

IMPLEMENTAÇÃO EFICIENTE DOS MÉTODOS DE PONTOS INTERIORES ESPECIALIZADOS PARA O PROBLEMA DE REGRESSÃO PELA NORMA L_p

Daniela Renata Cantane

Instituto de Matemática, Estatística e Computação-IMECC/UNICAMP
Praça Sérgio Buarque de Holanda, 651, CEP: 13081-970, Campinas, SP, Brasil.
E-mail: dcantane@ime.unicamp.br

Eliana Contharteze

Instituto de Matemática, Estatística e Computação-IMECC/UNICAMP
Praça Sérgio Buarque de Holanda, 651, CEP: 13081-970, Campinas, SP, Brasil.
E-mail: contharteze@yahoo.com.br

Aurelio Ribeiro Leite de Oliveira

Instituto de Matemática, Estatística e Computação-IMECC/UNICAMP
Praça Sérgio Buarque de Holanda, 651, CEP: 13081-970, Campinas, SP, Brasil.
E-mail: aurelio@ime.unicamp.br

RESUMO

Os métodos de pontos interiores primais-duais para o problema de regressão pela norma-p desenvolvidos tem sua estrutura matricial resultante explorada objetivando uma implementação eficiente. O problema de regressão tem inúmeras aplicações em diversas áreas. A norma-2 é muito popular, entre outros motivos, por permitir uma solução direta. Por sua vez a norma-1 permite reduzir o efeito de pontos discrepantes enquanto que a norma infinito garante proteção contra o pior caso. A norma-p permite pensar estas características de diferentes formas, adaptando o método ao problema a ser resolvido. A implementação do método de pontos interiores desenvolvida é comparada com implementações eficientes de outros métodos já existentes.

PALAVRAS CHAVE: métodos de pontos interiores, programação não linear, problema de regressão L_p .

ABSTRACT

The specific primal-dual interior point methods for the norm-p fitting problem previously developed will have their resulting matrix structure exploited aiming at an efficient implementation. The fitting problem has numerous applications in various areas. The norm-2 is very popular, among other reasons, for allowing a direct solution. The norm-1 allows the reduction of the effect of outliers while the infinite norm provides protection against the worst case. The norm-p allows to think these characteristics in different ways adapting the method to the problem to be solved. The interior point method implementation to be developed will be compared with an efficient implementation of other existing methods.

KEYWORDS: interior point methods, nonlinear programming, L_p regression problem.

1. Introdução

O método IRLS *iteratively reweighted least-squares* Merle e Späcch (1974) foi por muito tempo a única alternativa prática para a resolução do problema de regressão pela norma L_p . Mais recentemente este método foi aperfeiçoado, no que diz respeito a robustez, por meio da inclusão de uma busca linear Li (1993). No mesmo trabalho, foi também proposto um novo método que apresenta características similares aos métodos de pontos interiores. Este método apresentou resultados computacionais superiores ao IRLS.

Ambos métodos apresentados em Li (1993) têm uma importante desvantagem: a busca linear é computacionalmente cara. Os métodos de pontos interiores aplicados a este problema obtêm resultados computacionais superiores, repetindo o desempenho obtido na minimização pelas normas L_1 e L_∞ em Oliveira, Nascimento e Lyra (2000) e Oliveira e Lyra (2004), respectivamente.

Em Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004) são descritos os métodos de pontos interiores barreira logarítmica, barreira logarítmica preditor corretor, primal dual barreira logarítmica e primal dual barreira logarítmica preditor corretor para resolver problemas de regressão pela norma L_p , com $1 < p < 2$. Esses métodos foram implementados em MATLAB e os resultados computacionais comprovam que são mais eficientes que o GNCS, um método de Newton globalizado que usa as condições de flogas complementares.

O objetivo desse trabalho é aperfeiçoar e implementar métodos de pontos interiores para resolver de maneira eficiente problemas de otimização não-linear da forma:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_p^p, \quad (1)$$

onde $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é uma matriz de posto completo, $b \in \mathbb{R}^m$, $m > n$ e $1 < p < \infty$. O sistema linear $Ax = b$ pode ser inconsistente e a matriz A é uma matriz de Vandermonde no caso particular do problema de regressão polinomial.

Apresentamos neste trabalho os métodos primal dual barreira logarítmica e primal dual barreira logarítmica preditor corretor, desenvolvidos Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004), com modificações no cálculo dos resíduos, nos pontos iniciais e implementado na linguagem C, com a intenção de reduzir o número de operações e fazer com que estes métodos sejam computacionalmente mais eficientes, com o intuito de obter desempenho superior quando utilizados para resolver problemas de grande porte. Os novos métodos implementados são comparados com os métodos descritos em Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004).

