

Otimização: Aspectos Teóricos e Métodos Numéricos

Notas de aulas baseadas em:

- **Practical Optimization**
Philip E. Gill, Walter Murray, Margareth H. Wright.
Academic Press, 1981
- **Optimization Concepts and Applications in Engineering**
Ashok D. Belegundu, Tirupathi R. Chandrupatla.
Prentice-Hall, 1999
- **Numerical Optimization**
Jorge Nocedal, Stephen J. Wright. Springer, 1999
- **Iterative Methods for Optimization**
C. T. Kelley. Siam, 1999
- **História da Matemática**
Carl B. Boyer, Elza F. Gomide (tradução).
Edgard Blücher Ltda. 1978
- **outras ...**

página intencionalmente deixada em branco

Sumário

1	Generalidades	1
1.1	Estudo das relações de causa e efeito	1
1.2	Entra a Matemática	2
1.3	Funções reais de uma variável real	3
1.4	Pontos especiais de uma função escalar	5
1.5	Otimização	6
1.6	Propriedades Desejáveis em Funções	7
1.6.1	Continuidade	7
1.6.2	Diferenciabilidade	8
1.6.3	Suavidade	9
1.6.4	Convexidade	12
1.7	Recapitulando	15
2	Otimização Escalar	16
2.1	Reconhecimento analítico	16
2.2	Exemplos práticos	17
2.3	Conclusões parciais	22
2.4	Métodos Numéricos	23
2.4.1	Raízes de funções	23
2.5	Mínimos de funções escalares	30
2.5.1	Funções unimodais e enquadramento	31
2.5.2	Enquadramento inicial	32
2.5.3	Redução de intervalos	34
2.6	Método de Fibonacci	35
2.6.1	Números de Fibonacci	38
2.6.2	Método de Fibonacci (de novo)	41
2.6.3	Fibonacci, ainda uma vez	45
2.7	Idéias de ouro	46
2.8	Métodos de interpolação polinomial	50

3	Otimização Vetorial	52
3.1	Recordação Breve de Análise no \mathbb{R}^n	52
3.1.1	Continuidade e Derivadas	53
3.1.2	Funções Vetoriais de Variáveis Vetoriais	57
3.1.3	Funções lineares e quadráticas	58
3.2	Pontos Estacionários e Especiais no \mathbb{R}^n	59
3.2.1	Condições analíticas	59
3.2.2	Funções Quadráticas	63
3.3	Convexidade	66
4	Métodos numéricos para minimização vetorial	69
4.1	Método de descida máxima	70
4.1.1	Convergência do método de descida máxima	74
4.2	Método do gradiente conjugado	77
4.3	Métodos de Newton	81
4.4	Métodos de Newton modificados	83
4.5	Métodos de quase Newton	85
4.6	Método do politopo	87
5	Otimização Geral I	88
5.1	Soluções do PGO	89
5.2	Otimização sem restrições	90
5.3	Otimização com Restrições	91
5.4	Restrições Lineares de Igualdade	91
5.4.1	Condições Analíticas para o PGORLI	95
5.4.2	Problema da Projeção Ortogonal	102
5.5	Restrições Lineares de Desigualdade	103
5.5.1	Geometria da Região Viável	104
5.5.2	Geometria da função objetivo e do PGORLD	108
5.5.3	Álgebra do PGORLD	110
5.5.4	Resumo do enredo e roteiro	112
5.6	Método do Gradiente Projetado	116
6	Programação Linear	128
6.1	Geometria básica	128
6.2	Programação Linear, mais detalhes	131
6.3	Exemplos práticos	132
6.3.1	Problema geral da dieta	132
6.3.2	Problema de refinaria	133
6.3.3	Produção de ligas metálicas	134
6.4	Resolução gráfica de um PPL	135

6.5	Resolução manual de um PPL	135
6.6	Resolução numérica de um PPL	135
6.7	Dualidade em PL	135
7	Otimização Geral II	136
7.1	Programação quadrática	136
7.2	Restrições Não-Lineares de Igualdade	136
7.2.1	Álgebra das restrições e da função objetivo	137
7.3	Restrições Não-Lineares de Desigualdade	141
7.3.1	Geometria da função objetivo e das restrições	142
7.3.2	Álgebra do PGORNLD	144
7.4	Métodos numéricos	150
7.4.1	Método das direções viáveis	150
7.5	Problemas básicos	150
7.6	Outras propostas	150

página intencionalmente deixada em branco

Capítulo 1

Generalidades

Diz a Filosofia (caramba, começamos voando alto...) que o universo é governado pela lei de causa e efeito: toda causa produz um efeito e todo efeito é consequência de uma causa. Embora esta afirmação, assim como tudo em Filosofia, aliás, seja passível de discussões, debates e críticas, vamos aceitá-la como verdadeira. Assim, podemos teorizar que todo o conhecimento e toda a ciência dos seres humanos se resumem, em última análise, ao estudo das relações de causa e efeito.

1.1 Estudo das relações de causa e efeito

Pode-se reconhecer duas posturas, duas atitudes básicas frente às relações de causa e efeito:

- Dada uma causa qualquer, qual o seu efeito? Isto se chama **análise**.
- Dado um efeito qualquer, o que o causou? E isto é a **síntese**.

A palavra síntese é normalmente usada com uma acepção mais específica: que se deve fazer para que um certo efeito seja alcançado? Que medidas tomar para que algo desejado ocorra? Análise e síntese são atividades bem gerais, dada uma causa qualquer... dado um efeito qualquer... mas nas aplicações práticas estamos interessados em coisas bem menos vastas, estamos interessados em coisas bem precisas, os

Efeitos Especiais, ou Nobres

Existem efeitos especiais? quais são eles? o que os causa? Antes de mais nada, o que é, o que caracteriza um efeito especial? A resposta é simples. Para os seres humanos, em geral, coisas especiais são coisas **extremas**, ou

máximas ou **mínimas** de acordo com algum critério. Agora, conhecendo o sentido da palavra especial, fica fácil conceituar Otimização.

Otimização é o estudo das situações especiais, o que são, quanto valem e, principalmente, como atingi-las.

Pronto, eis algo extremamente normal, natural e forte nos seres humanos. Todos nós carregamos isso lá dentro, bem vivo, de modo consciente ou não. Assim se percebe a enorme importância do estudo de Otimização, ou vocês pensaram que estamos aqui apenas para mais um curso qualquer?

1.2 Entra a Matemática

Os matemáticos, como sempre, tem ferramentas muito exatas, precisas e poderosas para descrever as relações de causa e efeito, as funções. Dado um domínio \mathcal{C} e um contra-domínio \mathcal{E} o conceito de **função** ou **aplicação** ou **mapa** é clássico:

$$\begin{aligned} f : \mathcal{C} &\longrightarrow \mathcal{E} \\ x \in \mathcal{C} &\mapsto f(x) \in \mathcal{E} \end{aligned}$$

O domínio \mathcal{C} é o conjunto das causas, e o contra-domínio \mathcal{E} o dos efeitos, e deste modo pode-se ler a sentença matemática acima como: a uma causa x corresponde um efeito $f(x)$. É simples assim mesmo, uma função é apenas uma relação de causa e efeito e não algo tenebrosamente abstrato para assustar ainda mais os já assustados alunos iniciantes de cálculo. As funções básicas são as que associam conjuntos de números entre si, assim

$$x \in \mathcal{C} = \begin{cases} \mathbb{Z}^n \\ \mathbb{R}^n \\ \mathbb{C}^n \end{cases} \quad \text{e} \quad y = f(x) \in \mathcal{E} = \begin{cases} \mathbb{Z}^n \\ \mathbb{R}^n \\ \mathbb{C}^n \end{cases}$$

O volume de conhecimento sobre estas funções é bastante grande. As mais elementares são as famosas funções reais de variável real, ou univariáveis, ou escalares, onde $\mathcal{C} = \mathcal{E} = \mathbb{R}$, o corpo dos números reais.

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x \in \mathbb{R} &\mapsto f(x) \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

O conceito de **Operador** é algo mais sofisticado, embora a idéia básica seja a mesma. Temos ainda uma aplicação, um mapa, mas as causas e os efeitos são agora funções de um dado tipo, e não mais números.

$$\mathcal{C} = \mathcal{E} = \{\text{funções de um dado tipo}\}$$

Quando as causas e efeitos são funções do tempo pode-se associar o conceito de operador, algo tipicamente matemático, à idéia de **sistema**, de vasto emprego na engenharia. Em muitas situações de Otimização do comportamento de sistemas associa-se um número real a uma função:

$$\mathcal{C} = \{\text{funções de um dado tipo}\} \quad \text{e} \quad \mathcal{E} = \mathbb{R}$$

Sendo a Matemática tão importante, a hora é boa para uma tradicional “Revisão de Conceitos Básicos” que começará pelas ...

1.3 Funções reais de uma variável real

Também chamadas, como já vimos, de funções univariáveis ou ainda escalares, podem ser conceituadas simbolicamente por

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x \in \mathbb{R} &\mapsto f(x) \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

como também já vimos um pouquinho aí atrás. Usaremos

- muitas idéias
- pouco rigor
- muitas imagens

Posteriormente, para funções menos simples, as imagens ficarão mais difíceis, e o rigor deverá crescer, então é bom adquirir idéias sólidas a partir de agora. Há algumas maneiras básicas de se conhecer, de se entender uma função escalar; a elas.

1. **Conhecimento visual de uma função escalar.** Usa uma representação gráfica da função. Os seres humanos têm grande afinidade com o sentido da visão, certamente mais do que com os outros. Talvez por isto a inteligência humana é tão associada a padrões visuais, e os recursos gráficos são tão importantes no aprendizado e na fixação de conceitos.

Os meios visuais de se descrever funções são intuitivos, cômodos e agradáveis. São também, se não houver disponibilidades computacionais, de obtenção um tanto quanto trabalhosa. A figura 1.1 ilustra uma função escalar.

2. **Conhecimento analítico de uma função escalar.** É o que se tem por meio de uma expressão analítica da função, ou seja, uma fórmula, como por exemplo

$$f(x) = x^2 + 3x - \text{sen} \left(\sqrt[3]{x} \right)$$

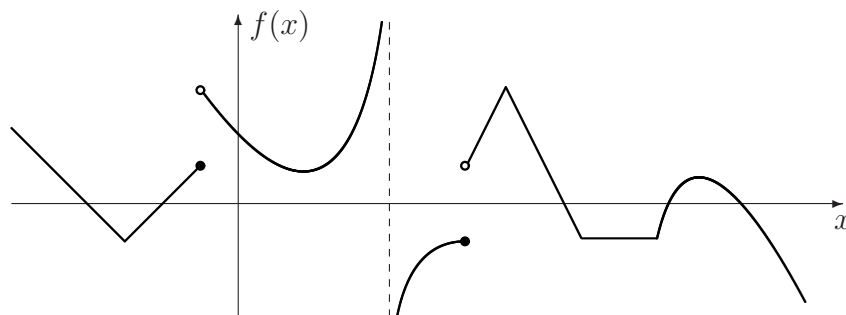


Figura 1.1: Gráfico de uma função real de variável real

O poderoso arsenal de ferramentas matemáticas desenvolvidas pelo Cálculo se aplica primordialmente a funções descritas por uma expressão analítica. Estas expressões são simples, densas e rápidas, embora às vezes possam não ser muito intuitivas.

3. **Conhecimento discreto de uma função escalar.** Por meio de uma tabela de valores que a função assume em vários pontos do domínio:

x	$f(x)$
x_1	y_1
x_2	y_2
\vdots	\vdots
x_n	y_n

Dizemos que a função é **amostrada** em alguns pontos. Este tipo de conhecimento é necessário às vezes.

Conhecendo a expressão analítica de uma função é possível, e até mesmo fácil (embora possa ser trabalhoso), obter seu gráfico e uma tabela de valores. Em tempos passados isso poderia requerer papel milimetrado, réguas, esquadros, curvas francesas, cuidado, carinho e alguns pendores artísticos. Hoje em dia há vários programas computacionais especializados nessas tarefas.

Conhecendo o gráfico de uma função, a obtenção de uma tabela de valores é algo simples e direto, mas chegar a uma expressão analítica pode se tornar muito complicado ou até mesmo impossível. Quando se conhece apenas uma tabela com os valores de uma função, a tarefa de se obter para ela uma fórmula e um gráfico é sempre delicada, e muitas vezes problemática ou mesmo impossível.

1.4 Pontos especiais de uma função escalar

É muito fácil identificar os pontos especiais ou nobres de uma função quando se pode visualizá-la, como por exemplo na figura 1.2. Pontos como P_1 são chamados de **mínimos locais fortes** ou **estritos** e variáveis que os acarretam, como a abscissa x_1 , são os **pontos** de mínimos locais fortes ou estritos, ou então **minimizadores** locais fortes ou estritos ou ainda, com um certo abuso de linguagem, recebem os mesmos nomes dos pontos e são também chamados de mínimos locais fortes (ou estritos).

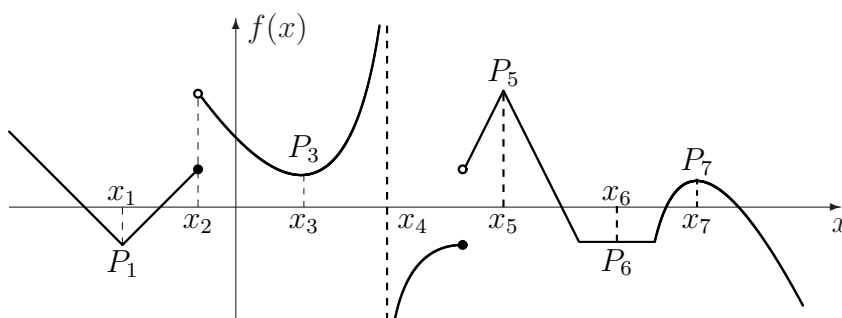


Figura 1.2: Pontos especiais de uma função real de variável real

O ponto P_3 é também um mínimo local forte, e x_3 um minimizador (ou ponto de mínimo, ou simplesmente mínimo) local forte. O sentido da palavra *forte* nas idéias acima fica claro ao observar o ponto P_6 , um mínimo local **fraco**; a abscissa causadora x_6 é um minimizador (ou ponto de mínimo, ou simplesmente mínimo) local fraco. As situações (x_5, P_5) e (x_7, P_7) representam **máximos** locais fortes. As representações gráficas são excelentes para se entender os conceitos fundamentais, mas a caracterização analítica é sempre necessária, apenas com ela se pode chegar a níveis satisfatórios de precisão e rigor. Vamos lá então!

Definição 1.4.1 (Mínimo local fraco) *Um ponto $x^* \in \mathbb{R}$ é um minimizador local fraco de uma função escalar f se existe uma vizinhança \mathcal{V} de x^* tal que $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in \mathcal{V}$. O valor $f(x^*)$ será o mínimo local (fraco).*

Conforme já mencionado, x^* é o minimizador, ou ponto de mínimo, ao passo que $f(x^*)$ é o mínimo, mas normalmente se abusa da nomenclatura e x^* é também chamado de mínimo.

Definição 1.4.2 (Mínimo local forte) *Um ponto $x^* \in \mathbb{R}$ é um minimizador local forte de uma função escalar f se existe uma vizinhança \mathcal{V} de x^**

tal que $f(x^*) < f(x)$ para todo $x \in \mathcal{V}$, com $x \neq x^*$. O valor $f(x^*)$ será o mínimo local (forte).

As palavras *fraca* e *forte* que aparecem nestes conceitos já foram explicadas, falta apenas entender o significado de *local*.

Definição 1.4.3 (Mínimo global) Um ponto $x^* \in \mathbb{R}$ é um minimizador global de uma função escalar f se $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}$. O valor $f(x^*)$ será o mínimo global.

Os métodos teóricos e práticos de otimização são muito eficientes para apontar mínimos **locais**, a obtenção de mínimos globais apresenta uma série de problemas, como veremos mais à frente. As definições para máximos são obtidas de maneira trivial, mudando nas frases acima aquilo que deve ser mudado. Isto para não sermos pernósticos com a sentença “As definições ... são obtidas mutatis mutandis”.

1.5 Otimização

A idéia mestra já foi apresentada, e nem seria preciso conceituar agora, mas vamos lá, Otimização é a busca de minimizadores ou maximizadores de funções. Podemos reconhecer algumas maneiras básicas de proceder.

Otimização Visual: quando há uma descrição visual, o gráfico da função, de onde diretamente se extrai informações sobre os extremos.

Otimização Analítica: quando há uma descrição analítica da função, a sua fórmula, a partir da qual se aplicam métodos teóricos.

Otimização Numérica: quando uma tabela de valores da função é gerada, (a partir de um gráfico, ou de uma fórmula ou de uma série de medidas) e, iterativamente, são selecionados candidatos a solução.

Fato 1.5.1 A Otimização Visual é simples, direta, fácil, extremamente cômoda e desejável. Basta olhar a curva e identificar os extremos.

Se há tantas vantagens na otimização visual, por que procurar os outros tipos? A razão é simples: às vezes é difícil traçar o gráfico da função, por muitos possíveis motivos. Em outras vezes é simplesmente impossível obter uma representação gráfica, como no caso de funções de variáveis vetoriais, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ onde $n \geq 3$. Nestes casos críticos é preciso recorrer à otimização analítica, e quando esta também é problemática, o único remédio

é a otimização numérica. A otimização analítica é bela e rigorosa. Muitos dos desenvolvimentos da Matemática clássica ajudam a formar seus alicerces e talvez por esta razão os primeiros avanços em seus territórios lembram o estudo do Cálculo.

1.6 Propriedades Desejáveis em Funções

A finalidade desta seção é recordar conceitos para aplicá-los à Otimização, ou seja, à procura de situações nobres em relações de causa e efeito. As funções reais de variável real, ou escalares, ou univariáveis já foram apresentadas (reapresentadas, na realidade, certo?) na seção 1.2. Repetindo a dose

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x \in \mathbb{R} &\mapsto f(x) \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Algumas propriedades são muito desejáveis em uma função, pois quando estão presentes é possível prever o comportamento da função em vários pontos a partir do seu valor em um único ponto. Este poder é algo muito precioso.

1.6.1 Continuidade

Uma função f é contínua no intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$ quando é possível traçar o seu gráfico, de $f(a)$ até $f(b)$, sem tirar o lápis do papel. Uma função f é contínua no ponto $x_0 \in \mathbb{R}$ quando é contínua em um intervalo $[a, b]$ que contém x_0 .

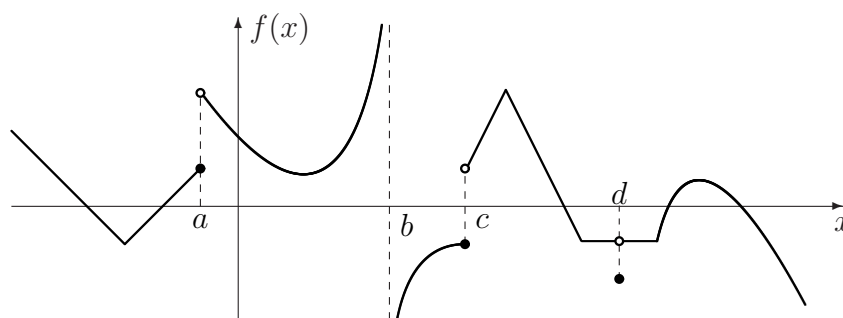


Figura 1.3: Continuidade de uma função real de variável real

Os leitores diligentes certamente verificarão a continuidade da função mostrada no gráfico da figura 1.3. As descontinuidades nos pontos a e c são do tipo salto, no ponto b temos uma fuga para infinito e em d uma falha

pontual. Os métodos visuais, como sempre, são cômodos e atraentes, mas é preciso relembrar os conceitos analíticos.

Definição 1.6.1 *A função real de variável real f é contínua no ponto $x_0 \in \mathbb{R}$ se e somente se*

$$\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f(x_0)$$

Ou então, sem usar o conceito de limite:

Definição 1.6.2 *A função real de variável real f é contínua no ponto $x_0 \in \mathbb{R}$ se e somente se para todo real $\varepsilon > 0$ existe um real $\delta > 0$ tal que se $|x - x_0| < \delta$ então $|f(x) - f(x_0)| < \varepsilon$.*

É a velha idéia de sempre, é possível chegar arbitrariamente próximo de $f(x_0)$ desde que se chegue suficientemente perto de x_0 .

Definição 1.6.3 *A função real de variável real f é contínua em um intervalo se e somente se for contínua em todos os pontos desse intervalo.*

O que é mais intuitivo, conceitos analíticos ou visuais?

1.6.2 Diferenciabilidade

Uma função f é **diferenciável** no ponto $x_0 \in \mathbb{R}$ quando é possível traçar uma única tangente à curva no ponto $f(x_0)$, e esta tangente é não vertical. O coeficiente angular desta reta (tangente do ângulo que ela faz com o eixo horizontal) será a **derivada** de f em x_0 . A figura 1.4 mostra a situação.

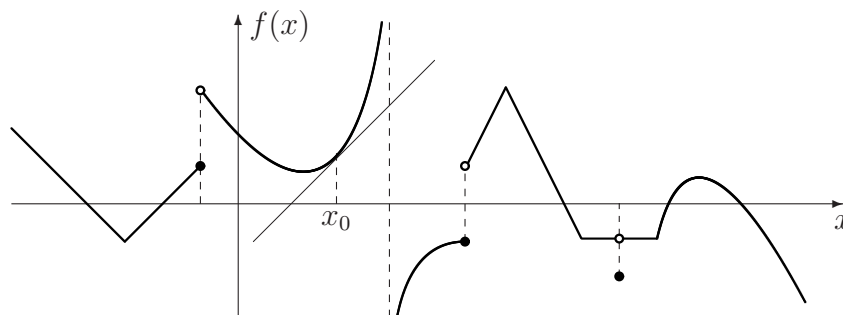


Figura 1.4: Tangente de uma função real de variável real

Fica muito claro que se f não é contínua em um ponto também não é diferenciável neste ponto. O conceito de diferenciabilidade em um intervalo é simples, a propriedade deve valer em todos os pontos deste intervalo. Muito bem, agora vamos colocar um pouco de rigor nestas idéias.

Definição 1.6.4 A função f é diferenciável no ponto $x_0 \in \mathbb{R}$ quando

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

existe. Este limite é chamado de **primeira derivada**, ou **derivada primeira**, ou **gradiente** de f em x_0 , com notação

$$f'(x_0) \quad \text{ou} \quad f^{(1)}(x_0) \quad \text{ou} \quad \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0}$$

Conceito certamente conhecido dos leitores, e muito. Vejamos agora as derivadas laterais.

Definição 1.6.5 A derivada lateral pela direita de f em $x_0 \in \mathbb{R}$ é dada por

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f^+(x_0)$$

quando este limite existe. Na derivada pela esquerda temos $h \rightarrow 0^-$ e a notação é $f^-(x_0)$.

Exemplo 1.6.1 Analisar a função descrita pela expressão $f(x) = |x|$. Os leitores traçarão o gráfico, com certeza, é fácil. Como também é fácil verificar que $f'(x)$ existe $\forall x \neq 0$ mas f não é diferenciável em $x_0 = 0$. Entretanto $f^+(0) = 1$ e $f^-(0) = -1$.

1.6.3 Suavidade

Parece coisa de poesia e literatura, mas tem um significado importante. A suavidade é a ausência de mudanças bruscas. A falta de continuidade é responsável pelas mudanças mais bruscas que podem existir, assim é fácil perceber que uma função não pode ser suave em um trecho onde apresente descontinuidades. Os requisitos para suavidade vão além disso, pois mudanças bruscas podem ser associadas também a outros fatores, como em breve se verá. A figura 1.5 ilustra trechos suaves e bruscos ou ríspido de uma função.

Para aqueles que acharam este conceito um tanto quanto vago e impreciso, dependendo de avaliações particulares (afinal, o que deve ser considerado uma mudança brusca?) é hora de rigor analítico, às vezes ele faz falta.

Definição 1.6.6 A função escalar f é **diferenciável em um intervalo** $\mathcal{I} \subset \mathbb{R}$ se e somente se $f'(x)$ existe $\forall x \in \mathcal{I}$. Neste caso podemos definir a **função derivada**, designada por f' , como

$$\begin{aligned} f' : \mathcal{I} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto f'(x) = \left. \frac{df}{dx} \right|_x \end{aligned}$$

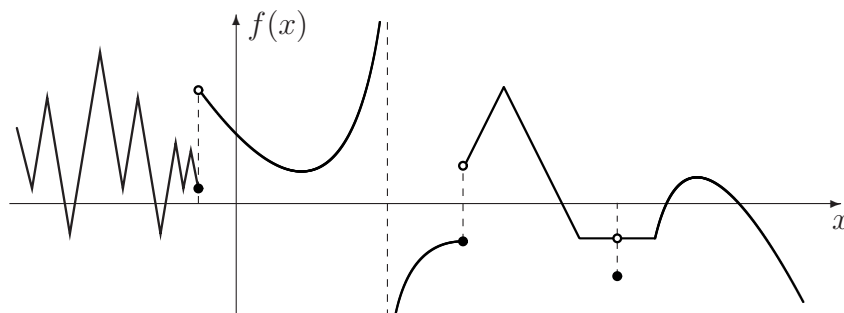


Figura 1.5: Suavidade de uma função real de variável real

Pessoal, isto é terreno conhecidíssimo, certo? E agora vem o que? As derivadas de ordem superior, claro, definidas seguindo esta mesma linha de raciocínio.

Definição 1.6.7 Se a função escalar f possui derivada primeira f' diferenciável em um intervalo $\mathcal{I} \subset \mathbb{R}$ então a função derivada de f' será chamada de **derivada segunda** de f e designada por f'' ou $f^{(2)}$.

Exemplo 1.6.2 Para função $f(x) = x^2$ a definição pode ser aplicada levando a

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(x+h)^2 - x^2}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} (2x+h) = 2x$$

como aliás já estávamos esperando. As outras derivadas seriam obtidas de maneira análoga, ou então usando as famosas regrinhas de derivação, resultando em

$$\begin{aligned} f''(x) &= 2 & \forall x \\ f^{(3)}(x) &= 0 & \forall x \\ &\vdots \\ f^{(n)}(x) &= 0 & \forall x, \forall n \geq 3 \end{aligned}$$

Os leitores são encorajados a traçar os gráficos para estas funções.

Exemplo 1.6.3 Analisar a diferenciabilidade da função dada por $f(x) = (1/2)(\max(0, x-5))^2$. O primeiro passo, se possível, é traçar o gráfico. Se a expressão dada estiver meio estranha tentem verificar o seguinte:

$$f(x) = \frac{1}{2} [g(x)]^2 \quad \text{onde} \quad g(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq 5 \\ x-5 & \text{se } x \geq 5 \end{cases}$$

As coisas ficaram mais fáceis, f é nula antes de $x = 5$ e um arco de parábola quadrática, com concavidade para cima, para $x \geq 5$, sendo contínua e diferenciável em todo o espaço. É fácil desenhar o gráfico desta função, e de suas derivadas. Tentem, leitores, e verifiquem que f' é contínua sempre mas sua diferenciabilidade falha em um ponto (qual?) e que f'' tem falhas na continuidade e na diferenciabilidade em um ponto (qual?).

A diferenciabilidade de uma função certamente falha quando ela não é contínua. Normalmente estamos interessados em funções que possam ser diferenciadas várias vezes, ou seja, funções contínuas que tenham derivadas também contínuas.

Definição 1.6.8 Quando uma função f e suas derivadas $f', f'', \dots, f^{(n)}$ são contínuas em um dado intervalo dizemos que ela é n vezes diferenciável, é de classe \mathcal{C}^n , ou então é \mathcal{C}^n contínua, e usamos a simbologia $f \in \mathcal{C}^n$.

Nos exemplos anteriores a esta definição tínhamos $f \in \mathcal{C}^\infty$ e $f \in \mathcal{C}^1$.

Definição 1.6.9 Uma função escalar é suave quando pertencer à classe \mathcal{C}^n com $n \geq 2$.

Pronto, eis aí o rigor desejado, a suavidade está associada ao número de vezes que se pode diferenciar a função. E por que mesmo a suavidade é importante? Vejam bem: quando uma função f é suave, o conhecimento de seu valor em um dado ponto permite ótimos palpites para os seus valores em pontos próximos: dado $f(x_0)$ é fácil estimar $f(x)$ para x em uma vizinhança de x_0 . Para justificar este fato segue, sem demonstrações, um resultado clássico do Cálculo elementar.

Teorema 1.6.1 (Teorema de Taylor:) sendo x_0 e x dois pontos em um intervalo \mathcal{I} onde $f \in \mathcal{C}^p$ então existe um real z , situado entre x_0 e x , tal que

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + (1/2!)f''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots + (1/(p-1)!)f^{(p-1)}(x_0)(x - x_0)^{p-1} + (1/p!)f^{(p)}(z)(x - x_0)^p \quad (1.1)$$

Se uma função é suficientemente suave em um intervalo, então conhecendo seu valor e os de suas derivadas em x_0 , e também um ponto z interno ($z = \alpha x_0 + (1 - \alpha)x$ para $0 < \alpha < 1$), é possível encontrar valores de f em outros pontos do intervalo, exatamente o que se afirmava possível. É importante lembrar que quando o ponto “desconhecido” x está próximo de x_0 , aproximações muito boas são obtidas mesmo com poucos termos na expressão acima. Mais detalhes sobre o teorema de Taylor virão à frente, no caso vetorial. Taylor é uma peça básica na demonstração formal de vários resultados básicos de Otimização.

1.6.4 Convexidade

É uma idéia muito básica, mas que depende do ponto de vista. A figura 1.6, por exemplo, ilustra o que se pode chamar de **convexidade de linhas** no plano; o observador O_1 vê algo côncavo, ao passo que O_2 vê algo convexo.



Figura 1.6: Convexo ou côncavo?

Convexidade de regiões fechadas

Quando se trata de regiões fechadas no plano, ainda se pode recorrer à visualização e usar os conceitos intuitivos de convexidade e concavidade: se um observador externo à região percebe a linha da fronteira sempre convexa então a região é convexa.



Figura 1.7: Regiões fechadas no plano

O conceito analítico: dados dois pontos A e B quaisquer na região plana, esta será convexa quando todos os pontos do segmento de reta \overline{AB} unindo A e B também estiverem contidos nela.

Convexidade de funções

Visualmente é fácil, como sempre: uma função f é convexa no intervalo $[a, b]$ quando a região fechada formada pela curva da função e o segmento de reta entre $f(a)$ e $f(b)$ for convexa.

A função representada na figura 1.8 é convexa nos intervalos $[a, b]$ e $[b, c]$, mas não em $[a, c]$. A bem do rigor, a função não deveria ser considerada convexa no intervalo $[a, b]$, embora satisfaça o critério visual acima. Ela deveria ser considerada côncava mas, como mencionamos o rigor, é hora de apresentar o conceito analítico.

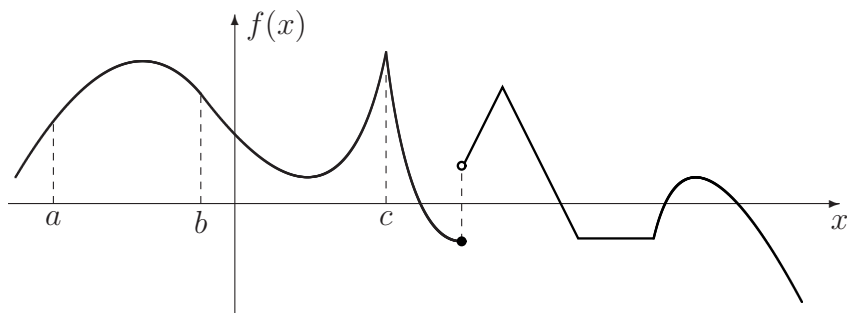


Figura 1.8: Convexidade de funções

Definição 1.6.10 Uma função escalar f é *convexa* no intervalo \mathcal{I} se e somente se para cada par de pontos $x_1, x_2 \in \mathcal{I}$ temos, para todo $\alpha \in [0, 1]$,

$$f(\alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2) \leq \alpha f(x_1) + (1 - \alpha)f(x_2)$$

Para simplificar a notação, designaremos $f(x_i)$ por f_i . A expressão acima significa que o gráfico da função f deve ficar abaixo do segmento de reta unindo f_1 a f_2 , e isto deve valer para quaisquer pontos x_1 e x_2 no intervalo. Uma figura cai bem.

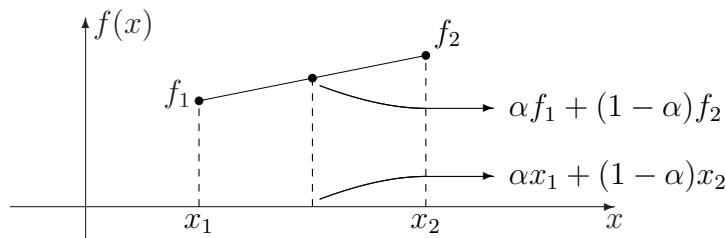


Figura 1.9: Visualizando a definição de convexidade de funções

Definição 1.6.11 Uma função escalar f é **estritamente** convexa no intervalo \mathcal{I} se e somente se para cada par de pontos $x_1, x_2 \in \mathcal{I}$ temos

$$f(\alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2) < \alpha f(x_1) + (1 - \alpha)f(x_2)$$

para cada $\alpha \in [0, 1]$.

A diferença é sutil, e a figura 1.10 ajuda a entender.

Vejamos algumas propriedades simples, que virão sem demonstrações, como aliás quase todas as propriedades neste texto. Leitores curiosos devem se dirigir às referências citadas, e a outras nelas citadas.

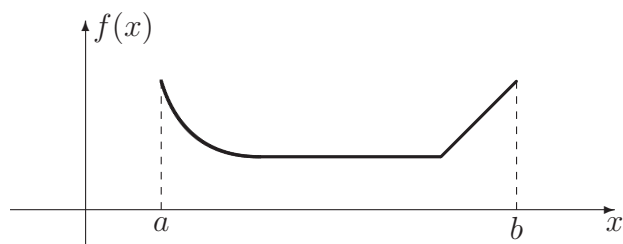


Figura 1.10: Caso de convexidade não estrita

Propriedade 1.6.1 *Uma função escalar f de classe \mathcal{C}^1 é convexa em um intervalo \mathcal{I} se e somente se para quaisquer $x_0, x \in \mathcal{I}$ temos*

$$f(x) \geq f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

A interpretação visual é simples: a curva da função f está sempre acima de qualquer tangente no intervalo.

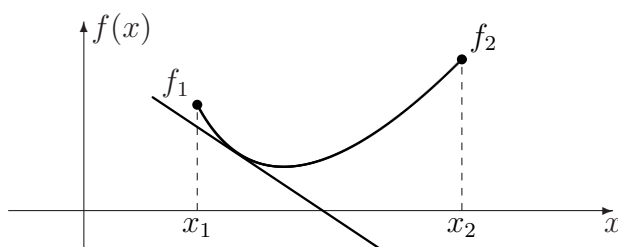


Figura 1.11: Características de funções convexas

Propriedade 1.6.2 *Uma função escalar f de classe \mathcal{C}^2 é convexa em um intervalo \mathcal{I} se e somente se para qualquer $x \in \mathcal{I}$ temos*

$$f''(x) \geq 0$$

A “concavidade” da curva está voltada para cima, esta é óbvia, e também pode ser visualizada na figura 1.11.

Propriedade 1.6.3 *Se x^* é um minimizador local para uma f convexa em um dado intervalo \mathcal{I} então x^* é também um minimizador global de f em \mathcal{I} .*

Mais uma vez a figura 1.11 ajuda. Se f é convexa em um intervalo então qualquer mínimo local é também global ou, em outras palavras, funções convexas em um intervalo possuem um único mínimo nesse intervalo, que é, conseqüentemente, local e global. Já se mencionou anteriormente que

a busca de mínimos globais é problemática, a maioria dos métodos leva a soluções locais. A propriedade acima outorga às funções convexas um status de nirvana, de algo sempre desejado e procurado, pois para elas é possível garantir que extremos locais sejam também globais.

1.7 Recapitulando

O que estamos fazendo mesmo? Qual era o objetivo disto tudo? Vimos que a otimização visual é altamente desejável, mas muitas vezes não se pode usá-la e é necessário recorrer à otimização analítica. Quando esta também for impraticável restam apenas os recursos da otimização numérica.

Para auxiliar na otimização analítica passamos por uma rápida revisão de conceitos básicos de cálculo escalar. Vimos algumas propriedades desejáveis de um função: continuidade, diferenciabilidade, suavidade e convexidade. É a importância das idades ... Hora boa para retornar ao interesse maior, a otimização, e começando pelo caso mas simples, o escalar ou univariável.

Capítulo 2

Otimização Escalar

Os pontos especiais de uma função qualquer são os minimizadores e maximizadores, fracos ou fortes, locais ou globais. A missão deste capítulo é buscá-los para as funções reais de apenas uma variável real, também chamadas de escalares ou univariáveis. Começaremos pelos aspectos analíticos, sempre que possível entremeados com visualizações, claro, e depois passearemos rapidamente pela praia dos métodos numéricos.

2.1 Reconhecimento analítico

A conceituação analítica rigorosa dos pontos especiais já foi apresentada no capítulo 1. O objetivo agora é descobrir propriedades destes pontos especiais, pois isto nos dá uma alternativa: ao invés de buscar os pontos que satisfazem a definição (o que pode ser impraticável, ou muito difícil) buscamos pontos que satisfazem as propriedades, o que pode ser (e normalmente é mesmo!) bem mais simples.

Definição 2.1.1 Dizemos que $x_e \in \mathbb{R}$ é um ponto **estacionário** da função $f \in \mathcal{C}^1$ quando e apenas quando $f'(x_e) = 0$.

Nos pontos estacionários a derivada se anula. É claro que a função precisa ser diferenciável, ou melhor ainda, de classe \mathcal{C}^1 .

Teorema 2.1.1 Se $x^* \in \mathbb{R}$ é um mínimo local de $f \in \mathcal{C}^1$ então x^* é estacionário: $f'(x^*) = 0$.

Este primeiro teorema fornece uma condição necessária para um ponto x^* ser mínimo local: ele deve ser estacionário. É interessante notar que o mínimo em questão pode ser fraco ou forte. Uma demonstração será fornecida para

o caso geral de funções vetoriais, no próximo capítulo. Para máximos há um resultado semelhante.

Teorema 2.1.2 *Se $x^* \in \mathbb{R}$ é um máximo local de $f \in \mathcal{C}^1$ então x^* é estacionário: $f'(x^*) = 0$.*

Isto é conhecido desde o colegial, derivar e igualar a zero! A busca de minimizadores ou maximizadores já está simplificada, basta buscar os estacionários. Mas ... basta mesmo? Infelizmente não. Se queremos, por exemplo, um mínimo e a função tem apenas um ponto estacionário este pode muito bem ser um máximo, ou um ponto de inflexão. Se queremos ter certeza de que o ponto estacionário em questão é realmente um minimizador ou maximizador precisamos de outras garantias, as condições suficientes.

Teorema 2.1.3 *Se $x^* \in \mathbb{R}$ é um ponto estacionário de $f \in \mathcal{C}^2$ e se $f''(x^*) > 0$ então x^* é um minimizador local forte.*

Teorema 2.1.4 *Se $x^* \in \mathbb{R}$ é um ponto estacionário de $f \in \mathcal{C}^2$ e se $f''(x^*) < 0$ então x^* é um maximizador local forte.*

Pronto, com estas condições suficientes podemos testar os candidatos (os ponto estacionários) e garantir a sua natureza. Assim, se x^* é tal que $f'(x^*) = 0$ ele será estacionário e um candidato a otimizador. Até aqui trabalhou a condição necessária, hora de entrarem as suficientes:

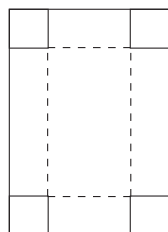
Se $f''(x^*) > 0$ então x^* é mínimo local forte
 Se $f''(x^*) < 0$ então x^* é máximo local forte
 Se $f''(x^*) = 0$ então x^* não otimiza, é de inflexão

Enredo conhecido há muito tempo: derivar, igualar a zero e olhar a derivada segunda. **Notem bem:** as condições analíticas de otimalidade funcionam para funções suaves, de classe \mathcal{C}^1 a necessária e \mathcal{C}^2 as suficientes. A otimização analítica de funções brucas — as de pouca continuidade, de classe \mathcal{C}^0 — é problemática.

2.2 Exemplos práticos

Trabalharemos com casos de interesse na engenharia. Por sorte nossa, é enorme o número de situações na engenharia que requerem otimização.

Exemplo 2.2.1 *Construir uma caixa aberta a partir de uma folha de papel tamanho A_4 de modo a maximizar o volume obtido. As dimensões do papel A_4 são, em milímetros, 297×210 . A figura 2.1 mostra a situação.*



Recorta-se, de cada canto, um quadrado com lado = x .
 Dobra-se nas linhas pontilhadas. A caixa obtida tem
 comprimento = $297 - 2x$
 largura = $210 - 2x$
 altura = x
 volume = $(297 - 2x)(210 - 2x)x$

Figura 2.1: Caixa aberta a partir de folha A4

O volume a ser maximizado vem do produto indicado acima:

$$\text{volume} = f(x) = (297 - 2x)(210 - 2x)x = 4x^3 - 1014x^2 + 62370x$$

Esta função objetivo é polinomial, uma parábola cúbica. É relativamente simples traçar o seu gráfico, até mesmo sem auxílio computacional. Usando o GNU PLOT chegaríamos à figura 2.2.

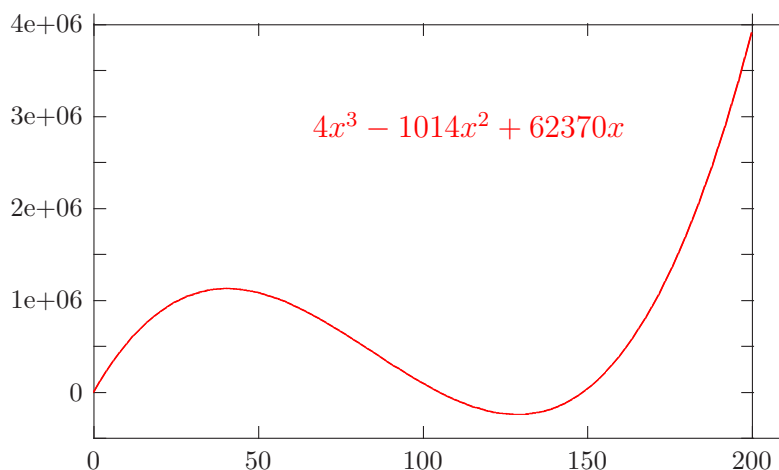


Figura 2.2: Volume da caixa aberta em função de x

Uma simples inspeção visual permite identificar o máximo: $x^* \approx 45$ correspondendo a $V^* = f^* \approx 10^6$. Existe também um mínimo, em $x \approx 130$, mas não tem sentido um valor de x maior do que a metade de uma das dimensões do papel. A solução analítica também é simples, afinal esta função é camarada. Usando as regras de derivação temos

$$\begin{aligned} f'(x) &= 12x^2 - 2028x + 62370 \\ &= 6(2x^2 - 338x + 10395) \end{aligned}$$

cujas raízes são os dois pontos estacionários: $x_{e_1} = 128.58$ e $x_{e_2} = 40.42$. Para o veredicto final precisamos da derivada segunda.

$$f''(x) = 6(4x - 338) \implies \begin{cases} f''(x_{e_1}) > 0 & \text{onde } x_{e_1} \text{ é mínimo} \\ f''(x_{e_2}) < 0 & \text{onde } x_{e_2} \text{ é máximo} \end{cases}$$

O volume máximo pode ser obtido com precisão: $V^* = f^* = 1128.5\text{mm}^3$.

Exemplo 2.2.2 Dada uma chapa de metal retangular de 50×30 unidades de comprimento, desejamos fazer caixas abertas, como antes, mas agora o lucro deve ser máximo. Cada unidade de volume rende 0.10\$, cada unidade de área desprezada custa 0.04\$ e a solda custa 0.02\$ por unidade de comprimento. É fácil deduzir que

$$\begin{aligned} \text{lucro} &= 0.10 * \text{volume} - 0.04 * \text{área} - 0.02 * \text{comprimento} \\ &= 0.10(50 - 2x)(30 - 2x)x - 0.04(4x^2) - 0.02(4x) \end{aligned}$$

É bem parecido com o anterior, e fica para os leitores.

Exemplo 2.2.3 Construir e operar um tanque de refrigeração de forma cilíndrica, com volume de 50m^3 e custo total mínimo. As tampas circulares custam $10\$/\text{m}^2$, as paredes laterais custam $6\$/\text{m}^2$, e a operação depende da área total, custando $80\$/\text{m}^2$. Calcular o diâmetro da base do tanque. Sendo o volume fixo deve-se exprimir a altura do tanque em função do diâmetro x e depois calcular as áreas das tampas, lateral e total.

$$\text{volume} = 50 = \pi \left(\frac{x}{2}\right)^2 h \implies h = \frac{200}{\pi x^2}$$

Somando o custo das tampas, da parede lateral e de operação teremos o custo total

$$\begin{aligned} \text{custo} &= 10 * \text{área das tampas} + 6 * \text{área lateral} + 80 * \text{área total} \\ &= 10 \left(2 \frac{\pi x^2}{4}\right) + 6 \left(\pi x \frac{200}{\pi x^2}\right) + 80 \left(\frac{2\pi x^2}{4} + \frac{200}{x}\right) \\ &= 45\pi x^2 + \frac{17200}{x} = f(x) \end{aligned}$$

As coisas ficam um pouquinho mais difíceis, pois f não é mais polinomial, mas ainda é perfeitamente possível traçar o gráfico, como na figura 2.3, e dele concluir que $x^* \approx 4$ e $f^* \approx 8000$.

