

UM CURSO DE OTIMIZAÇÃO

Ademir Alves Ribeiro
Elizabeth Wegner Karas

Curitiba
2010

Sumário

Prefácio	1
Introdução	2
1 Revisão de Conceitos	4
1.1 Sequências	4
1.1.1 Definições e resultados clássicos	4
1.1.2 Velocidade de convergência	6
1.2 Noções de topologia	8
1.3 Resultados de álgebra linear	9
1.4 Fórmula de Taylor	12
1.5 Exercícios do capítulo	17
2 Introdução à Otimização Irrestrita	19
2.1 O problema de otimização	19
2.2 Condições de otimalidade	21
2.3 Exercícios do capítulo	25
3 Convexidade	27
3.1 Conjuntos convexos	27
3.2 Funções convexas	30
3.3 Exercícios do capítulo	34
4 Algoritmos	35
4.1 Algoritmos de descida	35
4.2 Métodos de busca unidirecional	38
4.2.1 Busca exata - método da seção áurea	38
4.2.2 Busca inexata - condição de Armijo	43
4.3 Convergência global de algoritmos	46
4.3.1 Convergência global de algoritmos de descida	46
4.3.2 Teorema de Polak	49
4.4 Exercícios do capítulo	50

5	Métodos de Otimização	52
5.1	Método de Cauchy	52
5.1.1	Algoritmo	52
5.1.2	Convergência global	53
5.1.3	Velocidade de convergência	53
5.2	Método de Newton	56
5.2.1	Motivação	56
5.2.2	Algoritmo	57
5.2.3	Convergência	58
5.3	Método de região de confiança	61
5.3.1	Algoritmo	62
5.3.2	O passo de Cauchy	63
5.3.3	Convergência	65
5.3.4	O método dogleg	71
5.4	Exercícios do capítulo	73
5.5	Implementação computacional	75
5.5.1	Funções para teste	75
6	Otimização com Restrições	76
6.1	Cones	77
6.2	Condições de Karush-Kuhn-Tucker	83
6.2.1	O cone viável linearizado	83
6.2.2	O cone gerado pelos gradientes das restrições	84
6.2.3	O cone tangente	85
6.2.4	O teorema de Karush-Kuhn-Tucker	89
6.3	Exercícios do capítulo	91
7	Dicas e soluções dos exercícios	94
	Referências Bibliográficas	100

Prefácio

O objetivo deste texto é oferecer tanto para os alunos quanto para os professores um material didático para a disciplina de otimização.

Ademir e Elizabeth
Curitiba, 03 de Março de 2010.

Introdução

Otimização, direta ou indiretamente, faz parte do nosso dia a dia. Muitas vezes nem nos damos conta, mas estamos otimizando algo.

Mais formalmente, podemos dizer que otimização consiste em encontrar pontos de mínimo ou de máximo de uma função real sobre um conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Isto pode ser colocado na forma

$$(P_\Omega) \quad \begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & x \in \Omega. \end{array}$$

Em geral, o conjunto Ω é definido por restrições de igualdade e/ou desigualdade, ou seja,

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) \leq 0, \quad h(x) = 0\},$$

onde $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ são funções continuamente diferenciáveis.

O problema de otimização pode então ser reescrito como

$$(P) \quad \begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & g(x) \leq 0 \\ & h(x) = 0. \end{array}$$

Conforme as características do conjunto Ω e as propriedades das funções objetivo, teremos os diferentes problemas de otimização. Por exemplo, as funções envolvidas no problema podem ser contínuas ou não, diferenciáveis ou não, lineares ou não. O caso particular em que a função objetivo e as funções que definem Ω são funções lineares é conhecido como um *Problema de Programação Linear* (PPL) e é resolvido por métodos específicos, como o famoso *Método Simplex*. Entretanto, como este caso é tratado extensivamente em outro curso, não analisaremos neste trabalho. Estudaremos problemas onde todas as funções usadas para definí-los são continuamente diferenciáveis e, normalmente não lineares, isto é, estudaremos o problema geral de *Programação Não Linear* (PNL).

Um caso particular é o problema irrestrito, quando $\Omega = \mathbb{R}^n$. O problema irrestrito pode ser considerado simples em comparação com o problema geral de PNL e o estudo de suas propriedades bem como dos métodos que o resolvem é de fundamental importância em otimização, porque muitos métodos para resolver o problema geral de PNL fazem uso dos métodos que resolvem o irrestrito.

É conhecido na literatura que, quando o conjunto viável Ω é formado apenas por restrições de igualdade, Lagrange mostrou que se $x^* \in \Omega$ é solução, então existe $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$, conhecido como *Multiplicador de Lagrange*, tal que

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla h_i(x^*) = 0.$$

Esta condição é conhecida como *Condição de Lagrange*. Este resultado é central na teoria de otimização.

Contudo, um pouco antes de 1950, foi observado que existiam aplicações importantes nos problemas em que eram envolvidas restrições representadas por desigualdades. Por esta razão, alguns matemáticos têm desenvolvido métodos para tratar de problemas com este tipo de restrições. As primeiras condições de otimalidade neste sentido foram estabelecidas por Fritz-John [10] em 1948 e depois por Kuhn e Tucker [12] em 1951. Mais tarde foi descoberto que as condições de Kuhn-Tucker já teriam sido estabelecidas por W. Karush em 1939 em sua dissertação de mestrado, porém essa dissertação nunca foi publicada, mas partes essenciais foram reproduzidas por Kuhn [13] em 1976. Assim as condições de Kuhn-Tucker passaram a ser chamadas de condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT).

Este trabalho apresenta o desenvolvimento teórico das condições de otimalidade para o problema geral de otimização, bem como métodos iterativos para obter soluções.

Capítulo 1

Revisão de Conceitos

Neste capítulo apresentamos algumas definições básicas e alguns resultados de análise e álgebra linear relevantes para este trabalho. As principais referências deste capítulo são [4, 7, 14, 15, 16].

1.1 Sequências

Uma sequência em \mathbb{R}^n é uma aplicação $k \in \mathbb{N} \rightarrow x^k \in \mathbb{R}^n$, definida no conjunto \mathbb{N} dos números naturais. Denotaremos uma sequência por $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$, ou simplesmente por (x^k) . Por conveniência, consideramos que $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$.

1.1.1 Definições e resultados clássicos

Definição 1.1 Diz-se que o ponto $a \in \mathbb{R}^n$ é o limite da sequência (x^k) quando, para todo $\varepsilon > 0$ dado, é possível obter $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$k \geq k_0 \Rightarrow \|x^k - a\| < \varepsilon.$$

Neste caso, também dizemos que a sequência (x^k) converge para a e indicamos este fato por $x^k \rightarrow a$ ou $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = a$.

Vemos da definição anterior que o ponto $a \in \mathbb{R}^n$ é o limite da sequência (x^k) se para cada $\varepsilon > 0$, o conjunto $\mathbb{N}_1 = \{k \in \mathbb{N} \mid \|x^k - a\| \geq \varepsilon\}$ é finito, ou seja, fora da bola $B(a, \varepsilon)$ só poderão estar, no máximo, os termos x^1, \dots, x^{k_0} .

Uma subsequência de (x^k) é a restrição desta sequência a um subconjunto infinito $\mathbb{N}' = \{k_1 < k_2 < \dots < k_i < \dots\} \subset \mathbb{N}$. Equivalentemente, uma subsequência de (x^k) é uma sequência do tipo $(x^k)_{k \in \mathbb{N}'}$ ou $(x^{k_i})_{i \in \mathbb{N}}$, onde $(k_i)_{i \in \mathbb{N}}$ é uma sequência crescente de inteiros positivos. Note que $k_i \geq i$, para todo $i \in \mathbb{N}$.

Teorema 1.2 Se uma sequência (x^k) converge para um limite a , então toda subsequência (x^{k_i}) também converge para a .

Demonstração. Dado $\varepsilon > 0$ existe um k_0 tal que para todo $k > k_0$ tem-se $\|x^k - a\| < \varepsilon$. Como os índices da subsequência formam um subconjunto infinito, existe entre eles um $k_{i_0} \geq k_0$. Então para $k_i \geq k_{i_0}$ temos $k_i \geq k_0$. Logo $\|x^{k_i} - a\| < \varepsilon$. \square

O limite de uma subsequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}'}$ é chamado valor de aderência ou ponto de acumulação da sequência (x^k) .

Exercícios 1.3

1. Considere a sequência $x^k = (-1)^k + \frac{1}{k+1}$. Mostre que (x^k) tem dois pontos de acumulação e portanto não é convergente.
2. Podemos dizer que se a sequência tem um único ponto de acumulação, então ela é convergente?
3. Considere uma sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}$. Se $x^k \rightarrow a > 0$ então existe $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que para $k \geq k_0$ tem-se $x^k \geq \frac{a}{2}$.