O enfoque deste trabalho é a resolução de problemas de regressão polinomial, com isso ganhamos algumas propriedades importantes que farão com que a implementação em C seja mais eficiente. Uma análise das matrizes envolvidas nos métodos é realizada, essas observações nos levam a uma implementação eficiente em C.

2. O problema de regressão pela norma L_p

O problema de regressão (1), quando $p = 1$ e $p = \infty$, pode ser formulado por pro-

gramação linear e os métodos de pontos interiores aplicados a esses problemas permitem a exploração da estrutura matricial do problema de forma muito eficiente. A norma-2 permite solução direta. A norma L_p , com $1 < p < \infty$ é estritamente convexa. O problema (1) possui formulação convexa e portanto é garantida a existência de mínimo global.

O problema de regressão pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \min \quad & \|r\|_p^p \\ \text{s.a} \quad & Ax + r = b. \end{aligned} \quad (2)$$

Definindo $r = u - v$, com $u \geq 0$ e $v \geq 0$:

$$\begin{aligned} \min \phi(u, v) = \quad & \sum_{i=1}^m (u_i + v_i)^p \\ \text{s.a} \quad & Ax + u - v - b = 0, \\ & (u, v) \geq 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Observe que minimizar $\|r\|_p^p = \sum_{i=1}^m |u_i - v_i|^p$ é equivalente a minimizar $\phi(u, v) = \sum_{i=1}^m (u_i + v_i)^p$ desde que se verifiquem as restrições $u_i v_i = 0$, $i = 1, \dots, m$. Mas dado r_i sempre podemos escrevê-lo como $u_i - v_i$ de forma que $u_i v_i = 0$, por exemplo, se $r_i < 0$, basta fazer $u_i = 0$ e $v_i = -r_i$, por outro lado, se $r_i \geq 0$, podemos fazer $u_i = r_i$ e $v_i = 0$, assim teremos $\|r\|_p^p = \sum_{i=1}^m |u_i - v_i|^p = \sum_{i=1}^m (u_i + v_i)^p$.

3. Modificação nos métodos dos pontos interiores aplicados ao problema de regressão pela norma L_p

Os métodos de pontos interiores desenvolvidos em Cantane (2004): primal dual barreira logarítmica e primal dual barreira logarítmica preditor corretor foram modificados. As modificações foram feitas no ponto inicial, inserindo o parâmetro σ nos vetores u e v e no cálculo dos resíduos R_1 , R_2 , R_3 e R_4 , que não eram considerados anteriormente. Essas modificações foram realizadas no intuito de reduzir o número de operações necessárias por iteração.

3.1 Método Primal-Dual Barreira Logarítmica

O método descrito a seguir foi desenvolvido em Cantane (2004). Considerando o problema (3), a função objetivo é denotada em termos de u e v por $\phi(u, v) = \sum_{i=1}^n (u_i + v_i)^p$, o gradiente $\nabla \phi(u, v)$ é denotado por $g = \begin{bmatrix} g_u \\ g_v \end{bmatrix}$, onde $g_{u_i} = g_{v_i} = p(u_i + v_i)^{p-1}$ e $\nabla^2 \phi = \begin{bmatrix} \nabla g_u \\ \nabla g_v \end{bmatrix}$, onde $\nabla g_{u_{ij}} = \nabla g_{v_{ij}} = \begin{cases} \frac{p(p-1)}{(u_i + v_i)^{2-p}}, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$

é uma matriz diagonal denotada por G .

Utilizando o Método Primal-Dual Barreira Logarítmica El-Bakry, et al (1996) e Wright (1996), temos

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^n (u_i + v_i)^p - \mu \sum_{i=1}^n \ln(u_i) - \mu \sum_{i=1}^n \ln(v_i) \\ \text{sa} \quad & Ax + u - v - b = 0, \end{aligned}$$

onde $\mu > 0$ é o parâmetro barreira ($\mu \rightarrow 0$). A Lagrangeana é dada por

$$L = \sum_{i=1}^n (u_i + v_i)^p - \mu \sum_{i=1}^n \ln(u_i) - \mu \sum_{i=1}^n \ln(v_i) + y^t(Ax + u - v - b),$$

onde y é o multiplicador de Lagrange.