A solução analítica é menos direta, mas ainda fácil:

$$f'(x) = 90\pi x - \frac{17200}{x^2} = 0 \iff x^3 = \frac{17200}{90\pi}$$

Encontraríamos $x^* = 3.93$ e $f^* = 6560$ que representam efetivamente um mínimo, pois $f''(x^*) < 0$.

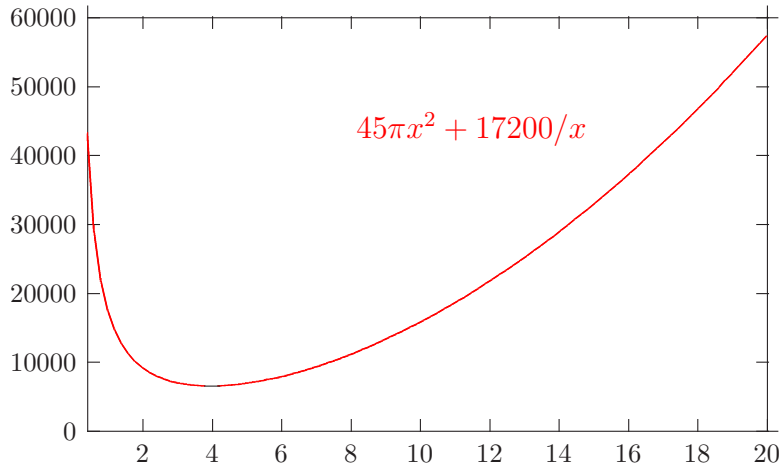


Figura 2.3: Custo total do tanque cilíndrico em função do diâmetro x

Exemplo 2.2.4 *Trapézio inscrito em uma semicircunferência de diâmetro 20, que altura maximiza a área?*

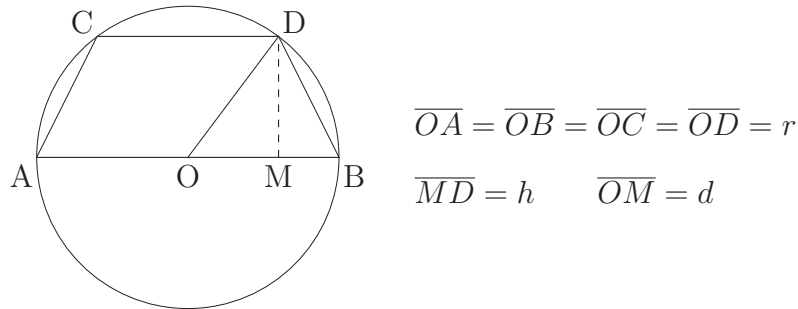


Figura 2.4: Trapézio inscrito em uma semicircunferência de diâmetro 20

No triângulo retângulo OMD temos $r^2 = h^2 + d^2$ donde $d = \sqrt{r^2 - h^2}$ e a área do trapézio é

$$\text{Área} = \frac{2d + 2r}{2}h = 10h + h\sqrt{100 - h^2} = f(h)$$

A otimização visual continua simples e direta, embora, talvez, pouco precisa: $h^* \approx 8.4$ e $A^* \approx 130$. O processo analítico é mais complicadinho, mas ainda dá para encarar na mão.

$$f'(x) = 10 + \frac{1}{2} (100h^2 - h^4)^{-1/2} (200h - 4h^3) = 10 + \frac{100 - 2h^2}{\sqrt{100 - h^2}}$$

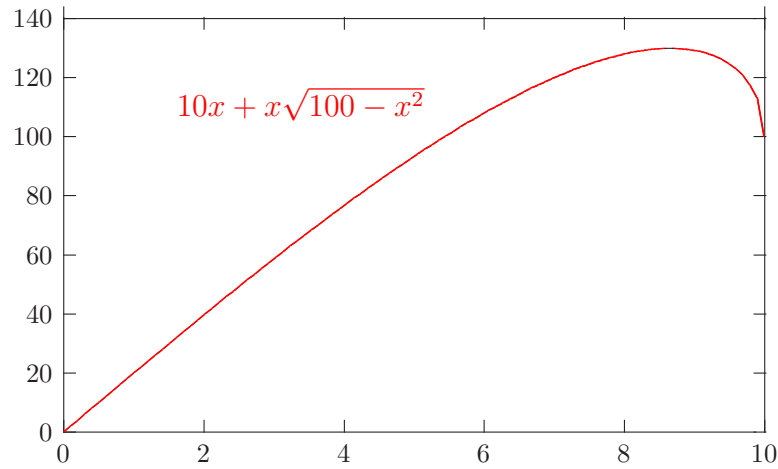


Figura 2.5: Área do trapézio inscrito em função da altura h

Igualando a zero encontrariamos $h^2(h^2 - 75) = 0$ cuja solução positiva e não nula é $h^* = \sqrt{75} = 8.66$, que corresponde ao máximo procurado.

Exemplo 2.2.5 Em uma solução de cloreto de potássio a energia de atração e repulsão atômica é dada por

$$E = -\frac{1.44}{r} + \frac{5.9 \times 10^{-6}}{r^9}$$

onde r é a distância entre os átomos. Sabendo que os estados de equilíbrio ocorrem nos mínimos de energia, calcular as distâncias de equilíbrio. Na figura 2.6 está plotada a curva para $10^6 E$, e pode-se identificar claramente o minimizador $r^* \approx 0.27$.

A solução analítica é obtida trilhando o caminho de sempre.

$$f'(r) = 1.44r^{-2} - 9 \times 5.9 \times 10^{-6}r^{-10} = 1.44r^{-2} (1 - 3.6875 \times 10^{-5}r^{-8})$$

$$f'(r) = 0 \iff r^8 = 3.6875 \times 10^{-5} \implies r^* = 0.279$$

O cálculo da derivada segunda revelaria ser este um ponto de mínimo

Exemplo 2.2.6 Placa plana com um orifício circular de diâmetro d pode suportar uma tensão de tração máxima dada pela fórmula

$$\sigma = \frac{1.11 + 1.11 (d/20)^{-0.18}}{20 - d} = f(d)$$

Calcular d que minimiza σ . A figura 2.7 mostra o gráfico desta função, de onde se estima $d^* \approx 2$.

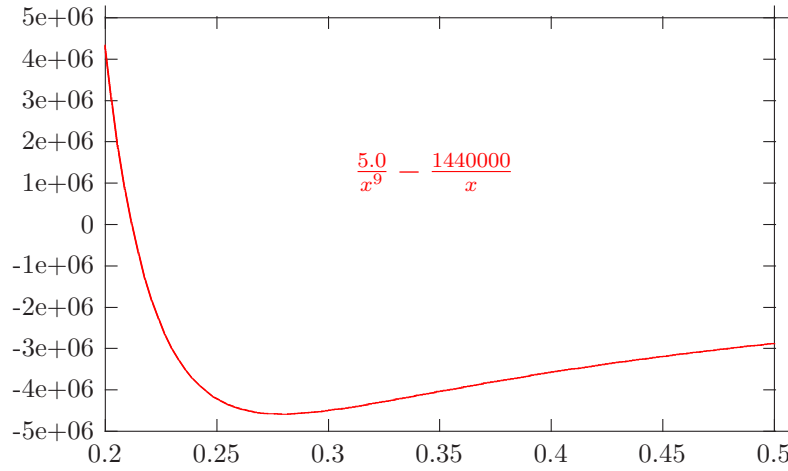


Figura 2.6: Energia em função da distância interatômica

O cálculo de derivada primeira forneceria, após alguns algebrismos

$$f'(d) = \frac{1.11(-0.18)(d/20)^{-1.18}(20-d)(1/20) + 1.11 + 1.11(d/20)^{-0.18}}{(20-d)^2}$$

$$f'(x) = \frac{1.11}{400} \frac{1 + 1.18x^{-0.18} - 0.18x^{-1.18}}{(1-x)^2} \quad \text{onde} \quad x = \frac{d}{20}$$

O cálculo dos pontos estacionários recai em uma equação cuja solução não é muito fácil ...

2.3 Conclusões parciais

A otimização visual é cômoda, agradável e foi possível em todos os casos vistos. Pode-se arriscar uma afirmação: os atuais recursos computacionais de visualização tornam a otimização visual sempre (ou, vá lá, quase sempre) possível para o caso univariável. Se não se puder usá-los, fica-se restrito a pouquíssimos casos polinomiais de baixo grau, onde o traçado manual das curvas é factível.

A otimização analítica pode ser simples e direta nos casos polinomiais de baixo grau, mas pode conduzir a equações mais delicadas ou até mesmo a situações definitivamente complicadas, como se pode perceber nos exemplos anteriores. É preciso lembrar que estamos no caso escalar, com funções reais de uma única variável real, e as previsões para o caso multivariável ficam preocupantes. Com efeito, para $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ com $n = 2$ as visualizações são mais elaboradas e trabalhosas, mas quando $n > 2$ elas são impossíveis. Além

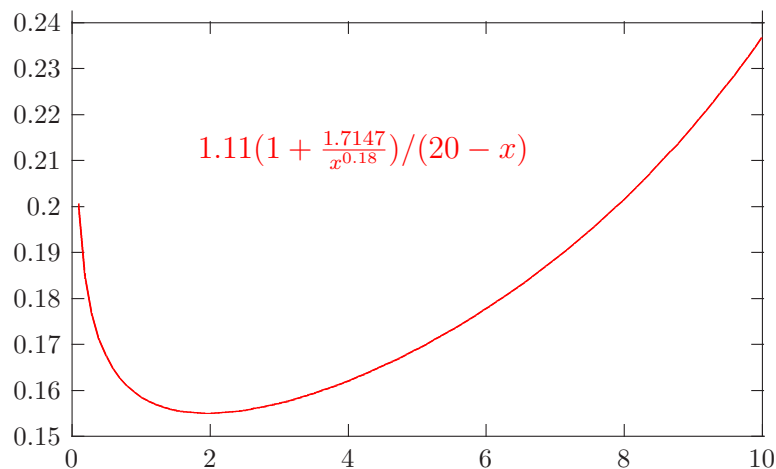


Figura 2.7: Tensão na placa plana em função do diâmetro do orifício

disto, é fácil aceitar que as soluções analíticas podem se tornar difíceis e impraticáveis. Esta situação gera a necessidade de procedimentos alternativos para a solução de problemas de otimização, os ...

2.4 Métodos Numéricos

Os procedimentos visuais e analíticos, quando aplicados a situações práticas, eventualmente encontram seus limites. Estes limites são superados pelas técnicas numéricas. Atualmente a otimização — e vários outros campos da ciência e da tecnologia — está intimamente associada aos métodos numéricos. A menos de raras exceções, a busca real de soluções analíticas deve ser implementada por meios numéricos, aproveitando a abundância e custo cada vez menor dos recursos computacionais.

2.4.1 Raízes de funções

Dada uma função escalar f as suas raízes, ou zeros, são as soluções da equação $f(x) = 0$. Em alguns casos, como por exemplo quando f é polinomial com grau ≤ 4 , a matemática oferece procedimentos sólidos e exatos para o cálculo das raízes, mas é comum encontrar situações onde estas soluções analíticas se tornam muito trabalhosas, ou mesmo impossíveis.

A busca de raízes é útil em otimização porque permite encontrar os pontos estacionários de funções, e estes são os candidatos a minimizadores ou maximizadores, como já visto. Alguns problemas de otimização vetorial também

envolvem o cálculo de raízes. Nestas notas veremos alguns métodos numéricos utilizáveis quando a função pesquisada é suficientemente suave.

Método da bisseção

A idéia é simples e intuitiva: é dado um intervalo inicial onde garantidamente existe uma raiz, como na figura 2.8. Dividimos este intervalo em duas partes iguais, com auxílio de seu ponto médio, e verificamos em qual das duas metades a raiz permanece. E assim procede o método, gerando intervalos cada vez menores e que sempre contém a raiz.

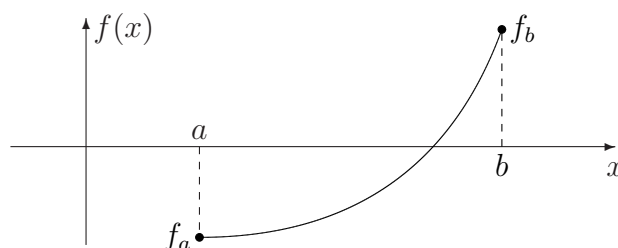


Figura 2.8: Intervalo contendo uma raiz

Como saber com certeza se em um dado intervalo existe uma raiz? Um critério simples, para o qual é necessária a continuidade de f , é calcular $f(a) = f_a$ e $f(b) = f_b$. Se $f_a f_b < 0$ então uma raiz de f certamente está contida no intervalo $[a, b]$. Na realidade este critério garante a existência de um número ímpar de raízes de f no intervalo. O método convergirá para uma delas.

Algoritmo 2.4.1 (Método da Bisseção)

- Dados:**
- $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave, ($\geq C^0$)
 - $I_0 = [a, b] \subset \mathbb{R}$, intervalo com $f_a f_b < 0$
 - $\delta \in \mathbb{R}^+$, tolerância

Meta: Encontrar um intervalo \bar{I} suficientemente pequeno contendo uma raiz de f .

Passo $i, i = 1, 2, \dots$

1. $[a, b] = I_{i-1}$ intervalo inicial
2. $c = a + (b - a)/2$ bisseção do intervalo
3. $f_a = f(a), f_b = f(b), f_c = f(c)$ cálculo da função

- | | |
|--|---------------------------|
| 4. $f_a f_c < 0$ | <i>raiz na 1.a metade</i> |
| (a) $b = c$ | <i>novo limite</i> |
| (b) $I_i = [a \ b]$ | <i>e vai para 6.</i> |
| 5. $f_a f_c > 0$ | <i>raiz na 2.a metade</i> |
| (a) $a = c$ | <i>novo limite</i> |
| (b) $I_i = [a \ b]$ | <i>novo intervalo</i> |
| 6. $(b - a) > \delta$ | <i>repete o passo</i> |
| 7. $(b - a) < \delta \implies \bar{I} = I_i$ | <i>FIM</i> |

Em cada passo a largura do intervalo é reduzida à metade, e assim, ao final do k -ésimo passo teremos um intervalo com amplitude L_k

$$L_k = L_0 2^{-k} = (b - a) 2^{-k}$$

É fácil calcular o número de iterações necessárias para que a tolerância desejada seja atingida:

$$L_k < \delta \quad \iff \quad k > \log_2 \frac{b - a}{\delta}$$

Este método converge sempre, e é razoavelmente rápido. Pode-se pensar em esquemas para acelerar seu comportamento, como por exemplo dividir o intervalo em 3 (ou mais) partes iguais.

Enquadramento Inicial

O resultado de cada passo do algoritmo é um intervalo que enquadra a raiz: $x^* \in I_k$. O intervalo inicial I_0 também precisa enquadrá-la, como escolhê-lo? Pode-se pensar em um procedimento do tipo:

- fixamos um ponto $a \in \mathbb{R}$ e um passo $0 < \Delta_i \in \mathbb{R}$
- calculamos $b = a + \Delta_i$
- $f_a f_b < 0 \rightarrow I_0 = [a \ b] \rightarrow \text{FIM}$
- $f_a f_b > 0$ aumentamos Δ_i e recomeçamos

Qualquer conhecimento prévio do usuário sobre f ajudará.

Método de Newton

A base do método anterior é uma seqüência de intervalos cada vez menores e que sempre enquadram a solução x^* . A idéia agora é gerar uma seqüência de pontos cada vez mais próximos da raiz procurada x^* . Dado um ponto, como obter um outro ponto melhor? Uma tática muito usada é a de escolher um substituto de f , ou seja, uma função g que seja próxima de f no ponto em consideração e cuja raiz seja fácil de obter. Em certas condições esta raiz substituta está mais próxima de x^* do que o ponto inicial.

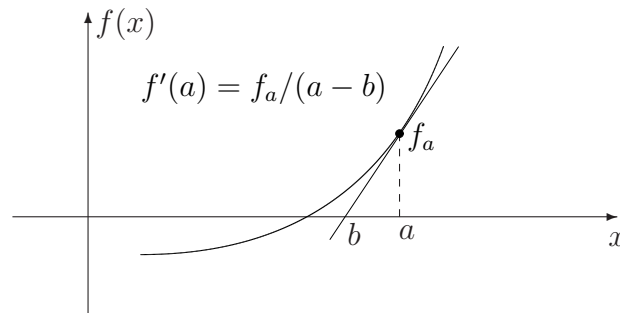


Figura 2.9: Base do método de Newton

A figura 2.9 ilustra a base do método. A tangente a uma curva, em um dado ponto é, possivelmente, o substituto em que primeiro se pensa, e será utilizada neste procedimento.

Algoritmo 2.4.2 (Método de Newton)

- Dados:**
- $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave, ($\geq C^1$)
 - $f' : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, sua derivada
 - $x_0 \in \mathbb{R}$, palpite inicial
 - $\delta \in \mathbb{R}^+$, tolerância

Meta: Encontrar x_r suficientemente próximo de uma raiz de f .

Passo $i, i = 1, 2 \dots$

1. $a = x_{i-1}$ ponto inicial
2. $f_a = f(a), f'_a = f'(a)$ cálculos
3. $b = a - f_a / f'_a$ novo ponto
4. $x_i = b$ atualiza o ponto
5. $(b - a) > \delta \implies$ repete o passo

$$6. (b - a) < \delta \implies x_r = b$$

FIM

Partimos de um palpite inicial x_0 , e para determinar o próximo ponto usamos um substituto de f , a sua tangente em x_0 . Quando o inicializador x_0 é bem escolhido (isto, em geral, significa que x_0 está próximo da solução x^*) a convergência é rápida, com índice quadrático. Escolhas menos felizes de x_0 podem acarretar problemas, ou mesmo impossibilidade de convergência. Uma escolha particularmente problemática para x_0 é a de um ponto estacionário, onde $f'(x_0) = 0$ e o algoritmo é incapaz de partir. De modo geral, se a derivada em uma iteração qualquer é pequena — $f'(x_i) \approx 0$ — haverá problemas na convergência do algoritmo. Os leitores são convidados a analisar os efeitos dos inicializadores a , b e c na figura 2.10.

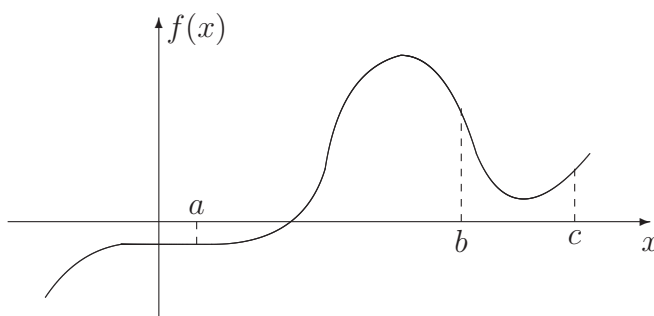


Figura 2.10: Que dizer destes inicializadores?

Isto mostra que a eficiência do método é muito sensível à escolha do inicializador x_0 e assim, qualquer experiência prévia do usuário com respeito à sua localização pode ser útil. Em vários outros métodos numéricos, aplicados ou não à Otimização, a escolha de inicializadores é um passo importante, muitas vezes decisivo para o sucesso da busca.

Outro aspecto importante é o critério de parada. Como saber se o ponto gerado em uma dada iteração está suficientemente próximo da solução desconhecida x^* , ou seja, quando finalizar o processo? Como o objetivo procurado é uma raiz da função f , é possível monitorar, a cada passo i , o valor de $f(x_i)$ e parar quando este valor for considerado satisfatório. Uma estratégia de parada diferente foi usada no algoritmo acima. Para explicá-la considere-se o seguinte fato: quando dois pontos sucessivos estiverem suficientemente próximos entre si então eles estão igualmente próximos da solução. A validade desta afirmação pode ser demonstrada com rigor. Em símbolos:

$$\text{Se } |x_k - x_{k-1}| < \delta \quad \text{então} \quad x_k = x_r \approx x^*$$

Um claro inconveniente do método de Newton, do modo como foi apresentado, é a necessidade de se conhecer a expressão analítica para a derivada da função f . Uma maneira de evitar este incômodo é fazer o cálculo numérico das derivadas. Este cálculo é feito escolhendo dois pontos próximos do ponto considerado que determinarão uma secante à curva, a qual, sob certas condições, pode ser considerada como uma aproximação da tangente. O uso das secantes é importante a ponto de merecer um método próprio.

Método da secante

A filosofia básica é a mesma, usamos um substituto para f , cuja raiz seja de fácil determinação. Neste caso o substituto é ainda uma função linear, a secante e não mais a tangente.

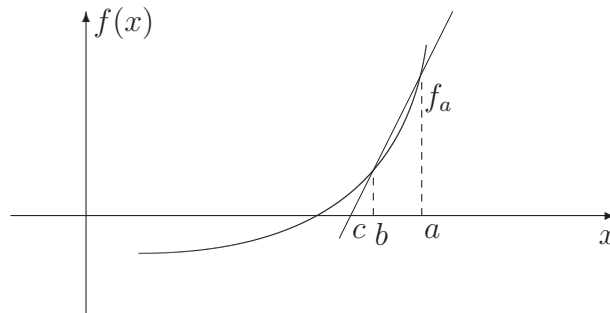


Figura 2.11: Usando uma secante como substituto

Dado o passo inicial, a primeira providência é determinar um outro ponto por onde também passará a secante. Em geral isto é feito por meio de um avanço ε : $b = a + \varepsilon$. Na situação ilustrada na figura 2.11 seria necessário um avanço negativo para obter b . Um raciocínio geométrico elementar, baseado em semelhança de triângulos, leva a

$$\frac{a - c}{b - c} = \frac{f_a}{f_b} \implies a - c = (b - c) \frac{f_a}{f_b} \implies c = b - \frac{a - b}{f_a - f_b} f_b$$

Algoritmo 2.4.3 (Método da Secante)

- Dados:**
- $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave, ($\geq \mathcal{C}^1$)
 - $x_0 \in \mathbb{R}$, palpite inicial
 - $\varepsilon_0 \in \mathbb{R}$, avanço inicial
 - $\delta \in \mathbb{R}^+$, tolerância

Meta: Encontrar x_r suficientemente próximo de uma raiz de f .

Passo $i, i = 1, 2 \dots$

- | | |
|--|-------------------------------|
| 1. $a = x_{i-1}$ | <i>ponto inicial</i> |
| 2. $b = a + \varepsilon_i$ | <i>outro ponto da secante</i> |
| 3. $c = b - f_b(a - b)/(f_a - f_b)$ | <i>raiz da secante</i> |
| 4. $x_i = c$ | <i>atualiza o ponto</i> |
| 5. $(c - a) > \delta \implies$ | <i>repete o passo</i> |
| 6. $(c - a) < \delta \implies c = x_r$ | <i>FIM</i> |

Os comentários feitos ao método de Newton se aplicam aqui, com relação à convergência, etc. A novidade é a presença do parâmetro de controle ε_i . Um valor constante em todos os passos simplifica o algoritmo, mas requer um valor pequeno para o avanço, para não nos afastarmos muito da região de interesse. Como, por outro lado, valores muito pequenos para ε podem trazer problemas numéricos, ou de lentidão, o ideal é um esquema onde ε é escolhido passo a passo. Quando o avanço inicial ε_0 é grande pode-se ter o ponto b tal que $f_a f_b < 0$, ou seja, o intervalo $[a, b]$ enquadra a raiz.

Método da Regula Falsa

É novamente um método de intervalos, onde o passo posterior é determinado não mais por biseção mas sim por uma secante. É também chamado de interpolação linear.

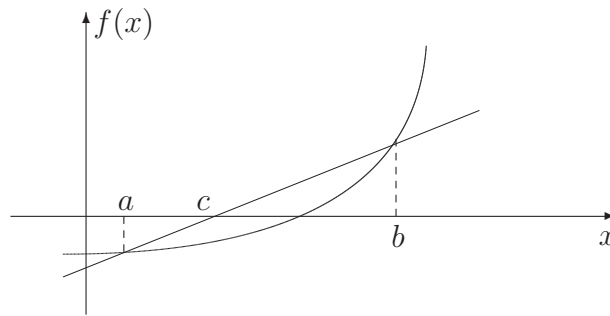


Figura 2.12: Regula Falsa ou interpolação linear

A estrutura básica do algoritmo da biseção pode ser usada, apenas muda o cálculo do ponto c

$$\frac{c - a}{-f_a} = \frac{b - c}{f_b} \implies cf_b - af_b = cf_a - bf_a \implies c = \frac{af_b - bf_a}{f_b - f_a}$$

Temos convergência assegurada, mas as coisas podem ser lentas.

Interpolações de ordem superior

O princípio básico dos métodos de Newton e da secante é o mesmo: um substituto de f permite calcular, a cada passo, uma aproximação melhor para a raiz. A facilidade de se obter raízes de funções lineares garante a popularidade destes métodos, mas podemos pensar em aproximações mais elaboradas que podem melhorar as características de convergência dos processos.

Se, por exemplo, dado um ponto inicial a geramos dois outros pontos b e c próximos podemos encontrar uma parábola quadrática $\alpha x^2 + \beta x + \gamma$ para substituir f . Além desta curva de segundo grau pode-se pensar em outras funções polinomiais, racionais, ou de qualquer tipo. A complexidade dos algoritmos aumentaria, mas os ganhos em velocidade podem ser significativos.

Exemplo 2.4.1 *Escrever programas, em linguagem MATLAB, para implementar os algoritmos da bisseção, Newton, secante e regra falsa. Encontrar as raízes que determinam os mínimos de todos os exemplos já vistos.*

2.5 Mínimos de funções escalares

Trataremos agora de procedimentos numéricos que permitem a obtenção direta dos mínimos. Estaremos restritos a funções univariáveis suaves, como anteriormente. Assim como no caso de raízes de funções, os métodos de minimização numérica direta podem pertencer a duas famílias básicas.

Métodos de intervalos enquadantes. Também chamados de métodos de **redução de intervalos**. Dado um intervalo $I_0 \subset \mathbb{R}$ que enquadra a solução (raiz ou mínimo), ou seja, $x^* \in I_0$, encontrar uma família de intervalos $\{I_j\}$ tais que $I_j \subset I_{j-1}$ e $x^* \in I_j$ para $j = 1, 2, \dots$. A bisseção e a regra falsa geram intervalos assim.

Métodos de pontos convergentes. Dado um palpite inicial $x_0 \in \mathbb{R}$, encontrar uma seqüência de pontos $\{x_k\}$, para $k = 1, 2, \dots$, tal que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$$

Além destas classes básicas, é preciso mencionar o conceito de **método garantido**. Uma idéia preliminar é a de método **seguro** ou **confiável**. Um método é seguro quando sua aplicação leva sempre a um resultado. Conforme já visto nestas notas, o método da bisseção é seguro, mas o de Newton não, por depender criticamente de x_0 e da particular função f .

Alguns outros métodos, como por exemplo os de interpolações, podem ser extremamente rápidos quando f é “boazinha” e x_0 é bem escolhido. Um

método é chamado de garantido quando é rápido para funções camaradas, e seguro em caso contrário. É claro que é exatamente este o objetivo de qualquer procedimento numérico!

2.5.1 Funções unimodais e enquadramento

Os métodos de intervalos para a obtenção de raízes se baseiam no conceito de “enquadrar” a solução: cada intervalo deve conter uma única raiz, ou um número ímpar delas. Precisamos de algo semelhante na busca de mínimos, e para isto entra em cena o conceito de **unimodalidade**: uma função **unimodal** em um dado intervalo possuirá um único mínimo nesse intervalo.

Definição 2.5.1 *Uma dada $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é unimodal no intervalo $[a, b]$ quando existe um único $x^* \in [a, b]$ tal que para quaisquer $x_1, x_2 \in [a, b]$ com $x_1 < x_2$ temos*

$$\begin{aligned} x_2 < x^* &\implies f(x_1) > f(x_2) \\ x_1 > x^* &\implies f(x_1) < f(x_2) \end{aligned}$$

Em outras palavras: a função decresce monotonicamente quando nos aproximamos de x^* pela esquerda, partindo de a , e cresce monotonicamente quando nos afastamos pela direita, em direção a b . É interessante notar que mesmo funções não suaves e não convexas podem ser unimodais, como na curva da esquerda da figura 2.13. Estamos interessados em funções suaves, e se possível convexas, então é bom armazenar na memória a curva da direita da mesma figura. O leitor deve se convencer de que o conceito de unimodalidade implica na existência de um único mínimo no intervalo.

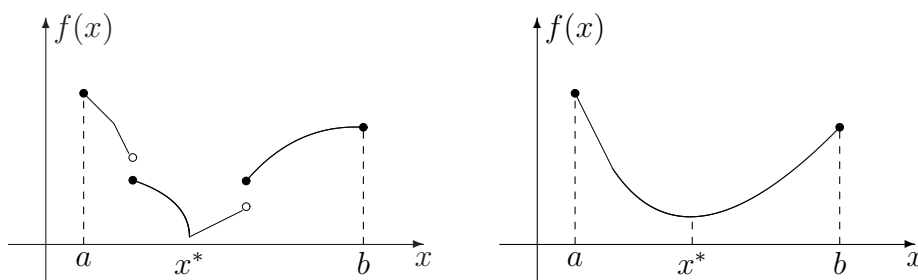


Figura 2.13: Exemplos de funções unimodais

Se f é unimodal em um intervalo $[a, b] = I_k \subset \mathbb{R}$ então este intervalo enquadra um mínimo, o único mínimo, como devem fazer todos os intervalos de interesse nos métodos numéricos. Neste ponto surgem dois problemas: em primeiro lugar, como escolher, dentro de um intervalo enquadrante, um

outro intervalo enquadrante? Isto constitui a base dos métodos numéricos, e será visto mais à frente. Mais urgente e mais geral é: como escolher intervalos enquadrantes? como verificar se um dado intervalo é enquadrante? A unimodalidade de um intervalo é suficiente para que ele seja enquadrante, como já visto, mas as condições de definição 2.5.1 são de aplicação incômoda, pois o conhecimento de x^* se faz necessário. Para contornar este impasse e simplificar as coisas, o chamado **Critério dos 3 pontos** entra em cena.

Propriedade 2.5.1 *Sejam $x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}$ tais que $x_1 < x_2 < x_3$ e uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ suave. Se $f(x_1) \geq f(x_2) < f(x_3)$ então o intervalo $[x_1, x_3]$ enquadra um mínimo.*

A demonstração desta propriedade será omitida, ela é baseada em continuidade. É importante notar que o resultado continua válido se $x_1 > x_2 > x_3$, ou seja, o ponto x_2 deve estar entre os outros dois. É também importante frizar que este critério dos 3 pontos garante intervalos enquadrantes, mas não unimodais. Em outras palavras, pode haver mais de um mínimo em um intervalo onde a condição é satisfeita, como se vê na figura 2.14.

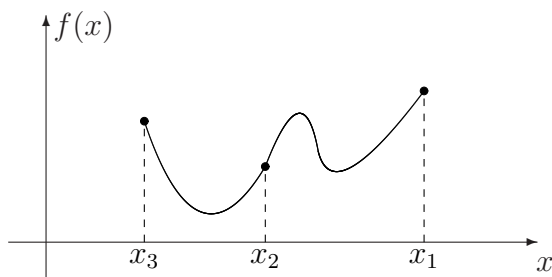


Figura 2.14: Intervalo não unimodal que satisfaz os 3 pontos

O critério dos 3 pontos é, claramente, menos poderoso do que a unimodalidade, mas sua aplicação é muito simples e isto compensa a possibilidade de enquadramento de mais de um mínimo. O critério dos 3 pontos é o usado, em geral, nos procedimentos numéricos. Antes de um detalhamento maior, um problema prático importante precisa ser resolvido, o problema de encontrar um intervalo enquadrante inicial.

2.5.2 Enquadramento inicial

Qualquer conhecimento prévio sobre o problema, que permita estimar um intervalo onde se deve procurar o mínimo, será saudado com entusiasmo. Se nada disso houver, deve-se lançar mão de um procedimento numérico extra para determinar um intervalo que contenha a solução. A idéia é procurar

x_1, x_2 e x_3 que satisfaçam o critério dos 3 pontos e possam servir como intervalo enquadrante inicial. Dados inicialmente o ponto x_1 e um avanço Δ calculamos $x_2 = x_1 + \Delta$. Se $f_2 \leq f_1$ isto significa que estamos andando no sentido correto e devemos continuar neste sentido até encontrar x_3 tal que $f_3 > f_2$. Quando o resultado da primeira verificação é $f_2 > f_1$ a função está crescendo e devemos inverter o sentido da busca (passo 4 abaixo).

Algoritmo 2.5.1 (Enquadramento Inicial por 3 pontos)

- Dados:**
- $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave
 - $x_1 \in \mathbb{R}$, ponto inicial
 - $\Delta \in \mathbb{R}$, avanço fixo
 - $\gamma \geq 1$ parâmetro de expansão

Objetivo: Encontrar $[a, b] \in \mathbb{R}$ que enquadre um mínimo de f

Passo $i, i = 1, 2, \dots$

1. $x_2 = x_1 + \Delta$
2. $f_1 = f(x_1), f_2 = f(x_2)$
3. $f_2 \leq f_1 \implies$ passo 5 *continua avançando*
4. $a = x_1, b = x_2, x_1 = b, x_2 = a, \Delta = -\Delta$ *inversão de sentido*
5. $x_3 = x_2 + \gamma\Delta, f_3 = f(x_3)$ *continua avançando*
6. $f_3 > f_2 \implies$ passo 8 *tudo bem*
7. $x_1 = x_2, x_2 = x_3 \implies$ passo 5 *recomeça de x_2*
8. $a = x_1, b = x_3 \implies$ FIM

O fator de expansão $\gamma = 1$ significa que todos os avanços são iguais a Δ : $x_3 = x_2 + \Delta = x_1 + \Delta + \Delta$. Para acelerar o procedimento usa-se normalmente $\gamma = 2$ ou $\gamma = 1.618$, a razão áurea.

Exemplo 2.5.1 Aplicar o método acima para $f(x) = -x^3 + 6x^2 + 15x - 5$. Usando $x_1 = 0$ e $\Delta = 1$ temos $x_2 = 1, f_1 = -5$ e $f_2 = 15 > f_1$. Invertendo o sentido da busca: $x_1 = 1, \Delta = -1, x_2 = 0, f_1 = 15$ e $f_2 = -5 \leq f_1$ e estamos no sentido correto. Entra agora o fator de expansão e a procura de x_3 . Para vocês, leitores.

A procura de bons inicializadores, pontos ou intervalos iniciais, é algo sempre presente em otimização. Em geral esta é uma etapa delicada e capaz de influenciar até mesmo o sucesso final do algoritmo, vide Newton. Em muitas aplicações, o fenômeno estudado é conhecido com profundidade suficiente para se ter uma noção precisa dos limites onde se espera o extremo. Isto é precioso, pois evita a aplicação de algoritmos inicializadores e já se pode ir direto aos métodos minimizadores. A eles então!

2.5.3 Redução de intervalos

Sendo I_k , com largura L_k , um intervalo enquadrante (ou por ser unimodal, ou pelo teste dos 3 pontos), como encontrar um intervalo I_{k+1} , menor, com largura L_{k+1} , que ainda enquadre o mínimo, ou seja, $I_{k+1} \subset I_k$ e $L_{k+1} < L_k$? O **CrITÉrio dos 2 Pontos** cuida destes aspectos: dois pontos internos são escolhidos no intervalo inicial, e um rápido teste permite selecionar um novo intervalo. A figura 2.15 mostra o processo. Tomando os pontos $x_1, x_2 \in [a, b]$ com $x_1 < x_2$ calculamos $f_1 = f(x_1)$ e $f_2 = f(x_2)$ e aplicamos o critério

$$\begin{aligned} f_1 = f_2 &\longrightarrow x^* \in [x_1, x_2] \subset [a, b] \\ f_1 > f_2 &\longrightarrow x^* \in [x_1, b] \subset [a, b] \\ f_1 < f_2 &\longrightarrow x^* \in [a, x_2] \subset [a, b] \end{aligned}$$

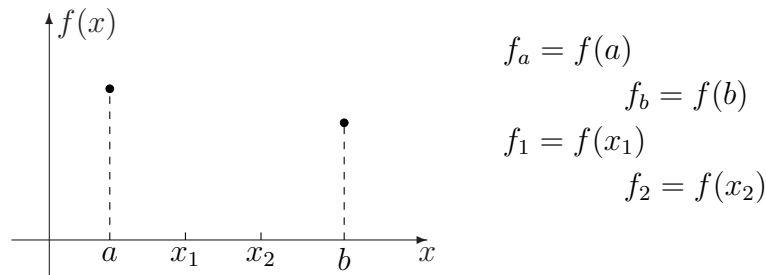
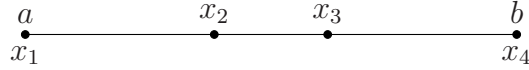


Figura 2.15: Diminuindo a largura dos intervalos enquadrantes

Este teste sempre gera um intervalo enquadrante contido no anterior, e uma vez definidas regras para a obtenção dos pontos interiores x_1 e x_2 teremos um método numérico de busca direta do ótimo. Quando um intervalo envolvido nesse processo é enquadrante mas não unimodal pode haver problemas. É fácil perceber isso, pois nesse caso o intervalo pode conter mais de um mínimo, e o processo de redução pode eliminar coisas que não deveriam ser eliminadas! Apesar destes possíveis perigos, os métodos numéricos, em geral, empregam estas técnicas de redução de largura, implicitamente confiando que os intervalos sejam unimodais.

2.6 Método de Fibonacci

Dado um intervalo enquadrante genérico $I_k = [a \ b]$, onde a função f é unimodal, escolhemos dois pontos internos simétricos com relação ao centro. Chamando $x_1 = a$ e $x_4 = b$ os pontos escolhidos serão x_2 e x_3 .



A localização exata desses pontos internos x_2 e x_3 , a partir do segundo intervalo, é feita de maneira automática, como se verá em breve. Resta assim um detalhe importante, a primeira escolha. Dado um intervalo inicial $I_1 = [a \ b] = [x_1 \ x_4]$, com largura L_1 , como determinar seus pontos interiores? O método de Fibonacci necessita de um **fator de redução inicial**, um real α_1 , com $0.5 < \alpha_1 < 0.7$. Mais à frente veremos como encontrar tal fator, e o porque desses limites. A largura do segundo intervalo é obtida a partir de

$$L_2 = \alpha_1 L_1 \quad \text{donde} \quad 0.5L_1 < L_2 < 0.7L_1$$

Como os pontos internos adicionais são eqüidistantes do ponto médio, é claro que $x_3 - x_1 = x_4 - x_2$, donde, conhecida a nova largura, eles podem ser obtidos facilmente, de uma maneira geométrica

$$x_3 \quad \text{tal que} \quad x_3 - x_1 = L_2 \quad \text{e} \quad x_2 \quad \text{tal que} \quad x_4 - x_2 = L_2$$

ou então de um modo algébrico:

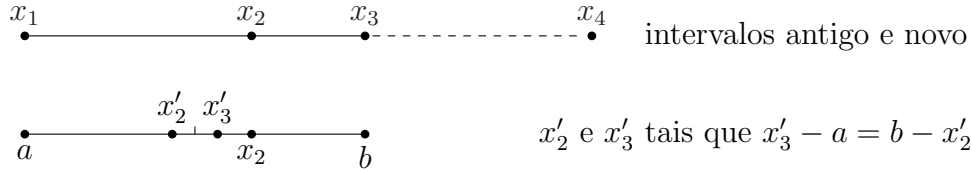
$$x_2 = \alpha_1 x_1 + (1 - \alpha_1)x_4 \quad \quad x_3 = (1 - \alpha_1)x_1 + \alpha_1 x_4$$

A primeira redução depende deste parâmetro α_1 ainda não discutido. A redução dos intervalos I_k para $k > 1$ é efetuada como acima, de maneira algébrica ou geométrica, desde que se conheça o fator de redução α_k .

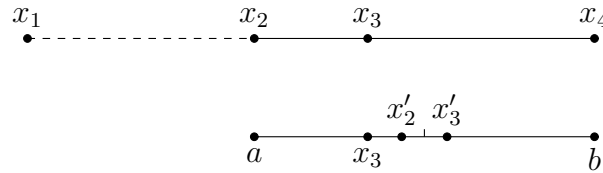
Para explicar o mecanismo geral de redução de intervalos, seja novamente o intervalo enquadrante genérico $I_k = [a \ b] = [x_1 \ x_4]$ visualizado acima, onde f é unimodal e os pontos internos simétricos com relação ao centro são x_2 e x_3 . Para determinar o próximo intervalo enquadrante, I_{k+1} , usa-se o Critério dos 2 Pontos. Se $f_2 < f_3$ então $[x_1 \ x_3]$ é o novo intervalo, e se $f_2 > f_3$ então retemos $[x_2 \ x_4]$. No caso de igualdade entre f_2 e f_3 a escolha é indiferente, ambos os intervalos serão enquadrantes. A unimodalidade de f em I_k valida este procedimento; se o intervalo I_k for enquadrante, com garantia dada pelo critério dos 3 pontos, mas não unimodal poderá haver problemas.

Vamos supor que o primeiro caso ocorre, e o novo intervalo é o da esquerda: $I_{k+1} = [x_1 \ x_3]$. Podemos rebatizá-lo de $[a \ b]$ e reiniciar o processo

achando dois pontos internos x'_2 e x'_3 equidistantes do centro. É útil notar que se o ponto x_2 “antigo” puder ser aproveitado isto poupará trabalho.



Temos novamente quatro pontos, em um intervalo menor, e o processo pode continuar. Se o segundo caso ocorre e o intervalo da direita é o eleito, podemos rebatizá-lo $I_{k+1} = [x_2 \ x_4] = [a \ b]$ e recomeçar com novos pontos interiores (se o “antigo” x_3 puder ser aproveitado, melhor):



A descrição acima é bastante geral. E neste ponto entra uma particularidade importante do método de Fibonacci: os pontos “antigos” são sempre aproveitados! Isto significa que $x'_3 = x_2$ nos intervalos da esquerda, ou então, nos da direita, $x'_2 = x_3$. Para uma visão mais detalhada suporemos, sem perda de generalidade, que os intervalos enquadrantes reduzidos são sempre os da esquerda. Com isto temos

$$I_k = [x_1 \ x_4] \quad \text{com largura} \quad L_k = x_4 - x_1$$

$$I_{k+1} = [x_1 \ x_3] \quad \text{com largura} \quad L_{k+1} = x_3 - x_1$$

Na próxima redução, supondo ainda que o intervalo da esquerda é o escolhido, teremos $I_{k+2} = [x_1 \ x'_3]$. Mas os pontos antigos são aproveitados, então $x'_3 = x_2$ e podemos escrever

$$I_{k+2} = [x_1 \ x_2] \quad \text{com largura} \quad L_{k+2} = x_2 - x_1$$

Como x_2 e x_3 são equidistantes do centro do segmento é fácil acompanhar o desenvolvimento abaixo

$$\begin{aligned} L_{k+2} &= x_2 - x_1 \\ &= x_4 - x_3 \\ &= x_4 - x_1 + x_1 - x_3 \\ &= L_k - L_{k+1} \end{aligned}$$

Este é um aspecto marcante do método de Fibonacci: a largura de um intervalo qualquer da sequência é obtida subtraindo as larguras dos dois intervalos imediatamente anteriores. E isto acontecerá mesmo se intervalos da direita forem eventualmente escolhidos nas seleções.

A mecânica básica de geração de intervalos do método está exposta, mas vários detalhes ainda precisam ser explicados. Como encontrar α_1 , o fator de redução inicial? Como determinar a largura do k -ésimo intervalo? Quantas iterações são necessárias para que os intervalos sejam menores que uma dada tolerância? Para facilitar a análise vamos reescrever as relações acima.

$$\begin{aligned} L_1 &= L_2 + L_3 \\ L_2 &= L_3 + L_4 \\ &\vdots \\ L_j &= L_{j+1} + L_{j+2} \\ &\vdots \\ L_{k-2} &= L_{k-1} + L_k \\ L_{k-1} &= L_k + L_{k+1} \\ L_k &= \dots \end{aligned}$$

A sequência anterior pode ser reescrita, na ordem inversa.

$$\begin{aligned} &L_k \\ L_{k-1} &= L_{k+1} + L_k \\ L_{k-2} &= L_{k-1} + L_k \\ &\vdots \\ L_2 &= L_3 + L_4 \\ L_1 &= L_2 + L_3 \end{aligned}$$

Chamando $F_i = L_{k-i+1}$ teremos outra versão para a sequência acima, com a numeração dos índices começando no topo da lista e não abaixo

$$\begin{aligned} F_1 &= L_k \\ F_2 &= L_{k-1} \\ F_3 &= L_{k-2} = F_1 + F_2 \\ &\vdots \\ F_i &= F_{i-2} + F_{i-1} \\ &\vdots \\ F_k &= F_{k-2} + F_{k-1} \end{aligned}$$

Mas isto é uma sequência de Fibonacci! Fibo quem, o que é isto? Hora de recordar, ao passado então.

2.6.1 Números de Fibonacci

Leonardo de Pisa viveu na Itália entre os anos 1180–1250. Filho de um comerciante que possuía negócios no mundo árabe, é muito provável que ele tenha sido educado lá, e lá tenha aprendido sobre o que hoje se conhece como algarismos indo-arábicos. O fato é que ele foi um dos principais deflagradores de uma das maiores revoluções da história da Matemática Ocidental ao lançar a obra **Liber Abaci** (Livro dos Ábacos), onde descreve os novos conceitos e muitas de suas consequências.