Definição 1.4 Uma sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}^n$ é limitada, quando o conjunto formado pelos seus elementos é limitado, ou seja, quando existe um número real $M > 0$ tal que $\|x^k\| \leq M$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

Definição 1.5 Seja $(x^k) \subset \mathbb{R}$ uma sequência limitada. Definimos o limite inferior da sequência (x^k) como seu menor ponto de acumulação e denotamos por $\liminf x^k$. Analogamente definimos o limite superior da sequência como seu maior ponto de acumulação e denotamos por $\limsup x^k$.

Exercícios 1.6

1. Determine $\liminf x^k$ e $\limsup x^k$, sendo $x^k = (-1)^k + \frac{1}{k+1}$.
2. Faça o mesmo para $(x^k) = (1, 2, 3, 1, 2, 3, \dots)$.

Definição 1.7 Sejam $(v_k) \subset \mathbb{R}^n$ e $(\lambda_k) \subset \mathbb{R} - \{0\}$ sequências com $\lambda_k \rightarrow 0$. Dizemos que $v_k = o(\lambda_k)$ quando $\frac{v_k}{\lambda_k} \rightarrow 0$. Mais geralmente, considere $g : J \subset \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}^n$ com 0 sendo um ponto de acumulação de J . Dizemos que $g(\lambda) = o(\lambda)$ quando $g(\lambda_k) = o(\lambda_k)$ para toda sequência $(\lambda_k) \subset J$ com $\lambda_k \rightarrow 0$.

A seguir enunciaremos alguns resultados importantes. As demonstrações podem ser encontradas em [4, 15, 16].

Teorema 1.8 Toda sequência convergente é limitada.

Teorema 1.9 Toda sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}$ monótona limitada é convergente.

Teorema 1.10 *Uma sequência limitada em \mathbb{R}^n é convergente se, e somente se, possui um único ponto de acumulação.*

Tendo visto o teorema acima, reveja o Exercício 1.3 (2).

Teorema 1.11 (Bolzano-Weierstrass) *Toda sequência limitada em \mathbb{R}^n possui uma subsequência convergente.*

O próximo resultado será útil na análise da convergência de algoritmos, que trataremos no Capítulo 4.

Teorema 1.12 *Seja $(x^k) \subset \mathbb{R}$ uma sequência monótona que possui uma subsequência convergente, digamos $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} a$. Então $x^k \rightarrow a$.*

Demonstração. Suponha que (x^k) é não crescente (o caso não decrescente é análogo). Afirmamos que $x^k \geq a$, para todo $k \in \mathbb{N}$. De fato, do contrário existiria $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que $x^k \leq x^{k_0} < a$, para todo $k \in \mathbb{N}$, $k \geq k_0$. Assim nenhuma subsequência de (x^k) poderia convergir para a . Provamos então que (x^k) é monótona e limitada. Pelo Teorema 1.9, temos que $x^k \rightarrow a$. \square

1.1.2 Velocidade de convergência

No contexto de otimização existe outro aspecto importante a ser analisado em uma sequência: a velocidade de convergência. Considere, por exemplo, as sequências

$$x^k = \frac{1}{k+5}, \quad y^k = \frac{1}{3^k} \quad \text{e} \quad z^k = \frac{1}{2^{2^k}}.$$

Vemos que todas elas convergem para 0, mas não com a mesma rapidez, conforme sugere a tabela abaixo.

k	1	2	3	4	5	6	7	8
x^k	0.1667	0.1429	0.1250	0.1111	0.1000	0.0909	0.0833	0.0769
y^k	0.3333	0.1111	0.0370	0.0123	0.0041	0.0014	0.0005	0.0002
z^k	0.2500	0.0625	0.0039	0.00001	0.0000000002	0.0...	0.0...	0.0...

Diante disto, é conveniente estabelecer uma maneira de medir a velocidade de sequências convergentes. Considere então uma sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}^n$ convergente para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Assim, $e_k = \|x^k - \bar{x}\| \rightarrow 0$. O que faremos é avaliar como o erro e_k tende para 0. Na primeira forma o erro a cada iteração não supera uma fração do erro anterior.

Definição 1.13 *Dizemos que a sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}^n$ converge linearmente para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ quando existe uma constante $r \in [0, 1)$ e um número natural $k_0 \in \mathbb{N}$, tais que*

$$\frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|} \leq r, \quad (1.1)$$

para todo $k \geq k_0$.

Note que a condição (1.1) implica que $x^k \rightarrow \bar{x}$, pois

$$\|x^{k_0+p} - \bar{x}\| \leq r^p \|x^{k_0} - \bar{x}\|,$$

para todo $p \in \mathbb{N}$ e $r \in [0, 1)$.

Exemplo 1.14 A sequência $x^k = \frac{1}{k+5}$ não converge linearmente para 0.

Resolução. De fato, temos

$$\frac{\|x^{k+1}\|}{\|x^k\|} = \frac{k+5}{k+6} \rightarrow 1.$$

□

Exemplo 1.15 A sequência $y^k = \frac{1}{3^k}$ converge linearmente para 0.

Resolução. Basta notar que

$$\frac{\|y^{k+1}\|}{\|y^k\|} = \frac{1}{3}.$$

□

Vejamos agora uma forma mais veloz de convergência.

Definição 1.16 A sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}^n$ converge superlinearmente para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ quando

$$\frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|} \rightarrow 0. \quad (1.2)$$

Note que a condição (1.2) também implica que $x^k \rightarrow \bar{x}$.

Exemplo 1.17 A sequência $x^k = \frac{1}{2^{k^2}}$ converge superlinearmente para 0.

Resolução. Temos

$$\frac{\|x^{k+1}\|}{\|x^k\|} = \frac{2^{k^2}}{2^{(k+1)^2}} = \frac{1}{2^{2k+1}} \rightarrow 0.$$

□

Outra forma de convergência, ainda mais rápida, é dada abaixo.

Definição 1.18 A sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}^n$ converge quadraticamente para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ quando $x^k \rightarrow \bar{x}$ e existe uma constante $M > 0$ tal que

$$\frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|^2} \leq M. \quad (1.3)$$

É importante observar que apenas a condição (1.3) não implica que $x^k \rightarrow \bar{x}$, como podemos ver na sequência $x^k = 2^k$.

Exemplo 1.19 A sequência $z^k = \frac{1}{2^{2^k}}$ converge quadraticamente para 0.

Resolução. Temos

$$\frac{\|x^{k+1}\|}{\|x^k\|^2} = \frac{(2^{2^k})^2}{2^{2^{k+1}}} = 1.$$

□

Exemplo 1.20 A sequência $x^k = \frac{1}{k!}$ converge superlinearmente mas não quadraticamente para 0.

Resolução. Temos

$$\frac{\|x^{k+1}\|}{\|x^k\|} = \frac{k!}{(k+1)!} = \frac{1}{k+1} \rightarrow 0.$$

e

$$\frac{\|x^{k+1}\|}{\|x^k\|^2} = \frac{(k!)^2}{(k+1)!} = \frac{k!}{k+1} = \frac{k}{k+1}(k-1)! \rightarrow \infty.$$

□

Exercícios 1.21

1. Estude a convergência de $x^k = \frac{1}{k^k}$.
2. Faça o mesmo para $x^k = e^{-k^2}$.

1.2 Noções de topologia

Definição 1.22 Um ponto $a \in \mathbb{R}^n$ é dito ponto de fronteira de um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ quando qualquer vizinhança de a contém algum elemento de X e algum elemento do complementar de X . O conjunto dos pontos fronteira de X é chamado de fronteira de X e será denotado por ∂X .

O fecho de um conjunto X é a união de X com a fronteira de X e é denotado por \overline{X} .

Definição 1.23 Um conjunto X é fechado quando contém sua fronteira, ou seja, quando $\partial X \subset X$. Se além disso X for limitado, diremos que ele é compacto.

De forma equivalente, podemos dizer que $X \subset \mathbb{R}^n$ é compacto se, e somente se, toda sequência de elementos de X possui uma subsequência que converge para algum elemento de X .

Exercícios 1.24

1. Considere $a \in \partial X$. Mostre que existem sequências $(x^k) \subset X$ e $(y^k) \subset \mathbb{R}^n \setminus X$ tais que $x^k \rightarrow a$ e $y^k \rightarrow a$.

2. Determine a fronteira dos conjuntos abaixo e verifique se são compactos:

- (a) $X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| < 1\}$;
- (b) \mathbb{Q} , o conjunto dos racionais;
- (c) $X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| = 1\}$;
- (d) $X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \leq b\}$, onde $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $b \in \mathbb{R}^m$ são dados.

Definição 1.25 Um ponto $a \in X \subset \mathbb{R}^n$ é chamado um ponto interior a X quando é centro de alguma bola aberta contida em X , ou seja, quando existe $\delta > 0$ tal que $B(a, \delta) \subset X$.

