

SEIS

OPTIMIZAÇÃO

ÍNDICE DO CAPÍTULO

6. 0. INTRODUÇÃO	3
6. 0. 1. A SÍNTESE: PROJECTO E DECISÃO OPTIMIZADOS.....	3
6. 0. 2. A ANÁLISE: OS PRINCÍPIOS DE OPTIMIDADE	5
6. 1. CONCEITOS GERAIS	7
6. 1. 1. PROGRAMAÇÃO LINEAR.....	8
6. 1. 2. PROGRAMAÇÃO CONVEXA.....	9
6. 2. AS TÉCNICAS CONCRETAS.....	12
6. 2. 0. PESQUISA UNIDIMENSIONAL	12
6. 2. 0. 1. MÉTODO DOS TERÇOS	13
6. 2. 0. 2. REGRA ÁUREA.....	13
6. 2. 0. 3. MÉTODO DA INTERPOLAÇÃO QUADRÁTICA.....	14
6. 2. 1. PESQUISA MULTIDIMENSIONAL.....	14
6. 2. 1. 1. MÉTODO DE POWELL.....	14
6. 2. 1. 2. MÉTODO DO GRADIENTE	19
6. 2. 1. 3. MÉTODO DA QUÁDRICA.....	24
6. 2. 1. 5. O PROBLEMA DAS CONSTRIÇÕES.....	26
6.2. 2. CONSTRIÇÕES E LIGAÇÕES NÃO-LINEARES	27
6. 3. PROGRAMAÇÃO NÃO-CONVEXA	31
6. 4. PREPARAÇÃO DA OPTIMIZAÇÃO	33
6. 5. ANÁLISE DO PROBLEMA DA OPTIMIZAÇÃO.....	37
6.6. AJUSTAMENTO	40
6.6.1. A CONSTRUÇÃO DE UMA FUNÇÃO OBJECTIVO	41
6.6.2. O CASO DOS PARÂMETROS LINEARES	42
6.6.3. O CASO DOS PARÂMETROS NÃO-LINEARES	43

6. 0. INTRODUÇÃO

O desejo humano da perfeição encontra a sua expressão mais acabada na teoria da optimização.

O termo técnico actual "*optimizar*", que tem um sentido mais forte que "*aperfeiçoar*", significa alcançar um "*ótimo*", isto é, um valor de qualidade inexcédível e "*optimização*" é o acto de optimizar; os sentidos destas palavras encontram-se hoje quase sempre em um contexto matemático, isto é, de estudo quantitativo dos ótimos e dos meios de os alcançar.

A palavra óptimo provem do étimo latino "*optimus*" que contém a raiz "*Ops*", do nome da deusa sabina da abundância, introduzida em Roma no séc. VIII a. C. Originalmente, o sentido de "*optimus*" era o de "o maior" ou "máximo".

Outras palavras latinas derivadas de "*Ops*" são "*opus*" (obra, resultante do trabalho) e "*opera*" (obras) em uma clara alusão a que os frutos de Ops se não obtêm sem trabalho; da mesma raiz provêm palavras como "*opulência*" e "*copioso*" ligadas com o posterior estatuto de Ops como deusa da riqueza. Com efeito, nos tempos imperiais o templo da deusa continha o Tesouro Romano; daí que o sentido tenha evoluído de "o maior" para "o melhor". Assim, Júpiter, o pai dos deuses, tomou o cognome de "*Optimus Maximus*". Quando a riqueza se tornou símbolo de poder, a aristocracia romana endinheirada passou a ser designada por "*optimates*", nome que é ainda hoje utilizado na Universidade inglesa de Oxford para designar os melhores académicos.

Dado que, portanto, a optimização implica a procura, e o encontro, da melhor maneira de proceder em dado contexto, tornam-se óbvias as suas aplicações nos mundos da produção, do comércio e da política, mundos em que pequenas diferenças de eficácia representam a enorme diferença entre o sucesso e a falência.

Embora muitas fases da teoria da optimização fossem já conhecidas desde há séculos, o volume e a lentidão dos cálculos exigidos virtualmente impediram a sua utilização prática, excepto nas situações mais elementares. O desenvolvimento e difusão dos meios de computação automática a partir de meados do presente século não só permitiram que muitos desses métodos se tornassem atraentes como encorajaram profundas e extensas investigações sobre a matéria. No entanto, mesmo no actual contexto científico e técnico, a teoria da optimização tem um significado que transcende o de um simples conjunto de receitas analíticas ou numéricas para encontrar ótimos: o estudo das várias técnicas de optimização, cada uma das quais adequada a uma situação quantitativa idealizada, permite frequentemente pôr em evidência regras aplicáveis a problemas não totalmente descritíveis em termos quantitativos; esse estudo pode, portanto, conduzir a um aumento das capacidades de decisão através da capacidade de identificar a forma própria de uma solução óptima, mesmo quando o problema não se encontra formulado em termos estritamente matemáticos; pode, além disso, desenvolver a apreciação do valor da informação necessária para a descrição de um sistema por forma a poder ser optimizado. Mesmo quando o caminho para o óptimo se encontra barrado ou obscurecido, a teoria da optimização frequentemente mostrará como é possível melhorar uma dada situação existente.

Os dois ramos fundamentais das aplicações da teoria da optimização são

- a) a síntese, o projecto e a decisão sobre o tipo de mundo que queremos construir e
- b) a análise a compreensão de como esse mundo funciona.

6. 0. 1. A SÍNTESE: PROJECTO E DECISÃO OPTIMIZADOS

A decisão sobre a forma de projectar, construir, regular e explorar um sistema físico e/ou económico implica a execução de três passos fundamentais:

- antes de mais, a *obtenção do conhecimento*, preciso e tanto quanto possível quantificado de como interactivam as variáveis do sistema;
- em segundo lugar, a *construção de uma medida da eficácia* do sistema, expressa em termos das suas variáveis; essa medida da eficácia deve constituir a tremendamente difícil resposta ao problema da quantificação da qualidade;
- finalmente, a *escolha dos valores das variáveis do sistema que conduzem à eficácia ótima*, que constitui o que, no sentido estrito, se chama o *problema matemático da optimização*.

Este faseamento mostra claramente como se relacionam a optimização no sentido lato e a decisão, ou optimização no sentido estrito. O primeiro passo – o conhecimento do sistema – é, obviamente, de importância fundamental, porque é aquele em que o decisor aplica todas as suas capacidades profissionais como engenheiro ou analista de sistemas. Com efeito, não tem sentido optimizar um modelo que não descreve com um mínimo de correcção o comportamento do sistema. Portanto, a maior parte do esforço despendido em estudos de optimização será, na prática, dedicado à compreensão do sistema e à sua descrição quantitativa. Neste sentido, a teoria da optimização veio reforçar, e não suplantá-la, a importância das actuais capacidades profissionais dos tecnólogos. Na alternativa, poderemos considerar que o campo privilegiado da teoria da optimização é constituído pelos sistemas bem conhecidos e matematicamente descritos.

Dado que o segundo passo – a medida da eficácia – é, basicamente uma questão de quantificação de um juízo de valor, sucede tanto ser trivialmente simples como virtualmente inexequível. Em muitos sistemas tecnoeconómicos, as medidas fundamentais ligam-se obviamente com proveitos, custos e eficiências, mas um sistema social ou político pode ter múltiplos objectivos apenas vagamente definidos e literalmente contraditórios e, mesmo quando é claro o tipo de medida a adoptar, a sua realização é em geral difícil e mais difícil ainda o estabelecimento das necessárias relações com as variáveis do sistema. No entanto, é indispensável tentar obter tal informação para que possamos gozar os frutos da optimização. Deste modo, uma das grandes vantagens do advento dos estudos de optimização foi a de atribuir a esse tipo de informação um valor que torna digno, justo, racional e salutar a sua aquisição.

Só após a realização completa dos dois primeiros passos se torna efectivamente possível a aplicação da teoria matemática que desenvolveremos adiante; a optimização torna-se então importante não apenas, nem principalmente, por conduzir ao óptimo, mas, na maior parte dos casos, essencialmente porque produz informação sobre a sensibilidade das condições de óptimo a flutuações e incertezas na descrição do sistema e na fixação dos seus parâmetros. É fundamentalmente por esta razão que um processo de decisão racional nunca está realmente completo sem o respectivo estudo de optimização.

Tomemos dois exemplos característicos do processo de decisão (ou projecto) com os seus três passos, tal como acabámos de o descrever.

O mais antigo e o mais poético é o contado por Virgílio na Eneida, em que, no século IX a. C., a rainha Dido procurou, para fundar Cartago, o terreno de maior superfície que pudesse ser delimitada pela pele de um búfalo. Da pele, Dido fez uma corda tão fina e tão comprida quanto possível e dispô-la em semicircunferência, com ambos os extremos na praia. A sua régia intuição dissera-lhe que este semicírculo tinha a máxima área para um dado perímetro, facto que Arquimedes (187-212 a. C.) veio a conjecturar, mas que só foi possível demonstrar com rigor cerca de três milénios mais tarde. Muitas cidades antigas têm, efectivamente, forma circular, provavelmente para minimizar o custo e a vulnerabilidade da muralha envolvente.

Um famoso problema de projecto renascentista foi o de uma *braquistocrónica* (do grego "tempo mais curto") o desenho de uma calha ao longo da qual um objecto deslizesse sem atrito descendo uma dada altura em um tempo mínimo. Galileu (1564-1642) conjecturou que se tratava de um arco de circunferência, mas a sua intuição traiu-o e em 1694 Johann Bernouilli demonstrou que se tratava de um arco de cicloide.

Em 1710, o filósofo alemão G. W. Leibniz empregou a palavra "*optimum*" na sua "*Teodiceia, ou um Ensaio sobre a Bondade de Deus, a Liberdade do Homem e a Origem do Mal*", ilustrando nas

seguintes linhas o papel da optimização na síntese: *"Existe uma infinidade de mundos possíveis, entre os quais Deus teve necessariamente que escolher o melhor, visto que Ele não faz nada em desacordo com a sua suprema sabedoria. Ora, esta suprema sabedoria, aliada a uma não menos infinita bondade, não poderia escolher senão o melhor. Tal como na matemática, em que, quando não há máximo nem mínimo, tudo é igual ou simplesmente não existe, também Deus, se não tivesse criado o melhor dos mundos, não teria, certamente, criado nenhum."*

Deste modo, Leibniz segue rigorosamente os nossos três passos: para o primeiro, o conhecimento, supõe uma sabedoria infinita; para o segundo, o juízo de valor, supõe uma bondade infinita; para o terceiro, a própria sabedoria infinita torna trivial a pesquisa do óptimo que, para um deus menor, seria uma tremenda tarefa de avaliação exaustiva.

A alegre doutrina de que vivemos no melhor dos mundos possíveis ficou conhecida pela nome de *optimismo filosófico* e as suas consequências no campo científico foram múltiplas e frutuosas, como vamos ver.

6. 0. 2. A ANÁLISE: OS PRINCÍPIOS DE OPTIMIDADE

Curiosamente, a teoria da optimização não funciona apenas no contexto óbvio da síntese, isto é, da decisão e do projecto, que acabámos de estudar: presta-se igualmente bem ao problema da descrição do comportamento de sistemas complexos, um problema que é convencionalmente considerado de carácter analítico. Naturalmente, a teoria da optimização aplica-se essencialmente à fase sintética da construção da descrição.

O uso da teoria da optimização para analisar o comportamento de um sistema corresponde a inverter os três passos descritos para a síntese racional: constrói-se o conhecimento sobre o funcionamento de um sistema supondo que ele se comporta de modo a optimizar uma dada medida de eficácia. Assim, o comportamento do sistema é completamente especificado pela identificação do critério de eficácia e pela aplicação da teoria da optimização. Este procedimento corresponde à descrição da natureza através de um *princípio de optimidade*.

O célebre matemático suíço Leonhard Euler (1707-83) parece ter sido também um optimista filosófico ao afirmar: *"Dado que a fábrica do mundo é a mais perfeita possível e feita pelo mais sábio dos criadores, nada acontece neste mundo em que não seja possível pôr em evidência um princípio de máximo ou de mínimo"*. Por difícil que seja aceitar uma generalização tão vasta como esta, apesar da imensa autoridade do seu autor, o facto é que esta ideia produziu numerosas formulações notavelmente simples de várias complexas leis naturais.

Com efeito, o enunciado de Héron de Alexandria sob a forma do princípio segundo o qual a luz se move entre dois pontos pelo trajecto mais curto, conduz directamente a resultados tão diversos como o de que o raio de luz é rectilíneo e o de que, na reflexão, o ângulo de incidência é igual ao ângulo de reflexão. O princípio mais genérico de Fermat (1657) de que a luz se desloca entre dois pontos de modo, não a minimizar a distância, mas o tempo de percurso dá directamente origem à lei de Snell-Descartes, sem contrariar o princípio de Héron e as suas consequências.

Foi em plena época do optimismo filosófico, e não por acaso, que as leis da Mecânica foram, pela primeira vez, formuladas em termos de princípio de mínimo: o *princípio de acção mínima* de Maupertuis, convictamente defendido por Euler, conduziu Lagrange a inventar o conceito de *potencial cinético*. O próprio Gauss enunciou um *princípio de constricção mínima* do qual pode deduzir-se o princípio newtoniano da igualdade da acção e da reacção.

Finalmente, a óptica e a mecânica aproximaram-se uma da outra através de um princípio único de mínimo concebido por W. R. Hamilton (1834), que engloba os princípios de Fermat e de Maupertuis, do qual puderam ser obtidas, por optimização, todas as leis mecânicas e ópticas então conhecidas. O mesmo princípio constitui o fundamento da mecânica relativista (Einstein, 1916) e da mecânica quântica ondulatória (Schrödinger, 1926).

Do mesmo modo, muitas das leis da Química e da Termodinâmica podem ser sintetizadas no princípio de Gibbs (1875-1878) segundo o qual um sistema no equilíbrio tem uma *"energia livre"* mínima. A própria economia clássica foi fundada por Adam Smith, em 1776, sobre o princípio de que o "homem económico" actua de modo a maximizar o seu proveito pessoal.

O optimismo filosófico veio, porém, a ser de tal modo distorcido pelos seguidores de Leibniz que,

- em 1759, Voltaire, com o característico radicalismo gaulês, se sentiu na obrigação de dar cabo dele através da sátira "*Candide ou de l'optimisme*". Com efeito, aquilo que inicialmente tinha sido uma doutrina dinâmica saudável que levava o homem a lutar para melhorar constantemente a sua condição, tinha acabado por transformar-se em uma doutrina estática, uma teorização da inacção, sob o argumento de que em um mundo tão bom quanto possível, mesmo sendo mau, nada há a fazer para melhorá-lo. Na última página de "*Candide*", o Dr. Pangloss, a caricatura voltairiana do optimista filosófico, diz a Candide: "*Existe um encadeamento necessário de acontecimentos neste melhor dos mundos; com efeito, se não tivesses sido expulso da casa a pontapé por amar a Dama Cunegundes, se não tivesses sido perseguido pela Santa Inquisição, se não tivesses tido que atravessar a América a pé, não estarias agora aqui a comer estes frutos deliciosos*". "*É bem verdade*", responde Candide, "*mas temos que nos levantar e ir trabalhar*". "

- com um britânico bom senso, Lord Shaftesbury e Lord Bolingbroke inspiraram ao célebre Alexander Pope a noção de "*all is good*", "ou, se há males particulares, eles formam o bem comum", constituindo assim os precursores literários do conceito de programação multiobjectivo.

Matematicamente, a questão da pesquisa de ótimos começou a clarificar-se com a observação elementar de Johannes Kepler de que as diferenças entre sucessivos valores de uma variável dependente, calculadas para valores equidistantes da variável independente, tendem a anular-se progressivamente a caminho de um extremo. Uma geração mais tarde, Pierre de Fermat desenvolveu a partir desta sugestão um método para calcular um extremo de uma função contínua de uma única variável real. O método proposto consistia basicamente em dar um acréscimo infinitesimal à variável independente e calcular, algebricamente, o acréscimo correspondente da variável dependente e em procurar o ponto x^* em que o valor da função é idêntico ao de um ponto vizinho, $x^* + dx$, com dx muito pequeno. Naturalmente, no decorrer do processo tinha que, sem efectivamente anular dx , se desembaraçar dos diferentes infinitésimos que, sabia ele antecipadamente, não deveriam figurar na solução; ao fazê-lo caía, naturalmente, dadas as carências do ferramental matemático da época, em frequentes ilogismos. O modo como Fermat lidava com os diferenciais, ou, como na época se chamavam, *deslocamentos virtuais*, levantou objecções por parte de certos dos seus contemporâneos, nomeadamente o arguto Descartes.

Quando Newton, em 1669, e Leibniz, em 1675, inventaram, por dois caminhos diferentes senão mesmo contraditórios, o cálculo infinitesimal, a dificuldade fundamental de Fermat permaneceu escondida por detrás do ruído produzido pela violenta controvérsia entre os seguidores destes dois autores. A questão foi, porém, trazida à luz pelo arguto George Berkeley, bispo de Cloyne, que, no seu "*O Analista, ou um discurso dirigido a um matemático infiel*", se vingava deste modo das contradições apontadas pelos matemáticos aos dogmas religiosos da época: criticou severamente o modo como, no início da demonstração a diferencial dx era considerada não nula e, mais adiante, quando convinha, se anulava. A ponderosa objecção de Berkeley lançou os matemáticos numa nova pesquisa destinada a consolidar o edifício do cálculo infinitesimal.

