FGV EMAp

João Pedro Jerônimo

Otimização para Ciência de Dados

Revisão para A1

Rio de Janeiro

2025

Conteúdo

Otimização Irrestrita

Nota: Esse capítulo será cheio de definições e teoremas um atrás do outro, já que ele é mais uma revisão de coisas que já vimos em cursos passados. Todas as definições, teoremas e provas aqui escritas podem ser encontradas nas anotações do professor (Phillip Thompson). O intuito desse documento é esclarecer alguns conceitos que podem parecer confusos e dar intuições para vários conceitos bastante abstratos

1.1 Introdução

Otimização é um ramo da matemática preocupada em resolver problemas em que você possui várias opções de escolha, de forma que cada uma tem o custo associado, e queremos escolher a escolha com menor custo possível, ou seja, queremos resolver:

$$\min_{x \in C} f(x) \tag{1}$$

Com $f : C \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sendo a **função objeto** e C sendo o **conjunto viável**.

1.2 Definições e Revisões de Cálculo

Nesse capítulo, vamos rever alguns conceitos de cálculo e introduzir a otimização irrestrita, onde queremos trabalhar em uma função f sem nenhuma restrição

Definição 1.2.1 (Ponto de Mínimo): Seja $f : C \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

- $x^* \in C$ é um **ponto de mínimo global** de f em $C \Leftrightarrow$

$$\forall x \in C, \qquad f(x^*) \leq f(x) \tag{2}$$

- $x^* \in C$ é um **ponto de mínimo global estrito** de f em $C \Leftrightarrow$

$$\forall x \in C, \qquad f(x^*) < f(x) \tag{3}$$

- $x^* \in C$ é um **ponto de mínimo local** de f em $C \Leftrightarrow$

$$\exists r > 0 \wedge \forall x \in C \cap B(x^*, r), \qquad f(x^*) \leq f(x) \tag{4}$$

- $x^* \in C$ é um **ponto de mínimo local estrito** de f em $C \Leftrightarrow$

$$\exists r > 0 \wedge \forall x \in C \cap B(x^*, r) \setminus \{x^*\}, \qquad f(x^*) \leq f(x) \tag{5}$$

Definição 1.2.2 (Bola): Uma bola $B \subset \mathbb{R}^n$ de raio $r > 0 \in \mathbb{R}$ e centro $p \in \mathbb{R}^n$ é o conjunto:

$$B(p, r) = \{x \in \mathbb{R} / \ \|x - p\| \leq r\} \tag{6}$$

Ou seja, qual é a diferença dos dois? Pontos de mínimo globais são menores que todo e qualquer outro ponto no domínio C da função, enquanto os pontos locais são os menores em uma determinada vizinhança, a partir do ponto de mínimo local em questão, qualquer direção que eu tomar eu vou começar a subir o valor de f, mesmo que existam pontos em outros locais do domínio que sejam menores que o ponto de mínimo local que eu estava analisando

Agora vamos lembrar algumas coisas que vimos em cálculo (Alguns teoremas que são apenas revisão não serão demonstrados)

Definição 1.2.3 (Derivada direcional): Dada $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $d \neq 0 \in \mathbb{R}^n$ e $\|d\| = 1$. Se

$$\exists \lim_{t \to 0^+} \frac{f(x + td) - f(x)}{t} \tag{7}$$

Isso é chamado de derivada direcional de f na direção d ($\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}d}$)

Definição 1.2.4 (Gradiente): Dada $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $\exists \frac{\partial f}{\partial x_i}$, $i = 1, ..., n$, o vetor gradiente de f é definido como:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{8}$$

Definição 1.2.5 (Continuamente Diferenciável): Uma função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é continuamente diferenciável se:

$$\forall x \in \mathbb{R}^n,\ \exists \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) \tag{9}$$

e $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ são contínuas $\forall i$

Teorema 1.2.1 (Aproximação de Primeira Ordem): Quando f é continuamente diferenciável, em uma vizinhança de um ponto x podemos mostrar que:

$$\forall d \in \mathbb{R}^n \text{ com } \|d\| = 1 \qquad \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}d} = \nabla f(x)^T d \tag{10}$$

e, além disso, temos:

$$\forall y \in \mathbb{R}^n \text{ na vizinhança} \qquad f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + o(\|y - x\|) \tag{11}$$

Onde $o : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ satisfaz $\lim_{t \to 0^+} \frac{o(t)}{t} = 0$

Apenas para relembrar, esse teorema está nos dando uma forma de aproximar uma função:

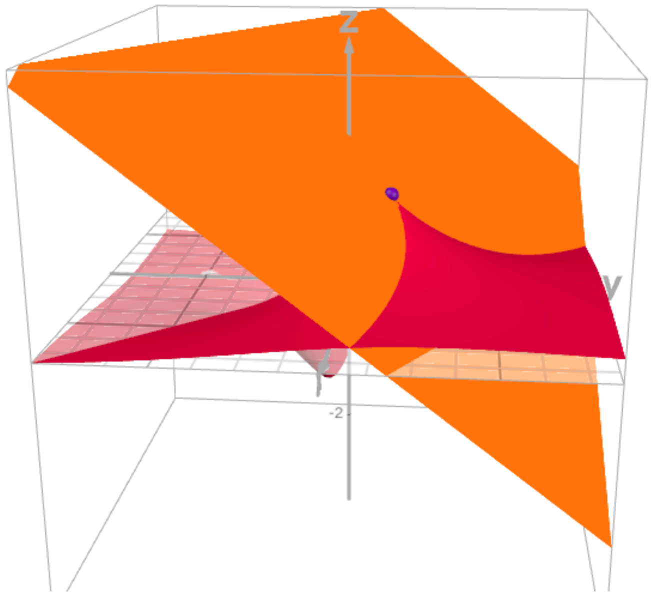

Figura 1: Função $f(x,y) = \frac{x+y}{x^2+y^2+1/5}$

Perceba que, próximo do ponto, a distância entre os pontos da curva e os do plano não são tão grandes, por isso que definimos a aproximação linear como mostrado anteriormente

Definição 1.2.6 (Funções duas vezes continuamente diferenciáveis): Podemos também expressar uma definição similar para uma função $f : C \to R$ definida num conjunto $C \subset \mathbb{R}^n$. Dizemos que $f : C \to R$ é duas continuamente diferenciável em C se existe $U \supset C$ conjunto aberto tal que existem todas derivadas parciais de primeira e segunda ordem em todo ponto $x \in U$ e, além disso, as funções $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} : U \to \mathbb{R}$ são contínuas

Definição 1.2.7 (Matriz Hessiana): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ com $U \subset \mathbb{R}$ e duas vezes continuamente diferenciável, a matriz hessiana de f no ponto $x \in U$ é definida como:

$$\nabla^2 f(x) := \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} \tag{12}$$

Perceba que $\nabla^2 f(x)$ é simétrica

Teorema 1.2.2 (Aproximação Linear): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ uma função duas vezes continuamente diferenciável e $U \subseteq \mathbb{R}^n$, e seja $x \in U$ e $r > 0$ tais que $B(x,r) \subset U$ então:

$$\begin{gathered} \forall y \in B(x,r)\ \exists \xi \in [x,y] \text{ tal que} \\ f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y-x) + \frac{1}{2}(y-x)^T \nabla^2 f(\xi)(y-x) \end{gathered} \tag{13}$$

Teorema 1.2.3 (Aproximação de Segunda Ordem): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ uma função duas vezes continuamente diferenciável e $U \subseteq \mathbb{R}^n$, e seja $x \in U$ e $r > 0$ tais que $B(x, r) \subset U$ então:

$$\begin{gathered}\forall y \in B(x, r) \text{ vale} \\ f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T \nabla^2 f(x)(y - x) + o(\|y - x\|^2)\end{gathered} \tag{14}$$

1.3 Soluções Locais: Condições de primeira ordem

Agora podemos começar a brincadeira. Quando falamos de condições de primeira ordem, estamos nos referindo a condições relacionadas a derivadas de primeiro grau, ou seja, funções que são continuamente diferenciáveis. Antes eu comentei que estávamos interessados em minimizar funções num conjunto C, porém, vamos primeiro ver sobre otimização **irrestrita**, ou seja, problemas do tipo:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{15}$$

Lembram que o vetor gradiente indica a direção que minha função tá crescendo? Quando estamos procurando um mínimo local, faz sentido dizer que a função cresça pra todos os lados, correto? Então faz sentido dizer que isso vai me dar um vetor gradiente 0 (Apenas uma intuição)

Teorema 1.3.1 (Condições de primeira ordem): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ uma função definida no conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Se $x^* \in U$ é um mínimo local de f e todas as derivadas parciais de f existem, então

$$\nabla f(x^*) = 0 \tag{16}$$

Demonstração: Seja $i \in [n]$ e defina a função $g(t) = f(x^* + te_i$. Temos que g é diferenciável em 0 e $g'(0) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x^*)$. Sendo x^* um ponto ótimo local de f , segue que 0 é um ponto ótimo local de g; portanto $0 = g'(0) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x^*)$. O argumento vale para todo $i \in [n]$, implicando que $\nabla f(x^*) = 0$ □

Esse teorema não vale na volta, já que, como vimos antes em cálculo, pontos de máximo e de sela também possuem essa característica, isso nos leva a criar a definição:

Definição 1.3.1 (Ponto estacionário): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ uma função definida no conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ e todas as derivadas parciais de f existem, então chamamos $x^* \in U$ de ponto estacionário de f em U se

$$\nabla f(x^*) = 0 \tag{17}$$

1.4 Soluções Locais: Condições de segunda ordem

Nas anotações, o professor generaliza o conceito de que, se x é estacionário e $f''(x) > 0$ então x é mínimo local.

Definição 1.4.1 (Positividade e Negatividade de uma matriz): Seja A uma matriz simétrica:

- Dizemos que A é positiva semidefinida, denotando-s por $A \succeq 0 \Leftrightarrow \forall x \in \mathbb{R}^n,\ x^T A x \geq 0$
- Dizemos que A é positiva definida, denotando-s por $A \succ 0 \Leftrightarrow \forall x \in \mathbb{R}^n,\ x^T A x > 0$
- Dizemos que A é negativa semidefinida, denotando-s por $A \preceq 0 \Leftrightarrow \forall x \in \mathbb{R}^n,\ x^T A x \leq 0$
- Dizemos que A é negativa definida, denotando-s por $A \prec 0 \Leftrightarrow \forall x \in \mathbb{R}^n,\ x^T A x < 0$
- Dizemos que A é indefinida, quando $\exists x, y \in \mathbb{R}^n$ tal que $x^T A x > 0$ e $y^T A y < 0$

Nas anotações do professor ele traz alguns conceitos que vimos em álgebra linear, mas eu não vou os abordar aqui.