Aplicando as condições de otimalidade Wright (1996), obtemos

$$\underbrace{\nabla L}_{J(x,y,u,v)} = \begin{bmatrix} A^t y \\ Ax + u - v - b \\ g - \mu U^{-1}e + y \\ g - \mu V^{-1}e - y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

onde U e V são matrizes diagonais cujos elementos não nulos são u e v respectivamente e $e = (1, 1, \dots, 1)^t$. Fazendo $z_u = \mu U^{-1}e$ e $z_v = \mu V^{-1}e$ e substituindo em (4), obtemos

$$\underbrace{\nabla L}_{J(x,y,u,v,z_u,z_v)} = \begin{bmatrix} A^t y \\ Ax + u - v - b \\ g - z_u + y \\ g - z_v - y \\ U Z_u e \\ V Z_v e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \mu e \\ \mu e \end{bmatrix}, \quad (5)$$

onde $Z_u = \text{diag}(z_u) = \begin{cases} z_{u_i}, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$ e $Z_v = \text{diag}(z_v) = \begin{cases} z_{v_i}, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$

Utilizando o Método de Newton Wright (1996), chegamos a

$$\begin{bmatrix} 0 & A^t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & I & -I & 0 & 0 \\ 0 & I & G & G & -I & 0 \\ 0 & -I & G & G & 0 & -I \\ 0 & 0 & Z_u & 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z_v & 0 & V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \\ du \\ dv \\ dz_u \\ dz_v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ r_5 \\ r_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A^t y \\ -Ax - u + v + b \\ -g + z_u - y \\ -g + z_v + y \\ -U Z_u e + \mu e \\ -V Z_v e + \mu e \end{bmatrix}.$$

Resolvendo o sistema, obtemos as direções dx, dy, du, dv, dz_u e dz_v . Por meio de eliminação de variáveis o sistema acima se reduz a

$$\begin{aligned} dx &= (A^t D A)^{-1} r, \\ dy &= D \left[r_2 - A dx - D z_u^{-1} (r_3 + U^{-1} r_5) + (D z_v - G^2 D z_u^{-1})^{-1} (I + D z_u^{-1} G) E \right], \\ dv &= (D z_v - G^2 D z_u^{-1})^{-1} [E + dy + D z_u^{-1} G dy], \\ du &= D z_u^{-1} (r_3 - dy - G dv + U^{-1} r_5), \\ dz_v &= V^{-1} (r_6 - Z_v dv), \\ dz_u &= U^{-1} (r_5 - Z_u du), \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} D &= \left[-Dz_u^{-1} - (Dz_v - G^2 Dz_u^{-1})^{-1} (I + Dz_u^{-1} G)^2 \right]^{-1}, \\ r &= - \left\{ r_1 - A^t D \left[r_2 - Dz_u^{-1} (r_3 + U^{-1} r_5) + (Dz_v - G^2 Dz_u^{-1})^{-1} (I + Dz_u^{-1} G) E \right] \right\}, \\ E &= \left[r_4 + Dz_u^{-1} (-Gr_3 - GU^{-1} r_5) + V^{-1} r_6 \right], \\ Dz_u &= (G + U^{-1} Z_u), \\ Dz_v &= (G + V^{-1} Z_v). \end{aligned}$$

Calculadas as direções, devemos atualizar as variáveis usando o tamanho do passo α definido de forma a manter as variáveis u , v , dz_u e dz_v estritamente positivas.

$$\alpha = \min \left\{ \tau \left(\min_{du_i < 0} -\frac{u_i}{du_i} \right), \tau \left(\min_{dv_i < 0} -\frac{v_i}{dv_i} \right), \tau \left(\min_{dz_{ui} < 0} -\frac{z_{ui}}{dz_{ui}} \right), \tau \left(\min_{dz_{vi} < 0} -\frac{z_{vi}}{dz_{vi}} \right), 1 \right\},$$

onde $\tau = 0,99995$.

Conhecendo as direções e os passos, as variáveis podem ser atualizadas por

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \alpha dx, \quad y^{k+1} = y^k + \alpha dy, \quad z_u^{k+1} = z_u^k + \alpha dz_u, \\ u^{k+1} &= u^k + \alpha du, \quad v^{k+1} = v^k + \alpha dv, \quad z_v^{k+1} = z_v^k + \alpha dz_v. \end{aligned}$$

A atualização do parâmetro barreira é dada por

$$\mu = \gamma \phi, \quad \text{onde } \gamma = u^t z_u + v^t z_v \text{ e } \phi = \frac{1}{m\sqrt{m}}.$$

Crítério de Convergência:

Os critérios de convergência são baseados nas condições de otimalidade na diferença dos valores de N atual e da iteração anterior:

$$N^k = \frac{\|\nabla L^k\|}{(1 + \|x^k\| + \|u^k\| + \|v^k\| + \|y^k\| + \|z_u^k\| + \|z_v^k\|)(2m)} \leq \epsilon, \quad |N^{k+1} - N^k| \leq \epsilon_1.$$

Pontos Iniciais:

Os pontos iniciais são calculados baseados nas idéias desenvolvidas em Coleman e Li (1992), com modificações nos vetores u e v :

$$\begin{aligned} x^0 &= (A^t A)^{-1} A^t b, \quad r^0 = b - Ax^0, \quad y^0 = \frac{\kappa r^0}{\|r^0\|_\infty}, \\ u_i^0 &= \begin{cases} r_i^0 + \sigma, & \text{se } r_i^0 \geq 0, \\ \sigma, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad v_i^0 = \begin{cases} \sigma, & \text{se } r_i^0 \geq 0, \\ \sigma - r_i^0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad \text{onde } 0 < \sigma \leq 1. \\ z_u^0 &= z_v^0 = e, \quad \text{onde } e = (1, 1, \dots, 1)^t. \end{aligned}$$

Em Coleman e Li (1992) u e v não são definidos, no entanto esta escolha foi proposta em Oliveira, Nascimento e Lyra (2000) de tal forma que satisfaça a relação $u^0 + v^0 = |\lambda r^0|$. Assim, se λ é $O(1)$, ambos u^0 e v^0 são da mesma ordem de r^0 . Lembremos que, por definição, $r = u - v$. Estabelecemos $\kappa = 0,975$.

3.2 Método Primal-Dual Preditor-Corretor

Este método, também desenvolvido em Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004), é apresentado com modificações no cálculo dos resíduos. No método preditor-corretor, primeiramente tomamos um passo afim em que o parâmetro barreira $\mu = 0$. Assim, temos que resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} 0 & A^t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & I & -I & 0 & 0 \\ 0 & I & G & G & -I & 0 \\ 0 & -I & G & G & 0 & -I \\ 0 & 0 & Z_u & 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z_v & 0 & V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \\ du \\ dv \\ dz_u \\ dz_v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ r_5 \\ r_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A^t y \\ -Ax - u + v + b \\ -g + z_u - y \\ -g + z_v + y \\ -UZ_ue + \mu e \\ -VZ_ve + \mu e \end{bmatrix}, \quad (6)$$

Resolvendo o sistema (6) e por meio de eliminação de variáveis, obtemos as direções afins:

$$\begin{aligned} \bar{dx} &= (A^t D A)^{-1} \bar{r}, \\ \bar{dy} &= D \left[\bar{r}_2 - A \bar{dx} - D z_u^{-1} (\bar{r}_3 + U^{-1} \bar{r}_5) + (D z_v - G^2 D z_u^{-1})^{-1} (I + D z_u^{-1} G) \bar{E} \right], \\ \bar{dv} &= (D z_v - G^2 D z_u^{-1})^{-1} [\bar{E} + \bar{dy} + D z_u^{-1} G \bar{dy}], \\ \bar{du} &= D z_u^{-1} (\bar{r}_3 - \bar{dy} - G \bar{dv} + U^{-1} \bar{r}_5), \\ \bar{dz}_v &= V^{-1} (\bar{r}_6 - Z_v \bar{dv}), \\ \bar{dz}_u &= U^{-1} (\bar{r}_5 - Z_u \bar{du}), \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} D &= \left[-D z_u^{-1} - (D z_v - G^2 D z_u^{-1})^{-1} (I + D z_u^{-1} G)^2 \right]^{-1}, \\ \bar{r} &= - \left\{ \bar{r}_1 - A^t D \left[\bar{r}_2 - D z_u^{-1} (\bar{r}_3 + U^{-1} \bar{r}_5) + (D z_v - G^2 D z_u^{-1})^{-1} (I + D z_u^{-1} G) \bar{E} \right] \right\}, \\ \bar{E} &= \left[\bar{r}_4 + D z_u^{-1} (-G \bar{r}_3 - G U^{-1} \bar{r}_5) + V^{-1} \bar{r}_6 \right], \\ D z_u &= (G + U^{-1} Z_u), \\ D z_v &= (G + V^{-1} Z_v). \end{aligned}$$

Para calcular os resíduos devemos comparar os sistemas de equações (5), substituindo x por $x + dx$, y por $y + dy$, u por $u + du$ e v por $v + dv$, z_u por $z_u + dz_u$ e z_v por $z_v + dz_v$ com o sistema de equações (6). As diferenças encontradas serão os resíduos.

Comparando o primeiro e o segundo sistema de equações, conclui-se que não existe resíduo. Comparando agora do terceiro ao sexto sistema de equações do sistema, encontram-se:

$$\begin{aligned} R_1 &= \tilde{g} - G(du + dv) - g, \\ R_2 &= \tilde{g} - G(du + dv) - g = R_1, \\ R_3 &= dU dZ_u e = dU dz_u, \\ R_4 &= dV dZ_v e = dV dz_v, \end{aligned}$$

onde $U = \text{diag}(u)$, $dU = \text{diag}(du)$, $Z_u = \text{diag}(z_u)$, $dZ_u = \text{diag}(dz_u)$, $V = \text{diag}(v)$, $dV = \text{diag}(dv)$, $Z_v = \text{diag}(z_v)$, $dZ_v = \text{diag}(dz_v)$, $e = [1, 1, \dots, 1]^t$, $\tilde{g} = p(u + \beta du + v + \beta dv)^{p-1}$ e $\beta = \min \left\{ \tau \left(\min(d_u + d_v) < 0 - \frac{(u + v)}{(d_u + d_v)} \right), 1 \right\}$, onde $\tau = 0,99995$.