Apesar do título, este livro não é sobre ábacos, é um tratado bastante completo sobre métodos e problemas algébricos em que o uso de numerais indo-arábicos é fortemente recomendado. O *Liber Abaci* apresenta partes pouco interessantes para o leitor moderno, mas muito úteis na época, sobre como resolver certas transações comerciais usando um complicado sistema de frações para calcular o câmbio entre diferentes moedas. Apesar destas passagens, alguns dos problemas comentados são tão estimulantes que foram — e continuam sendo — usados por autores posteriores. Eis um destes problemas, provavelmente adaptado de um papiro egípcio arcaico.

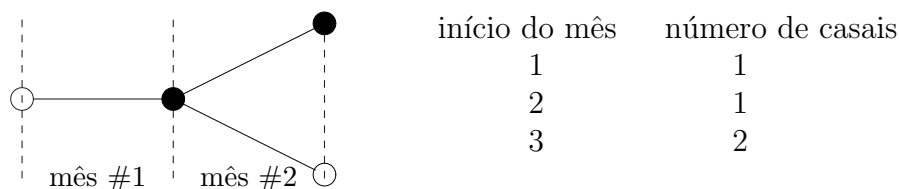
Sete velhas foram a Roma; cada uma tinha sete mulas; cada mula carregava sete sacos; cada saco continha sete pães; em cada pão havia sete facas e cada faca estava dentro de sete bainhas.

Era isto. O que mesmo se pedia, senhor Leonardo, o número total de bainhas? Este problema pode parecer meio bobo e elementar hoje em dia, mas é preciso lembrar que nos tempos de Leonardo (e, mais ainda, nos tempos do antigo Egito) não havia computadores para nos auxiliar nas contas. Também não havia calculadoras e nem sequer régua de cálculo. Não, tábuas de logaritmo ainda não tinham sido inventadas. Pessoal, nem Aritmética existia (pelo menos na Europa), as quatro operações básicas, as tabuadas nada disso era conhecido. Quando muito havia ábacos, e mesmo assim para os poucos que os sabiam manejar. O problema das sete velhas é meio bobo, basta calcular 7^6 e hoje tiramos isso de letra, mas naquele tempo ... O problema do *Liber Abaci* que mais inspirou os futuros matemáticos foi o seguinte:

Quantos casais de coelhos são produzidos em um ano, começando com apenas um casal, se em cada mês um casal gera um novo casal que se torna produtivo depois de um mês?

Além desta obra Leonardo também escreveu outras, como por exemplo **Flos**, **Liber Quadratorum** e **Practica Geometriae**, todas muita avançadas para a época em que viveu, mas suficientes para que fosse considerado pela posteridade como o matemático mais original e capaz do mundo cristão medieval. Como seu pai fosse chamado de Bonaccio, Leonardo de Pisa era conhecido como filho de Bonaccio ou, em italiano, Figlio Bonaccio ou simplesmente Fibonacci ou Fibonacci.

Chega de História, é hora de dar uma olhada nesses coelhos. O primeiro mês de cada casal é o mês de maturação, e o casal apenas sobrevive. Depois deste período o casal já é capaz de procriar, e ao final do segundo mês ele gerou outro casal, e permanece vivo. Simbolizando um casal jovem por uma circunferência e um casal maduro por um círculo temos a seguinte explicação gráfica para o processo



Agora é fácil continuar, o mecanismo básico foi descoberto, casal imaturo apenas sobrevive, casal maduro sobrevive e gera outro casal. Ou então: de cada circunferência sai apenas uma seta, e de cada círculo saem duas. Completando o esquema para mais alguns meses leva ao diagrama tipo árvore ilustrado na figura 2.16.

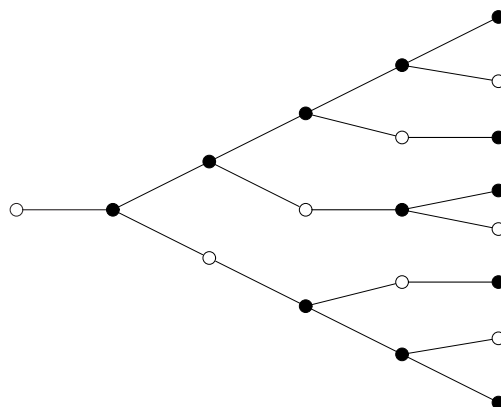


Figura 2.16: Visualizando os números de Fibonacci

O diagrama da figura 2.16 facilita o estabelecimento dos famosos números

de Fibonacci:

1 1 2 3 5 8 13 21 34 55 ...

A partir do terceiro, cada um destes números pode ser obtido somando os dois números imediatamente precedentes. Em uma criação real de coelhos as coisas podem ser diferentes, pois cada casal maduro normalmente gera mais de um casal de descendentes por período. Em compensação vários elementos são perdidos e não amadurecem ou procriam. Deste modo pode-se dizer que os números de Fibonacci ajudam a entender o mecanismo de crescimento de colônias de animais, mas a importância destes números extrapola estas possíveis aplicações.

Equação de Fibonacci

Para um estudo mais detalhado dos números de Fibonacci, seja a relação abaixo.

$$\begin{cases} f(i+2) = f(i+1) + f(i) & i = 0, 1, 2, \dots \\ f(0) = f_0, f(1) = f_1 \end{cases}$$

É fácil perceber a lei de formação por trás desta equação de recorrências: cada elemento é obtido somando dois elementos precedentes, a própria idéia dos números de Fibonacci. Os dois primeiros elementos, as condições iniciais, são dados do problema. Se $f_0 = f_1 = 0$ resulta a seqüência nula 0 0 0 ... Se $f_0 = f_1 = 1$ teremos 1 1 2 3 5 8 ..., os números de Fibonacci. Se $f_0 = 0$ e $f_1 = 1$ teremos 0 1 1 2 3 5 8 ..., a seqüência de Fibonacci deslocada para a direita. Os leitores são convidados a testar os efeitos de outras condições iniciais.

Para calcular $f(k)$, o valor da seqüência de Fibonacci no inteiro k , basta aplicar a definição $k-2$ vezes, mas esta tarefa pode ser muito pesada para valores altos de k . Seria interessante uma fórmula de aplicação direta, que fornecesse $f(k)$ para qualquer valor de k , sem a necessidade das $k-2$ iterações. Esta fórmula existe e pode ser encontrada, por exemplo, aplicando a teoria das transformadas Z na relação básica. O resultado geral é

$$f(k) = \frac{f_0\sqrt{5} + 2f_1 - f_0}{2\sqrt{5}} \left(\frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^k + \frac{f_0\sqrt{5} - 2f_1 + f_0}{2\sqrt{5}} \left(\frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^k$$

Uma expressão para a seqüência de Fibonacci tradicional é obtida quando $f_0 = f_1 = 1$

$$f(k) = \frac{1 + \sqrt{5}}{2\sqrt{5}} \left(\frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^k - \frac{1 - \sqrt{5}}{2\sqrt{5}} \left(\frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^k$$

Uma simplificação trivial leva à conhecida fórmula de Binet para o k -ésimo número de Fibonacci:

$$f(k) = \frac{\sqrt{5}}{5} \left[\left(\frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^{k+1} - \left(\frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^{k+1} \right] \quad (2.1)$$

Aplicando esta expressão para $k = 0, 1, 2 \dots$ são gerados os números de Fibonacci. Usando-a também se pode calcular a razão entre dois números de Fibonacci consecutivos, Após alguns algebrismos simples chega-se a

$$r(k) = \frac{f(k)}{f(k-1)} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \frac{1 - p^{k+1}}{1 - p^k} \quad \text{onde} \quad p = \frac{1 - \sqrt{5}}{1 + \sqrt{5}} \quad (2.2)$$

Mas $p \approx -0.3820$, logo $|p| < 1$, donde $|p^k|$ e $|p^{k+1}|$ tendem a 0 quando k cresce e assim a razão entre dois números de Fibonacci consecutivos e elevados tende a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} r(k) = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1.6180 \dots$$

Opa! Pode haver sinetas tocando para alguns leitores, pois este é um número conhecido. Mas isto fica para depois, já se faz tarde e é hora de interromper esta agradável revisão matemática e retornar aos métodos numéricos de otimização.

2.6.2 Método de Fibonacci (de novo)

Recordação das últimas seções: uma seqüência I_1, I_2, \dots, I_k de intervalos enquadantes era gerada, na qual, sendo L_i a largura do i -ésimo intervalo, tínhamos

$$\begin{aligned} L_1 &= L_2 + L_3 \\ L_2 &= L_3 + L_4 \\ &\vdots \\ L_{k-2} &= L_{k-1} + L_k \\ L_{k-1} &= L_k + L_{k+1} = 2L_k \\ L_k &= \text{suficientemente pequeno} \end{aligned}$$

Escrevendo esta seqüência na ordem inversa e rebatizando cada termo somos levados a

$$\begin{aligned} F_1 &= L_k \\ F_2 &= L_{k-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_3 &= F_2 + F_1 \\
&\vdots \\
F_{k-1} &= F_{k-2} + F_{k-3} \\
F_k &= F_{k-1} + F_{k-2}
\end{aligned}$$

Adicionando um termo falso $F_0 = L_k$ à seqüência acima obtemos uma seqüência onde cada termo é o produto de L_k , a largura final desejada, pelo número de Fibonacci correspondente:

$$L_k \quad L_k \quad 2L_k \quad 3L_k \quad 5L_k \quad 8L_k \quad \dots \quad f(k)L_k$$

Terreno conhecido, valeu a recordação, e notem bem que aqui não há coelhos! Várias perguntas já podem ser respondidas. Por exemplo, quantas reduções de intervalo são necessárias para que a largura final L_k seja menor que uma tolerância δ especificada? Fácil, basta olhar acima e perceber que o intervalo inicial — de largura L_1 conhecida — está associado ao último número de Fibonacci: $L_1 = f(k)L_k$ donde

$$L_k < \delta \iff \frac{L_1}{f(k)} < \delta \iff f(k) > \frac{L_1}{\delta} \iff k > k^*$$

A fórmula de Binet ensina a calcular $f(k)$, então estamos feitos. Bem, a rigor ainda não, pois na fórmula o k aparece como expoente, e estaremos realmente feitos apenas após determinarmos direitinho o valor de k^* .

Há um outro aspecto, importante, ainda inexplicado. Dado o intervalo inicial I_1 a determinação de I_2 depende do desconhecido fator de redução inicial α_1 . Eis como determiná-lo: conhecido o número de reduções de intervalo necessárias, a seqüência de Fibonacci está dimensionada, e com ela todos os intervalos do método. O intervalo I_1 tem largura $L_1 = f(k)L_k$ e a largura do segundo é $L_2 = f(k-1)L_k$. A fórmula para a razão de dois elementos consecutivos da seqüência de Fibonacci, equação (2.2) leva a

$$\alpha_1 = \frac{L_2}{L_1} = \frac{f(k-1)}{f(k)} = \frac{1}{r(k)} = \frac{2}{1 + \sqrt{5}} \frac{1 - p^k}{1 - p^{k+1}} \quad \text{onde} \quad p = \frac{1 - \sqrt{5}}{1 + \sqrt{5}}$$

Um estudo analítico, ou gráfico da variação de α_1 mostraria que $0.5 < \alpha_1 < 0.7$ para valores de k de interesse, o que justifica afirmação de segundo parágrafo da seção 2.6. Supondo que desejamos $n = 4$ reduções de intervalo, o que corresponde a $k = 5$, vem

$$\alpha_1 = \frac{L_2}{L_1} = \frac{2}{1 + \sqrt{5}} \frac{1 - p^5}{1 - p^6} = 0.625 = 5/8$$

Isto significa que $(x_3 - x_1) = (x_4 - x_2) = 5L_1/8$ e já sabemos tudo para prosseguir. É possível que em uma das reduções de intervalo os pontos internos x_2 e x_3 coincidam, impedindo o progresso do algoritmo. O exemplo acima leva a essa situação, verifiquem, leitores! O remédio para este tipo de mazela é espaçar lateralmente um dos pontos, com $x'_3 = x_3 + \delta$ onde δ deve ser bem escolhido. Hora de sistematizar as coisas, e para isso é bom fazer uma distinção. Se n é o número desejado de reduções de intervalo, a ele está associado o índice de Fibonacci $k = n + 1$, como já visto acima.

Algoritmo 2.6.1 (Método de Fibonacci)

- Dados:**
- $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave e unimodal em
 - $I_1 = [a \ b] \subset \mathbb{R}$, intervalo enquadrante inicial
 - $n \in \mathbb{Z} \neq$ desejado de reduções
 - $k \in \mathbb{Z}$ índice de Fibonacci ($= n + 1$)

Objetivo: Encontrar $I_n \subset I_1$ que enquadre um mínimo de f

Operações

1. $p = \frac{1-\sqrt{5}}{1+\sqrt{5}}; \alpha = \frac{2}{1+\sqrt{5}} \frac{1-p^k}{1-p^{k+1}}$
2. $i = 1$
3. $x_1 = a; x_4 = b; L_{ini} = b - a;$
4. $x_2 = \alpha x_1 + (1 - \alpha)x_4; f_2 = f(x_2)$
5. $x_3 = \alpha x_4 + (1 - \alpha)x_1; f_3 = f(x_3)$
6. $f_2 < f_3$
 - (a) $a = x_1; b = x_3; L_{fin} = b - a;$
 - (b) $i = n \rightarrow I_n = [a \ b] \rightarrow FIM$
 - (c) $\alpha = (L_{ini} - L_{fin})/L_{fin}; i = i + 1$
 - (d) volta a 3.
7. $f_2 \geq f_3$
 - (a) $a = x_2; b = x_4; L_{fin} = b - a;$
 - (b) $i = n \rightarrow I_n = [a \ b] \rightarrow FIM$
 - (c) $\alpha = (L_{ini} - L_{fin})/L_{fin}; i = i + 1$
 - (d) volta a 3.

Hora de exemplos para fixar todas essas coisarradas, ninguém é de ferro.

Exemplo 2.6.1 Em um certo problema de redução de intervalos a largura do intervalo inicial é $L_1 = 5.00$ e desejamos que o intervalo final tenha largura ≤ 0.01 . Quantas reduções serão necessárias pelo método de Fibonacci?

Lembrando que $L_1 = f(k)L_k$ temos

$$L_k \leq 0.01 \iff \frac{L_1}{f(k)} \leq 0.01 \iff f(k) \geq 500$$

Ou pela fórmula de Binet, ou escrevendo os números de Fibonacci na marra, verificaríamos que $f(13) = 377$ e $f(14) = 610$ donde $k = 14$. A tendência inicial é dizer que seriam necessárias 14 reduções ou 14 passos do algoritmo, mas é preciso uma certa cautela aqui, pois o intervalo inicial foi batizado de I_1 e com isto, após n reduções, o índice de Fibonacci é $k = n + 1$. Assim seriam necessárias $n = k - 1 = 13$ reduções.

Exemplo 2.6.2 Um projétil é arremessado de uma altura h e com um ângulo θ com relação ao solo, como se vê na figura 2.17. A distância d percorrida, já com os dados numéricos, é dada por (recordem Física!)

$$d = \left[9 \sin \theta + \sqrt{10 + 81 \sin^2 \theta} \right] 90 \cos \theta$$

Desejamos encontrar θ que maximize d . Resolver numericamente, por Fibonacci, com $n = 3$ reduções e intervalo inicial $I_1 = [0 \ 80]$.

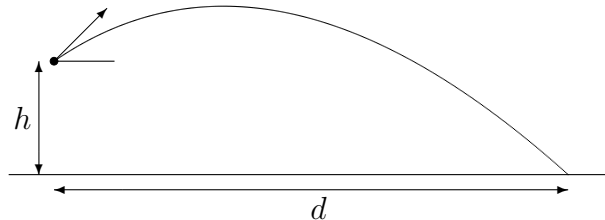


Figura 2.17: Alcance horizontal de um projétil

Este problema pede uma maximização e a teoria ensina a minimizar. Muito simples, basta minimizar $f(\theta) = -d(\theta)$. Como queremos 3 reduções temos $k = n + 1 = 4$ e

$$p = \frac{1 - \sqrt{5}}{1 + \sqrt{5}} = -0.3820 \quad \alpha = \alpha_1 = \frac{2}{1 + \sqrt{5}} \frac{1 - p^4}{1 - p^5} = 0.600$$

A partir do intervalo inicial temos $x_1 = 0$ e $x_4 = 80$; tendo obtido α_1 acima calculamos

$$x_2 = \alpha_1 x_1 + (1 - \alpha_1) x_4 = 32 \quad e \quad x_3 = 0.6 x_4 + 0.4 x_1 = 48$$

Agora os valores da função:

$$f_2 = f(x_2) = f(32) = \dots = -80.7720$$

$$f_3 = f(x_3) = f(48) = \dots = -848.3137$$

Como $f_2 > f_3$ o novo intervalo é $I_2 = [x_2 \ x_4] = [32 \ 80]$, com largura $L_2 = 80 - 32 = 48$. A largura do próximo intervalo já pode ser calculada: $L_3 = L_1 - L_2 = 32$ o que origina um novo valor para α : $\alpha = 32/48 = 0.666$ e os novos pontos interiores devem ser calculados:

$$x_2 = \alpha 32 + (1 - \alpha) 80 = 48 \quad e \quad x_3 = \alpha 80 + (1 - \alpha) 32 = 64$$

Novamente os valores da função:

$$f_2 = f(x_2) = f(32) = \dots = -848.3137$$

$$f_3 = f(x_3) = f(64) = \dots = -661.8800$$

Como $f_2 < f_3$ o novo intervalo é $I_3 = [x_1 \ x_3] = [32 \ 64]$, com largura $L_3 = 32$. A largura do próximo intervalo: $L_4 = L_2 - L_3 = 16$ o que significa $\alpha = 16/32 = 0.50$ e estamos exatamente no meio do intervalo, incapazes de encontrar **dois** pontos interiores. Havíamos alertado para essa possibilidade, para acertar as coisas escolheríamos dois pontos um pouquinho afastados do ponto médio 48 e recomeçaríamos a dança.

Já deu para sentir o gostinho, e, principalmente, já deu para perceber que em qualquer aplicação menos didática e mais próxima da realidade a quantidade de contas é braba. É, certamente, coisa para computadores.

2.6.3 Fibonacci, ainda uma vez

Na versão do algoritmo apresentada acima, um dado necessário para iniciar a busca é o número n de iterações totais, mas às vezes o que conhecemos a priori é a tolerância, ou seja, $\delta \in \mathbb{R}$ tal que $L_k < \delta$. Poderíamos pensar em adaptar o procedimento visto de modo a testar, em cada iteração, se $L_i < \delta$ ao invés de testar se $i = n$. Esbarraríamos em dificuldades logo no primeiro passo, porque apenas podemos efetuá-lo conhecendo o número total de iterações, isto é uma característica básica de Fibonacci. A solução clara é determinar n a partir de δ , mas isto não é das tarefas mais simples e assim fica explicada a razão de Fibonacci ser inicializado com n e não com δ .

Outro aspecto. As reduções de intervalo são baseadas no critério dos dois pontos: comparamos os valores de f em dois pontos internos. É bom frizar que a garantia destes testes é dada pela unimodalidade de f no intervalo.

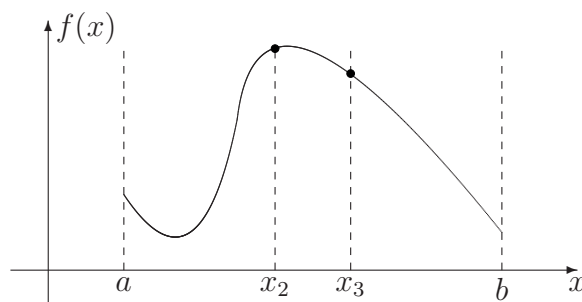


Figura 2.18: Problemas com o critério dos dois pontos

Consideremos o exemplo ilustrado na figura 2.18. O critério dos dois pontos diria que, como $f_2 > f_3$ então $[x_2, b]$ é enquadramento, o que é um grave erro.

A hipótese de unimodalidade é essencial. As preocupações começam quando lembramos que o intervalo inicial é gerado pelo critério dos 3 pontos, que garante enquadramento mas não unimodalidade. Que fazer? Uma postura pragmática aconselharia tocar o bonde sem grandes preocupações com esses detalhes, pois afinal de contas os problemas de interesse realmente prático envolvem funções bem comportadas e certamente unimodais. Casos patológicos como o acima são frutos de mentes matemáticas rigorosas, e não de engenheiros. Se se seguir essa postura e houver resultados inesperados, o principal suspeito é a falta de unimodalidade, e para corrigir os rumos deve-se procurar com mais cuidado o intervalo inicial.

Ainda um aspecto a considerar. Conforme visto, quando o número de iterações cresce muito, a razão entre os dois **primeiros** intervalos tende a

$$\alpha_1 = \frac{L_2}{L_1} = \frac{2}{1 + \sqrt{5}} \approx 0.61803$$

Na prática, quando $n \geq 12$ já podemos considerar isto válido, e o primeiro passo do algoritmo fica mais simples. Apesar dos detalhes apontados, Fibonacci é considerado o método mais eficiente para obter grandes reduções no tamanho dos intervalos de incerteza em um número fixo de passos.

2.7 Idéias de ouro

O sentido artístico dos antigos gregos era muito apurado e suas exigências estéticas muito abrangentes. Parte de sua geometria era dirigida a essas necessidades. Considere por exemplo a construção de retângulos. Retângulos muito finos ou muito gordos podem ser considerados “feios” tanto naquela época como também hoje em dia.

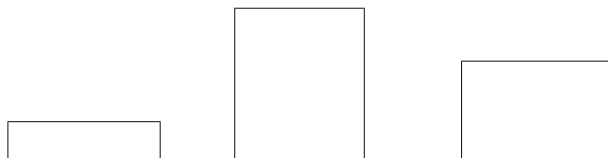


Figura 2.19: Retângulos feios e um mais equilibrado

Quando um arquiteto quiser um retângulo “bonito” como fazer? Qual a proporção entre base e altura de um tal retângulo belo, perfeito, equilibrado? Os gregos diziam que a resposta a esta pergunta está no que eles chamavam de **divisão de um segmento em média e extrema razão**. Mais tarde, já na Idade Média, este procedimento foi chamado de razão, proporção ou divisão áurea. Dado um segmento \overline{AB} , dividi-lo na razão áurea significa encontrar um ponto interno M tal que o segmento todo está para a parte maior assim como esta parte maior está para a parte menor.

$$\begin{array}{c} \text{A} \quad \quad \text{M} \quad \quad \text{B} \\ \hline \end{array} \quad \left(\overline{AB} / \overline{AM} \right) = \left(\overline{AM} / \overline{MB} \right)$$

Figura 2.20: Divisão áurea de um segmento

Os gregos clássicos formularam o problema e sabiam resolvê-lo, usando as únicas ferramentas permitidas pelas regras de sua geometria: régua e compasso. E estava feito, um retângulo cujos lados fossem os dois segmentos de uma divisão em média e extrema razão era um retângulo com aspecto equilibrado, harmonioso, um retângulo belo, para resumir, e que mais tarde seria promovido a áureo. E as aplicações apareciam, principalmente na Arquitetura. Até hoje, em escadas bem projetadas, qual a dimensão dos degraus? razão áurea, ela mesma. Templos, edifícios, monumentos, construções em geral com aparência leve e harmoniosa? razão áurea. Artistas posteriores, como Leonardo da Vinci, por exemplo, colocavam a proporção áurea em figuras humanas para lhes conferir graça e equilíbrio. O formato A4 é aproximadamente áureo.

Nem só de arte vive a razão áurea, já os matemáticos antigos descobriam coisas interessantes ... dentro de um retângulo áureo considere o quadrado constituído pelo lado menor, e corte-o fora. O retângulo que sobra é também áureo. Tem mais, a construção geométrica (usando régua e compasso apenas, lembrem, isto é geometria Euclidiana) do pentágono regular é baseada em quem? na razão áurea, claro. Chega de reminiscências e divagações, hoje em dia a Matemática vai muito além da Geometria Euclidiana da régua e

compasso, vejamos como a Álgebra encara o segmento áureo. Sendo d o tamanho do segmento \overline{AB} que se quer dividir e x o comprimento da divisão maior \overline{AM} a relação básica fica

$$\frac{d}{x} = \frac{x}{d-x} \implies x^2 + dx - d^2 = 0 \implies x = \begin{cases} d(\sqrt{5} + 1)/2 \approx 1.6180d \\ d(\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.6180d \end{cases}$$

A primeira solução não interessa e a segunda fornece a famosa razão áurea u , em notação mais recente:

$$u = \frac{x}{d} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0.6180$$

Em termos práticos, o segmento áureo maior é $\approx 61.80\%$ do todo, e o menor é $\approx 38.20\%$. É interessante notar que o inverso da primeira raiz, a desprezada, é exatamente a segunda: $1.618^{-1} = 0.618$. O objetivo principal deste texto é a otimização, e onde isto se encaixa? Voltando atrás algumas páginas o leitor verificará que a razão entre dois números de Fibonacci consecutivos depende do índice k e que para valores altos de k esta razão tende para um valor constante:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{f(k)}{f(k-1)} = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} = 1.618 = 1 + u$$

ou então

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{f(k-1)}{f(k)} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = 0.618 = u$$

Eis a razão áurea de novo! Verificando os números de Fibonacci percebe-se que já para $k = 10$ a aproximação áurea é muito boa. Um aspecto levemente incômodo do algoritmo de Fibonacci é que o número total de reduções e o índice k associado precisam ser conhecidos a priori, porque logo a primeira redução de intervalo depende disso, depende de $f(k-1)/f(k)$. Agora é fácil perceber que se o número de reduções prevista for grande (> 10) o cálculo da primeira delas é exatamente a divisão áurea do segmento inicial.

$$\begin{array}{ccccccc} a & & x_2 & & x_3 & & b \\ \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\ x_1 & & & & & & x_4 \end{array} \quad (x_3 - x_1)/(x_4 - x_1) = u = (x_4 - x_2)/(x_4 - x_1)$$

Figura 2.21: Divisão áurea para Fibonacci

Bem mais fácil, o processo pode ser inicializado sem o conhecimento de k . Mas tem mais, é imediato perceber que $(x_2 - x_1)/(x_3 - x_1) = u = 0.618$

e isto significa que se o intervalo escolhido for o da esquerda, $I_2 = [x_1 \ x_3]$, o ponto “antigo” x_2 divide aureamente I_2 e pode ser reaproveitado: $x'_3 = x_2$. A idéia básica do método da Divisão Áurea é exatamente essa, cada escolha de pontos internos é feita com o parâmetro $u = 0.618$. Após n reduções o intervalo final I_n é tal que $L_n = u^{n-1}L_1$ de onde se poderia calcular o número de reduções necessárias para se atingir uma dada tolerância.

Algoritmo 2.7.1 (Método da Divisão Áurea)

- Dados:**
- $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave e unimodal em
 - $I_1 = [a \ b] \subset \mathbb{R}$, intervalo enquadrante inicial
 - $\varepsilon \in \mathbb{R}$ tolerância

Objetivo:

Encontrar $I^* \subset I_1$, enquadrante, tal que $L^* < \varepsilon$

Operações

1. $x_1 = a; \quad x_4 = b; \quad L_i = b - a; \quad u = (\sqrt{5} - 1)/2;$
2. $x_2 = ux_1 + (1 - u)x_4;$
3. $x_3 = (1 - u)x_1 + ux_4;$
4. $f_2 = f(x_2)$
5. $f_3 = f(x_3)$
6. $f_2 < f_3$
 - $a = x_1; \quad b = x_3; \quad L_f = b - a;$
 - $L_f < \varepsilon \implies I^* = [a \ b] \rightarrow FIM$
 - $x_3 = x_2;$
 - $x_2 = ua + (1 - u)b; \implies \text{volta para 4.}$
7. $f_2 \geq f_3$
 - $a = x_2; \quad b = x_4; \quad L_f = b - a;$
 - $L_f < \varepsilon \implies I^* = [a \ b] \rightarrow FIM$
 - $x_2 = x_3;$
 - $x_3 = (1 - u)a + ub; \implies \text{volta para 4.}$

Este método é uma adaptação de Fibonacci, possivelmente mais simples e rápido. Os comentários feitos anteriormente continuam portanto válidos.

Exemplo 2.7.1 É o mesmo problema do projétil onde desejamos maximizar o alcance horizontal dado por

$$d = \left[9 \sin \theta + \sqrt{10 + 81 \sin^2 \theta} \right] 90 \cos \theta$$

Deve-se minimizar $f = -d$ como já havíamos visto. O intervalo inicial é $[0 \ 80]$. As divisões de intervalos são agora sempre dadas pela razão áurea e os leitores são convidados a calcular algumas iterações manualmente.

As vantagens obtidas com a aplicação da divisão áurea a Fibonacci estimulam a idéia de aplicá-la a outros algoritmos que envolvam intervalos, como por exemplo o algoritmo de enquadramento inicial via critério dos 3 pontos. Mas é hora de mudarmos um pouco de ares. Os métodos de redução de intervalo são robustos e confiáveis, mas exigem o cálculo da função objetivo f em um grande número de pontos. Às vezes isto é problemático.

2.8 Métodos de interpolação polinomial

Em intervalos pequenos as função suaves podem ser aproximadas por funções polinomiais. Nas vizinhanças de um mínimo estas funções podem ser confundidas com parábolas quadráticas. Dada uma função f e os pontos $x_1 < x_2 < x_3$ é fácil determinar a parábola que passa pelos pontos f_1 , f_2 e f_3 . Se sua equação é $g(x) = \alpha x^2 + \beta x + \gamma$ teremos três equações do tipo $\alpha x_i^2 + \beta x_i + \gamma = f_i$ para $i = 1, 2, 3$. A solução deste sistema fornece os coeficientes da parábola. Se f é suave então $g \approx f$ no intervalo $[x_1 \ x_3]$, se este é “pequeno”. Se houver um mínimo de f neste intervalo então o mínimo da parábola $(-\beta/(2\alpha))$, quando $\alpha > 0$) é uma boa aproximação para ele. Dizemos que g é uma interpolação de f .

Conhecendo mais informações sobre f — seu valor em outros pontos ou o valor de suas derivadas — pode-se encontrar parábolas cúbicas ou de ordem superior que interpolam f . Podemos usar estas idéias para atingir mínimos, vejamos. Dentro de um intervalo enquadrante $[a \ b]$ selecionamos três pontos p , q e m e calculamos $f_p = f(p)$, $f_q = f(q)$ e $f_m = f(m)$. A parábola $g(x)$ que passa por estes pontos é obtida solucionando o sistema

$$\begin{bmatrix} p^2 & p & 1 \\ q^2 & q & 1 \\ m^2 & m & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_p \\ f_q \\ f_m \end{bmatrix}$$

O minimizador desta curva é $u = -\beta/(2\alpha)$. Supomos que $u \in [a, b]$ e não está muito próximo dos outros pontos, para evitar problemas numéricos. Temos agora quatro pontos internos, dos quais um será descartado. Escolhemos o “pior” entre p , q e m comparando f_p , f_q e f_m , o maior destes números indicará o excluído. Com os pontos restantes encontramos outra parábola, etc, etc, etc. Como proceder quando a minimização da parábola g gera um ponto não aproveitável? Escolhemos novamente o pior entre os 3 pontos originais, pois ele será descartado, mas agora escolhemos também o melhor dentre eles, e o chamamos de z (lembrem que não se trata de um ponto novo, $z = p$ ou $z = q$ ou $z = m$). Este ponto divide $[a, b]$ em duas partes. Comparando $(z - a)$ e $(b - z)$ escolhemos a parte maior e a dividimos de maneira áurea, o que vai gerar o novo ponto u .

Esta é a filosofia básica, um uso híbrido de redução via divisão áurea e interpolação quadrática. Vários detalhes ainda precisam ser equacionados, claro, como por exemplo a inicialização e o término do processo. Um dos métodos mais conhecidos que usa este processo é o algoritmo de **Brent**. Ele parte com apenas um ponto interno p e os extremos a e b do intervalo inicial. Divisão áurea no maior dos segmentos resultantes gera um novo ponto. Mas chega, isto é apenas para estimular interesses. Basta deste aperitivo univariável, é hora de encarar outras dimensões, com ânimo e entusiasmo.

Capítulo 3

Otimização Vetorial

Antes de sair em busca de máximos e mínimos é hora de rever as idéias e conceitos básicos das funções reais de **várias** variáveis reais, também chamadas de funções reais de variável vetorial. Ou seja, é hora de encarar uma

3.1 Recordação Breve de Análise no \mathbb{R}^n

Quando $n = 1$ temos o conhecido caso escalar, de funções reais de uma única variável real, já revisto nestas notas. O caso geral de funções **vetoriais** de variáveis vetoriais, $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$, não interessa muito em otimização, então nos restringimos a $m = 1$. Uma função real de várias variáveis reais, ou de variável vetorial, ou função multivariável é representada por:

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n &\mapsto y = f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Exemplo 3.1.1 $f(x) = x^2 + 2x - e^{-x}$, para $x \in \mathbb{R}$

$$f(x_1, x_2) = x_1 x_2 \quad \text{para } x_1, x_2 \in \mathbb{R}$$

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^3 + 3x_1 x_2 x_3 + x_2^3 + \sqrt{x_3} \quad \text{para } x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}$$

Se $n \geq 3$ qualquer tentativa de visualização fica prejudicada, claro. Para $n = 2$ a função f se associa a superfícies que se desenvolvem no \mathbb{R}^3 e alguma visualização é possível, como na figura 3.1, onde se representa a superfície associada a $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$. Exatamente por essa razão esse será o caso preferido para exemplos.

O uso de curvas de nível, ou curvas de custo ou de valor constante facilita muito as coisas, pois permite um estudo satisfatório destas superfícies tridimensionais olhando para curvas bidimensionais no \mathbb{R}^2 . No caso geral, uma

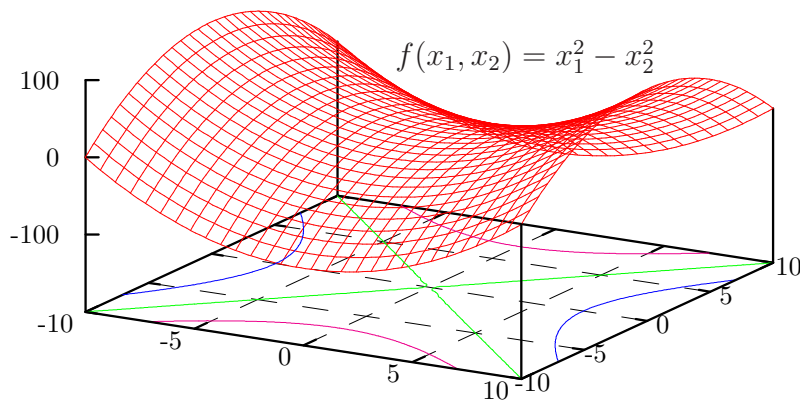


Figura 3.1: Visualização de uma superfície no \mathbb{R}^3

superfície de nível ou custo constante é o lugar geométrico onde a função f assume um mesmo valor:

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) = c = \text{cte.}\}$$

No caso do \mathbb{R}^2 as curvas de nível permitem uma boa idéia de que acontece no espaço tridimensional olhando apenas para o plano.

Exemplo 3.1.2 Seja $f(x_1, x_2) = x_1 x_2$. A relação $x_1 x_2 = c$ determina hipérboles equiláteras no plano, como os leitores facilmente verificariam. A função quadrática $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ tem circunferências concêntricas como curvas de nível, e para a função $f(x_1, x_2) = \max\{|x_1|, |x_2|\}$ as curvas de nível são ... para vocês, leitores.

3.1.1 Continuidade e Derivadas

Embora a visualização fique prejudicada, as idéias básicas são as mesmas e o formalismo é muito semelhante.

Definição 3.1.1 A função $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ é contínua no ponto \mathbf{x}^0 quando

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}^0} f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^0)$$

Ou então, sem usar limites

Definição 3.1.2 A função $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ é contínua no ponto \mathbf{x}^0 quando para todo real $\varepsilon > 0$ existe um real $\delta > 0$ tal que, se $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^0\| < \delta$ então $|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^0)| < \varepsilon$.

O mesmo desejo: é possível chegar arbitrariamente próximo de $f(\mathbf{x}^0)$ desde que cheguemos suficientemente perto de \mathbf{x}^0 . Ou então: os efeitos não podem ser muito diferentes de suas causas. Um bom comportamento, valioso.

Definição 3.1.3 Dada $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ e um ponto $\mathbf{x}^0 = [x_1^0 \ x_2^0 \ \dots \ x_n^0]^T \in \mathbb{R}^n$ diremos que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_i^0 + h, \dots, x_n^0) - f(\mathbf{x}^0)}{h},$$

quando existe, é a derivada parcial de f com relação a x_i no ponto $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, usualmente designada pelos símbolos

$$f'_{x_i}(\mathbf{x}^0) \quad \text{ou} \quad \left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}^0}$$

A mesma idéia do caso escalar, apenas agora existem n causas independentes e precisamos medir o efeito de cada uma delas.

Definição 3.1.4 A função $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ quando as derivadas parciais $f'_i(\mathbf{x}^0)$ existem $\forall i = 1, 2, \dots, n$.

A derivada de uma função escalar em um ponto tem um significado visual muito atraente, relacionado à tangente. Antes de generalizar esta interpretação é preciso definir um conceito único para derivada, pois o que se tem até agora são n idéias independentes.

Definição 3.1.5 Dada $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ diferenciável no ponto $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ diremos que

$$\begin{bmatrix} f'_{x_1}(\mathbf{x}^0) \\ f'_{x_2}(\mathbf{x}^0) \\ \vdots \\ f'_{x_n}(\mathbf{x}^0) \end{bmatrix} = g(\mathbf{x}^0) = \nabla f(\mathbf{x}^0) \in \mathbb{R}^n$$

é o **gradiente** de f no ponto \mathbf{x}^0 .

A notação com o nabla ∇ é a mais usual, mas o uso de $g(\mathbf{x}^0)$ é mais simples, desde que não exista possibilidade de confusão com outras funções. Quando $n = 2$ o conceito de gradiente tem uma interpretação visual muito simples e útil.

Fato 3.1.1 Dada $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ diferenciável em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, o gradiente neste ponto é perpendicular à curva de nível, apontando na direção de crescimento da função.

A demonstração deste fato clássico fica para outros textos, mas a idéia é bom guardar: o gradiente armazena informações sobre a direção e a quantidade de crescimento de uma função em cada ponto.

Exemplo 3.1.3 Calcular o gradiente de $f(x_1, x_2) = x_1 x_2$ nos pontos $\mathbf{x}^0 = [1 \ 1]^T$, $\mathbf{x}^1 = [2 \ -2]^T$ e $\mathbf{x}^2 = [0 \ -1]^T$. Plotá-los juntamente com as curvas de nível que passam pelos pontos. *As funções derivada são obtidas facilmente, como os leitores certamente sabem: $f'_{x_1}(x_1, x_2) = x_2$ e $f'_{x_2}(x_1, x_2) = x_1$. Usando as coordenadas dos pontos dados temos*

$$\nabla f(\mathbf{x}^0) = g(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \nabla f(\mathbf{x}^1) = g(\mathbf{x}^1) = \begin{bmatrix} -2 \\ 2 \end{bmatrix} \quad g(\mathbf{x}^2) = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

As visualizações ficam por conta dos leitores diligentes.

Como falar em intervalos no \mathbb{R}^n ?

Definição 3.1.6 Dado $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ e $0 < \delta \in \mathbb{R}$ diremos que o conjunto

$$B(\mathbf{x}^0, \delta) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^0\| < \delta \}$$

é uma bola ou esfera de raio δ centrada em \mathbf{x}^0 , ou simplesmente uma vizinhança de \mathbf{x}^0 .

Definição 3.1.7 Um conjunto de pontos do \mathbb{R}^n é convexo quando, dados dois pontos quaisquer nele, todos os pontos do segmento de reta que os une também pertencem a ele.

O segmento de reta entre \mathbf{x}^i e \mathbf{x}^f quaisquer do \mathbb{R}^n é definido como o conjunto de pontos $\alpha \mathbf{x}^i + (1 - \alpha) \mathbf{x}^f$ quando o escalar α varia entre 0 e 1, e assim a definição acima pode ser tornada mais precisa.

Propriedade 3.1.1 Um conjunto de pontos do \mathbb{R}^n é convexo se e somente se dados \mathbf{x}^i e \mathbf{x}^f quaisquer pertencentes a ele então, $\forall \alpha \in [0 \ 1]$, $\alpha \mathbf{x}^i + (1 - \alpha) \mathbf{x}^f$ também pertence.

Já topamos com a idéia de convexidade antes, e mais à frente ela será revista, mais detalhadamente. De modo geral, conjuntos de pontos no \mathbb{R}^n são chamados de domínios. Os conceitos de continuidade e diferenciabilidade podem ser expandidos para domínios.

Definição 3.1.8 Quando f é contínua em todos os pontos de um domínio $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ ela é contínua em \mathcal{D} . Quando ela é diferenciável em todos os pontos de \mathcal{D} ela será diferenciável em \mathcal{D} e podemos definir a função gradiente:

$$\begin{aligned} g : \mathcal{D} &\longrightarrow \mathbb{R}^n \\ \mathbf{x} \in \mathcal{D} &\mapsto g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

A função gradiente é também representada pelos símbolos ∇f ou ∇_f .

Exemplo 3.1.4 Para $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2) = x_1 x_2$ teremos

$$g(\mathbf{x}) = \nabla_f(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$$

Seja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ e um domínio aberto \mathcal{D} no \mathbb{R}^n . Se as derivadas parciais f'_{x_i} para $i = 1, 2, \dots, n$ são contínuas em \mathcal{D} dizemos que $f \in \mathcal{C}^1$, ou f é \mathcal{C}^1 contínua. Se as derivadas parciais de segunda ordem $f''_{x_i x_j}$ para $i, j = 1, 2, \dots, n$ são contínuas em \mathcal{D} dizemos que $f \in \mathcal{C}^2$, etc. Estas idéias são generalizações das idéias escalares e correspondem a funções suaves, bem comportadas, sem cantos ou quinas.

Definição 3.1.9 Sendo $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R} \in \mathcal{C}^2$ e $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ diremos que a matriz simétrica com as derivadas parciais de segunda ordem

$$\begin{bmatrix} f''_{x_1 x_1}(\mathbf{x}^0) & f''_{x_1 x_2}(\mathbf{x}^0) & \dots & f''_{x_1 x_n}(\mathbf{x}^0) \\ f''_{x_2 x_1}(\mathbf{x}^0) & f''_{x_2 x_2}(\mathbf{x}^0) & \dots & f''_{x_2 x_n}(\mathbf{x}^0) \\ \vdots & & \ddots & \\ f''_{x_n x_1}(\mathbf{x}^0) & f''_{x_n x_2}(\mathbf{x}^0) & \dots & f''_{x_n x_n}(\mathbf{x}^0) \end{bmatrix} = \nabla^2 f(\mathbf{x}^0) = H(\mathbf{x}^0)$$

é a matriz **Hessiana** de f no ponto \mathbf{x}^0 .

Além do símbolo H mostrado acima, muitas vezes usa-se para a Hessiana a notação G . Se esta matriz é definida em todos os pontos de um domínio \mathcal{D} pode-se falar na função Hessiana.

Assim como acontece no caso escalar, quando uma função possui propriedades desejáveis, dado o seu valor em um dado $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, é possível prever o seu comportamento em outros pontos. O teorema de Taylor traduz detalhadamente essa idéia.

Teorema 3.1.1 (Teorema de Taylor:) sendo \mathbf{x}^0 e \mathbf{x} dois pontos em um domínio aberto $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ onde uma função de variável vetorial f é contínua de classe \mathcal{C}^2 , então existe um vetor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ no segmento de reta unindo \mathbf{x}^0 e \mathbf{x} (ou seja: $\mathbf{z} = \alpha \mathbf{x}^0 + (1 - \alpha) \mathbf{x}$ para $0 < \alpha < 1$) tal que

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^0) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}^0)^T g(\mathbf{x}^0) + (1/2)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0)^T G(\mathbf{z})(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0) \quad (3.1)$$

Este teorema poderia ser apresentado em um contexto mais geral, para $f \in \mathcal{C}^p$ com $p > 2$; haveria um número maior de termos na expressão de $f(\mathbf{x})$. A versão acima, contendo apenas o gradiente e a Hessiana, é suficientemente poderosa para resolver as questões de otimização. A expressão (3.1) é, muitas vezes, apresentada de modo diferente: o ponto desconhecido é caracterizado como $\mathbf{x} = \mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}$ onde $\alpha \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, ou seja, saindo do ponto conhecido \mathbf{x}^0 e “andando uma distância” α na direção \mathbf{d} atinge-se o ponto \mathbf{x} . O teorema da Taylor passa a ser representado por

$$f(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^0) + \alpha \mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^0) + (\alpha^2/2) \mathbf{d}^T G(\mathbf{z}) \mathbf{d} \quad (3.2)$$

Para garantir que tanto o gradiente como a Hessiana sejam calculados no mesmo ponto \mathbf{x}^0 a expressão pode ser apresentada em uma terceira versão:

$$f(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^0) + \alpha \mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^0) + (\alpha^2/2) \mathbf{d}^T G(\mathbf{x}^0) \mathbf{d} + R_2(\alpha) \quad (3.3)$$

O termo adicionado, o **resto de Taylor**, é muitas vezes expresso apenas como $o(\alpha^2)$. Esta notação indica um termo de ordem 2, que “cai a zero mais rapidamente” que termos de ordem 1, como por exemplo o termo associado ao gradiente. Em símbolos: $\lim_{\alpha \rightarrow 0} o(\alpha^2)/\alpha = 0$. Para justificar isto é preciso usar a caracterização do resto de Taylor em sua forma mais bruta:

$$R_2(\alpha) = \alpha^2 r_2(\alpha) \quad \text{onde} \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} r_2(\alpha) = 0. \quad (3.4)$$

Supondo que a função f é diferenciável mais vezes seria possível detalhar ainda mais este resto e mostrar que ele pode ser considerado como $o(\alpha^3)$, o que não será necessário para os desenvolvimentos destas notas.