O interior de um conjunto X é formado pelos pontos interiores a X e denotado por $\text{int}(X)$.

Definição 1.26 Um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ é aberto, quando todos os seus pontos são interiores, ou seja para todo $a \in X$ existe $\delta > 0$ tal que $B(a, \delta) \subset X$.

1.3 Resultados de álgebra linear

As principais referências desta seção são [7, 14].

Definição 1.27 O núcleo de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, denotado por $\mathcal{N}(A)$, é um subconjunto de \mathbb{R}^n formado por todas as soluções do sistema homogêneo $Ax = 0$, ou seja,

$$\mathcal{N}(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}.$$

Temos que $\mathcal{N}(A)$ é um subespaço vetorial de \mathbb{R}^n . O número $\dim(\mathcal{N}(A))$ é chamado nulidade de A .

Lema 1.28 Considere $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Então $\mathcal{N}(A^T A) = \mathcal{N}(A)$.

Demonstração. Seja $x \in \mathcal{N}(A^T A)$, isto é, $A^T Ax = 0$. Multiplicando por x^T , obtemos $0 = x^T A^T Ax = (Ax)^T Ax = \|Ax\|^2$. Assim, $Ax = 0$, logo $x \in \mathcal{N}(A)$. Reciprocamente, se $x \in \mathcal{N}(A)$, então $Ax = 0$. Multiplicando por A^T , obtemos $A^T Ax = A^T 0 = 0$, o que completa a prova. \square

Definição 1.29 A imagem de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é o conjunto

$$\text{Im}(A) = \{y \in \mathbb{R}^m \mid y = Ax, \text{ para algum } x \in \mathbb{R}^n\}.$$

Note que $\text{Im}(A)$ é o espaço vetorial gerado pelas colunas de A , chamado espaço coluna de A . O posto de A é definido por $\text{posto}(A) = \dim(\text{Im}(A))$.

Prova-se em álgebra linear que $\text{posto}(A) = \text{posto}(A^T)$, ou seja, o espaço-linha e o espaço-coluna de A tem a mesma dimensão. Portanto, $\text{posto}(A) \leq \min\{m, n\}$. Quando ocorre a igualdade na expressão acima, dizemos que a matriz A tem posto cheio ou posto completo e em consequência disto, ou as colunas ou as linhas de A são linearmente independentes.

Outro fato clássico afirma que $\dim(\mathcal{N}(A)) + \dim(\text{Im}(A)) = n$, o que equivale a

$$\dim(\mathcal{N}(A)) + \text{posto}(A) = n. \quad (1.4)$$

Exercícios 1.30

1. Mostre que $\mathcal{N}(A) \perp \text{Im}(A^T)$.
2. Mostre que $\text{posto}(A) = \text{posto}(A^T A)$.

Definição 1.31 *Seja Y um subespaço de \mathbb{R}^n . O complemento ortogonal de Y é o conjunto dado por*

$$Y^\perp = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^T y = 0 \text{ para todo } y \in Y\}.$$

Lema 1.32 *Se $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, então $\mathcal{N}(A) = \text{Im}(A^T)^\perp$.*

Demonstração. Dado $x \in \text{Im}(A^T)^\perp$, temos $(Ax)^T y = x^T A^T y = 0$, para todo $y \in \mathbb{R}^m$. Portanto, $Ax = 0$, o que implica que $x \in \mathcal{N}(A)$. Reciprocamente, se $x \in \mathcal{N}(A)$, então $Ax = 0$. Logo $x^T (A^T y) = (Ax)^T y = 0$, para todo $y \in \mathbb{R}^m$, isto é, $x \in \text{Im}(A^T)^\perp$. Portanto $\mathcal{N}(A) = \text{Im}(A^T)^\perp$. \square

A definição que segue é de fundamental importância em otimização. Ela será usada mais adiante para estabelecer condições de otimalidade de um problema de PNL.

Definição 1.33 *Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica. Dizemos que A é definida positiva quando $x^T A x > 0$, para todo $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$. Tal propriedade é denotada por $A > 0$. Se $x^T A x \geq 0$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, A é dita semidefinida positiva, fato este denotado por $A \geq 0$.*

Exemplo 1.34 *Considere $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$. Se $A > 0$, então $a > 0$ e $\det(A) > 0$.*

Resolução. De fato, dado $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$, temos

$$x^T A x = ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 > 0.$$

Em particular, fazendo $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, obtemos $a > 0$. Além disso, tomando $x = \begin{pmatrix} t \\ 1 \end{pmatrix}$, obtemos $at^2 + 2bt + c > 0$, para todo $t \in \mathbb{R}$. Isto implica que o discriminante $4b^2 - 4ac$ é negativo, donde segue que $\det(A) = ac - b^2 > 0$. \square

A recíproca do fato provado acima também é verdadeira. Mais ainda, o resultado vale em $\mathbb{R}^{n \times n}$. Veja o Exercício 1.9 no final do capítulo.

Podemos inverter as desigualdades na Definição 1.33 para dizer o que é uma matriz definida negativa ou semidefinida negativa. Entretanto, existem matrizes que não são nem positivas nem negativas, o que motiva a seguinte definição.

Definição 1.35 *Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica. Dizemos que A é indefinida quando existem $x, y \in \mathbb{R}^n$ tais que $x^T A x < 0 < y^T A y$.*

Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica, então existe uma base ortonormal de autovetores, digamos $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Sendo $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ os autovalores associados, $P = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n)$ e $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, temos

$$AP = (Av_1 \ Av_2 \ \dots \ Av_n) = (\lambda_1 v_1 \ \lambda_2 v_2 \ \dots \ \lambda_n v_n) = PD.$$

Além disso, $P^T P = I$ e, portanto,

$$A = PDP^T. \quad (1.5)$$

A relação (1.5) permite caracterizar a positividade de uma matriz em função dos seus autovalores. Basta notar que dado $x \in \mathbb{R}^n$, definindo $y = P^T x$, temos

$$x^T A x = y^T D y = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2. \quad (1.6)$$

Os detalhes são deixados para o Exercício 1.10, no final do capítulo.

Outra relação importante que decorre de (1.5) é dada no seguinte resultado.

Lema 1.36 *Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica com λ_1 e λ_n sendo o menor e o maior autovalor, respectivamente, então*

$$\lambda_1 \|x\|^2 \leq x^T A x \leq \lambda_n \|x\|^2,$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Demonstração. Use a relação (1.6) e note que $\|y\|^2 = y^T y = x^T x = \|x\|^2$. \square

1.4 Fórmula de Taylor

As aproximações de Taylor para uma função constituem uma das mais importantes ferramentas em otimização, tanto no desenvolvimento da teoria quanto na construção de algoritmos. Aparecem por exemplo, na demonstração das condições de otimalidade de segunda ordem, que veremos no próximo capítulo, bem como na ideia do Método de Newton.

A Figura 1.1 abaixo ilustra as aproximações de Taylor de ordens 1 e 2 da função seno.

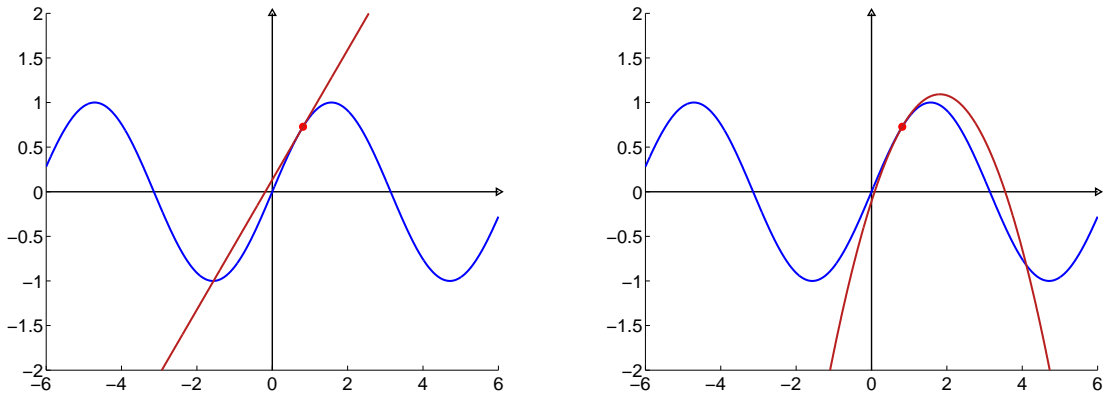


Figura 1.1: aproximações de Taylor de ordens 1 e 2.

Trabalharemos aqui com aproximações de primeira e segunda ordem. As de ordem superior, apesar de serem mais precisas (veja Figura 1.2), deixam de ser convenientes pelo alto custo computacional para o cálculo das derivadas.