No entanto, o esforço investido nessa pesquisa teórica não impediu Johann Bernouilli de, no entanto, resolver um problema de optimização multidimensional relativo a uma questão de marinharia (designadamente, resolvendo uma disputa entre Huyghens e o Cavaleiro Renau, engenheiro naval de Luís XIV, relativa ao problema do ângulo óptimo das velas e de bolina de um barco, dada a direcção do vento em relação à da rota) nem impediu Euler de usar e aperfeiçoar o método de Fermat, generalizando-o, no sentido da intuição de Bernouilli, ao caso das funções multivariável e aplicando-o com enorme sucesso a uma grande variedade de problemas concretos.

Mais tarde, Lagrange tentou dar uma base rigorosa ao cálculo mediante o uso de desenvolvimentos em série e, ao fazê-lo, contribuiu notavelmente para a teoria da optimização, embora o seu objectivo central se tivesse gorado por completo. Porém, só bem mais tarde, em 1821, com a definição, por Augustin Cauchy, do conceito de limite é que se tornou possível dar um passo definitivo no sentido de colocar a questão em termos teóricos sólidos, mas, entretanto, já se encontravam desenvolvidos todos os instrumentos analíticos necessários.

No entanto, dada a complexidade dos cálculos numéricos envolvidos, a aplicação da teoria a situações práticas permaneceu muito limitada a problemas de carácter teórico e de formulação analítica.

Com o advento da computação digital automática, porém, as aplicações entraram a multiplicar-se exponencialmente e a teoria teve que dar novos saltos em frente a fim de permitir o desenvolvimento de métodos capazes de lidar eficientemente com situações de alta complexidade.

6. 1. CONCEITOS GERAIS

A *Programação Matemática* (termo consagrado, mas particularmente infeliz; deveria, talvez, dizer-se "*Teoria da Optimização*") consiste em procurar, entre todos os pontos x de um espaço R^n que verificam certas condições do tipo

$$g_i(x) \leq 0 \quad 1 \leq i \leq k \text{ (ditas } \textit{constricções})$$

e

$$h_j(x) = 0 \quad 1 \leq j \leq l \text{ (ditas } \textit{ligações}, \text{ por analogia com a Mecânica)}$$

aquele ou aqueles que tornam mínimo – ou máximo, segundo os casos – um certo *critério* definido através de uma *função-objectivo*, $f(x)$, isto é:

$$\min_x [f(x) \mid g_i(x) \leq 0; h_j(x) = 0].$$

As ligações, quando resolúveis (ou *holónomas*, como se diz tradicionalmente na Mecânica), podem sempre ser consideradas como outros tantos abaixamentos da dimensionalidade do problema.

As constricções podem sempre ser consideradas como definindo um volume X , finito ou infinito, no espaço R^n das variáveis x , dentro do qual tem sentido procurar as soluções do problema e que, por analogia com a terminologia da ginástica rítmica desportiva, chamaremos o *praticável*.

Por exemplo, na ausência de constricções, o mínimo de $f(x) = (x-2)^2$ ocorre no ponto $x=2$ e vale $f(2) = 0$. Porém, na presença da constricção $x \geq 4$, o mínimo ocorre em $x = 4$ e vale $f(4) = 4$.

Na medida em que um conjunto de constricções reduz o domínio de pesquisa da solução, poderia pensar-se que constitui de algum modo uma simplificação do problema; porém, o que acontece é precisamente o inverso: embora menos extenso, o processo de optimização torna-se, na prática, mais complexo devido à existência das constricções; a própria condição básica de existência de um extremo na ausência de constricções (que é, como se sabe, a condição de estacionaridade, ou de anulação do gradiente) pode ser violada na presença de constricções.

Naturalmente, é concebível que existam conjuntos de constricções tais que a sua intersecção total ou conjunta seja vazia. Neste caso, certas dessas constricções serão *incompatíveis* com as restantes ou, como também dizemos, *impraticáveis*, pelo que não poderão ser cumpridas; nesta forma, o problema da programação matemática não terá solução. Se, porém, certas das constricções puderem, eventualmente, ser parcialmente relaxadas, convertendo-se, de condições, em simples objectivos do problema, este poderá ser transformado em um problema de programação multiobjectivo (q. v.).

Quando a variável x é *discreta*, dizemos estar em presença de um problema de *programação de inteiros*, quando é *contínua*, distinguiremos os casos dos problemas de programação *convexa* ou *não-convexa*, conforme as propriedades de $f(x)$, de $g_i(x)$ e de $h_j(x)$. A programação de inteiros constitui um domínio tecnicamente colocado aparte, próximo da teoria dos grafos e desempenha um papel fundamental em certos tipos de aplicações e, nomeadamente, na teoria do projecto estrutural.

As outras formas de Programação Matemática situam-se na fronteira da Análise Matemática e da Análise Numérica até porque para grande parte dos seus problemas não existem (ou não se conhecem) soluções analíticas e a análise numérica acaba por funcionar como solução de recurso em situações deste tipo; naturalmente, com o desenvolvimento recente do cálculo automático, o interesse por estas matérias recrudesciu e, embora o grosso desta matéria seja constituída por algoritmos especializados na resolução de certos tipos particulares de problemas, as contribuições teóricas têm sido substanciais e, por vezes, mesmo vitais.

Ocorre aqui fazer uma distinção de carácter fundamentalmente analítico entre :

- a *optimização estática* (ou *estacionária*), no sentido de que aquilo que fundamentalmente nos interessa é determinar um ponto extremo (máximo ou mínimo) de uma função objectivo, isto é, um valor numérico (constante) da função e, eventualmente, também, os valores numéricos (igualmente constantes) dos argumentos da função nesse ponto; trata-se, obviamente, nesta formulação, de um problema elementar de Análise Matemática, um simples *problema de extremo* (ou de máximos e mínimos, como mais informalmente se diz) que, em última análise, se reduz à resolução de um *sistema de equações inteiras*;

- a *optimização dinâmica* (*lato sensu*), em que o que pretende determinar-se é toda uma função (habitualmente interpretável como uma trajectória) e não meramente um dos seus pontos; nesta formulação, torna-se evidente que se trata de um problema matemático de nível avançado, correspondente ao que convencionou chamar-se o *cálculo de variações*, que se reduz, em última análise, à resolução de um *sistema de equações diferenciais*, em geral ordinárias, isto é, em derivadas totais e não parciais.

Salvo pelo que se refere à formulação lagrangeana (intrinsecamente variacional) da Mecânica Clássica e à formulação clássica (em termos de programação dinâmica) do problema do controlo digital optimizado, supor-se-á que o leitor possui contacto limitado com este tipo de problemas.

Esta distinção ao nível analítico esbate-se, porém, quando se passa à implementação numérica (e é virtualmente certo que um problema minimamente realista para ter interesse prático não é passível de solução analítica, exigindo recurso a métodos numéricos); com efeito, praticamente todas as implementações numéricas são de tipo *iterativo*, resultando em *aproximações sucessivas* que virtualmente definem uma trajectória desde um ponto de partida (em geral escolhido arbitrariamente), o *guess* inicial, até ao ponto de chegada ao extremo pretendido, ou uma sua vizinhança suficientemente próxima.

6. 1. 1. PROGRAMAÇÃO LINEAR

O problema típico de programação linear é da forma:

$$P = \begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_j \geq b_i & 1 \leq i \leq k_1 \\ x_j \geq 0 & 1 \leq j \leq k_2 \\ \max \left[f(x) = \sum_{j=1}^n c_j \cdot x_j \right] \end{cases}$$

Com efeito, no caso linear não faz sentido, obviamente, considerar explicitamente as restrições, visto que estas podem sempre ser resolvidas em ordem a um número igual de variáveis e, portanto, ser utilizadas para baixar a dimensionalidade do problema.

O programa diz-se *linear* porque são lineares a função objectivo e as restrições (as ligações, se existem, serão também lineares e não precisam de ser explicitadas porque, sendo resolúveis, determinam imediatamente um abaixamento da dimensionalidade do problema, o que, em termos de cálculo, só pode ser vantajoso.

A característica fundamental de um programa linear é a de, na ausência de restrições, não possuir pontos de estacionaridade, pelo que a solução, se existir, resultará inteiramente da presença de restrições; torna-se então evidente que uma condição suficiente para a existência de um extremo da função objectivo é a de as restrições definirem um praticável (necessariamente um hiperpoliedro) finito, isto é, encerrável dentro de um

hipercubo de dimensões finitas (que a condição não é estritamente necessário, é igualmente óbvio); neste caso, verifica-se facilmente, existirão dois extremos, um mínimo e um máximo situados sobre o contorno do praticável.

Desta característica peculiar do problema da Programação Linear resulta que possa ser abordado em termos puramente algébricos e não analíticos, por uma técnica de resolução em um número finito de passos que se concretizou, pela primeira vez no *algoritmo do simplex* de Dantzig, Kuhn e Tucker (1945-1950).

Em relação com o desenvolvimento coevo do cálculo automático, o sucesso da programação linear foi o factor determinante do aparecimento de toda uma gama de métodos quantitativos de gestão empresarial que constituem o objecto do ramo das Matemáticas Aplicadas que é conhecido pelo nome genérico e pouco rigoroso de *Investigação Operacional*, métodos que são hoje pouco menos que clássicos e são utilizados por inúmeros práticos e investigadores de variados ramos científicos e tecnológicos.

Por razões de natureza didáctica ligadas com a sua natureza peculiar, a Programação Linear não será estudada nesta cadeira, mas nas cadeiras de Investigação Operacional ou de Métodos Algébricos.

6. 1. 2. PROGRAMAÇÃO CONVEXA

A teoria da programação convexa tentou seguir o modelo da programação linear, de que é uma generalização óbvia. Infelizmente, porém,

- não dispõe de equivalente, em matéria de eficácia, do método do simplex, o que tem conduzido à formulação de numerosos algoritmos numéricos alternativos;

- a convexidade conjunta das restrições e da função objectivo não bastam para garantir a existência de solução sobre a fronteira do praticável.

Função convexa é uma função real tal que o conjunto dos pontos (x, y) acima do seu gráfico, isto é, tais que $y \geq f(x)$, é convexo. *Conjunto convexo* é um conjunto de pontos tal que o segmento que une dois quaisquer deles pertence inteiramente ao conjunto. Deste modo, a função convexa dos matemáticos é o que correntemente chamaríamos “com a convexidade para baixo” ou “com a concavidade para cima”.

O problema geral da programação convexa é do tipo

$$P = \begin{cases} g_i(x) \leq c_i & 1 \leq i \leq k \\ \min[f(x)] \end{cases}$$

em que tanto os g_i como f são *funções convexas* em R^n . O *conjunto permitido* ou *praticável*, isto é, compatível com as restrições, é então uma parte convexa de R^n mas não, em geral, um poliedro, porque as restrições não serão, em geral, lineares. A *lagrangeana* do problema é a função L em $R^n \times R^k$ definida por

$$L(x, y) = f(x) + \sum_{i=1}^k y_i \cdot [g_i(x) - c_i]$$

Sob certas condições gerais, ditas de *qualificação das restrições* o ponto x' é solução de P se e só se existirem y' e R^k tal que

$$L(x', y) \geq L(x', y') \geq L(x, y') \text{ qqs } x, y \quad \text{Eq. (6-1)}$$

As componentes y'_i de y' são os *multiplicadores de Lagrange* associados às k restrições.

Verifica-se facilmente que

$$y'_i \cdot [g_i(x') - c_i] = 0 \text{ qqs } i$$

tal como no caso linear.

A Equação (6-1) exprime o facto de (x', y') ser um *colo*, ou *ponto em sela*, da lagrangeana $L(x, y)$ e pode ser escrita na forma equivalente

$$\min_x \max_y [L(x, y)] = L(x', y') = \max_y \min_x [L(x, y)].$$

A expressão

$$\min_x \max_y [L(x, y)]$$

vale $f(x)$ se $g_i(x) < c_i$ e vale no caso contrário, de modo que o primeiro membro conduz ao problema P .

O primeiro membro conduz, portanto, às condições necessárias de optimidade em presença de restrições, conhecidas por *condições de Kuhn-Tucker*

$$\frac{dL(x, y)}{dx_j} = 0$$

ou

$$\frac{df(x)}{dx_j} + \sum_{i=1}^k dg_i x$$

Em teoria, o problema poderia, portanto, ser resolvido do seguinte modo:

- em uma primeira fase, resolver o sistema das condições necessárias em ordem às variáveis x_j , obtendo-se expressões destas em função dos valores, ainda desconhecidos, dos multiplicadores de Lagrange, y_i ;
- em uma segunda fase, introduzir estas expressões nas expressões das restrições e os valores dos multiplicadores relevantes para a solução são determinados; a substituição destes valores nas expressões das variáveis daria os valores destas no óptimo.

Na prática, dado que as condições necessárias são, em geral, não-lineares, a sua resolução algébrica não será, em geral, possível, e o único recurso que fica é a resolução numérica, em conjunto com as próprias restrições.

Os problemas graves que se levantam são, porém,

- o de nem todas as restrições se encontrarem activas no óptimo e
- o de não ser possível determinar à partida aquelas que o estão.

Na prática, portanto, o problema terá sempre que ser resolvido por um processo de pesquisa.

O segundo membro conduz a um outro programa convexo, dito *dual*, cuja solução é y' :

$$P^* = \begin{cases} y_i \geq 0 & 1 \leq i \leq k \\ \max \left[h(y) - \sum_{i=1}^k y_i^* \cdot c_i \right] \end{cases}$$

com

$$h(y) = \min [f(x) + \sum_{i=1}^k y_i \cdot g_i(x)].$$

Também neste caso, a resolução de P^* , isto é, a determinação dos multiplicadores de Lagrange, y'_i , trivializa o problema P , porque o reduz a minimizar em R^n a função $L(\cdot, y)$, sem restrições.

Um caso particular importante ocorre com frequência em economia e é da forma:

$$P' = \begin{cases} \sum_{i=1}^n x_i \leq c \\ x_i \geq 0 \\ \max \sum_{i=1}^n f_i(x_i) \end{cases}$$

em que as funções f_i são convexas (o que faz com que a sua soma o seja também).

A lagrangeana deste problema particular é da forma

$$L(x, y) = y \cdot c + \sum_{i=1}^n [y \cdot x_i f_i(x_i)]$$

e o conhecimento do multiplicador y permite decompor o problema inicial em n problemas individuais

$$P'_i = \max [f_i(x_i) y', x_i] \quad \text{para } 1 \leq i \leq n$$

A interpretação económica mais corrente é a seguinte: trata-se de repartir uma quantidade $c \in R^k$ de um certo bem entre n agentes; se o agente i receber a quantidade x_i , produzirá para a empresa o benefício $f_i(x_i)$. O problema P é o *problema do planificador central*: o de encontrar a repartição óptima, mas este problema é equivalente ao da determinação do multiplicador y e R_k : basta deixar os agentes aprovisionarem-se livremente, impondo-lhes a condição de maximizarem os seus lucros (obviamente para que comprem apenas o estritamente necessário) facturando-lhes a todos um conjunto de preços internos y' . É o que se chama a *descentralização pelos preços*.

A vantagem desta segunda formulação, do ponto de vista computacional, é óbvia: as quotas x'_i representam $n \cdot k$ números, enquanto o sistema dos preços internos, y' representa apenas k números.

Quanto aos métodos numéricos utilizados para implementar a programação convexa, eles reportam-se, naturalmente, ao problema da geração das alternativas relativas ao melhoramento do objectivo a partir de um dado ponto, e são de dois tipos fundamentais: os métodos directos e os métodos duais.

Os *métodos directos* consistem em trabalhar directamente sobre o problema primário, procurando um *algoritmo de descida*, isto é, gerador de uma sucessão (x_n) tal que $f(x_{n+1}) < f(x_n)$.

Os outros métodos, ditos *duais*, trabalham simultaneamente sobre o problema primário e o dual. O mais conhecido é o *método de Uzawa*, que consiste em procurar directamente o ponto em sela da lagrangeana, $L(x, y)$: a cada iteração, parte-se de (x_n, y_n) e dá-se um passo descendente segundo x seguido de um ascendente segundo y , o que produz (x_{n+1}, y_{n+1}) .

Estudaremos agora alguns métodos directos mais frequentemente usados. Com efeito, o estudo de uma certa variedade de métodos é indispensável, porque não existe um método único que possa responder a todos os tipos de necessidades em todos os tipos de situações possíveis.

Estes métodos caracterizam-se por produzirem iterativamente estimas de \mathbf{x}^* , o conjunto de variáveis de projecto que conduz o objectivo $f(\mathbf{x})$ ao seu valor mínimo. Todos eles trabalham igualmente bem na pesquisa de máximos, tomando $-f(\mathbf{x})$ em vez de $f(\mathbf{x})$.

Podem, basicamente, ser classificados em três grandes categorias com base no tipo de informação que exigem:

- *métodos de pesquisa directa* que usam apenas os valores da função objectivo;
- *métodos de gradiente*, que exigem valores precisos das primeiras derivadas de $f(\mathbf{x})$;
- *métodos de segunda ordem*, que, além das primeiras derivadas, exigem também conhecimento das segundas.

