Otimização não linear
Otimização unidimensional: Método DSC
Otimização multidimensional: condições de otimalidade

Ana Maria A. C. Rocha

Departamento de Produção e Sistemas

Universidade do Minho

arocha@dps.uminho.pt

Otimização

A otimização:

- surge em processos de tomada de decisão quando se pretende atingir o melhor resultado possível;
- é um dos objetivos dos profissionais das áreas das **Ciências de Gestão** e **Engenharia** – embora também surja noutras áreas: ciências aplicadas, economia, finanças, medicina e estatística;

. . . está relacionada com a **maximização** ou **minimização** de modelos matemáticos - **função objetivo**

. . . em certos casos, as **variáveis de decisão** estão sujeitas a condições, designadas **restrições**

Classificação de problemas

De acordo com as características da função objetivo e das restrições, os problemas de otimização são divididos em Problemas de Otimização Linear e **Problemas de Otimização Não Linear**:

- Otimização Linear: se a função objetivo e as restrições são lineares;
- **Otimização Não Linear**: se a função objetivo e/ou as restrições contêm funções não lineares nas variáveis;
  - casos particulares mais fáceis de resolver:

$$\left\{\begin{array}{l}\text{problemas quadráticos}\\ \text{problemas convexos (funções convexas)}\\ \text{problemas sem restrições}\end{array}\right.$$

Classificação de problemas de otimização

Quanto ao número de restrições

- Problema sem restrições
- Problema com restrições

Função objetivo	**Funções de restrição**	**Nome**
linear	lineares	Programação Linear
quadrática	lineares	Programação Quadrática
polinomial (grau>2)	lineares	**Programação Não Linear**
genérica (envolve funções trigonométricas, exp, log, função inversa, ...)	lineares	
linear	quadráticas polinomiais genéricas	
quadrática	quadráticas polinomiais genéricas	
genérica	quadráticas polinomiais genéricas	

Outras classes de problemas

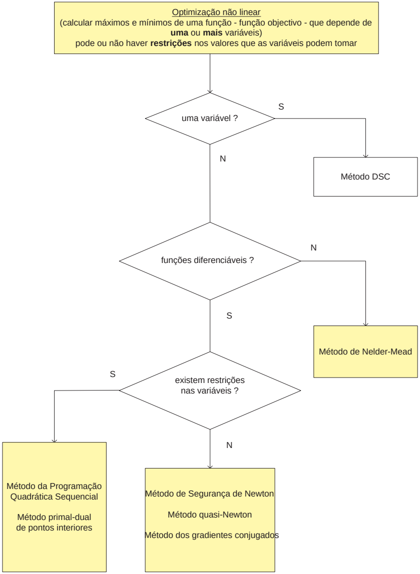
Outras diferenças que distinguem os problemas de otimização:

- diferenciável *vs* não diferenciável
- sem restrições *vs* com restrições
- unidimensional *vs* multidimensional
- convexo *vs* não convexo
- pequena/média dimensão *vs* grande dimensão
- contínuo *vs* discreto
- determinístico *vs* estocástico
- uniobjetivo *vs* multiobjetivo,

e

que obrigam a uma escolha adequada de métodos de resolução.

Características dos problemas



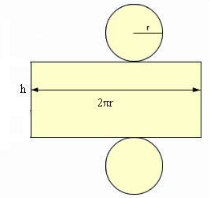
Exemplo 1

Tendo como objetivo fabricar latas cilíndricas com um volume de 1000 cm^3 e tapá-las em ambas as extremidades, qual deverá ser o raio da base e a altura da lata de modo a minimizar a quantidade de placa metálica, em termos de área superficial?

Exemplo 1 (cont.)

$$
\begin{aligned}
\text{Área Total} &= \text{Área}_{\text{retângulo}} + 2 \times \text{Área}_{\text{círculo}} \\
&= base \times h + 2\left(\pi r^2\right) \\
&= \text{Perímetro}_{\text{círculo}} \times h + 2\pi r^2 \\
&= 2\pi rh + 2\pi r^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\text{Volume} &= \pi r^2 \times h \\
1000 &= \pi r^2 \times h
\end{aligned}
$$



Formulação do problema:

$$
\begin{array}{ll}
\text{minimizar} & A(r,h) \equiv 2\pi rh + 2\pi r^2 \\
\text{sujeito a} & \pi r^2 h = 1000
\end{array}
$$

Problema com **2 variáveis** e **1 restrição**

Problema multidimensional com restrições

Exemplo 1 (cont.)

Este problema pode ser transformado num **problema sem restrições** e **uma variável**: $1000 = \pi r^2 \times h \Leftrightarrow h = \dfrac{1000}{\pi r^2}$
Substituindo em $A(r, h)$ vem

$$A(r) = 2\pi r \frac{1000}{\pi r^2} + 2\pi r^2 = \frac{2000}{r} + 2\pi r^2, r \neq 0$$

Formulação do problema:

$$\min_{r \in \mathbb{R}} \quad A(r) \equiv \frac{2000}{r} + 2\pi r^2, \quad r \neq 0$$

Problema com **1 variável** e **sem restrições**
Problema unidimensional sem restrições

Exemplo 2

O produto de três números positivos é igual a A (dado). Determine esses números por forma que a sua soma seja máxima.

