

# Métodos de Otimização de Terceira Ordem

**Daiane Gonçalves Ferreira**

Orientadora: Profa. Dra. Margarida Pinheiro Mello

Co-orientadora: Profa. Dra. Maria Aparecida Diniz Ehrhardt

Mestrado em Matemática Aplicada  
IMECC - Unicamp

1 de fevereiro de 2013

1 Introdução

2 1 variável

3  $n$  variáveis

4 Otimização

5 Testes

# Introdução

- Problema: Zero de função  $\longleftrightarrow$  Otimização
- Métodos de 2<sup>a</sup> ordem – Método de Newton
- Métodos de 3<sup>a</sup> ordem – Método de Halley
- Custo computacional  
1 variável –  $n$  variáveis
- Esparsidade

# Problema de zero de função

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \in \mathcal{C}^2$$

(P1) Encontrar  $x^*$  tal que  $f(x^*) = 0$

# Método de Newton

- Newton  $\rightarrow$  1669  
Raphson  $\rightarrow$  1690
- Método iterativo:  $x_0, x_1, x_2, \dots$
- Iteração  $k$ :  
(P1') Encontrar  $x_{k+1}$  tal que  $\ell_k(x_{k+1}) = 0$   
 $\ell_k(x)$  = polinômio grau 1  
grau de contato 1 com  $f(x)$  em  $x = x_k$
- Convergência quadrática

# Método de Halley

- Halley  $\rightarrow$  1694
- Método “descoberto” com frequência
- Método iterativo:  $x_0, x_1, x_2, \dots$
- Iteração  $k$ :  
(P1”) Encontrar  $x_{k+1}$  tal que  $h_k(x_{k+1}) = 0$   
$$h_k(x) = \frac{(x - x_k) + c}{a(x - x_k) + b}$$
  
grau de contato 2 com  $f(x)$  em  $x = x_k$
- Convergência cúbica

# Algebricamente

## Newton

$$l_k(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_k) + f'(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$$

# Algebricamente

## Newton

$$\ell_k(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$



# Algebricamente

## Halley

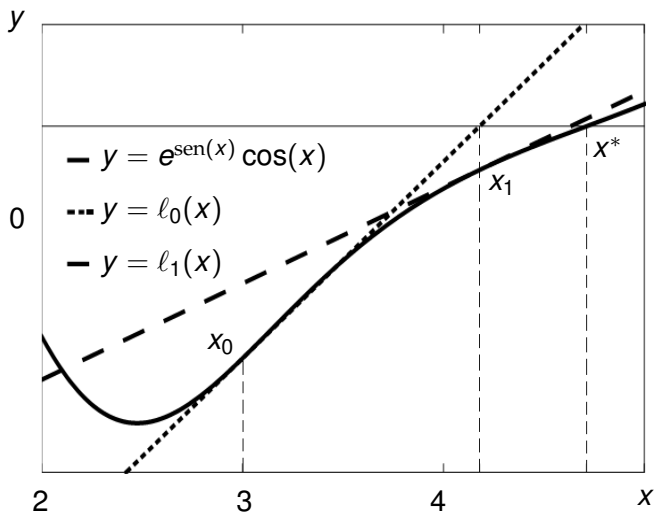
$$h_k(x) = \frac{(x - x_k) + c}{a(x - x_k) + b},$$

# Algebricamente

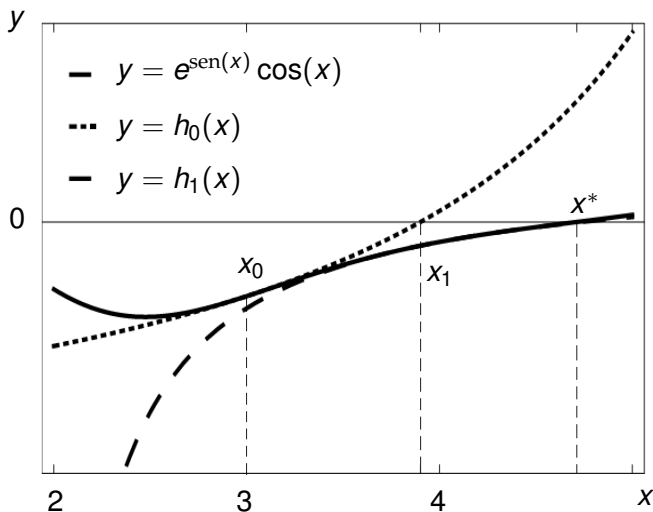
## Halley

$$h_k(x) = \frac{(x - x_k) + c}{a(x - x_k) + b}, \quad \left\{ \begin{array}{l} a = \frac{-f''(x_k)}{2f'(x_k)^2 - f(x_k)f''(x_k)} \\ b = \frac{2f'(x_k)}{2f'(x_k)^2 - f(x_k)f''(x_k)} \\ c = \frac{2f(x_k)f'(x_k)}{2f'(x_k)^2 - f(x_k)f''(x_k)} \end{array} \right.$$

# Newton - retas tangentes



# Halley - hipérboles tangentes



# Convergência

## Newton

Se

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \in C^2$$

$$f(x^*) = 0, f'(x^*) \neq 0$$

$(x_k)$  a sequência de Newton

$$x_k \rightarrow x^*$$

Então

a convergência é quadrática

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|^2} = cte$$

# Convergência

## Newton

Se

$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \in \mathcal{C}^2$   
 $f(x^*) = 0, f'(x^*) \neq 0$   
 $(x_k)$  a sequência de Newton  
 $x_k \rightarrow x^*$

Então

a convergência é quadrática

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|^2} = cte$$

## Halley

Se

$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \in \mathcal{C}^3$   
 $f(x^*) = 0, f'(x^*) \neq 0$   
 $(x_k)$  a sequência de Halley  
 $x_k \rightarrow x^*$

Então

a convergência é cúbica

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|^3} = cte$$

# Testes

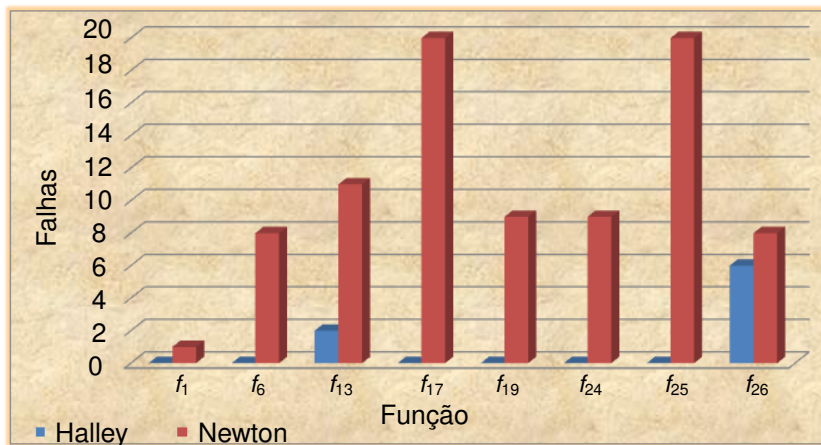
- MATLAB
- 30 funções:  $f_1 \cdots f_{30}$
- Funções pelo menos  $C^3$
- Converge para pelo menos um método
- 20 testes com ponto inicial aleatório
- Testes com falha desconsiderados
- Média aritmética de iterações e tempo

