FGV EMAp João Pedro Jerônimo

Otimização para Ciência de Dados

Revisão para A1

Rio de Janeiro 2025

Conteúdo

1	Otir	mização Irrestrita	3
	1.1	Introdução	4
	1.2	Definições e Revisões de Cálculo	4
	1.3	Soluções Locais: Condições de primeira ordem	7
	1.4	Soluções Locais: Condições de segunda ordem	7
	1.5	Existência de pontos ótimos	11
	1.6	Condições para soluções globais	. 13
	1.7	Funções quadráticas	. 13
2	Otir	mização Convexa	. 16
	2.1	Convexidade	. 17
		2.1.1 Caracterização de convexidade de primeira ordem	. 20
		2.1.2 Caracterizações de convexidade de segunda ordem	. 22
		2.1.3 Convexidade forte	. 23
	2.2	Otimização sobre conjuntos convexos	. 24
		2.2.1 Condição de primeira ordem: Caso geral	. 24
		2.2.2 Condições de primeira ordem: Caso convexo	. 27
3	Otimização com restrições lineares		. 28
	3.1	Condições KKT	. 29
	3.2	Condições KKT: Problema convexo	. 29
	3.3	Condições KKT com restrições linearres de igualdade	. 30
	3.4	Lagrangeano	. 32



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 $C \Leftrightarrow$

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

• $x^* \in C$ 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 $C \Leftrightarrow$

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

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

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

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:

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

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:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$
 (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 $o: \mathbb{R}_+ o \mathbb{R}$ satisfaz $\lim_{t o 0^+} rac{o(t)}{t} = 0$

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

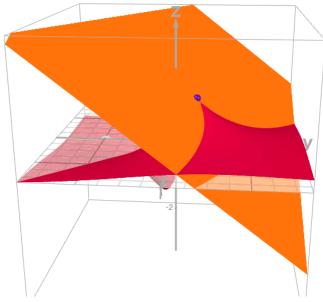


Figura 1: Função $f(x,y)=rac{x+y}{x^2+y^2+1/5}$

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 $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i\partial x_i}:U\to\mathbb{R}$ 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:

$$\nabla^{2} f(x) := \begin{pmatrix} \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{1}^{2}} & \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{1} \partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{1} \partial x_{n}} \\ \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{2} \partial x_{1}} & \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{2}^{2}} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \\ \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{n} \partial x_{1}} & \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{n} \partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2} f}{\partial x_{n}^{2}} \end{pmatrix}$$

$$(12)$$

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:

$$\forall y \in B(x,r) \; \exists \xi \in [x,y] \; \text{tal que}$$

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

$$\tag{13}$$

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:

$$\forall y \in B(x,r) \text{ vale}$$

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y-x) + \frac{1}{2} (y-x)^T \nabla^2 f(x) (y-x) + o \big(\|y-x\|^2 \big)$$

$$\tag{14}$$

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 $A \leq 0 \Leftrightarrow \forall x \in \mathbb{R}^n, \ x^T A x \leq 0$
- 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 $x^TAx > 0$ e $y^TAy < 0$

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 $\nabla^2 f(x^*) \leq 0$

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:

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

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

$$x_{\alpha}^* \coloneqq x^* + \alpha d \tag{19}$$

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

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

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

Como x^* é estacionário, temos:

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

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

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

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

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

Isso é válido pois eu assumi um d genérico

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

 ${\it Demonstraç\~ao}$: 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:

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

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

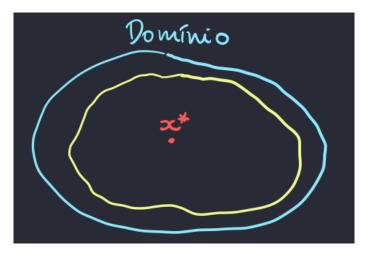


Figura 2: Desenho de domínio qualquer de uma função f

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 $B(x^{st},r)$ de forma que ela não ultrapasse a linha amarela

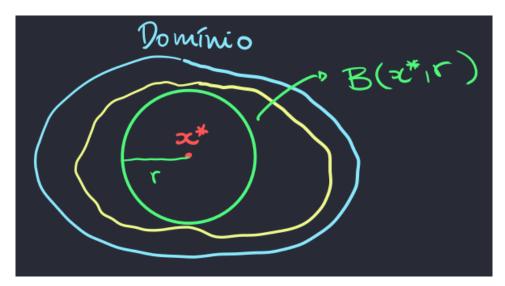


Figura 3: Desenho de domínio qualquer de uma função f com uma bola B

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 $abla^2 f(x^*)$ é indefinida. Portanto, $abla^2 f(x^*)$ 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 $abla f(x^*)=0$, 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 $\alpha \in (0, r)$:

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

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

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

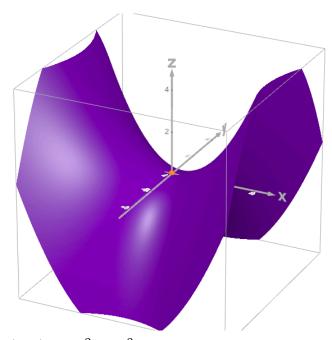


Figura 4: Função $f(x,y)=ax^2+by^2$. Ponto laranja é ponto de sela (Ponto (0,0,0))

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

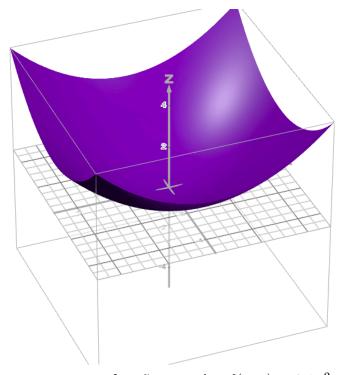


Figura 5: Exemplo de função coerciva $f(x,y) = 0.1x^2 + 0.1y^2$

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

 $\textit{Demonstração}\colon \mathsf{Seja}\; x_0 \in C$ 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 $\forall x \in \mathbb{R}^n$:

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

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

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

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:

$$f(x) = x^T A x + 2b^T x + c (37)$$

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

$$\nabla f(x) = 2(Ax + b)$$

$$\nabla^2 f(x) = 2A$$
(38)

Demonstração: Sabemos que $f(x)=x^TAx+2b^Tx+c$. 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.

$$x^{T}Ax = (x_{1} \dots x_{n}) \begin{pmatrix} a_{11} \dots a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1} \\ \vdots \\ x_{n} \end{pmatrix} = (x_{1} \dots x_{n}) \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{n} a_{1k} x_{k} \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{n} a_{nk} x_{k} \end{pmatrix}$$
(39)

Para facilitar nossa vida, vamos definir

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

. Então:

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

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

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

Agora sim:

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

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. $x ext{ \'e ponto estacion\'ario} \Leftrightarrow Ax = -b$.
- 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 > 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 $\forall x\neq 0\in\mathbb{R}^{n\times n}$

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

(Pode-se demonstrar pelo teorema espectral)

Agora podemos começar a prova:

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

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

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 $\alpha \in \mathbb{R}$,

$$f(\alpha v) = \lambda ||v||^2 \alpha^2 + 2(b^T v)\alpha + c \to \infty \text{ quando } \alpha \to \infty$$
 (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 $\psi=0$ tal que Av=0. Então, para todo $\alpha\in\mathbb{R}$,

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

Temos que:

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

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



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

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

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

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

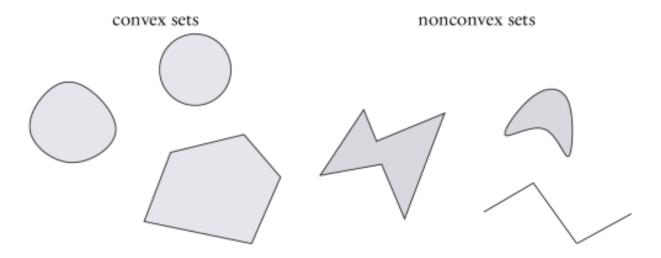


Figura 6: Exemplo de figuras convexas e não-convexas retirado das anotações do professor Porém, outra definição muito importante são as de **funções convexas**

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

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

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

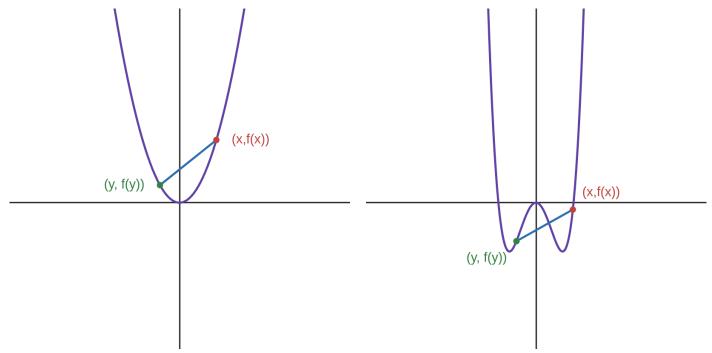


Figura 7: Função convexa $f(x) = x^2$

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 $\left\{x_i\right\}_{i=1}^k\subset C$ de pontos de C e qualquer $\lambda\in\Delta_k$:

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

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

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

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,

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

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 $\left\{x_i\right\}_{i=1}^k\subset C$, 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,

$$f(z) = f((1 - \lambda_{k+1})v + \lambda_{k+1}x_{k+1}) \le (1 - \lambda_{k+1})f(v) + \lambda_{k+1}f(x_{k+1})$$

$$= (1 - \lambda_{k+1})f\left(\sum_{i=1}^{k} \frac{\lambda_i}{1 - \lambda_{k+1}}x_i\right) + \lambda_{k+1}f(x_{k+1})$$

$$\le (1 - \lambda_{k+1})f\left(\sum_{i=1}^{k} \frac{\lambda_i}{1 - \lambda_{k+1}}f(x_i)\right) + \lambda_{k+1}f(x_{k+1})$$

$$= \sum_{i=1}^{k+1} f(x_i)$$
(63)

Teorema 2.1.2: Seja $C\subset\mathbb{R}^n$ convexo, dados quaisquer coleção $\left\{x_i\right\}_{i=1}^k\subset C$ 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:

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:

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

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

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

implicando que

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Somando-se as duas desigualdades acima obtemos

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

Isto é

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

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:

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

Demonstração: Anáogo ao Teorema 2.1.1.1

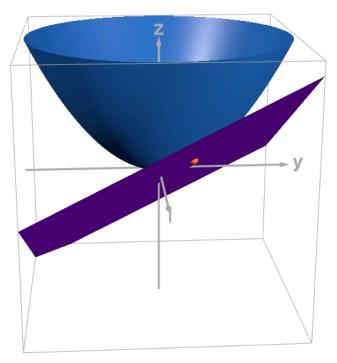


Figura 9: Função $f(x,y)=1.3x^2+1.27y^2$ e um plano tangente à curva

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:

$$f(x) = x^T A x + 2b^T x + c (81)$$

Onde A é simétrica. Então:

$$f$$
 (estritamente) convexa $\Leftrightarrow A \succeq 0 (A \succ 0)$ (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

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

Rearranjando, obtemos:

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

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

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

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

$$f(x) \ge f(y) + \nabla f(y)^T (x - y)$$

$$f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$
(86)

Somando ambas as igualdades, obtemos (85)

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

$$g(t) := f(x + t(y - x)), \qquad t \in [0, 1]$$
(87)

Pelo Teorema Fundamental do Cálculo:

$$f(y) = g(1) = g(0) + \int_0^1 g'(t) dt$$

$$= f(x) + \int_0^1 (y - x)^T \nabla f(x - t(y - x)) d$$

$$= f(x) + (y - x)^T \nabla f(x) + \int_0^1 (y - x)^T (\nabla f(x - t(y - x)) - \nabla f(x)) d$$

$$= f(x) + (y - x)^T \nabla f(x) + \frac{1}{t} \int_0^1 t(y - x)^T (\nabla f(x - t(y - x)) - \nabla f(x)) d$$

$$\geq f(x) + (y - x)^T \nabla f(x)$$
(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:

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

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

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

Além disso, pelo teorema de aproximação quadrática:

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

$$(93)$$

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

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

Isso é:

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

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

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

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

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:

$$\forall x \in C, \ \nabla^2 f(x) \succ 0 \Rightarrow f \text{ estritamente convexa em } C$$
 (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 ($\mu > 0$) se:

$$\forall x, y \in C \land \forall \lambda \in [0, 1],$$

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) + \frac{\mu}{2}\lambda(1 - \lambda) \|y - x\|^2 \le \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$$

$$(98)$$

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

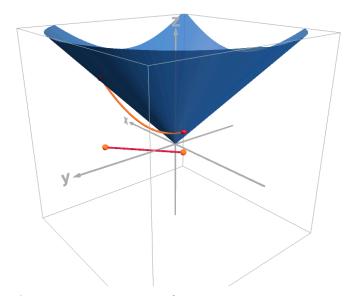


Figura 10: Função não-fortemente convexa, mas convexa $f(x) = \|x\|$

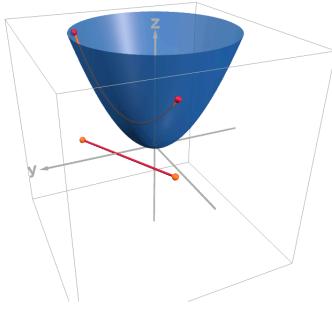


Figura 11: Função fortemente convexa $f(x) = \|x\|^2$

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:

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

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:

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

2.2 Otimização sobre conjuntos convexos

Com toda essa bagagem, conseguimos finalmente aplicar a otimização de f em uma restrição convexa ${\cal C}$

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

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:

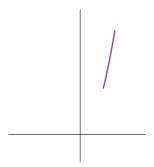


Figura 12: Exemplo de restrição: $f(x) = x^2 \text{ com } x \in [2, 3]$

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:

$$x^* \in C \text{ mínimo local} \Rightarrow \forall x \in C, \ \nabla f(x^*)^T (x - x^*) \ge 0$$
 (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 $d \coloneqq x-x^*, f'(x^*;d) = \nabla f(x^*)^T(x-x^*) < 0$. 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. \Box

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

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

Ou seja, quando o sinal do ângulo entre eles depende única e exclusivamente de u^Tv . 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

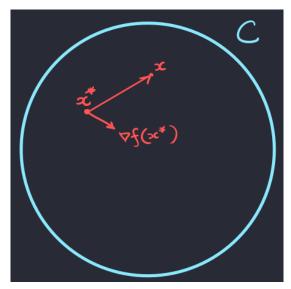


Figura 13: Ponto mínimo $x^* \in C$

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?

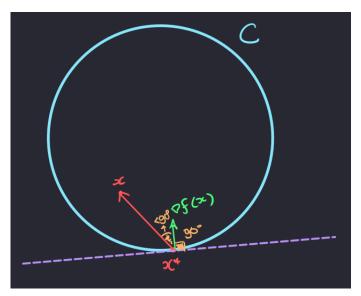


Figura 14: x^* mínimo na fronteira

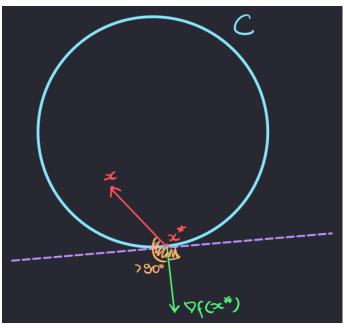


Figura 15: Função não-convexa $f(x) = x^4 - 3x^2$

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

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

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:

$$x^*$$
 mínimo global $\Leftrightarrow x^*$ é ponto estacionário (108)

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

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

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

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

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



Agora queremos minimizar problemas do tipo:

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

$$C = \bigcap_{i=1}^{m} \left\{ x \in \mathbb{R}^n / a_i^T x \le b_i \right\} \tag{112}$$

Há um exemplo nas anotações 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

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

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

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

Os números λ_i 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

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

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

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

Demonstração: (⇒) Segue do Teorema 3.1.1

(⇐) Definamos a função:

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

Temos que:

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

$$a_i^T x \le b_i, \ i = 1, ..., m$$
 (119)

Tem-se que:

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

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:

$$\min_x f(x)$$
 x sujeito a restrições do tipo $a_i^Tx \leq b_i, \ i=1,...,m$
$$e\ c_j^Tx=d_j,\ j=1,...,p$$

$$(121)$$

 $\text{ onde } f \text{ \'e continuamente diferenci\'avel em } \mathbb{R}^n, \ \left\{a_i\right\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}^n, \left\{b_i\right\}_{i=1}^m \subset \mathbb{R}, \left\{c_j\right\}_{j=1}^p \subset \mathbb{R}^n$

Disso, segue um teorema muito parecido:

Teorema 3.3.1: Considere o problema:

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

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

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

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i + \sum_{j=1}^{p} \mu_j c_j = 0$$

$$\lambda_i (a_i^T x^* - b_i) = 0, \ i = 1, ..., m$$

$$a_i^T x^* - b_i \le 0, \ i = 1, ..., m$$

$$\mu_j (c_j^T x^* - d_j) = 0, \ j = 1, ..., p$$
(123)

b) Suponha adicionalmente que f é convexa, então x^* é um mínimo global do problema \Leftrightarrow existem $\lambda_1,...,\lambda_m\geq 0$ 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:

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

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

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

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i a_i + \sum_{j=1}^p \mu_j^+ c_j - \sum_{j=1}^p \mu_j^- c_j = 0$$

$$\lambda_i (a_i^T x^* - b_i) = 0$$

$$\mu_j^+ (c_j^T x^* - d_j) = 0$$

$$\mu_j^- (-c_j^T x^* + d_j) = 0$$
(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:

$$\sum_{i=1}^{p} \mu_j^+ c_j - \sum_{i=1}^{p} \mu_j^- c_j = \sum_{i=1}^{p} \mu_j c_j$$
 (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

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

Como $\mu_j=\mu_j^+-\mu_j^-$ e $c_j^Tx^*-d_j=0$ 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:

$$\min_{x} f(x)$$
 tal que $g_i(x) \leq 0, \ \forall i=1,...,m$
$$h_j(x) = 0, \ \forall j=1,...,p$$
 (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:

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

Onde:

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