3.1.2 Funções Vetoriais de Variáveis Vetoriais

Dada a função

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^m \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n &\mapsto y = f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

chamaremos de **Jacobiana** de f a matriz $m \times n$ de suas derivadas parciais. O elemento (i, j) da Jacobiana é

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$$

Os conceitos básicos de otimização não se aplicam a estas funções, pois como encontrar elementos do \mathbb{R}^m , sendo $m > 1$, máximos ou mínimos?

3.1.3 Funções lineares e quadráticas

Uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada de **linear** quando existem constantes $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ e $\beta \in \mathbb{R}$ tais que

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} + \beta = \mathbf{x}^T \mathbf{a} + \beta \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Funções lineares são contínuas e diferenciáveis em todo o \mathbb{R}^n e é fácil verificar que

$$g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{a} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{e} \quad H(\mathbf{x}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

No caso visualizável $n = 2$ as funções lineares são planos no \mathbb{R}^3 e as curvas de nível são retas paralelas no \mathbb{R}^2 , como mostra a figura 3.2. Funções lineares sempre assumem valores positivos, negativos e nulos, são não limitadas e não possuem máximos ou mínimos.

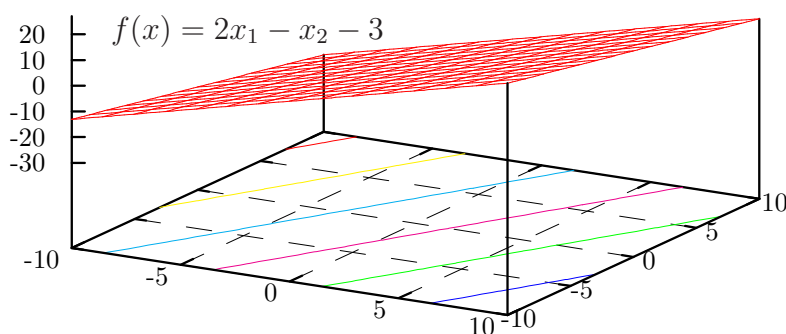


Figura 3.2: Plano no \mathbb{R}^3 e curvas de nível

Uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada de **quadrática** quando existem constantes $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, uma matriz quadrada, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ e $\gamma \in \mathbb{R}$ tais que

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + \gamma \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

O termo linear também poderia ter sido escrito como $\mathbf{x}^T \mathbf{b}$. Funções quadráticas são contínuas e diferenciáveis em todo o \mathbb{R}^n e é fácil verificar que

$$g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} + \mathbf{b} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{e} \quad H(\mathbf{x}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}) = A \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Assim como as lineares, as funções quadráticas são não limitadas, mas as semelhanças terminam por aqui. As funções quadráticas podem ter máximos e/ou mínimos, podem assumir valores apenas positivos, apenas negativos, ou então valores positivos, negativos e nulos. Mais sobre elas em breve.

3.2 Pontos Estacionários e Especiais no \mathbb{R}^n

Dizemos que $\mathbf{x}^e \in \mathbb{R}^n$ é um **ponto estacionário** da função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ quando o gradiente nele se anula:

$$g(\mathbf{x}^e) = \nabla f(\mathbf{x}^e) = 0$$

A mesma idéia de antes, mas agora quem se anula é um vetor. Os conceitos básicos a respeito dos pontos especiais de uma função já foram apresentados antes, no caso escalar, onde as visualizações ajudam muito a fixar as idéias. As definições formais serão repetidas agora.

Definição 3.2.1 Dizemos que $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é um **ponto de mínimo local forte** da função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ quando existe $\delta > 0$ tal que

1. $f(\mathbf{x})$ é definida $\forall \mathbf{x}$ tal que $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta$
2. $f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}^*) \quad \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$ tal que $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta$

Definição 3.2.2 Dizemos que $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é um **ponto de mínimo local fraco** da função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ quando existe $\delta > 0$ tal que

1. $f(\mathbf{x})$ é definida $\forall \mathbf{x}$ tal que $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta$
2. $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*) \quad \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$ tal que $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta$
3. \mathbf{x}^* não é um mínimo local forte

Dizemos que $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é um **ponto de mínimo global** da função f quando as desigualdades acima se verificam $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, ou seja, globalmente e não apenas em uma dada vizinhança do ponto.

3.2.1 Condições analíticas

O problema agora é o de buscar os mínimos (ou máximos) para funções vetoriais. As relações entre pontos estacionários e especiais, como era de se esperar, permanecem muito semelhantes às do caso univariável. Os teoremas básicos são vistos a seguir.

Teorema 3.2.1 (Condições Necessárias de Otimalidade) Se a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é suficientemente suave, e se $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é um mínimo local de f então ele é estacionário, ou seja,

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = g(\mathbf{x}^*) = 0,$$

a ainda $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) = G(\mathbf{x}^*) \geq .0$

A demonstração será apresentada, para ilustrar sua simplicidade. Aplicando Taylor, via expressão (3.2), ao minimizador \mathbf{x}^* e a um ponto $\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}$, onde o escalar α é positivo vem

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^*) + \alpha \mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^*) + (\alpha^2/2) \mathbf{d}^T G(\mathbf{z}) \mathbf{d}.$$

Supondo α pequeno, o ponto $\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}$ está em uma vizinhança do minimizador local \mathbf{x}^* , logo

$$0 \leq f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*) = \alpha \mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^*) + (\alpha^2/2) \mathbf{d}^T G(\mathbf{z}) \mathbf{d}.$$

Dividindo por α e fazendo $\alpha \rightarrow 0$, e como $\alpha > 0$ por hipótese, então $\mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^*) \geq 0$. Este raciocínio é feito para um novo ponto $\mathbf{x}^* - \alpha \mathbf{d}$, levando a outra conclusão: $\mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^*) \leq 0$. Estas duas conclusões são simultaneamente verdadeiras apenas quando $g(\mathbf{x}^*) = 0$, o que demonstra que o minimizador é estacionário. Para a outra condição aplica-se Taylor, via expressão (3.3), ao minimizador \mathbf{x}^* e a um ponto $\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}$, onde α é positivo:

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^0) + \alpha \mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^*) + (\alpha^2/2) \mathbf{d}^T G(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + R_2(\alpha).$$

Supondo mais uma vez α pequeno, e como \mathbf{x}^* é estacionário, então

$$0 \leq f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^0) = (\alpha^2/2) \mathbf{d}^T G(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + R_2(\alpha)$$

onde se divide por α^2 e se faz $\alpha \rightarrow 0$. Usando a propriedade do resto de Taylor vista em (3.4) conclui-se que $\mathbf{d}^T G(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} \geq 0$ e como isto vale $\forall \mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ então a Hessiana é positiva semidefinida em \mathbf{x}^* : $G(\mathbf{x}^*) \geq 0$. **Q.E.D**

Mais uma vez os mínimos locais são pontos estacionários de uma função. Como antes, as CNO restringem o universo da busca de soluções, mas para garantir que pontos deste universo reduzido realmente solucionam o PGO precisamos das CSO.

Teorema 3.2.2 (Condições Suficientes de Otimalidade) *Sendo a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ suficientemente suave, se $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é tal que*

1. $\nabla f(\mathbf{x}^*) = g(\mathbf{x}^*) = 0$
2. $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) = G(\mathbf{x}^*) > 0$

então \mathbf{x}^ será um mínimo local forte de f .*

A demonstração da validade deste resultado também é feita com o auxílio da fórmula de Taylor. Usando a versão (3.3) em \mathbf{x}^* e em um ponto $\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}$ próximo, ou seja, para α pequeno, vem

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^*) + \alpha \mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^*) + (\alpha^2/2) \mathbf{d}^T G(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + R_2(\alpha).$$

Como $g(\mathbf{x}^*) = 0$ e $G(\mathbf{x}^*) > 0$ então, para $\alpha \rightarrow 0$, $f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*) > 0$, e como isto vale $\forall \mathbf{d} \in \mathbb{R}$ então \mathbf{x}^* é um minimizador local forte. **Q.E.D**

Exemplo 3.2.1 Sendo $f(x) = x^3$ teremos $f'(x) = 3x^2$ e $f''(x) = 6x$, o que garante que $x^* = 0$ é um ponto estacionário onde $f''(x^*) \geq 0$, ou seja, satisfaz as CNO. Mas as CSO não são satisfeitas e este não é um mínimo de f , mas um ponto de inflexão. Seja agora $f(x_1, x_2) = x_1 x_2$. É fácil calcular

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_1} &= x_2; & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} &= 0; & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} &= 1 \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} &= x_1; & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} &= 0; & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} &= 1 \end{aligned}$$

donde tiramos

$$\nabla f(\mathbf{x}) = g(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \end{bmatrix} \quad e \quad \nabla^2 f(\mathbf{x}) = G(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

O ponto $\mathbf{x}^* = [0 \ 0]^T$ é estacionário, pois anula o gradiente, mas a Hessiana $G(\mathbf{x}^*)$ é indefinida, donde \mathbf{x}^* não é mínimo. Trata-se de um ponto de sela.

Exemplo 3.2.2 – Método dos mínimos quadrados. Temos 3 amostras de uma função escalar desconhecida $d(x)$: $x_1 = 1$ com $d(x_1) = 6 = d_1$, $x_2 = 3$ com $d(x_2) = 10 = d_2$ e $x_3 = 6$ com $d(x_3) = 2 = d_3$. Desejamos aproximar $d(x)$ por uma expressão do tipo $g(x) = a + b/x$. Determinar a e b para que a aproximação seja ótima. É um problema clássico de mínimos quadrados. O erro quadrado médio na amostra i é

$$(g(x_i) - d(x_i))^2 = \left(a + \frac{b}{x_i} - d_i \right)^2$$

e a busca de a e b ótimos se resume a minimizar a soma dos erros

$$\min f = \sum_1^3 \left(a + \frac{b}{x_i} - d_i \right)^2$$

Trata-se de um problema de minimização livre no \mathbb{R}^2 , com $\mathbf{x} = [a \ b]^T$. Desenvolvendo a expressão acima obtemos $f = 3a^2 + 41b^2/36 + 3ab - 58b/3 - 36a + 140$. Calculando o gradiente:

$$\nabla f = \begin{bmatrix} f'_a \\ f'_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6a + 3b - 36 \\ 3a + 41b/18 - 58/3 \end{bmatrix}$$

Seria fácil verificar que

$$\nabla f(\mathbf{x}^e) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \iff \mathbf{x}^e = \begin{bmatrix} a^* \\ b^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.1428 \\ 1.7143 \end{bmatrix}$$

Para checar se este PE é mesmo um minimizador, entra em cena a Hessiana. Fazendo as contas temos

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}^e) = H(\mathbf{x}^e) = \begin{bmatrix} 6 & 3 \\ 3 & 41/18 \end{bmatrix}$$

Pelo critério de Sylvester verificaríamos ser esta matriz positiva definida, donde o PE é realmente um mínimo.

Exemplo 3.2.3 Estudar a função $f = 2x_1^2 + 8x_2^2 + 8x_1x_2 - 5x_1$. O cálculo das derivadas parciais leva à função gradiente

$$g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 4x_1 + 8x_2 - 5 \\ 8x_1 + 16x_2 \end{bmatrix}$$

Verificaríamos que este gradiente não se anula, ou seja, a função não possui PEs que possam ser máximos ou mínimos. A visualização, feita na figura 3.3, ajuda a entender.

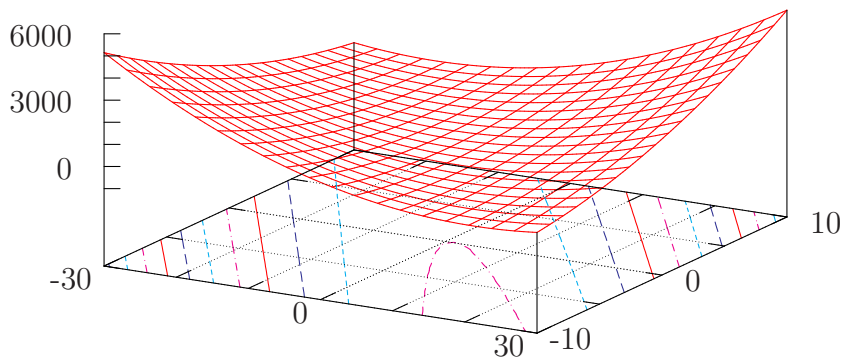


Figura 3.3: Superfície no \mathbb{R}^3 sem PEs

3.2.2 Funções Quadráticas

Em um número razoável de casos práticos de otimização a função objetivo é quadrática, como por exemplo nas interpolações via mínimos quadrados. Este fato é muito bem vindo, pois as funções quadráticas tem expressões analíticas relativamente simples e nelas os fatos básicos de otimização tem interpretações claras e diretas. A definição e algumas propriedades básicas já foram apresentadas anteriormente, e serão repetidas aqui. A função real de variável vetorial q é quadrática quando

$$q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b} \mathbf{x}^T$$

onde $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ e $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz $n \times n$. Notar que o termo independente γ , usado anteriormente, foi abandonado, pois não tem papel em otimização, e que a matriz A pode, sem perda de generalidade, ser considerada simétrica: $A = A^T$.

Propriedade 3.2.1 *O gradiente e a Hessiana de uma função quadrática são dados por:*

$$g(\mathbf{x}) = \nabla q(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} + \mathbf{b} \quad e \quad G(\mathbf{x}) = \nabla^2 q(\mathbf{x}) = A$$

A demonstração desta propriedade se faz expressando a função quadrática em termos das componentes x_1, x_2, \dots, x_n e calculando as derivadas parciais. Uma consequência imediata é dada por

Propriedade 3.2.2 *Os pontos estacionários de uma função quadrática são:*

$$\nabla q(\mathbf{x}) = 0 \iff A\mathbf{x} = -\mathbf{b}$$

Percebemos que quando a equação $A\mathbf{x} = -\mathbf{b}$ não admitir soluções a função não tem pontos estacionários e, consequentemente, mínimos ou máximos, sendo portanto ilimitada.

Propriedade 3.2.3 *Sendo $\mathbf{x}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ e $\alpha \in \mathbb{R}$*

$$q(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{p}) = q(\mathbf{x}) + \alpha \mathbf{p}^T (A\mathbf{x} + \mathbf{b}) + \frac{1}{2} \alpha^2 \mathbf{p}^T A \mathbf{p}$$

A expressão significa que saímos do ponto \mathbf{x} e andamos uma distância α na direção dada pelo vetor \mathbf{p} . Aplicando esta propriedade a um ponto estacionário vem

Propriedade 3.2.4 *Seja um ponto \mathbf{x}^* tal que $A\mathbf{x}^* = -\mathbf{b}$ e uma direção dada pelo vetor $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$:*

$$q(\mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{p}) = q(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2}\alpha^2\mathbf{p}^T A\mathbf{p}$$

Vemos que o comportamento de uma função quadrática nas vizinhanças de um ponto estacionário depende apenas da Hessiana $A = \nabla^2 q(\mathbf{x})$. Como A é simétrica seus autovalores são reais, e os autovetores associados formam uma base ortonormal. Supondo que “saímos” de um ponto estacionário \mathbf{x}^* ao longo de uma direção dada pelo i -ésimo autovetor de A podemos usar a propriedade acima com $\mathbf{p} = \mathbf{v}_i$.

$$\begin{aligned} q(\mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{v}_i) &= q(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2}\alpha^2\mathbf{v}_i^T A\mathbf{v}_i \\ &= q(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2}\alpha^2\lambda_i \end{aligned}$$

onde se usou a hipótese de que o autovetor \mathbf{v}_i tem norma unitária, ou seja: $\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i = 1$. É fácil concluir que

$$\begin{aligned} \lambda_i > 0 & \text{ então } q \text{ é crescente com } \alpha \\ \lambda_i < 0 & \text{ então } q \text{ é decrescente com } \alpha \\ \lambda_i = 0 & \text{ então } q \text{ é constante e linear: } q(\mathbf{x}) = \mathbf{b}^T \mathbf{x} \end{aligned}$$

Uma função quadrática com Hessiana positiva definida tem um comportamento peculiar com respeito à otimização, visto que seus autovalores são todos reais e positivos.

Propriedade 3.2.5 *Supondo $\lambda_i(A) > 0 \forall i = 1, 2, \dots, n$ o ponto estacionário \mathbf{x}^* é o único mínimo global da função.*

O equivalente escalar seria uma parábola de segundo grau com concavidade para cima.

Exemplo 3.2.4 *Seja a função quadrática $q(x_1, x_2) = 2.5x_1^2 + x_2^2 + 3x_1x_2 - 5.5x_1 - 3.5x_2$, expressa em forma matricial como*

$$q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} + [-5, 5 \quad -3, 5]\mathbf{x}$$

Como a Hessiana A é inversível o PE é dado trivialmente por

$$\mathbf{x}^* = -A^{-1}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0, 5 \\ 1, 0 \end{bmatrix}$$

Os autovalores e autovetores de A são

$$\lambda_1 = 6,85 \rightarrow \mathbf{v}^1 = \begin{bmatrix} -0,85 \\ -0,53 \end{bmatrix} \quad \lambda_2 = 0,15 \rightarrow \mathbf{v}^2 = \begin{bmatrix} 0,53 \\ -0,85 \end{bmatrix}$$

A função tem um mínimo global em \mathbf{x}^* e suas curvas de nível são elipses cujos eixos principais são os autovetores da Hessiana. Uma visão tridimensional desta função está na figura 3.4

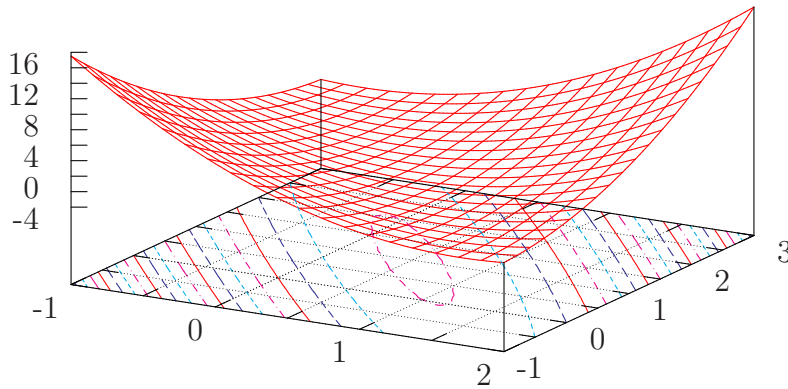


Figura 3.4: Quadrática cuja Hessiana tem autovalores positivos

O comportamento de uma função quadrática com Hessiana positiva semidefinida é sintetizado pela

Propriedade 3.2.6 *Supondo $\lambda_i(A) \geq 0 \forall i = 1, 2, \dots, n$ o ponto estacionário \mathbf{x}^* , se existir, é um mínimo local fraco da função.*

Exemplo 3.2.5 *Seja a função quadrática $q(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 0.5x_2^2 + 2x_1x_2 - 4x_1 - 2x_2$, expressa em vorma matricial como*

$$q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} + [-4 \quad -2] \mathbf{x}$$

A Hessiana A não é inversível, e a equação $A\mathbf{x}^ = -\mathbf{b}$ admite infinitas soluções dadas por*

$$\mathbf{x}^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} + \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

Cada um dos pontos desta reta no \mathbb{R}^2 é um mínimo local fraco. Esta reta é também a direção dos autovetores associados ao autovalor $\lambda_1 = 0$. Ao outro autovalor, $\lambda_2 = 5$, associa-se a direção $[2 \ 1]^T$. A superfície de q é do tipo calha, e suas curvas de nível são retas paralelas, como se pode visualizar na figura 3.5

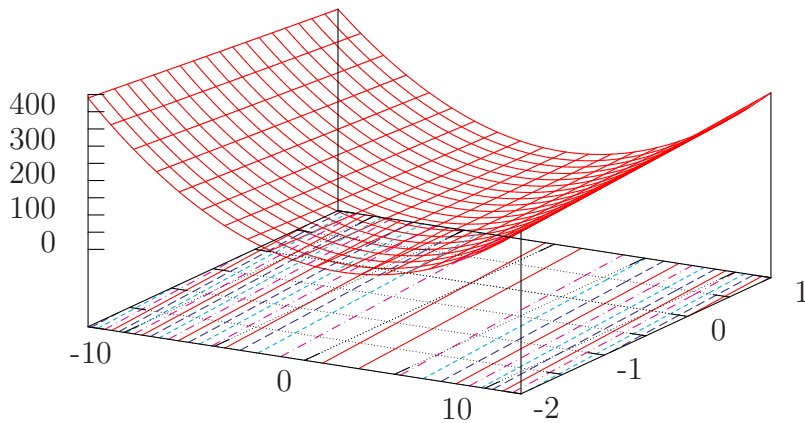


Figura 3.5: Quadrática com Hessiana positiva semidefinida

Quando a Hessiana da função quadrática tem autovalores positivos e negativos, ou seja, quando ela é indefinida, vale a:

Propriedade 3.2.7 *Supondo autovalores maiores, menores ou iguais a 0, o ponto estacionário x^* é uma sela.*

Exemplo 3.2.6 *Seja a função quadrática abaixo, com seu ponto estacionário.*

$$q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & -8 \end{bmatrix} \mathbf{x} + [-0,5 \quad 8,5] \mathbf{x}; \quad \mathbf{x}^* = -A^{-1} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0,5 \\ 1,0 \end{bmatrix}$$

Os autovalores e autovetores de A são

$$\lambda_1 = 3,09 \rightarrow \mathbf{v}^1 = \begin{bmatrix} -1,0 \\ 0,1 \end{bmatrix} \quad \lambda_2 = -8,09 \rightarrow \mathbf{v}^2 = \begin{bmatrix} -0,1 \\ -1,0 \end{bmatrix}$$

As curvas de nível (vide figura 3.6) são hipérboles cujos eixos principais estão associados aos autovetores da Hessiana.

3.3 Convexidade

A importância da convexidade nos problemas de otimização extrapola o caso escalar, e os resultados vistos nessa situação podem ser generalizados. Antes disso vale lembrar e repetir a definição formal de convexidade de regiões.

Definição 3.3.1 *Um domínio $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ é convexo se para qualquer par de elementos $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2 \in \mathcal{D}$ e qualquer real $\alpha \in [0, 1]$ o ponto $\alpha \mathbf{x}^1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}^2 \in \mathcal{D}$.*

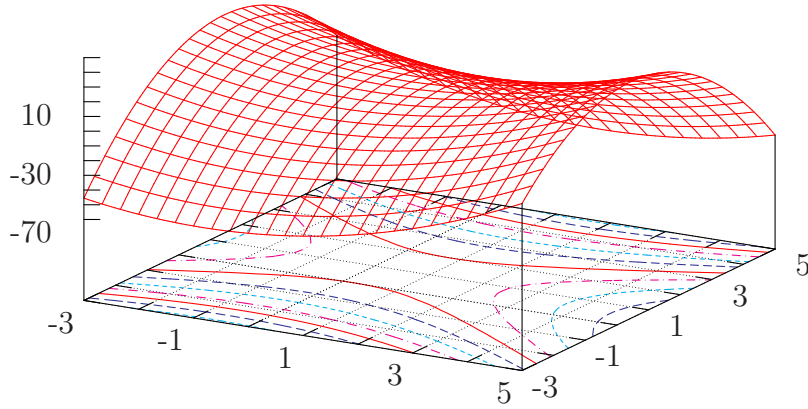


Figura 3.6: Quadrática com Hessiana indefinida

É a velha idéia de sempre, todos os pontos do segmento de reta unindo pontos quaisquer de \mathcal{D} também pertencem a este domínio. Note-se que o \mathbb{R}^n é convexo.

Definição 3.3.2 Diremos que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em um domínio $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ se para qualquer par de pontos $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2 \in \mathcal{D}$ e qualquer real $\alpha \in [0, 1]$ temos

$$f(\alpha \mathbf{x}^1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}^2) \leq \alpha f(\mathbf{x}^1) + (1 - \alpha) f(\mathbf{x}^2)$$

Embora a visualização seja mais difícil, é a mesma idéia anterior.

Propriedade 3.3.1 Se a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ pertence a \mathcal{C}^1 então ela será convexa em um domínio $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ se e somente se para quaisquer $\mathbf{x}^0, \mathbf{x} \in \mathcal{D}$ temos

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^0) + \nabla f(\mathbf{x}^0)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^0)$$

Olhando um pouco para trás, até a figura 1.11, vemos que se trata da mesma situação: o gráfico da função está acima de qualquer tangente.

Propriedade 3.3.2 Uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ pertencente a \mathcal{C}^2 será convexa em um domínio convexo $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ se e somente se

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}$$

Um critério para reconhecer a convexidade de uma função, baseado na Hessiana. Esta deve ser PSD em todos os pontos internos de um domínio convexo. Como a Hessiana de uma função quadrática é constante (estão lembrados, está há poucas páginas atrás) a determinação de sua convexidade é muito simples.

Propriedade 3.3.3 Se $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ então cada mínimo local será também global em \mathcal{D} .

Esta propriedade é uma das principais razões da importância da convexidade.

Propriedade 3.3.4 Se $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é ponto estacionário de uma função convexa f então \mathbf{x}^* é um minimizador global de f .

No caso geral a condição de estacionariedade $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ é apenas necessária para \mathbf{x}^* ser minimizador, para garantir mesmo isto precisaríamos verificar ainda se $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \geq 0$. Mas quando f é convexa tudo se simplifica e a condição de estacionariedade também é suficiente, beleza!

Exemplo 3.3.1 Analisar a função $f(x_1, x_2) = x_1 x_2$. Esta é uma quadrática simples que pode ser colocada na forma padrão:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x} \quad \text{donde} \quad \nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$$

Como a Hessiana é indefinida não há convexidade. A visualização pode ser feita na figura 3.7.

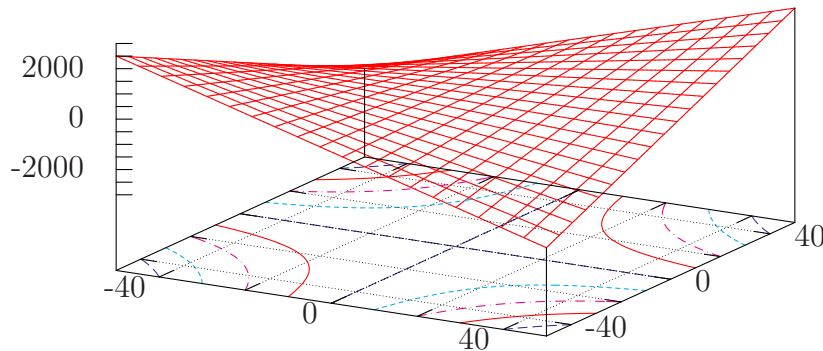


Figura 3.7: Hessiana indefinida: não há convexidade

A teoria da minimização sem restrições no caso geral é bela e rigorosa, mas as dificuldades operacionais de algumas aplicações podem torná-la impraticável, é uma pena ... Já vimos este filme antes, no caso escalar, e a solução estava nos métodos numéricos. Aqui também.

Capítulo 4

Métodos numéricos para minimização vetorial

Antes de começar, um lembrete importante. Assim como as ferramentas analíticas estudadas, os métodos numéricos que veremos neste capítulo também se aplicam apenas a funções suaves. Estes métodos trabalham com seqüências de pontos convergentes: a seqüência de pontos $\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^k$ no \mathbb{R}^n deve se aproximar da solução desejada \mathbf{x}^* . Algumas questões básicas.

Onde começar? Em qualquer método, se começarmos perto do final o caminho até ele será mais curto. Bem ... isto será verdade se o método for razoavelmente esperto, o que certamente será o nosso caso. Deste modo, qualquer informação a priori que se possa ter sobre a solução será muito útil. Se nada se souber sobre ela, paciência, começamos de um lugar qualquer e cabe unicamente ao método a tarefa de, sem qualquer tipo de pista, procurar \mathbf{x}^* .

Como proceder? Não há muita escolha, dado um ponto $\mathbf{x}^k \in \mathbb{R}^n$ devemos escolher uma direção \mathbf{d}^k , também um vetor do \mathbb{R}^n , e avançar uma certa distância α_k nela. Isto significa que um passo genérico de um algoritmo qualquer se baseia na relação $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$ ou, equivalentemente, no comportamento vetorial ilustrado pela figura 4.1.

As diferenças entre os possíveis métodos estão na maneira de se determinar a direção de avanço, o vetor $\mathbf{d}^k \in \mathbb{R}^n$, e a quantidade de avanço, o escalar $\alpha_k \in \mathbb{R}$.

Quando parar? Às vezes é possível calcular o gradiente em cada ponto \mathbf{x}^i . Como o gradiente se anula na solução \mathbf{x}^* , e como as funções são suaves, quando $\nabla f(\mathbf{x}^i)$ estiver suficientemente próximo de zero é hora

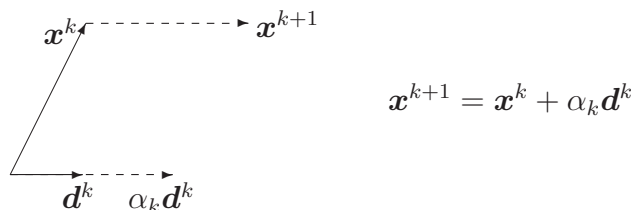


Figura 4.1: Comportamento vetorial dos métodos numéricos

de parar. Normalmente usamos a norma para medir esta proximidade de zero: se $\|\nabla f(\mathbf{x}^i)\| < \varepsilon$ (uma tolerância especificada) então FIM. Outra maneira é monitorar o avanço de cada passo. De modo geral, quando o avanço de vários passos consecutivos é pequeno, e cada vez menor, isto significa que estamos perto da solução e podemos parar. Em símbolos, se \mathbf{x}^{k+1} está suficientemente próximo de \mathbf{x}^k paramos. Para medir estas proximidades usamos a norma: se $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| < \varepsilon$ então FIM. Pode-se pensar em critérios de parada sofisticados, detalhando e combinando as idéias básicas acima.

4.1 Método de descida máxima

Ou de maior descida, ou de descida íngreme, ou, sendo bem nacionalistas, “steepest descent”. O mecanismo básico deste método é simples e intuitivo, e é conhecido desde a época de Cauchy: a direção de avanço em cada iteração deve causar o máximo decréscimo possível na função f . Como achar um vetor $\mathbf{d}^k \in \mathbb{R}^n$ com essa característica? Fácil, basta lembrar a idéia de gradiente, explicada anteriormente. Partindo de um ponto qualquer do \mathbb{R}^n e avançando na direção do gradiente o aumento será máximo. Como queremos o efeito oposto, a escolha é clara, avançar na direção oposta ao gradiente: $\mathbf{d}^k = -\nabla f(\mathbf{x}^k)$. O outro nome deste procedimento, **método do gradiente**, já pode ser entendido.

Animais subindo e descendo morros entendem muito bem de gradientes e de caminhos com máximas e mínimas inclinações. Seus objetivos são os de minimizar o esforço, logo eles escolhem rotas de subida ou descida mínimas, quase perpendiculares ao gradiente. É o chamado caminho dos burrinhos. A intuição funciona bem e permite descobrir qual a direção de descida máxima, mas as ferramentas analíticas também podem ser empregadas. Vamos supor um ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ e um outro ponto obtido ao se avançar uma distância α em uma direção \mathbf{d} qualquer: $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}$ onde $\alpha \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$. Usando o teorema

de Taylor para calcular o valor de uma função f no novo ponto temos

$$f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}) + \alpha [\nabla f(\mathbf{x})]^T \mathbf{d} + R$$

onde R é o resto de Taylor, que pode ser desprezado para valores pequenos de α . É exatamente esse o nosso caso, vamos considerar que os dois pontos estão próximos. Qual a variação sofrida por f ao se passar de \mathbf{x} ao outro ponto? Chamando-a de δf é fácil estabelecer que

$$\delta f = f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}) = \alpha [\nabla f(\mathbf{x})]^T \mathbf{d} = \alpha \mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x})$$

O escalar α pode ser considerado positivo, logo o sinal de δf depende do sinal de $\mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x})$ que é o produto escalar entre os vetores \mathbf{d} e $\nabla f(\mathbf{x})$. Várias conclusões interessantes, e simples, podem ser tiradas.

- Como o produto escalar se anula quando o ângulo entre os vetores é reto, concluímos que uma direção de avanço perpendicular ao gradiente não altera o valor da função, ou seja, esta é a direção da curva de nível que passa pelo ponto.
- Como o produto escalar é positivo quando o ângulo entre os vetores é agudo, um avanço que “aponta na mesma direção do gradiente” causa aumento no valor de f . No caso limite de ângulo nulo entre os vetores o produto escalar assume seu valor máximo, donde δf é máximo quando $\mathbf{d} = \nabla f(\mathbf{x})$.
- Mudando o que deve ser mudado no parágrafo acima concluímos que a direção de máxima descida é $\mathbf{d} = -\nabla f(\mathbf{x})$.

Em resumo, sendo θ o ângulo entre o gradiente $\nabla f(\mathbf{x})$ e a direção de teste escolhida \mathbf{d} temos

$\theta = 0^\circ$	direção de máxima subida
$0 < \theta < 90^\circ$	direção de subida
$\theta = 90^\circ$	direção de subida nula (CN)
$90^\circ < \theta < 180^\circ$	direção de descida
$\theta = 180^\circ$	direção de descida máxima

Exemplo 4.1.1 Para a função $f = x_1 x_2^2$, dado o ponto $\mathbf{x}^0 = [1 \ 2]^T$, verificar se $\mathbf{d} = [-1 \ 2]^T$ é uma direção de descida e calcular a ddm (direção de descida máxima). O cálculo das derivadas parciais fornece $f'_{x_1} = x_2^2$ e $f'_{x_2} = 2x_1 x_2$, donde

$$\nabla f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_2^2 \\ 2x_1 x_2 \end{bmatrix} \implies g(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} 4 \\ 4 \end{bmatrix} = 4 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Como $\mathbf{d}^T g(\mathbf{x}^0) = 4 > 0$ a direção dada é de subida e não de descida. A ddm é $-4[1 \ 1]^T$. É interessante notar que uma direção no \mathbb{R}^n pode ser dada por um vetor qualquer pertencente a ela e assim a resposta a este item poderia ser $\gamma[1 \ 1]^T$ para qualquer $\gamma \in \mathbb{R}, \gamma < 0$. É comum, mas não obrigatório, apresentar direções por meio de vetores com normas unitárias.

Voltando ao método do gradiente, a direção de avanço \mathbf{d}^k em uma iteração qualquer já está determinada, falta-nos α_k , a quantidade de avanço nessa direção. Usaremos o que se chama **busca de linha** ou **em linha** ou **linear**. Sendo \mathbf{x}^k e \mathbf{d}^k conhecidos, o próximo ponto \mathbf{x}^{k+1} depende apenas do avanço α_k ou, para simplificar, α .

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k = \mathbf{x}^{k+1}(\alpha)$$

e assim $f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k)$ é uma função escalar que denotaremos por $\tilde{f}(\alpha)$. O avanço α_k que causa o maior decréscimo em f é aquele que minimiza $\tilde{f}(\alpha)$:

$$\alpha_k = \min \left\{ \tilde{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k) \right\}$$

Mas este é um problema de otimização escalar que pode ser resolvido de maneira visual, analítica, ou numérica, como já visto, em detalhes, no capítulo 2.

Exemplo 4.1.2 Para a função $f = x_1 x_2^2$, dado o ponto $\mathbf{x}^0 = [1 \ 2]^T$, calcular o avanço α_0 da primeira iteração do método do gradiente. A ddm já foi calculada no exemplo anterior: $\mathbf{d}^0 = [-1 \ -1]^T$

$$\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}^0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + \alpha \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \alpha \\ 2 - \alpha \end{bmatrix}$$

donde $f(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}^0) = \tilde{f}(\alpha) = (1 - \alpha)(2 - \alpha)^2 = -\alpha^3 + 5\alpha^2 - 8\alpha + 4$. Derivando e igualando a zero:

$$\tilde{f}'(\alpha) = -3\alpha^2 + 10\alpha - 8 = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \alpha_1 = 2 \quad \text{ou} \quad \alpha_2 = 4/3$$

O cálculo da derivada segunda resolve a dúvida:

$$\tilde{f}''(\alpha) = -6\alpha + 10 \quad \Longrightarrow \quad \tilde{f}''(\alpha_1) = -2 < 0 \quad \text{e} \quad \tilde{f}''(\alpha_2) = 2 > 0$$

A minimização é portanto atingida com $\alpha_0 = \alpha_2 = 4/3$.

O raciocínio empregado para a busca em linha é específico para uma iteração do método do gradiente, mas pode perfeitamente ser usado em um contexto mais geral. Sendo \mathbf{x} e \mathbf{d} vetores do \mathbb{R}^n , e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função suave podemos associar a ela a função escalar

$$\begin{aligned}\tilde{f} : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \alpha &\mapsto \tilde{f}(\alpha) = f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{d})\end{aligned}$$

Definição 4.1.1 A derivada $\tilde{f}' = d\tilde{f}/d\alpha$ é chamada de derivada direcional de f na direção \mathbf{d} .

Um raciocínio simples com o gradiente mostraria que a derivada direcional pode ser obtida de modo alternativo:

$$\tilde{f}'(\alpha_0) = \left. \frac{d\tilde{f}}{d\alpha} \right|_{\alpha_0} = \mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x} + \alpha_0 \mathbf{d})$$

Fazendo $\alpha_0 = 0$ temos a derivada direcional no próprio ponto \mathbf{x} : $\tilde{f}'(0) = \mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x})$. Se \mathbf{d} é a ddm temos $\tilde{f}'(0) = -[\nabla f(\mathbf{x})]^T \nabla f(\mathbf{x}) = -\|\nabla f(\mathbf{x})\|^2$ que é um valor certamente negativo o que comprova (como se ainda fosse necessário ...) que a direção é de descida.

Algoritmo 4.1.1 (Método da Descida Máxima)

Dados:

- $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave
- $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, ponto de partida
- $\varepsilon_g, \varepsilon_a, \varepsilon_r \in \mathbb{R}$, tolerâncias

Objetivo: Encontrar $\mathbf{x}^k \in \mathbb{R}^n$ suficientemente próximo do mínimo \mathbf{x}^* de f

Operações

1. $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^0$
2. Calcule $\nabla f(\mathbf{x}^k) = \mathbf{g}(\mathbf{x}^k)$
3. $\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\| < \varepsilon_g \longrightarrow \mathbf{x}^* = \mathbf{x}^k \longrightarrow FIM$
4. $\mathbf{d}^k = -\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|^{-1}$ ddm normalizada
5. $\tilde{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k)$
6. $\alpha_k = \min\{\tilde{f}(\alpha)\}$

$$7. \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$$

8. $f(\mathbf{x}^{k+1})$ está OK?

(a) *sim:* $\longrightarrow \mathbf{x}^* = \mathbf{x}^{k+1} \longrightarrow FIM$

(b) *não:* $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k+1} \longrightarrow$ volta para 2.)

Vários aspectos precisam ser explicados e comentados. O primeiro critério de parada, encarado na etapa 3.) acima, é simples, gradiente pequeno em um dado passo indica proximidade do mínimo e estamos feitos. O critério adicional aparece na etapa 8.) de modo muito vago; ele, na realidade, envolve dois pontos consecutivos suficientemente próximos, ou seja, quando

$$|f(\mathbf{x}^{k+1}) - f(\mathbf{x}^k)| < \varepsilon_a$$

pode-se parar. O escalar ε_a é uma tolerância absoluta, mas também se pode pensar em uma tolerância relativa ou porcentual. Se

$$\frac{|f(\mathbf{x}^{k+1}) - f(\mathbf{x}^k)|}{|f(\mathbf{x}^k)|} < \varepsilon_r$$

então paramos. Um modo de aproveitar os dois conceitos simultaneamente é através do critério

$$|f(\mathbf{x}^{k+1}) - f(\mathbf{x}^k)| < \varepsilon_a + \varepsilon_r |f(\mathbf{x}^k)|$$

onde se poderia usar, por exemplo, $\varepsilon_a = 10^{-6}$ e $\varepsilon_r = 0.01$ ou 1%. Assim, o teste específico da etapa 8.) seria verificar a validade da expressão acima. Para aumentar a segurança costuma-se exigir que o critério acima seja verificado em duas iterações consecutivas.

A etapa 2.) do método acima solicita o valor do gradiente em um dado ponto. Se a função f permitir, pode-se encontrar a expressão analítica para ∇f e aplicá-la ao ponto \mathbf{x}^k , caso contrário deve-se usar uma rotina numérica para o cálculo do gradiente. A etapa 6.) requer a minimização de uma função escalar, e os mesmos comentários acima se aplicam. Os métodos numéricos vistos no capítulo 2 podem ser utilizados. Falta comentar sobre o aspecto mais importante, o algoritmo apresentado acima funciona, converge?

4.1.1 Convergência do método de descida máxima

Justificativas detalhadas sobre a convergência deste método — e de quase todos os outros — não serão vistas nestas notas. Diremos apenas que o

método do gradiente converge. O avanço α_k é obtido minimizando a função $\tilde{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k)$ no k -ésimo passo. Isto quer dizer que

$$\left. \frac{d\tilde{f}}{d\alpha} \right|_{\alpha_k} = 0 = [\nabla f(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k)]^T \mathbf{d}^k$$

onde empregamos o conceito de derivada direcional. Mas $\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k = \mathbf{x}^{k+1}$ e isto acarreta $[\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})]^T \mathbf{d}^k = 0$ e consequentemente $[\mathbf{d}^{k+1}]^T \mathbf{d}^k = 0$, ou seja, duas direções de descida consecutivas quaisquer são perpendiculares. A conclusão é que o método avança em zig-zag com ângulos retos, como mostra a figura 4.2, e se os α_k forem decrescentes a sequência deve convergir.

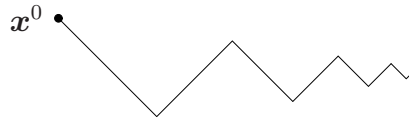


Figura 4.2: O método do gradiente avança em zig-zag com ângulos retos

Este arrazoado está longe de ser uma demonstração formal, mas serve bem aos propósitos atuais. Para ilustrar melhor estas idéias consideremos a função quadrática

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2a \end{bmatrix} \mathbf{x} = x_1^2 + ax_2^2 \quad a \in \mathbb{R}$$

Este exemplo é muito simples, f é convexa (para $a > 0$) e a origem é o mínimo. As curvas de nível são elipses concêntricas e as direções \mathbf{d}^k são tangentes a elas nos pontos \mathbf{x}^{k+1} . A figura 4.3 mostra, para $a = 1$, a função no \mathbb{R}^3 e as curvas de nível.

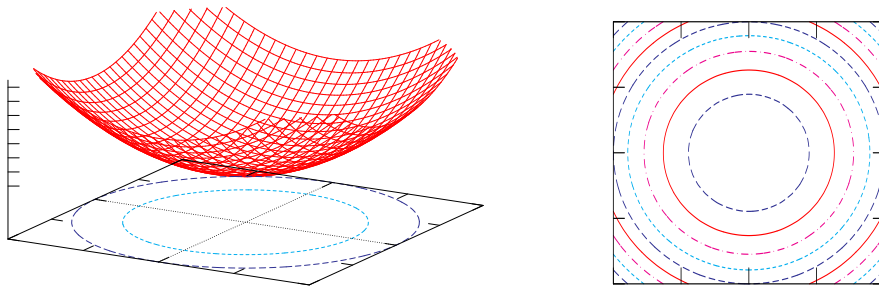


Figura 4.3: Visualizando o método do gradiente para uma quadrática

É imediato perceber que se $a = 1$ as elipses são circunferências e logo a primeira direção \mathbf{d}^0 aponta na direção do mínimo, para qualquer \mathbf{x}^0 . Quanto

maior o valor de a mais as elipses se alongam e pode-se prever uma convergência mais problemática. Alguns pontos continuam gerando raios diretos ao mínimo, aqueles nos eixos principais das elipses, mas para um inicializador \mathbf{x}^0 qualquer a convergência fica mais lenta. A figura 4.4 mostra a superfície da função no \mathbb{R}^3 e as curvas de nível para $a > 1$.

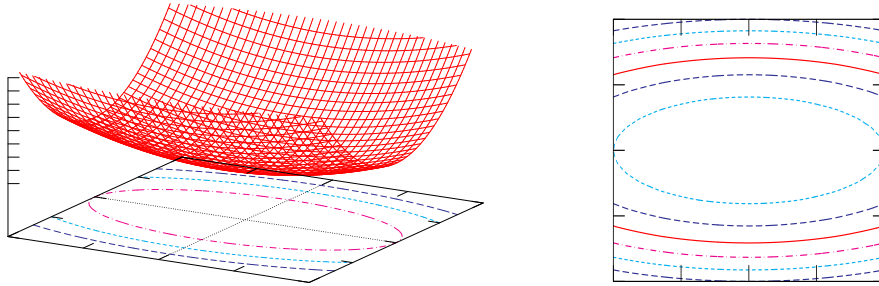


Figura 4.4: Quadrática e curvas de nível para $a > 1$

Demonstra-se que a convergência se relaciona ao condicionamento da Hessiana de f . Hessianas bem condicionadas nos pontos de interesse são excelentes para o método, causando convergências rápidas; no caso contrário há lentidão. O número de condição, ou de condicionamento de uma matriz pode ser definido, sob algumas condições, como λ^*/λ_* onde λ^* é o maior de seus autovalores e λ_* é o menor. Matrizes bem condicionadas apresentam números de condição próximos da unidade (seus autovalores estão próximos, agrupados, no plano complexo); matrizes mal condicionadas apresentam autovalores dispersos, números de condição elevados. A Hessiana da quadrática considerada pode ser obtida facilmente:

$$\nabla^2(f) = H = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2a \end{bmatrix}$$

onde, supondo $a > 1$, temos $\kappa(H) = a$, o que justifica analiticamente as idéias sugeridas graficamente. Muitas vezes problemas de convergência podem ser corrigidos alterando-se o condicionamento da Hessiana associada. Se a função do nosso exemplo fosse $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 9x_2^2$ teríamos $\kappa(H) = 9$ e a possibilidade de problemas. Escolhendo novas variáveis $w_1 = x_1$ e $w_2 = 3x_2$ temos

$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 9x_2^2 = w_1^2 + w_2^2 = g(\mathbf{w})$$

A nova função tem Hessiana bem condicionada e se presta muito bem ao método de descida máxima. A solução ótima \mathbf{w}^* deve ser reconvertida para as variáveis originais \mathbf{x} , claro.