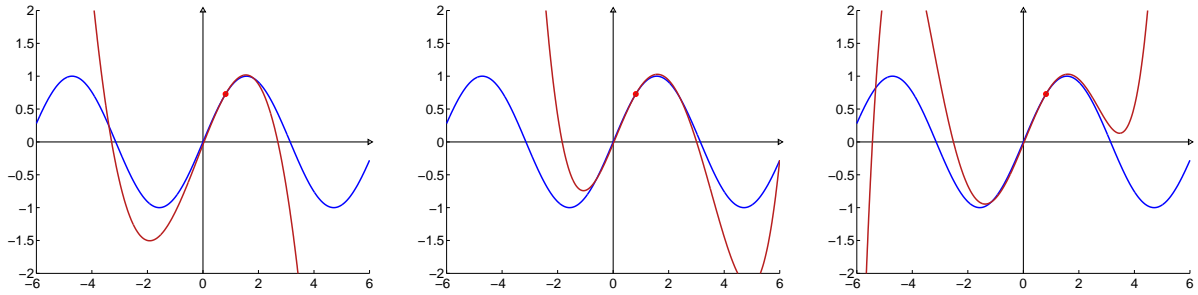


Figura 1.2: aproximações de Taylor de ordens 3, 4 e 5.

Antes de apresentar as fórmulas de Taylor vamos trabalhar um pouco com derivadas em várias variáveis. Inicialmente, considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe \mathcal{C}^2 . Indicaremos o gradiente e a hessiana de f , respectivamente, por

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \nabla^2 f = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Agora considere uma função vetorial $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. Sua derivada, chamada de jacobiana, é a matriz

$$J_f = f' = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Note que a linha i da jacobiana de f é o gradiente transposto da componente f_i . Em particular, para $m = 1$, temos $f' = (\nabla f)^T$. Além disso, $\nabla^2 f = J_{\nabla f}$.

O gradiente de uma função tem propriedades muito interessantes, tanto algébricas quanto geométricas. Destacamos abaixo algumas delas.

1. O gradiente é uma direção de crescimento da função;
2. É a direção de crescimento mais rápido;
3. O gradiente é perpendicular à curva de nível da função.

A justificativa dessas afirmações pode ser encontrada no Capítulo 3 de [16]. A Figura 1.3 ilustra as propriedades citadas.

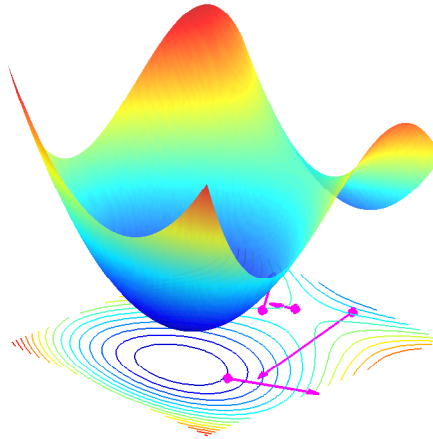


Figura 1.3: propriedades do vetor gradiente.

Exercícios 1.37

1. Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \|x\|^2 = x^T x$. Calcule $\nabla f(x)$ e $\nabla^2 f(x)$.
2. Generalizando o exercício anterior, considere $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e defina $f(x) = x^T A x$. Calcule $\nabla f(x)$ e $\nabla^2 f(x)$.

Outra relação importante surge quando restringimos uma função definida em \mathbb{R}^n aos pontos de um segmento de reta. Mais formalmente, dados $a, d \in \mathbb{R}^n$ e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, definimos $\varphi : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ por $\varphi(t) = f(a + td)$. Vamos calcular as derivadas de φ . Temos

$$\varphi'(t) = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\varphi(t+s) - \varphi(t)}{s} = \frac{\partial f}{\partial d}(a + td) = \nabla f(a + td)^T d.$$

Para calcular φ'' , note que $\varphi'(t) = \sum_{j=1}^n d_j \frac{\partial f}{\partial x_j}(a + td)$. Assim

$$\varphi''(t) = \sum_{j=1}^n d_j \nabla \frac{\partial f}{\partial x_j}(a + td)^T d = d^T \nabla^2 f(a + td) d.$$

Na Figura 1.4 temos uma superfície ilustrando o gráfico de f , um segmento de reta representando os pontos $a + td$ e uma curva sendo o gráfico de φ .

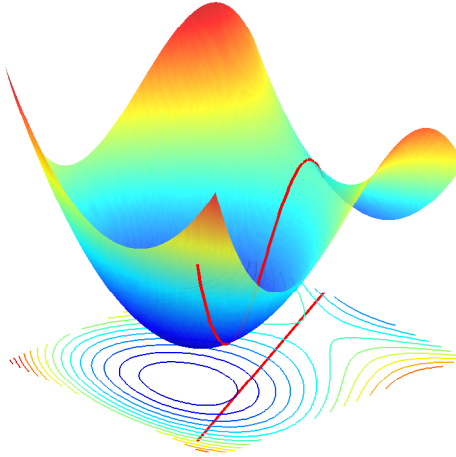


Figura 1.4: restrição de uma função a um segmento.

Finalmente vamos apresentar as Fórmulas de Taylor. As demonstrações podem ser encontradas em [16].

Teorema 1.38 (Taylor de primeira ordem) *Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe \mathcal{C}^1 e $a \in \mathbb{R}^n$. Então podemos escrever*

$$f(x) = f(a) + \nabla f(a)^T(x - a) + r(x),$$

$$\text{com } \lim_{x \rightarrow a} \frac{r(x)}{\|x - a\|} = 0.$$

O polinômio $p_1(x) = f(a) + \nabla f(a)^T(x - a)$ é chamado polinômio de Taylor de ordem 1 da função f . Dentre todos os polinômios de grau menor ou igual a 1, ele é o que melhor aproxima f . É também o único que satisfaz

$$p(a) = f(a) \quad \text{e} \quad p'(a) = f'(a).$$

Na Figura 1.5 ilustramos o erro cometido ao se aproximar f por p_1 .

O limite nulo no Teorema 1.38 significa que para x próximo de a o resto $r(x)$ é muito pequeno e vai para zero mais rápido que $\|x - a\|$.

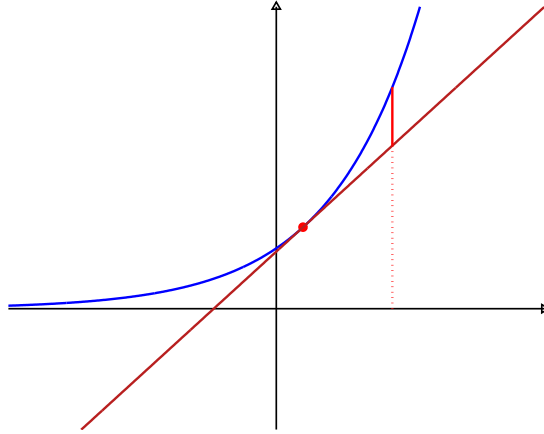


Figura 1.5: resto de Taylor de ordem 1.

Também é conveniente observar que podemos reescrever o Teorema 1.38 fazendo uma simples mudança de variável. De fato, definindo $d = x - a$, temos

$$f(a + d) = f(a) + \nabla f(a)^T d + r(d),$$

$$\text{com } \lim_{d \rightarrow 0} \frac{r(d)}{\|d\|} = 0.$$

Agora podemos nos perguntar qual é a melhor quadrática que aproxima uma dada função em uma vizinhança de um ponto. A resposta é dada pelo próximo teorema.

Teorema 1.39 (Taylor de segunda ordem) *Se $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função de classe \mathcal{C}^2 e $a \in \mathbb{R}^n$, então*

$$f(x) = f(a) + \nabla f(a)^T (x - a) + \frac{1}{2} (x - a)^T \nabla^2 f(a) (x - a) + r(x),$$

$$\text{com } \lim_{x \rightarrow a} \frac{r(x)}{\|x - a\|^2} = 0.$$

Analogamente ao que vimos anteriormente, o polinômio

$$p_2(x) = f(a) + \nabla f(a)^T (x - a) + \frac{1}{2} (x - a)^T \nabla^2 f(a) (x - a)$$

é chamado polinômio de Taylor de ordem 2 da função f e é a melhor aproximação para f dentre todos os polinômios de grau menor ou igual a 2. Além disso é o único que satisfaz

$$p(a) = f(a), \quad p'(a) = f'(a) \quad \text{e} \quad p''(a) = f''(a).$$

Na Figura 1.6 ilustramos o erro cometido ao se aproximar f por p_2 .

O limite nulo no Teorema 1.39 significa que para x próximo de a o resto $r(x)$ é muito pequeno e vai para zero muito mais rápido que $\|x - a\|$.