Problema com 3 variáveis e com 1 restrição

$$\begin{array}{ll} \text{maximizar} & x_1 + x_2 + x_3 \\ \text{sujeito a} & x_1 x_2 x_3 = A \end{array}$$

Sendo $x_3 = \dfrac{A}{x_1 x_2}$ e substituindo $\Rightarrow$

Problema com 2 variáveis sem restrições

$$\max_{x_1, x_2} \quad x_1 + x_2 + \frac{A}{x_1 x_2}, \quad x_1, x_2 \neq 0$$

Exemplo 3

Uma empresa de sumos de frutas pretende lançar no mercado embalagens de sumos com capacidade de 1.5 litros e com a forma de um prisma quadrangular regular, como mostra a figura.

Calcule o comprimento da aresta da base, x, e a altura da embalagem, h, de forma que a área superficial total seja mínima.

Formulação do problema:

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & 2x^2 + 4xh \\ \text{s.a} & x^2 h = 1.5 \end{array} \qquad (1)$$

Formulação de um problema sem restrições

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \qquad (2)$$

n representa o número de variáveis no problema.

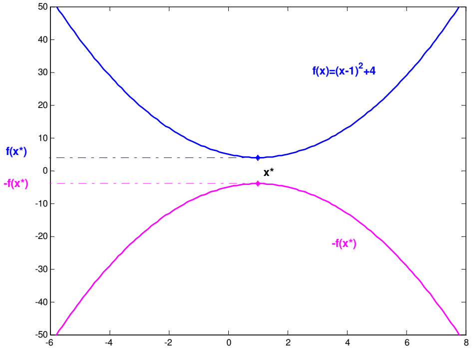
- Se $n = 1 \Longrightarrow \left[\begin{array}{l} \text{problema diz-se } \textbf{unidimensional} \\ x \text{ é escalar} \end{array}\right.$

- Se $n > 1 \Longrightarrow \left[\begin{array}{l} \text{problema multidimensional} \\ x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \text{é vetor de dimensão } n \end{array}\right.$

Mínimos *vs* máximos

$$\max f(x) = -\min(-f(x))$$

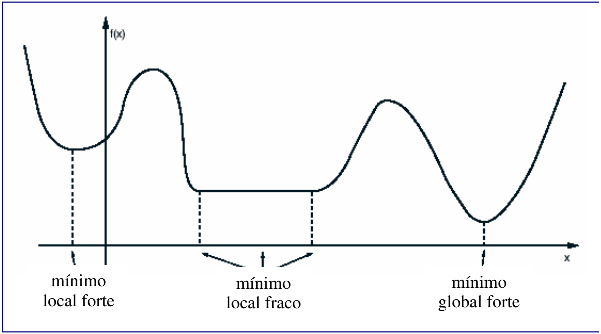
$$x^* = \underbrace{\arg\max\left(f\left(x\right)\right)}_{\text{maximizante}} = \underbrace{\arg\min\left(-f\left(x\right)\right)}_{\text{minimizante}}$$



Classificação de mínimos (e máximos)

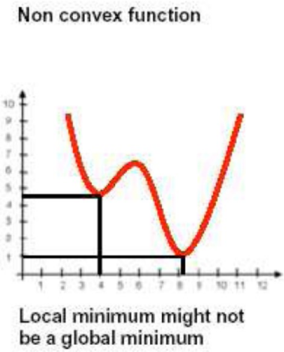
Seja $V(x, \delta)$ uma vizinhança (bola aberta) de x^* de raio δ $(\delta > 0)$.
x^* é minimizante **local** forte (fraco) se $\exists \delta > 0$:

- $f(x)$ é definida em $V(x^*, \delta)$
- $f(x^*) < (\leq) f(x), \; \forall x \in V(x^*, \delta); \; x \neq x^*$



Classificação de mínimos (e máximos)

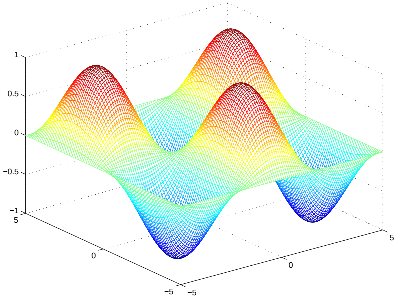
$$\begin{cases} \text{min(max)imizante global} \Rightarrow \text{min(max)imizante local} \\ \\ \text{min(max)imizante local} + f \ \underline{\text{convexa}} \ \text{(côncava)} \\ \ \Rightarrow \text{min(max)imizante global} \end{cases}$$



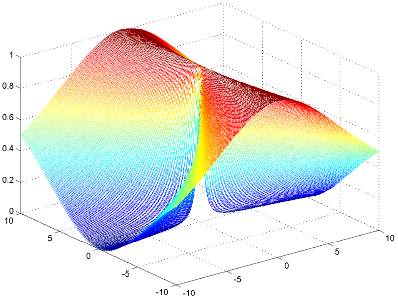
Classificação de mínimos (e máximos)

x^* é maximizante **local** forte (fraco) se $\exists\delta > 0$:

- $f(x)$ é definida em $V(x^*, \delta)$
- $f(x^*) > \;(\geq)\, f(x) \;\; \forall x \in V(x^*, \delta); \;\; x \neq x^*$