De modo geral, se um problema de minimização de uma função $f(\mathbf{x})$ apresentar problemas, pode-se procurar uma matriz real T $n \times n$, inversível tal que $\mathbf{x} = T\mathbf{w}$ ou, equivalentemente, $\mathbf{w} = T^{-1}\mathbf{x}$. O problema relativo a uma dada f é modificado lembrando que $f(\mathbf{x}) = f(T\mathbf{w}) = g(\mathbf{w})$.

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \quad \text{é equivalente a} \quad \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n} g(\mathbf{w})$$

Uma escolha criteriosa de T permite alterar condicionamentos e acelerar convergências. Isto se chama **escalonar** o problema. Vejamos, finalmente, um exemplo de aplicação de método de descida máxima.

Exemplo 4.1.3 Efetuar uma iteração do método de descida máxima para a função $f(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$ com $\mathbf{x}^0 = [0 \ 3]^T$. As derivadas parciais são: $f'_{x_1} = 4(x_1 - 2)^3 + 2(x_1 - 2x_2)$ e $f'_{x_2} = -4(x_1 - 2x_2)$ com o que se pode calcular o gradiente no ponto inicial:

$$\nabla f(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} -44 \\ 24 \end{bmatrix} \implies \mathbf{d}^0 = -\nabla f(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} 11 \\ -6 \end{bmatrix}$$

Notem que a direção é apenas uma das possíveis, e foi escolhida por apresentar números inteiros e pequenos. Avançando nesta direção temos

$$\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}^0 = \begin{bmatrix} 11\alpha \\ 3 - 6\alpha \end{bmatrix} \implies \tilde{f}(\alpha) = (11\alpha - 2)^4 + (11\alpha - 6 + 12\alpha)^2$$

Derivando esta função obtemos $\tilde{f}' = 44(11\alpha - 2)^3 + 46(23\alpha - 6)$, para a qual a obtenção de raízes não é das tarefas mais simples e pediria, talvez, um método numérico.

4.2 Método do gradiente conjugado

O método do gradiente pode ter convergência lenta, e além disso, nem mesmo nos casos considerados simples, como o das funções quadráticas, pode-se garantir que ele consiga convergência exata em um número finito de passos, e para qualquer ponto inicial. Como melhorar esses aspectos? Tal façanha é conseguida, para funções quadráticas, pelo Método do Gradiente Conjugado, devido a Fletcher e Reeves. Dado o sucesso do MGC para estas funções, espera-se que ele funcione melhor do que o MDM no caso geral.

No método do gradiente a direção de descida é sempre a direção de descida máxima: $\mathbf{d}^{k+1} = -\nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) = -g(\mathbf{x}^{k+1}) = \text{ddm}$. Duas direções de descida consecutivas \mathbf{d}^k e \mathbf{d}^{k+1} são sempre perpendiculares, e talvez aqui resida a

causa das imperfeições do método. Fazendo $\mathbf{d}^{k+1} = \text{ddm} + \text{desvio}$ para a direção anterior o efeito seria o de suavizar as mudanças de direção e, espera-se, o de melhorar a convergência. Pode-se atingir isso da seguinte maneira.

$$\mathbf{d}^{k+1} = -g(\mathbf{x}^{k+1}) + \beta_k \mathbf{d}^k \quad (4.1)$$

onde o escalar β_k mede uma certa inércia. Como encontrar este parâmetro? Valores pequenos de β_k indicam pouca mudança, ou seja, variação ainda brusca de direção (que pouco se afasta dos 90° originais), ao passo que valores elevados deixam a nova direção mais próxima da antiga. No MGC a determinação de β_k é feita impondo que \mathbf{d}^k e \mathbf{d}^{k+1} sejam direções conjugadas.

Dada uma matriz real A $n \times n$, positiva definida, os vetores $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ são direções conjugadas com relação a A quando $\mathbf{v}^T A \mathbf{w} = 0$. No MGC as primeiras direções de descida são conjugadas: $\mathbf{d}^i{}^T A \mathbf{d}^j = 0$ para $i \neq j$ e $i, j < n$ e A a Hessiana da função no ponto. Os avanços α_k são obtidos por busca linear, como antes. O detalhamento será feito para uma função quadrática.

$$f(\mathbf{x}) = q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

onde $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ e $A > 0$, para garantir a existência do mínimo. Em um ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ qualquer o gradiente é dado por $\nabla f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} + \mathbf{b}$. Supondo que $\mathbf{x}^k, \mathbf{d}^k \in \mathbb{R}^n$ são conhecidos a determinação do próximo ponto é regida por $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$ onde α_k é obtido por busca linear, minimizando $\tilde{f}(\alpha) = q(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k)$. Usando o conceito de derivada direcional e o fato de f ser quadrática, temos uma fórmula simples para esta etapa.

$$\frac{d\tilde{f}}{d\alpha} = [g(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k)]^T \mathbf{d}^k = \mathbf{d}^k{}^T [A(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k) + \mathbf{b}] = \mathbf{d}^k{}^T [\alpha A \mathbf{d}^k + g(\mathbf{x}^k)]$$

A quantidade de avanço pode ser obtida anulando esta expressão.

$$\frac{d\tilde{f}}{d\alpha} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha \mathbf{d}^k{}^T A \mathbf{d}^k + \mathbf{d}^k{}^T g(\mathbf{x}^k) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha = \alpha_k = - \frac{\mathbf{d}^k{}^T g(\mathbf{x}^k)}{\mathbf{d}^k{}^T A \mathbf{d}^k}$$

Ainda há algo a estabelecer com as derivadas direcionais, que será útil mais à frente. O valor α_k é minimizador, então

$$\left. \frac{d\tilde{f}}{d\alpha} \right|_{\alpha_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{d}^k{}^T g(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{d}^k{}^T g(\mathbf{x}^{k+1}) = 0 \quad (4.2)$$

Agora o ponto crucial, a escolha da nova direção \mathbf{d}^{k+1} . Usaremos a equação (4.1), aqui repetida por conveniência.

$$\mathbf{d}^{k+1} = -g(\mathbf{x}^{k+1}) + \beta_k \mathbf{d}^k$$

A determinação exata de β_k é feita impondo que \mathbf{d}^k e \mathbf{d}^{k+1} sejam direções conjugadas. No que segue denotaremos $g(\mathbf{x}^{k+1})$ por \mathbf{g}^{k+1} .

$$\begin{aligned}\mathbf{d}^{kT} A \mathbf{d}^{k+1} = 0 &\Rightarrow \mathbf{d}^{kT} A(\beta_k \mathbf{d}^k - \mathbf{g}^{k+1}) = 0 \\ &\Rightarrow \beta_k \mathbf{d}^{kT} A \mathbf{d}^k = \mathbf{d}^{kT} A \mathbf{g}^{k+1} = (\mathbf{g}^{k+1})^T A \mathbf{d}^k \\ &\Rightarrow \beta_k \mathbf{d}^{kT} A \mathbf{d}^k = (\mathbf{g}^{k+1})^T (\mathbf{g}^{k+1} - \mathbf{g}^k) / \alpha_k\end{aligned}$$

onde usamos $\mathbf{d}^k = (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) / \alpha_k$ e, da expressão do gradiente de uma função quadrática, $A\mathbf{x} = g(\mathbf{x}) - \mathbf{b} \forall \mathbf{x}$. Entrando agora com a expressão deduzida algumas linhas atrás para α_k somos levados a

$$-\beta_k \mathbf{d}^{kT} \mathbf{g}^k = (\mathbf{g}^{k+1})^T (\mathbf{g}^{k+1} - \mathbf{g}^k) \quad (4.3)$$

A equação (4.2) diz que $\mathbf{d}^{kT} \mathbf{g}^{k+1} = 0$, mas \mathbf{d}^k pode também ser obtido de 4.1, donde

$$\frac{1}{\beta_k} (\mathbf{d}^{k+1} + \mathbf{g}^{k+1})^T \mathbf{g}^{k+1} = 0 \Rightarrow (\mathbf{d}^{k+1})^T \mathbf{g}^{k+1} = -(\mathbf{g}^{k+1})^T \mathbf{g}^{k+1}$$

Considerando esta relação no passo anterior (ou seja, fazendo $k = k - 1$) temos $(\mathbf{d}^k)^T \mathbf{g}^k = -(\mathbf{g}^k)^T \mathbf{g}^k$ que pode ser substituída em 4.3 fornecendo — finalmente! — uma expressão simpática para β_k , em função apenas dos gradientes.

$$\beta_k = \frac{(\mathbf{g}^{k+1})^T (\mathbf{g}^{k+1} - \mathbf{g}^k)}{\mathbf{g}^{kT} \mathbf{g}^k} = \frac{\|\mathbf{g}^{k+1}\| - [\mathbf{g}^{k+1}]^T \mathbf{g}^k}{\|\mathbf{g}^k\|} \quad (4.4)$$

O uso desta fórmula conduz ao MGC na sua forma de Polak-Rebière. No método da descida máxima os gradientes em iterações consecutivas eram perpendiculares, e como há muitas coisas em comum entre estes métodos, analisemos o que acontece aqui.

$$\begin{aligned}(\mathbf{g}^{k+1})^T \mathbf{g}^k &= (\mathbf{g}^{k+1})^T (-\mathbf{d}^k + \beta_{k-1} \mathbf{d}^{k-1}) \\ &= \beta_{k-1} (\mathbf{g}^{k+1})^T \mathbf{d}^{k-1} \\ &= \beta_{k-1} (A\mathbf{x}^{k+1} + \mathbf{b})^T \mathbf{d}^{k-1} \\ &= \beta_{k-1} (A\mathbf{x}^k + \alpha_k A \mathbf{d}^k + \mathbf{b})^T \mathbf{d}^{k-1} \\ &= \beta_{k-1} (\mathbf{g}^k + \alpha_k A \mathbf{d}^k)^T \mathbf{d}^{k-1} \\ &= \beta_{k-1} (\mathbf{g}^{kT} + \alpha_k \mathbf{d}^{kT} A) \mathbf{d}^{k-1} \\ &= 0\end{aligned}$$

Confiando em que os leitores diligentes aproveitarão a oportunidade para exercitar seus dotes algébricos e perseguirão os detalhes desta demonstração

até se convencerem de que o resultado final é mesmo nulo, nós prosseguimos e passamos ao resultado:

$$\beta_k = \frac{(\mathbf{g}^{k+1})^T \mathbf{g}^k}{\mathbf{g}^{kT} \mathbf{g}^k} = \frac{\|\mathbf{g}^{k+1}\|}{\|\mathbf{g}^k\|} \quad (4.5)$$

Esta é uma fórmula mais simples que a anterior, e as versões do MGC baseadas nela são chamadas de Fletcher-Reeves. Falta apenas um pequeno detalhe com relação a \mathbf{d}^0 , a primeira direção de descida. Ela é encontrada da maneira natural, pelo gradiente: $\mathbf{d}^0 = -\mathbf{g}^0$.

Algoritmo 4.2.1 (Método do gradiente conjugado)

- Dados:**
- $f(\mathbf{x}) = (1/2)\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}$, quadrática com $A > 0$
 - $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, ponto de partida
- Objetivo:** Encontrar o mínimo \mathbf{x}^* de f
- Operações**
- $\mathbf{g}^0 = A\mathbf{x}^0 + \mathbf{b}$; $\mathbf{d}^0 = -\mathbf{g}^0$; *direção inicial*
 - $\alpha_0 = -\mathbf{d}^{0T} \mathbf{g}^0 / (\mathbf{d}^{0T} A \mathbf{d}^0)$; *avanço inicial*
 - $\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 + \alpha_0 \mathbf{d}^0$; *ponto #1*
 - $\mathbf{g}^1 = A\mathbf{x}^1 + \mathbf{b}$; *gradiente #1*
 - $\beta_0 =$ *Polak-Rebière ou Fletcher-Reeves*
 - $\mathbf{d}^1 = -\mathbf{g}^1 + \beta_0 \mathbf{d}^0$; *direção #1*
 - $\alpha_1 = -\mathbf{d}^{1T} \mathbf{g}^1 / (\mathbf{d}^{1T} A \mathbf{d}^1)$; *avanço # 1*
 - $\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \alpha_1 \mathbf{d}^1$; *ponto #2*
 - \vdots

Onde parar? Este é o aspecto notável do método, cuja demonstração está ausente, como quase sempre: o ponto \mathbf{x}^n é a solução exata do problema! Nada de aproximações ou critérios de parada, o mínimo de funções quadráticas é obtido de modo exato e em um número de passos finito e igual à dimensão n do problema. Beleza!

As expressões para β_k acima independem de A e de \mathbf{b} , ou seja, da natureza quadrática de f , e então é lícito pensar em usar este método para uma função

objetivo qualquer. Mas há preços a pagar . . . a busca linear deve ser resolvida por um método numérico qualquer, ou pela derivação analítica de \tilde{f} , e não mais pela agradável formuleta aplicada às quadráticas. Outro incômodo é a volta da natureza iterativa do processo, com a necessidade de critérios de parada, tolerâncias e todo o bataclan. No caso de aplicação geral do método, a cada n iterações um passo especial seria inserido, onde se usaria a direção de descida máxima pura, dada pelo gradiente.

Exemplo 4.2.1 Usar o MGC para $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 3x_2^2 + 2x_1 - 12x_2$ com $\mathbf{x}^0 = [4 \ 4]^T$. A forma canônica para a quadrática é sempre útil:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 2 \\ -12 \end{bmatrix}$$

Os passos são sempre diretos:

$$\mathbf{g}^0 = \begin{bmatrix} 10 \\ 12 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{d}^0 = -\mathbf{g}^0 = -2 \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix}; \quad \alpha_0 = 61/266 = 0.2293$$

E o resto fica para quem? É, leitores . . .

O entusiasmo com a rápida convergência do MGC no caso das quadráticas deve ser encarado com a cabeça fria, pois afinal estas funções são muito simples e seus mínimos, quando existem, podem ser encontrados diretamente, sem qualquer necessidade de algoritmos ou iterações. Para a quadrática $f(\mathbf{x}) = (1/2)\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{b}$ com $A > 0$, o ponto $\mathbf{x}^* = -A^{-1}\mathbf{b}$ é minimizador, e a convergência em n passos é um desperdício de tempo e energia, e não uma vantagem do método. Se para funções quadráticas pode-se usar uma fórmula, por que um algoritmo? Os méritos do MGC devem ser julgados a partir de sua aplicação a funções gerais.

4.3 Métodos de Newton

Os métodos de Newton são baseados na facilidade de se minimizar uma quadrática. Em cada passo encontramos uma aproximação quadrática $q(\mathbf{x})$ para a função objetivo $f(\mathbf{x})$, cujo mínimo será o próximo passo. Assim, para o vetor $\mathbf{x}^k \in \mathbb{R}^n$ podemos, lembrando o teorema de Taylor, escrever

$$\begin{aligned} q(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}^k) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^T \nabla f(\mathbf{x}^k) + (1/2)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k) \\ &= f(\mathbf{x}^k) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^T \mathbf{g}^k + (1/2)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^T \mathbf{G}^k(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k) \end{aligned}$$

onde os símbolos g^k e G^k denotam, respectivamente, o gradiente e a Hessiana de f em \mathbf{x}^k . Supondo $G^k > 0$, a expressão acima é uma quadrática em $(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)$, com ponto de mínimo em

$$\mathbf{x} - \mathbf{x}^k = -[G^k]^{-1}g^k$$

A lei de iteração é clara, chamando $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}$ temos

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{d}^k \quad \text{onde} \quad \mathbf{d}^k = -[G^k]^{-1}g^k = -[\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)]^{-1}\nabla f(\mathbf{x}^k)$$

Exemplo 4.3.1 Dada $f = 2x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_2 + x_1 - x_2$ e $\mathbf{x}^0 = [1 \ 5]^T$ determinar a direção de descida pelo método de Newton.

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \Rightarrow \nabla^2 f = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} = G^0$$

O gradiente e a direção procurada são

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \text{donde} \quad g^0 = \begin{bmatrix} 15 \\ 11 \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{d}^0 = - \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 15 \\ 11 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \end{bmatrix}$$

O mínimo de f , calculado pela fórmula analítica, é

$$\mathbf{x}^* = -[\nabla^2 f]^{-1}\mathbf{b} = - \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1.5 \end{bmatrix}$$

que seria atingido na primeira iteração: $\mathbf{x}^0 + \mathbf{d}^0 = \mathbf{x}^*$.

O método de Newton, ao contrário dos anteriores, é considerado de segunda ordem, porque o cálculo das direções \mathbf{d}^k depende da Hessiana, além do gradiente. Quando a função objetivo é quadrática, como no exemplo acima, Newton garante convergência em apenas uma iteração! Nada que mereça tanto espanto e exclamação, pois neste caso temos uma fórmula para obtenção direta do mínimo e não um método numérico.

No caso geral, partindo de um inicializador \mathbf{x}^0 a sequência $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{d}^k$ poderá levar ao mínimo procurado \mathbf{x}^* , e por ser este um método de segunda ordem, ele converge rapidamente, quando converge. Este é o gargalo, estreito, do método de Newton, a convergência. É fácil entender o porque dos problemas, eles estão associados com a Hessiana. Em primeiro lugar, a direção $\mathbf{d}^k = -[G^k]^{-1}g^k$ desce ao mínimo porque se supõe que a quadrática

associada tenha um mínimo, ou seja, sua matriz $A > 0$. É perfeitamente possível que a função f não tenha sido informada deste fato, e assim sua Hessiana em um dado ponto pode não ser positiva definida.

O caso escalar permite uma visualização clara, como sempre acontece. Na figura 4.5, gráfico da esquerda, o ponto \mathbf{x}^k está em uma região de “concavidade para baixo” e isto corresponde à derivada segunda (Hessiana) negativa. O método de Newton inicializado neste ponto não convergirá.

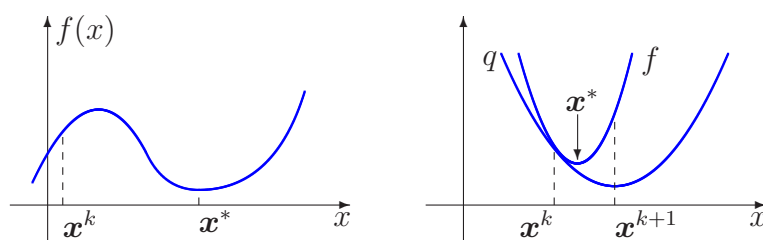


Figura 4.5: Casos problemáticos para o método de Newton

Outro caso problemático é ilustrado no gráfico da direita da mesma figura. A Hessiana de $q(x)$ é positiva, como deveria ser, mas é constante, ao passo que a Hessiana de $f(x)$ é positiva também, mas varia, e com isto a curvatura desta linha é muito mais acentuada. O resultado é que o próximo ponto, \mathbf{x}^{k+1} , se afasta do mínimo \mathbf{x}^* . Em resumo, este método é muito sensível com relação ao inicializador, e a situação de falha na convergência é comum. Já no cálculo de raízes para o caso escalar Newton apresentava estas mesmas mazelas.

Exemplo 4.3.2 Aplicar o método de Newton para minimizar as funções:

1. $f(x) = x^3 - 6x^2 + 9x + 1, \quad x_0 = 0$
2. $f(x) = 5x^4 - 20x^3 + 30x^2 - 20x + 5, \quad x_0 = 0$

4.4 Métodos de Newton modificados

Muitas variações existem, mostraremos apenas um possível caminho. A meta geral é corrigir os problemas de convergência indicados, para que se possa preservar a grande vantagem do método, sua rapidez. As iterações são governadas, lembremos, por

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{d}^k \quad \text{onde} \quad \mathbf{d}^k = -[\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^k) = -[G^k]^{-1} g^k$$

Aceita-se bem, intuitivamente, o fato de que a diminuição do avanço em uma dada direção \mathbf{d}^k evita a divergência. Isto pode ser conseguido por um α_k não mais unitário como acima, mas obtido por uma busca linear.

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k \quad \text{onde} \quad \alpha_k \quad \text{minimiza} \quad \tilde{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k)$$

Outro perigo apontado era o sinal de Hessiana $G^k = \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$. Esta matriz pode ser usada no método apenas se for positiva definida. A correção de sinal é conseguida por um truque matricial simples, apresentado sem demonstração. Sendo I_n a matriz identidade de ordem n , é sempre possível encontrar $\gamma \in \mathbb{R}$ tal que

$$F^k = G^k + \gamma I_n$$

tenha seus autovalores positivos e possa, assim, ser usada para gerar uma direção \mathbf{d}^k que seja realmente de descida:

$$\mathbf{d}^k = -[F^k]^{-1} g^k = -[\nabla^2 f(\mathbf{x}^k) + \gamma I_n]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^k)$$

Some-se a uma quantidade negativa algo suficientemente positivo e o resultado será positivo; este o princípio, elementar, desse artifício. Para garantir boas propriedades numéricas os autovalores de F^k não devem estar muito próximos de zero, e a escolha de γ deve levar isto em conta.

Algoritmo 4.4.1 (Método de Newton modificado)

Dados:

- $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave
- $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, ponto de partida
- $0 < \delta \in \mathbb{R}$, tolerância para os $\lambda_i(F^k)$

Objetivo: Encontrar um mínimo \mathbf{x}^* de f

Operações

1. $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^0$;
2. $g^k = \nabla f(\mathbf{x}^k)$; $G^k = \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$;
3. $\gamma \in \mathbb{R}$ tal que $\lambda_i(G^k + \gamma I_n) > 0$;
4. $F^k = G^k + \gamma I_n$;
5. $\mathbf{d}^k = -[F^k]^{-1} g^k$;
6. $\tilde{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k)$;
7. $\alpha_k = \min \tilde{f}(\alpha)$;

8. $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$;
9. tudo OK: $\longrightarrow \mathbf{x}^* = \mathbf{x}^{k+1} \longrightarrow FIM$
10. volta para 2.

A etapa desencorajadora deste método é, sem dúvida, o cálculo da Hessiana G^k e de seus autovalores. Fazer isto numericamente pode ser trabalhoso e cheio de armadilhas, e assim este método é recomendado apenas quando a obtenção analítica da Hessiana for possível e cômoda.

4.5 Métodos de quase Newton

O tema básico destes métodos é o de facilitar o cálculo da Hessiana. Deseja-se chegar a ela sem derivar duas vezes a função objetivo f , a partir das informações contidas no gradiente. As iterações seriam regidas por

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k = \mathbf{x}^k - \alpha_k [F^k]^{-1} g^k$$

onde F^k contém informações sobre a Hessiana G^k e deve ser obtida de modo simples e cômodo. O avanço α_k , como sempre, vem da busca linear, pela minimização de $\tilde{f}(\alpha)$. A tarefa de obter F^k é substituída pela de obter sua inversa $H^k = [F^k]^{-1}$. Em cada passo esta matriz deve exibir, de algum modo, características da Hessiana, ou melhor, de sua inversa. Vejamos como conseguir isso. O gradiente de f pode ser expandido com auxílio de Taylor em torno de \mathbf{x}^k :

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}^k) + \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k) + \dots$$

Retendo apenas a parte linear e usando notação simplificada:

$$g(\mathbf{x}) = g^k + G^k(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)$$

Considerando que o ponto de teste \mathbf{x} é o próximo vetor do algoritmo, ou seja, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{k+1}$, temos

$$G^k(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) = g^{k+1} - g^k$$

Nota-se que H , em cada iteração, pode ser delimitada pela relação

$$H^{k+1} \gamma^k = \delta^k \quad \text{onde} \quad \begin{cases} \gamma^k = g^{k+1} - g^k \\ \delta^k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \end{cases}$$

chamada de condição de quase-Newton. Uma possibilidade para se gerar matrizes H satisfazendo esta restrição é a apresentada por Davidon-Fletcher-Powell (DFP)

$$H^{k+1} = H^k + \alpha \mathbf{u} \mathbf{u}^T + \beta \mathbf{v} \mathbf{v}^T$$

onde $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ devem ser determinados de modo a satisfazer a condição de quase-Newton:

$$H^k \gamma^k + \alpha \mathbf{u} \mathbf{u}^T \gamma^k + \beta \mathbf{v} \mathbf{v}^T \gamma^k = \delta^k$$

Uma possível solução é dada por

$$\mathbf{u} = \delta^k \quad \mathbf{v} = H^k \gamma^k \quad \alpha = (\mathbf{u}^T \gamma^k)^{-1} \quad \beta = -(\mathbf{v}^T \gamma^k)^{-1}$$

como os leitores diligentes, sempre eles, verificarão. Com isto a lei DFP fica

$$H^{k+1} = H - \frac{H \gamma \gamma^T H}{\gamma^T H \gamma} + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma}$$

onde o índice k foi omitido do lado direito. Esta lei de formação tem características interessantes: se H^k é simétrica e positiva definida então H^{k+1} também o será. Isto é importante porque garante que as direções $\mathbf{d}^k = -H^k \mathbf{g}^k$ serão efetivamente de descida. Para assegurar esta propriedade basta escolher $[H^0]^T = H^0 > 0$, o que é normalmente feito com $H^0 = I$.

Quando aplicada a funções quadráticas a lei acima garante que $H^n = A^{-1}$ e isto significa convergência exata em n passos, como no método do gradiente conjugado. Outra fórmula de recorrência baseada na condição de quase-Newton é a de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS):

$$H^{k+1} = H - \frac{\delta \gamma^T H + H \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} + \left(1 + \frac{\gamma^T H \gamma}{\delta^T \gamma}\right) \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma}$$

Algoritmo 4.5.1 (Método de quase Newton)

- Dados:**
- $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave
 - $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, ponto de partida

Objetivo: Encontrar um mínimo \mathbf{x}^* de f

Operações

1. $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^0$; $H^k = H^0 = I$
2. $\mathbf{g}^k = \nabla f(\mathbf{x}^k)$;
3. $\mathbf{d}^k = -H^k \mathbf{g}^k$;

4. $\tilde{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k);$
5. $\alpha_k = \min \tilde{f}(\alpha);$
6. $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k;$
7. *tudo OK:* $\longrightarrow \mathbf{x}^* = \mathbf{x}^{k+1} \longrightarrow FIM$
8. $\delta^k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$
9. $g^{k+1} = \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}); \gamma^k = g^{k+1} - g^k;$
10. $H^{k+1} = \quad DFP \text{ ou } BFGS$
11. $k = k + 1 \longrightarrow \text{vai para } \mathcal{B}.$

4.6 Método do politopo

A generalização dos métodos escalares de intervalo (Fibonacci, seção áurea) para o caso vetorial é problemática, pois a carga computacional cresce exponencialmente com n , é a praga da dimensão. O que existe é algo apenas inspirado na idéia: procuramos regiões $R_0, R_1, \dots, R_k, \dots$ do \mathbb{R}^n que se tornem cada vez menores e cada vez mais próximas da solução, mas, e aqui entra a diferença, R_{k+1} não deve estar necessariamente contida em R_k , e o valor procurado \mathbf{x}^* não precisa estar contido em uma dada região da sequência.

Capítulo 5

Otimização Geral I

As bases da **Otimização Livre** ou **Irrestrita** já foram apresentadas em capítulos anteriores, para os casos escalar e vetorial. A meta agora é mais sofisticada: minimizar uma função real da variável vetorial \mathbf{x} quando esta variável não mais percorre o \mathbb{R}^n de maneira livre, mas está sujeita a determinadas restrições, ou seja, deve pertencer a certas regiões dele. Este problema, também chamado de **Problema de Minimização Não Linear Com Restrições** ou **Problema Geral de Otimização** — **PGO** — ou simplesmente **Problema de Programação Não Linear** pode ser formulado como

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \text{RV} \subset \mathbb{R}^n$$

onde RV, a chamada **Região Viável**, engloba os pontos do \mathbb{R}^n por onde a variável \mathbf{x} pode excursionar livremente. Este conjunto é normalmente delimitado pelas **restrições**. Na próxima formulação, mais detalhada, a RV é explicitamente definida pelas restrições.

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad \begin{cases} c_i(\mathbf{x}) = 0 & i = 1, 2, \dots, k \\ c_i(\mathbf{x}) \geq 0 & i = k + 1, \dots, m \end{cases}$$

A função $f(\mathbf{x})$ que se deseja minimizar é a **função objetivo**, o termo s.a. deve ser lido como “sujeito a”, as k primeiras restrições são as **restrições de igualdade**, e as outras, obviamente, são as de **desigualdade**. Quando se procura um máximo de uma função $h(\mathbf{x})$, a mesma estrutura acima vale, desde que se use como função objetivo $f(\mathbf{x}) = -h(\mathbf{x})$. **Pontos Viáveis** são os pontos que satisfazem as restrições. A região viável RV, o conjunto destes pontos, pode ser definida formalmente:

$$\text{RV} = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \mid c_i(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, k \text{ e } c_j(\mathbf{v}) \geq 0 \quad \forall j = k + 1, \dots, m\}$$

Apenas na RV buscaremos nossas soluções, é óbvio.

Exemplo 5.0.1 Queremos minimizar $f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2$ com as restrições

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ x_1^2 + x_2^2 \geq 0 \end{cases}$$

Os leitores devem identificar os pontos do \mathbb{R}^2 que formam a RV acima descrita. O que muda na RV quando a segunda restrição é uma desigualdade do tipo “menor ou igual”?

5.1 Soluções do PGO

Mais uma vez recorremos ao caso escalar, pela facilidade de visualização; as conclusões, entretanto, são gerais. A otimização livre da função esboçada na figura 5.1 leva a um único mínimo x^* , obtido trivialmente. Se a região viável é dada pelos pontos $a \leq x \leq b$ então há mais soluções além do minimizador x^* : os pontos a e b , as extremidades do intervalo, são agora maximizadores. Quando a otimização é restrita ao intervalo $a \leq x \leq c$ o ponto $f(a)$ será um máximo e $f(c)$ um mínimo.

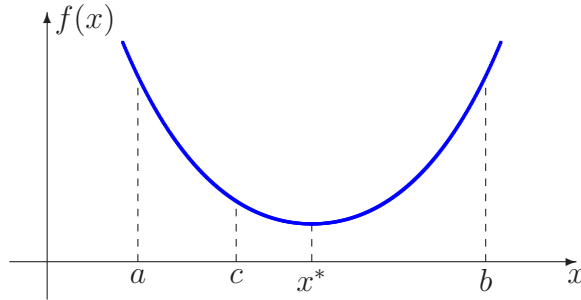


Figura 5.1: Soluções quando \mathbf{x} tem variação restrita

Os mínimos globais ou locais de f são as soluções procuradas quando não há restrições, mas quando elas existem, estes extremos podem não ser as únicas soluções. Nestes casos o PGO pode ainda ter soluções em pontos onde a função objetivo não apresenta extremos, como ilustrado na figura acima. Torna-se necessário definir o que seriam as soluções do Problema de Otimização em seu caso mais geral, com restrições.

Definição 5.1.1 O ponto $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é uma **Solução Local Forte** do PGO quando existir um real $\delta > 0$ tal que

$$\begin{cases} f(\mathbf{x}) \text{ é definida } \forall \mathbf{x} \in \text{RV tal que } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta \\ f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}^*) \forall \mathbf{x} \in \text{RV}, \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^* \text{ tal que } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta \end{cases}$$

Ainda podem existir soluções fracas:

Definição 5.1.2 O ponto $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é uma **Solução Local Fraca** do PGO quando existir um real $\delta > 0$ tal que

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\mathbf{x}) \text{ é definida } \forall \mathbf{x} \in \text{RV} \text{ tal que } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta \\ f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*) \quad \forall \mathbf{x} \in \text{RV}, \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*, \text{ tal que } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta \\ \mathbf{x}^* \text{ não é uma solução local forte} \end{array} \right.$$

Buscar soluções do PGO com base apenas nas definições acima pode ser impraticável, a menos de casos muito especiais com RVs pequenas. Precisamos de mais teoria, e ela passa a ser apresentada agora, a partir dos casos mais simples. De um modo geral ela se aplica quando as funções objetivo e as restrições são suficientemente suaves. Entenderemos que uma função é suficientemente suave quando for diferenciável pelo menos duas vezes.

5.2 Otimização sem restrições

As restrições de igualdade e desigualdade não estão presentes, conduzindo a casos mais simples. Dependendo da função objetivo temos casos já analisados anteriormente. Os resultados analíticos serão reapresentados sucintamente nesta seção. Para funções escalares o PGO é particularizado para

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \text{RV} = \mathbb{R}$$

ou seja, não existem restrições e as soluções são os mínimos “normais” de f .

Teorema 5.2.1 (Condições Necessárias de Otimalidade) Sendo f suficientemente suave e $x^* \in \mathbb{R}$ um mínimo local de f então

$$f'(x^*) = 0$$

e ainda a condição de segunda ordem $f''(x^*) \geq 0$.

Os mínimos locais de uma função são pontos estacionários, e a derivada segunda é não negativa neles. Se procuramos as soluções do PGO, este resultado restringe o universo da busca aos pontos estacionários com segundas derivadas não negativas. Para efetivamente garantir que pontos deste universo solucionam o PGO precisamos de outro resultado:

Teorema 5.2.2 (Condições Suficientes de Otimalidade) *Seja f suficientemente suave, seja $x^* \in \mathbb{R}$ tal que*

1. $f'(x^*) = 0$
2. $f''(x^*) > 0$

Então x^ será um mínimo local forte de f .*

Usar as CNO (condições necessárias de otimalidade) e depois as CSO (condições suficientes de otimalidade) leva a uma maneira formal e correta de encontrar os mínimos de uma dada f . São estes os teoremas que legitimam a conhecida associação entre mínimos e “derivar e igualar a zero”. Quando f não é suficientemente suave estamos em apuros; algumas vezes o conceito de derivadas laterais pode ajudar. A generalização para o caso vetorial, com gradientes entrando em lugar das derivadas é simples e direta e foi analisada anteriormente, na seção 3.2.1, onde as demonstrações dos resultados foram feitas, com o auxílio da expansão de f em série de Taylor.

5.3 Otimização com Restrições

Seja novamente o PGO em sua formulação mais geral, aqui repetida.

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad \begin{cases} c_i(\mathbf{x}) = 0 & i = 1, 2, \dots, k \\ c_i(\mathbf{x}) \geq 0 & i = k+1, \dots, m \end{cases}$$

Os casos mais simples de analisar e resolver acontecem quando as restrições $c_i(\mathbf{x})$ são funções lineares:

$$c_i(\mathbf{x}) = a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n + \beta_i = \mathbf{x}^T \mathbf{a}_i + \beta_i \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{a}_i = [a_{i1} \ a_{i2} \ \dots \ a_{in}]^T \in \mathbb{R}^n$ e $\beta_i \in \mathbb{R}$. As restrições de igualdade e as de desigualdade ficam, respectivamente

$$\mathbf{x}^T \mathbf{a}_i + \beta_i = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{x}^T \mathbf{a}_i = -\beta_i = b_i \quad (5.2)$$

$$\mathbf{x}^T \mathbf{a}_i + \beta_i \geq 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{x}^T \mathbf{a}_i \geq -\beta_i = b_i \quad (5.3)$$

5.4 Restrições Lineares de Igualdade

Quando todas as m restrições são de igualdade e lineares temos o seguinte problema, abreviadamente chamado de PGORLI ou apenas ORLI ou RLI:

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad \mathbf{x}^T \mathbf{a}_i + \beta_i = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m < n$$

A desigualdade $m < n$ acima se explica porque se $m = n$ as próprias restrições (supostas independentes) determinam um ponto único no \mathbb{R}^n e não “sobra espaço” para a otimização. Lembrando as equações (5.1) e (5.2) é possível escrever

$$c_i(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{a}_i + \beta_i = \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + \beta_i = [a_{i1} \ a_{i2} \ \cdots \ a_{in}] \mathbf{x} + \beta_i \quad (5.4)$$

o que leva à formação das seguintes matrizes

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = A \quad \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix} = -\mathbf{b}$$

e permite a formulação matricial do PGORLI:

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

onde A é uma matriz $m \times n$ cujas linhas são as restrições \mathbf{a}_i^T e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ tem como elementos os $b_i = -\beta_i$. A hipótese, muito natural, de restrições linearmente independentes leva a $\rho(A) = m$ ou seja, o posto da matriz A é m , o seu número de linhas.

Exemplo 5.4.1 Minimizar $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1 - 2x_2$ com a restrição $c(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 1 = 0$. Usando notação matricial para a quadrática e a restrição no PGORLI temos

$$\min f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad [1 \ 1] \mathbf{x} = 1$$

A quadrática tem mínimo em $[2 \ 1]$ e suas curvas de nível são elipses com eixos dados pelos autovetores da Hessiana A . A restrição é uma reta. A figura 5.2 mostra a restrição e algumas elipses. O valor da função objetivo em cada ponto da restrição pode ser obtido pela curva de nível que passa por esse ponto. Percebe-se facilmente que o mínimo procurado acontece no ponto de tangência entre a reta da restrição e uma das curvas de nível.

Essa visão geométrica da solução como uma tangência entre restrição e curva de nível é muito importante e estará presente em várias outras situações. Para complementá-la é preciso calcular de maneira analítica e precisa o exato ponto de tangência. Uma maneira de conseguir isto seria lembrando que a restrição, no caso deste exemplo, pode ser escrita como $x_2 = 1 - x_1$; entrando com esta expressão na função objetivo temos

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= x_1^2 + 2(1 - x_1)^2 - 2x_1 - 2(1 - x_1) \\ &= 3x_1^2 - 4x_1 - 4 = h(x_1) \end{aligned}$$

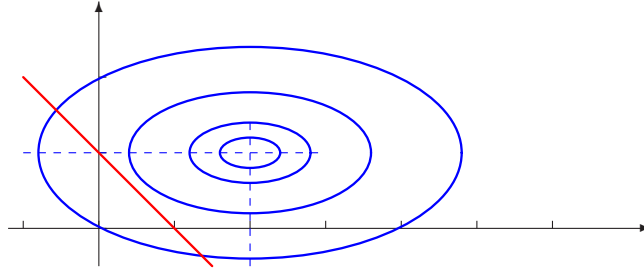


Figura 5.2: Quadrática com uma restrição linear de igualdade

A minimização desta função escalar livre fornece o ponto de tangência, ou seja, a solução do problema vetorial com restrição.

$$h'(x_1) = 6x_1 - 4 = 0 \iff x_1 = 2/3 \text{ e } x_2 = 1/3$$

Este caminho algébrico envolve uma **redução de ordem** pois permite que se trabalhe em uma função objetivo mais simples que a original. Além de esta função ser mais simples, o novo problema é livre, sem restrições. Todos os aspectos simples e intuitivos deste procedimento autorizariam a idéia de que esta redução de ordem é a base de qualquer método de solução do PGORLI no caso geral. Não é bem assim, há um outro caminho possível. Sendo $\lambda \in \mathbb{R}$ uma nova variável pode-se definir uma função expandida $h(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda c(\mathbf{x})$ onde f é a função objetivo e c é a restrição:

$$h(\mathbf{x}, \lambda) = h(x_1, x_2, \lambda) = x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1 - 2x_2 + \lambda(x_1 + x_2 - 1)$$

$$h(x_1, x_2, \lambda) = x_1^2 + 2x_2^2 + (\lambda - 2)x_1 + (\lambda - 2)x_2 - \lambda$$

Esta é uma função real de uma variável vetorial do \mathbb{R}^3 . Para calcular seus pontos estacionários, deve-se obter o gradiente e igualá-lo a zero.

$$\begin{aligned} h'_{x_1} &= 2x_1 + \lambda - 2 = 0 \\ h'_{x_2} &= 4x_2 + \lambda - 2 = 0 \\ h'_\lambda &= x_1 + x_2 - 1 = 0 \end{aligned}$$

A solução deste sistema linear é $\lambda = x_1 = 2/3$ e $x_2 = 1/3$, que se revelaria um minimizador após o cálculo da Hessiana. O interessante a se notar é que este segundo procedimento leva também à solução do PGORLI para o exemplo, envolve também uma minimização livre, sem restrições, mas agora em um espaço com **dimensão aumentada**.

No exemplo acima três aspectos foram enfocados:

1. a **geometria** da solução
2. a sua obtenção por **redução de ordem**
3. a sua obtenção por **aumento de ordem**

Estes aspectos aparecem neste particular exemplo ou são algo geral, que ocorre sempre? Já foi mencionado que a imagem de curvas de nível tangenciando restrições desempenha um papel importante no tratamento analítico e rigoroso dos problemas gerais de otimização, e isto em breve se confirmará. É fácil e intuitivo aceitar que a redução de ordem funciona. A restrição linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ amarra m das n variáveis e f pode ser encarada como uma aplicação não mais do \mathbb{R}^n , mas do \mathbb{R}^{n-m} em \mathbb{R} . Para os detalhes, seja $\mathbf{x}_r \in \mathbb{R}^m$ o vetor composto pelas m primeiras componentes de \mathbf{x} , e $\mathbf{x}_l \in \mathbb{R}^{n-m}$ o vetor composto pelas suas $n - m$ últimas componentes.

$$\mathbf{x}_r = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \quad \mathbf{x}_l = \begin{bmatrix} x_{m+1} \\ x_{m+2} \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Seja A_r a matriz formada pelas m primeiras colunas de A . Esta matriz é quadrada e também inversível (se não o for, é possível trocar a ordem das variáveis x_i em \mathbf{x} para que isto aconteça, pois o posto de A é m por hipótese). Seja A_l a matriz formada pelas $n - m$ últimas colunas de A . A equação básica das restrições lineares de igualdade pode ser reescrita como

$$A\mathbf{x} = A_r\mathbf{x}_r + A_l\mathbf{x}_l = \mathbf{b} \implies \mathbf{x}_r = A_r^{-1}\mathbf{b} - A_r^{-1}A_l\mathbf{x}_l$$

ou seja, as variáveis \mathbf{x}_r são restritas, fixas, amarradas, e apenas podem variar livremente as $m - n$ variáveis de \mathbf{x}_l . O procedimento acima mostra como é simples reduzir a ordem de um problema de otimização com restrições lineares de igualdade. Se as restrições de igualdade forem não lineares a intuição diz que a redução de ordem ainda é possível, mas o problema de se encontrar as variáveis livres pode ser formidável...

Hora de analisar os métodos de aumento de ordem, de ver com mais detalhes, mas ainda sem muito rigor, o que há por trás deles. Sendo a função objetivo $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $c(\mathbf{x}) = 0$ uma única restrição, não necessariamente linear, define-se a função $h : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ por meio da expressão

$$h(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda c(\mathbf{x})$$

onde λ é uma variável real. As derivadas parciais de h com relação a seus argumentos são

$$\frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = h'_x \quad \frac{\partial h}{\partial \lambda} = h'_\lambda = c(\mathbf{x})$$

donde se conclui que os pontos estacionários de h , aqueles onde ∇h se anula, satisfazem a restrição. Em outras palavras, se $(\mathbf{x}_e, \lambda_e)$ é estacionário, então $\nabla h(\mathbf{x}_e, \lambda_e) = 0$ e $c(\mathbf{x}_e) = 0$. Seja $(\mathbf{x}^*, \lambda^*)$ um mínimo livre, irrestrito de h . É fácil perceber que

$$h(\mathbf{x}^*, \lambda^*) \leq h(\mathbf{x}, \lambda) \quad \forall \mathbf{x} \quad \forall \lambda \quad \implies \quad f(\mathbf{x}^*) + \lambda^* c(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}) + \lambda c(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \quad \forall \lambda$$

Mas $c(\mathbf{x}^*) = 0$, pois qualquer mínimo é estacionário, logo

$$f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}) + \lambda c(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}$$

Esta expressão, para $\lambda = 0$, leva a $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ o que, como \mathbf{x}^* satisfaz a restrição, indica que ele soluciona o PGORLI. Este raciocínio, particular, pois considera apenas uma restrição, é apenas uma explicação intuitiva dos mecanismos que atuam no aumento de ordem. Mais rigor virá em breve. A primeira posição com relação a estes métodos é de dúvida ou até de desagrado, afinal por que trabalhar em espaços com dimensões maiores se é possível fazê-lo em dimensões menores? Por menos natural que pareça, estes métodos são utilizados, mais mesmo que os de redução de ordem, apesar de serem mais trabalhosos. A pedra de toque, o condão decisivo destes métodos é que a generalização de seu uso para casos de restrições não lineares de igualdade ou de desigualdade é feita de maneira razoavelmente suave.

5.4.1 Condições Analíticas para o PGORLI

Conforme visto anteriormente, o PGORLI consiste em minimizar $f(\mathbf{x})$ quando $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ e também está sujeito às restrições $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Lembrando a conceitualização formal, sabemos que \mathbf{x}^* é uma solução quando

1. \mathbf{x}^* é viável, ou seja, $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$, e
2. $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ para qualquer vizinho viável \mathbf{x} de \mathbf{x}^*

Um bom início inclui um estudo detalhado dos pontos viáveis, onde as restrições são válidas. O conjunto de todos eles é a região viável RV, caracterizada por

$$RV = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \mid A\mathbf{v} = \mathbf{b}\}$$

Dado um ponto viável $\mathbf{v} \in \text{RV}$, considere o problema de encontrar uma direção ou vetor \mathbf{p} tal que $\mathbf{v} + \mathbf{p} \in \text{RV}$. Em outras palavras, queremos condições para, partindo da RV, nela permanecer. É fácil deduzir que

$$\mathbf{v} + \mathbf{p} \in \text{RV} \iff A\mathbf{p} = 0$$

Direções \mathbf{p} tais que $A\mathbf{p} = 0$ são chamadas de **viáveis** e são as direções que permitem que um movimento permaneça em RV.