Teorema 1.4.1 (Condições necessárias de segunda ordem): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ com $U \subset \mathbb{R}^n$ e suponha que f é duas vezes continuamente diferenciável sobre U e seja $x^* \in U$, então:

1. Se x^* é mínimo local, então $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$
2. Se x^* é máximo local, então $\nabla^2 f(x^*) \preceq 0$

Demonstração: Vamos apenas provar o item 1 já que a prova para o 2 é análoga (Basta aplicar a demonstração na função $-f$).

Sendo x^* um ponto de mínimo local, $\exists B(x^*, r) \subset U$ tal que:

$$\forall x \in B(x^*, r) \qquad f(x) \geq f(x^*) \tag{18}$$

Seja $0 \neq d \in \mathbb{R}^n$. Para todo $0 < \alpha < \frac{r}{\|d\|}$, vamos definir:

$$x^*_\alpha := x^* + \alpha d \tag{19}$$

$$x^*_\alpha \in B(x^*, r) \Rightarrow f(x^*_\alpha) \geq f(x^*) \tag{20}$$

Pelo Teorema 1.2.2, $\exists \xi_\alpha \in [x^*, x^*_\alpha]$ tal que

$$f(x^*_\alpha) - f(x^*) = \nabla f(x^*)^T (x^*_\alpha - x^*) + \frac{1}{2}(x^*_\alpha - x^*)^T \nabla^2 f(\xi_\alpha)(x^*_\alpha - x^*) \tag{21}$$

Como x^* é estacionário, temos:

$$f(x^*_\alpha) - f(x^*) = \frac{\alpha^2}{2} d^T \nabla^2 f(\xi_\alpha) d \tag{22}$$

Combinando as equações (18) e (22), temos que, para todo $\alpha \in \left(0, \frac{r}{\|d\|}\right)$:

$$d^T \nabla^2 f(\xi_\alpha) d \geq 0 \tag{23}$$

Usando de que $\xi_\alpha \to x^*$ quando $\alpha \to 0^+$ e por continuidade da Hessiana, segue:

$$d^T \nabla^2 f(x^*) d \geq 0 \tag{24}$$

Isso é válido pois eu assumi um d genérico $\square$

Perceba que essa condição é necessária, mas não é suficiente. Por exemplo, a função $f(x) = x^3$ é tal que $f'(0) = 0$, $f''(0) = 0$, porém, não é um ponto de máximo nem de mínimo.

Teorema 1.4.2 (Condições suficientes de segunda ordem): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ com $U \subset \mathbb{R}^n$ e suponha que f é duas vezes continuamente diferenciável sobre U e seja $x^* \in U$ um ponto estacionário de f em U, então:

- Se $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$ então x^* é um ponto de mínimo local estrito
- Se $\nabla^2 f(x^*) \prec 0$ então x^* é um ponto de máximo local estrito

Demonstração: Provaremos apenas o primeiro item. O segundo segue do primeiro aplicado em $-f$

Seja $x^* \in U$ um ponto estacionário de f em U tal que $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$. Como a Hessiana é contínua, segue que $\exists B(x^*, r) \subset U$ tal que $\nabla^2 f(x^*) \succ 0 \ \forall x \in B(x^*, r)$. Pelo Teorema 1.2.2, segue que $\forall x \in B(x^*, r) \ \exists \xi \in [x^*, x] \subset B(x^*, r)$ tal que:

$$f(x) - f(x^*) = \nabla f(x^*)^T (x - x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^T \nabla^2 f(\xi)(x - x^*) \tag{25}$$

Como x^* é estacionário, $\nabla f(x^*) = 0$. Segue também que $\nabla^2 f(\xi) \succ 0 \ \forall x \in B(x^*, r)$. Isso significa que

$$\forall x \neq x^*, \qquad f(x) > f(x^*) \tag{26}$$

Ou seja, x^* é mínimo local estrito $\square$

Para clarear um pouco sobre a demonstração, os passos mais confusos pode ser a conclusão final. Principalmente essa conclusão $\nabla^2 f(\xi) \succ 0$. Vamos tentar abstrair isso isso com $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$. Pega um ponto de mínimo estrito local, e faz uma bola em volta dele, todo ponto dentro daquele lugar vai ter hessiana positiva por conta da continuidade da Hessiana. Como assim? Imagina que a Hessiana é uma função $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$, como ela é uma função contínua, não faz sentido eu mudar a entrada da função e ela bruscamente trocar de positivo pra negativo, certo? Claro que em um certo ponto, ela passa pelo 0 e o sinal troca, mas eu consigo aumentar minha bola até um pouquinho antes disso acontecer

Figura 2: Desenho de domínio qualquer de uma função f

A partir dessa linha amarela, os pontos vão ter hessiana negativa e, em cima dela, eles tem hessiana igual a 0, ou seja, então eu consigo criar uma bola $B(x^*, r)$ de forma que ela não ultrapasse a linha amarela

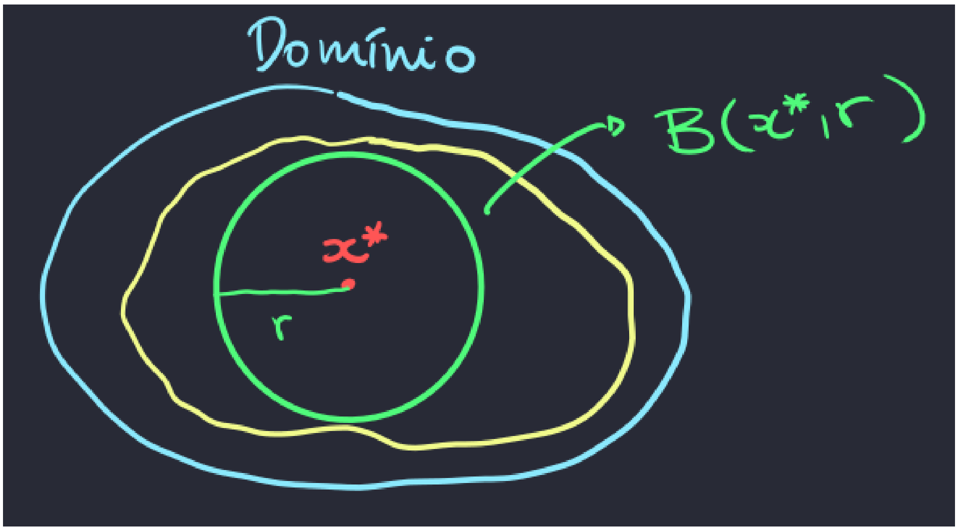

Figura 3: Desenho de domínio qualquer de uma função f com uma bola B

Ou seja, eu sei que todos os pontos dentro dessa bola tem Hessiana positiva. Depois disso, eu apenas utilizo do Teorema 1.2.2 para chegar na desigualdade $f(x) > f(x^*)$

Um teorema parecido pode ser usado para pontos que tem gradiente 0, mas que não são nem máximo nem mínimo (Como vimos em $f(x) = x^3$)

Definição 1.4.2 (Ponto de Sela): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ definida num conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Suponha que f é duas vezes continuamente diferenciável. $x^* \in U$ é ponto de sela de f em U se ele é um ponto estacionário, mas não é nem ponto de máximo nem ponto de mínimo

Teorema 1.4.3 (Condições suficientes para pontos de sela): Seja $f : U \to \mathbb{R}$ com $U \subset \mathbb{R}^n$ e suponha que f é duas vezes continuamente diferenciável sobre U e seja $x^* \in U$ um ponto estacionário de f em U, se $\nabla^2 f(x^*)$ é indefinda, então x^* é ponto de sela

Demonstração: Seja $\nabla^2 f(x^*)$ é indefinida. Portanto, $\nabla^2 f(x^*)$ possui auto-valor positivo λ_1 associado ao auto-vetor v_1 com norma $\|v_1\| = 1$. Sendo U aberto, existe $r > 0$ tal que $x^* + \alpha v_1 \in U$ para todo $\alpha \in (0, r)$. Pelo Teorema 1.2.3 e usando que $\nabla f(x^*) = 0$, sabemos que existe uma função $o : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ satisfazendo:

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{o(t)}{t} = 0 \tag{27}$$

tal que para todo $\alpha \in (0, r)$:

$$\begin{aligned} f(x^* + \alpha r) &= f(x^*) + \frac{\alpha^2}{2} v_1^T \nabla^2 f(x^*) v_1 + o(\alpha^2 \ \|v_1\|^2) \\ &= f(x^*) + \frac{\lambda_1 \alpha^2}{2} \ \|v_1\|^2 + o(\alpha^2 \ \|v_1\|^2) \\ &= f(x^*) + \frac{\lambda_1 \alpha^2}{2} + o(\alpha^2) \end{aligned} \tag{28}$$

Segue da equação (27) que $\exists \varepsilon_1 \in (0, r)$ tal que:

$$\forall \alpha \in (0, \varepsilon_1), \qquad g(\alpha^2) > -\frac{\lambda_1 \alpha^2}{2} \tag{29}$$

Portanto,

$$\forall \alpha \in (0, \varepsilon_1), \qquad f(x^* + \alpha v_1) > f(x^*) \tag{30}$$

Ou seja, x^* não pode ser máximo local sobre U. Um argumento análogo dizendo que $\exists \lambda_2 < 0$ sendo λ_2 um autovalor da hessiana pode ser usado para mostrar que x^* também não pode ser mínimo local $\square$