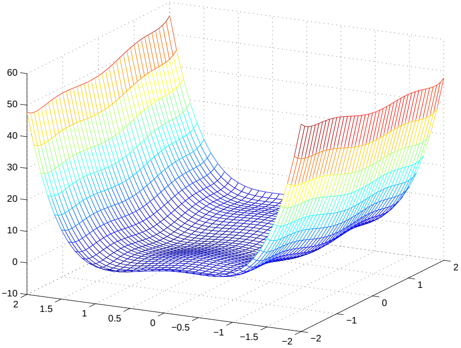
(máximos e mínimos fortes)

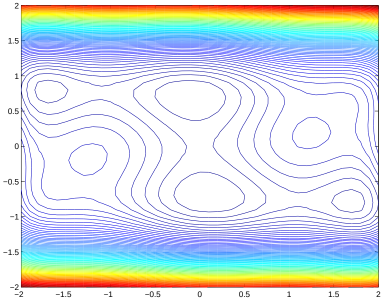


(máximos e mínimos fracos)

Classificação de mínimos (e máximos)

x^* é minimizante **global** forte (fraco) se $f(x^*) < (\leq) f(x)$, para todo o x que pertence ao domínio de $f(x)$ (onde a função é definida);

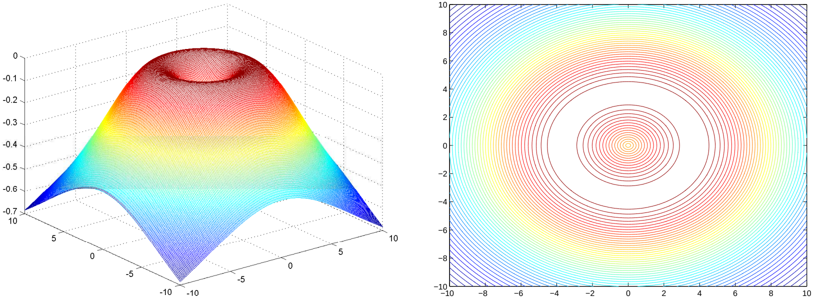




(2 mínimos globais e 4 mínimos locais)

Classificação de mínimos (e máximos)

x^* é maximizante **global** forte (fraco) se $f(x^*) > (\geq) f(x)$ para todo o x que pertence ao domínio de $f(x)$ (onde a função é definida);



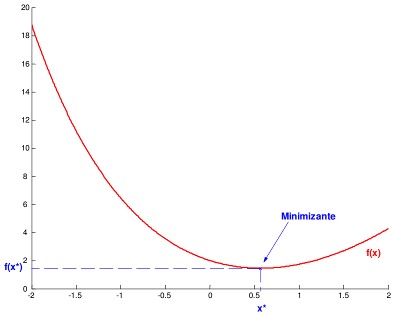
(máximos globais fracos)

Nota: Todo o ótimo global é local; no entanto, um ótimo local pode não ser global.

Problema unidimensional (n=1)

Exemplo 1

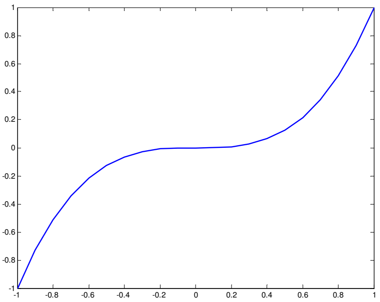
$$\min_{x \in \mathbb{R}} \; f(x) \equiv x^2 + 2e^{-x}$$



(tem 1 mínimo)

Exemplo 2

$$\min_{x \in \mathbb{R}} \; f(x) \equiv x^3$$



(não tem mínimos)

Condições de otimalidade

Assume-se que $f(x)$ é continuamente diferenciável até à 2^a ordem.

Condição necessária (e suficiente) de 1^a ordem:

Se x^* é uma solução do problema (2) ($n = 1$) então

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

Nota: A condição $f'(x^*) = 0$ define os pontos estacionários de $f(x)$: minimizante (como no exemplo 1), maximizante, ou ponto de inflexão (como no exemplo 2).

Condição necessária de 2^a ordem (para ser mnimizante):

Se x^* é uma solução do problema (2) ($n = 1$) que satisfaz a condição de 1^a ordem, então

- $f''(x^*) \geq 0$.

Condições de otimalidade

Condição suficiente de 2^a ordem:

Se x^* é um ponto que verifica a condição de 1^a ordem e se

- $f''(x^*) > 0$

então x^* é um **minimizante** local forte de (2).

Nota: As condições necessárias e suficientes de 2^a ordem para um **maximizante** são respetivamente

- $f''(x^*) \leq 0$
- $f''(x^*) < 0$.

Métodos de resolução para problema unidimensional

$$\min_{x \in \mathbb{R}} f(x)$$

- Métodos de procura (ou pesquisa) direta (que **não** usam derivadas)
- Métodos de aproximação
- Métodos mistos

O método de Davies, Swann e Campey (DSC):

- é iterativo que só usa informação da função objetivo f
- é do tipo misto (tem uma fase de procura e uma fase de aproximação)
- a fase de aproximação usa interpolação quadrática
- é para problemas de otimização unidimensionais.

Método DSC

1. **Fase de procura**
   - procura no sentido positivo e/ou sentido negativo
   - constrói, em cada iteração, 3 pontos igualmente distanciados que definem um intervalo que contém o minimizante da função
   - compara apenas os valores da função objetivo em diversos pontos.