Exemplo 5.4.2 Seja um problema de minimização no \mathbb{R}^2 com uma única restrição de igualdade $c_1(x_1, x_2) = x_1 + x_2 = 1$. A RV, como pode ser visto na figura 5.3, é a reta do \mathbb{R}^2 cujos pontos são $[\alpha \ 1 - \alpha]^T$. Uma vez sobre esta reta, as direções viáveis são dadas por $x_2 = -x_1$. As direções viáveis podem ser aplicadas a pontos dentro ou fora da RV.

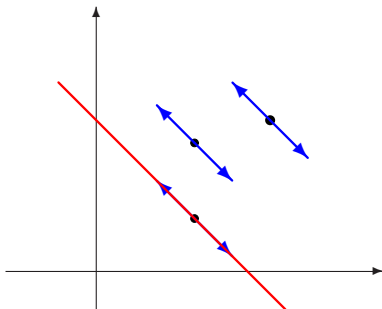


Figura 5.3: Direções viáveis podem ser aplicadas a pontos fora da RV

O conjunto de todas as direções viáveis é dado pelo espaço nulo ou núcleo, ou kernel de A :

$$\mathcal{Z} = \ker A = \{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid A\mathbf{p} = 0\}$$

Este conjunto é um subespaço vetorial do \mathbb{R}^n , ao passo que a RV pode não ter uma estrutura de subespaço. Supondo, como anteriormente, que as m restrições são linearmente independentes a matriz A terá posto completo, e a dimensão de \mathcal{Z} estará determinada:

$$\rho(A) = m \implies \dim \mathcal{Z} = n - m = t$$

Seja Z uma matriz $n \times t$ cujas colunas formam uma base para \mathcal{Z} . A partir deste ponto é possível exprimir uma direção viável \mathbf{p} qualquer como uma combinação linear das colunas de Z .

$$Z = [\mathbf{z}_1 \ \mathbf{z}_2 \ \cdots \ \mathbf{z}_t] \quad \mathbf{p} = Z\mathbf{p}_z, \quad \text{onde } \mathbf{p}_z \in \mathbb{R}^t$$

A recíproca é verdadeira, se uma direção \mathbf{p} satisfaz a condição acima ela será viável. Se \mathbf{x}^* é solução do PGORLI, o valor da função objetivo em um vizinho viável $\mathbf{x}^* + \varepsilon \mathbf{p}$, por meio da série de Taylor, é

$$f(\mathbf{x}^* + \varepsilon \mathbf{p}) = f(\mathbf{x}^*) + \varepsilon \mathbf{p}^T g(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \mathbf{p}^T G(\mathbf{x}^*) \mathbf{p} + \dots$$

onde g e G denotam, como sempre, gradiente e Hessiana de f . Usando a caracterização das direções viáveis,

$$f(\mathbf{x}^* + \varepsilon \mathbf{p}) - f(\mathbf{x}^*) = \varepsilon \mathbf{p}_z^T Z^T g(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \mathbf{p}_z^T Z^T G(\mathbf{x}^*) Z \mathbf{p}_z + \dots$$

Considerando valores pequenos de ε e seguindo um raciocínio análogo ao apresentado na seção 3.2.1 poderíamos estabelecer o

Teorema 5.4.1 Condições Necessárias de Otimalidade. *Se f suficientemente suave e $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PGORLI, então*

1. $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$
2. $Z^T g(\mathbf{x}^*) = 0$

e ainda $Z^T G(\mathbf{x}^*) Z \geq 0$, uma condição de segunda ordem.

A primeira condição, bastante óbvia, diz que as soluções devem ser viáveis. A condição seguinte é a do gradiente, ou de primeira ordem. A grandeza $Z^T g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^t$ é o **gradiente projetado de f** . Pontos nos quais o gradiente projetado se anula são **pontos estacionários com restrições**. Também neste caso há um gradiente que deve se anular ... A figura 5.4 permite visualizar o gradiente projetado no \mathbb{R}^2 . Por um ponto \mathbf{x} qualquer traçamos a paralela à restrição $c(\mathbf{x}) = 0$ e nela se projeta, geometricamente, o gradiente da função objetivo. Esta paralela à restrição é caracterizada analiticamente pelo conjunto de pontos $\mathbf{x} + \mathbf{p}$, onde \mathbf{p} é uma direção viável.

O teorema 5.4.1 mostra, de maneira clara, a redução de ordem funcionando, pois deve-se anular o gradiente projetado e este é um vetor em um espaço de dimensão $t = n - m$. Mas dentro deste mesmo teorema, codificadas de maneira menos clara, há ainda outras possibilidades. Raciocinemos. A matriz Z , por definição, é tal que $AZ = 0$ ou, equivalentemente, $Z^T A^T = 0$. Isto significa que as colunas de A^T varrem o espaço nulo da matriz Z^T . Mas o gradiente projetado se anula na solução, logo $Z^T g(\mathbf{x}^*) = 0$ o que garante que o gradiente “simples” $g(\mathbf{x}^*)$ é uma combinação linear das colunas de A^T :

$$Z^T g(\mathbf{x}^*) = 0 \quad \implies \quad g(\mathbf{x}^*) = A^T \begin{bmatrix} \lambda_1^* \\ \lambda_2^* \\ \vdots \\ \lambda_m^* \end{bmatrix} = A^T \lambda^* \quad \text{onde} \quad \lambda^* \in \mathbb{R}^m$$

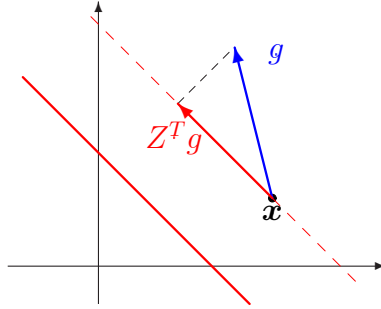


Figura 5.4: Visualização do gradiente projetado no \mathbb{R}^2

Os coeficientes λ_i^* , componentes do vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$, são os famosos **multiplicadores de Lagrange**. Estes multiplicadores permitem a formulação do resultado acima de maneira diferente.

Teorema 5.4.2 Condições Necessárias de Otimalidade. *Se f suficientemente suave e $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PGORLI, então*

1. $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$
2. $\exists \lambda^* \in \mathbb{R}^m \mid g(\mathbf{x}^*) = A^T \lambda^*$

e ainda $Z^T G(\mathbf{x}^*) Z \geq 0$, uma condição de segunda ordem.

Apenas a segunda condição mudou, garantindo que ficássemos livres do tal gradiente projetado, a situação em que ele aparecia é agora expressa em termos do gradiente simples e dos multiplicadores de Lagrange. Mas há mais a se notar. O leitor é convidado a deduzir que as duas primeiras condições acima implicam dizer que $(\mathbf{x}^*, \lambda^*)$ é um ponto estacionário da função $h : \mathbb{R}^{n+m} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $h(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda^T (A\mathbf{x} + \mathbf{b})$ e chamada de **Lagrangeana**. Com o seu uso as restrições desaparecem, o trabalho passa a ser feito em um espaço com dimensão ampliada ... eis o mecanismo de aumento de ordem se apresentando.

A terceira condição dos teoremas acima é a condição de segunda ordem, ou da Hessiana. A matriz $Z^T G(\mathbf{x}^*) Z$ com dimensões $t \times t$ é a **Hessiana Projetada** e deve ser positiva semidefinida. Assim como antes, as condições necessárias permitem delimitar a busca de soluções aos pontos que as satisfazem. Para garantir que um destes pontos seja mesmo solução do PGORLI precisamos do

Teorema 5.4.3 Condições Suficientes de Otimalidade. *Se f suficientemente suave, e $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ tal que*

1. $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$
2. $Z^T g(\mathbf{x}^*) = 0$ ou, equivalentemente, $\exists \lambda^* \in \mathbb{R}^m \mid g(\mathbf{x}^*) = A^T \lambda^*$
3. $Z^T G(\mathbf{x}^*) Z > 0$

Então \mathbf{x}^* será uma solução local do PGORLI.

Exemplo 5.4.3 Considere novamente o exemplo 5.4.1, analisado anteriormente de modo pouco rigoroso.

$$\min f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad [1 \ 1]\mathbf{x} = 1$$

Algumas curvas de nível, assim como a restrição, aparecem na figura 5.2. A função objetivo f tem um mínimo global em $\mathbf{x}^* = [2 \ 1]^T$; esta solução teria algo a ver com a solução que calcularemos agora de modo rigoroso e que leva em conta as restrições? Dada a matriz das restrições \mathbf{a} e sua transposta \mathbf{a}^T , é fácil encontrar a matriz (coluna, no caso) Z tal que $\mathbf{a}^T Z = Z^T \mathbf{a} = 0$. Encontraríamos $Z^T = [1 \ -1]$, donde os gradientes normal e projetado são

$$g(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad Z^T g(\mathbf{x}) = [2 \ -4]\mathbf{x}$$

Lembrando que a restrição deve ser satisfeita, e o gradiente projetado deve se anular no ponto estacionário chegamos a

$$\begin{cases} [1 \ 1]\mathbf{x} = 1 \\ [2 \ -4]\mathbf{x} = 0 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -4 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

cuja única solução leva a $[2/3 \ 1/3]^T$, como antes. Aplicando as condições suficientes de otimalidade — CSO — neste candidato (basta aplicar a terceira delas, porque as outras automaticamente se verificam) temos

$$Z^T G(\mathbf{x}^*) Z = [1 \ -1] \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = 6 > 0$$

donde se conclui que o ponto estacionário encontrado é uma solução local, um mínimo.

Exemplo 5.4.4 Considere o PGORLI com restrições lineares de igualdade dado por

$$\min f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} \quad \text{s.a.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = [1 \ 1]\mathbf{x} = 1$$

Conforme visto anteriormente, a função objetivo f tem um mínimo global em $\mathbf{x}^* = [0.5 \ 1.0]^T$ e suas curvas de nível são elipses cujos eixos principais são os autovetores da Hessiana. A matriz Z tal que $\mathbf{a}^T Z = Z^T \mathbf{a} = 0$ é dada por $Z^T = [1 \ -1]$, donde os gradientes normal e projetado são

$$g(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} \quad e \quad Z^T g(\mathbf{x}) = [2 \ 1] \mathbf{x} + 2$$

Lembrando que a restrição deve ser satisfeita, e o gradiente projetado deve se anular no ponto estacionário chegamos a

$$\begin{cases} [1 \ 1] \mathbf{x} = 1 \\ [2 \ 1] \mathbf{x} = -2 \end{cases} \quad ou \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

cuja única solução é $[-3 \ 4]^T$. Aplicando as CSO neste candidato (basta a terceira delas) temos

$$Z^T G(\mathbf{x}^*) Z = [1 \ -1] \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = 1 > 0$$

donde se conclui que o ponto estacionário encontrado é uma solução local, um mínimo. Neste caso a visualização é possível, pois as curvas de nível e as restrições são linhas no \mathbb{R}^2 .

Exemplo 5.4.5 Seja agora o PGORLI com

$$\min f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix} \quad s.a. \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = [1 \ -1] \mathbf{x} = 0$$

A função objetivo f é representada por uma superfície tipo calha e tem seus mínimos locais na reta dada por

$$\mathbf{x}^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} + \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

A matriz Z e os gradientes normal e projetado são

$$Z = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad g(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} - \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix} \quad e \quad Z^T g(\mathbf{x}) = [6 \ 3] \mathbf{x} - 6$$

Lembrando que a restrição e o gradiente projetado devem se anular no ponto estacionário chegamos a

$$\begin{cases} [1 \ -1] \mathbf{x} = 0 \\ [6 \ 3] \mathbf{x} = 6 \end{cases} \quad ou \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 6 & 3 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 6 \end{bmatrix}$$

cuja única solução é $[2/3 \ 2/3]^T$. Aplicando as CSO neste candidato (basta aplicar a terceira delas, porque as outras automaticamente se verificam) temos

$$Z^T G(\mathbf{x}^*) Z = [1 \ 1] \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 9 > 0$$

donde se conclui que o ponto estacionário encontrado é uma solução local, um mínimo. No caso sem restrições havia toda uma reta de soluções, aqui ela é única. Neste caso as curvas de nível são retas paralelas e a “tangência” entre elas e a restrição é na realidade uma interseção.

Exemplo 5.4.6 Seja agora o PGORLI com

$$\min f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & -8 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} -1 \\ 17 \end{bmatrix} \quad \text{s.a.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = [1 \ -1] \mathbf{x} = -1/2$$

A função objetivo para este caso, já vimos isto, é caracterizada por um ponto de sela e não admite mínimos ou máximos. A matriz Z e os gradientes normal e projetado são

$$Z = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad g(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & -8 \end{bmatrix} \mathbf{x} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 \\ 17 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad Z^T g(\mathbf{x}) = [2 \ -9] \mathbf{x} + 8$$

Lembrando que a restrição e o gradiente projetado devem se anular no ponto estacionário chegamos a

$$\begin{cases} [1 \ -1] \mathbf{x} = -1/2 \\ [2 \ -9] \mathbf{x} = -8 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -9 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} -1/2 \\ -8 \end{bmatrix}$$

cuja única solução é $[1/2 \ 1]^T$, exatamente o ponto de sela anterior. Aplicando as CSO neste candidato (basta a terceira) temos

$$Z^T G(\mathbf{x}^*) Z = [1 \ 1] \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & -8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = -7 < 0$$

Não se pode concluir que este ponto seja uma solução do problema. Na realidade ele soluciona o problema de se encontrar o máximo de f com as restrições dadas. Os leitores são convidados a repetir estes cálculos (desta última f) para as seguintes restrições:

1. $[1 \ 2] \mathbf{x} = 3/2$
2. $[1 \ -2] \mathbf{x} = -3/2$
3. $[1 \ 2] \mathbf{x} = 0$

5.4.2 Problema da Projeção Ortogonal

Esta é uma construção clássica da geometria Euclidiana espacial: a partir de um ponto externo, lançar uma reta perpendicular a um plano determinando assim a projeção ortogonal do ponto no plano. A figura 5.5 ilustra a situação com o uso de vetores; de um ponto \mathbf{x}^k no plano “sai” um vetor \mathbf{d}_m cuja projeção ortogonal é \mathbf{d} . Projeções também podem ser feitas em retas do \mathbb{R}^3 . A distância entre a “extremidade” P do vetor \mathbf{d}_m e um ponto qualquer do plano é mínima quando este ponto é a “extremidade” do vetor \mathbf{d} , sendo esta uma característica básica da projeção ortogonal.

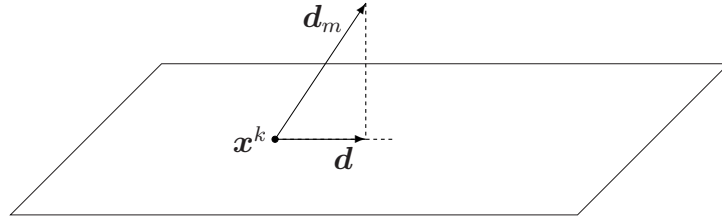


Figura 5.5: Projeção Ortogonal no \mathbb{R}^3

Seja agora o \mathbb{R}^n , e uma matriz \hat{A} ($t \times n$) com $t < n$. O conjunto de vetores $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ tais que $\hat{A}\mathbf{d} = 0$ (o espaço nulo de \hat{A}) representa, dependendo de t , “retas” ou “planos” ou “superfícies lineares”; com um pouco de abuso de nomenclatura chamaremos esses pontos de **hiperplanos**. A distância entre as “extremidades” de dois vetores pode ser associada à norma euclidiana de sua diferença, $\|\mathbf{d}_m - \mathbf{d}\|$; na realidade a distância é a raiz quadrada desta norma. Com isto torna-se possível associar a projeção ortogonal a um problema de otimização: dados $\mathbf{d}_m \in \mathbb{R}^n$ e um hiperplano nesse espaço, encontrar $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ tal que \mathbf{d} pertence ao hiperplano e $\|\mathbf{d}_m - \mathbf{d}\|$ é mínima. Em termos mais precisos, sendo dados $\mathbf{d}_m \in \mathbb{R}^n$ e \hat{A} ($t \times n$) com $t < n$,

$$\min f(\mathbf{d}) = \|\mathbf{d}_m - \mathbf{d}\| = (\mathbf{d}_m - \mathbf{d})^T (\mathbf{d}_m - \mathbf{d})$$

$$\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad \hat{A}\mathbf{d} = 0$$

Este é um PGORLI; para solucioná-lo criamos uma nova variável $\beta \in \mathbb{R}^t$ e construímos a Lagrangeana $L(\mathbf{d}, \beta) = f(\mathbf{d}) - \beta^T \hat{A}\mathbf{d}$ (o sinal poderia ser positivo) que será minimizada sem restrições. Desenvolvendo vem

$$\begin{aligned} L(\mathbf{d}, \beta) &= (\mathbf{d}_m - \mathbf{d})^T (\mathbf{d}_m - \mathbf{d}) - \beta^T \hat{A}\mathbf{d} \\ &= \mathbf{d}_m^T \mathbf{d}_m - \mathbf{d}_m^T \mathbf{d} - \mathbf{d}^T \mathbf{d}_m + \mathbf{d}^T \mathbf{d} - \beta^T \hat{A}\mathbf{d} \\ &= \|\mathbf{d}_m\|^2 - 2\mathbf{d}_m^T \mathbf{d} + \mathbf{d}^T \mathbf{d} - \beta^T \hat{A}\mathbf{d} \end{aligned}$$

Pelas condições necessárias devemos procurar os pontos estacionários da Lagrangeana. Para que as derivadas parciais se anulem devemos ter $\partial L / \partial \beta = 0$, que leva a $\hat{A}\mathbf{d} = 0$, e $\partial L / \partial \mathbf{d} = -2\mathbf{d}_m + 2\mathbf{d} - \hat{A}^T \beta = 0$ que leva a

$$\mathbf{d} = \hat{A}^T \gamma + \mathbf{d}_m \quad \text{onde} \quad \gamma = \frac{1}{2} \beta \in \mathbb{R}^t \quad (5.5)$$

As condições suficientes garantem que este ponto estacionário é realmente um mínimo e assim se resolve analiticamente o problema da projeção ortogonal. A expressão para o vetor projetado \mathbf{d} em (5.5) envolve um vetor do \mathbb{R}^t e isto pode ser evitado. Multiplicando a equação, pela esquerda, por \hat{A} :

$$\hat{A}\mathbf{d} = \hat{A}\hat{A}^T \gamma + \hat{A}\mathbf{d}_m \implies \gamma = -(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1} \hat{A}\mathbf{d}_m$$

pois $\hat{A}\mathbf{d} = 0$ (\mathbf{d} é viável) e a matriz $\hat{A}\hat{A}^T$ é inversível (supõe-se que as linhas de \hat{A} sejam linearmente independentes). Agora é fácil desenvolver:

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= -\hat{A}^T (\hat{A}\hat{A}^T)^{-1} \hat{A}\mathbf{d}_m + \mathbf{d}_m \\ &= \left[I_n - \hat{A}^T (\hat{A}\hat{A}^T)^{-1} \hat{A} \right] \mathbf{d}_m \end{aligned}$$

donde, finalmente,

$$\mathbf{d} = P\mathbf{d}_m \quad \text{onde} \quad P = I_n - \hat{A}^T (\hat{A}\hat{A}^T)^{-1} \hat{A} \quad (5.6)$$

Assim, por meio de (5.6), se consegue traduzir a operação por meio de uma **matriz projetiva** P ($n \times n$), o que é muito cômodo nas aplicações. O problema da projeção ortogonal será usado brevemente em um método numérico, onde se entenderá o porquê das notações \hat{A} , \mathbf{d}_m , \mathbf{x}^k etc.

5.5 Restrições Lineares de Desigualdade

Quando as m restrições lineares são de desigualdade temos o seguinte problema, abreviadamente chamado de PGORLD ou apenas ORLD ou RLD:

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$$

onde A é uma matriz $m \times n$ cujas linhas são as restrições \mathbf{a}_i^T para $i = 1, 2, \dots, m$ e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ tem como elementos os b_i . A i -ésima restrição é dada por $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{a}_i \geq b_i$.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix}; \quad \mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Na modelagem de alguns problemas certas grandezas devem ser **menores** ou iguais determinados limites. No caso linear isto se traduziria por

$$\alpha_{i1}x_1 + \alpha_{i2}x_2 + \cdots + \alpha_{in}x_n \leq \beta_i$$

Uma restrição deste tipo deve se adequar ao modelo acima, o que se faz de modo trivial. Sendo $\mathbf{a}_i^T = -[\alpha_{i1}x_1 \ \alpha_{i2}x_2 \ \cdots \ \alpha_{in}x_n]$ e $b_i = -\beta_i$ teremos a restrição “canônica” $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i$ do tipo das anteriores.

5.5.1 Geometria da Região Viável

Uma única restrição: $\mathbf{a}^T \mathbf{x} \geq b$. No \mathbb{R}^2 a região viável será um semiplano delimitado pela reta $\mathbf{a}^T \mathbf{x} - b = 0$, como se vê na figura 5.6. Pode-se dizer que a RV possui uma fronteira, dada pela reta acima, e um “miolo” caracterizado pelos pontos \mathbf{x} tais que $\mathbf{a}^T \mathbf{x} - b > 0$. Em cada ponto da fronteira existe uma direção perpendicular a esta fronteira e que aponta para dentro, para o miolo, chamada de **normal de entrada na RV**. É sempre útil, nos esboços, traçar pelo menos uma normal de entrada para cada fronteira, pois isso facilita a percepção de qual lado da fronteira é viável.

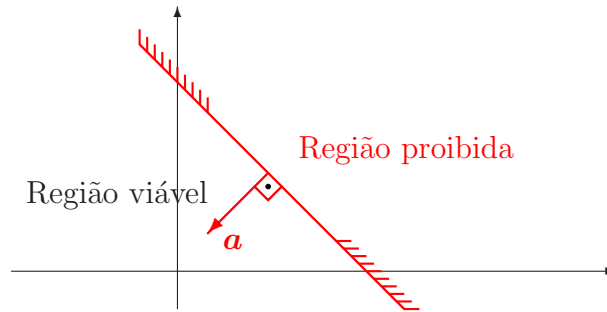


Figura 5.6: Região viável para uma restrição linear de desigualdade

Para o caso de uma única restrição linear no \mathbb{R}^2 é fácil ver que a normal de entrada em qualquer ponto é dada por $\mathbf{a} = \nabla(\mathbf{a}^T \mathbf{x} - b) \in \mathbb{R}^2$. No caso geral de várias restrições, lineares ou não, no \mathbb{R}^n , esta idéia de associar a normal de entrada a um gradiente permanecerá válida. No \mathbb{R}^3 , uma única restrição linear gera uma fronteira composta pelo plano $\mathbf{a}^T \mathbf{x} - b = 0$; um dos semiespaços determinados por este plano será o miolo. A normal de entrada é a mesma em qualquer ponto, dada pelo gradiente da restrição: \mathbf{a} . No \mathbb{R}^n para $n > 3$ usa-se o termo **hiperplano** para designar a fronteira de uma RV associada a uma única restrição linear.

Duas restrições: $\mathbf{a}_1^T \mathbf{x} \geq b_1$ e $\mathbf{a}_2^T \mathbf{x} \geq b_2$. No caso de as fronteiras se interceptarem as RVs serão setores, exemplos dos quais se pode ver na

figura 5.7. Os leitores são convidados a estudar o caso de as fronteiras serem paralelas.

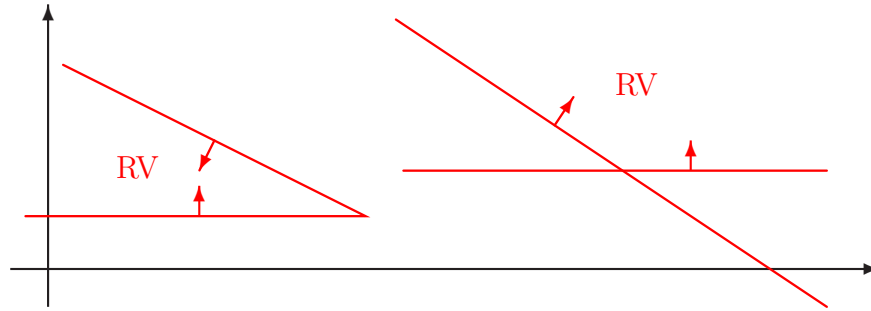


Figura 5.7: Região viável para duas restrições lineares de desigualdade

Três ou mais restrições. É preciso supor que as m ($m \geq 3$) restrições sejam compatíveis, ou seja, determinem uma RV não vazia. Para $m = 3$ a figura 5.8 mostra algumas possibilidades.

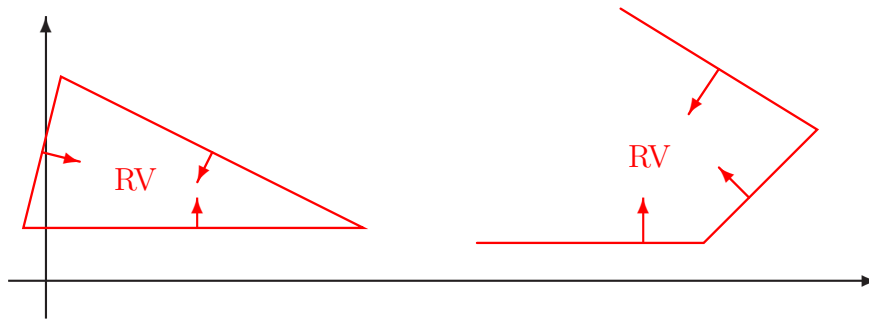


Figura 5.8: Região viável para três restrições compatíveis no \mathbb{R}^2

Seria fácil generalizar, no \mathbb{R}^2 , para $m > 3$: as fronteiras são linhas poligonais abertas ou fechadas que dão origem a regiões viáveis finitas ou limitadas e infinitas ou ilimitadas. Assim, no \mathbb{R}^2 , as RVs são polígonos; no \mathbb{R}^3 são poliedros e em espaços de dimensões maiores serão politopos.

Seja qual for a dimensão n ou o número de restrições, um fato muito importante pode ser estabelecido para a região viável delimitada por restrições do tipo $A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$:

Propriedade 5.5.1 *A região viável delimitada no \mathbb{R}^n pelas restrições lineares de desigualdade do tipo $A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$ é convexa.*

A demonstração, simples, é deixada para os leitores. Antes de prosseguir, uma definição que será útil mais tarde.

Definição 5.5.1 O **cone** dos (ou gerado pelos) vetores $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2 \dots \mathbf{v}^k \in \mathbb{R}^n$ é o conjunto

$$C_{\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2 \dots \mathbf{v}^k} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} = \sum_{i=1}^k \alpha_i \mathbf{v}^i \text{ quando } \alpha_i \geq 0 \forall i = 1, 2, \dots, k\}$$

Esse cone é formado pelas combinações lineares com coeficientes não negativos dos vetores. No plano, para dois vetores, a figura 5.9 ilustra o conceito.

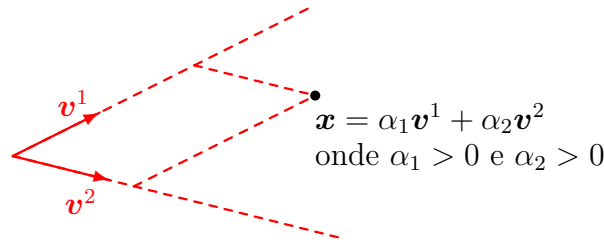


Figura 5.9: Cone gerado por dois vetores no \mathbb{R}^2

Percebe-se que o cone é o setor angular compreendido entre os dois vetores. Ainda no \mathbb{R}^2 , os leitores são convidados a analisar os seguintes casos: a.) ângulo entre os dois vetores é π , b.) há mais de dois vetores. Como ficam os cones no \mathbb{R}^3 , para dois ou mais vetores? Pede-se também que os leitores demonstrem a seguinte

Propriedade 5.5.2 Os cones gerados por vetores são regiões convexas.

É fácil ver que no \mathbb{R}^2 a região viável delimitada por $A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$ é a interseção de vários cones.

Atividade de pontos viáveis

No caso geral, a RV é o conjunto dos pontos que satisfazem as restrições, ou pontos viáveis, e é dada por

$$RV = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \mid A\mathbf{v} \geq \mathbf{b}\}$$

A visualização no \mathbb{R}^2 fica mais fácil, como sempre, e vários aspectos dela foram apresentados nas seções anteriores. É necessário frizar novamente que pode ser impossível satisfazer certos conjuntos de restrições ou, em outras palavras, a região viável RV pode ser vazia. Dado um ponto de teste $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ temos as opções: ou \mathbf{x}^0 é inviável, ou é interno ou está na fronteira. Para decidir é preciso usar as restrições.

$$\begin{array}{lll}
\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^0 = b_i & \rightarrow & \text{restrição } i \text{ é } \mathbf{ativa} \text{ em } \mathbf{x}^0: \quad \mathbf{x}^0 \in \text{fronteira} \\
\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^0 > b_i & \rightarrow & \text{restrição } i \text{ é } \mathbf{inativa} \text{ em } \mathbf{x}^0: \quad \mathbf{x}^0 \in \text{miolo}^* \\
\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^0 < b_i & \rightarrow & \text{restrição } i \text{ é } \mathbf{violada} \text{ em } \mathbf{x}^0: \quad \mathbf{x}^0 \notin \text{RV}
\end{array}$$

Na segunda linha desta tabela o ponto \mathbf{x}^0 estará no miolo se a condição $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^0 > b_i$ for válida $\forall i = 1, 2, \dots, m$. Quando uma única restrição está ativa em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^2$ este ponto pertence a uma aresta do polígono (ou linha poligonal) que é a fronteira da RV. Quando uma única restrição está ativa em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^3$ este ponto pertence a uma face do poliedro que é a fronteira da RV. Quando uma única restrição está ativa em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n, n > 3$ este ponto pertence a um hiperplano, que é uma “face” do politopo.

Quando duas restrições estão ativas em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^2$ este ponto é um vértice do polígono (ou linha poligonal) que é a fronteira da RV. Quando duas restrições estão ativas em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^3$ este ponto pertence a uma aresta do poliedro que é a fronteira da RV. Quando três restrições estão ativas em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^2 \dots$ ou uma delas é supérflua ou não existe RV. Quando três restrições estão ativas em $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^3$ este ponto é um vértice do poliedro-fronteira da RV.

Cone Viável de um ponto $\mathbf{x}^0 \in \text{RV}$

Quando todas as restrições estão inativas em \mathbf{x}^0 , pode-se partir de \mathbf{x}^0 e caminhar em qualquer direção, possivelmente pouco, sem violar qualquer restrição: $\exists \alpha \in \mathbb{R} \mid \mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{p} \in \text{RV} \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$. Quando a i -ésima restrição está ativa em \mathbf{x}^0 , os avanços que deixam este ponto devem ser bem escolhidos para que levem a pontos ainda na região viável: $\exists \alpha \in \mathbb{R} \mid \mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{p} \in \text{RV}$ para algumas direções $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$. É possível caracterizar estes avanços bem comportados em linguagem matemática precisa, o que se fará no devido tempo. O próximo conceito legitima estas idéias.

Definição 5.5.2 *O cone viável de um ponto $\mathbf{x}^0 \in \text{RV}$ é*

$$\text{CV}_{\mathbf{x}^0} = \left\{ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{p} \in \text{RV} \text{ para } \alpha \text{ adequado} \right\}$$

Na ilustração da esquerda da figura 5.10 o ponto \mathbf{x}^0 está no miolo da RV e seu CV é todo o \mathbb{R}^n , no caso o \mathbb{R}^2 . Na ilustração do meio o ponto \mathbf{x}^0 está na fronteira, em uma aresta, e seu CV é um semi-espaco. Na direita o ponto \mathbf{x}^0 ocupa um vértice e seu CV é o setor angular mostrado, o cone gerado por vetores que estão nas arestas.

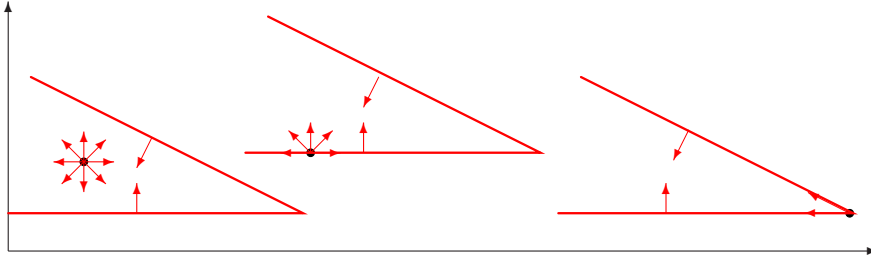


Figura 5.10: Cones viáveis no \mathbb{R}^2

5.5.2 Geometria da função objetivo e do PGORLD

É bem sabido que o gradiente de uma função f em um dado ponto \mathbf{x} indica a direção de maior subida ou acréscimo. E que a direção de descida máxima, a ddm, é dada por $-g(\mathbf{x})$. E também que uma direção $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ é de descida quando $\mathbf{d}^T g(\mathbf{x}) < 0$. O cone de descida de um ponto qualquer é o conjunto de suas direções de descida. Em linguagem formal:

Definição 5.5.3 *O cone de descida de um ponto $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ é*

$$\text{CD}_{\mathbf{x}^0} = \{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{p}^T g(\mathbf{x}^0) < 0\}$$

É claro que para uma direção $\mathbf{p} \in \text{CD}$ temos uma descida da função f : $f(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{p}) < f(\mathbf{x}^0)$ para um α adequado. A visualização permitida pela figura 5.11 ilustra que o cone de descida é o semi-espaco delimitado pela tangente à curva de nível e “oposto” ao gradiente.

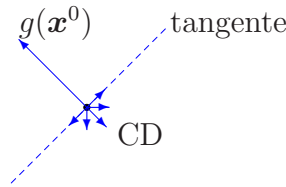


Figura 5.11: Cone de descida no \mathbb{R}^2

Dado um ponto $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ as direções simultaneamente viáveis e de descida são muito importantes. O conjunto de todas estas direções é o

Definição 5.5.4 *O cone de descida viável de um ponto $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ é*

$$\text{CDV}_{\mathbf{x}^0} = \text{CD}_{\mathbf{x}^0} \cap \text{CV}_{\mathbf{x}^0}$$

Reconhecendo as soluções do PGORLD

Como saber se um dado ponto de teste $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ é uma solução do PGORLD? A resposta é clara: não deve haver direções viáveis que sejam também de descida. Os conceitos geométricos recém expostos tratam exatamente disto, e o fazem de um modo claro, intuitivo, sucinto e elegante. O cone de descida viável, CDV, não deve existir! Neste ponto a tentação é grande para exprimir esta condição dizendo que $\text{CDV} = \emptyset$ ou seja, vazio, mas isto não é verdade, pois o vetor nulo pertence a qualquer cone e assim a formulação correta é

$$\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n \text{ é solução do PGORLD} \iff \text{CDV}_{\mathbf{x}^0} = \{0\}$$

O teste de pontos \mathbf{x}^0 na fronteira é muito elucidativo e conduz a conclusões importantes; na figura 5.12 os CDVs são mostrados para algumas situações básicas para pontos em uma aresta.

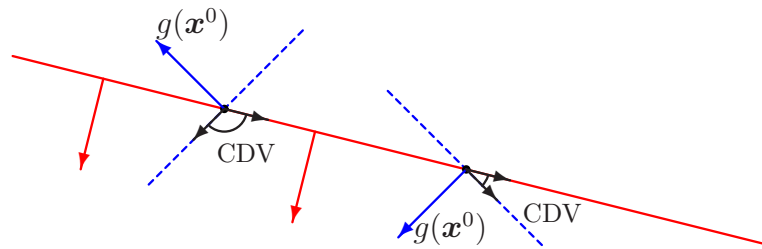


Figura 5.12: Cones de descida viável para pontos em aresta

É fácil perceber as condições para que um ponto de teste seja solução do PGORLD: **o gradiente $g(\mathbf{x}^0)$ deve ser paralelo à normal de entrada na RV.** Ou, em outros termos, deve haver tangência entre as curvas de nível da função objetivo e a aresta em consideração. Em linguagem mais técnica temos que $\exists \lambda^* > 0$ tal que $g(\mathbf{x}^0) = \lambda^* \mathbf{n}$ onde \mathbf{n} é a normal de entrada da aresta. A figura 5.13 mostra a situação de pontos de teste ainda na fronteira, mas não mais em uma aresta e sim em um vértice.

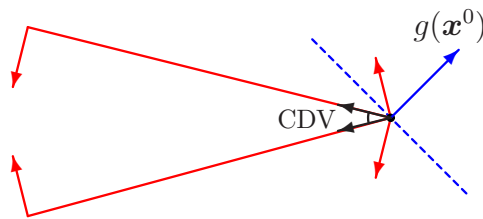


Figura 5.13: Ponto de teste em um vértice

O leitor deve se convencer de que, nestas condições, um ponto de teste é solução do PGORLD quando **o gradiente $g(\mathbf{x}^0)$ pertence ao cone gerado pelas normais de entrada** no vértice. Esta condição pode ser expressa em linguagem mais técnica: $\exists \lambda_1^* > 0$ e $\exists \lambda_2^* > 0$ tais que $g(\mathbf{x}^0) = \lambda_1^* \mathbf{n}_1 + \lambda_2^* \mathbf{n}_2$ onde \mathbf{n}_1 e \mathbf{n}_2 são as normais de entrada das arestas que formam o vértice. O teste de pontos \mathbf{x}^0 no miolo da RV é muito simples e nem merece figura, o reconhecimento de soluções do PGORLD é feito pela condição de estacionariedade velha de guerra: $g(\mathbf{x}^0) = 0$.

Estes últimos parágrafos apresentaram conceitos teóricos cuja visualização geométrica é simples, pelo menos no \mathbb{R}^2 . A grande utilidade destas ferramentas é fazer com que os leitores aceitem de modo natural e intuitivo, e sem a necessidade de demonstrações intrincadas e abstratas, as condições rigorosas dos próximos teoremas.

5.5.3 Álgebra do PGORLD

Um ponto de teste \mathbf{x}^0 , recordemos, pertence à RV quando $A\mathbf{x}^0 \geq \mathbf{b}$, onde A é uma matriz $m \times n$. Designando a i -ésima linha de A por \mathbf{a}_i^T temos

$$A\mathbf{x}^0 \geq \mathbf{b}; \quad A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$$

Supondo t restrições ativas em \mathbf{x}^0 , retiramos das matrizes A e \mathbf{b} as t linhas correspondentes e com elas formamos as matrizes \hat{A} e $\hat{\mathbf{b}}$. É claro que \hat{A} é $t \times n$ e $\hat{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^t$, e ainda

$$\hat{A}\mathbf{x}^0 = \hat{\mathbf{b}}$$

As matrizes \hat{A} e $\hat{\mathbf{b}}$ são as matrizes das (ou com as) restrições ativas. É razoável supor que as t restrições ativas são independentes, o que garante que o posto de \hat{A} é completo, ou seja, $\rho(\hat{A}) = t$. Sejam os vetores $\mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^n, i = 1, 2, \dots, n - t$, linearmente independentes, tais que $\hat{A}\mathbf{z}_i = 0$; eles formam uma base para $\ker(\hat{A})$, o espaço nulo (kernel) da matriz \hat{A} . Colocando-os lado a lado forma-se a matriz $Z = [\mathbf{z}_1 \ \mathbf{z}_2 \ \dots \ \mathbf{z}_{n-t}]$ com n linhas e $n - t$ colunas, a matriz de projeção nas restrições ativas. Alguns casos particulares ajudam a entender. Se \mathbf{x}^0 é um ponto interno então não há restrições ativas nele, $t = 0$, a matriz \hat{A} não tem sentido, e diremos que $Z = \ker(\hat{A}) = \mathbb{R}^n$ e $Z = I_n$. Outro caso interessante: como no \mathbb{R}^2 podemos ter, no máximo, $t = 2$ restrições ativas para um dado \mathbf{x}^0 em RV, se três ou mais linhas retas passam por um mesmo ponto, apenas duas delas definem uma região, e podemos ignorar a outra. Uma figurinha ajudaria.

Os próximos resultados virão sem demonstrações, mas há artifícios que ajudam a aceitar e entender as condições apresentadas neles. Os cones vistos nas seções anteriores servem para isso, traduzir em termos intuitivos a fraseologia técnica das idéias que serão (apenas) apresentadas. De modo informal, seja $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução do PGORLD. Como $\mathbf{x}^* \in \text{RV}$, ou \mathbf{x}^* é interno ou está na fronteira. Se \mathbf{x}^* é interno então ele é um dos mínimos livres de f , e para ele valem os resultados já vistos na minimização sem restrições.

Se \mathbf{x}^* está na fronteira, ou ele está em uma aresta ou em um vértice. Se estiver em uma aresta, há duas possibilidades: ou a curva de nível que passa por ele é tangente à aresta, ou ela a corta. Este raciocínio já foi feito, com o auxílio dos CDVs, e leva à conclusão de que a curva de nível deve ser tangente à restrição, com o gradiente apontando para o miolo da RV. Ainda há uma possibilidade, basta olhar alguns parágrafos acima, a solução \mathbf{x}^* pode estar no encontro de duas arestas, em um vértice. Neste caso o gradiente $\nabla f(\mathbf{x}^*)$ deve estar compreendido entre as normais às restrições.

O formalismo rigoroso permite a explicação teórica e a demonstração da validade de todos estes aspectos, e vale para o caso geral do \mathbb{R}^n . Mas a idéia básica de tudo pode ser visualizada com os artifícios acima! Com estas novas bagagens já podemos encarar mais teoria.

Teorema 5.5.1 Condições Necessárias de Otimalidade. *Supondo f suficientemente suave e sendo $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PGORLD, então*

1. $A\mathbf{x}^* \geq \mathbf{b}; \quad \hat{A}\mathbf{x}^* = \hat{\mathbf{b}} \quad (\text{condição de viabilidade})$
2. $\exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid g(\mathbf{x}^*) = \hat{A}^T \lambda^* \quad (\text{condição de tangência})$
3. $\lambda_i^* \geq 0, \forall i = 1, 2, \dots, t \quad (\text{mesmo sentido das normais})$

e ainda $Z^T G(\mathbf{x}^*) Z \geq 0$, uma condição de segunda ordem.

Muito parecido com o caso anterior, o das restrições lineares de igualdade. A matriz \hat{A} , associada às restrições ativas em \mathbf{x}^* , aparece em alguns locais substituindo A . A segunda condição, de tangência, emprega os multiplicadores de Lagrange λ_i^* ; ela é, como antes, equivalente à condição do gradiente projetado, $Z^T \nabla f(\mathbf{x}^*) = Z^T g(\mathbf{x}^*) = 0$. Como sempre, as condições necessárias fornecem um processo inicial de filtragem, selecionando os candidatos (muitas vezes poucos, que bom!) que **podem** ser solução. Para efetivamente garantir a otimalidade ainda precisamos das

Teorema 5.5.2 Condições Suficientes de Otimalidade. *Supondo f suficientemente suave, seja $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ tal que*

1. $A\mathbf{x}^* \geq \mathbf{b}; \quad \hat{A}\mathbf{x}^* = \hat{\mathbf{b}}$
2. $\exists \lambda^* \in \mathbb{R}^m \mid g(\mathbf{x}^*) = \hat{A}^T \lambda^* \quad (\text{ou } Z^T g(\mathbf{x}^*) = 0)$
3. $\lambda_i^* > 0, \forall i = 1, 2, \dots, t$
4. $Z^T G(\mathbf{x}^*) Z > 0$

Então \mathbf{x}^* será uma solução local forte do PGORLD.

5.5.4 Resumo do enredo e roteiro

Para um ponto qualquer $\mathbf{x}^0 \in \text{RV}$, seja \hat{A} a matriz das restrições ativas em \mathbf{x}^0 , para a qual $\hat{A}\mathbf{x}^0 = \hat{\mathbf{b}}$ e Z cujas colunas formam uma base para $\ker \hat{A}$, ou seja, uma matriz com o máximo número possível de colunas linearmente independentes tal que $\hat{A}Z = 0$. As condições necessárias de otimalidade, CNO, são, em símbolos:

$$\begin{array}{c} \text{dada } f \in \mathcal{C}^k \\ \text{e} \\ \mathbf{x}^* \text{ solução do RLD} \end{array} \implies \left\{ \begin{array}{l} A\mathbf{x}^* \geq \mathbf{b}; \quad \hat{A}\mathbf{x}^* = \hat{\mathbf{b}} \\ \exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid \hat{A}^T \lambda^* = g(\mathbf{x}^*) \quad (\equiv Z^T g(\mathbf{x}^*) = 0) \\ \lambda_i^* \geq 0 \\ Z^T G(\mathbf{x}^*) Z \geq 0 \end{array} \right.$$

As condições suficientes de otimalidade — CSO — são, em símbolos:

$$\exists \mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n \mid \left\{ \begin{array}{l} A\mathbf{x}^* \geq \mathbf{b}; \quad \hat{A}\mathbf{x}^* = \hat{\mathbf{b}} \\ \exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid \hat{A}^T \lambda^* = g(\mathbf{x}^*) \\ \lambda_i^* > 0 \\ Z^T G(\mathbf{x}^*) Z > 0 \end{array} \right. \implies \mathbf{x}^* \text{ é solução local forte}$$

O uso das condições de otimalidade para problemas PGORLD pode ser feito através de um **roteiro** de operações. Como sempre as CNs geram os candidatos e as CSs dão a palavra final.