Essa prova parece complicada, então vou dar uma noção mais intuitiva. Vimos em álgebra linear que uma matriz é positiva definida se, e somente se, todos os seus autovalores são maiores que 0 (O mesmo para matrizes negativas definidas), e que se elas possuem um autovalor positivo e outro negativo, então ela é indefinida. Mas o que isso me diz intuitivamente? Lembra que, se uma matriz tem multiplicidade algébrica igual a multiplicidade geométrica em todos os autovalores, então a gente pode dividir ela como:

$$\nabla^2 f(x) = Q^T \Lambda Q \tag{31}$$

Q é ortogonal pois $\nabla^2 f(x)$ é simétrica (Teorema Espectral). Mas o que isso significa? De uma maneira intuitiva, isso significa que os autovetores indicam direções ortogonais e o autovalor indica se a hessiana está crescendo ou diminuindo **naquela direção**, então se ela é indefinida em um ponto de sela, quer dizer que eu tenho direções que a hessiana tanto cresce como diminui, como ela cresce e diminui em direções diferentes partindo do mesmo ponto, ele não é nem máximo, nem mínimo

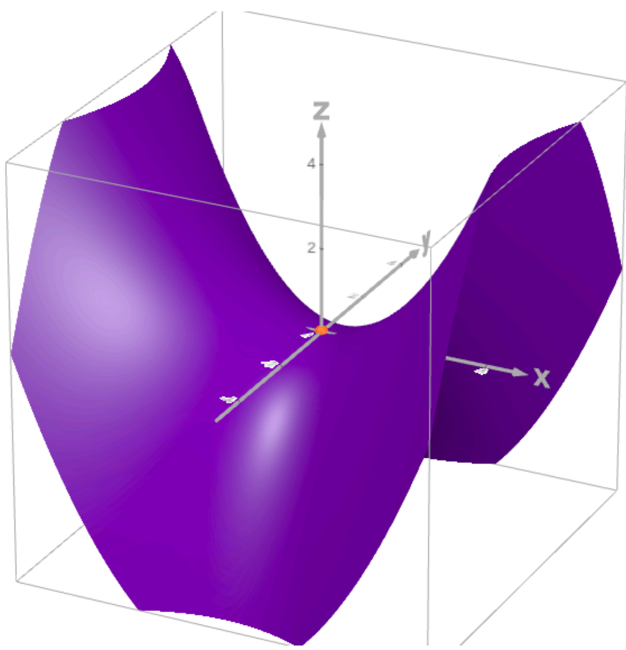

Figura 4: Função $f(x, y) = ax^2 + by^2$. Ponto laranja é ponto de sela (Ponto (0,0,0))

1.5 Existência de pontos ótimos

Até agora estávamos assumindo que pontos ótimos existiam, mas e se eles não existem?

Definição 1.5.1 (Conjunto fechado): Um conjunto C é fechado se seu complementar C^c é aberto

Definição 1.5.2 (Conjunto limitado): Um conjunto C é limitado se $\exists r > 0$ tal que $C \subset B(0, r)$

Definição 1.5.3 (Conjunto compacto): Um conjunto C é compacto se é fechado e limitado

Teorema 1.5.1 (Weierstrass): Seja $C \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto compacto e $f : C \to \mathbb{R}$, então f possui um ponto de mínimo global e de máximo global em C

Quando o conjunto não é compacto, o teorema de Weierstrass não garante a existência, então podemos usar essa outra definição:

Definição 1.5.4 (Coercividade): Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. A função é dita coerciva se:

$$\lim_{\|x\| \to \infty} = \infty \tag{32}$$

Ou seja, todo e qualquer vetor que eu pegar e aumentar seu tamanho, a função aumenta junto, formando o que parece uma grande bacia, onde você coloca água e ela nunca vaza

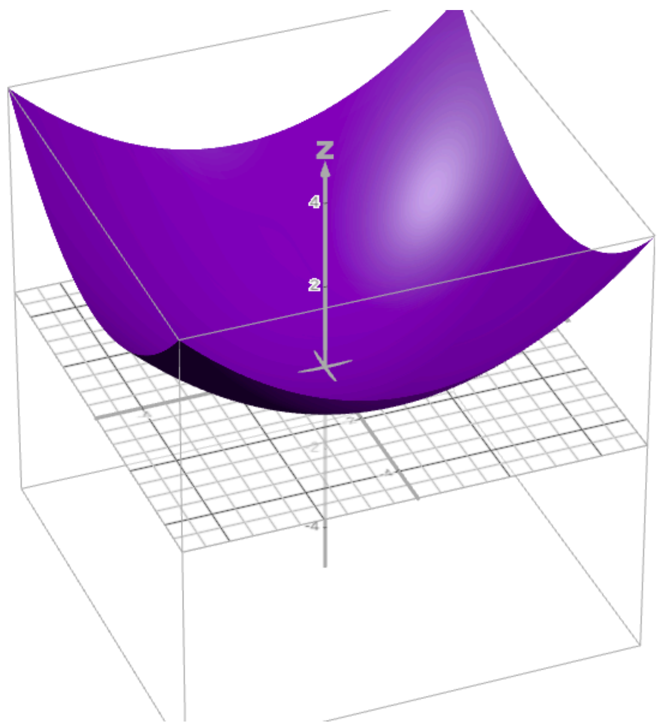

Figura 5: Exemplo de função coerciva $f(x, y) = 0.1x^2 + 0.1y^2$

Teorema 1.5.2 (Existência de soluções: Coercividade): Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função contínua e coerciva e $C \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto fechado não-vazio. Então f tem um mínimo global em C

Demonstração: Seja $x_0 \in C$ um ponto arbitrário. Como f é coerciva, segue que existe $M > 0$ tal que

$$f(x) > f(x_0) \text{ para todo } x \text{ tal que } \|x\| > M \tag{33}$$

Temos que x^* é um ponto de mínimo global de f sobre C. Portanto $f(x^*) \geq f(x_0)$. Segue da afirmação em diplay que o conjunto de mínimos globais de f sobre C é exatamente o conjunto de mínimos globais de f sobre $C \cap B(0, M)$. O conjunto $C \cap B(0, M)$ é fechado e limitado, portanto compacto. Segue do Teorema de Weierstrass que f possui ponto de mínimo global sobre $C \cap B(0, M)$, e portanto, sobre C também □

1.6 Condições para soluções globais

Teorema 1.6.1: Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ duas vezes continuamente diferenciável. Suponha que:

$$\nabla^2 f(x) \succeq 0,\ \ \forall x \in \mathbb{R}^n \tag{34}$$

Então, em todo ponto estacionário de f, esse ponto é um mínimo global

Demonstração: Pelo Teorema 1.2.2, seja $x^* \in \mathbb{R}^n$ um ponto estacionário em f e $\forall x \in \mathbb{R}^n$:

$$f(x) - f(x^*) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T \nabla^2 f(\xi)(x - x^*) \tag{35}$$

Porém, vale que $\forall x,\ \ \nabla^2 f(\xi) \succeq 0$. Temos então que:

$$\forall x \in \mathbb{R}^n,\ \ f(x) \geq f(x^*) \tag{36}$$

Logo, x^* é ponto de mínimo global em f □

1.7 Funções quadráticas

Um conjunto interessante de funções com algumas propriedades convenientes são as funções quadráticas

Definição 1.7.1 (Função quadrática): Uma função é quadrática quando $\exists A \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ simétrica}, b \in \mathbb{R}^n, c \in \mathbb{R}$ tal que a função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ pode ser expressa como:

$$f(x) = x^T A x + 2b^T x + c \tag{37}$$

Teorema 1.7.1 (Derivadas de uma quadrática): Seja f uma função quadrática como na Definição 1.7.1, temos que:

$$\begin{gathered} \nabla f(x) = 2(Ax + b) \\ \nabla^2 f(x) = 2A \end{gathered} \tag{38}$$

Demonstração: Sabemos que $f(x) = x^T A x + 2b^T x + c$. Vamos definir que x_i é a i-ésima entrada de x. Vamos primeiro calcular uma derivada parcial genérica de f. Como a derivada é uma operação linear, eu vou ver cada componente separadamente.

$$x^T A x = (x_1\ \ ...\ \ x_n) \begin{pmatrix} a_{11} & ... & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & ... & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = (x_1\ \ ...\ \ x_n) \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n a_{1k} x_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^n a_{nk} x_k \end{pmatrix} \tag{39}$$

Para facilitar nossa vida, vamos definir

$$\alpha_j = \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k \tag{40}$$

. Então:

$$f(x) = \alpha_1 x_1 + ... + \alpha_n x_n + 2(b_1 x_1 + ... + b_n x_n) + c \tag{41}$$

Agora podemos tirar a derivada de $f(x)$ em x_j, mas antes, perceba que:

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial x_j} = a_{ij} \tag{42}$$

Agora sim:

$$\begin{gathered} \frac{\partial f}{\partial x_j} = x_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial \alpha_j} + ... + \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_j x_j) + ... + x_n \frac{\partial \alpha_n}{\partial x_j} + 2b_j \\ \frac{\partial f}{\partial x_j} = x_1 a_{1j} + ... + \frac{\partial \alpha_j}{\partial x_j} x_j + \alpha_j + ... + x_n a_{nj} + 2b_j \\ \frac{\partial f}{\partial x_j} = \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_k + \sum_{k=1}^{n} a_{kj} x_k + 2b_j \end{gathered} \tag{43}$$

Como A é simétrica, podemos reescrever isso como:

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = 2\left(\sum_{k=1}^{n} a_{kj} x_k + b_j\right) \tag{44}$$

Ou seja, o gradiente da função é:

$$\nabla f(x) = 2(Ax + b) \tag{45}$$

E para a hessiana é bem mais fácil, dado o item anterior, basta que tiremos a derivada novamente para x_i:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} = 2a_{ij} \tag{46}$$

Ou seja:

$$\nabla^2 f(x) = 2A \tag{47}$$

□

Teorema 1.7.2 (Pontos estacionários e ótimos de função quadrática): Seja uma função f definida na Definição 1.7.1, então:

1. x é ponto estacionário $\Leftrightarrow Ax = -b$.
2. Suponha que $A \succeq 0$. Então x é ponto de mínimo global $\Leftrightarrow Ax = -b$.
3. Suponha que $A \succ 0$. Então $x = -A^{-1}b$ é ponto de mínimo global estrito.

Demonstração:

1. Segue imediatamente da fórmula do gradiente.

2. Suponha que $A \succeq 0$. Da formula da Hessiana, segue que $\nabla^2 f(x) \succeq 0 \ \forall x \in \mathbb{R}^n$. O resultado segue então do Teorema 1.6.1 e item 1.
3. Suponha que $A \succ 0$. Então $x = -A^{-1}b$ é a única solução de $Ax = -b$. Segue do item (ii) que $x = -A^{-1}b$ é o único ponto de mínimo global de f e, portanto, mínimo global estrito.