Os métodos directos que utilizam apenas valores da função objectivo para guiar a pesquisa do óptimo podem, por sua vez, ser divididos grosseiramente em

- *métodos heurísticos*, que, como o nome sugere, são construídos com base em certas intuições (geométricas ou de outra natureza) e para os quais não existem garantias de desempenho, excepto as que dizem respeito à experiência acumulada em dadas aplicações concretas; os métodos heurísticos (método de Hooke & Jeeves, *Direct search of numerical and statistical problems*, J. ACM, 8, 1966), método do simplex, de Spendley, Hext & Himsworth, *Sequential application of simplex designs in optimization and evolutionary operation*, Technometrics, 4, 1962, ou a sua variante melhorada, de Nelder & Mead, *A simplex method for function minimization*, Computer J. , 7, 1965) baseiam-se na ideia da pesquisa factorial (de modo simples e directo no primeiro caso, de modo mais sofisticado e optimizado no segundo); a heurística refere-se essencialmente a modos mais ou menos habilidosos de evitar (nem sempre com sucesso !) pesquisas exaustivas ao longo de todas as coordenadas.

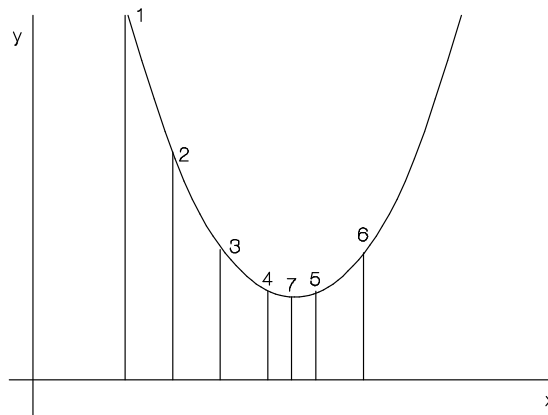
- *métodos fundamentados teoricamente*, cuja fundamentação permite obter certas garantias de desempenho, como, por exemplo, a convergência, pelo menos sob condições bem definidas; dos métodos com fundamentação teórica, que constituem desenvolvimentos teóricos dos anteriores, estimulados pela constatação empírica de vantagens e inconvenientes por vezes misteriosos; o método de Powell (*An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives*, Computer J. , 7, 1964); *On search directions for minimization algorithms*, Math. Prog. , 4(2), 1973), nomeadamente com as modificações propostas por Zangwill (*Minimizing a function without calculating derivatives*, Computer J. , 10, 1967) e Brent (*Algorithms for minimization without derivatives*, Academic Press, New York, 1973) é o mais interessante e utilizado.

Antes, porém, de passarmos ao estudo sistemático destes diferentes métodos, temos, por razões didácticas, que abordar o problema elementar da pesquisa unidimensional, sobre cujos métodos e conceitos se baseia grande parte dos métodos multidimensionais.

6. 2. AS TÉCNICAS CONCRETAS

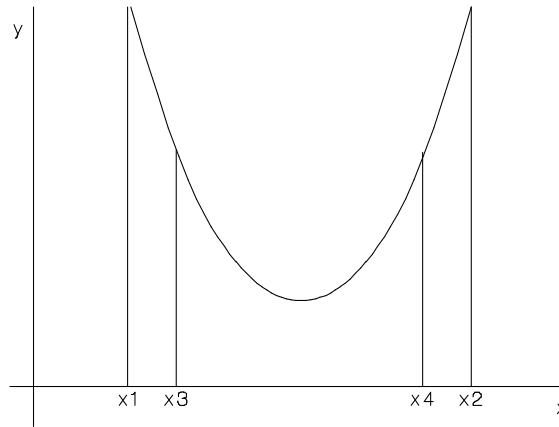
6. 2. 0. PESQUISA UNIDIMENSIONAL

O mais elementar problema de optimização consiste na pesquisa do extremo de uma função de uma só variável. Os critérios analíticos são bem conhecidos, mas são numerosos os casos em que, por falta de uma definição analítica conveniente da função objectivo, ou de algum ou alguns dos seus componentes, há que recorrer a métodos numéricos.



O leitor poderá por si próprio imaginar um método simples, essencialmente numérico, para pesquisa do mínimo de uma função de uma variável. Uma ideia viável consiste em procurar, a partir de um ponto de partida

dado, o sentido em que a função decresce. Em seguida dar-se-á um passo nesse sentido, e assim sucessivamente, até que se detecte um aumento na função, isto é, que o novo valor calculado seja mais alto que o anterior. Quando tal se verificar, abandonam-se os dois últimos pontos calculados e parte-se de novo do antepenúltimo, mas agora com um passo menor, por exemplo, metade do anterior. O processo prossegue até o mínimo ter sido localizado dentro da precisão pre-especificada.



6. 2. 0. 1. MÉTODO DOS TERÇOS

Este método elementar é perfeitamente válido mas pode exigir demasiados cálculos da função $f(x)$. Algumas técnicas correntemente utilizadas pressupõem que sejam conhecidos dois pontos x_1 e x_2 entre os quais se encontra o mínimo procurado (é esta a situação do método elementar quando se descobre um ponto mais elevado); a partir daí calculam-se dois novos pontos x_3 e x_4 dentro do intervalo $\{x_1, x_2\}$; se $f(x_4)$ for menor que $f(x_3)$, podemos garantir que o mínimo se encontra entre x_3 e x_2 , de modo que não há necessidade de pesquisar o intervalo $\{x_1, x_3\}$; do mesmo modo, se fosse $f(x_3) < f(x_4)$, poderíamos abandonar $\{x_4, x_2\}$.

O problema que agora se levanta é o de qual deve ser a regra de escolha dos pontos x_3 e x_4 dentro do intervalo $\{x_1, x_2\}$. Uma ideia simples consiste em dividir o intervalo em terços, mas é imediato ver que, se mantivermos a regra, quando tivermos abandonado um dos subintervalos, nenhum dos cálculos feitos será aproveitado para o interior do novo intervalo. Um processo mais eficiente consiste, portanto, em encontrar uma divisão do intervalo por tal forma que o mais baixo dos valores calculados possa ser aproveitado na comparação seguinte.

6. 2. 0. 2. REGRA ÁUREA

O *método da secção áurea* utiliza esta condição. Com efeito, começando com o intervalo $\{x_1, x_2\}$ em que se sabe estar o mínimo, escolhemos x_3 de modo a ser $x_3 - x_1 = A \cdot (x_2 - x_1)$ e x_4 de modo que $x_4 - x_1 = B \cdot (x_2 - x_1)$. Assim:

se for $f(x_3) < f(x_4)$ o mínimo está em $\{x_1, x_4\}$ e o próximo passo implica $x_2 \leftarrow x_4$ e $x_4 \leftarrow x_3$; será, portanto $x_3 - x_1 = B \cdot (x_4 - x_1)$

se for $f(x_3) > f(x_4)$ o mínimo está em $\{x_3, x_2\}$ e o próximo passo implica $x_1 \leftarrow x_3$ e $x_3 \leftarrow x_4$; será, portanto $x_4 - x_3 = B \cdot (x_2 - x_3)$

Estas quatro equações exigem, como condição de compatibilidade, que seja $A - A \cdot B^2 = B - A$, isto é, $A = B^2$, de modo que resulta $B^2 - B^4 = B - B^2$, ou seja,

$$B = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = 0.6180339887$$

e

$$A = B^2 = 0.3819660112.$$

6. 2. 0. 3. MÉTODO DA INTERPOLAÇÃO QUADRÁTICA

Uma outra técnica que se usa com frequência, dita da *interpolação quadrática*, consiste em, uma vez isolado um extremo, substituir a curva por uma parábola para obter uma nova estima do extremo e retomar o processo de busca, agora com um passo mais pequeno. Dado que, em muitos casos, a maior parte do tempo de cálculo é dedicado ao cálculo dos valores da função, aconselha-se a iniciar a busca descendente com passos sucessivamente duplicados, até se encontrar um valor da função que exceda o anterior; chegado a este ponto, x_n , dá-se um passo em sentido contrário com metade da amplitude, de modo a partir o último intervalo a meio por um ponto x_{n+1} ; fica-se então com 4 pontos equidistantes, respectivamente x_{n-2} , x_{n-1} , x_{n+1} , x_n ; destes, identifica-se o que dá o valor mais baixo e despreza-se o mais distante dele (se o mais baixo for x_{n-1} , despreza-se x_n ; se for x_{n+1} , despreza-se x_{n-2}); sejam f_1 , f_2 , f_3 os valores de $f(x)$ nos pontos retidos, equidistantes, x_1 , x_2 , x_3 ; a parábola que passa pelos três pontos tem por equação

$$y = y_1 + \frac{x - x_1}{h} \cdot (f_2 - f_1) + \frac{(x - x_1) \cdot (x - x_1 - h)}{2h^2} \cdot (f_3 - 2f_2 + f_1)$$

cujo mínimo se encontra no ponto

$$x_2 + \frac{h \cdot (f_1 - f_3)}{2 \cdot (f_3 - 2f_2 + f_1)}$$

Obtida assim uma estimativa da posição do mínimo, o ponto em questão é utilizado como ponto de partida para uma nova busca descendente.

6. 2. 1. PESQUISA MULTIDIMENSIONAL

6. 2. 1. 1. MÉTODO DE POWELL

Aqui, a ideia fundamental, ao contrário dos métodos heurísticos, é a de utilizar ao máximo a história das iterações anteriores para obter direcções de aceleração e, ao mesmo tempo, evitar a degenerescência em pesquisas sequenciais por coordenadas, em que os outros métodos caem com desagradável frequência. Para isso, baseia-se na modelagem da função objectivo (de forma analítica supostamente desconhecida, de acordo com a hipótese de falta de informação sobre as derivadas) sob a forma de uma quádrlica.

Há duas razões básicas para a escolha da quádrlica:

- é a função não-linear mais simples de minimizar (as funções lineares não permitem modelar adequadamente funções com mínimos em pontos finitos), de modo que uma técnica geral eficaz sê-lo-á, por maioria de razão, no caso da quádrlica;
- nas vizinhanças do óptimo, todas as funções não-lineares (analíticas !) podem ser aproximadas por uma quádrlica (visto que, no desenvolvimento em série de Taylor, os termos lineares, cujos coeficientes são as primeiras derivadas, se anulam).

A ideia fundamental resulta da observação de que, se uma função quadrática de N variáveis puder ser transformada em uma soma de quadrados perfeitos, o óptimo pode ser encontrado mediante N pesquisas monovariáveis, uma relativa a cada uma das variáveis transformadas.

O processo de transformar uma função quadrática

$$q(x) = a + b^T \cdot x + x^T \cdot C \cdot x/2$$

em uma soma de quadrados perfeitos é equivalente a encontrar uma matriz de transformação T tal que o termo quadrado se reduza a forma diagonal; assim, dada a forma quadrática

$$Q(x) = x^T \cdot C \cdot x$$

a transformação procurada

$$x = T \cdot z$$

dará

$$Q(x) = z^T \cdot T^T \cdot C \cdot T \cdot z = z^T \cdot D \cdot z$$

em que D é uma matriz diagonal.

Seja então t_j a coluna j de T . A transformação procurada exprime x como combinação linear dos vectores coluna t_j :

$$x = T \cdot z = t_1 \cdot z_1 + \dots + t_N \cdot z_N$$

Os vectores t_j podem interpretar-se como

- puros operadores que conduzem, em um novo sistema de coordenadas, às direcções principais da quádrlica; geometricamente, isto corresponde a tomar uma quádrlica geral, com termos cruzados, e realinhar os eixos coordenados com as direcções principais (perpendiculares entre si) da quádrlica;

Seja, por exemplo, a quádrlica

$$f(x) = 4 \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2 - 4 \cdot x_1 \cdot x_2 + x_1$$

e a transformação

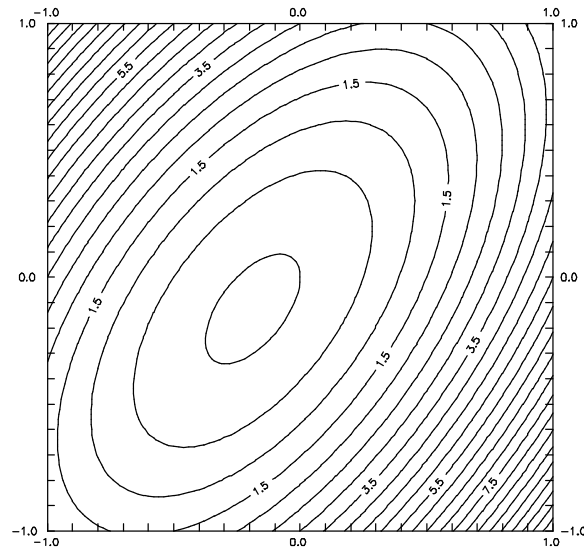
$$x_1 = z_1 + z_2/2$$

$$x_2 = z_2$$

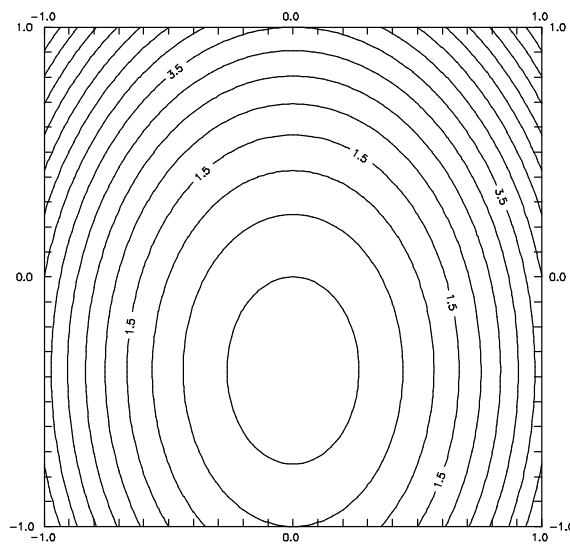
ou

de modo que

$$f(z) = 4 \cdot z_1^2 + 2 \cdot z_2^2 + z_1 + z_2/2$$



Quádrlica com termos cruzados: $4 \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2 - 4 \cdot x_1 \cdot x_2 + x_1$



Quádrlica sem termos cruzados: $4 \cdot x_1^2 + 2 \cdot x_2^2 + x_1 + x_2/2$

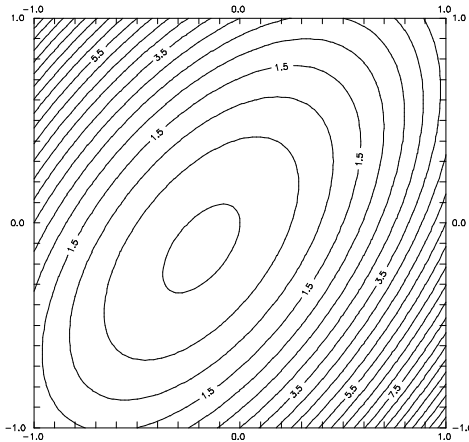
• como vectores do espaço original que constituem *direcções conjugadas* da quádrlica, direcções que têm a propriedade de pesquisas sucessivas e independentes ao longo delas conduzirem, sem iteração, directamente ao mínimo (só se, por acaso, os eixos coordenados ortogonais originais fossem conjugados, essas direcções conjugadas seriam perpendiculares):

$$x_1 = x_0 + l_1 \cdot t_1$$

$$x_2 = x_1 + l_2 \cdot t_2$$

...

$$x_{min} = x_{N-1} + l_N \cdot t_N$$



As direcções dos vectores t_j como direcções conjugadas da quádrlica

Deste modo, as direcções s_i ($i = 1, \dots, r \leq N$) serão conjugadas (em relação a \mathbf{C}) se forem linearmente independentes e se

$$s_i^T \cdot \mathbf{C} \cdot s_j = 0 \quad (i \neq j)$$

Consideremos, então, de novo a função quadrática geral

$$q(\mathbf{x}) = \mathbf{a} + \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{x} / 2$$

Os pontos ao longo da direcção \mathbf{d} a partir de \mathbf{x}_1 serão

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + l \cdot \mathbf{d}$$

e o mínimo de $q(\mathbf{x})$ ao longo de \mathbf{d} é obtido encontrando l^* tal que $\partial q / \partial l = 0$:

$$\frac{\partial q}{\partial l} \bigg|_{\mathbf{x}} = (\mathbf{b}^T + \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{C}) \cdot \mathbf{d} = 0$$

$$\mathbf{y}_1^T \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{d} = 0$$

Notando por \mathbf{y}_1 esse mínimo, teremos:

$$[\mathbf{y}_1^T \cdot \mathbf{C} + \mathbf{b}^T] \cdot \mathbf{d} = 0$$

Do mesmo modo, para um mínimo \mathbf{y}_2 atingido ao longo de \mathbf{d} a partir do ponto \mathbf{x}_2 , será

$$[\mathbf{y}_2^T \cdot \mathbf{C} + \mathbf{b}^T] \cdot \mathbf{d} = 0$$

de modo que

$$[\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1]^T \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{d} = 0.$$

Deste modo, por definição, as direcções $\mathbf{d} [\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1]$ são conjugadas em relação a \mathbf{C} , o que fornece um método cómodo para calcular a direcção conjugada de uma dada direcção.