# Falhas

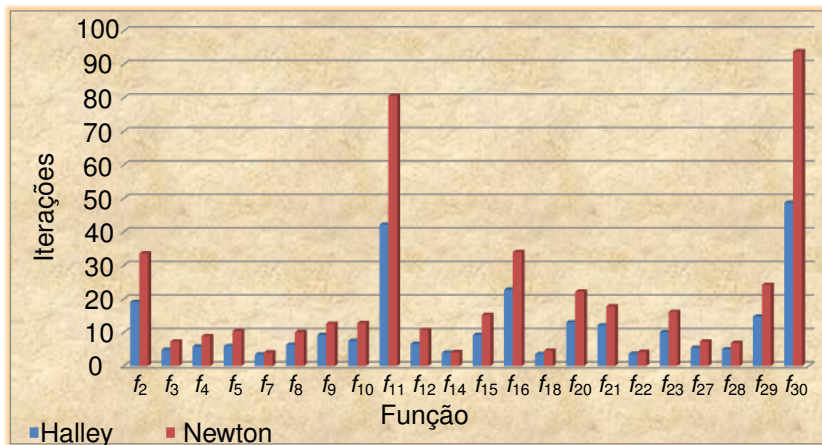
- 8 problemas com falhas
- Newton  $\rightarrow$  86 falhas
- Halley  $\rightarrow$  8 falhas
- 2 problemas  $\rightarrow$  Newton nunca converge
  - ▶  $f_{17}(x) = \sqrt[3]{x^2 - 9}$
  - ▶  $f_{25}(x) = \frac{x^4 + \sqrt[8]{x^2}}{x^2 + 3}$



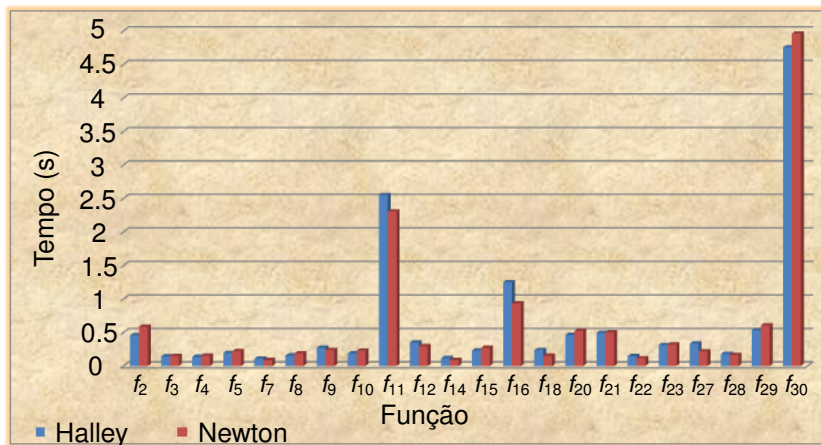
# Falhas



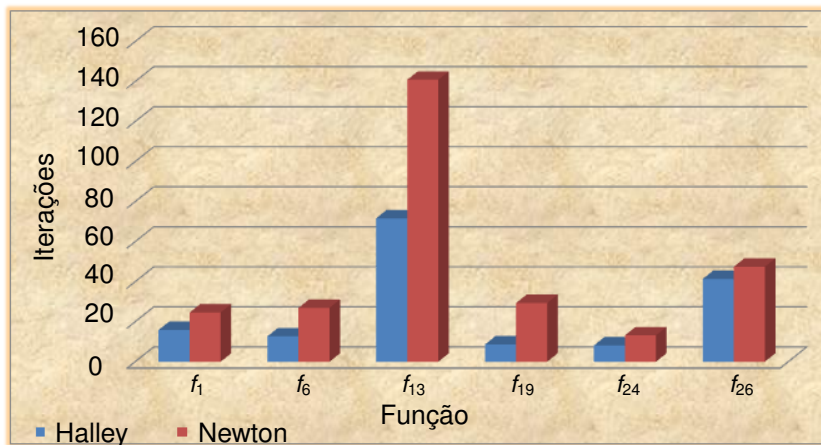
# Testes com êxito



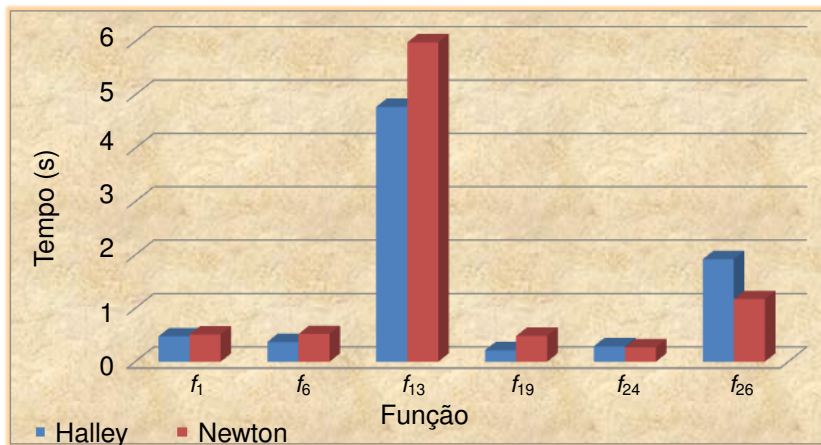
# Tempo



# Testes com falha



# Tempo



# Fórmula iterativa

## Newton

$$x_{k+1} = x_k - [F'(x_k)]^{-1} F(x_k)$$

## Halley

$$x_{k+1} = x_k - [I - \frac{1}{2} F'(x_k)^{-1} F''(x_k) F'(x_k)^{-1} F(x_k)]^{-1} F'(x_k)^{-1} F(x_k)$$

# Convergência

## Newton

Se

$$F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \in C^2$$

$F(x^*) = 0$ ,  $F'(x^*)$  não singular

$(x_k)$  a sequência de Newton

$$x_k \rightarrow x^*$$

Então

a convergência é quadrática

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} = cte$$

# Convergência

## Newton

Se

$F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \in \mathcal{C}^2$   
 $F(x^*) = 0$ ,  $F'(x^*)$  não singular  
 $(x_k)$  a sequência de Newton  
 $x_k \rightarrow x^*$

Então

a convergência é quadrática

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} = cte$$

## Halley

Se

$F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \in \mathcal{C}^2$   
 $F''$  Lipschitz contínua  
 $F(x^*) = 0$ ,  $F'(x^*)$  não singular  
 $(x_k)$  a sequência de Halley  
 $x_k \rightarrow x^*$

Então

a convergência é cúbica

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^3} = cte$$



# Condições de Otimalidade

## Condição necessária de 1ª ordem

Seja  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  diferenciável no ponto  $x^* \in \mathbb{R}^n$ . Se  $x^*$  é um minimizador local de  $f$ , então

$$\nabla f(x^*) = 0$$

Um ponto  $x^* \in \mathbb{R}^n$  que cumpre a condição acima é dito ponto crítico ou ponto estacionário da função  $f$ .

# Zero de função $\longleftrightarrow$ Otimização

(P2) Encontrar  $\bar{x}$  que minimiza  $f(x)$

# Zero de função $\longleftrightarrow$ Otimização

(P2) Encontrar  $\bar{x}$  que minimiza  $f(x)$

(P3) Encontrar  $\bar{x}$  tal que  $F(\bar{x}) = 0$ , onde  $F(x) = \nabla f(x)$

## Método de Newton para o Problema de Otimização

$$x_{x+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$$

## Método de Newton para o Problema de Otimização

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$$

## Método de Halley para o Problema de Otimização

$$x_{k+1} = x_k - \left[ I - \frac{1}{2} \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla^3 f(x_k) \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k) \right]^{-1} \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$$

# Esforço Computacional

## Método de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)}_d$$

# Esforço Computacional

## Método de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)}_d$$

Necessita  $\nabla f(x)$  e  $\nabla^2 f(x)$

# Esforço Computacional

## Método de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)}_d$$

Necessita  $\nabla f(x)$  e  $\nabla^2 f(x)$   
 $\nabla^2 f(x_k) d = \nabla f(x_k)$