□

Teorema 1.7.3 (Coercividade de funções quadráticas): Seja função f definida como na Definição 1.7.1. Então f é coerciva $\Leftrightarrow A \succ 0$.

Demonstração: Precisamos do seguinte lema: Seja $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simétrica, então $\forall x \neq 0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$

$$\lambda_{\min}(A) \leq \frac{x^T A x}{\|x\|^2} \leq \lambda_{\max}(A) \tag{48}$$

(Pode-se demonstrar pelo teorema espectral)

Agora podemos começar a prova:

$(\Longleftarrow)$ Suponha que $A \succ 0$. Denote $\alpha := \lambda_{\min}(A)$. Pelo lema àcima e Cauchy-Schwarz, segue que, para todo $x \in \mathbb{R}^n$,

$$f(x) = x^T A x + 2b^T x + c \geq \alpha \ \|x\|^2 - 2\|b\|\|x\| + c \tag{49}$$

Segue que $f(x) \to \infty$ quando $\|x\| \to \infty$; isto é, f é coerciva.

$(\Longrightarrow)$ Suponha que f é coerciva. Suponha que A tenha auto-valores negativos. Portanto, existem $v \neq 0$ e $\lambda < 0$ tais que $Av = \lambda v$. Portanto, para todo $\alpha \in \mathbb{R}$,

$$f(\alpha v) = \lambda \|v\|^2 \ \alpha^2 + 2(b^T v)\alpha + c \to \infty \text{ quando } \alpha \to \infty \tag{50}$$

Isto contradiz a hipótese de coercividade. Portanto, A possui todos auto-valores não-negativos. Provaremos agora que 0 não é auto-valor de A, provando que $A \succ 0$. Assuma que exista $\not{v} = 0$ tal que $Av = 0$. Então, para todo $\alpha \in \mathbb{R}$,

$$f(\alpha v) = 2(b^T v)\alpha + c. \tag{51}$$

Temos que:

$$f(\alpha v) \to \begin{cases} c \text{ quando } \alpha \to \infty \text{ se } b^T v = 0 \\ -\infty \text{ quando } \alpha \to -\infty \text{ se } b^T v > 0 \\ \infty \text{ quando } \alpha \to \infty \text{ se } b^T v < 0 \end{cases} \tag{52}$$

Em qualquer caso a coerção é violada, portanto, 0 não pode ser autovalor de A □

Otimização Convexa

Agora vamos focar os nossos esforços em resolver um conjunto específico de problemas de otimização, os do tipo:

$$\min_{x \in C} f(x) \qquad C \subseteq \mathbb{R}^n \text{ convexo} \tag{53}$$

Ou seja, agora começaremos a aplicar as famosas restrições nos problemas que vamos abordar

2.1 Convexidade

Definição 2.1.1 (Conjunto convexo): Um conjunto $C \subseteq \mathbb{R}^n$ é dito convexo se

$$\forall x, y \in C \land \forall \lambda \in (0,1) \text{ vale } \lambda x + (1-\lambda)y \in C \tag{54}$$

Ou seja, se eu pego dois pontos dentro do conjunto C e fizer uma reta que interliga eles, todos os pontos nessa reta devem estar dentro de C

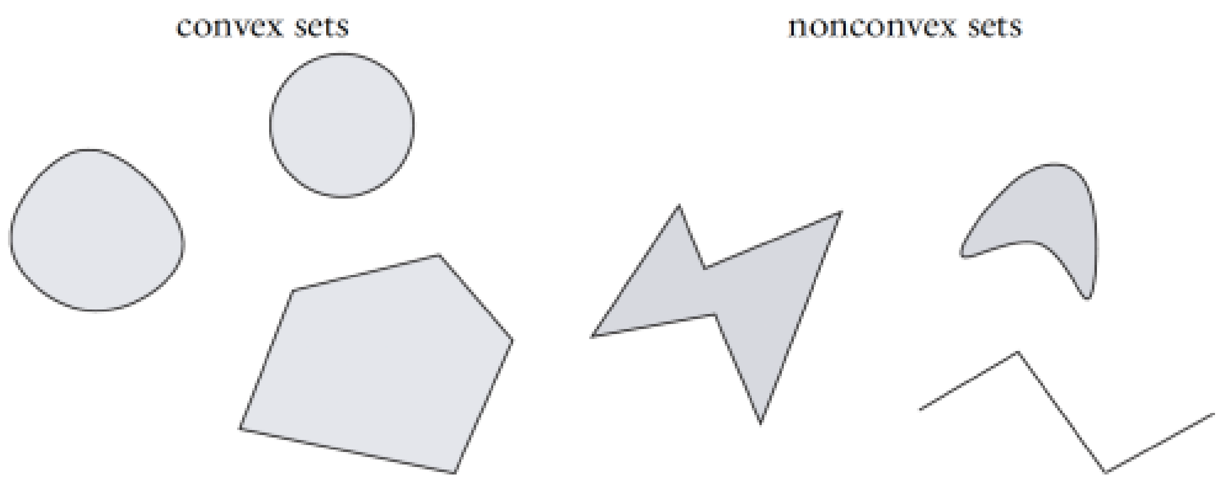

Figura 6: Exemplo de figuras convexas e não-convexas retirado das anotações do professor

Porém, outra definição muito importante são as de **funções convexas**

Definição 2.1.2 (Funções convexas): Uma função $f : C \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com C convexo é dita convexa se:

$$\forall x, y \in C \land \forall \lambda \in (0,1) \text{ vale } f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) \tag{55}$$

Definição 2.1.3 (Funções estritamente convexas): Uma função $f : C \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com C convexo é dita estritamente convexa se:

$$\forall x, y \in C \land \forall \lambda \in (0,1) \text{ vale } f(\lambda x + (1-\lambda)y) < \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) \tag{56}$$

Mas o que isso quer dizer? Quer dizer que eu vou pegar o segmento entre meus pontos x e y e vou aplicar a função neles, depois eu vou pegar o segmento de reta entre $f(x)$ e $f(y)$ e comparar. Todos os pontos nesse segmento de reta tem que estar acima dos pontos da curva que eu fiz antes

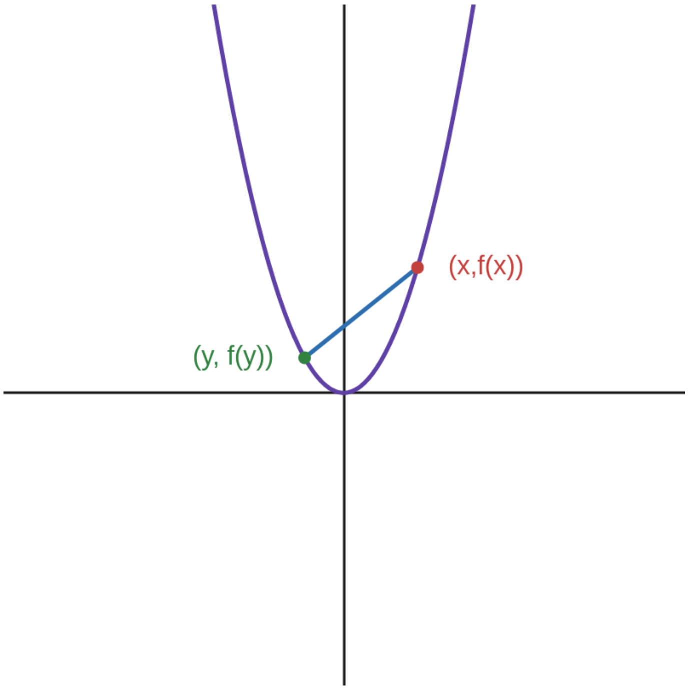

Figura 7: Função convexa $f(x) = x^2$

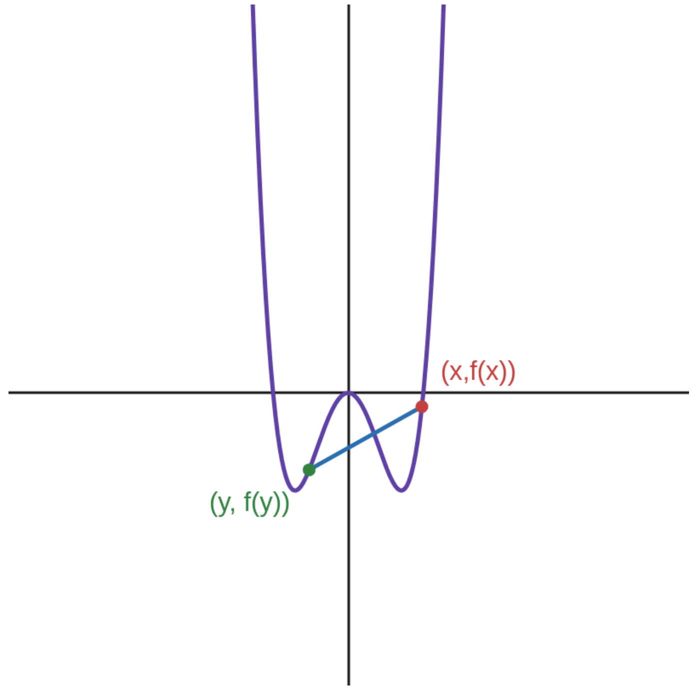

Figura 8: Função não-convexa $f(x) = x^4 - 3x^2$

Antes de continuar, vamos definir um conjunto simplex, que utilizaremos bastante daqui pra frente:

Definição 2.1.4 (Conjunto simplex): O conjunto simplex Δ_k é definido como:

$$\Delta_k := \left\{ \lambda \in \mathbb{R}_+^k / \sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 1 \right\} \tag{57}$$

Existe um teorema que mostra que isso vale não só para a combinação de dois pontos, mas para a combinação de quaisquer n pontos

Teorema 2.1.1 (Teorema de Jenssen): Seja $f : C \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, com C convexo, uma função convexa. Então dados quais quer coleção $\{x_i\}_{i=1}^k \subset C$ de pontos de C e qualquer $\lambda \in \Delta_k$:

$$f\left(\sum_{i=1}^{k} \lambda_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^{k} \lambda_i f(x_i) \tag{58}$$