Aqui também podemos reescrever o Teorema 1.39 fazendo $d = x - a$. Ficamos

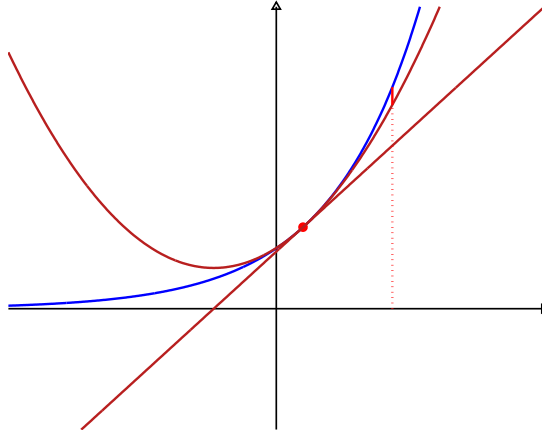


Figura 1.6: resto de Taylor de ordem 2.

com

$$f(a + d) = f(a) + \nabla f(a)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(a) d + r(d),$$

com $\lim_{d \rightarrow 0} \frac{r(d)}{\|d\|^2} = 0$.

Exemplo 1.40 Considere a função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x_1 \cos x_2 + x_2 \sin x_1$. Determine as aproximações de Taylor de ordens 1 e 2 para f em torno de 0. Estime o erro da linear na região $[-1, 1] \times [-1, 1]$.

Resolução. Temos $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \cos x_2 + x_2 \cos x_1 \\ \sin x_1 - x_1 \sin x_2 \end{pmatrix}$. Assim, $p_1(x) = f(0) + \nabla f(0)^T x = x_1$.

Para estimar o erro, note que se $|z| \leq 1$, então $\cos z > \frac{1}{2}$ e $|\sin z| < \frac{\sqrt{3}}{2}$. Portanto,

$$|f(x) - p_1(x)| = |f(x) - x_1| \leq |x_1| |\cos x_2 - 1| + |x_2 \sin x_1| < 1,367.$$

Esta estimativa é razoável pois $\left| f \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} - 1 \right| \approx 1,3$. □

Veremos agora outra fórmula de Taylor, na qual não supomos $d \rightarrow 0$ para estimar a diferença $f(a + d) - f(a)$. Para ordem 1, ela é exatamente o Teorema do Valor Médio. De modo geral a chamamos de Taylor com resto de Lagrange.

Teorema 1.41 (Teorema do Valor Médio) Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe \mathcal{C}^1 e $a \in \mathbb{R}^n$. Então existe $t \in (0, 1)$ tal que

$$f(a + d) = f(a) + \nabla f(a + td)^T d.$$

A Figura 1.7 ilustra o TVM.

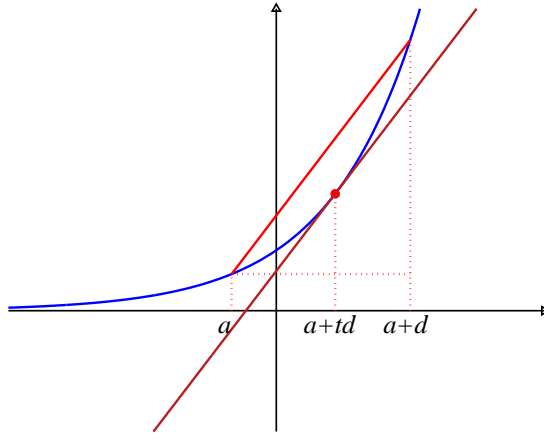


Figura 1.7: Teorema do Valor Médio.

Teorema 1.42 (Taylor com resto de Lagrange) Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe \mathcal{C}^2 e $a \in \mathbb{R}^n$. Então existe $t \in (0, 1)$ tal que

$$f(a + d) = f(a) + \nabla f(a)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(a + td) d.$$

1.5 Exercícios do capítulo

1.1. Considere a sequência definida por $y^1 = 0$, $y^{k+1} = \frac{1}{1 + 2y^k}$. Mostre que:

- (a) $0 \leq y^k \leq 1$ para todo $k \in \mathbb{N}$.
- (b) $(y^{2k-1})_{k \in \mathbb{N}}$ é crescente e $(y^{2k})_{k \in \mathbb{N}}$ é decrescente.
- (c) $y^k \rightarrow \frac{1}{2}$.

1.2. Considere as sequências definidas por $a^1 = 0$, $a^2 = 1$, $a^{k+2} = \frac{a^{k+1} + a^k}{2}$ e $x^1 = 0$, $x^2 = 1$, $x^{k+2} = x^{k+1} + 2x^k$. Mostre que:

- (a) $a^k = \frac{x^k}{2^{k-2}}$ para todo $k \in \mathbb{N}$.
- (b) $x^{k+1} + x^k = 2^{k-1}$ para todo $k \in \mathbb{N}$.
- (c) $\frac{x^k}{x^{k+1}} \rightarrow \frac{1}{2}$.
- (d) $a^k \rightarrow \frac{2}{3}$.

1.3. Generalize o exercício anterior. Considere a sequência definida por $a^1 = \alpha$, $a^2 = \beta$, $a^{k+2} = \frac{a^{k+1} + a^k}{2}$, com $\alpha < \beta$ e mostre que $a^k \rightarrow \alpha + \frac{2}{3}(\beta - \alpha)$.

1.4. Mostre que a convergência superlinear implica na linear, mas a recíproca é falsa.

1.5. Mostre que a convergência quadrática implica na superlinear, mas a recíproca é falsa.

1.6. Considere $X \subset \mathbb{R}^n$ e $(y^k) \subset \partial X$, tal que $y^k \rightarrow a$. Mostre que $a \in \partial X$.

1.7. Se V é um subespaço de \mathbb{R}^n , então $\mathbb{R}^n = V \oplus V^\perp$.

1.8. Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica. Sendo $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ uma base ortonormal de autovetores e $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ os autovalores associados. Supondo que nenhum autovalor é nulo, obtenha uma expressão para a inversa A^{-1} .

1.9. A matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida positiva se, e somente se, os determinantes principais são positivos.

1.10. A matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida positiva se, e somente se, todos os seus autovalores são positivos.

1.11. Seja $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ uma matriz de posto n . Mostre que $A^T A$ é definida positiva.

1.12. Considere $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e defina $f(x) = \|g(x)\|_2^2$. Calcule $\nabla f(x)$ e $\nabla^2 f(x)$.

1.13. Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \|Ax - b\|_2^2$, onde $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $b \in \mathbb{R}^m$. Calcule $\nabla f(x)$.

1.14. Obtenha os polinômios de Taylor de ordens 1 e 2 das funções dadas.

(a) $f(x, y) = \frac{x}{1+y}$ em $P = (0, 0)$.

(b) $f(x, y) = e^x \sqrt{1+y^2}$ em $P = (0, 0)$.

1.15. Aproxime $f(x) = e^x$ em $a = 0$ pelos polinômios de Taylor de ordem 3 e 4. A seguir, calcule os valores dessas aproximações em $x = 0,2$ e $x = 1$ e compare com os valores corretos.

1.16. Calcule os polinômios de Taylor de ordem 1, 2 e 3 da função $f(x) = \sqrt{x+1}$ em $a = 0$ e da função $g(x) = \ln x$ em $x = 1$. A seguir, calcule os valores dessas aproximações em $x = 0,2$ e $x = 1$ e compare com os valores corretos.

Capítulo 2

Introdução à Otimização Irrestrita

Neste capítulo trataremos do problema de minimização irrestrita. Algumas referências para este assunto são [5, 8].

2.1 O problema de otimização

Vamos considerar aqui o problema

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & x \in \mathbb{R}^n. \end{array} \quad (2.1)$$

Definição 2.1 Considere uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $\bar{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$. Dizemos que \bar{x} é um minimizador local de f em Ω quando existe $\delta > 0$, tal que $f(\bar{x}) \leq f(x)$, para todo $x \in B(\bar{x}, \delta) \cap \Omega$. Caso $f(\bar{x}) \leq f(x)$, para todo $x \in \Omega$, \bar{x} é dito minimizador global de f em Ω .

Quando as desigualdades na Definição 2.1 forem estritas para $x \neq \bar{x}$, diremos que \bar{x} é minimizador estrito. Se não for mencionado o conjunto Ω , significa que $\Omega = \mathbb{R}^n$.

Veremos em seguida condições que garantem a existência de minimizadores. Na Seção 2.2 discutiremos critérios de otimalidade.

Teorema 2.2 (Weierstrass) Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ contínua e $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ compacto não vazio. Então existe minimizador global de f em Ω .