2. **Fase de aproximação**
   - seleciona 3 pontos igualmente distanciados que definem um intervalo que contém o minimizante da função objetivo
   - aproxima a função nesse intervalo por uma **quadrática** e usa o seu minimizante como aproximação ao minimizante da função.

3. **Critério de paragem (CP)**
   - é baseado na distância entre os pontos que foram usados na aproximação quadrática.
   - se o CP for verificado então o minimizante da quadrática é a melhor aproximação à solução.

Método de Davies, Swann e Campey (DSC)

Em qualquer iteração

a procura começa com uma aproximação inicial à solução, designada x_1, e uma perturbação $\delta > 0$.

1. procura no sentido positivo

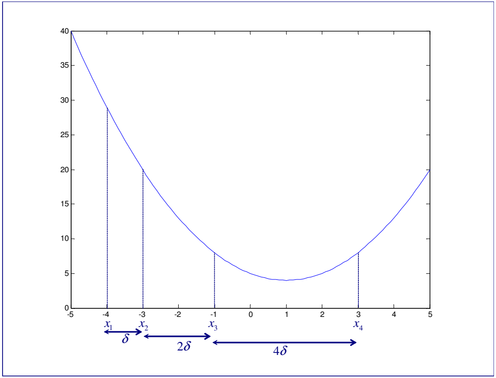
A partir do x_1 e no <u>sentido positivo</u>, calcula-se uma sequência de pontos $x_2, x_3, x_4, \ldots$

distanciados, respetivamente, de δ, 2δ, 4δ, 8δ, ...

$$\begin{aligned} & x_1 \\ & x_2 = x_1 + \delta \\ & x_3 = x_2 + 2\delta \\ & \ldots \\ & x_k = x_{k-1} + 2^{k-2}\delta \end{aligned}$$

até que no ponto x_k se tenha $f(x_k) > f(x_{k-1})$.

Método de Davies, Swann e Campey (DSC)



Nesta altura, tem-se

$$\cdots < x_{k-2} < x_{k-1} < x_k$$

em que $f(x_{k-2}) \geq f(x_{k-1})$ e $f(x_{k-1}) < f(x_k)$ e a distância entre x_k e x_{k-1} é duas vezes a distância entre x_{k-1} e x_{k-2}.

Método de Davies, Swann e Campey (DSC)

- Calcula-se o ponto médio do último intervalo:

$$x_m = \frac{x_k + x_{k-1}}{2}$$

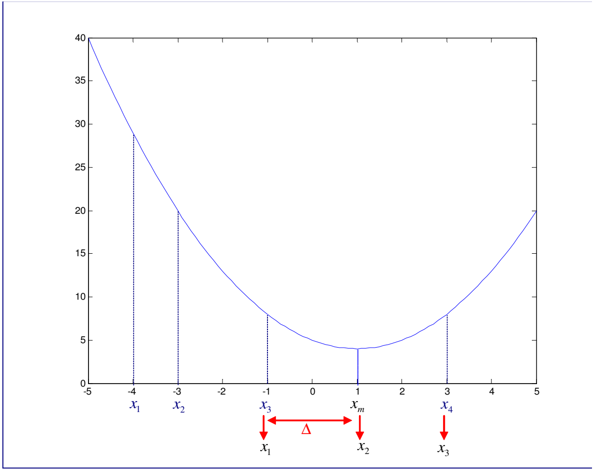
e fica-se com 4 pontos igualmente espaçados

$$x_{k-2} < x_{k-1} < x_m < x_k$$

- Para a aproximação quadrática, é necessário seleccionar três dos quatro pontos.
Comparam-se os valores de $f(x)$ nos dois pontos interiores do intervalo:

Método de Davies, Swann e Campey (DSC)

- Se $f(x_{k-1}) \leq f(x_m)$ então escolhem-se os pontos x_{k-2}, x_{k-1} e x_m senão $(f(x_{k-1}) > f(x_m))$ escolhem-se os pontos x_{k-1}, x_m e x_k



Fase de aproximação do método DSC

MIN q O minimizante da quadrática, $x^*(q)$, que passa por estes três pontos (nesta fase, redefinidos por $x_1 < x_2 < x_3$) determina-se por

$$x^*(q) = x_2 + \Delta \frac{f(x_1) - f(x_3)}{2(f(x_3) - 2f(x_2) + f(x_1))}$$

com $\Delta = (x_2 - x_1) = (x_3 - x_2)$.

Critério de paragem:

verificar se a distância entre os pontos que foram usados para construir a quadrática não excede $\varepsilon > 0 \quad (\approx 0)$:

$$(x_2 - x_1) = (x_3 - x_2) = \Delta \leq \varepsilon$$

Paragem do método DSC ?

i) Se o critério de paragem for verificado, o processo iterativo termina, sendo $x^*(q)$ a melhor aproximação calculada à solução;

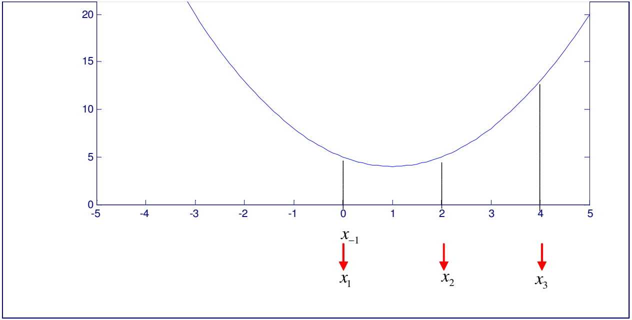
ii) Se o critério de paragem não se verificar, o processo repete-se e o minimizante da quadrática, $x^*(q)$, passa a ser o x_1 da nova iteração. A perturbação δ também deve ser reduzida através de: $\delta = M\delta$, com $M < 1$.