Seja, de novo, a quádrlica

$$q(\mathbf{x}) = 4 \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2 - 4 \cdot x_1 \cdot x_2 + x_1$$

e sejam os pontos $\mathbf{x}_1 = [0, 0]^T$ e $\mathbf{x}_2 = [1, 0]^T$ e direcção $\mathbf{d} = [1, 1]^T$; a primeira pesquisa segue a linha

$$\mathbf{x} = [0, 0]^T + l \cdot [1, 1]^T$$

e conduz a

$$l^* = -1/6$$

$$\mathbf{y}_1 = [-1/6, -1/6]^T$$

enquanto a segunda pesquisa ao longo de

$$\mathbf{x} = [1, 0]^T + l \cdot [1, 1]^T$$

conduz a

$$l^* = -5/6$$

$$y_2 = [1/6, -5, 6]^T$$

De acordo com a propriedade fundamental da conjugação,

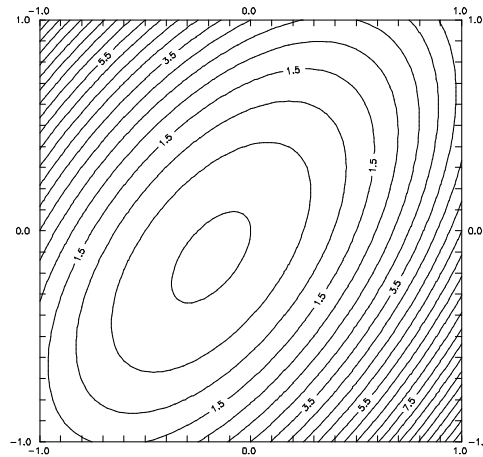
$$y_2 - y_1 = [1/6, -5/6]^T - [-1/6, -1/6]^T = [1/3, -2/3]^T$$

é a direcção conjugada de $d = [1, 1]^T$.

Por definição

$$[1, 1] \cdot C \cdot [1/3, -2/3]^T$$

como o leitor verificará sem dificuldade.



As direcções dos vectores t_j como direcções conjugadas da quádrlica

O método de POWELL desenvolve-se, portanto, ao longo dos seguintes passos:

1. Escolha-se x_0 , o ponto de partida, e um conjunto de N direcções s_i , linearmente independentes; para simplificar, $s_i = e_i$, os versores dos eixos;
2. Minimize-se ao longo de $N+1$ direcções, usando o mínimo calculado em cada uma como ponto de partida para a seguinte; seja s_N a primeira e a última das direcções de pesquisa;
3. Forme-se a nova direcção conjugada usando a propriedade fundamental da conjugação;
4. Substitua-se s_i por s_2 e assim sucessivamente; substitua-se s_N pela nova direcção conjugada; regresse-se a (2).

Resulta do modo como o método foi construído que, se $f(x)$ for quadrática e tiver mínimo, este será atingido em exactamente N ciclos (2-3-4). Se a função não for quadrática serão, naturalmente, necessários mais ciclos; porém, demonstra-se que, sob condições muito gerais, o mínimo, se existir, será encontrado em um número finito de passos, dentro de uma precisão compatível com a precisão do cálculo.

Para que o método possa ser praticável, é necessário introduzir nele

- a) um critério de convergência para determinar o ponto de paragem;
- b) um teste de ortogonalidade (o que é particularmente importante quando $f(x)$ não for quadrática).

Quanto ao problema do critério de paragem, como quanto a tantos outros do cálculo numérico, não existe resposta definitivamente satisfatória. Os dois critérios mais correntes são

e

6.2.1.2. MÉTODO DO GRADIENTE

Ao contrário dos métodos analíticos, que tentam ir directamente ao valor desejado, os métodos numéricos, iterativos, baseiam-se no princípio de dar sucessivos passos descendentes até encontrar o ponto mais baixo possível.

O perigo por trás de tal ideia consiste, naturalmente, em algures no flanco da encosta existir um "buraco" no fundo do qual se situa o mínimo e ao lado do qual o algoritmo de pesquisa vai passar sem se aperceber. Neste caso, como é evidente, estamos já perante um problema de optimização não-convexa e poder-se-ia dizer que não cabe aqui analisá-lo; não se esqueça, porém, que, em situações concretas, raramente sabemos *a priori* se estamos perante um problema convexo, ou não. O único remédio conhecido contra este risco, que é, aliás, comum a todos os outros métodos de pesquisa multidimensional, consiste em lançar o algoritmo sucessivas vezes de pontos diferentes a fim de minimizar a probabilidade de tal acidente.

Conceptualmente, inspiram-se todos na ideia do mapa topográfico traçado por meio de curvas de nível

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \text{constante}.$$

Em termos analíticos, seja a função objectivo

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

que, para $y = \text{constante}$, dá as curvas de nível; suponhamos que derivamos f , mantendo y constante, isto é, ao longo de uma curva de nível

$$\frac{dy}{ds} = \frac{\partial f}{\partial x_1} \cdot \frac{dx_1}{ds} + \frac{\partial f}{\partial x_2} \cdot \frac{dx_2}{ds} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} \cdot \frac{dx_n}{ds} = 0$$

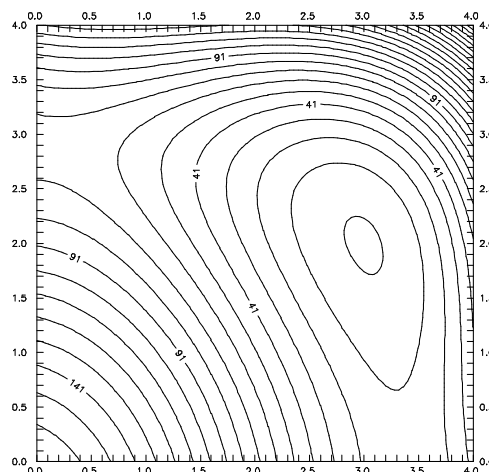
em que s é o comprimento de arco sobre a curva de nível, e as n funções

$$\frac{dx_j}{ds} \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

são os cosenos directores da curva de nível; resulta que os números

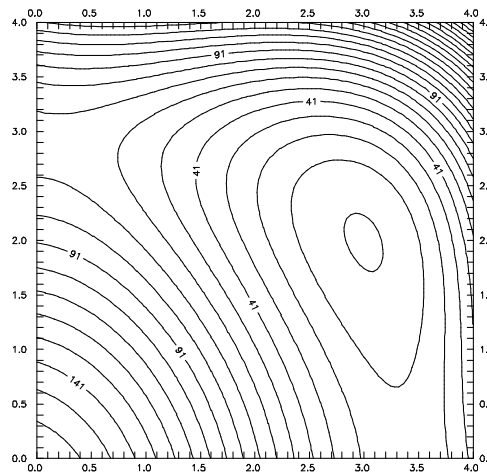
$$\frac{\partial f}{\partial x_j} \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

são proporcionais aos cosenos directores da perpendicular à curva de nível e podem ser considerados como as componentes cartesianas de um vector coluna $df/d\mathbf{x}$.



Estes números definem, portanto, a direcção do *gradiente local* que, é fácil mostrar, dá a direcção do maior pendor da superfície, no sentido ascendente.

Se seguirmos a direcção do gradiente local em sentido inverso seremos, então, conduzidos ao mínimo local. Dado que todos os caminhos de maior pendor levam ao mesmo ponto, nem sequer precisamos de ser muito exactos: acabaremos sempre por lá chegar, pelo menos aproximadamente.



Uma propriedade fundamental do método do gradiente (e que deve ser comum a todos os bons métodos de optimização) é, portanto, a de ser autocorrector: mesmo que se cometa um erro no cálculo de um passo (e mesmo que esse erro implique a passagem para um ponto em que a função tem um valor mais alto que no anterior), os passos seguintes, desde que isentos de erro, corrigi-lo-ão, embora eventualmente à custa de atraso da convergência.

O *método do gradiente* tem o ponto fraco de, nas vizinhanças do mínimo, $df/d\mathbf{x}$ ser muito pequeno e, devido aos erros de cálculo, apontar só vagamente para o mínimo. No entanto, o valor desta fraqueza não deve ser exagerado: se todas as inclinações são já muito pequenas, pouco haverá a ganhar com requintes na localização do mínimo em termos de diminuição da função, nomeadamente quando se tem em conta que a modelagem da função objectivo não passa, na realidade, de uma aproximação.

A técnica mais primária de aplicação da ideia do método do gradiente consiste em dar passos (usando o expoente ⁽¹⁾ para indicar a sua ordem)

$$x_j^{(i+1)} = x_j^{(i)} - h \cdot \frac{\partial f^{(i)}}{\partial x_j} \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

em que h é o passo.

O primeiro problema é, naturalmente, o de arbitrar um valor razoável para h , tendo em mente que não há necessidade de ser muito exacto, visto que todos os caminhos vão dar ao mínimo. Um modo simples de o resolver consiste em começar com um passo qualquer (por exemplo, com $h = 1$) e

- i) se $f(\mathbf{x}^{(i+1)}) < f(\mathbf{x}^{(i)})$, dar novo passo com $h = 2 \cdot h$;
- ii) se $f(\mathbf{x}^{(i+1)}) > f(\mathbf{x}^{(i)})$, não efectivar o passo e fazer nova tentativa com $h = h/2$;
- iii) voltar a i) ou ii).

Uma outra maneira um pouco mais requintada, computacionalmente mais pesada e de vantagem duvidosa, consiste em normalizar os $\frac{\partial f^{(i)}}{\partial x_j}$ por

$$\left[\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial x_j} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

isto é, converter as derivadas em cosenos directores, tornando o passo independente da inclinação da superfície.

O principal defeito do método do gradiente, para um espaço de dimensionalidade elevada, reside no esforço de cálculo exigido por $\frac{\partial f^{(i)}}{\partial x_j}$. Além disso, em muitos problemas reais é difícil ou impossível obter uma expressão analítica da função objectivo em forma cerrada, para dela deduzir as componentes do gradiente. É este último, notavelmente, o caso de os valores da função objectivo dependerem de resultados experimentais, reais ou numéricos. Em tal caso, recorrer-se-á, naturalmente, ao expediente simples de variar ligeiramente uma das coordenadas e observar a correspondente variação do valor da função, o que dá uma estimativa do valor da derivada parcial correspondente:

$$\frac{f(x + \delta x_j) - f(x)}{\delta x_j} \equiv \frac{\partial f}{\partial x_j}$$

Se o leitor decidir usar este método considerando-o apenas como uma integração das equações

$$\frac{dx}{ds} = \frac{\partial f}{\partial x_j}$$

então um método de Runge-Kutta seria provavelmente a melhor solução. No entanto, a experiência mostra que uma tal opção global não é computacionalmente vantajosa.

É frequente apontar-se a esta técnica o inconveniente de, quando a variação de x_j for demasiado pequena, a variação resultante da função ser pequena, o que pode conduzir a erro na estima da derivada por efeito dos erros de arredondamento (note-se que, neste caso, a subtracção é inevitável) e de, quando a variação for demasiado grande, se não estar a medir o *gradiente local* mas uma espécie de *gradiente regional*. É um facto que a primeira situação é, efectivamente, perniciosa; a segunda, porém, apenas atrasará a convergência ou, na pior das hipóteses, provocará uma paragem precoce do algoritmo; ironicamente, pode mesmo constituir uma bênção, como veremos no caso da programação não convexa.

Um dos problemas práticos mais complicados associados à programação convexa resulta da existência, com frequência surpreendente, de *vales singulares*, isto é, de depressões muito alongadas com o fundo, ou *thalweg*, muito pouco inclinado e de planta curva; com efeito, em tais casos, o algoritmo de pesquisa pode

a) tornar-se extremamente lento ou mesmo parar intempestivamente, nomeadamente quando, respectivamente, as encostas forem muito abruptas e o *thalweg* quase de nível;

b) tender a oscilar em trajectórias transversais ao vale.

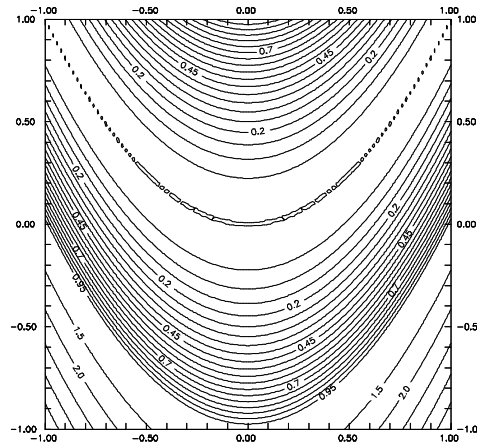
Analiticamente, trata-se de situações em que a hesseana, ou matriz das curvaturas, se torna singular ou quase-singular; atendendo, por outro lado, a que a grande maior parte dos métodos praticáveis de optimização numérica é, quando muito, de segunda ordem, compreende-se que tenham então tendência para falhar, o que implica que, contrariamente ao que, com frequência, tácita ou explicitamente se supõe, os métodos de segunda ordem não são, em geral, suficientes para o problema da optimização multivariável.

O desprezo das derivadas de ordem superior resulta do carácter particularmente insidiosos da generalização do caso monovariável ao caso multivariável.

Com efeito, em 1742, MacLaurin pode afirmar com verdade, no caso unidimensional, que x_0 é um máximo (ou um mínimo) se e só se a derivada não nula de mais baixa ordem nesse ponto for negativa (ou positiva) e de ordem par. Em 1979 um matemático da craveira de Lagrange sentiu-se justificado ao propor um princípio idêntico para as funções multivariável, afirmando que, se as

diferenciais em x_0 não nulas e de ordem mais baixa forem definidas positivas (negativas) e de ordem par, então x_0 será um mínimo (máximo). Esta concepção mítica não foi, porém, posta a nu durante mais de um século, até que Genocchi e Peano deram um contra-exemplo elementar de uma função que tem um vale curvo:

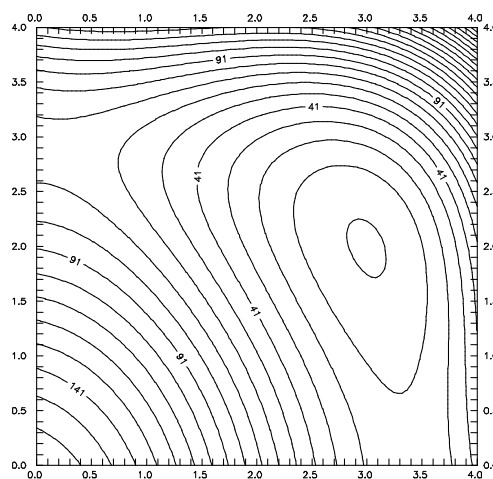
$$z = (y - a^2 \cdot x^2) \cdot (y - b^2 \cdot x^2)$$



A função de Genocchi-Peano para $a = b = 1$

O princípio errado de Lagrange, falsamente demonstrado por este mediante um desprezo ilegítimo de diferenciais de ordem superior, é ainda hoje frequentemente ignorado, devido à sua aparente plausibilidade, ou desprezado, com base na ideia de que tais situações são demasiado raras para merecerem tratamento genérico; a teoria rigorosa, mas complicada, foi fornecida (já neste século!) por Scheefer e Stolz.

No caso particular dos problemas de regressão de mínimos quadrados (que abordaremos especificamente adiante), a experiência mostra que a existência de vales singulares se liga muito frequentemente com uma má cobertura pelos dados da região com interesse.



Por este facto, é extremamente importante sabermos defender-nos de tais situações, nomeadamente porque com frequência acontece serem puros artifícios de modelagem que pouco têm que ver com o sistema real. Em termos práticos, porém, tais geometrias correspondem frequentemente à existência local de *quase-relações* entre variáveis, que dão origem a situações de quase-indiferença, ou de permutabilidade, entre as variáveis. Com efeito, os vales resultam frequentemente de situações em que são incluídas no modelo variáveis pouco importantes ou mesmo irrelevantes, designadamente:

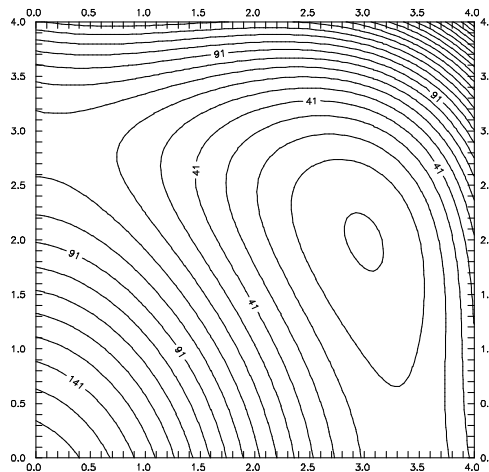
- a) por este ter pretensões insensatas de pormenor e de exaustividade; .

b) por existirem relações matemáticas ou estatísticas ocultas ou ignoradas entre as variáveis do modelo.

Estas circunstâncias devem, portanto, ser sempre ser tomadas em particular consideração na fase da modelagem; caso as adequadas precauções não possam ser tomadas nesta fase, quaisquer dificuldades de convergência do algoritmo de optimização ligadas com geometrias deste tipo devem ser sempre consideradas como sério aviso de uma possível má parametragem do modelo, nomeadamente no que se refere à condensação de parâmetros.

Seja como for, se o problema se apresentar ao nível do cálculo numérico, uma solução interessante consistiria em escalar apropriadamente os diferentes x_i (que, numa função objectivo podem, inclusivamente, ser dimensionalmente heterogéneos). A ideia subjacente é a de que um vale elíptico alongado tende a dar mais complicações que uma depressão aproximadamente circular, em que todos os gradientes apontam para o mesmo ponto.

