INFORMAÇÕES GERAI S

Título do trabalho: Métodos Clássicos de Otimização

Autor (es): Gabriel Costa Silva Sales, Hélio Luiz Simonetti, Virgil Del Duca Almeida

Palavras-chave: Otimização Determinística, Método dos Multiplicadores de Lagrange, Método de Newton, Métodos Quase-Newton (BFGS).

Campus: Betim

Área do Conhecimento (CNPq): Engenharias

RESUMO

Este trabalho aborda três métodos clássicos de otimização, sua formulação matemática para o problema de otimização com restrição de igualdade, implementadas em Fortran e C++. Os métodos abordados são baseados em gradientes, isto é, fazem uso do cálculo e das derivadas da Função Objetivo (FO) e as restrições para procura do ótimo. No entanto, a hipótese é sempre de que o problema seja convexo, que uma solução mínima possa ser encontrada, e que esta solução exista. Uma aplicação matemática é modelada com os métodos clássicos de otimização: a) Método de Newton, b) Método dos Multiplicadores de Lagrange e c) Métodos Quase-Newton (BFGS) e uma análise comparativa entre esses métodos é considerada. A fim de mostrar a eficiência e eficácia dos algoritmos implementados os custos computacionais da Linguagem Fortran e C++.

INTRODUÇÃO

A otimização é uma ferramenta da Matemática Aplicada utilizada na resolução de problemas nos quais é preciso encontrar a solução mais eficiente entre todas as possibilidades existentes. Tais soluções são chamadas de minimizadores ou maximizadores da função objetivo do problema considerado (PERIÇARO,2013). Quando o número de funções e o número de variáveis aumentam, a complexidade em se determinar as possibilidades de soluções ótimas também aumenta. Neste contexto, surge a necessidade de desenvolver técnicas matemáticas e computacionais que refinem o processo de otimização, dado que este é amplamente utilizado para resolver problemas de engenharia.

Existem vários métodos que podem ser usados com sucesso para determinar o melhor conjunto de variáveis de projeto para proporcionar uma estrutura ótima. Ao classificar esses métodos, eles podem ser divididos em dois grupos: os métodos baseados em Gradiente e os Heurísticos.

A primeira categoria, métodos baseados em gradiente, faz uso do cálculo e das derivadas da função objetivo (FO) e as restrições para procura do ótimo. No entanto, a hipótese é sempre de que o problema seja convexo, que uma solução mínima possa ser encontrada, e que esta solução exista. Existem alguns problemas reais que não produzirão um problema de otimização convexa, Haftka et al. (1992). Isto é porque o problema pode ser descontínuo. Por esta razão, outros métodos que são independentes dos gradientes das funções utilizadas são necessários, tais como os métodos heurísticos. Há também a necessidade de uma boa escolha de ponto inicial, sendo que cada ponto otimizado tem sua “zona de atração” e que qualquer busca a partir de um ponto dentro da zona, resultará neste mesmo ponto otimizado para uma busca local (WEHRENS, 2000, p.7).

Os métodos de otimização baseados em procedimentos heurísticos foram desenvolvidos a partir de qualquer percepção intuitiva para o problema, ou a partir de argumentos plausíveis de metodologias de otimização baseadas em observações da natureza. Estes são os métodos baseados em regras relativamente simples e de senso comum, também não há a exigência de derivadas complexas ou uma cuidadosa escolha de valores iniciais de busca(GEEM, 2001,p.2.) Embora tais métodos proporcionam boas soluções ótimas, apresentam uma aparente falta de rigor matemático. Assim não se tem a garantia que uma solução ótima será alcançada. Uma característica da maioria destes métodos é que eles têm uma abordagem ascendente, diferentes dos métodos a base de cálculos. Nesse sentido, este projeto apresenta a implementação de três métodos clássicos de otimização que são: Método de Newton-Raphson, Método dos Multiplicadores de Lagrange, Método Quase-Newton (BFGS).

METODOLOGIA

Para o desenvolvimento deste projeto, estudou-se a formulação dos métodos clássicos de otimização (disciplina do curso de engenharia mecânica e engenharia de controle e automação). Assim, a pesquisa bibliográfica se faz necessária para proporcionar o conhecimento teórico necessário para implementação dos métodos. Para este fim, usou-se como referências: Arora (2004), Hatfka and Gandhi (1996), Brandão e Silva (2014), Brandão (2005) e Snyman (2005).