2. procura no sentido negativo

Quando, a partir de x_1, o valor de $f(x_2) > f(x_1)$ (para $x_2 = x_1 + \delta$) a procura deve voltar-se para o sentido negativo, a começar novamente por x_1.
O próximo ponto, na procura, é $x_{-1} = x_1 - \delta$.

Método de Davies, Swann e Campey (DSC)

2. i) Se $f(x_{-1}) > f(x_1)$, significa que o intervalo definido por $[x_{-1}, x_2]$, com x_1 como ponto médio, contém o minimizante desejado. Nesta altura, determina-se o minimizante da quadrática (que passa pelos **três pontos** agora calculados), $x^*(q)$, tal como está descrito no ponto **MIN q**.



Método de Davies, Swann e Campey (DSC)

2. ii) No entanto, se $f(x_{-1}) < f(x_1)$, significa que a procura deve <u>continuar</u> no <u>sentido negativo</u> até que $f(x_{-k}) > f(x_{-(k-1)})$, isto é, procede-se da seguinte forma:

$$\begin{aligned} &x_{-2} = x_{-1} - 2\delta \\ &\dots \\ &x_{-k} = x_{-(k-1)} - 2^{k-1}\delta \end{aligned}$$

até que no ponto x_{-k} se tenha $f(x_{-k}) > f\left(x_{-(k-1)}\right)$.
Nesta altura, tem-se

$$x_{-k} < x_{-(k-1)} < x_{-(k-2)} < \cdots$$

em que $f\left(x_{-(k-2)}\right) \geq f\left(x_{-(k-1)}\right)$ e $f\left(x_{-(k-1)}\right) < f(x_{-k})$

Método de Davies, Swann e Campey (DSC)

e a distância entre x_{-k} e $x_{-(k-1)}$ é duas vezes a distância entre $x_{-(k-1)}$ e $x_{-(k-2)}$.
Calcula-se o ponto médio do último intervalo:

$$x_m = \frac{x_{-k} + x_{-(k-1)}}{2}$$

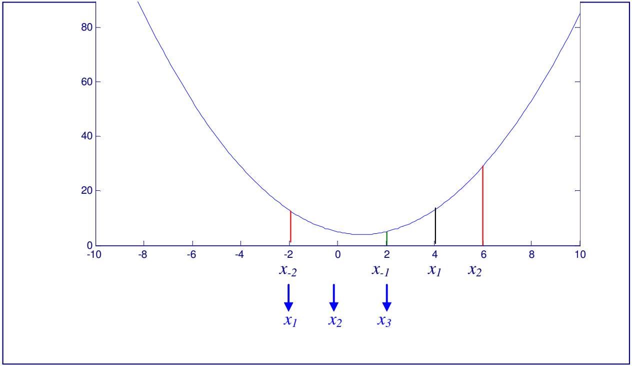
e fica-se com 4 pontos igualmente espaçados

$$x_{-k}, x_m, x_{-(k-1)}, x_{-(k-2)}$$

Se $f(x_m) < f\left(x_{-(k-1)}\right)$ então escolhem-se os pontos x_{-k}, x_m e $x_{-(k-1)}$
senão $\left(f(x_m) \geq f\left(x_{-(k-1)}\right)\right)$ escolhem-se os pontos $x_m, x_{-(k-1)}$ e $x_{-(k-2)}$

Método de Davies, Swann e Campey (DSC)

O processo entra na fase de aproximação - ponto **MIN q** - calcula-se o minimizante da quadrática que passa pelos 3 pontos agora selecionados - tal como foi descrito na procura no sentido positivo:

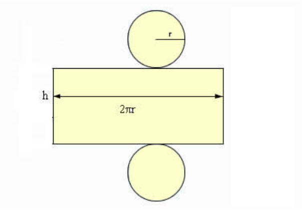


Exercício

Tendo como objetivo fabricar latas cilíndricas com um volume de $1000\ cm^3$ e tapá-las em ambas as extremidades, qual deverá ser o raio da base e a altura da lata de modo a minimizar a quantidade de placa metálica, em termos de área superficial? Utilize o algoritmo de DSC, baseado na interpolação quadrática, com o valor inicial $r_1 = 7$, $\delta = 0.5$, $\varepsilon = 0.3$ e $M = 0.5$. Use 4 casas decimais nos cálculos.

$$\boxed{\min_{r\in\mathbb{R}} \quad \underbrace{\frac{2000}{r} + 2\pi r^2}_{\text{função objetivo}}}$$