Demonstração: Faremos por indução. O caso base $k = 1$ é bem óbvio. Agora vamos supor que vale para k. Sejam $\{x_i\}_{i=1}^{k+1} \subset C$ e $\lambda \in \Delta_{k+1}$. Para facilitar, definamos:

$$z := \sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i x_i \tag{59}$$

Se $\lambda_{k+1} = 1$, então $\sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 0$; Como $\lambda_i \geq 0 \ \forall i \in [k]$, tem-se que $\lambda_i = 0$. Nesse caso, $x_{k+1} = z$ e a desigualdade é imediata Se $\lambda_{k+1} < 1$. Nesse caso,

$$z = \lambda_{k+1} x_{k+1} \sum_{i=1}^{k} \lambda_i x_i = \lambda_{k+1} x_{k+1} + (1 - \lambda_{k+1}) \underbrace{\sum_{i=1}^{k} \frac{\lambda_i}{1 - \lambda_{k+1}} x_i}_{v} \tag{60}$$

E é bem fácil de ver que

$$\sum_{i=1}^{k} \frac{\lambda_i}{1-\lambda_{k+1}} = 1 \tag{61}$$

Como C é convexo e $\{x_i\}_{i=1}^k \subset C$, então temos que:

$$\frac{1}{1-\lambda_{k+1}} \sum_{i=1}^{k} \lambda_i x_i \in C \tag{62}$$

Isso é um teorema que vou enunciar posteriormente e demonstrar também. Como $x_{k+1} \in C$, pela convexidade de f,

$$\begin{aligned} f(z) = f((1-\lambda_{k+1})v + \lambda_{k+1}x_{k+1}) &\leq (1-\lambda_{k+1})f(v) + \lambda_{k+1}f(x_{k+1}) \\ &= (1-\lambda_{k+1})f\left(\sum_{i=1}^{k} \frac{\lambda_i}{1-\lambda_{k+1}} x_i\right) + \lambda_{k+1}f(x_{k+1}) \\ &\leq (1-\lambda_{k+1})f\left(\sum_{i=1}^{k} \frac{\lambda_i}{1-\lambda_{k+1}} f(x_i)\right) + \lambda_{k+1}f(x_{k+1}) \\ &= \sum_{i=1}^{k+1} f(x_i) \end{aligned} \tag{63}$$

□

Teorema 2.1.2: Seja $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo, dados quaisquer coleção $\{x_i\}_{i=1}^k \subset C$ de pontos em C e qualquer $\lambda \in \Delta_k$, então:

$$\sum_{i=1}^{k} \lambda_i x_i \in C \tag{64}$$

Demonstração: Caso base: $k = 2$ é trivial. Vamos supor que vale para um determinado k, então:

$$\sum_{i=1}^{k} \mu_i x_i \in C \tag{65}$$

Para qualquer $\mu \in \Delta_k$. Já que esse ponto está em C, vamos pegar um novo vetor x_{k+1} ainda em C. Já que ambos os vetores estão em C e ele é convexo, vale:

$$\forall \alpha \in (0,1),\ \alpha \sum_{i=1}^{k} \mu_i x_i + (1-\alpha)x_{k+1} \in C \tag{66}$$

Porém, perceba que

$$\alpha \sum_{i=1}^{k} \mu_i + (1-\alpha) = \alpha + 1 - \alpha = 1 \tag{67}$$

Ou seja, se eu denotar $\lambda \in \mathbb{R}^{k+1}$ de tal forma que $\lambda_i = \alpha\mu_i$ para $i \in [k]$ e $\lambda_{k+1} = 1 - \alpha$ eu obtenho uma coleção de números tal que $\lambda \in \Delta_k$ e uma coleção $\{x_i\}_{i=1}^{k+1}$ tal que:

$$\sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i x_i \in C \tag{68}$$

□

2.1.1 Caracterização de convexidade de primeira ordem

Funções convexas podem ser não-diferenciáveis. Funções convexas diferenciáveis possuem uma caracterização importante: hiperplanos tangentes ao seu gráfico são sempre estimativas abaixo da função.

Teorema 2.1.1.1 (Desigualdade do gradiente): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com C convexa e f continuamente diferenciável, então:

$$f \text{ convexa} \Leftrightarrow \forall x, y \in C,\ \ f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) \leq f(y) \tag{69}$$

Demonstração: $(\Longrightarrow)$ Suponha que f seja convexa. Sejam $x, y \in C \wedge \lambda \in [0, 1]$. A desigualdade enunciada vale trivialmente se $x = y$. Iremos então assumir que $x \neq y$. Da convexidade de f,

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \tag{70}$$

implicando que

$$\frac{f(x + \lambda(y - x)) - f(x)}{\lambda} \leq f(y) - f(x) \tag{71}$$

Tomando $\lambda \to 0^+$, obtemos

$$f'(x; y - x) = \lim_{\lambda \to 0^+} \frac{f(x + \lambda(y - x)) - f(x)}{\lambda} \leq f(y) - f(x) \tag{72}$$

Como f é continuamente diferenciável, $f'(x; y - x) = \nabla f(x)^T (y - x)$ e a desigualdade segue.

$(\Longleftarrow)$ Assuma que a desigualdade vale. Sejam $x, y \in C$ e $\lambda \in (0, 1)$. Defina $z = \lambda x + (1 - \lambda)y$. Temos:

$$x - z = z - (1 - \lambda)y - z = (1 - \lambda)(\lambda)(y - z) \tag{73}$$

À seguir, usaremos a desigualdade nos pares (x, z) e (y, z). Temos

$$f(z) + \nabla f(z)^T (x - z) \leq f(x) \tag{74}$$

$$f(z) + \nabla f(z)^T (y - z) \leq f(y) \tag{75}$$

Multiplicando-se a primeira desigualdade por $(\lambda)(1 - \lambda)$ e usando a igualdade na segunda desigualdade, obtemos

$$\frac{\lambda}{1 - \lambda} f(z) + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \nabla f(z)^T (x - z) \leq \frac{\lambda}{1 - \lambda} f(x) \tag{76}$$

$$f(z) - \frac{\lambda}{1 - \lambda} \nabla f(z)^T (x - z) \leq f(y) \tag{77}$$

Somando-se as duas desigualdades acima obtemos

$$\frac{\lambda}{1-\lambda}f(z) + f(z) \leq \frac{\lambda}{1-\lambda}f(x) + f(y) \tag{78}$$

Isto é

$$f(z) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) \tag{79}$$

Segue que f é convexa □

Teorema 2.1.1.2 (Desigualdade do gradiente estrito): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com C convexa e f continuamente diferenciável, então:

$$f \text{ estritamente convexa} \Leftrightarrow \forall x, y \in C,\ \ f(x) + \nabla f(x)^T(y-x) < f(y) \tag{80}$$

Demonstração: Anáogo ao Teorema 2.1.1.1 □

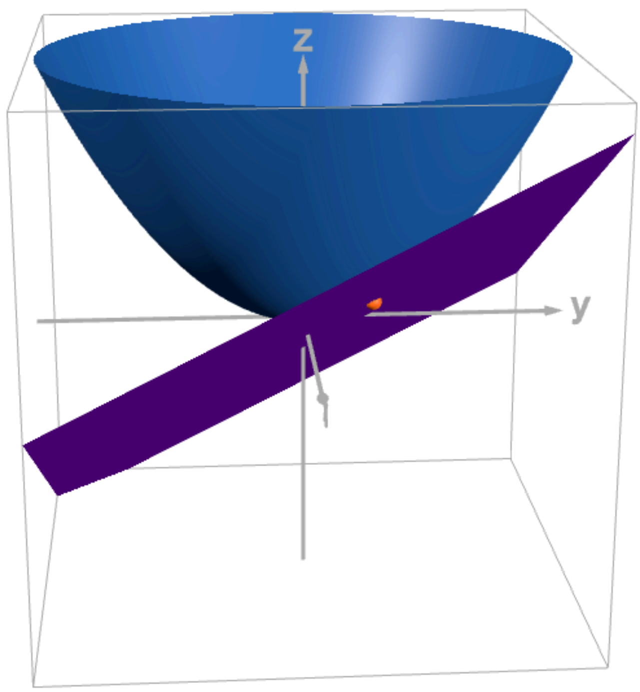

Figura 9: Função $f(x, y) = 1.3x^2 + 1.27y^2$ e um plano tangente à curva

A gente pode usar os teoremas anteriores pra caracterizar as funções quadráticas e quando elas são convexas

Teorema 2.1.1.3 (Convexidade da quadrática): Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função quadrática:

$$f(x) = x^T Ax + 2b^T x + c \tag{81}$$

Onde A é simétrica. Então:

$$f \text{ (estritamente) convexa} \Leftrightarrow A \succeq 0 (A \succ 0) \tag{82}$$

Demonstração: A prova para o caso Pelo Teorema 2.1.1.1 e sabendo que $\nabla f(x) = 2(Ax + b)$, temos que f é convexa $\Leftrightarrow$

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n, y^T Ay + 2b^T y + c \geq x^T Ax + 2b^T x + c + 2(Ax + b)^T(y - x) \tag{83}$$

Rearranjando, obtemos:

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n (y-x)^T A(y-x) \geq 0 \Rightarrow A \succeq 0 \tag{84}$$

□

Teorema 2.1.1.4 (Monotonicidade do gradiente): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continuamente diferenciável, então:

$$f \text{ convexa em } C \Leftrightarrow \forall x, y \in C,\ (\nabla f(x) - \nabla f(y))^T (x-y) \geq 0 \tag{85}$$

Demonstração: $(\Longrightarrow)$ Assuma que f é convexa sobre C. Por Teorema 2.1.1.1:

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f(y) + \nabla f(y)^T (x-y) \\ f(y) &\geq f(x) + \nabla f(x)^T (y-x) \end{aligned} \tag{86}$$

Somando ambas as igualdades, obtemos (85)