Pontos com $t = 0$. São pontos internos e devemos verificar quais deles satisfazem as CNO e as CSO. Mas, já que são pontos internos, isto é equivalente a usar a teoria para o caso sem restrições e verificar se existem mínimos de f em RV (devem ser internos!).

Pontos com $t = 1$. Pontos onde há apenas uma restrição ativa, são arestas no \mathbb{R}^2 , faces no \mathbb{R}^3 , etc. Devemos procurar tangências entre as curvas de nível e as restrições. Para isto considera-se, separadamente, cada

uma das restrições como sendo a única restrição ativa ou, em outros termos, para cada uma das linhas de A :

$$\mathbf{a}_i^T = \hat{A} \quad \text{e} \quad b_i = \hat{\mathbf{b}} \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Aplicando as CN e as CS verificamos se há tangência com a restrição considerada, e se o ponto candidato é solução.

Pontos com $t = 2$. Duas restrições ativas significam vértices no \mathbb{R}^2 , arestas no \mathbb{R}^3 , etc. Note-se que no \mathbb{R}^2 apenas duas restrições podem passar por um dado ponto, qualquer outra seria redundante. Para cada um dos vértices devemos identificar as restrições que o formam, montar a matriz \hat{A} e aplicar as CNO e as CSO.

Pontos com $t = 3$

Caramba, parece longo e complicado. E quase sempre é mesmo, trata-se de uma busca exaustiva que muitas vezes pode se tornar impraticável. Boa hora para exemplos que, obviamente, serão factíveis.

Exemplo 5.5.1 Minimizar uma quadrática com restrições lineares de desigualdade:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} - \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} \quad \text{s.a.} \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x} \geq 0$$

Esta quadrática é velha conhecida; a figura 5.14 ilustra as restrições.

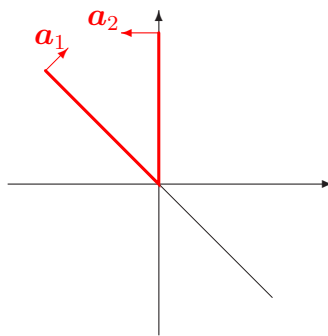


Figura 5.14: Minimizando uma quadrática com RLD

Traçando as curvas de nível da função objetivo f teríamos uma solução visual. A aplicação do roteiro acima corresponde a um vôo cego, por instrumentos. Para $t = 0$, pontos internos. Por se tratar de uma quadrática, o

gradiente é de obtenção imediata:

$$g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x}^e = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

A Hessiana é obtida por inspeção, e como se revela positiva definida concluímos que o PE acima é um mínimo global de f , mas ele não pertence à região viável, pois

$$A\mathbf{x}^e = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}^e = \begin{bmatrix} 3/2 \\ -1/2 \end{bmatrix} \not\geq 0$$

Para estudar o caso $t = 1$ supondo que apenas a restrição # 1 está ativa. A matriz das restrições ativas e a de projeção são dadas por

$$\mathbf{a}_1^T = [1 \ 1] = \hat{A} \implies Z = Z_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Para pesquisar pontos de tangência entre as curvas de nível de f e a restrição # 1 devemos anular o gradiente projetado.

$$Z^T g(\mathbf{x}) = [1 \ -1] \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} - \frac{1}{2} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = 0$$

Esta equação se reduz a $[2 \ 1]\mathbf{x} - 2 = 0$ que, em conjunto com a restrição ativa $\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{a}_1^T \mathbf{x} = [1 \ 1]\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}} = 0$ leva ao ponto de teste.

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}^0 = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

que, infelizmente, não é viável pois $A\mathbf{x}^0 \not\geq 0$, como os leitores certamente verificarão. Isto significa que a tangência se dá fora da RV, ou seja, não há solução na restrição #1. Mesmo assim é válido verificar se esta tangência é favorável, ou, em outras palavras, se o gradiente é ou não paralelo à normal de entrada. Para isto é preciso analisar a equação $g(\mathbf{x}) = \lambda \mathbf{a}_1$.

$$g(\mathbf{x}) = \lambda \mathbf{a}_1 \implies \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x}^0 - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}^0 = \begin{bmatrix} 0.5 - \lambda \\ 1 + 2\lambda \end{bmatrix}$$

Como a restrição é ativa neste ponto temos $\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}^0 = 0$ o que levaria a $\mathbf{x}^0 = [2 \ -2]^T$, fora da RV, como esperado, e $\lambda = -1.5 \not\geq 0$ o que significa que o gradiente, embora tenha a mesma direção que a normal de entrada,

aponta para o outro lado. Ainda no caso $t = 1$, agora apenas a restrição #2 é ativa.

$$\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{a}_2^T \mathbf{x} = [-1 \ 0] \mathbf{x} = 0 \quad \text{donde} \quad Z = Z_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

A pesquisa de tangência pode ser feita pelo gradiente projetado ou pelos multiplicadores de Lagrange. Na primeira opção depois deve-se verificar se o sentido do gradiente é o correto; esta tarefa já está embutida no segundo procedimento.

$$g(\mathbf{x}) = \lambda \mathbf{a}_2 \Rightarrow \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x}^0 - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{x}^0 = \begin{bmatrix} 0.5 - 2\lambda \\ 1 + 3\lambda \end{bmatrix}$$

A restrição é ativa aqui, logo $\mathbf{a}_2^T \mathbf{x}^0 = 0$ o que levaria a $\mathbf{x}^0 = [0 \ 7/4]^T$, dentro da RV!, e $\lambda^* = 1/4 > 0$ o que significa que o gradiente tem a mesma direção e o mesmo sentido da normal de entrada, apontando para o interior da RV. Tangência mais sentido correto significa que temos um candidato. Hora de as CSs entrarem em cena. As primeiras condições são trivialmente verificadas, faltando apenas a condição de segunda ordem, a da Hessiana.

$$Z^T G(\mathbf{x}^0) Z = [0 \ 1] \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 2 > 0$$

e estamos feitos, o vetor $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^0 = [0 \ 7/4]^T$ é solução do PGORLD! Mas o trabalho ainda não terminou, é preciso ainda estudar o caso $t = 2$, ou seja, as duas restrições ativas simultaneamente. É o vértice $[0 \ 0]^T$. A matriz $\hat{A} = A$ tem duas linhas linearmente independentes, logo $Z = 0 = Z^T$. A condição a ser verificada é $g(\mathbf{x}^0) = \hat{A}^T \lambda^*$:

$$g(\mathbf{x}_0) = -(1/2) \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = \hat{A}^T \alpha^* \Rightarrow \lambda^* = \begin{bmatrix} 2 \\ -7/2 \end{bmatrix} \not\geq 0$$

e não temos um candidato, muito menos uma solução.

A resolução analítica do PGORLD, com o auxílio das Condições de Otimidade desenvolvidas, mostrou-se, confirmando os temores, muito trabalhosa. E isto para um exemplo simples de uma quadrática no \mathbb{R}^2 . Qualquer tentativa de usar este procedimento em exemplos menos triviais seria, e aceita-se isto bem, temerosa. É exatamente nestas horas que os métodos numéricos mostram seu valor. A eles, pois.

5.6 Método do Gradiente Projetado

O PGORLD, Problema Geral de Otimização com Restrições Lineares de Desigualdade, é: dadas $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ suficientemente suave, uma matriz A ($m \times n$) e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ desejamos

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$$

Denotando a i -ésima linha de A por \mathbf{a}_i^T temos

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

A **hipótese básica** de trabalho é: quando se considera um ponto viável qualquer \mathbf{x}^0 , as linhas de A e de \mathbf{b} são reordenadas de modo que as restrições ativas em \mathbf{x}^0 ocupem as t primeiras posições.

$$\mathbf{x}^0 \in \text{RV} \Rightarrow A\mathbf{x}^0 \geq \mathbf{b} \quad \text{onde} \quad A = \begin{bmatrix} \hat{A} \\ A^r \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \mathbf{b}^r \end{bmatrix}$$

A matriz \hat{A} das restrições ativas em \mathbf{x}^0 é $t \times n$ e a das restrições inativas em \mathbf{x}^0 , ou restantes, A^r , é $m-t \times n$; as partições de \mathbf{b} são $\hat{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^t$ e $\mathbf{b}^r \in \mathbb{R}^{m-t}$. É óbvio que

$$\hat{A}\mathbf{x}^0 = \hat{\mathbf{b}} \quad \text{e} \quad A^r\mathbf{x}^0 > \mathbf{b}^r$$

O **Método de Rosen** ou do gradiente projetado é um método numérico onde uma sequência de pontos $\mathbf{x}^0 \mathbf{x}^1 \dots \mathbf{x}^k \dots$ converge para uma solução \mathbf{x}^* de um problema com restrições gerais de desigualdade. Segue uma versão para o caso linear, ou seja, o PGORLD. Há, em todo o procedimento, várias etapas distintas.

MR 0) Inicialização. O inicializador será sempre um ponto viável, $\mathbf{x}^0 \ni A\mathbf{x}^0 \geq \mathbf{b}$. Embora este ponto inicial possa estar na fronteira, em geral supomos que ele é interno: $\mathbf{x}^0 \ni A\mathbf{x}^0 > \mathbf{b}$.

MR 1) Andando no miolo. Dado $\mathbf{x}^0 \in \text{RV}$ com $A\mathbf{x}^0 > \mathbf{b}$ usamos um método qualquer de otimização livre ou irrestrita, como por exemplo o do gradiente. Várias possibilidades podem ocorrer.

MR 1-1) Existe solução livre \mathbf{x}^* e $\mathbf{x}^* \in \text{RV}$. O processo termina nesta primeira fase e o uso de um método livre basta para solucionar o PGORLD. Embora o inicializador \mathbf{x}^0 e a solução \mathbf{x}^* sejam viáveis, a sequência de pontos $\mathbf{x}^0 \mathbf{x}^1 \dots \mathbf{x}^k \dots \mathbf{x}^*$ pode, eventualmente, deixar a RV e a ela retornar depois, como se ilustra na figura 5.15.

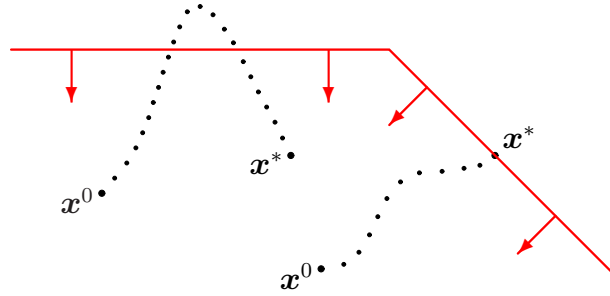
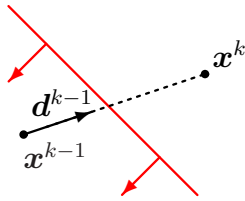


Figura 5.15: Pontos deixam a RV, mas voltam

MR 1-2) Existe solução livre x^* mas $x^* \notin RV$. A seqüência de pontos $x^0 x^1 \dots x^*$ deixa a RV em alguma iteração, para não mais retornar a ela. A solução do PGORLD fica em algum ponto da fronteira onde pelo menos uma restrição está ativa; a probabilidade de isto acontecer é grande. Seja x^k o ponto a partir do qual a seqüência não mais retorna à RV, como a seguir se ilustra.



Pela regra geral, $x^k = x^{k-1} + \alpha_{k-1} d^{k-1}$. Ao partir de x^{k-1} pela direção d^{k-1} a fronteira da RV é cruzada. Diminuindo adequadamente o valor do avanço α_{k-1} podemos trazer x^k até a fronteira, e deste ponto começará a fase 2 do método.

Como então encontrar α_c tal que $x^{k-1} + \alpha_c d^{k-1}$ apenas encosta na fronteira? Sabemos que $x^k = x^{k-1} + \alpha_{k-1} d^{k-1} \notin RV$, então as linhas de A e as de b podem ser reordenadas, colocando as restrições violadas em x^k nas primeiras posições. As primeiras linhas das “novas” matrizes A e b serão denotadas por A^v e b^v , e suas últimas linhas, associadas a restrições que permanecem satisfeitas em x^k , serão A^s e b^s . É imediato perceber que

$$x^{k-1} \in RV : \begin{cases} A^v x^{k-1} > b^v \\ A^s x^{k-1} > b^s \end{cases} \quad x^k \notin RV : \begin{cases} A^v x^{k-1} < b^v \\ A^s x^{k-1} \geq b^s \end{cases}$$

donde se conclui que α_c é a solução real para a equação

$$A^v (x^{k-1} + \alpha_c d^{k-1}) = b^v \quad (5.7)$$

Esta expressão (5.7) finaliza o que se pode chamar de “procedimento para encostar na fronteira”, com utilidade aqui e em outras partes, como se verá.

MR 1-3) Não existe solução irrestrita mas $\mathbf{x}^k \in \text{RV} \forall k$. O método livre não converge e (como não convergiria para uma função objetivo linear, por exemplo) mas avança sempre dentro da RV: o PGORLD não tem solução.

MR 1-4) Não existe solução livre mas \mathbf{x}^k sai da RV. O problema pode ter soluções mesmo para funções que não apresentam minimizadores locais ou globais, como por exemplo as lineares. Neste caso a sequência de pontos $\mathbf{x}^0 \mathbf{x}^1 \dots \mathbf{x}^k \dots$ do algoritmo irrestrito fatalmente deixará a RV, e deve-se usar o procedimento visto no item MR 1-2 para obrigar \mathbf{x}^k a encostar na fronteira, de onde começará a fase 2.

Exemplo 5.6.1 Considere o PGORLD

$$\min f(\mathbf{x}) = [1 \ 1 \ 1]\mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \quad \text{s. a.} \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \geq \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

O gradiente de f , em qualquer $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ é $\nabla f = \mathbf{g} = [1 \ 1 \ 1]^T$ donde a ddm (direção de descida máxima) em qualquer ponto é $\mathbf{d}_m = -\mathbf{g} = -[1 \ 1 \ 1]^T$. A primeira iteração do método do gradiente a partir do ponto viável $\mathbf{x}^0 = [8 \ 6 \ 4]^T$ leva a

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}_m = \begin{bmatrix} 8 - \alpha \\ 6 - \alpha \\ 4 - \alpha \end{bmatrix} \implies A\mathbf{x}^1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 - \alpha \end{bmatrix}$$

É fácil ver que \mathbf{x}^1 encosta na fronteira da RV (na terceira restrição) quando $2 - \alpha = 1$ ou seja, $\alpha_c = 1$ levando ao ponto de toque

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^c = \mathbf{x}^0 + \alpha_c \mathbf{d}_m = \begin{bmatrix} 8 \\ 6 \\ 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Para as mesmas restrições A e \mathbf{b} seja agora $f(\mathbf{x}) = [-4 \ -3 \ -2]\mathbf{x}$. A ddm em qualquer ponto é $\mathbf{d}_m = -\mathbf{g} = [4 \ 3 \ 2]^T$. A primeira iteração do método do gradiente a partir do mesmo ponto viável \mathbf{x}^0 leva a

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}_m = \begin{bmatrix} 8 + 4\alpha \\ 6 + 3\alpha \\ 4 + 2\alpha \end{bmatrix} \implies A\mathbf{x}^1 = \begin{bmatrix} 2 + \alpha \\ 2 + \alpha \\ 2 + \alpha \end{bmatrix} > \mathbf{b} \quad \forall \alpha > 0$$

O método do gradiente leva a pontos sempre viáveis, ou seja, o PGORLD não apresenta soluções.

MR 2) Andando na fronteira. Dado \mathbf{x}^k na fronteira da RV busca-se uma sequência de pontos $\mathbf{x}^k \mathbf{x}^{k+1} \mathbf{x}^{k+2} \dots$, todos na fronteira, convergindo para uma solução \mathbf{x}^* do PGORLD. É preciso aprender a caminhar “dentro” das restrições como se vê na figura 5.16. Cada iteração será regida pela relação tradicional $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$. Quando não houver problemas de ambiguidade, $\alpha_k \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{d}^k \in \mathbb{R}^n$ serão designados por α e \mathbf{d} , levando a $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}$.

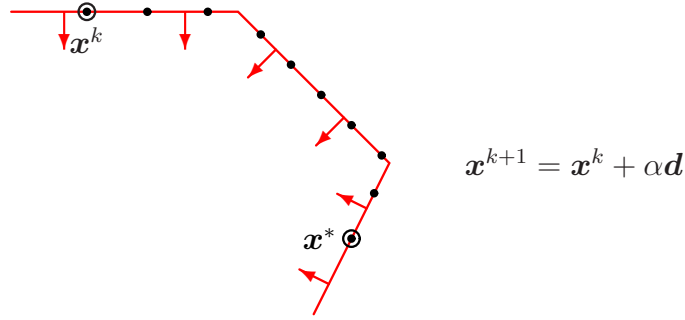
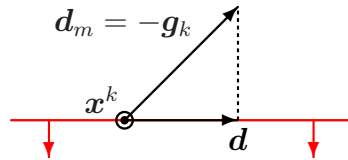


Figura 5.16: Andando na fronteira

MR 2-1) Direção de avanço. O primeiro objetivo é encontrar uma direção de avanço $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ tal que o próximo ponto permaneça na fronteira e cause uma diminuição no valor da função objetivo:

$$\mathbf{x}^k \text{ na fronteira} \dots \text{encontrar } \mathbf{d} \ni \begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d} \text{ na fronteira} \\ f(\mathbf{x}^{k+1}) < f(\mathbf{x}^k) \end{cases}$$

Para garantir avanços sempre na fronteira é preciso escolher $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\hat{A}\mathbf{d} = 0$ onde \hat{A} é a matriz das restrições ativas em \mathbf{x}^k . Para f decrescer é preciso escolher uma direção de descida, ou seja, tal que $\mathbf{d}^T \nabla_f(\mathbf{x}^k) < 0$. No caso livre, os decréscimos mais rápidos da função objetivo são conseguidos usando a ddm, velha conhecida: $\mathbf{d}_m = -\nabla_f(\mathbf{x}^k) = -\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) = -\mathbf{g}_k$. Para a situação atual pode-se conseguir um avanço mais rápido usando a **projeção da ddm na restrição**.



Examinando a representação gráfica ao lado, no \mathbb{R}^2 , parece fácil projetar \mathbf{d}_m , encontrar a direção de avanço \mathbf{d} e caminhar dentro da restrição, mas é preciso um método geral.

Uma possibilidade de conseguir isto já é conhecida: para \mathbf{x}^k viável, com $A\mathbf{x}^k \geq \mathbf{b}$, sejam \hat{A} ($t \times n$) a matriz das restrições ativas em \mathbf{x}^k , com posto t , e Z ($n \times n - t$) tal que $\hat{A}Z = 0$; o produto $Z^T \mathbf{v}$ projeta um

vetor qualquer \mathbf{v} na restrição. Esta, entretanto, é uma projeção pouco interessante pois o resultado $Z^T \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{n-t}$ e tem dimensão reduzida, menor que n . O problema da projeção ortogonal, visto na seção 5.4.2, pode ser aplicado nesta situação, levando a

$$\mathbf{d} = P\mathbf{d}_m = -P\mathbf{g}_k \quad \text{onde} \quad P = I_n - \hat{A}^T(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A}$$

A matriz projetiva P é $(n \times n)$, logo a direção projetada $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como se desejava. A expressão acima é bastante simples e será empregada no algoritmo; ela, porém, pode ser modificada:

$$\begin{aligned} \mathbf{d} = P\mathbf{d}_m &= (I_n - \hat{A}^T(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A})\mathbf{d}_m \\ &= \mathbf{d}_m + \hat{A}^T(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A}\mathbf{g}_k = \mathbf{d}_m + \hat{A}^T\gamma \end{aligned}$$

onde $\gamma = (\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A}\mathbf{g}_k \in \mathbb{R}^t$ e $\hat{A}^T\gamma$ é o **vetor projetante**, a linha tracejada na ilustração anterior.

MR 2-2) Quantidade de avanço. Conhecida a direção de avanço $\mathbf{d} = P\mathbf{d}_m$ resta encontrar o passo, ou quantidade, ou distância de avanço α . A técnica de busca em linha, ou linear, será adotada. Sendo \mathbf{x}^k e \mathbf{d} grandezas fixas, o vetor $\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d}$ depende apenas do real α e assim $f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d})$ se transforma em um função real da variável real α .

$$\begin{array}{c} \mathbf{x}^k \xrightarrow{\mathbf{d}} \cdots \mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d} \end{array} \quad f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d}) = \tilde{f}(\alpha)$$

Quando $\alpha \in [0, \infty)$ o ponto $\mathbf{x} = \mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d}$ sai de \mathbf{x}^k e percorre a direção de avanço no sentido indicado por \mathbf{d} ; a derivada de \tilde{f} com relação a α permite saber se f é crescente, decrescente ou estacionária em \mathbf{x} . Pode-se demonstrar que

$$\tilde{f}'(\alpha) = \lim_{\Delta\alpha \rightarrow 0^+} \frac{f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d} + \Delta\alpha\mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d})}{\Delta\alpha} = \dots = \mathbf{d}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d})$$

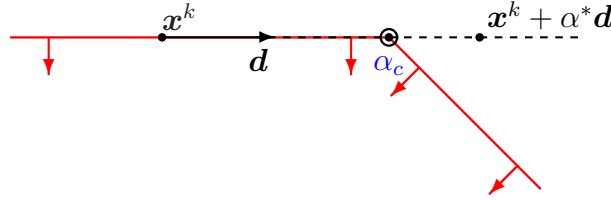
É o produto escalar entre a direção de avanço \mathbf{d} e o gradiente no “novo” ponto \mathbf{x} . O sinal de \tilde{f}' em $\alpha = 0$ é obtido imediatamente: $\tilde{f}'(0) < 0$ pois a ddm projetada \mathbf{d} é uma direção de descida. O estudo do sinal de $\tilde{f}'(\alpha)$ para $\alpha > 0$, em particular os pontos em que $\tilde{f}'(\alpha)$ se anula, é muito importante.

MR 2-2-1) Existe $\alpha^* > 0$ tal que $\tilde{f}'(\alpha^*) = 0$ e $\mathbf{x}^k + \alpha^*\mathbf{d} \in \mathbf{RV}$. A derivada direcional se anula em um ponto viável: avançando mais a função objetivo deixa de decrescer, logo

$$\alpha_k = \alpha = \alpha^* \quad \longrightarrow \quad \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}$$

e o algoritmo prossegue.

MR 2-2-2) Existe $\alpha^* > 0$ tal que $\tilde{f}'(\alpha^*) = 0$ mas $\mathbf{x}^k + \alpha^* \mathbf{d} \notin \mathbf{RV}$. A direção \mathbf{d} encontra uma barreira e o avanço ótimo estaria além dela. É preciso avançar menos, encontrar $0 < \alpha_c < \alpha^*$ tal que $\mathbf{x}^k + \alpha_c \mathbf{d}$ apenas encoste na quina. No \mathbb{R}^2 :



Para encontrar α_c entra em cena, novamente, o procedimento de encostar na fronteira resumido pela equação (5.7) em MR 1-2.

$$\alpha_k = \alpha = \alpha_c \quad \longrightarrow \quad \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}$$

e o algoritmo prossegue.

MR 2-2-3) $\nexists \alpha^* > 0$ tal que $\tilde{f}'(\alpha^*) = 0$ e $\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d} \in \mathbf{RV} \forall \alpha > 0$. A direção de avanço \mathbf{d} é uma direção de descida ilimitada. Se todos os pontos nela (para $\alpha > 0$) são viáveis isto significa que não existe solução para o PGORLD.

MR 2-2-4) $\nexists \alpha^* > 0$ tal que $\tilde{f}'(\alpha^*) = 0$ mas $\exists \bar{\alpha} > 0 \ni \mathbf{x}^k + \alpha^* \mathbf{d} \notin \mathbf{RV}$. A direção \mathbf{d} desce sem limites, mas encontra uma barreira, ou quina, e devemos proceder como em MR 2-2-2: encontrar $\alpha_c \dots$

$$\alpha_k = \alpha = \alpha_c \quad \longrightarrow \quad \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}$$

e o algoritmo prossegue.

MR 3) Quando parar? O mecanismo mostrado acima funciona desde que $\mathbf{d} = P\mathbf{d}_m = -P\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) \neq 0$. Quando a direção de avanço é nula ... não se pode avançar, claro. Isto significaria que se chegou ao destino procurado, ou seja, as CNO foram satisfeitas e o algoritmo terminou? Vejamos. A direção de avanço é a projeção ortogonal da ddm:

$$\mathbf{d} = P\mathbf{d}_m = (I_n - \hat{A}^T(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A})\mathbf{d}_m = -\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) + \hat{A}^T\gamma$$

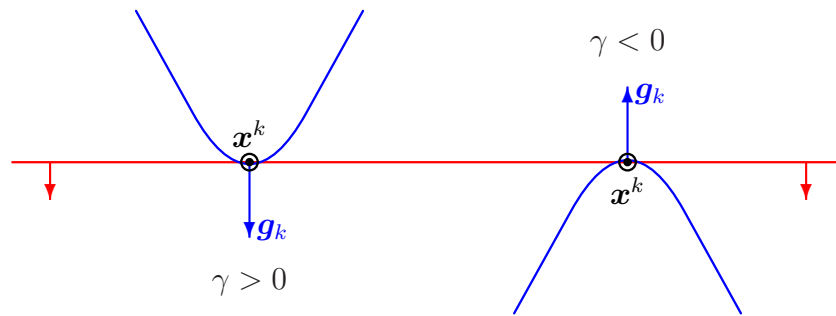
onde $\gamma \in \mathbb{R}^t$ e $\hat{A}^T\gamma$ é o vetor projetante, como visto há poucas linhas. Se $\mathbf{d} = 0$ em \mathbf{x}^k temos

$$-\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) + \hat{A}^T\gamma = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}^k) = \hat{A}^T\gamma = \mathbf{a}^1\gamma_1 + \mathbf{a}^2\gamma_2 + \dots + \mathbf{a}^t\gamma_t$$

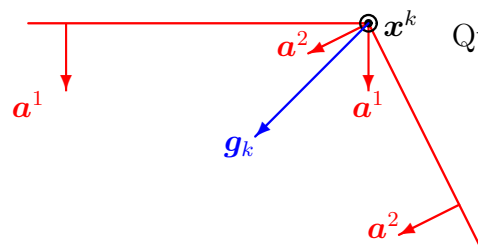
Esta é uma das CNOs, a condição de tangência: a curva de nível é tangente à restrição em \mathbf{x}^k . Além disso os elementos $\gamma_1, \gamma_2 \dots \gamma_t$ são os multiplicadores de Lagrange associados. Já há, assim, indícios de parada... mas não há certeza ainda, outras condições devem ser verificadas.

MR 3-1) A direção de avanço $\mathbf{d} = 0$ e $\gamma_i \geq 0 \forall i = 1, 2 \dots t$. Quando há apenas uma restrição ativa em \mathbf{x}^k , $t = 1$, a visualização, no \mathbb{R}^2 como sempre, é factível, e é mostrada a seguir. Antes, porém, uma série de sentenças equivalentes, oriundas dos fundamentos teóricos do PGORLD:

$\mathbf{d} = 0$, direção de avanço nula
tangência entre curva de nível de f e restrição
paralelismo entre gradiente de f e normal de entrada
transversalidade entre gradiente de f e restrição



Havendo paralelismo, $\gamma < 0$ indica um **máximo** e $\gamma > 0$ um **mínimo**. Quando $t = 2$ ainda se pode visualizar, no \mathbb{R}^2 , claro: estamos em uma esquina.



Quando $\gamma_1 \geq 0$ e $\gamma_2 \geq 0 \dots$

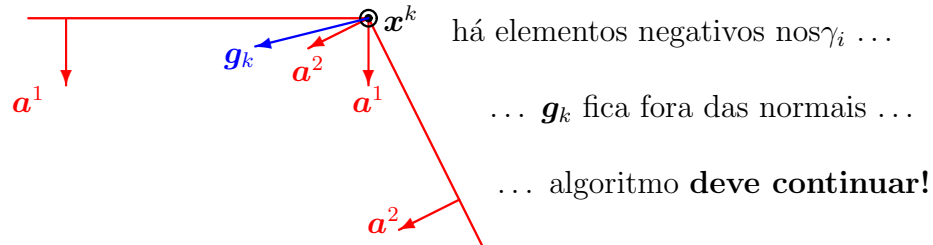
$\dots \mathbf{g}_k$ fica entre as normais \dots

\dots e temos um **mínimo!**

Quando $t > 2$ é muito difícil visualizar como feito acima e as condições analíticas devem ser empregadas: se $\mathbf{d} = 0$ e $\gamma_i \geq 0 \forall i = 1, 2 \dots t$ significa que **o algoritmo pode parar**.

MR 3-2) A direção de avanço $\mathbf{d} = 0$ e há elementos negativos em γ . Como sempre, a visualização no \mathbb{R}^2 ajuda. Se $t = 1$ e $\gamma < 0$ é o caso de um máximo, como já visto; se $t = 2$ a figura a seguir ilustra que

existe um CDV não nulo, logo ainda não se chegou a uma solução e o algoritmo deve continuar.



Usando uma linguagem sugerida pelas ilustrações, é preciso “sair da esquina” e mais, “sair da esquina pela rua que desce”. Devemos **desativar uma restrição**: retirar uma linha de \hat{A} e recomeçar. Qual restrição desativar? Aquela correspondente ao “pior” γ_i , o mais negativo:

$$\gamma_j^* = \min\{\gamma_1, \gamma_2 \dots \gamma_t\} \implies \text{desativar a } j\text{-ésima restrição}$$

Exemplo 5.6.2 Considere, novamente, o PGORLD

$$\min f(\mathbf{x}) = [1 \ 1 \ 1]\mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \quad s. \ a. \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \geq \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

No exemplo 5.6.1, a primeira iteração do método do gradiente partia do ponto viável $\mathbf{x}^0 = [8 \ 6 \ 4]^T$ levando a um ponto \mathbf{x}^1 na fronteira da RV:

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^c = \mathbf{x}^0 + \alpha_c \mathbf{d}_m = \begin{bmatrix} 8 \\ 6 \\ 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Como a restrição tocada era a terceira, a matriz A deve ter suas linhas reordenadas

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad \hat{A} = [-1 \ 1 \ 1]$$

A matriz de projeção pode ser calculada

$$P = I_3 - \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \left([-1 \ 1 \ 1] \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} [-1 \ 1 \ 1] = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Como f é linear sua ddm é constante, logo

$$\mathbf{d} = P\mathbf{d}_m = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Para calcular a quantidade de avanço da iteração, o próximo ponto é $\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \alpha\mathbf{d}$, e

$$f(\mathbf{x}^2) = f(\mathbf{x}^1 + \alpha\mathbf{d}) = [1 \ 1 \ 1] \begin{bmatrix} 7 - 4\alpha/3 \\ 5 - 2\alpha/3 \\ 3 - 2\alpha/3 \end{bmatrix} = 15 - 8\alpha/3$$

um valor que diminui sempre! Isto significa que será necessário “dobrar uma esquina”. Para encostar na próxima restrição:

$$A(\mathbf{x}^2) = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7 - 4\alpha/3 \\ 5 - 2\alpha/3 \\ 3 - 2\alpha/3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 - 2\alpha/3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

A primeira componente deste vetor $= 1 \ \forall \alpha > 0$, a segunda componente $> 1 \ \forall \alpha > 0$; apenas a terceira componente pode inviabilizar \mathbf{x}^2 , e o ponto de toque ocorre quando $2 - 2\alpha/3 = 1$, ou seja, $\alpha = \alpha_c = 3/2$. Com isto,

$$\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \alpha\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 5 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix} \implies A\mathbf{x}^2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \implies \hat{A} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$P = I_3 - \hat{A}^T(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \implies \mathbf{d} = P\mathbf{d}_m = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$f(\mathbf{x}^3) = f(\mathbf{x}^2 + \alpha\mathbf{d}) = [1 \ 1 \ 1] \begin{bmatrix} 5 - \alpha \\ 4 - \alpha \\ 2 \end{bmatrix} = 11 - 2\alpha$$

um valor que, novamente, diminui sempre! Mais uma vez será necessário “dobrar uma esquina”. Para encostar na próxima restrição:

$$A(\mathbf{x}^2 + \alpha\mathbf{d}) = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 - \alpha \\ 4 - \alpha \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 - \alpha \end{bmatrix}$$

o que garante que o ponto de toque ocorre quando $2 - \alpha = 1$, ou seja, $\alpha = \alpha_c = 1$. Esta iteração fica

$$\mathbf{x}^3 = \mathbf{x}^2 + \alpha \mathbf{d} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} \implies A\mathbf{x}^3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \implies \hat{A} = A$$

$$P = I_3 - A^T(AA^T)^{-1}A = 0 \implies \mathbf{d} = P\mathbf{d}_m = 0$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^3) = \hat{A}^T \gamma \implies \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{bmatrix} \implies \gamma = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix} > 0$$

Isto mostra que $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^3 = [4 \ 3 \ 2]^T$ é solução do PGORLD.

Exemplo 5.6.3 Minimizar a quadrática com restrições lineares de desigualdade:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} - \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} \quad \text{s.a.} \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \geq 0$$

No exemplo 5.5.1 esta quadrática foi minimizada com a aplicação dos resultados analíticos: tangências entre curvas de nível e restrições eram procuradas (pontos estacionários) e as condições teóricas eram testadas. Agora o trabalho será feito com o método de Rosen. Para um inicializador já na fronteira:

$$\mathbf{x}^0 = \begin{bmatrix} -2 \\ 2 \end{bmatrix}; \quad A\mathbf{x}^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} \implies \hat{A} = [1 \ 1]$$

$$\mathbf{d}_m = -\mathbf{g}(\mathbf{x}^0) = -\begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x}^0 + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 19 \\ 11 \end{bmatrix}$$

$$P = I_2 - \hat{A}^T(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{d} = P\mathbf{d}_m = 2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{f}'(\alpha) = \mathbf{d}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}) = [4 \ -4] \left(\begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha - 1 \\ 1 - \alpha \end{bmatrix} - \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} \right) = 4\alpha - 8$$

Esta derivada se anula em $\alpha = 2$ o que levaria a $\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 + 2\mathbf{d} = [2 \ -2]^T$. Para testar a viabilidade: $A\mathbf{x}^1 = [0 \ -2]^T$ donde $\mathbf{x}^1 \notin RV$ e $A^v = [-1 \ 0]$. Para encontrar o ponto de toque:

$$A^v(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{d}) = 0 \implies [-1 \ 0] \begin{bmatrix} 2\alpha - 2 \\ 2 - 2\alpha \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow \alpha = \alpha_c = 1$$

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 + \alpha_c \mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \hat{A} = A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow P = 0; \mathbf{d} = 0$$

É preciso verificar os multiplicadores de Lagrange para saber se este ponto é uma solução, ou apenas uma etapa intermediária.

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^1) = \hat{A}^T \gamma \Rightarrow \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x}^1 - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \gamma \Rightarrow \gamma = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -7 \\ 4 \end{bmatrix}$$

O ponto \mathbf{x}^1 é uma “esquina” e para prosseguir devemos desativar a pior restrição, no caso a primeira, associada a $\gamma_1 < 0$, o que traz $\hat{A} = [-1 \ 0]$ e

$$P = I_2 - \hat{A}^T (\hat{A} \hat{A}^T)^{-1} \hat{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{d} = P \mathbf{d}_m = \frac{1}{2} P \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 7/2 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{f}'(\alpha) = \mathbf{d}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^1 + \alpha \mathbf{d}) = 0 \Leftrightarrow \dots \alpha = 1/2$$

A iteração pode ser concluída:

$$\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \alpha \mathbf{d} = \frac{7}{4} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \hat{A} = [-1 \ 0] \Rightarrow P = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^2) = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{d}_m = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

É fácil notar que $\mathbf{d} = P \mathbf{d}_m = 0$ e devemos verificar, mais uma vez, os multiplicadores de Lagrange

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^2) = \hat{A}^T \gamma \Rightarrow \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} \gamma \Rightarrow \gamma = \frac{1}{4} > 0$$

o que termina o algoritmo! A figura abaixo ilustra a geometria dos passos do procedimento

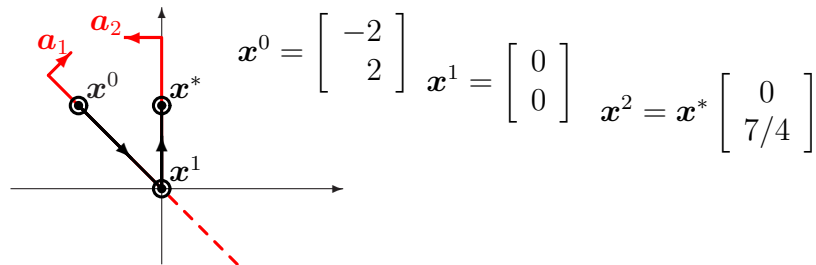


Figura 5.17: Método de Rosen para quadrática com RLD

Hora de sistematizar. Note-se que, estando a solução em alguma parte da fronteira, como ocorre na maior parte dos casos, o método busca uma solução exata e os conceitos de tolerâncias e \mathbf{x}^k suficientemente próximo de \mathbf{x}^* perdem um pouco o sentido. Assim, as instruções abaixo, embora possam ser adaptadas ao caso mais geral, assumem movimentos na fronteira.

Algoritmo 5.6.1 (Método do Gradiente Projetado: Rosen)

Dados:

- $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, uma função suave
- uma RV no \mathbb{R}^n delimitada por $A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$
- inicializador $\mathbf{x}^0 \in RV$

Objetivo: Encontrar $\mathbf{x}^k \in \mathbb{R}^n$ suficientemente próximo do mínimo \mathbf{x}^* de f , ou encontrar \mathbf{x}^* na fronteira.

Operações

1. $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^0$; armar o passo k
2. $\hat{A}; A^r; \hat{\mathbf{b}}; \mathbf{b}^r$; estabelecer atividade em \mathbf{x}^k
3. $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{x}^k); \mathbf{d}_m = -\mathbf{g}$; encontrar a ddm
4. $P = I_n - \hat{A}^T(\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A}$; matriz projetante
5. $\mathbf{d} = P\mathbf{d}_m$; ddm projetada
6. $\mathbf{d} = 0 \dots$ não se pode avançar
 - (a) $\gamma = (\hat{A}\hat{A}^T)^{-1}\hat{A}\mathbf{g}$; multiplicadores de Lagrange
 - (b) $\gamma_i \geq 0 \forall i \rightarrow \mathbf{x}^k$ satisfaz CNO !!! parada!
 - (c) $\exists \gamma_i < 0 \rightarrow$ desativa pior restrição \rightarrow volta ao passo 2.
7. $\mathbf{d} \neq 0 \dots$ avanço é possível
8. $\exists \alpha_c \ni$ alguma linha de $A^r(\mathbf{x}^k + \alpha_c \mathbf{d}) = 0$ avanço crítico
 - (a) $\tilde{f}'(\alpha_c) < 0 \rightarrow \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_c \mathbf{d} \rightarrow \mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k+1} \rightarrow$ volta ao passo 2.
 - (b) $\tilde{f}'(\alpha_c) > 0 \rightarrow$ vai ao passo 9.
9. $\exists \alpha^* \ni \tilde{f}'(\alpha^*) = 0$
10. $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha^* \mathbf{d} \rightarrow \mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k+1} \rightarrow$ volta ao passo 2.

Capítulo 6

Programação Linear

Quando se quer minimizar uma função **linear** com restrições (de igualdade ou desigualdade) também lineares, temos um problema de Programação Linear, PPL ou simplesmente PL. Uma função objetivo linear é dada por

$$f(\mathbf{x}) = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n = \mathbf{x}^T \mathbf{c} = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

onde $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ é o vetor dos coeficientes c_i . O PGO fica então

$$\min f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad A\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$$

6.1 Geometria básica

Como f é linear temos, $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$: $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}$ e $\nabla^2 f(\mathbf{x}) = 0$. Funções lineares deste tipo, lembremos, são ilimitadas e não apresentam máximos ou mínimos, logo a solução do PPL sempre estará ou nas arestas ou nos vértices. No \mathbb{R}^2 a visualização é possível, e muito instrutiva. Seja então um PPL com apenas uma restrição: para $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$, $\min f(\mathbf{x}) = [1 \ 1]\mathbf{x}$ s.a. $[1 \ -1]\mathbf{x} > 1$. A figura 6.1 mostra as curvas de nível de f e a restrição.

A imagem é tão forte que permite uma generalização, válida, é bom frizar, no \mathbb{R}^2 : PPLs com uma única restrição terão solução apenas quando esta for perpendicular ao gradiente (paralela às curvas de nível), caso em que todos os pontos são solução. Agora colocamos duas restrições para a mesma função objetivo: para $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$, $\min f(\mathbf{x}) = [1 \ 1]\mathbf{x}$ s.a.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \end{bmatrix} \mathbf{x} > \mathbf{b}$$

A figura 6.2 mostra as curvas de nível de f e três tipos de combinação entre as duas restrições. É fácil perceber que as RVs são convexas, e em um

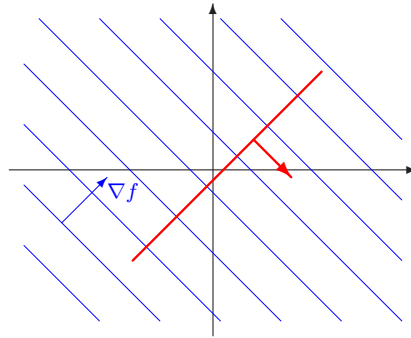


Figura 6.1: Restrição única paralela ao gradiente

dos casos (qual, leitores?) a solução está no vértice, em outro as soluções estão em uma aresta, e no outro não há solução, ou melhor, não há um mínimo, mas há um máximo.

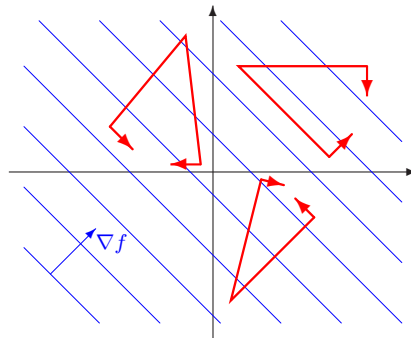


Figura 6.2: PPL no plano com duas restrições

O que acontece quando as retas que definem as restrições são paralelas? Há três possibilidades básicas:

- A interseção dos semiplanos é vazia e portanto não existe RV.
- Um dos semiplanos está contido no outro e portanto uma das restrições é supérflua, pode ser descartada e recaímos no caso anterior, de uma única restrição.
- A interseção dos semiplanos é a faixa ilimitada entre as duas retas. Que acontece com a solução neste caso, leitores?

Seja ainda a mesma função objetivo no \mathbb{R}^2 , mas agora com três restrições de desigualdade. Supondo RV não vazia, uma das possibilidades é que ela seja o triângulo delimitado pelas retas, uma região convexa e limitada. Esta

situação é muito interessante, pois sempre haverá mínimos e máximos, em vértices ou arestas, como a figura 6.3 ajuda a visualizar. Algumas linhas acima foi sugerido que ainda há outra possibilidade de RV não vazia para três restrições. Esta fica para vocês, leitores.

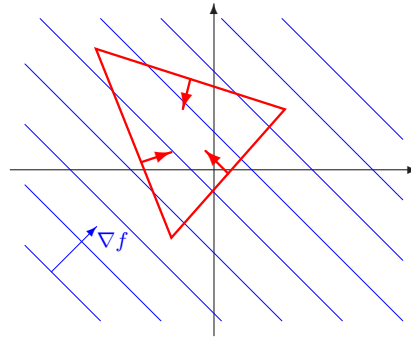


Figura 6.3: PPL no plano com três restrições

E o caso de mais de três restrições no \mathbb{R}^2 , como fica? Em primeiro lugar, a RV deve existir, a interseção dos semiplanos deve ser não vazia. Assim como três retas podem levar a RVs triangulares, é fácil perceber que mais restrições podem levar também a regiões limitadas e convexas. Como as restrições são retas, estas regiões são **polígonos**, não necessariamente regulares. As RVs poderão ser quadradas, pentagonais, hexagonais, etc. Uma função objetivo linear em RVs poligonais convexas sempre apresentará máximos e mínimos, que podem ser facilmente detectados. Este *facilmente* é porque estamos no \mathbb{R}^2 , claro. Quando $n \geq 3$ que se pode dizer?

Algumas generalizações parecem ser seguras. Se as RVs forem **polítopos convexos** — os correspondentes n -dimensionais dos polígonos convexas planos — então sempre haverá soluções que poderão se localizar nos correspondentes das arestas, ou dos vértices. Dá para aceitar, mas como encontrar estas soluções? Teremos que efetuar um vôo cego, pois não há condições de visibilidade. Seja o PPL: para $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, $\min f(\mathbf{x}) = [1 \ 1 \ 1]\mathbf{x}$ s.a.