Resolução do Exercício



$$\begin{aligned} \text{Área Total} &= \text{Área}_{\text{retângulo}} + 2 \times \text{Área}_{\text{círculo}} \\ &= base \times h + 2\left(\pi r^2\right) \\ &= \text{Perímetro}_{\text{círculo}} \times h + 2\pi r^2 \\ &= 2\pi rh + 2\pi r^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Volume} &= \pi r^2 \times h \\ 1000 &= \pi r^2 \times h \end{aligned}$$

$$\min \quad \underbrace{2\pi rh + 2\pi r^2}_{A(r,h)}$$

$$\begin{aligned} \text{Volume} &= \pi r^2 \times h \\ 1000 &= \pi r^2 \times h \Longrightarrow h = \frac{1000}{\pi r^2} \end{aligned}$$

Substituindo em $A(r,h)$ vem $A(r) = 2\pi r \dfrac{1000}{\pi r^2} + 2\pi r^2 = \dfrac{2000}{r} + 2\pi r^2$

Resolução do Exercício (cont.)

$$\begin{array}{ll} \min & \dfrac{2000}{r} + 2\pi r^2 \\ \text{s.a} & r \in \mathbb{R} \end{array}$$

Iniciar algoritmo DSC

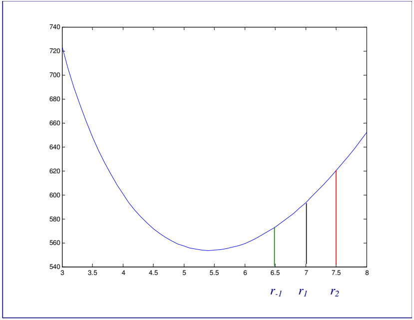
$r_1 = 7, \delta = 0.5, \varepsilon = 0.3, M = 0.5$

$$\begin{cases} r_1 = 7 \\ A(r_1) = 593.5904 \end{cases}$$

$$\begin{cases} r_2 = 7 + 0.5 = 7.5 \\ A(r_2) = 620.0958 \end{cases}$$

$A(r_2) > A(r_1) \Rightarrow$ sentido negativo

$$\begin{cases} r_{-1} = 7 - 0.5 = 6.5 \\ A(r_{-1}) = 573.1569 \end{cases}$$

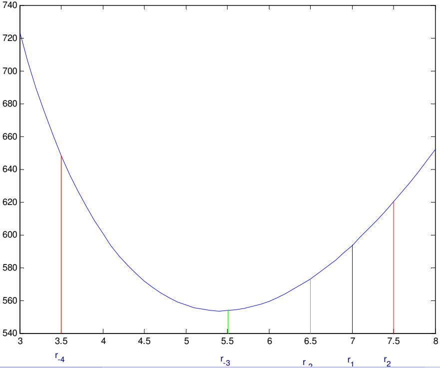


Resolução do Exercício (cont.)

$$A(r_{-1}) < A(r_1) \Rightarrow \begin{cases} r_{-2} = 6.5 - 2 \times 0.5 = 5.5 \\ A(r_{-2}) = 553.7027 \end{cases}$$

$$A(r_{-2}) < A(r_{-1}) \Rightarrow \begin{cases} r_{-3} = 5.5 - 4 \times 0.5 = 3.5 \\ A(r_{-3}) = 648.3976 \end{cases}$$

$$A(r_{-3}) > A(r_{-2}) \Rightarrow \text{PARAR.}$$



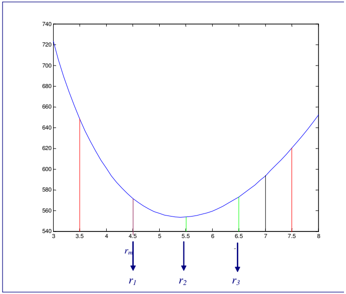
Resolução do Exercício (cont.)

Calcular ponto médio.

$$\begin{cases} r_m = (5.5 + 6.5)/2 = 4.5 \\ A\left(r_m\right) = 571.6789 \end{cases}$$

Escolher 3 pontos igualmente espaçados.

$$\begin{cases} r_1 = 4.5 & A\left(r_1\right) = 571.6789 \\ r_2 = 5.5 & A\left(r_2\right) = 553.7027 \\ r_3 = 6.5 & A\left(r_3\right) = 573.1569 \end{cases}$$



Minimizante da quadrática

$$\begin{cases} r_{\min} = 5.4803 \\ A\left(r_{\min}\right) = 553.6508 \end{cases}$$

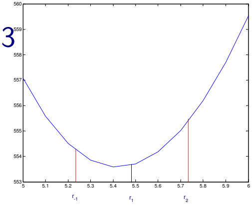
Testar CP: $(\Delta = (r_2 - r_1) = 1) \leq 0.3$

Falso, por isso fazer nova iteração.

Resolução do Exercício (cont.)

Fazer $\delta = M\delta = 0.5 \times 0.5 = 0.25$ e $r_{min} \to r_1$

$$\begin{cases} r_1 = 5.4803 \\ A(r_1) = 553.6508 \end{cases} \quad \begin{cases} r_2 = 5.4803 + 0.25 = 5.7303 \\ A(r_2) = 555.3387 \end{cases}$$



Como $A(r_2) > A(r_1)$ então

$$\begin{cases} r_{-1} = 5.4803 - 0.25 = 5.2303 \\ A(r_{-1}) = 554.2703 \end{cases}$$

Como $A(r_{-1}) > A(r_1)$ então PARAR. Não é necessário calcular ponto médio.