Demonstração. Vejamos primeiro que o conjunto $f(\Omega) = \{f(x) \mid x \in \Omega\}$ é limitado inferiormente. Suponha por absurdo que não. Então, para todo $k \in \mathbb{N}$, existe $x^k \in \Omega$ tal que $f(x^k) \leq -k$. Como a sequência (x^k) está no compacto Ω , ela possui uma subsequência convergente para um ponto de Ω , digamos $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} \bar{x} \in \Omega$. Pela continuidade de f , temos $f(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} f(\bar{x})$, uma contradição. Portanto, $f(\Omega) = \{f(x) \mid x \in \Omega\}$ é limitado inferiormente. Considere $\bar{f} = \inf\{f(x) \mid x \in \Omega\}$. Então, para todo $k \in \mathbb{N}$, existe $x^k \in \Omega$ tal que

$$\bar{f} \leq f(x^k) \leq \bar{f} + \frac{1}{k},$$

o que implica $f(x^k) \rightarrow \bar{f}$. Repetindo o argumento acima, obtemos $f(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} f(\bar{x})$, com $\bar{x} \in \Omega$. Pela unicidade do limite, temos $f(\bar{x}) = \bar{f} \leq f(x)$, para todo $x \in \Omega$, o que completa a demonstração. \square

O Teorema 2.2 tem uma consequência interessante, que pode garantir a existência de minimizador global em \mathbb{R}^n .

Corolário 2.3 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ contínua e suponha que existe $c \in \mathbb{R}$ tal que o conjunto $L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq c\}$ é compacto não vazio. Então f tem um minimizador global.*

Demonstração. Pelo Teorema 2.2, existe $\bar{x} \in L$ tal que $f(\bar{x}) \leq f(x)$, para todo $x \in L$. Por outro lado, se $x \notin L$, temos $f(x) > c \geq f(\bar{x})$. Assim, $f(\bar{x}) \leq f(x)$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$. \square

Exercícios 2.4

1. Sejam $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x^T A x$. Mostre que f tem um minimizador global \bar{x} em $B = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| = 1\}$.
2. Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica. Usando o exercício anterior, mostre que existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que $x^T A x \geq \lambda \|x\|^2$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Veremos agora outro resultado que garante a existência de minimizador global em \mathbb{R}^n , sem supor compacidade. Em contrapartida, fazemos uma hipótese a mais sobre a função.

Definição 2.5 *Dizemos que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é coerciva quando $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f(x) = \infty$.*

Teorema 2.6 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e coerciva. Então, f tem um minimizador global.*

Demonstração. Considere $a \in \mathbb{R}^n$ e $b = f(a)$. Como $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f(x) = \infty$, existe $r > 0$ tal que $f(x) > b$, sempre que $\|x\| > r$. Como o conjunto $B = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq r\}$ é um compacto, o Teorema 2.2 garante que existe $\bar{x} \in B$ tal que $f(\bar{x}) \leq f(x)$, para todo $x \in B$. Além disso, $a \in B$, pois $f(a) = b$. Para $x \notin B$, temos $f(x) > b = f(a) \geq f(\bar{x})$. Isto prova que \bar{x} é minimizador de f . \square

Observação: o Exercício 2.11 no final do capítulo fornece outra demonstração para o Teorema 2.6.

Exercícios 2.7

1. Seja $\delta > 0$ e suponha que $d^T A d \geq 0$, para todo $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|d\| = \delta$. Prove que $d^T A d \geq 0$, para todo $d \in \mathbb{R}^n$.

Dica. Considere $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$. Tomando $v = \frac{\delta d}{\|d\|}$, temos que $\|v\| = \delta$. Portanto, usando a hipótese, temos que

$$\left(\frac{\delta}{\|d\|}\right)^2 d^T A d = v^T A v \geq 0.$$

Assim, $d^T A d \geq 0$. □

2. Sejam $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica, $b \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$. Suponha que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x^T A x + b^T x + c$ tem um minimizador local \bar{x} . Mostre que $2A\bar{x} + b = 0$. Mostre também que \bar{x} é minimizador global.

Dica. Dado $d \in \mathbb{R}^n$, temos $f(\bar{x} + td) = f(\bar{x}) + t^2 d^T A d + t(2A\bar{x} + b)^T d$. Como \bar{x} é minimizador local, para t suficientemente pequeno, vale $t^2 d^T A d + t(2A\bar{x} + b)^T d \geq 0$. Portanto, $2A\bar{x} + b = 0$. Para ver que \bar{x} é global, note que $f(\bar{x} + d) = f(\bar{x}) + d^T A d + (2A\bar{x} + b)^T d = f(\bar{x}) + d^T A d$. Como $d^T A d \geq 0$ para d próximo de 0, o mesmo vale para todo $d \in \mathbb{R}^n$. □

3. Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida positiva, mostre que a função acima é coerciva.

Dica. Se λ é o menor autovalor de A , temos $f(x) \geq \lambda \|x\|^2 - \|b\| \|x\| + c$. □

2.2 Condições de otimalidade

Teorema 2.8 (Condição necessária de 1ª ordem) *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciável no ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Se \bar{x} é um minimizador local de f , então*

$$\nabla f(\bar{x}) = 0. \tag{2.2}$$

Demonstração. Considere $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ arbitrário. Como \bar{x} é minimizador local, existe $\delta > 0$ tal que

$$f(\bar{x}) \leq f(\bar{x} + td), \tag{2.3}$$

para todo $t \in [0, \delta)$. Pela expansão de Taylor,

$$f(\bar{x} + td) = f(\bar{x}) + t \nabla f(\bar{x})^T d + r(t),$$

com $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{r(t)}{t} = 0$. Usando 2.3 e dividindo por t , obtemos $0 \leq \nabla f(\bar{x})^T d + \frac{r(t)}{t}$. Passando o limite quando $t \rightarrow 0$, obtemos $\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0$. Se $\nabla f(\bar{x})$ não fosse nulo, poderíamos escolher $d = -\nabla f(\bar{x})$, resultando em $\|\nabla f(\bar{x})\|^2 = -\nabla f(\bar{x})^T d \leq 0$, o que é uma contradição. Logo $\nabla f(\bar{x}) = 0$. □

Definição 2.9 *Dizemos que um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ é estacionário (ou crítico) para o problema (P), se vale a condição (2.2).*

Teorema 2.10 (Condição necessária de 2ª ordem) *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável no ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Se \bar{x} é um minimizador local de f , então a matriz Hessiana de f no ponto \bar{x} é semidefinida positiva, isto é,*

$$d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d \geq 0, \quad (2.4)$$

para todo $d \in \mathbb{R}^n$.

Demonstração. Considere $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ arbitrário. Por Taylor,

$$f(\bar{x} + td) = f(\bar{x}) + t \nabla f(\bar{x})^T d + \frac{t^2}{2} d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + r(t),$$

com $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{r(t)}{t^2} = 0$. Como \bar{x} é minimizador local, o Teorema 2.8 garante que $\nabla f(\bar{x}) = 0$. Portanto, para t suficientemente pequeno,

$$0 \leq f(\bar{x} + td) - f(\bar{x}) = \frac{t^2}{2} d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + r(t),$$

Dividindo por t^2 e passando o limite quando $t \rightarrow 0$, obtemos $d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d \geq 0$. \square

Exemplo 2.11 *Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = (x_1 - x_2^2)(x_1 - \frac{1}{2}x_2^2)$. Verifique que $\bar{x} = 0$ é o único ponto estacionário de f e não é minimizador. No entanto, fixada qualquer direção $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, \bar{x} minimiza localmente f ao longo de d .*

Resolução. Temos $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 - \frac{3}{2}x_2^2 \\ -3x_1x_2 + 2x_2^3 \end{pmatrix}$. Assim, se $\nabla f(x) = 0$, então $x = 0$. Além disso, $f\left(\frac{\frac{2}{3}t}{\sqrt{t}}\right) = -\frac{t^2}{18} < 0$, o que significa que $\bar{x} = 0$ não é minimizador local de f . Porém, dado $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, temos $f(\bar{x} + td) = t^2(d_1 - td_2^2)(d_1 - \frac{1}{2}td_2^2)$. Se $d_1 = 0$, então $f(\bar{x} + td) = \frac{1}{2}t^4d_2^4 \geq 0$. Caso $d_1 \neq 0$, a expressão $(d_1 - td_2^2)(d_1 - \frac{1}{2}td_2^2)$ é positiva em $t = 0$ e, por continuidade, também para t próximo de 0. A Figura 2.1 ilustra este exemplo. \square

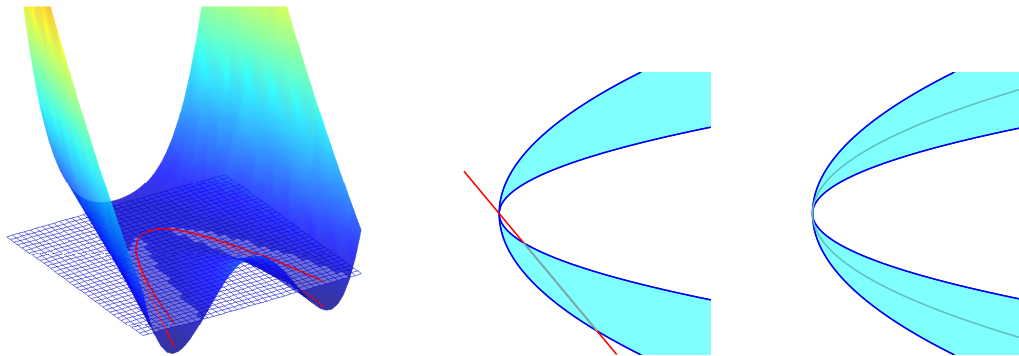


Figura 2.1: ilustração do Exemplo 2.11.