Uma variante económica do método do gradiente é conhecida por *método da descida mais rápida* e consiste em, a partir de um dado ponto $x^{(i)}$ fazer uma pesquisa unidireccional ao longo da direcção do gradiente calculado até encontrar, com a precisão possível, o mínimo dessa direcção. Nesse mínimo estaremos, em princípio, sobre o ponto em que a linha de pesquisa é tangente à curva de nível local; assim, nesse ponto, o novo gradiente será perpendicular ao anterior; procedendo repetidamente deste modo, atingiremos finalmente o mínimo sem termos tido que calcular o gradiente em cada passo.



Pesquisa ao longo de uma linha de gradiente

Em resumo, as etapas do método da descida mais rápida são:

1. Em um ponto inicial $x^{(0)}$, calcular $-df^{(0)}/dx$ e dar passos

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - h \cdot df^{(i)}/dx.$$

2. Procurar nessa direcção até encontrar três pontos dos quais o médio é o menor.

3. Usar a interpolação quadrática em torno do ponto médio

$$t = \frac{h}{2} \cdot \left[\frac{f_h^{(i)} - f_{-h}^{(i)}}{f_h^{(i)} - 2f_0^{(i)} + f_{-h}^{(i)}} \right]$$

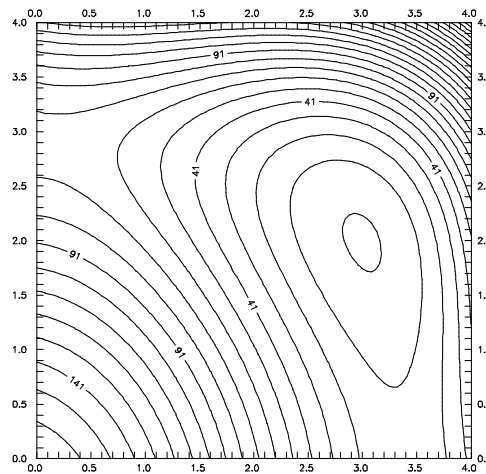
para encontrar o mínimo, onde $f_h^{(i)} = f(x^{(i)} - h \cdot df^{(i)}/dx)$. Assim, o novo ponto é

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - t \cdot df^{(i)}/dx.$$

4. Testar o critério de paragem e, no caso de continuar, utilizar o gradiente perpendicular,

$$df^{(i+1)}/dx_j = -1/(df^{(i)}/dx_i),$$

voltando a 2.



Pesquisa ao longo de uma direcção ortogonal

A variante da descida mais rápida tem particular interesse no caso, muito frequente para nós, de os cálculos da função e das suas derivadas serem muito trabalhosos, como acontece quando têm que ser obtidas por simulação numérica; em tais casos, é especialmente recomendável trabalhar desde o início com valores de passo muito pequenos.

O leitor verificará sem dificuldade que a pesquisa pode ainda ser melhorada se, em vez de se adoptar a pesquisa na perpendicular, se pesquisar na direcção conjugada, como se fazia no método de POWELL. Essa é a subvariante dos *gradientes conjugados*.

6. 2. 1. 3. MÉTODO DA QUÁDRICA

É fácil verificar que o método do gradiente é o equivalente multidimensional do método directo (de Newton) de optimização unidimensional e que o seu ponto fraco reside na dificuldade com que trabalha na vizinhança imediata do mínimo, devido ao pequeno valor do gradiente; esta ideia leva à tentativa de melhorá-lo pelo uso do método equivalente ao da interpolação quadrática, o do ajustamento de uma quádrica. Com efeito, nas vizinhanças imediatas do mínimo, a função é mais bem aproximada por uma função deste tipo que pelo plano tangente, o que permite prever com melhor aproximação a localização do mínimo.

Assim, alguns algoritmos utilizam o método do gradiente (ou a sua variante da descida mais rápida) na primeira fase da pesquisa e, quando o passo se torna demasiado pequeno, utilizam o método da quádrica, como já, no parágrafo anterior, se sugeria fazer para o próprio método da descida mais rápida, embora a uma dimensão apenas.

Este método estabelece-se em termos formais de modo muito simples: seja $f(\mathbf{x})$ a função a minimizar, seja $\nabla f(\mathbf{x})$ o seu gradiente e $H(\mathbf{x})$ a sua matriz hessiana de elementos $\partial^2 f(\mathbf{x}) / \partial x_i \partial x_j$. Então a função

$$g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_n) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \cdot \nabla f(\mathbf{x}_n) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n)^T \cdot \mathbf{H}(\mathbf{x}_n)$$

constituirá uma boa aproximação a $f(\mathbf{x})$ se \mathbf{x}_n for já próximo do mínimo \mathbf{x} .

Note-se de passagem que esta solução do método da quádrica corresponde à solução pelo método de Newton da equação $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Neste ponto será

$$\nabla g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}_n) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{x}_n) = \mathbf{0}$$

de onde

$$\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_n = -\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_n) \cdot \nabla f(\mathbf{x}_n)$$

O método da quádriga não tem especial interesse como método independente, dado só ser aplicável nas vizinhanças imediatas do mínimo; adquire, no entanto, o seu pleno significado quando combinado com outros métodos menos eficientes nesta vizinhança, como o do gradiente.

6. 2. 1. 4. MÉTODO DE LEVENBERG-MARQUARDT

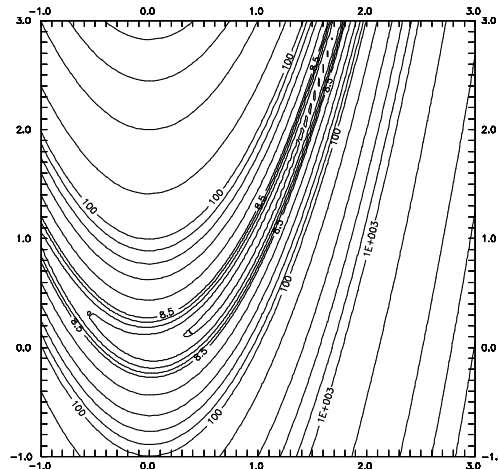
A ideia notável que ocorreu separadamente a Levenberg e a Marquardt foi a de combinar os dois métodos anteriores no mesmo passo, fazendo

$$\mathbf{h} = \mathbf{h}_{quad} + \lambda \cdot \mathbf{h}_{grad}$$

em que \mathbf{h}_{grad} e \mathbf{h}_{quad} são, respectivamente, os vectores de passo dos métodos do gradiente e da quádriga e λ é um parâmetro a determinar pela própria evolução do processo, segundo a seguinte lógica:

- começa-se com um valor elevado de λ (em relação à norma de \mathbf{h}_{quad}), isto é, começa-se virtualmente segundo o gradiente e continua-se decrementando o valor de λ enquanto os novos pontos calculados conduzirem a valores decrescentes da função objectivo; assim, o método aproxima-se progressivamente do da quádriga quando é bem sucedido;
- porém, cada vez que o novo ponto seja mal sucedido (isto é, corresponda a um incremento da função objectivo), o ponto é ignorado, o valor de λ é incrementado e faz-se nova tentativa.

Deste modo, no decorrer de uma pesquisa típica, o valor de λ oscila várias vezes ao sabor das irregularidades da superfície até que, chegado às vizinhanças do mínimo, tende a decrescer indefinidamente; esta circunstância permite determinar o ponto de paragem do algoritmo.



Curiosamente, o método torna-se especialmente vantajoso nas situações difíceis como as de existência de depressões alongadas, porque aí a quádriga detecta muito facilmente o alongamento. Deste modo, o algoritmo, por ingénuo que pareça, é um dos mais rápidos e eficazes que se conhecem.

Concebido inicialmente para resolver problemas de mínimos quadrados onde resulta particularmente económico pela facilidade, característica deste tipo particular de problema, no cálculo das derivadas e da quádriga osculadora, o método pode, como se viu, ser estendido a casos mais gerais, embora à custa de trabalho de cálculo maior que no caso particularmente fácil dos mínimos quadrados.

6.2.1.5. O PROBLEMA DAS CONSTRIÇÕES

Os métodos de pesquisa descritos nos parágrafos anteriores referiam-se a problemas sem restrições, o que significava que o praticável era ilimitado; são, porém, frequentes os casos em que condições físicas ou matemáticas nos forçam a reduzir a busca a valores das variáveis que satisfazem determinadas condições.

EXEMPLO: Minimizar

$$f(x) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 4)^2$$

sujeito a

$$x_2 - x_1 \geq 0$$

$$4x_1 + x_2 + 12 \geq 0$$

$$-x_1 - x_2 + 4 \geq 0$$

$$x_1 - x_2 + 5 \geq 0$$

Encontrado que seja um método de geração de alternativas adequado ao problema em questão, é agora necessário modificá-lo para que tome em consideração as restrições e restrições, garanta uma melhoria sistemática do objectivo até ao eventual atingimento de um óptimo.

6.2.1.5.1. CONSTRIÇÕES LINEARES

Certas formas destas restrições são mais fáceis de trabalhar que outras.

Por exemplo, no caso, muito frequente, das *restrições de não-negatividade*, $x_i \geq 0$, o modo mais simples de resolver o problema é por meio de uma *mudança de variáveis*. Com efeito, se fizermos, por exemplo, $x_i = y_i^2$, poderemos minimizar $f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(y_1^2, y_2^2, \dots, y_n^2)$ em ordem aos y_i , sem restrições, e, fazendo de novo $x_i = y_i^2$, teremos as restrições de não negatividade automaticamente satisfeitas no óptimo.

O mesmo tipo de técnica se pode aplicar ao caso, igualmente muito frequente, das *restrições a um intervalo*: $u_i \leq x_i \leq l_i$; neste caso faremos, por exemplo,

$$x_i = u_i + (l_i - u_i) \cdot \sin^2(y_i)$$

e resolveremos o problemas sem restrições em ordem aos y_i .

EXEMPLO: Seja o programa

$$\text{Min}[f(x) = (x_1 + 1)^2 + (x_2 - 4)^2 \quad x_1, x_2 \geq 0]$$

que, mediante a transformação $x_i = (y_i^2 - 1)^2$ dá origem a

$$\text{Min}[F(y) = (y_1^4 - 2 \cdot y_1^2 + 2)^2 + (y_2^4 - 2 \cdot y_2^2 - 3)^2]$$

e é fácil verificar que $F(y)$ tem seis mínimos, $y = (\pm 1, \pm \sqrt{3})$, $y = (\pm 1, 0)$, dos quais os primeiros 4 correspondem a mínimos de $f(x)$ e os dois últimos são espúrios.

EXEMPLO: Seja o programa

$$\text{Min}[f(x) = 3 \cdot x_1 - 2x_1 \cdot x_2 + 3 \cdot x_2^2 \quad x_1, x_2 \geq 0]$$

que, mediante a transformação $y_i = x_i^2$ dá

$$\text{Min}[F(y) = 3 \cdot y_1^2 - 2y_1^2 \cdot y_2^2 + 3 \cdot y_2^4]$$

É fácil verificar que, enquanto

$$\text{lap. } f = \begin{vmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 6 \end{vmatrix}$$

é definida positiva e, portanto, $f(x)$ é convexa

$$\text{lap. } F = 4 \cdot \begin{vmatrix} 9y_1^2 - y_2^2 & -2y_1 \cdot y_2 \\ -2y_1 \cdot y_2 & 9y_1^2 - y_2^2 \end{vmatrix}$$

não é definida positiva, de modo que $F(x)$ não é convexa.

No entanto, é preciso um extremo cuidado com este tipos de técnicas de mudança de variáveis porque, com elas corremos o risco de encontrar *falsos mínimos*. Com efeito, a optimização de $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ parará quando for $\partial f / \partial y_i$, mas

$$\frac{\partial f}{\partial y_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial y_i}$$

de modo que qualquer transformação em que os $\partial x_i / \partial y_i$ se anulem em um ponto do praticável, introduz um mínimo espúrio que, por azar, o algoritmo de pesquisa pode apanhar.

Além disso, o uso imprudente de uma mudança de variáveis pode dar origem à transformação de um problema convexo em não-convexo, com toda a complexificação resultante.

Estes tipos particulares de restrições pertencem à classe mais vasta das chamadas *restrições lineares*, cuja forma é

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} \cdot x_j - b_j \geq 0$$

e que são ainda razoavelmente tratáveis, porque a fronteira do praticável é formada por rectas (no caso bidimensional), por planos (no caso tridimensional), ou por hiperplanos (no caso multidimensional geral); é, portanto, fácil caminhar sobre a fronteira na pesquisa do óptimo.

Foram desenvolvidos diversos métodos para aproveitar esta facilidade.

O mais conhecido é o *método do gradiente projectado* que consiste em projectar o gradiente sobre a restrição activa (isto é, sobre cuja fronteira o método de pesquisa embateu) e em caminhar sobre esta como se fosse uma simples ligação (isto é, eliminando uma das variáveis pela respectiva condição), até se encontrar o mínimo ou se tornar activa uma outra restrição.

Deste método existe também uma variante do tipo descida mais rápida.

6.2.2. CONSTRIÇÕES E LIGAÇÕES NÃO-LINEARES

O aparecimento de uma ligação expressa por uma função não-linear das variáveis torna, naturalmente, o problema mais complicado.

A figura mostra uma interpretação geométrica na presença de três restrições, de acordo com as quais os pontos A e B satisfazem às seguintes condições:

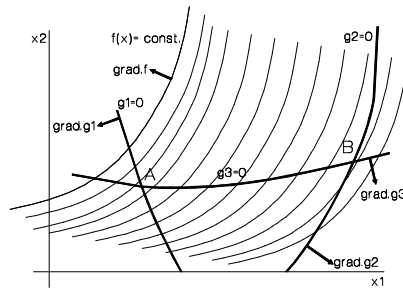
$$A: -grad. f(x^*) = \beta_1^* \cdot grad. g_1(x^*) + \beta_3^* \cdot grad. g_3(x^*)$$

e neste ponto o gradiente não existe no subespaço $\beta_1^* < 0$ gerado pelo gradiente das funções de restrição; x não é, portanto, um mínimo porque o valor da função pode ainda ser reduzido no domínio praticável;

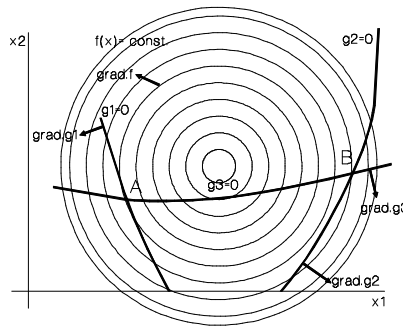
$$B: -grad. f(x^*) = \beta_2^* \cdot grad. g_2(x^*) + \beta_3^* \cdot grad. g_3(x^*)$$

e neste ponto existe um óptimo local porque não existe direcção dentro do domínio praticável ao longo da qual o valor da função possa ser reduzido.

Porém, este exemplo pode ser enganador, no sentido de que pode sugerir que a solução do problema se encontra sobre a fronteira do praticável, o que só acontece por a função objectivo ser, neste caso, convexa.



No caso mais geral, o óptimo encontrar-se-á no interior do praticável, como mostra a segunda figura.



Embora seja possível fazer uma generalização do método do gradiente projectado a esta nova situação, a solução é complexa de mais para ser abordada ao nível deste curso. Em alternativa, consideraremos o *método dos multiplicadores de Lagrange* que se desenvolve do seguinte modo (consideraremos, para simplificar a compreensão, apenas o caso bidimensional, mas a extensão do formalismo ao caso multidimensional é imediata): suponhamos que à ligação $g(x, y) = 0$ se pode dar a forma $y = f(x)$; o problema equivale então a procurar pontos estacionários da função $f(x, f(x))$, isto é,

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dx}$$

mas $g(x, y) = 0$ implica

$$\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dx} = \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x} = 0$$

ou, eliminando df/dx entre as duas equações,

$$\frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial g}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial g}{\partial x}$$

Definamos agora, arbitrariamente, um número λ pela relação

$$\frac{\partial f}{\partial y} + \lambda \cdot \frac{\partial g}{\partial y} = 0 \quad (\text{Eq. 1})$$

e usemos esta relação para eliminar dg/dy na equação anterior:

$$\frac{df}{dx} \cdot \frac{df}{dy} + \lambda \cdot \frac{df}{dy} \cdot \frac{dg}{dy} = 0$$

ou

$$\frac{df}{dx} + \lambda \cdot \frac{dg}{dx} = 0 \quad (\text{supondo } df/dy \neq 0) \quad (\text{Eq. 2})$$

As equações (1) e (2) juntamente com $g(x, y) = 0$ determinam as quantidades λ , x e y .

Estas equações podem, formalmente, ser obtidas do seguinte modo: definamos arbitrariamente a *lagrangeana do problema*:

$$L(x, y) = f(x, y) + \lambda \cdot g(x, y)$$

e verificaremos que as derivadas

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \lambda \cdot \frac{\partial g}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial y} + \lambda \cdot \frac{\partial g}{\partial y} = 0$$

conduzem precisamente às equações (1) e (2) e, conjuntamente com $g(x, y) = 0$ determinam a solução.

A generalização ao caso multidimensional é agora imediata.

O método dos multiplicadores de Lagrange pode, com algum cuidado ser aplicado também ao caso das restrições, cada vez que uma delas se torne activa, isto é, que o método de pesquisa esbarre com ela (nesse caso, como vimos, ela comporta-se como ligação. Porém, o método dos multiplicadores de Lagrange conduz frequentemente a sistemas de equações não-lineares analiticamente irresolúveis; além disso, é de todo inaplicável quando a função objectivo e/ou as restrições/ligações não tiverem formulação cerrada.