# Esforço Computacional

## Método de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)}_d$$

Necessita  $\nabla f(x)$  e  $\nabla^2 f(x)$

$$\nabla^2 f(x_k) d = \nabla f(x_k)$$

Resolução de um sistema linear

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \underbrace{\overbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}^M}_{P} \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \underbrace{\overbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}^M}_{P} \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

Necessita  $\nabla f(x)$ ,  $\nabla^2 f(x)$  e  $\nabla^3 f(x)$

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \underbrace{\overbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}^M}_{P} \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$\nabla^2 f(x_k) s = \nabla f(x_k)$$

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \underbrace{\overbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}^M}_{P} \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$\nabla^2 f(x_k) s = \nabla f(x_k)$$

Resolução de um sistema linear

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \overbrace{\left( \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_P \right)}^M \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$P = \nabla^3 f(x_k) s$$

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \overbrace{\left( \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_P \right)}^M \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$P = \nabla^3 f(x_k) s$$

Produto tenso · vetor

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \overbrace{\left( \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_P \right)}^M \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$\nabla^2 f(x_k) M = P$$



# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \underbrace{\overbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}^M}_{P} \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$\nabla^2 f(x_k) M = P$$

Resolução de  $n$  sistemas lineares

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \overbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}^M \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$\left[ I - \frac{1}{2} M \right] d = s$$

# Esforço Computacional

## Método de Halley

$$x_{k+1} = x_k - \underbrace{\left[ I - \frac{1}{2} \overbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla^3 f(x_k) (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}^M \right]^{-1}}_d \underbrace{(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)}_s$$

$$\left[ I - \frac{1}{2} M \right] d = s$$

Resolução de um sistema linear

- Análise ingênua

Newton

$$O(n^2)$$

$$k$$

$$\frac{2}{2}$$

$$\frac{k}{2}n^2$$

Halley

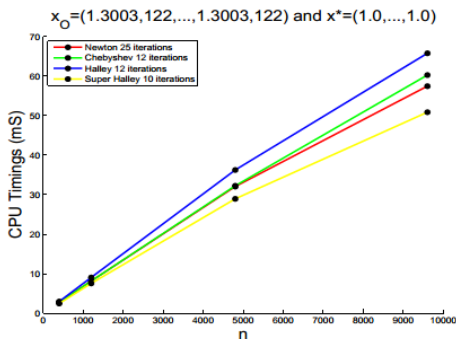
$$O(n^3)$$

$$k$$

$$\frac{3}{3}$$

$$\frac{k}{3}n^3$$

- Gundersen e Steihaug (2006)



# Testes preliminares no MATLAB

Classe de funções criada → estrutura de esparsidade

$$f_n(x) = \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} e^{x_i} \text{sen}(x_{n-i+1})$$

- Dimensão de 10 a 400
- Ponto inicial → vetor de 'uns'

# Esparsidade dos problemas

Hessiana da função  $f_{10}$

$$\begin{bmatrix} X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X \\ 0 & X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X & 0 \\ 0 & 0 & X & 0 & 0 & 0 & 0 & X & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X & 0 & 0 & X & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & X & X & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & X & X & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X & 0 & 0 & X & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & X & 0 & 0 & 0 & 0 & X & 0 & 0 \\ 0 & X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X & 0 \\ X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X \end{bmatrix}$$

# Característica dos Problemas

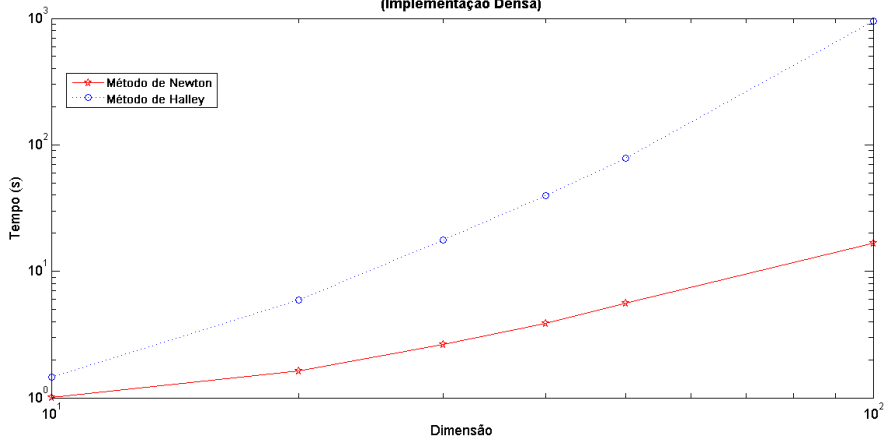
- Estrutura de esparsidade comum na prática
- Aproveitar a esparsidade dos problemas podem tornar Halley competitivo com Newton
- Hessiana e Tensor simétricos
- Hessiana e o tensor programados no MATLAB
- Resolução dos sistemas  $\rightarrow$  LDL

# Implementação densa

$$f_n(x) = \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} e^{x_i} \text{sen}(x_{n-i+1})$$

$n$	<i>Método de Newton</i>		<i>Método de Halley</i>	
	iterações	tempo (s)	iterações	tempo (s)
10	21	1.003	11	1.457
20	21	1.627	11	5.960
30	21	2.632	11	17.560
40	21	3.867	11	39.470
50	22	5.599	11	78.170
100	22	16.630	11	948.600



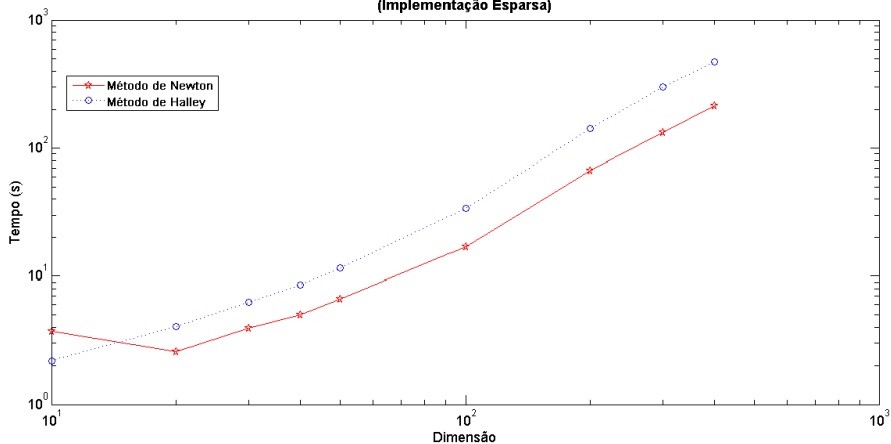
**Método de Newton X Método de Halley  
(Implementação Densa)**

# Implementação esparsa

$$f_n(x) = \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} e^{x_i} \text{sen}(x_{n-i+1})$$

$n$	<i>Método de Newton</i>		<i>Método de Halley</i>	
	iterações	tempo (s)	iterações	tempo (s)
10	21	3.697	11	2.181
20	21	2.556	11	4.054
30	21	3.939	11	6.306
40	21	4.969	11	8.562
50	22	6.620	11	11.580
100	22	17.00	11	33.760
200	22	67.230	11	142.100
300	22	132.700	11	302.00
400	23	215.900	12	473.900