$(\Longleftarrow)$ Suponha que (85) seja válida e sejam $x, y \in C$, vamos definir a função:

$$g(t) \coloneqq f(x + t(y-x)), \qquad t \in [0,1] \tag{87}$$

Pelo Teorema Fundamental do Cálculo:

$$\begin{gathered} f(y) = g(1) = g(0) + \int_0^1 g'(t) \,\mathrm{d}t \\ = f(x) + \int_0^1 (y-x)^T \nabla f(x - t(y-x)) \,\mathrm{d} \\ = f(x) + (y-x)^T \nabla f(x) + \int_0^1 (y-x)^T (\nabla f(x - t(y-x)) - \nabla f(x)) \,\mathrm{d} \\ = f(x) + (y-x)^T \nabla f(x) + \frac{1}{t} \int_0^1 t(y-x)^T (\nabla f(x - t(y-x)) - \nabla f(x)) \,\mathrm{d} \\ \geq f(x) + (y-x)^T \nabla f(x) \end{gathered} \tag{88}$$

Onde utilizamos (85) na última desigualdade □

2.1.2 Caracterizações de convexidade de segunda ordem

Teorema 2.1.2.1 (Caracterização de convexidade de segunda ordem): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ duas vezes continuamente diferenciável sobre um conjunto convexo C, então:

$$f \text{ convexa em } C \Leftrightarrow \forall x \in C,\ \nabla^2 f(x) \succeq 0 \tag{89}$$

Demonstração: $(\Longleftarrow)$ Suponha que $\nabla^2 f(x) \succeq 0$ para todo $x \in C$. Sejam $x, y \in C$. Pelo teorema de aproximação linear, existe $\xi \in [x, y] \subset C$ tal que

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y-x) + (y-x)^T \nabla^2 f(\xi)(y-x) \tag{90}$$

Como $\nabla^2 f(\xi) \succeq 0$, segue que

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) \tag{91}$$

Como o argumento vale para todo $x, y \in C$, provamos que f e convexa em C pelo Teorema 2.1.1.1.

($\Longrightarrow$) Suponha que f é convexa em C. Sejam $x \in C$ e $d \in \mathbb{R}^n$ com $\|d\| = 1$. Sendo C aberto, existe $\varepsilon > 0$ tal que $x + \lambda d \in C$ para todo $0 < \lambda < \varepsilon$. Para tal λ, segue do Teorema 2.1.1.1

$$f(x + \lambda d) \geq f(x) + \lambda \nabla f(x)^T d \tag{92}$$

Além disso, pelo teorema de aproximação quadrática:

$$f(x + \lambda d) = f(x) + \lambda \nabla f(x)^T d + \frac{\lambda^2}{2} d^T \nabla^2 f(x) d + o(\lambda^2 \ \|d\|^2) \tag{93}$$

Combinando as expressões, obtemos, para todo $\lambda \in (0, \varepsilon)$

$$\frac{\lambda^2}{2} d^T \nabla^2 f(x) d + o(\lambda^2) \geq 0 \tag{94}$$

Isso é:

$$d^T \nabla^2 f(x) d + \frac{o(\lambda^2)}{\lambda^2} \geq 0 \tag{95}$$

Fazendo com que $\lambda \to 0$, temos:

$$d^T \nabla^2 f(x) d \geq 0 \tag{96}$$

Ou seja, $\nabla^2 f(x) \succeq 0, \ \forall x$ $\square$

Teorema 2.1.2.2 (Caracterização de convexidade de segunda ordem): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ duas vezes continuamente diferenciável sobre um conjunto convexo C, então:

$$\forall x \in C, \ \nabla^2 f(x) \succ 0 \Rightarrow f \text{ estritamente convexa em } C \tag{97}$$

A volta na questão anterior não vale, por exemplo, $f(x) = x^4$ tem mínimo em 0, mas $f''(0) = 0$

2.1.3 Convexidade forte

Vimos o conceito de convexidade aplicando a condição de pontos numa reta estarem acima da curva da função. Mas e se uma forma mais curvada ainda tivesse em cima da função?

Definição 2.1.3.1 (Convexidade forte): Uma função $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com C convexo é μ-fortemente convexa (μ > 0) se:

$$\begin{gathered} \forall x, y \in C \wedge \forall \lambda \in [0, 1], \\ f(\lambda x + (1 - \lambda) y) + \frac{\mu}{2} \lambda (1 - \lambda) \ \|y - x\|^2 \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda) f(y) \end{gathered} \tag{98}$$

Mas o que diabos isso significa? A gente agora, em vez de checar se os pontos na reta $t(x, f(x)) + (1 - t)(y, f(y))$ $(t \in [0, 1])$, imagine que tem uma cordinha entre esses dois pontos, a gravidade vai afetar ela e ela vai ficar curvada, e μ dita o quão curvada a cordinha está. Se os pontos nessa cordinha estão acima da curva para todos os pontos na curva, então a função é μ-fortemente convexa

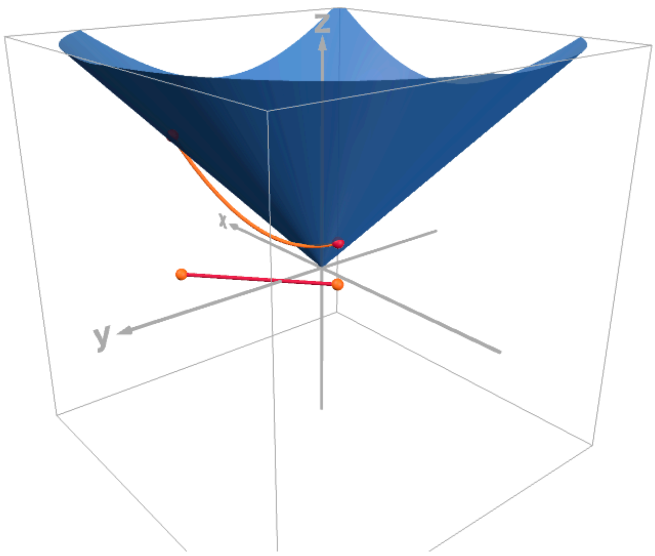

Figura 10: Função não-fortemente convexa, mas convexa $f(x) = \|x\|$

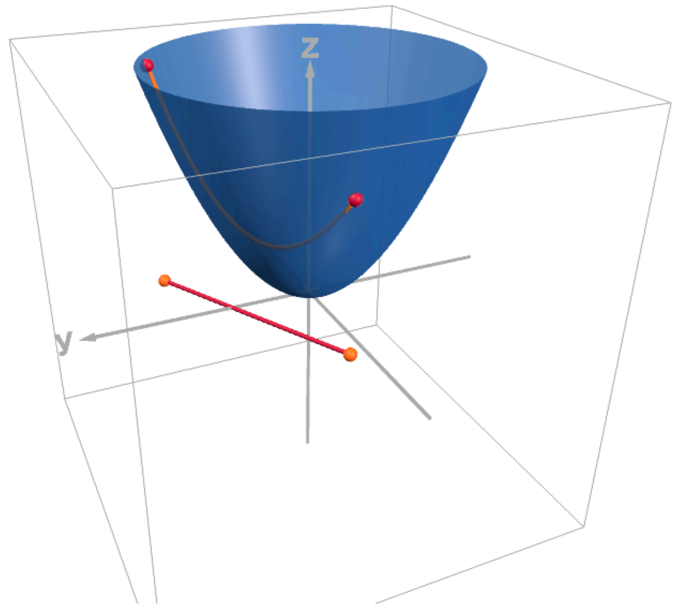

Figura 11: Função fortemente convexa $f(x) = \|x\|^2$

Teorema 2.1.3.1 (Desigualdade do gradiente: fortemente convexa): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continuamente diferenciável e C convexo. Temos:

$$f \ \mu\text{-fortemente convexa} \Leftrightarrow \forall x, y \in C,\ \ f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{\mu}{2} \|y - x\|^2 \leq f(y) \quad (99)$$

Teorema 2.1.3.2 (Caracterização de convexidade forte de segunda ordem): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ duas vezes continuamente diferenciável e C convexo. Então:

$$f \ \mu\text{-fortemente convexa} \Leftrightarrow \nabla^2 f(x) - \mu I \succ 0 \quad (100)$$

2.2 Otimização sobre conjuntos convexos

Com toda essa bagagem, conseguimos finalmente aplicar a otimização de f em uma restrição convexa C

$$\min_{x \in C} f(x) \quad (101)$$

2.2.1 Condição de primeira ordem: Caso geral

Vamos primeiramente ver uma condição sobre funções generalizadas. Algo que faz sentido pensar quando estamos sendo restringidos, é pensar que não necessariamente meu máximo ou mínimo vai ter derivada igual a 0, veja o exemplo:

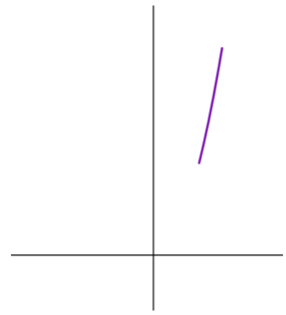

Figura 12: Exemplo de restrição: $f(x) = x^2$ com $x \in [2, 3]$

Teorema 2.2.1.1 (Condição de primeira ordem: Caso restrito): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continuamente diferenciável em C convexo e fechado, então:

$$x^* \in C \text{ mínimo local} \Rightarrow \forall x \in C,\ \nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0 \tag{102}$$

Demonstração: Precisamos do seguinte lema: Seja $f : U \to \mathbb{R}$ função continuamente diferenciável sobre um aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Se para algum $x \in U$ e $d \neq 0$ tem-se

$$\nabla f(x)^T d < 0 \tag{103}$$

então existe $\varepsilon > 0$ tal que para todo $t \in (0, \varepsilon)$, $x + td \in U$ e

$$f(x + td) < f(x) \tag{104}$$

Continuemos a demonstração do teorema original. Assuma por contradição que exista $x \in C$ tal que $\nabla f(x^*)^T (x - x^*) < 0$. Temos então que, para $d := x - x^*$, $f'(x^*; d) = \nabla f(x^*)^T (x - x^*) < 0$. Segue do lema anterior, que existe $\varepsilon \in (0, 1)$ tal que

$$\forall t \in (0, \varepsilon), f(x^* + td) < f(x^*) \tag{105}$$

Sendo C convexo, segue que $x^* + td = (1 - t)x^* + tx \in C$. Concluímos então que x^* não é um ponto de mínimo local de f em C — uma contradição. □

Mas o que esse teorema quer dizer??? Vamos por partes. Lembra do cosseno entre dois vetores v e u?

$$\cos(\theta) = \frac{u^T v}{\|u\| \ \|v\|} \tag{106}$$

Ou seja, quando o sinal do ângulo entre eles depende única e exclusivamente de $u^T v$. Lembre que, se $\theta \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$ então $\cos(\theta) \geq 0$ e se $\theta \in \left[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right]$ então $\cos(\theta) \leq 0$. Mas o que isso quer dizer? Espera mais um pouco. Lembra que vimos em cálculo 2 que o vetor gradiente indica a direção no domínio que eu devo seguir para que **a função aumente**? Show, agora a gente pode entender o que o teorema quer dizer para nós.