O caso das ligações não-lineares irresolúveis pode ser resolvido simplesmente, embora com trabalho, por um *método de Courant* que consiste em minimizar a função

$$F(x) = f(x) + r \cdot \sum_{i=1}^m [g_i(x)]^2$$

sob a forma de problema sem ligações, para uma sucessão monotonamente crescente de valores de r . À medida que r se torna infinitamente grande, a soma dos quadrados das ligações é forçada a anular-se. Deste modo, a sucessão de mínimos de F sem ligações tende para o mínimo de f com ligações.

O caso das restrições não-lineares irresolúveis na saturação é mais complexo e pode ser resolvido na generalidade mediante uma de duas técnicas.

O *método do seguimento de fronteiras* propõe que logo que se detecte que o algoritmo de pesquisa tenta violar uma restrição, se coloque sobre a sua fronteira e não a abandone, a não ser quando encontra uma outra; porém, o seguimento da fronteira, correspondente à resolução numérica de uma equação não-linear, pode ser muito trabalhoso e sujeito a despistes.

Neste último caso, prefere-se o *método das penalizações*, cujo princípio já vimos em funcionamento no método de Courant: somar à função objectivo os quadrados das ligações corresponde a "penalizar" a minimização da função resultante quando a ligação é violada. Assim, se for

$$g_i^*(\mathbf{x}) = \begin{cases} g_i(\mathbf{x}) & \text{se } g_i(\mathbf{x}) < 0 \\ 0 & \text{se } g_i(\mathbf{x}) \geq 0 \end{cases}$$

e fizermos

$$F(x) = f(x) + r \cdot \sum_{i=1}^m g_i^*(x),$$

cada vez que o algoritmo de pesquisa tenta violar a restrição, o valor da função objectivo sobe e o algoritmo volta a desviar-se.

A técnica geral mais correntemente utilizada consiste em resolver uma sucessão de problemas de optimização não-constrangida construídos de tal modo que converjam para a solução do problema constrangido, independentemente do carácter convexo ou não-convexo do praticável.

Basicamente há duas técnicas possíveis:

- a primeira, chamada *método das funções de penalização* ou *método das penalizações externas* ou, ainda *método da convergência externa*, consiste em adicionar à função objectivo um termo de penalização pela violação das restrições. O método gera uma sucessão de pontos não-praticáveis cujo limite é a solução do problema original (com restrições).

- a segunda, chamada *método das barreiras* ou *método das penalizações internas* ou, ainda, *método da convergência interior*, consiste em adicionar à função objectivo um termo que impede os pontos gerados de abandonar o praticável. Assim, o método gera uma sucessão de pontos praticáveis cujo limite é a solução do problema original.

A função objectivo aumentada no método das penalizações externas é da forma

$$F(x, r_k) = f(x) + r_k \cdot \sum_{j=1}^m G_j[g_j(x)]$$

e, que os G_j são funções das restrições g_j e os r_k são constantes positivas chamadas *parâmetros de penalização*; o termo que contém o somatório chama-se a *penalização*. As penalizações são frequentemente de forma quadrática:

$$G_j = \max [g_j(x), 0]^2.$$

A minimização de F para uma série de valores crescentes de r_k produz uma sucessão de soluções que se aproximam progressivamente da satisfação das restrições.

Habitualmente, o método é iniciado fora do praticável, com um valor da função objectivo bem abaixo do mínimo constrangido e o algoritmo converge para uma solução praticável com um valor mais alto da função objectivo; com efeito, a penalização diminui à medida que o ponto se move para a fronteira.

Em muitas situações práticas, verifica-se que certas restrições são mais fáceis de satisfazer que outras; nestes casos, a experiência mostra que se obtém uma convergência mais rápida se se considerarem valores diferentes dos parâmetros de penalização para cada uma das restrições:

$$F(x, r_k) = f(x) + r_{kj} \cdot \sum_{j=1}^m G_j[g_j(x)]$$

A cada nível de penalização (k) verifica-se a satisfação de todas as restrições e só se aumentam os r_{kj} daquelas que forem violadas.

É fácil verificar que o método é aplicável tanto às restrições propriamente ditas como às restrições.

No *método das barreiras*, originalmente proposto por Carroll em 1961, o ponto de partida é escolhido no praticável, com um valor da função objectivo mais alto que o mínimo constrangido. A função objectivo aumentada é da forma

$$F(x, r_k) = f(x) + r_k \cdot \sum_{j=1}^m G_j[g_j(x)]$$

com

$$G_j = -1/g_j(x)$$

ou

$$G_j = -\ln[-g_j(\mathbf{x})].$$

L é minimizado para uma série de mínimos que se aproxima monotonamente do mínimo constrangido. A penalização tende para infinito quando o ponto se aproxima da fronteira.

Nesta forma, o método só pode ser aplicado às restrições propriamente ditas; porém, uma modificação proposta por Fiacco & McCormick (*Non-linear programming - Sequential unconstrained minimization technique*, Wiley, New York, 1968) na forma

$$L(x, r_k) = f(x) + r_k \sum_{i=1}^m -\ln[-g_i(x)] + (1/r_k) \cdot \sum_{i=1}^s h_i^2(x)$$

que se minimiza para uma sucessão de r_k decrescentes mas positivos.

Um tipo particular de programa não-linear em geral não-convexo particularmente bem estudado e para o qual existem algoritmos bastante eficientes que não exigem estas técnicas sequenciais para satisfazer condições é o *programa quadrático*, definido por uma função objectivo quadrática e restrições lineares (cf. Reklaitis, Ravindran & Ragsdell, *Engineering Optimization*, Wiley, 1983):

$$\text{Min} \left[\sum_{j=1}^n c_j \cdot x_j + \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n q_{ik} \cdot x_{ik} \left[\sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_j \right] = b_i, \quad x_j \geq 0 \right]$$

para o qual Wolfe (1961) desenvolveu um algoritmo baseado nas condições de Kuhn-Tucker que resolve pelo método do simplex o seguinte sistema de equações:

$$A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$2. \mathbf{D} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{A}^T \cdot \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta} = -\mathbf{c}^T$$

$$x_i, \beta_i = 0$$

em que os β_i são variáveis artificiais não-negativas. O problema é, naturalmente, de dimensão muito mais elevada que o problema original, mas pode ser resolvido com facilidade dada a incorporação automática das restrições.

Os conhecidos problemas de regressão linear multivariável que, quando encarados como problemas algébricos apresentam sérios problemas de instabilidade numérica, podem, com vantagem, ser resolvidos como programas quadráticos, considerando os resíduos como as variáveis.

Um outro tipo particular de programa não-linear bem estudado e para o qual existem soluções eficientes é o chamado *programa geométrico* (ibid.), cujo objectivo é

$$f(x) = \sum T_i = 1 \quad c_i \cdot p_i(x)$$

com

$$p_i(x) = \prod N_n = 1 \quad x_n^{a_{ni}}$$

em que os a_{ni} são números reais, positivos, negativos ou nulos e os c_i são reais positivos; uma função do tipo de $f(x)$ diz-se um *posinómio* e difere de um polinómio por os seus expoentes serem reais quaisquer mas os coeficientes serem positivos.

6. 3. PROGRAMAÇÃO NÃO-CONVEXA

No caso da programação não convexa, a situação é, matematicamente, muito menos clara: as condições necessárias de optimidade não são suficientes, não há problema dual no sentido da programação convexa, nem existe método numérico universal.

Com efeito, um mínimo global é um ponto x^* tal que

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ qqs } x \in X$$

enquanto um mínimo local é um ponto x^* tal que

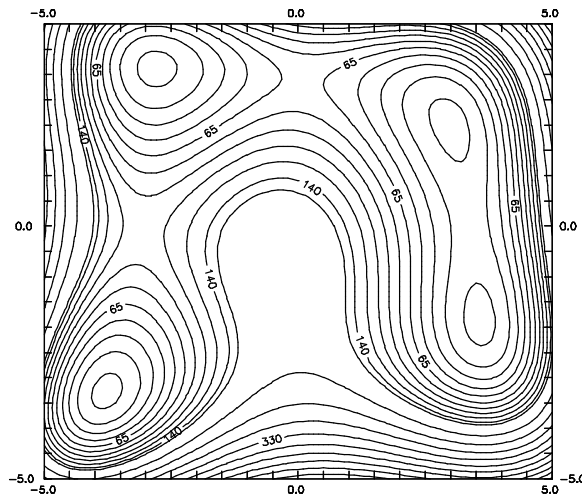
$$f(x^*) \leq f(x) \text{ qqs } x \in [X \cap U(x^*)]$$

em que $U(x^*)$ é a região convexa de $f(x)$ que se chama a *bacia de atracção* da solução x^* , que funciona como um atractor do algoritmo de pesquisa.

O problema central da programação não-convexa é obviamente o de que, não havendo convexidade garantida para a função objectivo dentro do praticável,

- tal como no caso anterior da programação convexa, os mínimos não se encontram necessariamente sobre a fronteira do praticável, mas, em geral, no interior deste.

- ao contrário do caso anterior da programação convexa, existe em princípio uma *multiplicidade de mínimos locais*, de modo que qualquer método numérico, sendo necessariamente um método míope, isto é, puramente local, corre o risco de se encaminhar para um mínimo local e dele não poder sair, situação que é ainda agravada pelo facto evidente de não haver critério local capaz de distinguir um mínimo local de um global;



Uma superfície com vários mínimos, a função

Por razões de simplicidade, o problema da programação matemática costuma, portanto, dividir-se em duas fases:

a) o *problema da optimização livre*, isto é, *sem restrições*: as condições necessárias de óptimo são as de anulação local do gradiente da função objectivo:

$$f'(x^*) = \left\| \frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right\| = 0$$

e a condição suficiente é a de ser definida positiva a matriz hesseana:

$$H^* = H(x^*) = \left\| \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right\|$$

b) o *problema da optimização restringida*: as condições necessárias (condições de Kuhn-Tucker) são expressas em termos da lagrangeana do problema:

$$L(x, a, \beta) = f(x) + \sum_i a_i \cdot h_i(x) + \sum_j \beta_j \cdot g_j(x) \quad (\text{Eq. 3})$$

em que a_i e β_j são os multiplicadores de Lagrange das restrições e das restrições não-holónomas, respectivamente, e tomam a forma

$$\text{grad. } L(x^*) = \text{grad. } f(x^*) + \sum_i a_i^* \cdot \text{grad. } h_i(x^*) + \sum_j \beta_j^* \cdot \text{grad. } g_j(x^*) = 0$$

sujeita a

$$h_i(x^*) = 0$$

$$g_j(x^*) \leq 0$$

$$\beta_j^* \cdot g_j(x^*) = 0$$

$$\beta_j^* \geq 0$$

e estas condições são suficientes no caso de o problema ser convexo.

O problema central específico da optimização não convexa pode, portanto, definido como o de encontrar um método de geração de alternativas que permita o atingimento do óptimo absoluto, sem encalhe em óptimos locais.

Como se sabe, o único método actualmente disponível consiste em uma combinação de uma técnica de Monte Carlo do tipo aceitação-rejeição (para geração de sucessivos pontos de partida, ou "guesses" iniciais, dentro do praticável) combinado com uma técnica do tipo anterior (para melhoramento do "guess" inicial).

6. 4. PREPARAÇÃO DA OPTIMIZAÇÃO

Uma vez formulado um modelo de um sistema, o problema da preparação para a fase formal de optimização deve ser encarado frontal e especificamente.

Esta preparação implica três tipos fundamentais de actividades, a saber:

- i) modificações destinadas a evitar dificuldades numéricas;
- ii) reorganizações destinadas a aumentar a eficiência da solução;
- iii) análise estrutural, destinada a evidenciar as características específicas do problema gerado e, em função delas, a identificar o tipo de algoritmo de optimização a utilizar.

As dificuldades numéricas que mais frequentemente podem dar origem a paragens intempestivas dos algoritmos e/ou a abortamentos da sua execução ligam-se com

- problemas de escala das variáveis e das funções intervenientes,
- com problemas de incompatibilidade entre rotinas de cálculo de funções e das respectivas derivadas,
- com a não-derivabilidade de certas funções e
- com a ausência de salvaguardas para os valores dos argumentos de funções.

Examiná-los-emos sucessivamente pela ordem indicada.

• Os problemas de escala podem referir-se às variáveis ou às funções intervenientes no problema. Idealmente, todas as variáveis do modelo deveriam ser definidas de modo a que os seus valores prováveis caíam no intervalo $[0, 10]$ de modo a garantir um máximo de precisão tanto na sua representação como na dos respectivos vectores de pesquisa; é, naturalmente, muito simples proceder a uma escalagem conveniente, desde que sejam conhecidos os intervalos prováveis de variação de cada uma delas, mas este conhecimento é, em geral, muito difícil, excepto por via recursiva.

Do mesmo modo, devem examinar-se tanto os valores das restrições nas vizinhanças da solução pretendida como a sua sensibilidade a variações dos valores das variáveis; complementarmente, deveriam ainda examinar-se os valores dos gradientes das restrições nas vizinhanças da solução.

Idealmente, deveria procurar-se que todas as restrições exibissem idêntica sensibilidade às variações de valor das suas variáveis (já devidamente escaladas) e que os respectivos gradientes tomassem valores todos da mesma ordem; com efeito, deste modo ter-se-ia garantido que as violações das diferentes restrições tivessem todas o mesmo peso e que as operações sobre os respectivos jacobianos não dessem origem a problemas de precisão. O remédio é, obviamente, multiplicar as restrições por escalares adequados de modo a que os seus valores característicos e/ou os respectivos gradientes caiam no intervalo $[0, 1, 10]$.

Root & Ragsdell (1980) propuseram um algoritmo recursivo para escolha dos factores de escala cujo objectivo é determinar um vector de escalas de linhas, r , e um vector de escala de colunas, c , tais que os elementos do jacobiano transformado, $J'_{ij} = r_i \cdot L_{ij} \cdot c_j$ cujas linhas são os vectores gradiente das restrições se encontrem dentro das razões e_1 e e_2 da grandeza do elemento "médio" de J . Este é calculado identificando o elemento de J de maior valor absoluto pela sua linha i^* e coluna j^* e calculando a média dos valores absolutos de todos os elementos não-nulos excluindo os da linha i^* e da coluna j^* ; assim, se for NN o número de elementos não nulos da matriz J , com exclusão dos da linha i^* e da coluna j^* ,

$$z = \sum_{i=1}^{i^*} \sum_{j=1}^{j^*} |J_{ij}| / NN$$

Em termos desta notação, o objectivo do algoritmo é o de encontrar r e c tais que

$$e_2 \cdot z \leq |J'_{ij}| \leq e_1 \cdot z$$

para valores razoáveis de e_1 e e_2 , por exemplo, 10 e $0, 1$, respectivamente.

O procedimento proposto não garante o atingimento deste objectivo para todos os i e j , mas tende, pelo menos, para ele.

O procedimento é o seguinte: em um dado ponto x_0 calculem-se J e z e executem-se os seguintes passos:

i) para todas as colunas j ainda não escaladas, calcule-se

$$c_j = n_j \cdot z / \sum_j |J_{ij}|$$

em que n_j é o número de elementos não nulos da coluna j de J ; se $e_2 \leq c_j \leq e_1$, repor $c_j=1$; caso contrário, reter c_j como factor de escala e actualizar a coluna j de J por meio de

$$J'_{ij} = r_i \cdot L_{ij} \cdot c_j$$

e recalcular z ;

ii) se pelo menos uma coluna j foi escalada no passo anterior, continue-se, caso contrário, pare-se;

iii) para todas as linhas i ainda não escaladas, calcule-se

$$r_i = m_i \cdot z / \sum_i |J_{ij}|$$

em que m_i é o número de elementos não nulos da linha i de J ; se $e_2 \leq r_i \leq e_1$, repor $r_i=1$; caso contrário, reter r_i como factor de escala e actualizar a linha i de J por meio de

$$J'_{ij} = r_i \cdot L_{ij} \cdot c_j$$

e recalcular z ;

iv) se pelo menos uma linha i de J foi escalada no passo anterior, continuar em 1, caso contrário, parar.

• Incompatibilidades entre o modelo da função-objectivo e os valores calculados das suas derivadas podem ter resultados catastróficos por desencaminharem o algoritmo de pesquisa. Por esta razão, muitos autores defendem o cálculo numérico das derivadas como procedimento sistemático; no entanto, de um modo geral, o uso de gradientes analíticos, quando possível e cuidadosamente implementado é computacionalmente mais eficiente, vantagem que não deve ser desprezada.

O método mais simples de evitar este tipo de percalço consiste em calcular o gradiente por diferenças e compará-lo com o valor obtido através do algoritmo de derivação utilizado, utilizando o primeiro se a diferença for excessivamente grande.