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} \geq \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Analisaremos individualmente cada uma das restrições. Se a i -ésima delas for perpendicular ao gradiente então tudo bem, todos os pontos da “aresta” são soluções, caso contrário nada feito. Seja então a restrição # 1, represen-

tada pela primeira linha de A :

$$[1 \ -1 \ 0]\mathbf{x} = 1 \Rightarrow Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow Z^T g(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Como este vetor não é nulo, não existe tangência. Cálculo análogo para as outras duas restrições levaria ao mesmo resultado o que nos permite concluir que as soluções não estão em planos do \mathbb{R}^3 . O próximo passo é combinar as restrições duas a duas. Para as duas primeiras linhas de A temos

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow Z = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow Z^T g(\mathbf{x}) = \dots$$

Combinaríamos as restrições i e j e aplicaríamos as CNO e as CSO. Neste caso as combinações representam retas do \mathbb{R}^3 , e ou estas retas não contêm soluções ou todos seus pontos são soluções. Ainda precisamos combinar as três restrições simultaneamente, o que nos daria um ponto no \mathbb{R}^3 , um vértice. Em nosso caso numérico,

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ e o candidato único é } \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Para aplicar as condições restantes devemos verificar se existe $\lambda^* \in \mathbb{R}^3$ tal que $\hat{A}^T \lambda^* = g(\bar{\mathbf{x}})$ e se $\lambda^* > 0$. A resposta seria positiva. A conclusão é direta: mesmo em um caso simples de $n = 3$ a solução teórica do PPL pode ficar impraticável, será preciso usar métodos numéricos!

6.2 Programação Linear, mais detalhes

Soluções analíticas para o problema de otimizar uma função objetivo linear com restrições também lineares, de igualdade e desigualdade, já foram apresentadas na teoria básica de capítulos anteriores e também na última seção. As dificuldades operacionais decorrentes obrigam o emprego dos métodos numéricos. Há métodos numéricos de duas famílias distintas para resolver estes problemas, a família SIMPLEX, que envolve manipulações elementares nos elementos de uma matriz e que tem sido usada quase com exclusividade desde seu aparecimento em 1947, e as técnicas mais modernas de pontos interiores, do final da década de 1980. Antes de apresentar e detalhar estes métodos, segue uma série de situações práticas onde a aplicação de técnicas de PL pode ajudar.

6.3 Exemplos práticos

6.3.1 Problema geral da dieta

Minimizar gasto com alimentos mantendo dieta equilibrada.

Compramos x_i unidades de cada um dos n alimentos.

Custo de cada alimento é c_i .

Custo total = $c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n = \mathbf{c}^T \mathbf{x} = f(\mathbf{x})$.

Alimento i possui a_{1i} gramas de proteína

Total de proteína: $a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = \mathbf{a}_1^T \mathbf{x}$

Necessidade mínima de proteína: b_1

Alimento i possui a_{2i} gramas de carboidrato

Total de carboidrato: $a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = \mathbf{a}_2^T \mathbf{x}$

Necessidade mínima de carboidrato: b_2

OK, já deve ter dado para perceber o espírito da coisa. Vamos supor que, além de proteína e carboidratos, temos outros elementos essenciais tipo gorduras, fibras, vitaminas, etc, em um total de m . A meta do problema é minimizar o custo total

$$c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

satisfazendo as restrições de equilíbrio alimentar

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &\geq b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &\geq b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &\geq b_m \end{aligned}$$

Ainda há um outro tipo de restrição, quase sempre presente em problemas práticos. Queremos realmente comprar os alimentos, ou seja, as quantidades x_i devem ser positivas! A menos, claro, que também se considere possível a **venda** dos produtos. Mas aí o modelo mudaria. Usando a notação matricial mais densa e compacta podemos formular o problema como

$$\min f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad \begin{cases} A\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \\ \mathbf{x} \geq 0 \end{cases}$$

Trata-se de um PPL de minimização, com restrições (lineares, claro) de desigualdade do tipo maior ou igual.

6.3.2 Problema de refinaria

É uma simplificação. Dois produtos são refinados, gasolina e gás-óleo por exemplo. Sendo x_1 e x_2 a quantidade de cada um deles produzida em um dado período e sendo \$7 o lucro (preço de venda menos custo total de refino, em unidades monetárias por unidade do produto) associado à gasolina e \$5 o do gás-óleo, o lucro total obtido com estes dois produtos em um período é

$$f(x_1, x_2) = 7x_1 + 5x_2 = \begin{bmatrix} 7 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

Na refinaria existe um tanque para a destilação atmosférica. Se esse tanque fosse empregado exclusivamente para o refino da gasolina a produção seria de 500 000 toneladas em um período; se apenas o gás-óleo fosse produzido seriam 600 000 toneladas desse produto, por período. O importante a notar é que o tamanho do tanque limita a quantidade dos produtos em cada período. Os leitores são convidados a usar uma regrinha de três simples para concluir que

$$\frac{x_1}{500000} + \frac{x_2}{600000} \leq 1$$

Tanto gasolina como gás-óleo precisam também ser dessulfurados. O reservatório de dessulfuração da refinaria é capaz de processar 700 000 toneladas de gasolina por período ou então 500 000 toneladas de gás-óleo. Um raciocínio análogo levaria a

$$\frac{x_1}{700000} + \frac{x_2}{200000} \leq 1$$

O refino da gasolina exige ainda o seu reforming catalítico, cujo reservatório tem capacidade máxima de 400 000 toneladas. O gás-óleo não precisa deste processo e não compete assim com a gasolina neste item, mas ele precisa sofrer o cracking catalítico, e a gasolina não. A capacidade do tanque de cracking é de 450 000 toneladas, por período. Estas duas restrições adicionais podem ser escritas como

$$x_1 \leq 400000 \quad \text{e} \quad x_2 \leq 450000$$

A meta do problema é maximizar o lucro com os dois produtos:

$$\text{lucro} = 7x_1 + 5x_2 = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

satisfazendo as restrições de capacidade dos reservatórios

$$\begin{aligned} x_1 + (5/6)x_2 &\leq 500000 \\ x_1 + (7/5)x_2 &\leq 700000 \\ x_1 + 0x_2 &\leq 400000 \\ 0x_1 + x_2 &\leq 450000 \end{aligned}$$

Refinarias normalmente querem **produzir**, e isto significa $x_1 > 0$ e $x_2 > 0$. Valores negativos poderiam ser admitidos se a refinaria **comprasse** produtos refinados. Usando a notação matricial

$$\min f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad \begin{cases} A\mathbf{x} \leq \mathbf{b} \\ \mathbf{x} \geq 0 \end{cases}$$

Trata-se de um PPL de maximização, com restrições lineares de desigualdade do tipo menor ou igual e também maior ou igual.

6.3.3 Produção de ligas metálicas

Uma indústria metalúrgica tem como matérias primas cinco tipos diferentes de ligas metálicas. Há no almoxarifado 500 Kg da variedade #1, e seu preço por Kg é \$ 6. Esta primeira liga possui 10% de um certo elemento A e 90% de um outro elemento B. A tabela abaixo lista as propriedades de todas as ligas em estoque.

Liga #	qtd	\$/Kg	%A	%B
1	300	06	10	90
2	400	10	15	85
2	200	18	20	80
4	700	24	30	70
5	450	30	40	60

A meta é produzir, com o mínimo custo possível, 1000 Kg de um outro tipo de liga com 25% do metal A e 75% de B. Usando x_i da liga existente i o custo é facilmente encontrado:

$$6x_1 + 10x_2 + 18x_3 + 24x_4 + 30x_5 = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

Para que o produto final tenha 25% de A em sua composição é preciso (re-cordem Química!) que

$$0.1x_1 + 0.15x_2 + 0.2x_3 + 0.30x_4 + 0.4x_5 = 250$$

As disponibilidades em estoque geram outras restrições

$$x_1 \leq 300 \quad x_2 \leq 400 \quad x_3 \leq 200 \quad x_4 \leq 700 \quad x_5 \leq 450$$

E finalmente as restrições naturais, $x_i > 0 \forall i$ porque se supõe que a fábrica queira produzir e vai assim gastar seus estoques. Se se quisesse **vender** os estoques estas variáveis poderiam ser negativas. Usando notação compacta

$$\min f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad \begin{cases} \hat{A}\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}} \\ A\mathbf{x} \leq \mathbf{b} \\ \mathbf{x} \geq 0 \end{cases}$$

É um PPL de minimização, com restrições lineares de igualdade, de desigualdade do tipo menor ou igual e também maior ou igual.

6.4 Resolução gráfica de um PPL

Consideremos um problema simples, no \mathbb{R}^2 . Uma certa fábrica lucra \$5 ao vender uma unidade de um produto P_1 e \$6 por unidade de P_2 . A confecção do 1.o produto usa uma unidade de um recurso A, uma unidade de um outro recurso B e sete unidades de C. A confecção do 2.o produto usa duas unidades de A, uma unidade de B e quatro unidades de C. Há em estoque 14 unidades de A, 9 de B e 56 de C. Uma tabelinha sempre ajuda

Recurso	qtd	em P_1	em P_2
A	14	1	2
B	09	1	1
C	16	7	4

Escolher as quantidades x_1 e x_2 de cada produto que se deve fabricar para maximizar os lucros.

6.5 Resolução manual de um PPL

6.6 Resolução numérica de um PPL

6.7 Dualidade em PL

Capítulo 7

Otimização Geral II

Antes de se encarar o caso mais geral de função objetivo e restrições não lineares ainda há alguns casos gerais mais simples e importantes.

7.1 Programação quadrática

Quando se quer minimizar uma função **quadrática** com restrições (de igualdade ou desigualdade) lineares, temos um problema de Programação Quadrática. Uma função objetivo quadrática, em sua forma canônica, é caracterizada por uma matriz real A ($n \times n$) e um vetor $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. O PGO, sendo R e \mathbf{r} os parâmetros das restrições, fica então reformulado como

$$\min f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{b} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad R\mathbf{x} \geq \mathbf{r}$$

As quadráticas são cômodas e de manuseio relativamente fácil (perdem apenas para as lineares) e assim a programação quadrática tem a sua popularidade. Quando se deseja minimizar um função qualquer e as componentes de \mathbf{x} tem limites superiores e inferiores:

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad l_i \leq x_i \leq u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

As RVs são hipercubos (retângulos no \mathbb{R}^2) e isto facilita as coisas.

7.2 Restrições Não-Lineares de Igualdade

Quando há t restrições não lineares de igualdade o problema é abreviadamente chamado de PGORNI ou apenas ORNI ou RNI:

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad c_i(\mathbf{x}) = 0; \quad i = 1, 2, \dots, t$$

que admite uma formulação matricial quando empilhamos as restrições em um vetor $C(\mathbf{x})$:

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad C(\mathbf{x}) = 0$$

onde $C(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^t$. Os comentários feitos no início da seção 5.4 são mais válidos do que nunca: as t restrições devem ser compatíveis, ou seja, devem levar a uma RV não vazia. Figuras poderiam ser feitas, no \mathbb{R}^2 , ilustrando as curvas de nível da função objetivo f e as linhas, não necessariamente retas, das restrições (apenas uma deve ser considerada, para evitar trivialidades). Os leitores são estimulados a isso, este texto se volta agora a outros aspectos.

7.2.1 Álgebra das restrições e da função objetivo

O PGORLI, descrito na seção 5.4, é um caso particular deste PGORNI, e muitas das intuições lá desenvolvidas também valem aqui, como a visão geométrica ligando tangências entre restrições e curvas de nível de f às soluções. Tanto as técnicas de “projetar o gradiente” quanto os métodos lá chamados de “aumento de ordem” e o seu elo com os multiplicadores de Lagrange continuam importantes, cruciais mesmo, neste caso geral.

Como as restrições agora são mais sofisticadas, um tratamento algébrico mais rigoroso é preciso. Uma restrição qualquer c_i deve ser considerada não apenas como uma curva ou superfície estaticamente talhada no \mathbb{R}^n , mas como uma função real de variável vetorial, como a função objetivo:

$$\begin{aligned} c_i : \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} &\mapsto c_i(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

A curva de nível associada ao valor 0 desta função fornece a visão tradicional, não dinâmica, da restrição. Supondo c_i suficientemente suave, o **gradiente da restrição i em um ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$** é denotado por

$$\nabla c_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n$$

Uma direção $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ é **tangente à restrição i no ponto \mathbf{x}** quando

$$\mathbf{p}^T \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i^T(\mathbf{x}) \mathbf{p} = 0$$

ou seja, \mathbf{p} é perpendicular ao gradiente \mathbf{a}_i no ponto \mathbf{x} . Estes conceitos se aplicam a qualquer ponto no \mathbb{R}^n mas é comum associá-los a pontos \mathbf{x} tais que $c_i(\mathbf{x}) = 0$ ou seja, o gradiente \mathbf{a}_i é a normal à restrição em \mathbf{x} , e \mathbf{p} é a tangente nesse ponto. A figura 7.1 ilustra a situação no \mathbb{R}^2 .

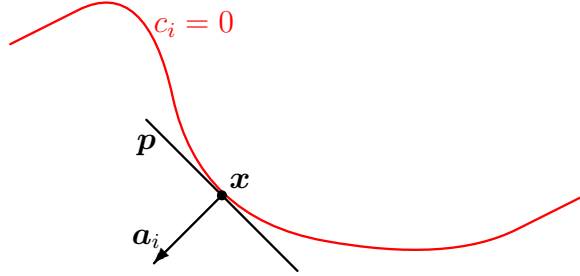


Figura 7.1: Tangente, gradiente e restrição no \mathbb{R}^2

Para um ponto \mathbf{x} viável qualquer, o resultado de colocar os gradientes das t restrições lado a lado e transpor a matriz obtida é a **Jacobiana das restrições**, denotada por A .

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T(\mathbf{x}) \\ \mathbf{a}_2^T(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \mathbf{a}_t^T(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = A(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{t \times n} \quad \text{Jacobiana das restrições}$$

Uma direção $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ é **tangente simultânea às t restrições em $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$** quando

$$A(\mathbf{x})\mathbf{p} = 0$$

No \mathbb{R}^2 o conceito de tangentes simultâneas a várias curvas pode causar espanto, mas em espaços com dimensões maiores não: para entender esta idéia precisamos do \mathbb{R}^n com $n > 2$. Um ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ será chamado de **regular** quando as t linhas de $A(\mathbf{x})$ forem linearmente independentes:

$$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{é regular} \quad \Leftrightarrow \quad \rho(A(\mathbf{x})) = t$$

Deste modo, sendo \mathbf{x} um ponto viável e regular, haverá $n - t$ tangentes simultâneas linearmente independentes: $\mathbf{z}_1(\mathbf{x}), \mathbf{z}_2(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{z}_{n-t}(\mathbf{x})$. Colocando-as lado a lado chega-se a uma matriz $(n \times n - t)$, a **matriz das tangentes simultâneas**:

$$[\mathbf{z}_1(\mathbf{x}) \ \mathbf{z}_2(\mathbf{x}) \ \cdots \ \mathbf{z}_{n-t}(\mathbf{x})] = Z(\mathbf{x})$$

É trivial perceber que $A(\mathbf{x})Z(\mathbf{x}) = 0$ e que $Z^T(\mathbf{x})A^T(\mathbf{x}) = 0$. Esta matriz Z^T projeta um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ nas tangentes simultâneas. A **Hessiana da restrição i** , a derivada de segunda ordem, é definida como

$$\nabla^2 c_i(\mathbf{x}) = G_{ci}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

A **Lagrangeana** traz em si informações tanto da função objetivo como das restrições, e desempenha um papel importante, já sentido antes no caso linear. Ela é uma função real de um espaço de dimensão aumentada, obtida adicionando à função objetivo uma combinação linear das restrições:

$$L(\mathbf{x}, \lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_t) = f(\mathbf{x}) - \lambda_1 c_1(\mathbf{x}) - \dots - \lambda_t c_t(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i c_i(\mathbf{x})$$

As t variáveis adicionais, os coeficientes da combinação linear das restrições, são chamados de **multiplicadores de Lagrange**. Usando notação vetorial para estes reais λ_i , e para as restrições temos um conceito formal da Lagrangeana:

$$L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^t \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$(\mathbf{x}, \lambda) \mapsto L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \lambda^T C(\mathbf{x})$$

onde $\lambda = [\lambda_1 \ \lambda_2 \ \dots \ \lambda_t]^T \in \mathbb{R}^t$ é o vetor dos multiplicadores de Lagrange e $C(\mathbf{x})$ é a matriz $t \times 1$ das restrições. As derivadas parciais de primeira ordem da Lagrangeana são

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \lambda) &= \nabla f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i \nabla c_i(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{g}(\mathbf{x}) - [\mathbf{a}_1(\mathbf{x}) \ \mathbf{a}_2(\mathbf{x}) \ \dots \ \mathbf{a}_t(\mathbf{x})] \lambda \\ &= \mathbf{g}(\mathbf{x}) - A^T(\mathbf{x}) \lambda \\ \frac{\partial}{\partial \lambda} L(\mathbf{x}, \lambda) &= C(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

A derivada parcial de segunda ordem, com relação a \mathbf{x} da Lagrangeana é

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} L(\mathbf{x}, \lambda) &= \nabla^2 f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i \nabla^2 c_i(\mathbf{x}) \\ &= G(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i G_{c_i}(\mathbf{x}) = W(\mathbf{x}, \lambda) \end{aligned}$$

Esta matriz $W(\mathbf{x}, \lambda)$, com algum abuso de notação, é chamada de **Hessiana da Lagrangeana**. Já é possível enunciar o primeiro teorema geral para este caso. Mesmo sem quaisquer demonstrações formais, toda a intuição acumulada desde o caso linear, relacionando as soluções otimizadoras com tangência entre curvas de nível e restrições, ajuda a aceitar com naturalidade estes resultados.

Teorema 7.2.1 Condições Necessárias de Otimalidade, v I. *Supondo f suficientemente suave e sendo $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PORNI, então*

1. $C(\mathbf{x}^*) = 0$
2. $Z^T(\mathbf{x}^*)\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0$

A segunda condição pode ser interpretada como: o **gradiente projetado** se anula na solução \mathbf{x}^* . Ou então, o gradiente de f deve ser perpendicular às tangentes comuns, porque as curvas de nível e as restrições devem ser tangentes. Transpondo esta condição leva a

$$\mathbf{g}^T(\mathbf{x}^*)Z(\mathbf{x}^*) = 0$$

e como, supondo regularidade de \mathbf{x}^* , $A(\mathbf{x}^*)Z(\mathbf{x}^*) = 0$ então $\mathbf{g}^T(\mathbf{x}^*)$ é uma combinação linear das linhas de $A(\mathbf{x}^*)$, ou, de modo equivalente, o gradiente “normal” $\mathbf{g}(\mathbf{x}^*)$ é uma combinação linear das colunas de $A^T(\mathbf{x}^*)$. Isto pode ser expresso de modo formal:

$$Z^T(\mathbf{x}^*)\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0 \iff \exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = A^T(\mathbf{x}^*)\lambda^*$$

o que permite estabelecer as Condições Necessárias de uma outra forma, onde não aparece o gradiente projetado.

Teorema 7.2.2 Condições Necessárias de Otimalidade, v II. *Supondo f suficientemente suave e sendo $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PORNI, então*

1. $C(\mathbf{x}^*) = 0$
2. $\exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = A^T(\mathbf{x}^*)\lambda^*$

Estas condições envolvem as restrições e a função objetivo; a Lagrangeana também. Lembrando as derivadas de L deduzidas acima é fácil concluir que

$$C(\mathbf{x}^*) = 0 \iff \frac{\partial}{\partial \lambda}(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$$

$$\exists \lambda^* \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = A^T(\mathbf{x}^*)\lambda^* \iff \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^*}(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$$

e isto permite uma terceira versão, cômoda e elegante, das CNOs:

Teorema 7.2.3 Condições Necessárias de Otimalidade, v III. *Supondo f suficientemente suave e sendo $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PORNI, então*

1. $\nabla L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$ para algum $\lambda^* \in \mathbb{R}^t$

Disto se conclui que as soluções do PORNI são **pontos estacionários da Lagrangeana!** Um problema de minimização com restrições pode ser auxiliado por um **sem restrições**, uma consequência notável da Lagrangeana! Como sempre, as condições necessárias fornecem um filtro inicial que seleciona os possíveis candidatos, os únicos pontos que tem chance de ser solução. Para efetivamente eleger as soluções definitivas precisamos das CSO, condições suficientes de otimalidade, já na forma elegante da Lagrangeana.

Teorema 7.2.4 Condições Suficientes de Otimalidade. *Supondo f suficientemente suave, seja $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ tal que*

1. $\nabla L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$ para algum $\lambda^* \in \mathbb{R}^t$
2. $Z^T(\mathbf{x}^*)W(\mathbf{x}^*, \lambda^*)Z(\mathbf{x}^*) > 0$

Então \mathbf{x}^ será uma solução local do RNI.*

Exemplo 7.2.1 Minimizar uma quadrática no \mathbb{R}^2 , com uma restrição não linear de igualdade:

$$f(\mathbf{x}) = (1/2)\mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} - (1/2)\mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \end{bmatrix} \quad \text{s.a.} \quad x_1^2 - x_2 = 0$$

Começando pela restrição, que também é quadrática

$$c = x_1^2 - x_2 \quad \nabla c = \mathbf{a}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad A(\mathbf{x}) = [2x_1 \quad -1] \quad Z(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 2x_1 \end{bmatrix}$$

7.3 Restrições Não-Lineares de Desigualdade

Este é o caso mais completo e geral, sem qualquer particularização na função objetivo ou nas restrições, levando ao seguinte problema, abreviadamente chamado de PGORNLD ou apenas ORND ou RND

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad c_i(\mathbf{x}) \geq 0; \quad i = 1, 2, \dots, m$$

que admite uma formulação matricial quando empilhamos as restrições em um vetor $C(\mathbf{x})$:

$$\min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \text{s.a.} \quad C(\mathbf{x}) \geq 0$$

onde $C(\mathbf{x}) = [c_1(\mathbf{x}) \quad c_2(\mathbf{x}) \quad \dots \quad c_m(\mathbf{x})]^T \in \mathbb{R}^m$. Uma visita ao caso das restrições **lineares**, nas seções 5.4 e 5.5, ajuda, pois aqueles são casos particulares deste, e também agora devemos considerar pontos internos “puros”

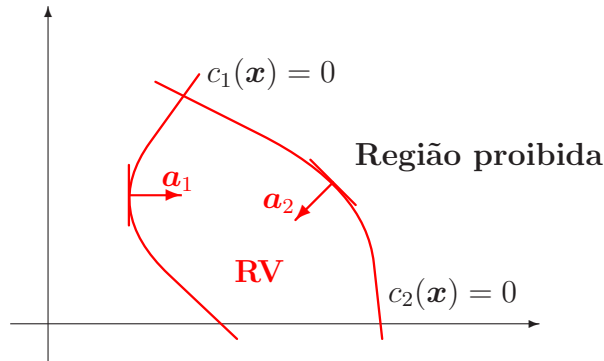


Figura 7.2: RV para duas restrições não lineares de desigualdade

ou que tocam as fronteiras, restrições ativas, etc. A figura 7.2 ilustra, no \mathbb{R}^2 , as linhas, não necessariamente retas, de duas restrições; são mostradas também duas normais de entrada na Região Viável RV.

É sempre bom ter em mente que tanto a função objetivo f quanto as restrições c_i , $i = 1, 2 \dots m$ são funções do \mathbb{R}^n em \mathbb{R} suficientemente suaves. As soluções do PGORNLD podem ser internas ou tocar as fronteiras. A teoria irrestrita já apresentada cobre completamente os casos de soluções internas. Como a prática mostra que, normalmente, há uma ou mais restrições ativas nas soluções, há que se tratar com detalhes da interessante teoria de otimização nas fronteiras.

7.3.1 Geometria da função objetivo e das restrições

Os conceitos a seguir, relacionados à função objetivo, são básicos e já foram apresentados anteriormente neste texto; foram aqui colocados para reforçar a notação e facilitar a leitura.

Gradiente de f em \mathbf{x} : $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n$

Hessiana de f em \mathbf{x} : $G(\mathbf{x}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Direção de descida em \mathbf{x} : $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n \ni \mathbf{g}^T(\mathbf{x})\mathbf{d} = \mathbf{d}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) < 0$

Direção de descida máxima em \mathbf{x} : $\mathbf{d}_m = -\mathbf{g}(\mathbf{x}) = -\nabla f(\mathbf{x})$

Cone de descida em \mathbf{x}^0 : $\text{CD}_{\mathbf{x}^0} = \{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{p}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^0) < 0\}$

O cone de descida é o conjunto de todas as direções que partem de um ponto e levam, pelo menos para pequenos avanços, a valores menores da

função objetivo, como se percebe na expressão a seguir

$$\text{CD}_{\mathbf{x}^0} = \left\{ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{p}) < f(\mathbf{x}^0) \text{ para algum } \alpha \in \mathbb{R} \right\}.$$

Os próximos conceitos se referem às restrições e são também básicos e já conhecidos. As seções 5.5.1, 5.5.2 e 7.2.1 trataram inicialmente destas idéias.

Gradiente da restrição i em \mathbf{x} : $\mathbf{a}_i(\mathbf{x}) = \nabla c_i(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n$

Hessiana da restrição i em \mathbf{x} : $G_{ci}(\mathbf{x}) = \nabla^2 c_i(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Tangente à restrição i em \mathbf{x} : $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \ni \mathbf{p}^T \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i^T(\mathbf{x}) \mathbf{p} = 0$

Cone viável em \mathbf{x}^0 : .. $\text{CV}_{\mathbf{x}^0} = \{ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}^0 + \alpha \mathbf{p}) \in \text{RV para } \alpha \in \mathbb{R} \}$

Direção viável em \mathbf{x}^0 na restrição i : $\mathbf{d} \ni \mathbf{d}^T \mathbf{a}_i(\mathbf{x}^0) = \mathbf{a}_i^T(\mathbf{x}^0) \mathbf{d} > 0$

Note-se que os gradientes \mathbf{a}_i apontam para dentro da RV: são as normais de entrada. As intuições sobre cones geradas nas seções 5.5.1 e 5.5.2 continuam válidas aqui, com a diferença de que agora as normais de entrada na RV (os gradientes \mathbf{a}_i das restrições) variam de ponto a ponto. Lembremos que para um ponto viável \mathbf{x}^0 interno, no miolo da RV, $\text{CV}_{\mathbf{x}^0} = \mathbb{R}^n$, o espaço todo; quando apenas a restrição i está ativa em \mathbf{x}^0 o conceito de direção viável ajuda a caracterizar o cone:

$$\text{CV}_{\mathbf{x}^0} = \left\{ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{p}^T \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) > 0 \right\};$$

quando duas restrições i e j estão ativas no ponto de teste \mathbf{x}^0 , como na interseção entre as curvas na figura 7.2,

$$\text{CV}_{\mathbf{x}^0} = \left\{ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{p}^T \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) > 0 \text{ e } \mathbf{p}^T \mathbf{a}_j(\mathbf{x}) > 0 \right\}.$$

O cone de descida viável de um ponto de teste \mathbf{x}^0 engloba as direções viáveis que fazem decrescer a função objetivo: $\text{CDV}_{\mathbf{x}^0} = \text{CD}_{\mathbf{x}^0} \cap \text{CV}_{\mathbf{x}^0}$. Se o ponto \mathbf{x}^0 está no miolo da RV então $\text{CV}_{\mathbf{x}^0} = \mathbb{R}^n$ e $\text{CDV}_{\mathbf{x}^0} = \text{CD}_{\mathbf{x}^0}$ e tudo se passa como num problema de otimização livre, quando não há restrições. Quando o ponto de teste \mathbf{x}^0 está na fronteira da RV é preciso saber em quantas restrições ele toca. Devemos neste ponto supor que a lista das m restrições c_i é reordenada de modo que aquelas ativas em \mathbf{x}^0 ocupem as t primeiras posições. O CDV passa a ser caracterizado por

$$\text{CDV}_{\mathbf{x}^0} = \left\{ \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{p}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^0) < 0 \text{ e } \mathbf{p}^T \mathbf{a}_i(\mathbf{x}^0) > 0; i = 1, 2, \dots, t \right\}.$$

Como visto na seção 5.5.2, se existe um cone de descida viável partindo de um ponto qualquer, este ponto **não é solução** de PORND; em outras palavras, não há CDV fincado nas soluções do problema, ou, em símbolos

$$\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n \text{ é solução do PGORLD} \iff \text{CDV}_{\mathbf{x}^*} = \{0\}.$$

Usando a caracterização dos CDVs logo acima é possível reescrever esta condição de existência na seguinte forma: o ponto $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é solução do PGORLD se e somente se

$$\nexists \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \ni \mathbf{p}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) < 0 \text{ e } \mathbf{p}^T \mathbf{a}_i(\mathbf{x}^*) > 0 \text{ para } i = 1, 2, \dots, t.$$

O próximo é um resultado sobre cones, clássico de álgebra linear, que pode ser adaptado para este problema vetorial no \mathbb{R}^n . Usando a notação pertinente:

Lema 7.3.1 (Lema de Farkas) *Dados $\mathbf{g}, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_t \in \mathbb{R}^n$, é possível expressar $\mathbf{g} = \lambda_1 \mathbf{a}_1 + \lambda_2 \mathbf{a}_2 + \dots + \lambda_t \mathbf{a}_t$ para reais $\lambda_i \geq 0$ se e somente se*

$$\nexists \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n \ni \mathbf{p}^T \mathbf{g} < 0 \text{ e } \mathbf{p}^T \mathbf{a}_i \geq 0 \text{ para } i = 1, 2, \dots, t.$$

Como já aconteceu antes, no caso das restrições lineares, esta seção de aspectos geométricos tem a finalidade de apresentar de um modo (espera-se!) intuitivo e natural, e sem demonstrações formais elaboradas, fatos que aparecerão nos teoremas próximos. Em outras palavras, as CNOs (condições necessárias de otimização) e as CSOs (condições suficientes) ainda serão apresentadas, mas o material desta seção permitirá aceitá-las e entendê-las bem.

7.3.2 Álgebra do PGORNLD

Um ponto viável \mathbf{x} pode tocar simultaneamente em t restrições, $1 \leq t \leq m \leq n$; sendo $\mathbf{a}_i(\mathbf{x})$ $i = 1, 2, \dots, t$ os gradientes dessas restrições no ponto, a matriz das **normais de entrada** ou das **restrições ativas** é definida como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T(\mathbf{x}) \\ \mathbf{a}_2^T(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \mathbf{a}_t^T(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \hat{A}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{t \times n}$$

O conceito de tangentes simultâneas e a inicial estranheza que ele pode provocar já foram comentados anteriormente. Para o presente caso, uma **tangente simultânea** às t restrições ativas em \mathbf{x} é uma direção $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\hat{A}(\mathbf{x})\mathbf{p} = 0$. Um ponto viável \mathbf{x} será **regular** quando o posto de sua

matriz de restrições ativas for completo: $\rho[\hat{A}(\mathbf{x})] = t$ ou, em outras palavras, as linhas de $\hat{A}(\mathbf{x})$ são linearmente independentes.

Para $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ viável e regular haverá $n - t$ tangentes simultâneas linearmente independentes, pois $\rho[\hat{A}(\mathbf{x})] = t$ implica que $\ker[\hat{A}(\mathbf{x})]$, o espaço nulo (kernel) da matriz $\hat{A}(\mathbf{x})$, tem dimensão $n - t$. Sejam então $\mathbf{p}_1(\mathbf{x}), \mathbf{p}_2(\mathbf{x}) \dots \mathbf{p}_{n-t}(\mathbf{x})$ vetores do \mathbb{R}^n que formam uma base para $\ker[\hat{A}(\mathbf{x})]$; com eles se forma a matriz das **tangentes simultâneas** às t restrições ativas em \mathbf{x} :

$$[\mathbf{p}_1(\mathbf{x}) \ \mathbf{p}_2(\mathbf{x}) \ \dots \ \mathbf{p}_{n-t}(\mathbf{x})] = Z(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n \times (n-t)}.$$

Uma tangente simultânea qualquer às t restrições ativas em \mathbf{x} é um vetor do \mathbb{R}^n que pode ser expresso como $\mathbf{p} = Z(\mathbf{x})\alpha$ para $\alpha \in \mathbb{R}^{n-t}$.

Uma maneira de olhar ao mesmo tempo para a função objetivo e para as restrições é através da **Lagrangeana**, uma função muito rica, pois traz em si informações sobre f e sobre as c_i . Sendo \mathbf{x} um ponto viável no qual as t primeiras restrições estão ativas, a **Lagrangeana truncada** é uma aplicação de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^t$ em \mathbb{R} , definida como

$$L_t(\mathbf{x}, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_t) = f(\mathbf{x}) - \lambda_1 c_1(\mathbf{x}) - \lambda_2 c_2(\mathbf{x}) - \dots - \lambda_t c_t(\mathbf{x}).$$

O vetor das **restrições ativas** é $\hat{C}(\mathbf{x}) = [c_1(\mathbf{x}) \ c_2(\mathbf{x}) \ \dots \ c_t(\mathbf{x})]^T \in \mathbb{R}^t$; como os escalares λ_i podem ser agrupados em um vetor $\lambda = [\lambda_1 \ \lambda_2 \ \dots \ \lambda_t]^T \in \mathbb{R}^t$ a Lagrangeana truncada admite uma expressão mais compacta

$$L_t(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \lambda^T \hat{C}(\mathbf{x})$$

Algumas vezes a Lagrangeana pode ser apresentada com sinais positivos na combinação linear das restrições. As derivadas parciais da Lagrangeana truncada são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L_t(\mathbf{x}, \lambda) &= \nabla f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i \nabla c_i(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \hat{A}^T \lambda \\ \frac{\partial}{\partial \lambda} L_t(\mathbf{x}, \lambda) &= \hat{C}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Derivando pela segunda vez com relação a \mathbf{x} aparece o que se chama, não muito propriamente, de **Hessiana da Lagrangeana**:

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} L_t(\mathbf{x}, \lambda) = G(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i G_{c_i}(\mathbf{x}) = W(\mathbf{x}, \lambda)$$

Os conceitos apresentados nos últimos parágrafos serão agora resumidos para facilitar futuras consultas a eles.

Restrições em \mathbf{x} : $C(\mathbf{x}) = [c_1(\mathbf{x}) \ c_2(\mathbf{x}) \ \cdots \ c_m(\mathbf{x})]^T \in \mathbb{R}^m$

Restrições ativas em \mathbf{x} : $\hat{C}(\mathbf{x}) = [c_1(\mathbf{x}) \ c_2(\mathbf{x}) \ \cdots \ c_t(\mathbf{x})]^T \in \mathbb{R}^t$

Normais de entrada em \mathbf{x} : ... $\hat{A}(\mathbf{x}) = [\mathbf{a}_1(\mathbf{x}) \ \mathbf{a}_2(\mathbf{x}) \ \cdots \ \mathbf{a}_t(\mathbf{x})]^T \in \mathbb{R}^{t \times n}$

Tangentes simultâneas em \mathbf{x} : $Z(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n \times (n-t)} \ni \hat{A}(\mathbf{x})Z(\mathbf{x}) = 0$

Lagrangeana truncada em \mathbf{x} : $L_t(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \lambda^T \hat{C}(\mathbf{x})$

Nada garante que as t restrições ativas em um dado ponto \mathbf{x} sejam as primeiras das m restrições listadas em $C(\mathbf{x})$, mas é prática comum supor que isso acontece. Se não for o caso, sempre se pode reordenar a lista para que isso ocorra. Outro aspecto da lista acima: várias das grandezas tem sentido apenas para pontos viáveis que encostam em pelo menos uma restrição, e nem podem ser definidos para pontos internos, no miolo da RV.

Seguem os resultados mais fortes e importantes, as Condições de Otimalidade para o PGORNLD. Virão sem demonstrações formais e rigorosas, mas para compensar essa falha confia-se que as intuições previamente colocadas sejam capazes de fazer os leitores aceitarem e entenderem de modo natural a fraseologia matemática.

Teorema 7.3.1 Condições Necessárias de Otimalidade – versão I.

Supondo a função objetivo f e as restrições c_i suficientemente suaves, e sendo $\mathbf{x}^ \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PGORNLD onde as t primeiras restrições estão ativas, então*

$$1. \ C(\mathbf{x}^*) \geq 0; \ \hat{C}(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (\text{condição de viabilidade})$$

$$2. \ \exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid g(\mathbf{x}^*) = \hat{A}^T(\mathbf{x}^*)\lambda^* \quad (\text{condição de tangência})$$

$$3. \ \lambda^* \geq 0 \text{ ou seja, } \lambda_i^* \geq 0, \ \forall i = 1, 2, \dots, t \quad (\text{mesmo sentido das normais})$$

e ainda $Z^T(\mathbf{x}^)W(\mathbf{x}^*, \lambda^*)Z(\mathbf{x}^*) \geq 0$, uma condição de segunda ordem.*

As semelhanças com o caso de restrições lineares são fortes, os leitores devem comparar este resultado ao teorema 5.5.1. Como acontece com condições necessárias em geral, este resultado pode ajudar a encontrar candidatos a solução. O procedimento seria árduo: investigar as várias possibilidades de restrições ativas em um dado $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ para verificar se ele é candidato. Escolhidos os candidatos, como decidir sobre eles? com as condições suficientes, como sempre.

Teorema 7.3.2 Condições Suficientes de Otimalidade – versão I.

Supondo a função objetivo f e as restrições c_i suficientemente suaves, e sendo $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ um ponto onde as t primeiras restrições estão ativas, e para o qual

1. $C(\mathbf{x}^*) \geq 0$; $\hat{C}(\mathbf{x}^*) = 0$ (condição de viabilidade)
2. $\exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid g(\mathbf{x}^*) = \hat{A}^T(\mathbf{x}^*)\lambda^*$ (condição de tangência)
3. $\lambda^* \geq 0$ ou seja, $\lambda_i^* \geq 0, \forall i = 1, 2, \dots, t$ (mesmo sentido das normais)
4. $Z^T(\mathbf{x}^*)W(\mathbf{x}^*, \lambda^*)Z(\mathbf{x}^*) > 0$ (uma condição de segunda ordem)

então \mathbf{x}^* será uma solução local para o PGORNLD.

A quarta condição envolve a matriz das tangentes simultâneas Z e a Hessiana da Lagrangeana. As três primeiras condições também são necessárias, e podem assumir formatos diferentes, e talvez mais interessantes, como se vê a partir de agora. As derivadas da Lagrangeana truncada são, como já mostrado,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L_t(\mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \hat{A}^T \lambda \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial \lambda} L_t(\mathbf{x}, \lambda) = \hat{C}(\mathbf{x})$$

Com isto as condições 1b) e 2) dos teoremas podem ser fundidas em uma única condição:

$$\left. \begin{array}{l} \hat{C}(\mathbf{x}^*) = 0 \\ \exists \lambda^* \ni g(\mathbf{x}^*) = \hat{A}^T(\mathbf{x}^*)\lambda^* \end{array} \right\} \iff \exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \ni \nabla L_t(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$$

Um gradiente deve se anular ... esta é a mais tradicional e conhecida condição de otimalidade de primeira ordem, derivar e igualar a zero. Aqui também ela está presente, em um problema bem mais sofisticado, com restrições, agora empregando a Lagrangeana truncada. Uma nova versão das CNO pode ser apresentada.

Teorema 7.3.3 Condições Necessárias de Otimalidade – versão II.

Supondo a função objetivo f e as restrições c_i suficientemente suaves, e sendo $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PGORNLD onde as t primeiras restrições estão ativas, então

1. $C(\mathbf{x}^*) \geq 0$ (condição de viabilidade)
2. $\exists \lambda^* \in \mathbb{R}^t \mid \nabla L_t(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$ (condição de tangência)
3. $\lambda^* \geq 0$ ou seja, $\lambda_i^* \geq 0, \forall i = 1, 2, \dots, t$ (mesmo sentido das normais)

e ainda $Z^T(\mathbf{x}^*)W(\mathbf{x}^*, \lambda^*)Z(\mathbf{x}^*) \geq 0$, uma condição de segunda ordem.

As condições suficientes diferem apenas na última, a de segunda ordem, onde deve haver positividade estrita. A Lagrangeana usada nos últimos resultados é conhecida como truncada por levar em conta apenas as t restrições ativas; como se pode considerar que estas são as primeiras da lista,

$$L_t(\mathbf{x}, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_t) = f(\mathbf{x}) - \lambda_1 c_1(\mathbf{x}) - \dots - \lambda_t c_t(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i c_i(\mathbf{x}).$$

A Lagrangeana “pura” ou total leva em conta todas as m restrições

$$L(\mathbf{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_t, \dots, \lambda_m) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^t \lambda_i c_i(\mathbf{x}) - \sum_{j=t+1}^m \lambda_j c_j(\mathbf{x}).$$

É imediato perceber, supondo restrições independentes, como é o nosso caso, as condições para haver igualdade entre as Lagrangeanas

$$L(\mathbf{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_m) = L_t(\mathbf{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_t) \iff \lambda_j = 0 \text{ para } j = t+1, t+2, \dots, m.$$

Seja então um vetor $\lambda = [\lambda_1 \dots \lambda_t \lambda_{t+1} \dots \lambda_m]^T \in \mathbb{R}^m$ e o produto

$$\lambda^T C(\mathbf{x}) = \lambda_1 c_1(\mathbf{x}) + \dots + \lambda_t c_t(\mathbf{x}) + \lambda_{t+1} c_{t+1}(\mathbf{x}) + \dots + \lambda_m c_m(\mathbf{x}).$$

Lembrando novamente que as m restrições são independentes, e supondo que no ponto \mathbf{x} as t primeiras restrições estão ativas, então é fácil ver que

$$\lambda^T C(\mathbf{x}) = 0 \iff \lambda_j = 0 \text{ para } j = t+1, t+2, \dots, m.$$

o que fornece condições para a igualdade das Lagrangeanas e permite estabelecer o

Teorema 7.3.4 Condições Necessárias de Otimalidade – versão III. *Supondo a função objetivo f e as restrições c_i suficientemente suaves, e sendo $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução local do PGORNLD onde as t primeiras restrições estão ativas, então existe $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que*

1. $\nabla L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$ (condição de primeira ordem)
2. $\lambda^* \geq 0$ ou $\lambda_i^* \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, m$ (condição de não negatividade)
3. $\lambda^{*T} C(\mathbf{x}^*) = 0$ (condição de transversalidade)
4. $C(\mathbf{x}^*) \geq 0$ (condição de viabilidade)

e ainda $Z^T(\mathbf{x}^*)W(\mathbf{x}^*, \lambda^*)Z(\mathbf{x}^*) \geq 0$, uma condição de segunda ordem.

A atividade do ponto \mathbf{x}^* aparece explicitamente apenas na condição de segunda ordem, a menos importante delas, e que muitas vezes nem mesmo é enunciada como parte deste teorema. Embora equivalente às outras, esta terceira versão das condições necessárias é mais elegante e concisa, pois a Lagrangeana total leva em conta todas as restrições e não apenas as ativas (lembrar que, agora, $\lambda \in \mathbb{R}^m$). A condição de transversalidade, também chamada de complementaridade, fica com a tarefa de atribuir multiplicadores de Lagrange nulos às restrições inativas.

Teorema 7.3.5 Condições Suficientes de Otimalidade – versão II.

Supondo a função objetivo f e as restrições c_i suficientemente suaves, e sendo $\mathbf{x}^ \in \mathbb{R}^n$ um ponto onde as t primeiras restrições estão ativas, e para o qual*

1. $\nabla L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0$ (condição de primeira ordem)
2. $\lambda^* \geq 0$ ou $\lambda_i^* \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, m$ (condição de não negatividade)
3. $\lambda^{*T}C(\mathbf{x}^*) = 0$ (condição de transversalidade)
4. $C(\mathbf{x}^*) \geq 0$ (condição de viabilidade)
5. $Z^T(\mathbf{x}^*)W(\mathbf{x}^*, \lambda^*)Z(\mathbf{x}^*) > 0$ (uma condição de segunda ordem)

então \mathbf{x}^ será uma solução local para o PGORNLD.*

Estes teoremas são chamados de **condições KKT** para homenagear Karush, Kuhn e Tucker, pioneiros em seu estudo. É quase desnecessário comentar sobre a concisão, elegância, beleza e importância deles. Mas e quanto à aplicabilidade destas condições, o que dizer? Estes resultados são o rigoroso alicerce de toda a teoria matemática de Otimização, mas podem ser usados para efetivamente encontrar soluções de problemas específicos?

As condições necessárias podem ser usadas para selecionar candidatos a solução: devemos verificar se um dado $\mathbf{x}^c \in \mathbb{R}^n$ qualquer satisfaz as CNOs. Este procedimento seria longo e tedioso:

1. supondo \mathbf{x}^c interno, no miolo da RV, aplicaríamos as condições irrestritas de otimização,
2. supondo que \mathbf{x}^c toca apenas na restrição i , para $i = 1, 2, \dots, m$, usaríamos $\hat{C}(\mathbf{x}) = c_i(\mathbf{x})$. Se \mathbf{x}^c satisfizer as CNO, ele é um ponto na restrição i de onde não saem direções de descida viáveis, ou seja, um candidato;

3. supondo que \mathbf{x}^c toca apenas nas restrições i e j para $i, j = 1, 2, \dots, m$, montaríamos a matriz $\hat{C}(\mathbf{x}) =$ correspondente e testaríamos, pelas CNO, se ele é ou não um candidato;
4. supondo que \mathbf{x}^c toca simultaneamente em três restrições ...
5. ...

E depois ainda viria a aplicação das CSOs para garantir se candidatos são realmente solução do problema ... Parece desoladoramente longo e tedioso, o que é fato, a menos de casos trivialmente simples. Estes são motivos fortes o suficiente para justificar o uso de métodos numéricos.

7.4 Métodos numéricos

A teoria de otimização vetorial com restrições é bela, rigorosa, digna de ser conhecida. Mas aceita-se com muita naturalidade o fato de que a sua aplicação a situações práticas seja difícil, problemática, quase impensável. Abre-se no horizonte, amplo e convidativo, a rota, talvez única, dos métodos numéricos.

O método de Rosen, apresentado na seção 5.6 para o caso linear, pode ser generalizado para este caso; o gradiente deveria ser projetado nas tangentes simultâneas. A sua aplicabilidade é mais simples no caso das restrições lineares porque estas se confundem com as tangentes simultâneas.

7.4.1 Método das direções viáveis

7.5 Problemas básicos

7.6 Outras propostas