**Método de Newton X Método de Halley  
(Implementação Esparsa)**



# Nova proposta: Evitar o cálculo do tensor

Hessiana simbólica

$$H(x + ts), \quad t \in \mathbb{R}$$

# Nova proposta: Evitar o cálculo do tensor

Hessiana simbólica

$$H(x + ts), \quad t \in \mathbb{R}$$

derivar com relação  $t$

$$\frac{\partial H(x + ts)}{\partial t} = T(x + ts)s$$

## Nova proposta: Evitar o cálculo do tensor

Hessiana simbólica

$$H(x + ts), \quad t \in \mathbb{R}$$

derivar com relação  $t$

$$\frac{\partial H(x + ts)}{\partial t} = T(x + ts)s$$

$t = 0$

$$T(x + ts)s |_{t=0} = T(x)s$$

# Nova proposta: Evitar o cálculo do tensor

Hessiana simbólica

$$H(x + ts), \quad t \in \mathbb{R}$$

derivar com relação  $t$

$$\frac{\partial H(x + ts)}{\partial t} = T(x + ts)s$$

$t = 0$

$$T(x + ts)s |_{t=0} = T(x)s$$

Produto tensor  $\cdot$  vetor

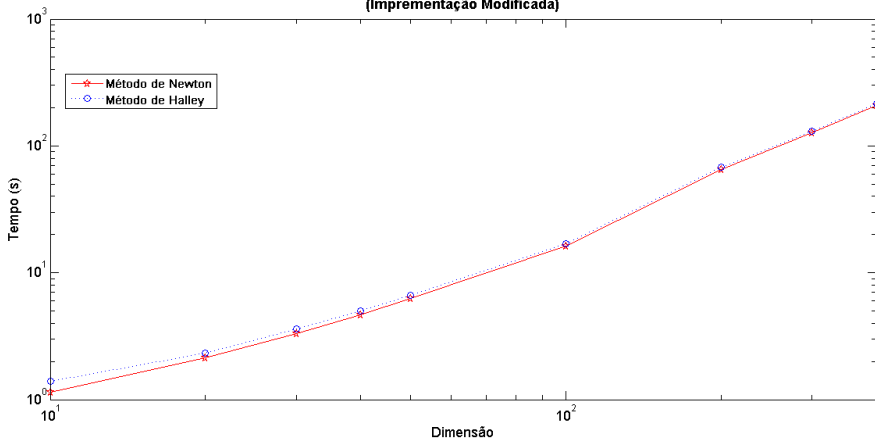
# Implementação modificada

$$f_n(x) = \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} e^{x_i} \text{sen}(x_{n-i+1})$$

$n$	<i>Método de Newton</i>		<i>Método de Halley</i>	
	iterações	tempo (s)	iterações	tempo (s)
10	21	1.138	11	1.397
20	21	2.144	11	2.337
30	21	3.298	11	3.599
40	21	4.632	11	5.038
50	22	6.252	11	6.626
100	22	16.170	11	16.990
200	22	65.490	11	67.870
300	22	127.600	11	131.100
400	23	207.800	12	213.100



Método de Newton X Método de Halley  
(Implementação Modificada)



# Problemas

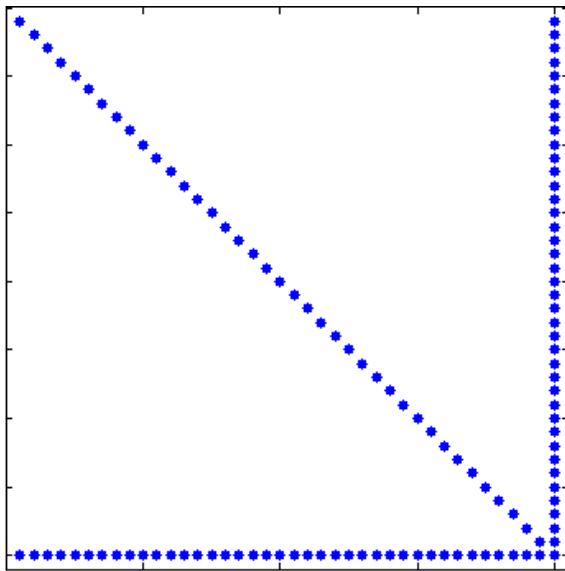
- CUTEr

ARWHEAD	DQRTIC	NONDQUAR	ENGVAL1	DIXMAANE
---------	--------	----------	---------	----------

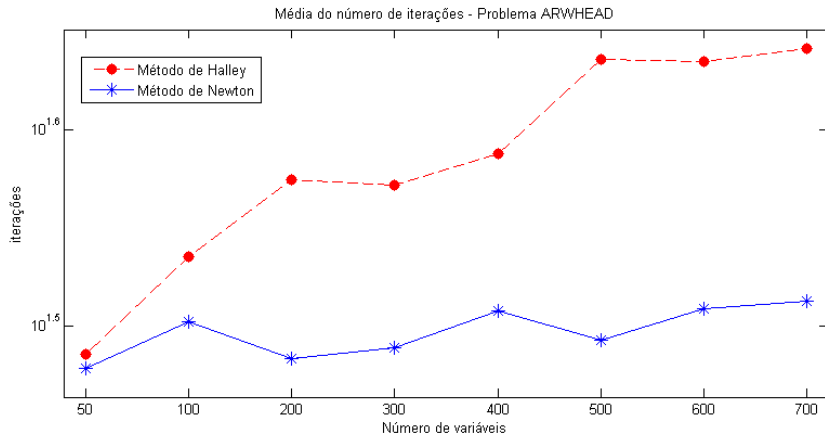
- Andrei (2008)