Teorema 2.12 (Condição suficiente de 2ª ordem) *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável no ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Se \bar{x} é um ponto estacionário e se a matriz Hessiana de f em \bar{x} é definida positiva, então \bar{x} é minimizador local estrito do problema (P).*

Demonstração. Seja λ o menor autovalor de $\nabla^2 f(\bar{x})$. Como esta matriz é definida positiva, temos $\lambda > 0$. Além disso, pelo Lema 1.36 (veja também Exercícios 2.4 da Seção 2.1), $d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d \geq \lambda \|d\|^2$. Por Taylor, já usando o fato de \bar{x} ser estacionário, temos

$$f(\bar{x} + d) = f(\bar{x}) + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + r(d) \geq f(\bar{x}) + \frac{1}{2} \lambda \|d\|^2 + r(d),$$

com $\lim_{\|d\| \rightarrow 0} \frac{r(d)}{\|d\|^2} = 0$. Assim, $\frac{f(\bar{x} + d) - f(\bar{x})}{\|d\|^2} \geq \frac{\lambda}{2} + \frac{r(d)}{\|d\|^2}$. Como $\lim_{\|d\| \rightarrow 0} \left(\frac{\lambda}{2} + \frac{r(d)}{\|d\|^2} \right) > 0$, existe $\delta > 0$ tal que $\frac{\lambda}{2} + \frac{r(d)}{\|d\|^2} > 0$, para todo $d \in B(0, \delta) \setminus \{0\}$, donde segue que $f(\bar{x} + d) - f(\bar{x}) > 0$, para todo $d \in B(0, \delta) \setminus \{0\}$, ou, equivalentemente,

$$f(\bar{x}) < f(x),$$

para todo $x \in B(\bar{x}, \delta) \setminus \{\bar{x}\}$. □

Salientamos que as definições e resultados envolvendo minimizadores podem ser reformulados para maximizadores de forma inteiramente análoga. No entanto, convém estudar com mais detalhes alguns pontos que não são nem minimizadores nem maximizadores.

Definição 2.13 *Considere uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que \bar{x} é um ponto de sela da função f quando para todo $\varepsilon > 0$, existem $x, y \in B(\bar{x}, \varepsilon)$ tais que*

$$f(x) < f(\bar{x}) < f(y).$$

O próximo teorema nos fornece uma condição suficiente (mas não necessária) para que um ponto seja sela.

Teorema 2.14 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável no ponto estacionário $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Se $\nabla^2 f(\bar{x})$ é indefinida, então \bar{x} é ponto de sela de f .*

Demonstração. Considere $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d < 0$. Por Taylor, já usando o fato de \bar{x} ser estacionário, temos

$$\frac{f(\bar{x} + td) - f(\bar{x})}{t^2} = \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + \frac{r(t)}{t^2},$$

com $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{r(t)}{t^2} = 0$. Portanto,

$$f(\bar{x} + td) < f(\bar{x}),$$

para todo t suficientemente pequeno. Considere agora $v \in \mathbb{R}^n$ tal que $v^T \nabla^2 f(\bar{x})v > 0$. Analogamente, podemos concluir que $f(\bar{x} + tv) > f(\bar{x})$, para t suficientemente pequeno. Isto prova que \bar{x} é ponto de sela. \square

Exemplo 2.15 Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$f(x) = 2x_1^3 - 3x_1^2 - 6x_1x_2(x_1 - x_2 - 1).$$

Descreva os pontos estacionários da função f .

Resolução. Temos $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 6x_1^2 - 12x_1x_2 - 6x_1 + 6x_2^2 + 6x_2 \\ -6x_1^2 + 12x_1x_2 + 6x_1 \end{pmatrix}$. Logo, os pontos críticos são soluções de

$$\begin{cases} 6x_2^2 + 6x_2 = 0 \\ 6x_1^2 - 12x_1x_2 - 6x_1 = 0 \end{cases},$$

que podemos verificar que são $x^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $x^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $x^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ e $x^4 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

Além disso,

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 12x_1 - 12x_2 - 6 & -12x_1 + 12x_2 + 6 \\ -12x_1 + 12x_2 + 6 & 12x_1 \end{pmatrix}.$$

Fazendo $A_j = \frac{1}{6} \nabla^2 f(x_j)$, temos $A_1 = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $A_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$, $A_3 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ e $A_4 = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}$. Note que A_1 é indefinida, pois $u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $v = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ fornecem $u^T A_1 u < 0$ e $v^T A_1 v > 0$. Portanto x^1 é ponto de sela. Já o ponto x^2 é minimizador local, pois $A_2 > 0$. Além disso, $A_3 = -A_1$ também é indefinida, sendo então x^3 ponto de sela. Finalmente, $A_4 = -A_2 < 0$, o que implica que x^4 é maximizador local. A Figura 2.2 ilustra este exemplo. \square

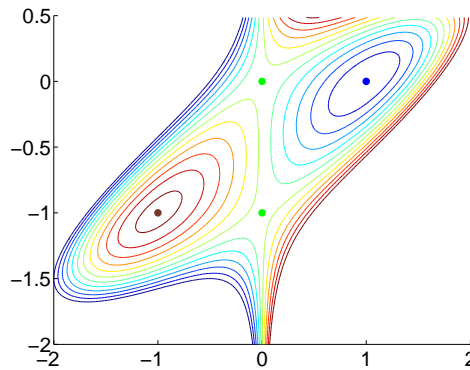


Figura 2.2: ilustração do Exemplo 2.15.

Exemplo 2.16 Dado $\sigma > 1$, mostre que o sistema

$$\begin{cases} \sigma \cos x_1 \sin x_2 + x_1 e^{x_1^2 + x_2^2} = 0 \\ \sigma \sin x_1 \cos x_2 + x_2 e^{x_1^2 + x_2^2} = 0 \end{cases}$$

tem uma solução $\bar{x} \neq 0$.

Resolução. $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \sigma \sin x_1 \sin x_2 + \frac{1}{2} e^{x_1^2 + x_2^2}$. Fazendo $u = x_1^2 + x_2^2$, temos que $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \sigma \cos x_1 \sin x_2 + x_1 e^u \\ \sigma \sin x_1 \cos x_2 + x_2 e^u \end{pmatrix}$ e

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} -\sigma \sin x_1 \sin x_2 + e^u + 2x_1^2 e^u & \sigma \cos x_1 \cos x_2 + 2x_1 x_2 e^u \\ \sigma \cos x_1 \cos x_2 + 2x_1 x_2 e^u & -\sigma \sin x_1 \sin x_2 + e^u + 2x_2^2 e^u \end{pmatrix}.$$

Portanto, $\nabla^2 f(0) = \begin{pmatrix} 1 & \sigma \\ \sigma & 1 \end{pmatrix}$. Como $\sigma > 1$, $\nabla^2 f(0)$ não é semidefinida positiva e assim, $x = 0$ não pode ser minimizador local de f . Mas f é coerciva e portanto tem um minimizador local $\bar{x} \neq 0$. □

2.3 Exercícios do capítulo

2.1. Sejam $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função estritamente crescente e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Prove que minimizar $f(x)$ é equivalente a minimizar $g(f(x))$.

2.2. Considere números reais $a < b < c$ e as funções $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, definidas por

$$f(x) = |x - a| + |x - b| \quad \text{e} \quad g(x) = |x - a| + |x - b| + |x - c|.$$

Determine os minimizadores destas funções.

2.3. Sejam $a, b \in \mathbb{R}$ dois números reais positivos. Considere a função de Rosenbrock $f(x) = a(x_2 - x_1^2)^2 + b(1 - x_1)^2$. Encontre o (único) ponto estacionário de f e verifique se é minimizador local. Prove que $\nabla^2 f(x)$ é singular se e somente se $x_2 - x_1^2 = \frac{b}{2a}$.

2.4. Prove que a função $f(x) = (x_2 - x_1^2)^2 + x_1^5$ tem um único ponto estacionário que não é minimizador nem maximizador local.

2.5. Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ contínua, $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ e $\bar{f} = f(\bar{x})$. Suponha que todo x tal que $f(x) = \bar{f}$ é um minimizador local de f . Mostre que \bar{x} é um minimizador global de f .

2.6. Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \sin x_1 \sin x_2 + e^{x_1^2 + x_2^2}$. Mostre que $\bar{x} = 0$ é ponto estacionário de f . Diga se é minimizador, maximizador ou sela.