Vamos considerar o caso mais básico, quando x^* não ta na fronteira de C

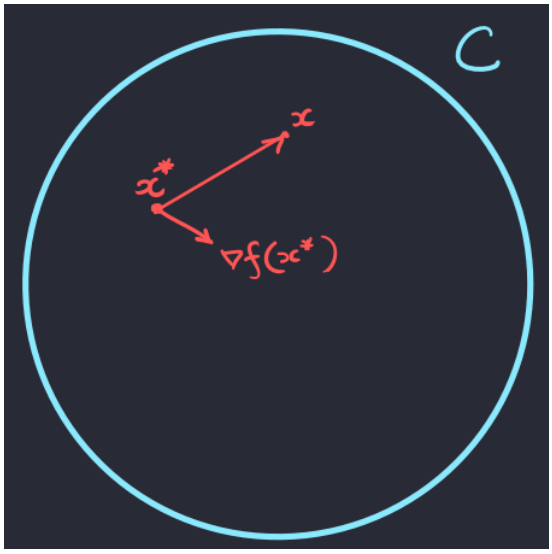

Figura 13: Ponto mínimo $x^* \in C$

Na imagem temos o vetor gradiente e o vetor $x - x^*$. Quando variamos o nosso ponto x, podemos claramente perceber que o vetor $x - x^*$ faz vários ângulos com o gradiente, só que se o gradiente for desça forma, ao andarmos na direção oposta ao gradiente, nossa função vai diminuir, ou seja, x^* não pode ser um ponto de mínimo! O que isso quer dizer? Que meu gradiente é 0!

Mas e se x^* estiver na minha fronteira?

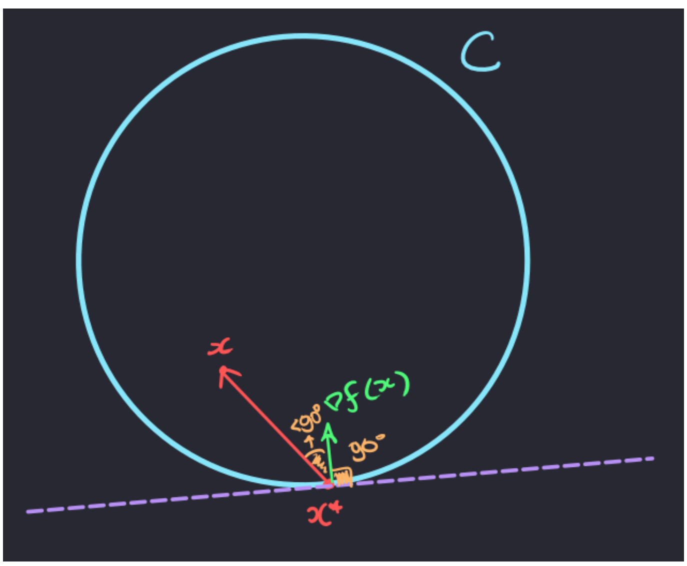

Figura 14: x^* mínimo na fronteira

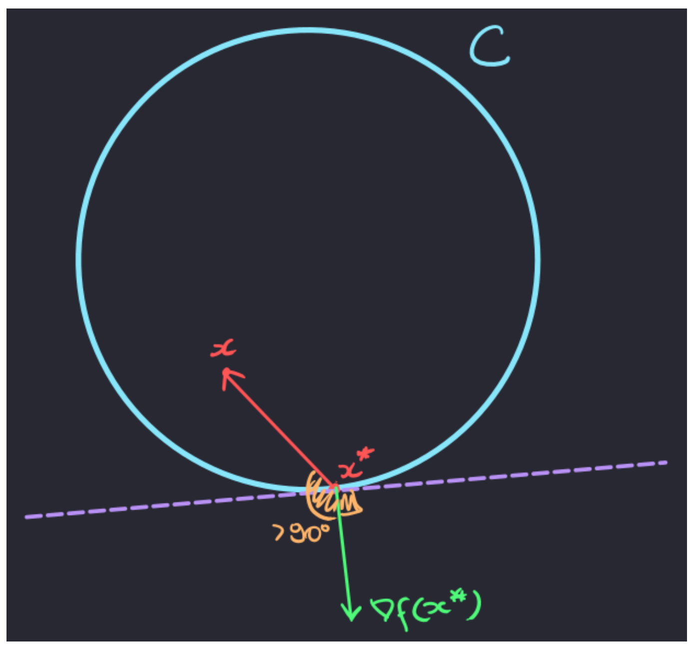

Figura 15: Função não-convexa $f(x) = x^4 - 3x^2$

Perceba que na primeira figura, se eu vejo o ângulo do gradiente com qualquer outro ponto no meu conjunto eu tenho menos que 90 graus, ou seja, o meu gradiente aponta para **dentro do conjunt**, de forma que a única maneira de diminuir mais a função é **saindo da restrição**. Na outra figura isso é melhor ilustrado. Veja que existem vetores no conjunto que fazem mais que 90 graus com o vetor gradiente, ou seja, o vetor gradiente ta para fora do conjunto C, de forma que eu consigo andar na direção $-\nabla^2 f(x^*)$ para que diminua ainda mais a função, ou seja, x^* não seria um mínimo

Esse teorema nos da motivação para uma definição

Definição 2.2.1.1 (Ponto estacionário): Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com C convexo e fechado, chamamos $x^* \in C$ de ponto estacionário quando

$$\forall x \in C,\ \nabla f(x^*)(x - x^*) \geq 0 \tag{107}$$

2.2.2 Condições de primeira ordem: Caso convexo

Teorema 2.2.2.1: Seja $f : C \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continuamente diferenciável e convexa com C convexo e fechado e $x^* \in C$, então:

$$x^* \text{ mínimo global} \Leftrightarrow x^* \text{ é ponto estacionário} \tag{108}$$

Demonstração: Precisamos provar apenas ($\Longleftarrow$) do Teorema 2.2.1.1. Seja $x^* \in C$ um ponto estacionário de f em C. Obtemos que, para todo $x \in C$,

$$f(x) \geq f(x^*) + \nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq f(x^*) \tag{109}$$

onde a primeira desigualdade segue da desigualdade do gradiente (Teorema 2.1.1.1) e a segunda desigualdade segue de que x^* é ponto estacionário. Sendo que

$$\forall x \in C,\ f(x) \geq f(x^*) \tag{110}$$

segue que $x^* \in C$ é ponto de mínimo global de f em C. $\square$

Otimização com restrições lineares

Agora queremos minimizar problemas do tipo:

$$\min_x f(x)$$
$$x \text{ sujeito a restrições do tipo } a_i^T x \leq b_i,\ i = 1, ..., m \tag{111}$$

onde f é continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$, $\{a_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}^n, \{b_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}$. Ou seja, o conjunto viável C é o poliédro:

$$C = \cap_{i=1}^m \{x \in \mathbb{R}^n / a_i^T x \leq b_i\} \tag{112}$$

Há um exemplo nas anotaçéos sobre convexidade do Phillip que mostram que C é convexo.

3.1 Condições KKT

Teorema 3.1.1 (Condições KKT para restrições lineares: condições necessárias de otimalidade): Considere o problema de minimização

$$\min_x f(x)$$
$$\text{sujeito à } a_i^T x \leq b_i, i = 1, ..., m \tag{113}$$

onde f é uma função continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$ $\{a_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R} \wedge \{b_i\}_{i=1}^m \subset R$. Então, se x^* é um ponto de mínimo local do problema, existem $\lambda_1, ..., \lambda_m \geq 0$ tais que

$$\begin{aligned} \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i a_i = 0, \\ \lambda_i (a_i^T x^* - b_i) = 0, \qquad i = 1, ..., m \\ a_i^T x^* - b_i \leq 0, \qquad i = 1, ..., m \end{aligned} \tag{114}$$

Os números λ_j são chamados de **multiplicadores de lagrange**

3.2 Condições KKT: Problema convexo

Teorema 3.2.1 (Condições KKT para restrições lineares: condições necessárias de otimalidade com função convexa): Considere o problema de minimização

$$\min_x f(x)$$
$$\text{sujeito à } a_i^T x \leq b_i, i = 1, ..., m \tag{115}$$

onde f é uma função continuamente diferenciável **convexa** em $\mathbb{R}^n$ $\{a_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R} \wedge \{b_i\}_{i=1}^m \subset R$. Então, se x^* é um ponto de mínimo local do problema $\Leftrightarrow \exists \lambda_1, ..., \lambda_m \geq 0$ tais que

$$\begin{aligned} \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i a_i = 0, \\ \lambda_i (a_i^T x^* - b_i) = 0, \qquad i = 1, ..., m \\ a_i^T x^* - b_i \leq 0, \qquad i = 1, ..., m \end{aligned} \tag{116}$$

Demonstração: $(\Longrightarrow)$ Segue do Teorema 3.1.1

($\Longleftarrow$) Definamos a função:

$$h(x) := f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (a_i^T x - b_i) \tag{117}$$

Temos que:

$$\nabla h(x^*) = \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i \tag{118}$$

Como h é convexa (Soma de funções convexas), segue que x^* é ponto mínimo de h em $\mathbb{R}^n$. Em particular, dado qualquer $x \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$$a_i^T x \leq b_i,\ i = 1, ..., m \tag{119}$$

Tem-se que:

$$\begin{aligned} f(x^*) &= f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (a_i^T x - b_i) \\ &\leq f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (a_i^T x - b_i) \\ &\leq f(x) \end{aligned} \tag{120}$$

Na primeira equação utilizamos a segunda condição e na segunda desigualdade usamos o fato que $\lambda_i \geq 0$. Concluímos então que x^* é solução do sistema □