Agora podemos impor um valor para o parâmetro barreira μ e resolver o sistema:

$$\begin{bmatrix} 0 & A^t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & I & -I & 0 & 0 \\ 0 & I & G & G & -I & 0 \\ 0 & -I & G & G & 0 & -I \\ 0 & 0 & Z_u & 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z_v & 0 & V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{dx} \\ \hat{dy} \\ \hat{du} \\ \hat{dv} \\ \hat{dz}_u \\ \hat{dz}_v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A^t y \\ -Ax - u + v + b \\ -g + z_u - y - R_1 \\ -g + z_v + y - R_2 \\ -UZ_ue + \mu e - R_3 \\ -VZ_ve + \mu e - R_4 \end{bmatrix},$$

onde

$$\begin{aligned} R_1 &= \tilde{g} - G(du + dv) - g, \\ R_2 &= \tilde{g} - G(du + dv) - g, \\ R_3 &= dUdz_u, \\ R_4 &= dVdz_v, \\ \tilde{g} &= p(u + \beta du + v + \beta dv)^{p-1}, \\ \beta &= \min \left\{ \tau \left(\min_{(du_i + dv_i) < 0} -\frac{(u_i + v_i)}{(du_i + dv_i)} \right), 1 \right\}, \text{ onde } \tau=0.9995. \end{aligned}$$

Obtemos as direções do passo corretor:

$$\begin{aligned} \hat{dx} &= (A^t DA)^{-1} \hat{r}, \\ \hat{dy} &= D \left[\hat{r}_2 - A \hat{dx} - Dz_u^{-1} (\hat{r}_3 + U^{-1} \hat{r}_5) + (Dz_v - G^2 Dz_u^{-1})^{-1} (I + Dz_u^{-1} G) \hat{E} \right], \\ \hat{dv} &= (Dz_v - G^2 Dz_u^{-1})^{-1} [\hat{E} + \hat{dy} + Dz_u^{-1} G \hat{dy}], \\ \hat{du} &= Dz_u^{-1} (\hat{r}_3 - \hat{dy} - G \hat{dv} + U^{-1} \hat{r}_5), \\ \hat{dz}_v &= V^{-1} (\hat{r}_6 - Z_v \hat{dv}), \\ \hat{dz}_u &= U^{-1} (\hat{r}_5 - Z_u \hat{du}), \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} D &= \left[-Dz_u^{-1} - (Dz_v - G^2 Dz_u^{-1})^{-1} (I + Dz_u^{-1} G)^2 \right]^{-1}, \\ \hat{r} &= - \left\{ \hat{r}_1 - A^t D \left[\hat{r}_2 - Dz_u^{-1} (\hat{r}_3 + U^{-1} \hat{r}_5) + (Dz_v - G^2 Dz_u^{-1})^{-1} (I + Dz_u^{-1} G) \hat{E} \right] \right\}, \\ \hat{E} &= [\hat{r}_4 + Dz_u^{-1} (-G \hat{r}_3 - G U^{-1} \hat{r}_5) + V^{-1} \hat{r}_6], \\ Dz_u &= (G + U^{-1} Z_u), \\ Dz_v &= (G + V^{-1} Z_v). \end{aligned}$$

O cálculo do passo α e a atualização das variáveis são análogos ao método primal-dual barreira logarítmica.

Algumas Considerações

O critério de convergência e o ponto inicial são os mesmos utilizados no método de pontos interiores primal dual barreira logarítmica. Temos que A é uma matriz de Vandermonde, necessita-se armazenar apenas os valores dados pela segunda coluna da matriz. A matriz $A^t A$ é uma matriz inversível, pois A tem posto completo e é uma matriz de Hankel, ou seja, os elementos de cada antidiagonal são iguais. Encontram-se também matrizes do tipo $A^t DA$ nos cálculos que envolvem as direções, onde D é uma matriz diagonal não-singular. $A^t DA$ também é uma matriz não-singular e de Hankel.