Ordenar pontos. $\begin{cases} r_1 = 5.2303 & A(r_1) = 554.2703 \\ r_2 = 5.4803 & A(r_2) = 553.7027 \\ r_3 = 5.7303 & A(r_3) = 555.3387 \end{cases}$

Calcular minimizante da quadrática $\begin{cases} r_{\text{min}} = 5.4224 \\ A(r_{\text{min}}) = 553.5812 \end{cases}$

Testar CP: $((r_2 - r_1) = 0.25) \leq 0.3 \Leftrightarrow$ Verdadeiro

Solução$\Rightarrow \begin{cases} r^* = 5.4224 \text{ e a altura } h^* = \frac{1000}{\pi r^2} = 12.06 \\ A(r^*) = 553.5812 \end{cases}$

Formulação de um problema sem restrições

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{3}$$

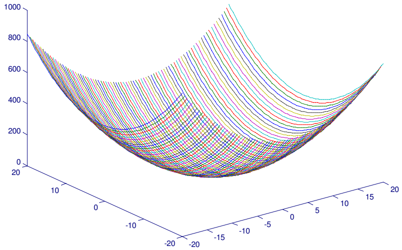
n representa o número de variáveis no problema.

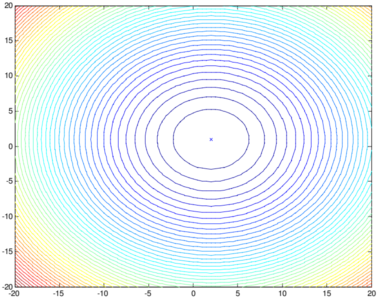
- Se $n = 1 \Longrightarrow$ $\left[\begin{array}{l}\text{problema diz-se unidimensional}\\ x \text{ é escalar}\end{array}\right.$
- Se $n > 1 \Longrightarrow$ $\left[\begin{array}{l}\text{problema } \textbf{multidimensional}\\ x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \text{ é vetor de dimensão } n\end{array}\right.$

Problema multidimensional sem restrições

Exemplo 1

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} \; f(x) \equiv (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$$

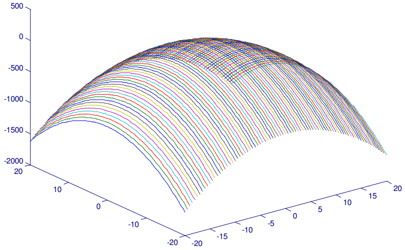


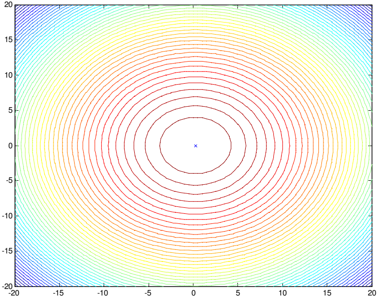


Problema multidimensional sem restrições

Exemplo 2

$$\max_{x \in \mathbb{R}^2} \; f(x) \equiv 2(-x_1^2 - x_2^2 + 1) + x_1$$

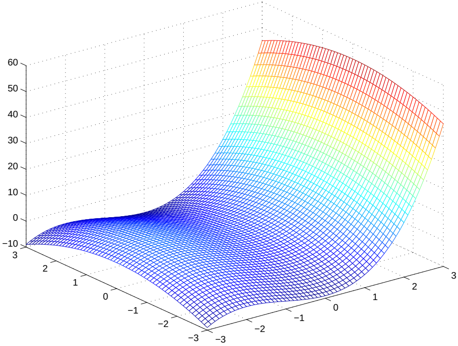


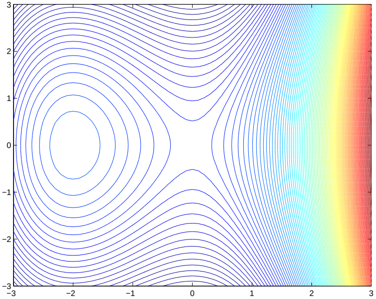


Problema multidimensional sem restrições

Exemplo 3

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} \; f(x) \equiv 3x_1^2 - x_2^2 + x_1^3$$



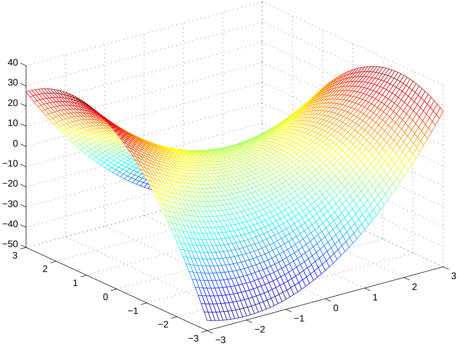


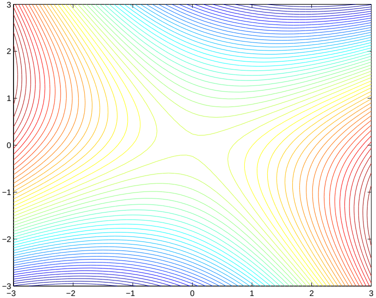
Ponto sela em $(0, 0)$

Problema multidimensional sem restrições

Exemplo 4

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} \; f(x) \equiv 3x_1^2 - 4x_1x_2 - 4x_2^2$$





Ponto sela em $(0, 0)$

Notação

Vetor gradiente da função $f(x)$ - $x \in \mathbb{R}^n$ -

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} \text{ vetor de } \mathbb{R}^n$$

Matriz Hessiana da função $f(x)$

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} \begin{array}{c} \text{matriz} \\ \text{simétrica} \\ \text{de } n \times n \end{array}$$

Condições de otimalidade

Assume-se $f(x)$ continuamente diferenciável até à 2^a ordem.