Para a instalação do programa compilador da linguagem Fortran " Compaq Visual Fortran" foi necessário a utilização da máquina virtual " Oracle VM VirtualBox", devido à incompatibilidade do compilador gratuito com o windows 7 dos computadores do laboratório de Informática do IFMG – Betim. Desta forma, na Máquina Virtual, foi utilizado o Windows XP. O compilador de C++ utilizado foi o “Dev-C++ versão 5.1.1”. Os dois compiladores foram usados dentro da máquina virtual para evitar diferenças nas implementações. Assim sendo, foram compilados ambas as linguagens, Fortran e C++, para comparações qualitativas e de quantidade de linhas de implementação dos códigos, uma vez que, o tempo de execução e consumo de memória demonstraram se parâmetros oscilantes são significantes para serem diferenças marcantes.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Conforme foi proposto, a análise dos resultados será dada através de arquivos de saída do programa implementado e apresentados em gráficos. Foi avaliado a quantidade de linhas dos códigos-fonte entre os programas realizados em Fortran e C++ e foi constatado que o C++ apresentou o melhor rendimento além do seu sistema de indexação que auxilia na organização do código. Uma vez decidido a linguagem, a implementação gráfica foi desenvolvida para a análise.

O problema proposto consiste na otimização de uma chapa retangular com comprimento e largura definidos pelo usuário para a confecção de uma caixa que tenha o volume máximo, ilustrado a seguir:

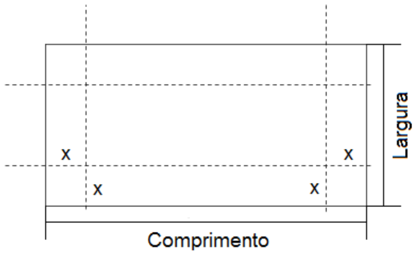

Figura 1: Chapa retangular não otimizada

A Figura 2, mostra que quanto maior x, maior será a altura da caixa e menor será a largura e o comprimento da mesma, da mesma forma que quanto menor for a variável, maior serão as demais dimensões. Portanto, é necessário saber qual o valor de x que proporcionará um volume ótimo. Para a modelagem do problema, temos uma equação unidimensional em x.

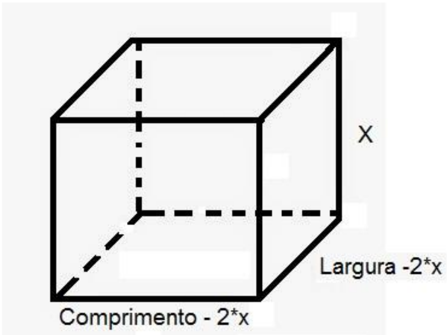

Figura 2: Caixa montada

Para calcular o volume de um paralelepípedo retangular, tem-se que:

*Volume = comprimento*largura*altura* (1)

Para o problema proposto usa-se a expressão:

*Função Objetivo = (comprimento -2*x)*(largura -2*x)*x* (2)

Manipulando matematicamente (2) chega-se a:

Função Objetivo = $4*x^3 + (-2*comprimento - 2*largura)*x^2 + comprimento*largura*x$ (3)

Deste modo, a equação (3) foi implementada nos métodos matemáticos clássicos propostos neste trabalho para a busca do ótimo. As figuras 3, 4 e 5 mostram a variação da função objetivo com o número de iterações em cada método de otimização.