5. Resultados Computacionais

Neste trabalho, apresentamos os métodos de pontos interiores descritos em Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004) com as modificações no ponto inicial e o cálculo dos resíduos. A seguir, encontram-se os resultados computacionais em Matlab comparando essas modificações com os resultados obtidos em Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004) e os resultados computacionais da implementação eficiente em C. Os testes computacionais foram feitos no Matlab R2009a, sistema computacional Linux,

p	PDBL			PDBL(antigo)		
	it	tempo	Fo	it	tempo	Fo
1,1	20	0,3038	2,4550e+04	33	0,4288	2,4551e+04
1,2	16	0,2455	2,8274e+04	27	0,3473	2,8274e+04
1,3	13	0,2037	3,2781e+04	22	0,3013	3,2781e+04
1,4	11	0,1828	3,8243e+04	20	0,2616	3,8243e+04
1,5	10	0,1704	4,4881e+04	18	0,2543	4,4881e+04
1,6	9	0,1553	5,2952e+04	18	0,2464	5,2952e+04
1,7	9	0,1518	6,2775e+04	18	0,2497	6,2775e+04
1,8	9	0,1543	7,4734e+04	18	0,2566	7,4734e+04
1,9	10	0,1633	8,9311e+04	19	0,2193	8,9311e+04

Tabela 1: Problema de Juros em Matlab.

p	PDBLPC			PDBLPC(antigo)		
	it	tempo	Fo	it	tempo	Fo
1,1	11	0,1858	2,4550e+04	1	0,0658	2,6118e+04
1,2	11	0,1895	2,8274e+04	1	0,0502	2,9726e+04
1,3	7	0,1395	3,2781e+04	1	0,0545	3,4090e+04
1,4	7	0,1397	3,8243e+04	1	0,0536	3,9382e+04
1,5	6	0,1123	4,4881e+04	1	0,0537	4,5816e+04
1,6	6	0,1231	5,2952e+04	1	0,0540	5,3658e+04
1,7	6	0,1222	6,2775e+04	1	0,0535	6,3239e+04
1,8	13	0,1320	7,4734e+04	1	0,0529	7,4975e+04
1,9	8	0,1488	8,9311e+04	1	0,0518	8,9381e+04

Tabela 2: Problema de Juros em Matlab.

memória 4GB, processador Intel(R) Core(TM)2.

5.1 Implementação em Matlab

• **Problema de Grande Porte:** Esse problema, descrito em Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004), compreende valores de juros diários ao longo de 40 anos, totalizando 10958 valores observados, os dados foram normalizados no intervalo $[0, 1]$. Assim, temos que a matriz de Vandermonde possui $m = 10958$ linhas e, neste caso, fizemos uma aproximação linear, ou seja, $n=2$. Utilizamos $\mu = 0,001$, $\tau = 0,99995$, $\beta = 10$, $\epsilon = 10^{-10}$, $\epsilon_1 = 10^{-8}$, onde ϵ e ϵ_1 são do critério de convergência, e $\sigma = 10^{-10}$.

Percebemos uma redução no número de iterações e no valor da função objetivo na Tabela (1). Agora, na Tabela (2), o método primal-dual barreira logarítmica preditor-corretor aumentou o número de iterações, mas o valor da função objetivo diminuiu.

• **Função Seno Hiperbólico:** Esse problema contém 40 mil pontos, os valores da segunda coluna de A são obtidos dividindo-se o intervalo $[-2, 2]$ em 40 mil. O

p	PDBL			PDBL(antigo)		
	it	tempo	Fo	it	tempo	Fo
1,1	1	0,1421	7,4724e+003	1	0,1148	7,4722e+003
1,2	1	0,1410	6,5564e+003	1	0,1070	6,5562e+003
1,3	1	0,1317	5,7680e+003	1	0,1069	5,7679e+003
1,4	1	0,1334	5,0874e+003	2	0,1473	5,0872e+003
1,5	1	0,1335	4,4339e+003	17	0,6822	4,4339e+003
1,6	1	0,1322	3,9872e+003	16	0,6685	3,9499e+003
1,7	1	0,1369	3,5425e+003	15	0,6261	3,5235e+003
1,8	1	0,1363	3,1547e+003	14	0,5882	3,1471e+003
1,9	1	0,1320	2,8158e+003	14	0,5843	2,8141e+003

Tabela 3: Seno Hiperbólico (Aproximação Linear em Matlab).

p	PDBLPC			PDBLPC(antigo)		
	it	tempo	Fo	it	tempo	Fo
1,1	1	0,2214	7,4725e+003	1	0,1441	7,4725e+003
1,2	1	0,2351	6,5565e+003	1	0,1308	6,5565e+003
1,3	1	0,2117	5,7681e+003	1	0,1299	5,7681e+003
1,4	1	0,2186	5,0875e+003	1	0,1280	5,0875e+003
1,5	1	0,2080	4,4984e+003	1	0,1292	4,4985e+003
1,6	1	0,2149	3,9872e+003	1	0,1288	3,9872e+003
1,7	1	0,2144	3,5425e+003	1	0,1282	3,5425e+003
1,8	1	0,2155	3,1547e+003	1	0,1290	3,1547e+003
1,9	1	0,2161	2,8158e+003	1	0,1280	2,8158e+003

Tabela 4: Seno Hiperbólico (Aproximação Linear em Matlab).

vetor b é o valor do seno hiperbólico do valor correspondente na segunda coluna de A. Lembramos que $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$. Obtém-se a matriz $A_{40000 \times 2}$ e o vetor b . Vamos aproximar a função seno hiperbólico por um polinômio de grau 1. Utilizamos $\mu = 0,001$, $\tau = 0,99995$, $\beta = 10$, $\epsilon = 10^{-10}$, $\epsilon_1 = 10^{-8}$, onde ϵ e ϵ_1 são do critério de convergência, e $\sigma = 10^{-1}$.