As situações mais frequentes de não-derivabilidade dos modelos ocorrem sob uma de duas formas principais:

- existência de cláusulas condicionais que dão acesso a diferentes rotinas de cálculo da função-objectivo de acordo com os valores assumidos por certas variáveis ou funções; estas situações podem gerar descontinuidades que causam dificuldades no cálculo numérico de gradientes, por forçarem o cálculo por uma via no ponto x_0 e por outra no ponto x_0+d ; a solução consiste em testar sistematicamente a ocorrência destes fenómenos ou, na alternativa, utilizar algoritmos de optimização que não utilizem o cálculo de gradientes; tipicamente, esta situação ocorre nas formulações imprudentes de penalizações como forma fácil de forçar restrições sobre o modelo;

- existência de operadores do tipo *min/max*; este problema pode ser ultrapassado substituindo cláusulas do tipo

$$g(x) = \max_j \{g_j(x)\}$$

por

$$g(x) = y \geq g_j(x).$$

- Uma outra causa, muitas vezes ignorada, mas frequentemente causadora de abortamento de algoritmos de optimização é a falta de salvaguardas contra as ultrapassagens de limites de validade dos argumentos de certas funções, algumas tão correntes como as potências ou os logaritmos.

Para evitar este tipo de problemas, torna-se necessário introduzir restrições emergentes da constituição concreta do modelo e não do problema original, e em forçar o seu estrito respeito, o que nem sempre será fácil de levar à prática.

- Como se fez notar a propósito das técnicas de programação matemática, a dificuldade dos algoritmos de optimização não-linear cresce exponencialmente não só com o número de variáveis mas também com o número de restrições e restrições. Deste ponto de vista, em geral, as restrições lineares causam menos problemas que as não-lineares e a restrições menos dificuldades que as restrições.

Consequentemente, há vantagem em introduzir uma fase suplementar no processo de preparação da optimização destinada a reorganizar o modelo de modo a minimizar o número de restrições, objectivo que pode ser conseguido mediante o uso de mudanças de variáveis e/ou transformações de funções, eliminação de restrições eventualmente redundantes e/ou uso de sequenciações adequadas de equações.

Chamaremos, para os presentes efeitos, *transformação de uma função* a um simples rearranjo algébrico da sua expressão ou a uma concatenação de uma função com outra.

Para melhorar a eficiência de um algoritmo de optimização, escolhem-se em geral transformações capazes de converter restrições não-lineares em lineares.

Em particular, se da análise da estrutura da função-objectivo e de uma restrição $h_k(x)=0$, pudermos concluir que uma das restrições $h_k(x) \leq 0$ ou $h_k(x) \geq 0$ estará activa no óptimo, então poderemos utilizar essa restrição no lugar da restrição, expandindo assim o praticável e facilitando simultaneamente a convergência para o óptimo e o estabelecimento de um ponto de partida dentro do praticável.

O uso de mudanças das variáveis independentes através de transformações quadráticas ou logarítmicas permite eliminar restrições de positividade para essas variáveis, do mesmo modo que uma transformação do tipo arcotangente permite eliminar restrições a intervalos. Por isso, estas e outras transformações são muito frequentemente utilizadas pelos práticos.

Há, porém, que proceder com cautela porque certas dessas transformações podem produzir um ou mais dos seguintes resultados indesejáveis:

- ocorrência de extremos locais espúrios;
- degradação da convexidade;
- degradação ou mesmo inibição da convergência.

Seja, como primeiro exemplo, o programa

$$\text{Min } [f(x) = (x_1 + 1)^2 + (x_2 - 4)^2 \geq x_1, x_2 \geq 0]$$

que, mediante a transformação

$$x_i = (y_i^2 - 1)^2$$

dá origem ao programa

$$\text{Min } [F(y) = (y_1^4 - 2 \cdot y_1^2 + 2)^2 + (y_2^4 - 2 \cdot y_2^2 - 3)^2]$$

É fácil verificar que $F(y)$ tem seis mínimos

$$y = (\pm 1, \pm 3^{1/2}), y = (\pm 1, 0)$$

dos quais os primeiros quatro correspondem a mínimos de $f(x)$ e os dois últimos são espúrios.

Como segundo exemplo, consideremos o programa

$$\text{Min } [f(x) = 3 \cdot x_1^2 - 2 \cdot x_1 \cdot x_2 + 3 \cdot x_2^2 \geq x_1, x_2 \geq 0]$$

que, mediante a transformação

$$y_i = x_i^2$$

dá origem ao programa

$$\text{Min } [F(y) = 3 \cdot y_1^4 - 2 \cdot y_1^2 \cdot y_2^2 + 3 \cdot y_2^4]$$

É fácil verificar que, enquanto

$$\text{lap. } f = \begin{vmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 6 \end{vmatrix}$$

é definida positiva e, portanto, $f(x)$ é convexa, sucede que

$$\text{lap. } f = \begin{vmatrix} 9y_1^2 - y_2^2 & -2y_1 \cdot y_2 \\ -2y_1 \cdot y_2 & 9y_1^2 - y_2^2 \end{vmatrix}$$

não é definida positiva, de modo que F não é convexa.

Do ponto de vista prático, o problema mais grave resulta da necessidade de evitar o aparecimento de extremos espúrios. O uso de transformações monótonas e biunívocas permitirá em geral atingir esse objectivo.

- Um outro meio de aumentar a eficiência dos algoritmos de optimização consiste em eliminar restrições que, apesar de fisicamente significativas, sejam redundantes, porque um tal procedimento diminui o número de restrições e acelera o cálculo.

Embora limites redundantes sejam de identificação imediata, restrições redundantes são, em geral, muito difíceis de identificar. Actualmente, dispomos apenas de critérios para identificar restrições redundantes no caso linear (cf. , v. g. , Luenberger, *Introduction to linear and non-linear programming*, Addison-Wesley, 1973); no entanto, a sua complexidade é tal que se não justifica o seu uso senão no caso de optimizações lineares repetidas ou de optimizações não-lineares.

- Finalmente, a dimensionalidade e o número das restrições de um problema pode ser substancialmente reduzida pela resolução explícita ou implícita de algumas delas e a consequente eliminação das variáveis correspondentes. Embora em casos simples possa suceder que todas as restrições possam ser eliminadas sem recurso a métodos iterativos, é mais frequente que o processo de eliminação termine com um certo número de restrições que não podem ser resolvidas directamente em ordem a uma ou mais das variáveis independentes. Neste caso, duas linhas de ataque ao problema são possíveis: reter estas restrições enquanto tais e as variáveis

correspondentes como variáveis independentes ou, na alternativa, resolver essas restrições iterativamente cada vez que seja necessário calcular a função-objectivo. Neste último caso, porém, é necessário ter o cuidado de impor ao cálculo iterativo uma tolerância suficientemente apertada para não afectar a lógica do método de pesquisa, condição que se pode tornar tão exigente que se revele mais prático recorrer à primeira estratégia.

6. 5. ANÁLISE DO PROBLEMA DA OPTIMIZAÇÃO

O estágio final da preparação da optimização consiste na análise da formulação final do problema, com vista a identificar, se possível, certas das suas características estruturais que têm implicações na facilidade da sua resolução.

Essas características são, nomeadamente, a convexidade, a finitude do praticável, a unicidade da solução e a existência de um ponto de partida praticável.

- A demonstração da convexidade é, em geral, irrealizável, mas é muito fácil identificar certos elementos da formulação do modelo que tornam o problema não convexo. Em primeiro lugar, obviamente, deve verificar-se se o problema contém restrições não lineares, caso em que a não-convexidade é garantida.

Em seguida, caso as restrições sejam todas lineares, poderemos usar dois tipos de testes para as restrições não-lineares: um baseia-se no sinal do hesseano e o outro na decomposição da função em uma soma de funções convexas. Em ambos os casos, é aconselhável, com base na hipótese pessimista mas realista de que a maioria dos problemas de projecto é não-convexa e identificável mesmo pelas restrições mais simples, começar sempre o teste pelas restrições não-lineares mais simples.

Finalmente, só quando se poder demonstrar que o conjunto das restrições e restrições é convexo é que valerá a pena considerar a convexidade da função-objectivo.

Se, no fim de toda esta análise, tivermos obtido a garantia de que o problema é convexo, poderemos então ter a certeza de que qualquer ponto que satisfaça as condições de Kuhn-Tucker é um extremo global. Caso contrário, devemos preparar-nos para enfrentar o sério problema da multiplicidade de extremos locais.

- Tanto no caso convexo como no não convexo, a questão da finitude do praticável constitui um dado importante para o problema da optimização.

Trata-se, porém, de um questão que rapidamente se torna muito difícil com o aumento da dimensão (número de variáveis) do problema.

Por um lado, é um facto que todo o sistema real tem limites mais ou menos bem definidos, resultantes de considerações físicas e ou económicas, para o intervalo de variação das suas variáveis de projecto, desde que, obviamente, estas sejam adequadamente definidas. Por outro lado, não é menos facto que um modelo não é um sistema real, mas apenas uma sua aproximação, porque nele o projectista não incorporou, deliberada ou inadvertidamente, muitas das características e limitações do real. Deste modo, o facto de o modelo pretender representar o sistema real não constitui garantia de que nele não ocorram certas patologias matemáticas que no real seriam impensáveis.

Os casos de infinitude do praticável podem frequentemente ser postos em evidência por simples exame casuístico das suas restrições, e podem sempre ser corrigidos pela imposição de razoáveis restrições suplementares ad hoc. No entanto, dada a necessidade acima estudada de manter o número de restrições em um mínimo estrito, é conveniente que nos asseguremos da absoluta necessidade de tais restrições antes de as incorporarmos no modelo.

Embora não existam actualmente testes sistemáticos e de resultados garantidos para a finitude de um praticável, duas técnicas elementares cobrem a maior parte das situações.

A primeira é o exame das variáveis uma a uma, a fim de estabelecer se os seus valores possuem limites inferiores e superiores para valores fixos das restantes variáveis.

A segunda, chamada teste das derivadas parciais, utiliza-se quando os gradientes das restrições são calculáveis analiticamente, e para aquelas variáveis que escaparam ao teste anterior.

Baseia-se este teste na observação de que as condições de Kuhn-Tucker escritas em termos das restrições

$$f = \sum_j u_j \cdot g_j u_j \geq 0$$

implicam que, para que seja possível exprimir a derivada parcial $\partial f / \partial x_i$ como combinação convexa dos gradientes das restrições, $\partial g_j / \partial x_i$, é necessário que exista pelo menos uma restrição, por exemplo, g_l , com derivada parcial negativa, $\partial g_l / \partial x_i < 0$, e pelo menos uma outra, por exemplo, g_k , com derivada parcial positiva, $\partial g_k / \partial x_i > 0$ (supondo, naturalmente, que o óptimo não é totalmente livre ($\partial f / \partial x_i \neq 0$) nem existe sobre a superfície de uma restrição, mas na intersecção de duas ou mais, o que constitui uma hipótese não garantida mas plausível). Assim, verificar-se-á se, para cada variável x_i , existe uma restrição com derivada parcial positiva e uma outra com derivada parcial negativa; se não for o caso para alguma das variáveis, então é prudente a imposição de um limite superior, se é a derivada negativa que não existe, inferior no caso contrário.

- Uma terceira consideração refere-se à possibilidade de existência de soluções não-únicas, isto é, de uma multiplicidade de extremos locais.

Em geral, um problema convexo pode ter um único valor óptimo da função-objectivo, mas esse valor pode ser realizado em uma multiplicidade de pontos, que representam outros tantos projectos optimizados.

Por outro lado, para que um problema possua mais que um extremo local, terá que ser não-convexo, mas a não-convexidade não é suficiente para garantir a multiplicidade dos extremos locais.

Nestas condições, o teste de convexidade discutido atrás não fornece toda a informação relevante para este problema, tornando-se necessária uma análise mais repuxada.

É nossa profunda convicção, e de muitos outros autores (cf. Reklaitis, Ravindran & Ragsdell, *op. cit.*), baseada em uma longa experiência com problemas deste tipo que a não-unicidade da solução é, na maior parte dos casos, um puro artifício resultante do processo de modelagem em si, e não de uma característica do real. A ser efectivamente assim, a situação é particularmente grave: a maior parte dos extremos locais do modelo não corresponderá sequer a extremos locais do sistema real.

Uma situação muito comum deste tipo resulta da ocorrência no modelo de combinações fixas de duas ou mais variáveis; por exemplo, se sempre que x e y ocorrem em um modelo o fazem sob a forma do produto $x \cdot y$, este poderia ser substituído por uma variável única $z = x \cdot y$ e o problema resultaria de dimensionalidade reduzida.

Um outro tipo de não-unicidade resulta frequentemente de, na formulação do modelo, terem sido omitidas certas restrições ou restrições que envolvem x ou y separadamente; quando for este o caso, uma vez reconhecida a situação, o remédio é fácil: basta impor a restrição esquecida.

Como se deixou dito atrás, embora a não-unicidade seja sempre uma possibilidade nos problemas não-convexos, a não-convexidade, por si só, não garante a não-unicidade; na realidade, é em geral muito difícil provar a efectiva (e não apenas potencial) existência de uma multiplicidade de extremos locais, excepto pela sua identificação expressa.

Ora, apesar da grave e constante ameaça de não-unicidade em qualquer problema de projecto, existe uma tendência, por parte da maior parte dos projectistas, para ignorar completamente esta questão e contentarem-se irreflectidamente com qualquer extremo que o algoritmo de optimização possa detectar.

Pensamos que uma tal prática comporta graves riscos totalmente incontrolados e aconselhamos vivamente a pesquisa sistemática deste tipo de situações através de uma multiplicidade de optimizações a partir de "guesses" iniciais, ou pontos de partida, tão diferentes quanto possível. Porém, dado o alto custo deste tipo de

solução, a boa regra é proceder a uma pesquisa tão exaustiva quanto possível da não-convexidade do problema, da ocorrência de combinações fixas de variáveis, de omissões de restrições e de outros defeitos de modelagem, antes de proceder à optimização propriamente dita.

- Finalmente, antes da passagem à optimização propriamente dita, torna-se necessário proceder a um estudo da praticabilidade do problema. Esta necessidade surge em dois contextos diferentes:

- por um lado, obviamente não faz sentido embarcar em uma tentativa de optimização se o praticável for vazio ou se reduzir a um único ponto(o que seria, quase necessariamente, sintoma de má formulação do problema e obrigaria a voltar à estaca zero);

- por outro lado, a obtenção de um ponto de partida praticável é característica obrigatória de muitos dos melhores métodos de optimização.

Existem três tipos basicamente distintos de procedimentos capazes de gerar um ponto de partida praticável:

- o *método de Monte Carlo* que é, no fundo, um procedimento de aceitação-rejeição em que se vão gerando aleatoriamente sucessivas hipóteses que são em seguida testadas quanto a praticabilidade; embora muitos autores tendam a rejeitar este método com base na sua excessiva exigência de tempo de cálculo, pensamos que ele é fundamentalmente o mais útil, nomeadamente no contexto de problemas dotados de não-unicidade da solução, como se deixou apontado atrás;

- o *método da minimização directa das restrições* que consiste em resolver o problema da minimização de uma função de penalização exterior sem restrições:

$$\text{Min } [f(x) = \sum_k \{h_k(x)\}^2 + \sum_j \{\min [0, g_j(x)]\}^2]$$

que identifica os pontos praticáveis com um valor nulo da função-objectivo e que se simplifica notavelmente se previamente nos tivermos desembaraçado das restrições; para os métodos de optimização que exigem pontos de partida estritamente praticáveis, isto é, $g_j(x_0) > 0$ (e não simplesmente $g_j(x_0) \geq 0$), o problema pode ser reformulado na forma

$$\text{Min } [f(x) = \sum_k \{h_k(x)\}^2 + \sum_j \{\min [0, g_j(x)] - e\}^2]$$

tendo apenas o cuidado de tomar e suficientemente pequeno para que não esvazie o praticável;

- finalmente, o método de minimização sequencial, mais complexo mas mais eficaz, que, dado o conjunto de restrições $g_j(x) \geq 0$, $x_i^L \leq x_i \leq x_i^U$ e um parâmetro de tolerância ε , consiste em:

- passo I: resolver o problema

$$\text{Min } [-g_j(x) \quad x^L \leq x \leq x^U]$$

terminando em um ponto x^1 tal que $g_j(x^1) \geq \varepsilon$, para $j = 2, \dots, J$, resolver a série de problemas

- passo II:

$$\text{Min } [-g_j(x) \geq g_m(x) \geq 0, \quad m=1, \dots, J-1; \quad x^L \leq x \leq x^U]$$

com ponto de partida x^{j-1} e terminando em x^j tal que $g_j(x^j) \geq \varepsilon$,

- passo III: se $g_j(x) \geq \varepsilon$ não puder ser obtido para algum j , reduzir ε e repetir o procedimento; se ε se tornar menor que uma dada tolerância fixada sensatamente, terminar o procedimento.

Obtida que seja uma solução para o problema da optimização, o problema do projecto, que poderia, em primeira aproximação, supor-se redutível ao problema da optimização, está, na realidade, ainda longe de totalmente resolvido. Com efeito, haverá, em primeiro lugar, que validar a solução obtida, em dois sentidos muito diferentes:

- i) dado que todo o modelo implica simplificações na representação do real, que todas as leis físicas têm limites de validade e que todos os dados têm precisão limitada, é necessário rever a solução à luz destas

condicionantes para verificar que a solução não excede as limitações correspondentes e, se necessário, reformular o problema;

ii) uma vez assegurados de que a solução é praticável(em termos do real, não do modelo), verificaremos que a solução obtida é efectivamente um óptimo; nesta fase não se trata simplesmente de verificar se a solução satisfaz às condições de Kuhn-Tucker, mas de interpretá-la e de tratar de compreender por que é, efectivamente, óptima; com efeito, para que uma solução seja credível, é necessário que seja possível explicar, em termos fisicamente intuitivos, as razões para os valores obtidos para as variáveis, de outro modo, a validade da solução repousará apenas na fé na matemática e na informática.