3.3 Condições KKT com restrições linearres de igualdade

Porém, em alguns casos, é possível que tenhamos restrições de desigualdade:

$$\begin{gathered} \min_x f(x) \\ x \text{ sujeito a restrições do tipo } a_i^T x \leq b_i,\ i = 1, ..., m \\ \text{e } c_j^T x = d_j,\ j = 1, ..., p \end{gathered} \tag{121}$$

onde f é continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$, $\{a_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}^n, \{b_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}, \{c_j\}_{j=1}^p \subset \mathbb{R}^n$

Disso, segue um teorema muito parecido:

Teorema 3.3.1: Considere o problema:

$$\begin{gathered}\min_x f(x)\\ x \text{ sujeito a restrições do tipo } a_i^T x \le b_i,\ i = 1, ..., m\\ \text{e } c_j^T x = d_j,\ j = 1, ..., p\end{gathered} \tag{122}$$

onde f é continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$, $\{a_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}^n, \{b_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}, \{c_j\}_{j=1}^p \subset \mathbb{R}^n$. Então:

a) Se x^* é um ponto de mínimo local do problema, então existem $\lambda_1, ..., \lambda_m \ge 0$ e $\mu_1, ..., \mu_p \in \mathbb{R}$ tais que

$$\begin{gathered}\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i a_i + \sum_{j=1}^p \mu_j c_j = 0\\ \lambda_i\left(a_i^T x^* - b_i\right) = 0,\ i = 1, ..., m\\ a_i^T x^* - b_i \le 0,\ i = 1, ..., m\\ \mu_j\left(c_j^T x^* - d_j\right) = 0,\ j = 1, ..., p\end{gathered} \tag{123}$$

b) Suponha adicionalmente que f é convexa, então x^* é um mínimo global do problema $\Leftrightarrow$ existem $\lambda_1, ..., \lambda_m \ge 0$ e $\mu_1, ..., \mu_p \in \mathbb{R}$ tians que as condições anteriormente mencionadas valem

Demonstração: Primeiro demonstraremos o (a). Demonstrar essa parte é equivalente a resolver o problema:

$$\begin{gathered}\min_x f(x)\\ x \text{ sujeito a restrições do tipo } a_i^T x \le b_i,\ i = 1, ..., m\\ c_j^T x \le d_j \wedge -c_j^T x \le -d_j,\ j = 1, ..., p\end{gathered} \tag{124}$$

onde f é continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$, $\{a_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}^n, \{b_i\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}, \{c_j\}_{j=1}^p \subset \mathbb{R}^n$

Sendo x^* uma solução do problema descrito anteriormente, pelo Teorema 3.1.1, temos:

$$\begin{gathered}\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i a_i + \sum_{j=1}^p \mu_j^+ c_j - \sum_{j=1}^p \mu_j^- c_j = 0\\ \lambda_i\left(a_i^T x^* - b_i\right) = 0\\ \mu_j^+\left(c_j^T x^* - d_j\right) = 0\\ \mu_j^-\left(-c_j^T x^* + d_j\right) = 0\end{gathered} \tag{125}$$

Como x^* é viável, então as segundas e terceiras condições mencionadas na reformulação anterior são satisfeitas. Definindo então $\mu_j = \mu_j^+ - \mu_j^-$, então temos:

$$\sum_{j=1}^p \mu_j^+ c_j - \sum_{j=1}^p \mu_j^- c_j = \sum_{j=1}^p \mu_j c_j \tag{126}$$

Então segue que as condições estabelecidas originalmente no teorema são satisfeitas

Para a demonstração de (b), Suponha que x^* viável e existem $\lambda_1, ..., \lambda_m \geq 0$ e $\mu_1, ..., \mu_p \in \mathbb{R}$ tais que as condições do teorema sejam satisfeitas. Defina

$$\mu_j^+ := \left(\mu_j\right)_+ = \max\{\mu_j, 0\}, \qquad \mu_j^- := \left(\mu_j\right)_- = \max\{-\mu_j, 0\} \tag{127}$$

Como $\mu_j = \mu_j^+ - \mu_j^-$ e $c_j^T x^* - d_j = 0$ para $j \in [p]$, segue em particular que (125) é satisfeito. Sendo f convexa, segue do Teorema 3.2.1 que x^* é solução do problema reformulado e, em particular, do problema original do teorema □

3.4 Lagrangeano

Vimos minimizações para condições lineares e convexas, mas nem sempre isso acontece. Muitas vezes temos problemas com conjuntos completamente genéricos, então temos o problema:

$$\begin{gathered} \min_x f(x) \\ \text{tal que } g_i(x) \leq 0,\ \forall i = 1, ..., m \\ h_j(x) = 0,\ \forall j = 1, ..., p \end{gathered} \tag{128}$$

Definição 3.4.1 (Lagrangeano): O **Lagrangeano** associado à função f é a função $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ tal que:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T g(x) + \mu^T h(x) \tag{129}$$

Onde:

$$\lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_m \end{pmatrix},\ \mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_p \end{pmatrix},\ g(x) = \begin{pmatrix} g_1(x) \\ \vdots \\ g_m(x) \end{pmatrix},\ h(x) = \begin{pmatrix} h_1(x) \\ \vdots \\ h_p(x) \end{pmatrix} \tag{130}$$

Teorema 3.4.1 (Gradiente Lagrangeano): Dado o Lagrangeano de uma função f, temos que o gradiente do lagrangeano **somente em relação a** x se da por:

$$\nabla_x L(x, \lambda, \mu) = \nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g(x) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j \nabla h(x) \tag{131}$$

3.5 As generalizações do KKT

Agora queremos generalizar totalmente o KKT, então vamos aos poucos. Vamos enunciar o problema novamente:

$$\begin{gathered} \min_x f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \qquad i \in [m] \\ h_j(x) = 0 \qquad j \in [p] \end{gathered} \tag{132}$$

Vamos agora fazer uma definição que tem uma razão matemática, mas acaba por nos ajudar em alguns casos. Essa definição evita condições redundantes no nosso problema, o que pode acabar nos atrapalhando. Faremos um exemplo para mostrar essa ajuda

Definição 3.5.1 (Condições de qualificação de independência linear): Sejam $g_1, ..., g_m : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $h_1, ..., h_p : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continuamente diferenciáveis e $x^* \in \mathbb{R}^n$, defina:

$$I(x^*) := \{i \in [m] : g_i(x^*) = 0\} \tag{133}$$

Dizemos que LICQ (Linear Independent Condition Qualification) é satisfeita em x^* para as funções $g_1, ..., g_m$ e $h_1, ..., h_p$ se

$$\{\nabla g_i(x^*) : i \in I(x^*)\} \cup \left\{\nabla h_j(x^*) : j \in [p]\right\} \text{ é linearmente independente} \tag{134}$$

Teorema 3.5.1 (KKT): Se x^* é um ponto de mínimo local de $f(x)$ (Nas restrições $g_i(x) \leq 0$ e $h_j(x) = 0$) e Definição 3.5.1 é satisfeita em x^*, isso implica que:

$$\begin{gathered} \exists \lambda_1, ..., \lambda_m \geq 0,\ \exists \mu_1, ..., \mu_p \in \mathbb{R} \\ \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j \nabla h_j(x^*) = 0 \\ \lambda_i g_i(x^*) = 0 \qquad i \in [m] \\ g_i(x^*) \leq 0 \qquad i \in [m] \\ h_j(x^*) = 0 \qquad j \in [p] \end{gathered} \tag{135}$$

Exemplo (Utilidade da LICQ): aaaaaaaaaaa preencher aqui aaaaaaaaaaaa

Porém, como vimos em todos os problemas que envolvem funções convexas, a volta irá valer, de forma que:

Teorema 3.5.2 (KKT Convexo): Se x^* é um ponto de mínimo local de $f(x)$ (Nas restrições $g_i(x) \leq 0$ e $h_j(x) = 0$ sendo funções continuamente diferenciáveis e convexas) e Definição 3.5.1 é satisfeita em x^*, isso vale se, e somente se:

$$\begin{gathered} \exists \lambda_1, ..., \lambda_m \geq 0,\ \exists \mu_1, ..., \mu_p \in \mathbb{R} \\ \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j \nabla h_j(x^*) = 0 \\ \lambda_i g_i(x^*) = 0 \qquad i \in [m] \\ g_i(x^*) \leq 0 \qquad i \in [m] \\ h_j(x^*) = 0 \qquad j \in [p] \end{gathered} \tag{136}$$

Definição 3.5.2 (Condição de Slater): Dizemos que a condição de Slater é satisfeita para as funções $g_1, ..., g_m$ (convexas) se

$$\exists \hat{x} \in \mathbb{R}^n \ /\ g_i(\hat{x}) < 0,\ \forall i \in [m] \tag{137}$$

Teorema 3.5.3 (KKT e Slater): Se x^* é mínimo local de $f(x)$ (Nas restrições $g_i(x) \leq 0$ e $h_j(x) = 0$ sendo funções continuamente diferenciáveis e convexas) e x^* satisfaz Definição 3.5.2, então x^* é ponto KKT (A volta não vale)

Porém, não faz sentido falarmos de funções convexas de igualdade ($h_j(x) = 0$), isso nos permite reescrever o problema de uma forma interessante:

$$\begin{gathered} \min_x f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \qquad i \in [m] \\ h_j(x) = 0 \qquad j \in [p] \\ s_k(x) = 0 \qquad k \in [q] \\ \text{Onde } f,\ g_i \text{ são convexas e } h_j,\ s_k \text{ são afins} \end{gathered} \tag{138}$$

Então podemos adaptar a condição de slater:

Teorema 3.5.4 (Condição de Slater): Dizemos que a condição de Slater é satisfeita para as funções $g_1, ..., g_m$ (convexas) e $h_1, ..., h_p$ e $s_1, ..., s_q$ (afins) quando:

$$\begin{gathered} \exists \hat{x} \in \mathbb{R}^n \text{ tal que} \\ g_i(\hat{x}) < 0,\ \forall i \in [m] \\ h_j(\hat{x}) \leq 0,\ \forall j \in [p] \\ s_k(\hat{x}) = 0,\ \forall k \in [q] \end{gathered} \tag{139}$$

De forma que o Teorema 3.5.3 continua valendo