TRIDIAG1	HIMMELBLAU	PSC1	QF2	LIARWHD
----------	------------	------	-----	---------

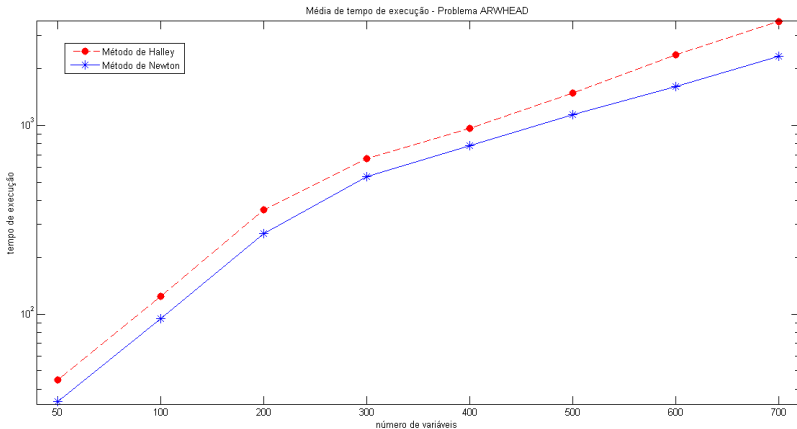
# ARWHEAD



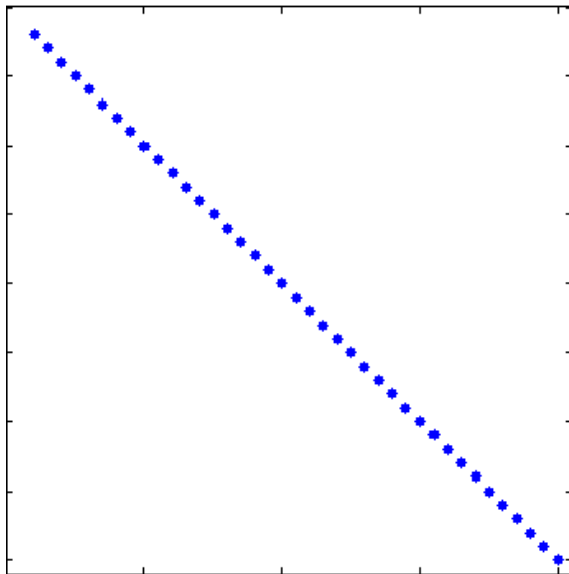
# Iteração



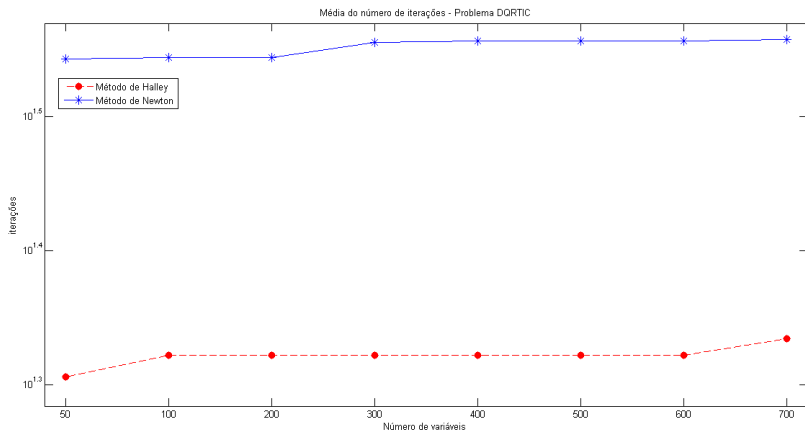
# Tempo



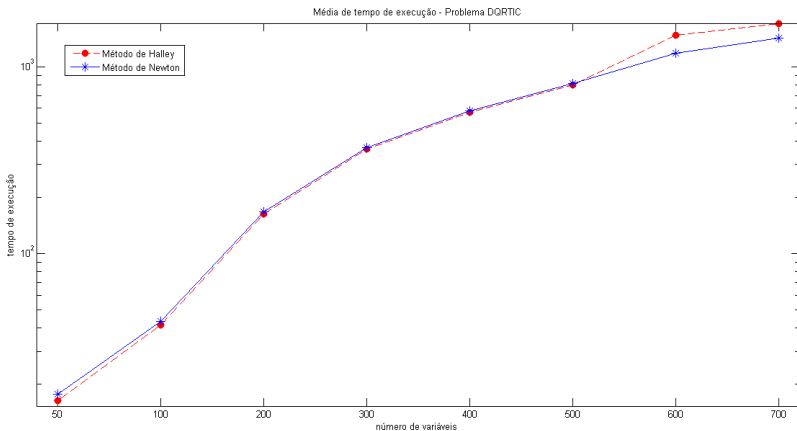
# DQRTIC



# Iteração

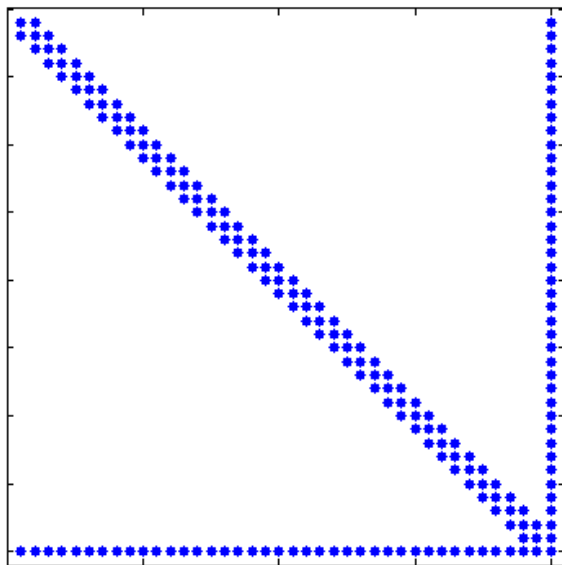


# Tempo

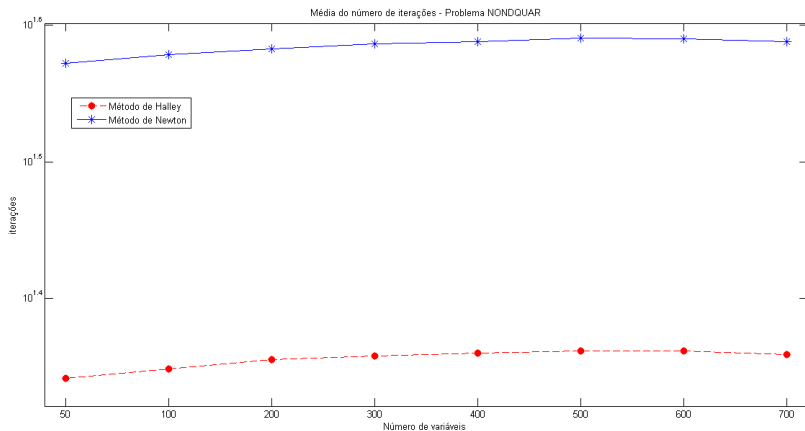




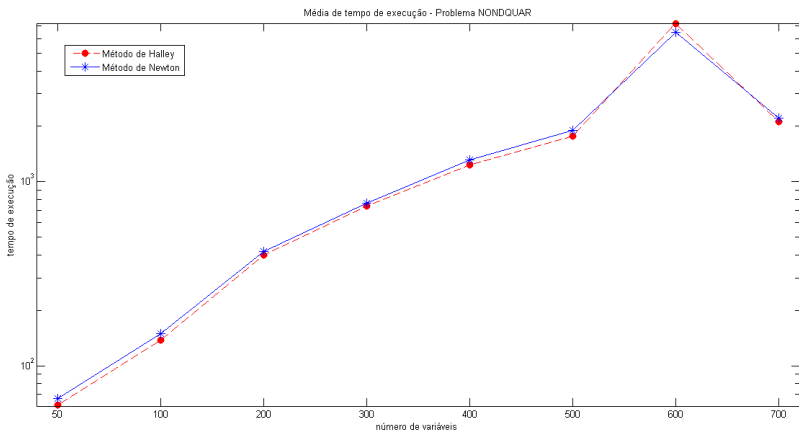
# NONDQUAR



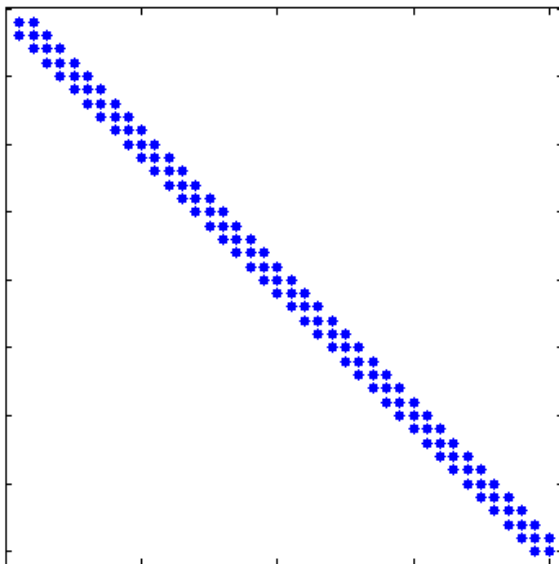
# Iteração



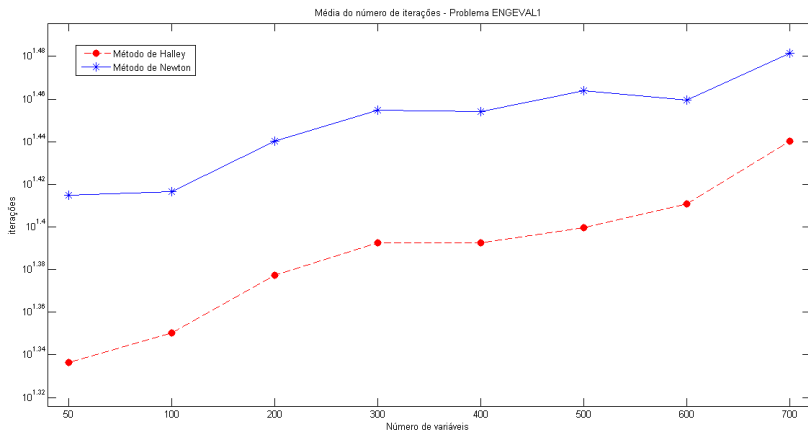
# Tempo



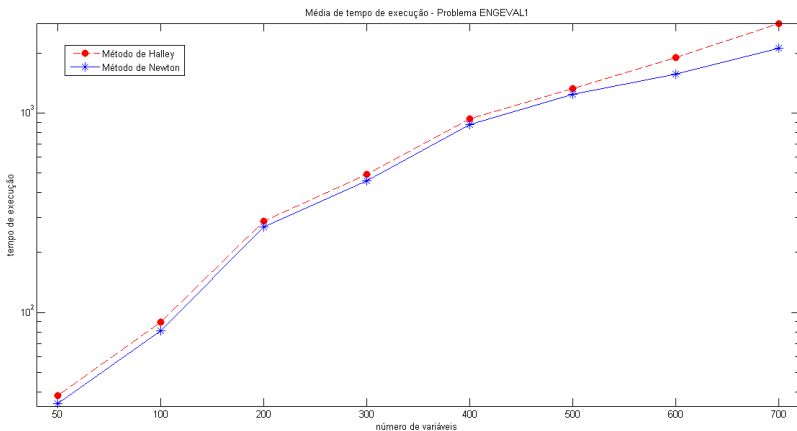
# ENGVAL1



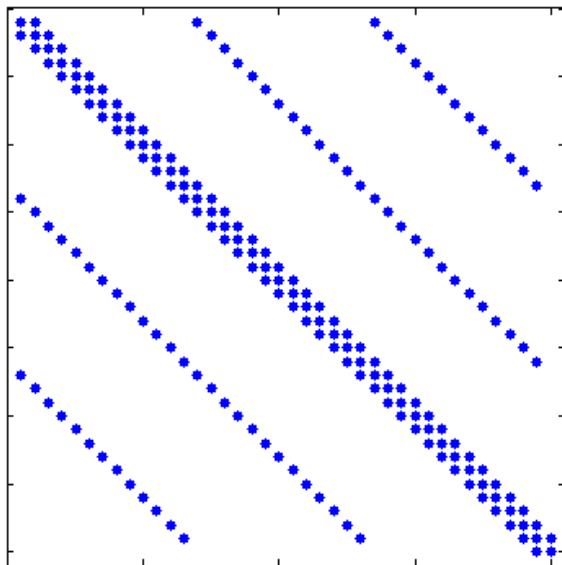
# Iteração



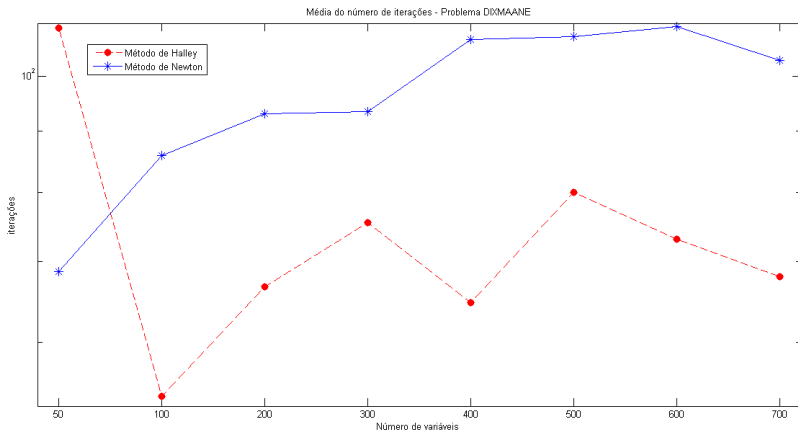