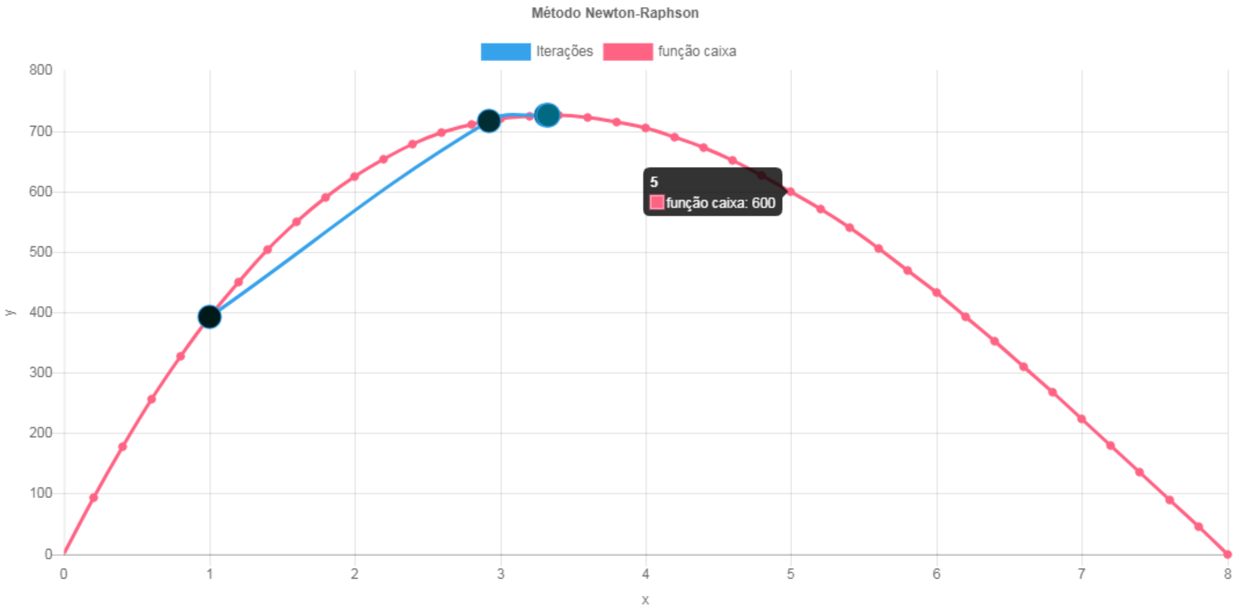

Figura 3: Gráfico da otimização Newton-Raphson

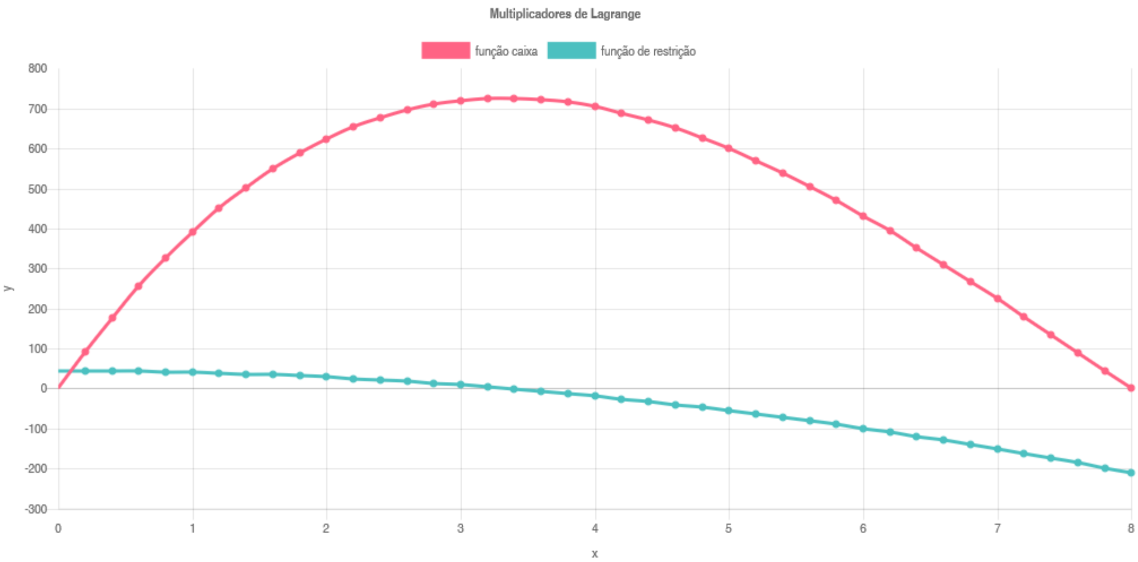

Figura 4 Gráfico de Otimização por Multiplicadores de Lagrange

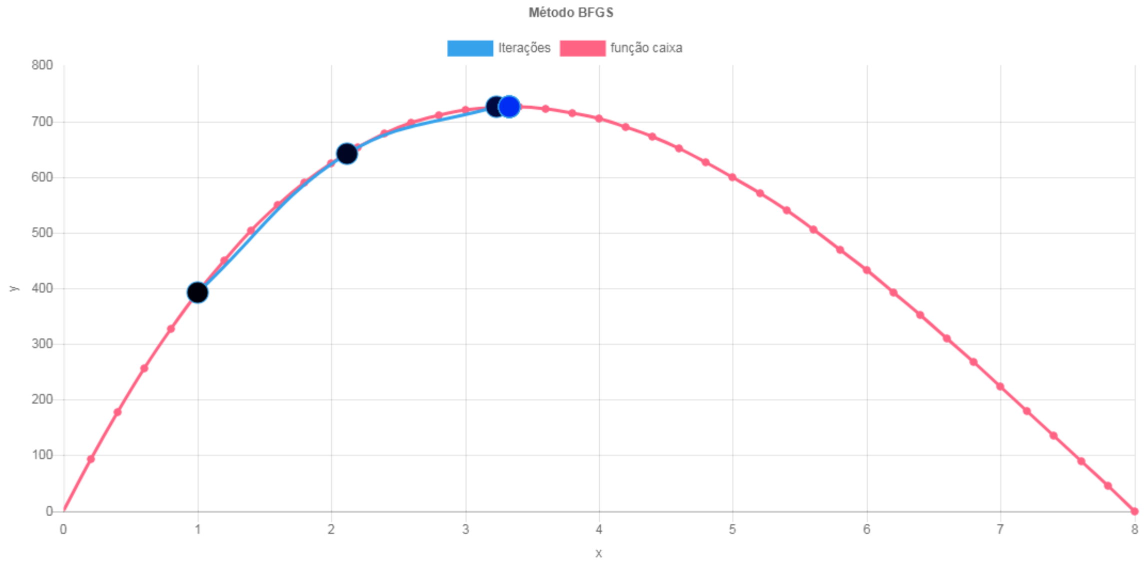

Figura 5 Otimização pelo método BFGS

A partir dos gráficos e do desenvolvimento matemático foi notado que o Newton-Raphson apresenta uma convergência rápida, contudo não é um método que diferem máximos e mínimos, portanto pode convergir para um resultado não ótimo de acordo com o ponto de partida das iterações. Em um segundo ponto, temos o método de Multiplicadores de Lagrange, o qual trabalha de uma maneira diferente dos demais, necessitando de uma equação de restrição para o problema matemático proposto. Desta forma, não retornará necessariamente o ponto ótimo da Função Objetivo e sim o ótimo em relação à equação restritiva. Outro ponto sobre os Multiplicadores de Lagrange é que sua construção gráfica se dá nos eixos x, y e z e não apenas em x e y como trabalhado com os demais métodos, apresentando assim, uma configuração gráfica indiferente para a pesquisa. Por fim, o método BFGS, assim como Newton-Raphson, é um método iterativo de rápida convergência e possui como característica distinta sua capacidade de trabalho com mais de uma variável. Para uma boa convergência utilizando este método é preciso estabelecer bons números de ponto inicial e valor do passo α.

CONCLUSÕES