Na Tabela (3), onde o número de iterações diminuiu e notamos um leve aumento no valor da função objetivo em alguns casos. Na Tabela (4) o tempo aumentou, isso acontece por causa da forma de calcular os resíduos. A nova maneira de calcular os resíduos reduz o número de iterações mas aumenta levemente o tempo já que para isso fazemos mais cálculo que nos métodos antigos.

5.2 Implementação na Linguagem C

• **Problema de Grande Porte:** Esse problema que contém 109570 observações e foi obtido a partir do problema de grande porte citado na seção anterior. Utilizamos

p	PDBL			PDBLPC		
	it	tempo	Fo	it	tempo	Fo
1,1	1	0,2100	2,5640e+05	2	0,3200	2,5640e+05
1,2	1	0,2000	2,9068e+05	2	0,3200	2,9068e+05
1,3	1	0,2000	3,3194e+05	2	0,3200	3,3194e+05
1,4	1	0,2000	3,8173e+05	2	0,3200	3,8173e+05
1,5	1	0,2100	4,4195e+05	2	0,3200	4,4195e+05
1,6	1	0,2000	5,1499e+05	2	0,3200	5,1499e+05
1,7	1	0,2000	6,0379e+05	2	0,3200	6,0379e+05
1,8	1	0,2000	7,1203e+05	2	0,3300	7,1203e+05
1,9	1	0,2100	8,4430e+05	2	0,3300	8,4430e+05

Tabela 5: Problema de Juros (Aproximação Linear em C).

p	PDBL			PDBLPC		
	it	tempo	Fo	it	tempo	Fo
1,1	1	0,2600	1,7511e+05	2	0,4200	1,7511e+05
1,2	1	0,2700	1,9302e+05	1	0,3500	1,9302e+05
1,3	1	0,2600	2,1414e+05	2	0,4300	2,1414e+05
1,4	1	0,2600	2,3902e+05	2	0,4200	2,3902e+05
1,5	1	0,2600	2,6834e+05	2	0,4000	2,6834e+05
1,6	1	0,2600	3,0293e+05	2	0,4200	3,0293e+05
1,7	1	0,2600	3,4379e+05	2	0,4300	3,4379e+05
1,8	1	0,2600	3,9214e+05	2	0,4200	3,9214e+05
1,9	1	0,2600	4,4946e+05	2	0,4400	4,4946e+05

Tabela 6: Problema de Juros (Aproximação por Polinômio de Grau 8 em C).

$\mu = 0,001$, $\tau = 0,99995$, $\beta = 10$, $\epsilon = 10^{-10}$, $\epsilon_1 = 10^{-8}$, onde ϵ e ϵ_1 são do critério de convergência, e $\sigma = 10^{-10}$. Primeiramente, realiza-se uma aproximação linear e em seguida, uma aproximação por um polinômio de grau 8.

Nas Tabelas (5, 6) podemos ver que o método primal-dual barreira logarítmica convergiu em apenas uma iteração para todos os valores de p , por isso não haveria necessidade de utilizarmos o primal-dual preditor-corretor, mesmo assim fizemos os testes com o primal-dual preditor-corretor que por sua vez convergiram em duas iterações, é aceitável que isso aconteça, pois é como utilizar uma ferramenta mais eficiente para resolver um problema que não necessita de tal eficiência pelo fato de ter convergido em apenas uma iteração no método primal-dual. Comparando com experimentos realizados em Matlab, pode-se observar que o número de iterações foram reduzidos em todos os casos. A função objetivo foi reduzida na maioria dos casos.