• O passo seguinte consiste em determinar a sensibilidade da solução encontrada em relação aos parâmetros fixados no modelo e às restrições a este impostas.

Com efeito, a maior riqueza informacional de um projecto não se encontra na solução propriamente dita mas essencialmente no comportamento do sistema nas vizinhanças do óptimo:

- quais as restrições activas no óptimo e que, portanto, condicionaram decisivamente o seu valor ?
- quais destas podem ser realisticamente relaxadas, de modo a melhorar ainda mais a solução ?
- quais os termos de custo que dominam o sistema no óptimo ?
- quais destes podem ainda ser mais reduzidos ?
- qual a sensibilidade do óptimo a eventuais variações dos parâmetros ?
- quais destes podem ser reajustados de modo a melhorar ainda mais a solução ?
- quais os que devem ser conhecidos com maior rigor ?

Dado que este tipo de informação é extremamente importante não só para o projecto em questão mas, principalmente, para afinar a sensibilidade do próprio projectista, uma análise de sensibilidade muito completa é, em muitos casos, mais importante que a própria solução óptima.

A análise de sensibilidade começará, em geral, pelo exame dos multiplicadores de Lagrange(se foi esta a técnica usada), visto que, como se deixou apontado, estes representam os custos marginais das restrições e restrições; assim, dada uma restrição $h_k(x) = b_k$, o seu multiplicador v_k vale $v_k = \partial f / \partial b_k$ e, de modo semelhante, dada uma restrição $g_j(x) \geq d_j$, o seu multiplicador u_j vale $u_j = \partial f / \partial d_j$. Em uma primeira aproximação, a variação do valor da função objectivo resultante de variações dos segundos membros das restrições e restrições será

$$f(x) - f(x^*) = \sum_k (\partial f / \partial b_k) \cdot \delta b_k + \sum_j (\partial f / \partial d_j) \cdot \delta d_j = \sum_k v_k \cdot \delta b_k + \sum_j u_j \cdot \delta d_j.$$

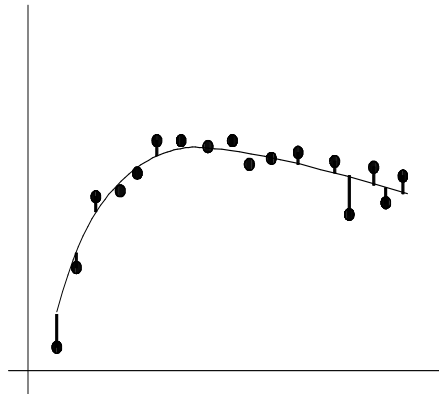
Para o estudo de sensibilidade em relação aos parâmetros do modelo, a única técnica disponível consiste, obviamente, em efectuar uma série de análises de casos convenientemente escolhidos de acordo com a sensibilidade que o projectista tem para o seu problema.

Todo este longo requisito, que, em uma primeira aproximação mais parece uma especiosa refutação da possibilidade de um projecto verdadeiramente racional, destina-se a pôr em evidência, por um lado, o vício de idealismo que infecta a abordagem da Inteligência Artificial e, por outro lado, o facto, para nós fundamental, de, mesmo naquelas situações simples em que é possível a matematização de um problema de projecto e a sua formulação como problema de programação matemática, o próprio conceito de projecto constituir matéria de uma complexidade só característica da tecnologia e completamente desconhecida da ciência.

6.6. AJUSTAMENTO

6.6.1. A CONSTRUÇÃO DE UMA FUNÇÃO OBJECTIVO

São frequentes em engenharia as situações em que há mais condições a satisfazer que parâmetros a ajustar.



Um exemplo típico é o dispormos de um modelo matemático dotado de um certo número de parâmetros que pretendemos determinar experimentalmente; para isso, ensaiamos o comportamento do sistema em várias situações possíveis e escolhemos os valores dos parâmetros que produzem um comportamento do modelo que se distancia minimamente do do sistema real.

Em situações mais simples, pretendemos apenas ajustar a um conjunto de dados experimentais uma curva cuja forma analítica é conhecida mas cujos parâmetros (coeficientes, expoentes, etc.) dependem da situação concreta

Posto nestes termos, o problema pode ser formulado como um simples problema de optimização e, muito apropriadamente, deixa-nos a liberdade de determinar mais pontos experimentais que o número de parâmetros, o que é vantajoso porque proporciona uma oportunidade de compensar os eventuais erros experimentais. A questão fundamental é a de escolher um sentido apropriado para a expressão "*se distancie minimamente*", entendendo-se "*apropriado*" no sentido de que exprima com justeza aquilo que entendemos por "*distância*" e no sentido de que seja formalizável em termos matemáticos e facilmente trabalhável.

Trata-se, portanto, do problema particularmente agudo de definir uma função objectivo adequada.

Uma saída frequente para o problema – e mais frequentemente que se pensa, impensada – consiste em definir como função objectivo a soma dos quadrados dos desvios entre o comportamento observado e o modelado. A frequência com que se usa esse tipo de função objectivo resulta de uma conjugação de circunstâncias: por um lado,

para este tipo de objectivo, as técnicas de optimização estão bem estudadas e são frequentemente notavelmente simples e eficazes; por outro lado,

- existe uma convicção generalizada – mas, em geral, mal fundamentada – de que esse é uma espécie de critério universal (a norma quadrática, ou euclidiana, é, efectivamente, um dos mais vulgares critérios de distância, mas, nem por sombras, o único). Neste contexto costuma mesmo dizer-se que os experimentalistas pensam que se trata de um teorema das matemáticas e os matemáticos pensam que é um resultado da experiência.

Porém, antes de aceitar este método dos mínimos quadrados, convém examiná-lo um pouco e compará-lo com algumas alternativas óbvias. A característica fundamental do método dos mínimos quadrados é a de ponderar mais os grandes desvios que os pequenos: preferirá, por exemplo, dez desvios de uma unidade a um de quatro unidades ($4^2 > 10 \sum_{i=1}^{10} 1^2 = 10$). Ora, se o desvio grande for fruto de um erro grosseiro, esse critério pode ser nefasto. Em outras situações, pelo contrário, revela-se excessivamente tolerante para os erros grandes, em comparação com o que faria um desenhador hábil ao traçar a curva que medianamente representa os pontos experimentais. É, portanto, sempre prudente examinar os resíduos do ajustamento, tanto numérica como graficamente, porque o método dos mínimos quadrados não tem, efectivamente, nada de infalível.

O método dos mínimos quadrados minimiza $\sum \epsilon^2$ mas poderíamos, por exemplo, minimizar $\sum |\epsilon|$ que ponderaria mais igualitariamente erros pequenos e grandes (e que muito raramente se usa, provavelmente porque conduz a difíceis problemas analíticos – que não numéricos), ou minimizar.

Além destes defeitos, o leitor não terá dificuldade, após alguma prática, em notar que o método dos mínimos quadrados tende sempre a ajustar por forma a colocar os maiores desvios nos extremos do intervalo observado, o que é, no mínimo, irritante.

Com efeito, podem facilmente formular-se outros critérios dotados de características diferentes, mas, seja como for, temos a obrigação de nos debruçar agora um pouco sobre o método dos mínimos quadrados, quanto mais não seja pelas suas características especiais em termos numéricos.

6.6.2. O CASO DOS PARÂMETROS LINEARES

A título de introdução ao método dos mínimos quadrados, comecemos pelo problema simples e comum de ajustar uma recta $y = a \cdot x + b$ a um conjunto de dados $\{x_i, y_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Pretendemos, portanto, determinar os parâmetros a e b por forma a minimizar

$$m(a, b) = \sum_{i=1}^n \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - (a \cdot x_i + b)]^2$$

em que $m(a, b)$ é uma função dos parâmetros.

Derivando em ordem aos parâmetros e igualando a zero as derivadas

$$\frac{\partial m}{\partial a} = -2 \cdot \sum_{i=1}^n [y_i - (a \cdot x_i + b)] x_i = -2 \cdot \left[a \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \cdot \sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right] = 0$$

$$\frac{\partial m}{\partial b} = -2 \cdot \sum_{i=1}^n [y_i - (a \cdot x_i + b)] = -2 \cdot \left[a \cdot \sum_{i=1}^n x_i + b \cdot \sum_{i=1}^n 1 - \sum_{i=1}^n y_i \right] = 0$$

Este sistema, chamado sistema das *equações normais*, é facilmente solúvel e dá directamente os valores óptimos de a e b .

Em certos casos, temos a certeza de que a recta deve passar pela origem, isto é, deve ser da forma $y = a \cdot x$. O leitor construirá a equação normal para este caso

Este esquema é generalizável com facilidade a outros casos em que a curva a ajustar seja função linear dos seus parâmetros (e não necessariamente da sua variável). Um caso típico é o dos *polinómios*:

$$y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n,$$

em que

$$m(a_1, a_2, \dots, a_n) = \sum_{i=1}^n \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - (a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n)]^2$$

Teremos:

$$\frac{dm(a_i)}{da_k} = -2 \cdot \sum \left[y_i - (a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n) \right]^2$$

de modo que, rearranjando os termos e desenvolvendo,

$$\begin{cases} a_0 \cdot \sum 1 + a_1 \cdot \sum x_i + \dots + a_n \cdot \sum x_i^n = \sum y_i \\ a_0 \cdot \sum x_i + a_1 \cdot \sum x_i^2 + \dots + a_n \cdot \sum x_i^{n+1} = \sum y_i \cdot x_i \\ \dots\dots\dots \\ a_0 \cdot \sum x_i^n + a_1 \cdot \sum x_i^{n+1} + \dots + a_n \cdot \sum x_i^{2n} = \sum y_i \cdot x_i^n \end{cases}$$

e, para simplificar a notação, escreveremos

$$\sum x_i^k = S_k \quad (k = 1, 2, \dots, 2n)$$

$$\sum y_i \cdot x_i^k = T_k \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

de onde as equações normais

$$\begin{cases} S_0 \cdot a_0 + S_1 \cdot a_1 + \dots + S_n \cdot a_n = T_0 \\ S_1 \cdot a_0 + S_2 \cdot a_1 + \dots + S_{n+1} \cdot a_n = T_1 \\ \dots\dots\dots \\ S_n \cdot a_0 + S_{n+1} \cdot a_1 + \dots + S_{2n} \cdot a_n = T_n \end{cases}$$

que constituem um sistema de $n+1$ equações a $n+1$ incógnitas. Embora se possa mostrar, por via analítica, que o determinante do sistema não é nulo (e, portanto, que o sistema é bem determinado porque todas as equações são independentes entre si, quaisquer que sejam os pontos x_i - o que não deixa de ser surpreendente), na prática, para $n > 10$, ele é virtualmente nulo e, portanto, o sistema é virtualmente irresolúvel excepto por via numérica.

6.6.3. O CASO DOS PARÂMETROS NÃO-LINEARES

Quando os parâmetros da família de funções que pretendemos ajustar não aparecem sob forma linear, o problema pode complicar-se substancialmente. Teremos então, em geral, que recorrer aos métodos gerais de optimização do capítulo anterior.

Em certos casos, mudanças de variável podem linearizar o problema. Assim, por exemplo, a função

$$y = a \cdot x^b$$

é não linear nos seus parâmetros a e b , mas a logaritmização produz

$$\ln(y) = \ln(a) + b \cdot \ln(x)$$

de modo que nos novos parâmetros $a = \ln(a)$ e $\beta = b$ já temos um problema linear

Porém, no caso particular de ocorrerem conjuntamente parâmetros lineares e não-lineares, poderemos simplificar o cálculo estimando um conjunto de valores para os parâmetros lineares e fazendo um ajustamento do tipo anterior para os lineares; em seguida, considerando a soma dos quadrados dos desvios obtidos como uma função dos parâmetros não-lineares apenas, optimizaremos estes pelos métodos gerais. Naturalmente, a cada passo teremos que reoptimizar de novo, em separado, os parâmetros lineares.

Quando não for esse o caso, o método aconselhável é, indiscutivelmente, o de Levenberg-Marquardt, que foi especialmente criado para este tipo de situação, aproveitando ao máximo as vantagens que ela oferece. Veremos, em especial, como a formulação se simplifica espectacularmente.

Começamos por formular o problema em forma geral como

$$\min \left[S(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m (f_i(\mathbf{x}))^2 \right]$$

notando que, sendo

$$\mathbf{f} = \{f_i(\mathbf{x})\} \quad (i = 1, 2, \dots, m)$$

será

$$S(\mathbf{x}) = \mathbf{f}^T \cdot \mathbf{f}$$

e por definir a matriz jacobiana de $S(\mathbf{x})$ como

$$\mathbf{J} = df_i(\mathbf{x})/dx_j$$

O método do gradiente consiste em calcular o gradiente que, neste caso particular, vale

$$\mathbf{v} = \mathbf{J}^T \cdot \mathbf{f}$$

e dar um passo

$$\mathbf{h}_{grad} = -k_1 \cdot \mathbf{v} = -k_1 \cdot \mathbf{J}^T \cdot \mathbf{f}. \quad (A)$$

No método da quádriga raciocina-se do seguinte modo: no mínimo o gradiente é nulo,

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{0},$$

equação que pode ser simplificada considerando o desenvolvimento de $v_i(\mathbf{x})$ em torno de \mathbf{x} ,

$$v_i(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = v_i(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^n h_k \cdot \frac{dv_i}{dx_k} + o(\mathbf{h}^2)$$

e considerando $v_i(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = \mathbf{0}$, por se supor que $\mathbf{x} + \mathbf{h}$ é o mínimo, teremos

$$\sum_{k=1}^n h_k \cdot \frac{dv_i}{dx_k} = -v_i(\mathbf{x})$$

e, por força da expressão particular do gradiente,

$$\frac{dv_j(\mathbf{x})}{dx_k} = \sum_{i=1}^m \left[J_{ik}(\mathbf{x}) \cdot J_{ij}(\mathbf{x}) + f_i(\mathbf{x}) \cdot \frac{d^2 f_i(\mathbf{x})}{dx_i \cdot dx_k} \right]$$

Considerando agora que nas vizinhanças do mínimo, os segundos termos são desprezáveis, temos

$$\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{h}_{quad} = -k_2 \cdot \mathbf{v} = -k_2 \cdot \mathbf{J}^T \cdot \mathbf{f}. \quad (B)$$

No método de Levenberg-Marquardt o passo de optimização, \mathbf{h} , será dado pela combinação de (A) e (B)

$$(\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J} + \lambda \cdot \mathbf{I}) \cdot \mathbf{h} = -\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{f} \quad (1)$$

em que λ é um parâmetro. Então, quando λ é muito grande face à norma de $\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J}$, o passo \mathbf{h} tende para a direcção do gradiente, enquanto para λ muito pequeno face a essa norma, se obtém a direcção do método da quádriga.

Nash dá o seguinte exemplo: para a função de Rosenbrock ("banana valley")

$$S(\mathbf{x}) = S(x_1, x_2) = 100 \cdot (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)$$

começando em

$$S(-1, 2, 1) = 24.1999,$$

o método do gradiente exigiu 232 cálculos de derivadas e 2248 cálculos de S para atingir

$$S(1.00144, 1.0029) = 2.1 \cdot 10^{-14}$$

e mais 468 derivadas e 4027 somas de quadrados para atingir

$$S(1.00084, 1.00168) = 2.1 \cdot 10^{-7}$$

O método de Marquardt exigiu 24 derivadas e 32 somas de quadrados para atingir

$$S(I., I.) = 1.4 * 10^{-14}$$

Se pretendermos fazer uma escalagem dos parâmetros

$$\mathbf{x}' = \mathbf{D} \cdot \mathbf{x}$$

em que \mathbf{D} é uma matriz diagonal de elementos positivos, obtemos uma jacobiana transformada

$$\mathbf{J}' = \mathbf{J} \cdot \mathbf{D}$$

e as equações (1) tomam a forma

$$(\mathbf{J}'^T \cdot \mathbf{J}' + l \cdot \mathbf{I}) \cdot \mathbf{h}' = -\mathbf{J}'^T \cdot \mathbf{f} = (\mathbf{D}^{-l} \cdot \mathbf{J}^T \cdot \mathbf{D}^{-l} + l \cdot \mathbf{I}) \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{h} = \mathbf{D}^{-l} \cdot \mathbf{J}^T \cdot \mathbf{f}$$

isto é,

$$(\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J} + l \cdot \mathbf{D}) \cdot \mathbf{h} = -\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{f} \quad (2)$$

o que significa que a escalagem pode ser feita implicitamente resolvendo (2) em vez de (1). Marquardt e Levenberg sugeriram a escolha de escala

$$D_{i,i}^2 = [\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J}]_{i,i}$$

mas Nash (*Compact numerical methods for computers*, Adam Hilger, Bristol, 1979) propõe, para evitar o problema da nulidade dos elementos diagonais de $\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J}$, tomar

$$D_{i,i}^2 = [\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J}]_{i,i} + 1$$

Deste modo, a matriz $(\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J} + \lambda \cdot \mathbf{D})$ é definida positiva, e uma escolha adequada de λ pode sempre torná-la computacionalmente definida positiva, de modo que pode aplicar-se-lhe a decomposição de Khalestky na sua forma mais simples.