Através dos resultados obtidos, foi possível notar que o método de Newton-Raphson é o mais simples e de conversão mais rápida para a solução de um problema unidimensional, podendo receber qualquer parâmetro de entrada dentro da zona de atração da maximização da função. O método BFGS é o método para solução de equações com mais incógnitas e consequentemente se torna mais complexo. O método de Lagrange faz uma otimização rápida, contudo não é preciso ao ótimo local. Portanto, quando se trata de problemas unidimensionais, o método que melhor atende é o de Newton-Raphson e em situações mais complexas o BFGS é o ideal.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

PERIÇARO, Gislaine Aparecida. **MÉTODOS NEWTON E QUASE-NEWTON PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA**,2013.

WEHRENS, Ron; BUYDENS, Lutgarde. Classical and nonclassical optimization methods. **Encyclopedia of analytical chemistry**, 2000.

HATFKA. Gandhi, R.V., "**Structural Shape Optimization – A survey**", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 57, pp.91-106, 1996.

SNYMAN, J. A., **An Introduction to Basic Optimization Theory and Classical and New Gradient-Based Algorithms**, Springer, 2005.

BRANDÃO, M. A. L., e Silva, P. H. R., **Alguns Métodos de Otimização**, CNMAI – Congresso Nacional de Matemática Aplicada à Indústria, Caldas Novas, Goiás, 2014.

GEEM, Zong Woo; KIM, Joong Hoon; LOGANATHAN, Gobichettipalayam Vasudevan. **A new heuristic optimization algorithm: harmony search simulation**, v. 76, n. 2, p. 60-68, 2001.

ARORA, Jasbir. **Introduction to optimum design**. Academic Press, 2004.