- **Função Seno:** Esse problema contém 150 mil dados. A segunda coluna da matriz A é formada por elementos no intervalo $\left[0, \frac{3}{2}\pi\right]$, o vetor b consiste no seno desses valores. Vamos utilizar aproximação por um polinômio de grau 2. Utilizamos

p	PDBL			PDBLPC		
	it	tempo	Fo	it	tempo	Fo
1,1	2	0,4000	1,9369e+04	2	0,4900	1,9369e+04
1,2	2	0,3900	1,6418e+04	2	0,4800	1,6418e+04
1,3	2	0,3900	1,3951e+04	2	0,4800	1,3951e+04
1,4	2	0,3900	1,1882e+04	2	0,4800	1,1882e+04
1,5	2	0,4000	1,0144e+04	2	0,4800	1,0144e+04
1,6	2	0,3900	8,6791e+03	2	0,4900	8,6791e+03
1,7	2	0,4000	7,4418e+03	2	0,4900	7,4418e+03
1,8	2	0,4200	6,3945e+03	2	0,4900	6,3945e+03
1,9	2	0,3900	5,5063e+03	2	0,5000	5,5063e+03

Tabela 7: Função Seno (Aproximação por Polinômio de Grau 2 em C.)

$\mu = 0,001$, $\tau = 0,99995$, $\beta = 10$, $\epsilon = 10^{-10}$, $\epsilon_1 = 10^{-8}$, onde ϵ e ϵ_1 são do critério de convergência, e $\sigma = 10^{-10}$.

Na Tabela (7), verifica-se que os métodos primal-dual barreira-logarítmica e primal-dual barreira-logarítmica preditor-corretor obtiveram o mesmo no número de iterações e o mesmo valor da função objetivo.

6. Conclusões

Os métodos de pontos interiores para resolver problemas de regressão polinomial apresentam melhor desempenho e menor esforço computacional que o método GNCS, podemos verificar isso em Cantane (2004) e Oliveira e Cantane(2004).

Nesse trabalho os métodos de pontos interiores já existentes são aperfeiçoados. Modifica-se a forma de calcular o o ponto inicial e os resíduos dos métodos e como consequência o número de iterações e o valor da função objetivo foram reduzidos.

Pode-se escolher σ , que é usado no cálculo do ponto inicial, de forma a diminuir ainda mais o valor da função objetivo. Assim obtém-se a possibilidade de escolher bons pontos de partida.

Com as modificações no cálculo dos resíduos, o tempo por iteração aumenta porque a nova forma de calculá-los é mais trabalhosa que a forma antiga, mas a diferença de tempo é quase insignificante. Entretanto conseguimos diminuir o número de iterações no método primal-dual barreira logarítmica preditor-corretor.

Na implementação eficiente na linguagem C aproveitamos a estrutura matricial dos métodos para economizar memória, isso é possível porque muitos valores deixam de ser armazenados. Com isso a complexidade computacional é reduzida e podemos resolver problemas de maior porte de forma eficiente. Em particular, não é necessário armazenar nenhuma matriz durante a solução de um problema.

Os métodos de pontos interiores apresentam uma estrutura matricial que faz com que a implementação não seja complexa, enquanto que o método GNCS por exemplo requer muito mais trabalho na implementação, visto que o método necessita de um

procedimento de busca linear que é computacionalmente muito caro.

Experimentos numéricos mostram que os métodos de pontos interiores especializados para o problema de regressão pela norma L_p apresentam melhor desempenho que os métodos existentes. O método de pontos interiores primal-dual barreira logarítmica preditor-corretor apresenta melhor desempenho em problemas de grande porte.

Referências

- [1] Cantane, D. R. *Métodos de pontos interiores aplicados ao problema de regressão pela norma L_p* , dissertação de mestrado ICMC-USP/São Carlos, 2004.
- [2] Coleman, T.F. and Li, Y.; A globally and quadratically convergent affine scaling method for linear l_1 problems, *Math. Programming*, **56** (1992), 189-222.
- [3] El-Bakry, A.S., Tapia, R.A., Tsuchiya, T. and Zhang, Y. ; On the formulation and the theory of the Newton interior-point method for nonlinear programming, *Journal of Optimization Theory and Applications*, **89** (1996), 507-541.
- [4] Li, Y.; A globally convergent method for l_p problems, *SIAM J. Optimization*, **3** (1993), 609-629.
- [5] Merle, G. and Späc̈th, H. ;Computational experience with discrete l_p approximation, *Computing*, **12** (1974), 315-321.
- [6] Oliveira, A.R.L. e Cantane, D.R. *Métodos de Pontos Interiores Aplicados ao Problema de Regressão pela Norma L_p* , TEMA. Tendências em Matemática Aplicada e Computacional, v. 5, 2004, p. 281-291.
- [7] Oliveira, A.R.L. and Lyra, C.; Interior point methods for the polynomial L_∞ fitting problems, *Internacional Transactions in Operational Research*, **11** (2004), 309-322.
- [8] Oliveira, A.R.L., Nascimento, M.A. and Lyra C., Efficient implementation and benchmark of interior point methods for the polynomial L_1 fitting problems, *Statistics & Data Analysis*, **35** (2000), 119-135.
- [9] Wright, S.J. ; “Primal-Dual Interior-Point Methods”, SIAM Publications, SIAM Philadelphia, PA, USA, 1996.