# Tempo



# DIXMAANE

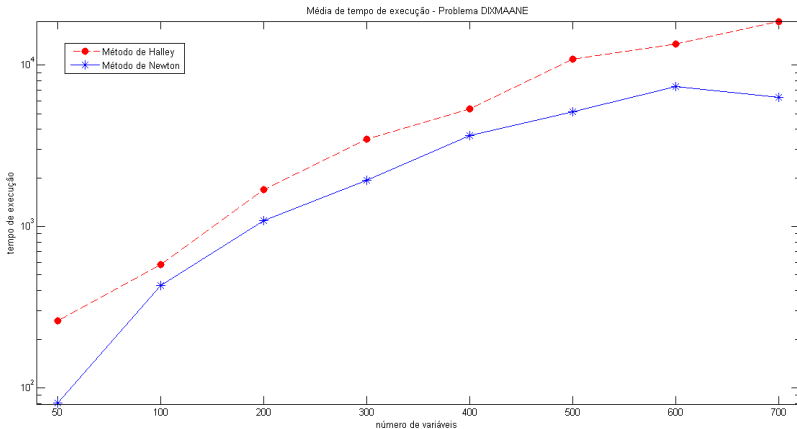


# Iteração

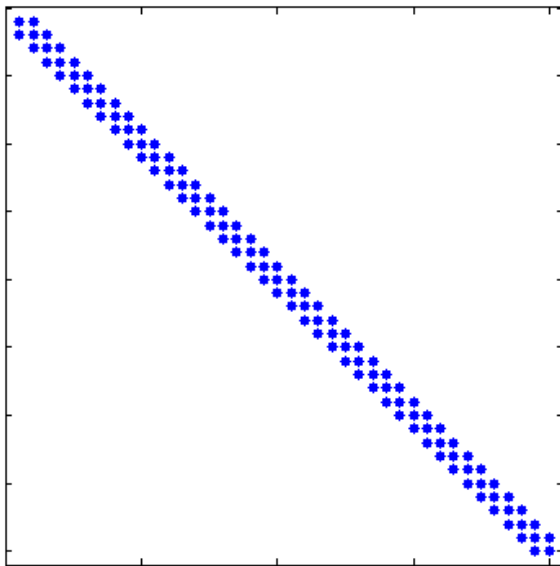




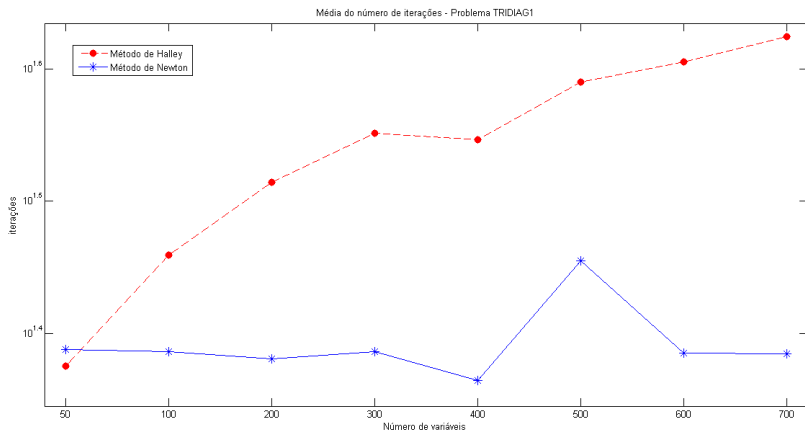
# Tempo



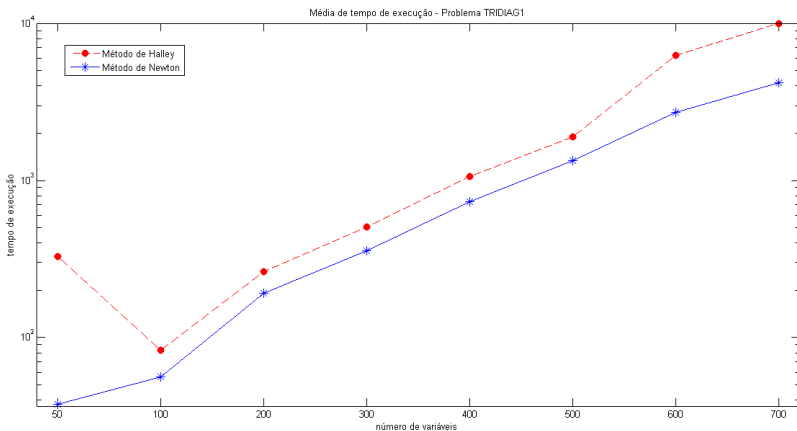
# TRIDIAG1



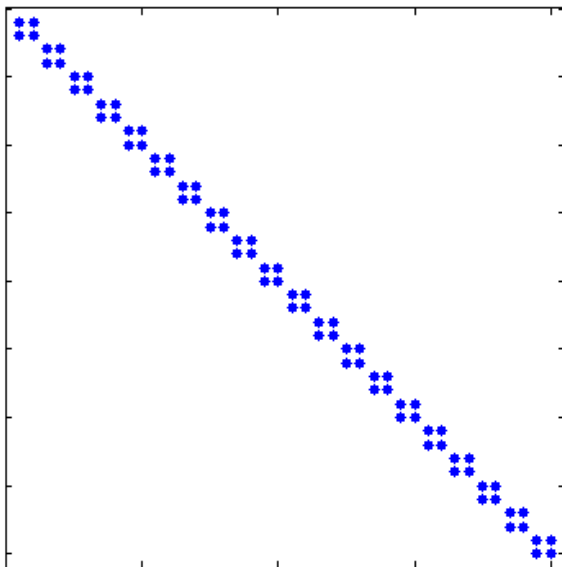
# Iteração



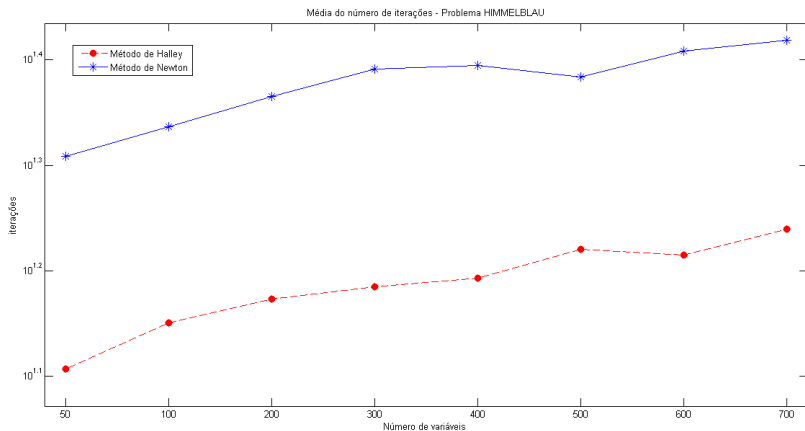
# Tempo



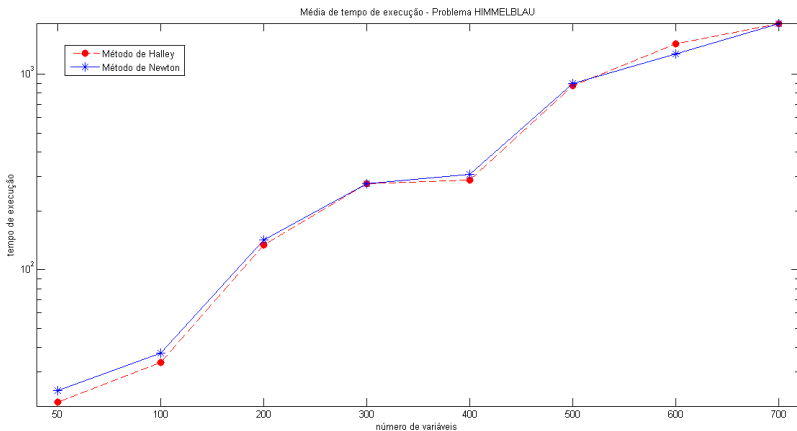
# HIMMELBLAU



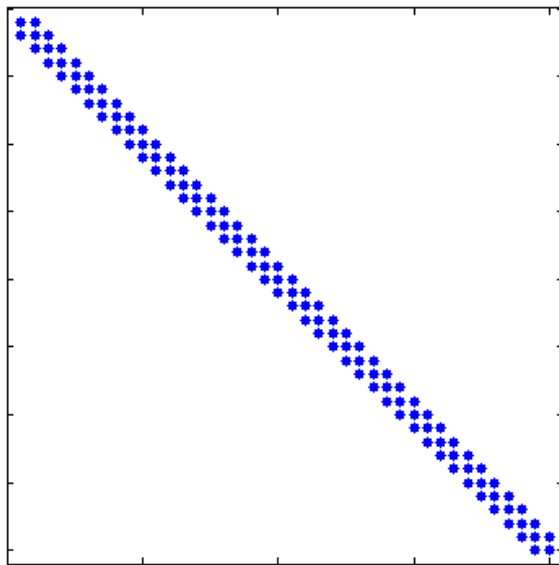
# Iteração



# Tempo

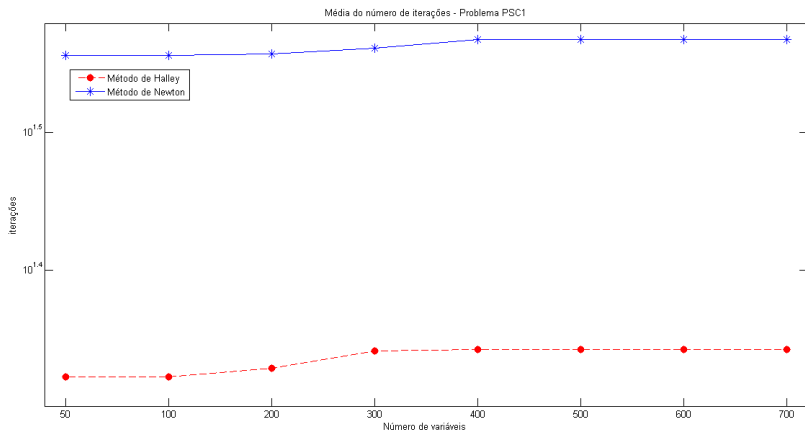


# PSC1

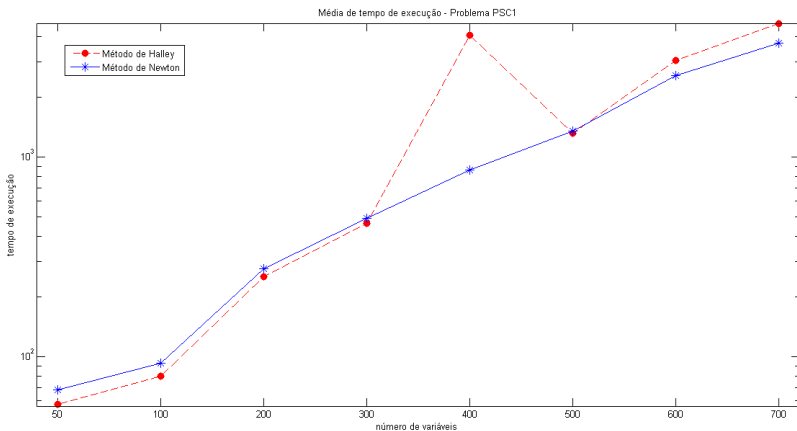




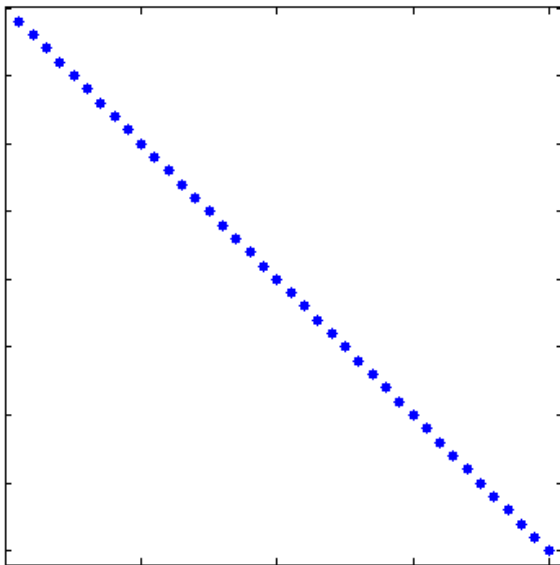
# Iteração



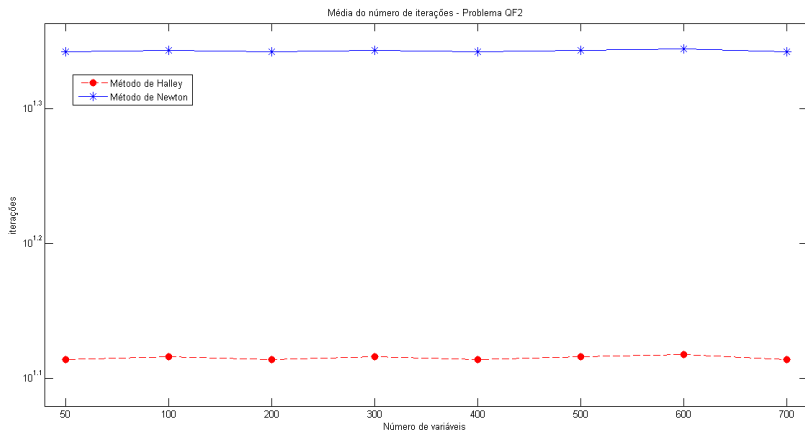
# Tempo



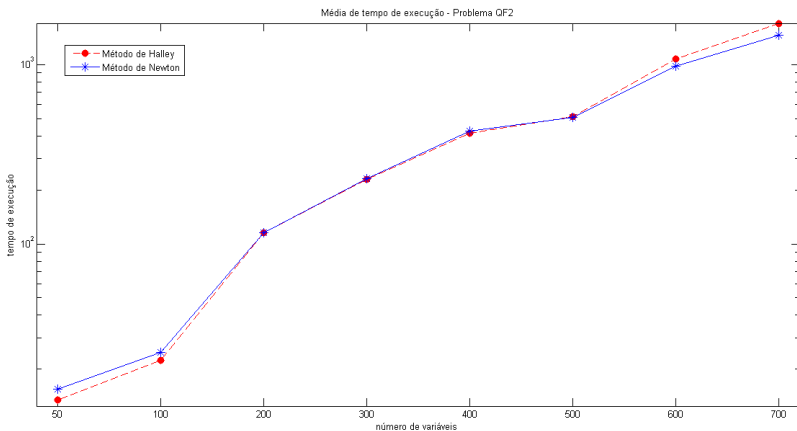