Condição necessária (e suficiente) de 1^a ordem:

Se x^* é uma solução do problema (3) então o vetor gradiente calculado em x^* anula-se, i.e.,

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

Os pontos estacionários da função f são os pontos que verificam

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

$$\begin{cases} \text{minimizante (como no Exemplo 1)} \\ \text{maximizante (como no Exemplo 2)} \\ \text{ponto sela (como nos Exemplos 3 e 4)} \end{cases}$$

Condições de otimalidade

Condição necessária de 2^a ordem:

Se x^* é uma solução do problema (3) que satisfaz a condição de 1^a ordem, então $\nabla^2 f(x^*)$ é semi-definida positiva.

Condição suficiente de 2^a ordem:

Se x^* é um ponto que verifica a condição de 1^a ordem e se a matriz Hessiana calculada em x^*, $\nabla^2 f(x^*)$, é definida positiva, então x^* é um **minimizante** local forte de (3).

Condição suficiente de 2^a ordem:

Se x^* é um ponto que verifica a condição de 1^a ordem e se a matriz Hessiana calculada em x^*, $\nabla^2 f(x^*)$, é definida negativa, então x^* é um **maximizante** local forte de (3).

Condições de otimalidade

Assumindo $\nabla f\left(x^{*}\right)=0$**:**

Condições de 2^a ordem para um minimizante

$\nabla^2 f(x^*)$ é semi-definida positiva (condição necessária)

$\nabla^2 f(x^*)$ é definida positiva (condição suficiente)

Condições de 2^a ordem para um maximizante

$\nabla^2 f(x^*)$ é semi-definida negativa (condição necessária)

$\nabla^2 f(x^*)$ é definida negativa (condição suficiente)

Se $\nabla^2 f(x^*)$ é indefinida, então x^* é ponto sela (ou de descanso).

Definições

- Uma matriz diz-se **definida positiva** se os determinantes das submatrizes principais são positivos;
- se pelo menos um dos determinantes das submatrizes principais é zero e os outros são positivos, a matriz diz-se **semi-definida positiva**.

- Uma matriz diz-se **definida negativa** se os determinantes das submatrizes principais têm sinais alternados, sendo o de ordem 1 negativo;
- se pelo menos um dos determinantes das submatrizes principais é zero e os outros têm sinais alternados, sendo o de ordem 1 negativo, a matriz diz-se **semi-definida negativa**.

- Uma matriz diz-se **indefinida** se os sinais dos determinantes das submatrizes principais não verificam nenhuma das 4 situações acima mencionadas.

NOTA: Para identificar uma matriz semi-definida positiva ou semi-definida negativa, a sequência dos determinantes tem de ter pelo menos um elemento não nulo. Se toda a sequência for constituída por elementos nulos nada se pode concluir.

Resumo

Seja x^* um ponto para o qual $\nabla f(x^*) = 0$ e $\nabla^2 f(x^*) \neq$ matriz nula:

- Se $\nabla^2 f(x^*)$ é definida positiva então x^* é minimizante
- Se $\nabla^2 f(x^*)$ é definida negativa então x^* é maximizante
- Se $\nabla^2 f(x^*)$ é semi-definida positiva então x^* é minimizante ou ponto sela
- Se $\nabla^2 f(x^*)$ é semi-definida negativa então x^* é maximizante ou ponto sela
- Se $\nabla^2 f(x^*)$ é indefinida então x^* é ponto sela.

Exercício

Dada a função $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ definida por

$$f(x_1, x_2, x_3) = 5x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^4 - 32x_3 + 6x_1x_2 + 5x_2$$

verifique que ela tem apenas um ponto estacionário. Use a condição suficiente de 2^a ordem para o classificar.

Resolução do Exercício

Determinação do vetor gradiente e matriz Hessiana da função:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 10x_1 + 6x_2 \\ 4x_2 + 6x_1 + 5 \\ 4x_3^3 - 32 \end{pmatrix} \text{ e } \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 10 & 6 & 0 \\ 6 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 12x_3^2 \end{pmatrix}$$

- Resolver o sistema

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

Resolução do Exercício (cont.)

Da **condição de 1ª ordem** (resolução do sistema $\nabla f(x) = 0$) temos que

$$x^* = (7.5, -12.5, 2)^T \text{ é ponto estacionário de } f(x_1, x_2, x_3).$$

Da **condição de 2ª ordem**

$$\nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 10 & 6 & 0 \\ 6 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 48 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \det\left(\nabla^2 f_1\right) = 10 > 0 \\ \det\left(\nabla^2 f_2\right) = 4 > 0 \\ \det\left(\nabla^2 f_3\right) = 192 > 0 \end{cases}$$

Como $\nabla^2 f(x^*)$ é <u>definida positiva</u>, então

$$x^* = (7.5, -12.5, 2)^T \text{ é } \textbf{minimizante}.$$