## QF2



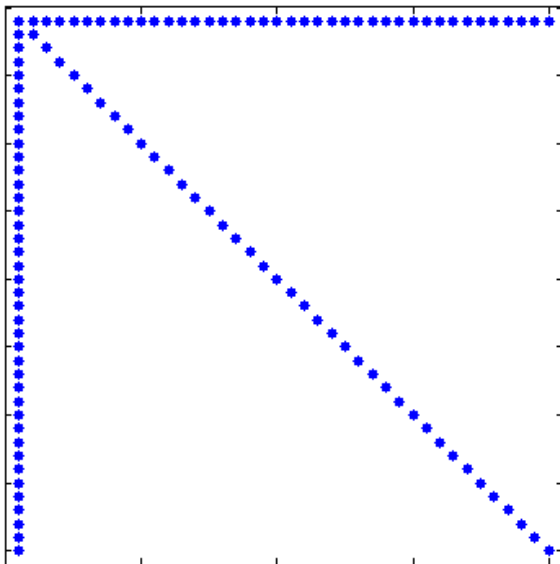
# Iteração



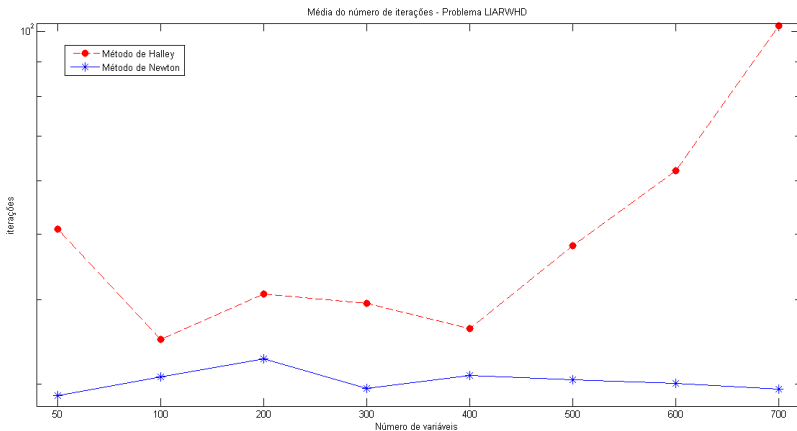
# Tempo



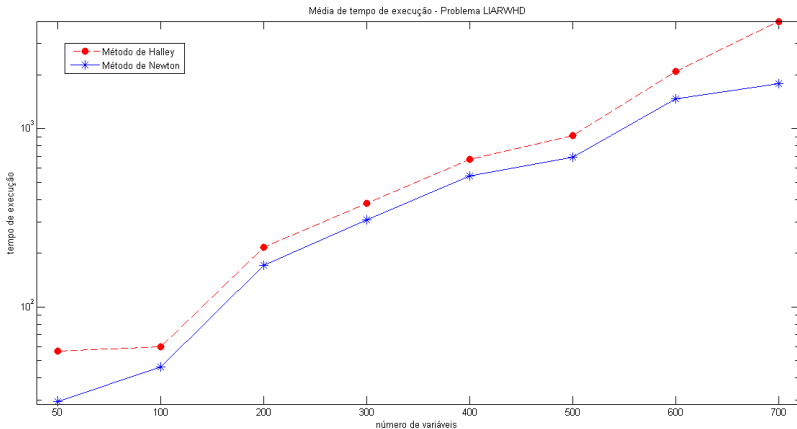
# LIARWHD



# Iteração



# Tempo





# Considerações Finais

- Ordem de convergência  $\times$  Custo computacional
- Modificação de implementação
- Melhora significativa no método de Halley
- Limitações do MATLAB

## Referências

- Geir Gundersen e Trond Steihaus.** Sparsity in higher order methods in optimization. Technical Report 327, Department of Informatics, University of Bergen, June 2006.
- Geir Gundersen e Trond Steihaus.** On large-scale unconstrained optimization problems and higher order methods. *Optimization Methods & Software, Vol. 25, No. 3, June 2010, 337-358*
- T. R. Scavo e J. B. Thoo.** On the geometry of Halley's method. *American Mathematical Monthly, 102 (5) (1995) 417-426*
- Neculai Andrei.** An unconstrained optimization test functions collection. *Advanced Modeling and Optimization, Vol. 10, No 1, 2008*
- I. Bongartz, A. R. Conn, Nick Gould, and Ph. L. Toint.** "CUTE: constrained and unconstrained testing environment". In: *ACM Trans. Math. Softw. 21.1 (1995), pp. 123.*
- Richard L. Burden e J. Douglas Faires.** Análise Numérica. *Pioneira Thomson Learning, 2003.*
- G.H. Brown Jr.** On Halley's variation of Newton's method. *American Mathematical Monthly, 84(9):726-728, 1977.*