2.7. Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2^2$. Determine e faça um esboço do conjunto $\{x \in \mathbb{R}^2 \mid \nabla^2 f(x) > 0\}$.

2.8. Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x_1^2 - x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_1 + \frac{2}{3}x_2 + e^{x_1+x_2}$.

(a) Mostre que $\bar{x} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ é um ponto estacionário de f .

(b) Calcule $\nabla^2 f(\bar{x})$ e diga se \bar{x} é minimizador local.

2.9. Considere o problema irrestrito

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) = x_1^2 - x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_1 + e^{x_1+x_2} \\ \text{sujeito a} & x \in \mathbb{R}^2. \end{array}$$

(a) Verifique que o ponto $\bar{x} = 0$ não é ótimo.

(b) Minimize a função a partir de \bar{x} na direção $d = -\nabla^T f(\bar{x})$.

2.10. Se for possível determine a e b de modo que $f(x) = x^3 + ax^2 + bx$ tenha um máximo local em $x = 0$ e um mínimo local em $x = 1$.

2.11. Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e coerciva. Dado $a \in \mathbb{R}^n$, mostre que o conjunto $L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(a)\}$ é compacto não vazio.

2.12. Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ contínua e $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(\bar{x})\}$ é limitado. Mostre que f tem minimizador global.

Capítulo 3

Convexidade

Dentre as várias classes de funções estudadas em matemática, existe uma que se destaca pelas excelentes propriedades que possui: a classe das funções convexas. Em otimização, a convexidade permite por exemplo concluir que minimizadores locais são globais, ou ainda, que pontos estacionários são minimizadores. Algumas referências para este assunto são [2, 6, 19].

3.1 Conjuntos convexos

Os conjuntos convexos constituem o domínio natural para as funções convexas, conforme veremos agora.

Definição 3.1 Um conjunto $C \subset \mathbb{R}^n$ é dito *convexo* quando dados $x, y \in C$, o segmento $[x, y] = \{(1 - t)x + ty \mid t \in [0, 1]\}$ estiver inteiramente contido em C .

Na Figura 3.1 ilustramos 2 conjuntos, um convexo e outro não.

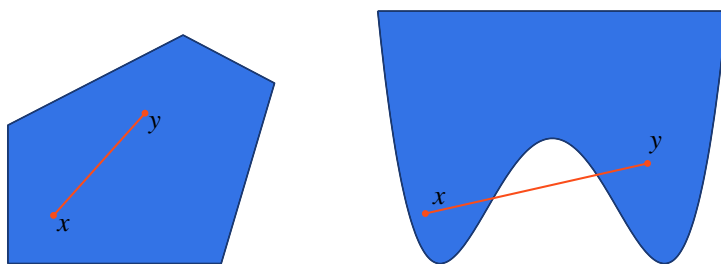


Figura 3.1: conjuntos convexo e não convexo.

Exercícios 3.2

1. Sejam C_i , $i = 1, \dots, m$ conjuntos convexos. Então o conjunto $C = \bigcap_{i=1}^m C_i$ também é convexo.
2. Mostre que o conjunto solução de um sistema de equações lineares é convexo.

Veremos agora alguns resultados que além de sua importância em análise convexa, podem também ser usados para provar o clássico Lema de Farkas, fundamental para a obtenção das condições de Karush-Kuhn-Tucker para problemas com restrições.

Lema 3.3 *Sejam $u, v \in \mathbb{R}^n$ com $u \neq v$. Se $\|u\|_2 = \|v\|_2 = r$, então $\|(1-t)u + tv\|_2 < r$, para todo $t \in (0, 1)$.*

Demonstração. Pela desigualdade triangular, temos

$$\|(1-t)u + tv\|_2 \leq (1-t)\|u\|_2 + t\|v\|_2 = r.$$

Suponha, por absurdo, que $\|(1-t)u + tv\|_2 = r$. Então

$$(1-t)^2 u^T u + 2t(1-t)u^T v + t^2 v^T v = \|(1-t)u + tv\|_2^2 = r^2.$$

Como $u^T u = v^T v = r^2$ e $t \in (0, 1)$, obtemos $u^T v = r^2$. Portanto,

$$\|u - v\|^2 = u^T u - 2u^T v + v^T v = 0,$$

o que é um absurdo. Assim,

$$\|(1-t)u + tv\|_2 < r,$$

completando a demonstração. \square

Considere agora um conjunto $S \subset \mathbb{R}^n$, um ponto $z \in \mathbb{R}^n$ e o problema de encontrar um ponto de S mais próximo de z . Este problema pode não ter solução e quando tem, não garantimos unicidade. No entanto, conforme provaremos a seguir, se S é fechado, então existe solução. Se além de fechado, for convexo, a solução é única e será chamada de projeção de z sobre S , denotada por $\text{proj}_S(z)$. Veja ilustração na Figura 3.2.

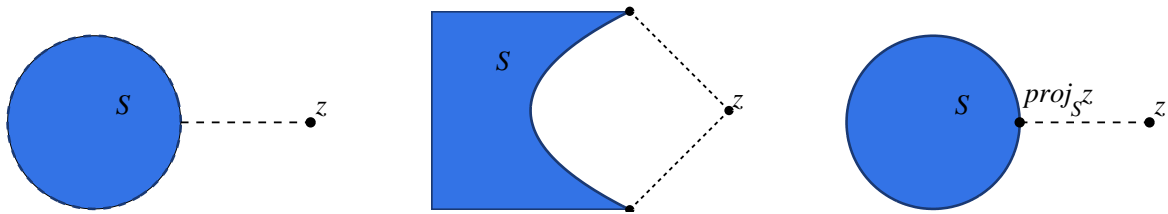


Figura 3.2: projeção sobre um conjunto.

Lema 3.4 *Seja $S \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto fechado não vazio. Dado $z \in \mathbb{R}^n$, existe $\bar{z} \in S$ tal que*

$$\|z - \bar{z}\| \leq \|z - x\|,$$

para todo $x \in S$.

Demonstração. Seja $\alpha = \inf\{\|z - x\| \mid x \in S\}$. Então, para todo $k \in \mathbb{N}$, existe $x^k \in S$ tal que

$$\alpha \leq \|z - x^k\| \leq \alpha + \frac{1}{k}. \quad (3.1)$$

Em particular, $\|z - x^k\| \leq \alpha + 1$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Logo, existe uma subsequência convergente, digamos, $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} \bar{z}$. Sendo S fechado, temos que $\bar{z} \in S$. Além disso,

$$\|z - x^k\| \xrightarrow{\mathbb{N}'} \|z - \bar{z}\|.$$

Mas por (3.1), $\|z - x^k\| \rightarrow \alpha$, donde segue que $\|z - \bar{z}\| = \alpha$, completando a prova. \square

Ao contrário do lema anterior, o próximo resultado depende da norma e será estabelecido usando a norma euclidiana.

Lema 3.5 *Seja $S \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto não vazio, convexo e fechado. Dado $z \in \mathbb{R}^n$, existe um único $\bar{z} \in S$ tal que*

$$\|z - \bar{z}\|_2 \leq \|z - x\|_2,$$

para todo $x \in S$. Denotaremos $\bar{z} = \text{proj}_S(z)$.

Demonstração. A existência é garantida pelo Lema 3.4. Para provar a unicidade, suponha que existam $\bar{z} \neq \tilde{z}$ em S tais que

$$\|z - \bar{z}\|_2 \leq \|z - x\|_2 \quad \text{e} \quad \|z - \tilde{z}\|_2 \leq \|z - x\|_2, \quad (3.2)$$

para todo $x \in S$. Tomando $x = \tilde{z}$ na primeira desigualdade e $x = \bar{z}$ na segunda, obtemos

$$\|z - \bar{z}\|_2 = \|z - \tilde{z}\|_2.$$

Por outro lado, o ponto $x = \frac{1}{2}(\bar{z} + \tilde{z})$ está no convexo S . Além disso, pelo Lema 3.3, com $r = \|z - \bar{z}\|_2 = \|z - \tilde{z}\|_2$ e $t = \frac{1}{2}$, temos

$$\|z - x\|_2 = \|(1 - t)(z - \bar{z}) + t(z - \tilde{z})\|_2 < r,$$

contradizendo (3.2). \square

Vejam agora o principal resultado desta seção. Por simplicidade vamos indicar a norma euclidiana por $\|\cdot\|$.

Teorema 3.6 *Sejam $S \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto não vazio, convexo e fechado, $z \in \mathbb{R}^n$ e $\bar{z} = \text{proj}_S(z)$. Então*

$$(z - \bar{z})^T(x - \bar{z}) \leq 0,$$

para todo $x \in S$.

Demonstração. Considere um ponto arbitrário $x \in S$. Dado $t \in (0, 1)$, pela convexidade de S , temos que $(1 - t)\bar{z} + tx \in S$. Portanto,

$$\|z - \bar{z}\| \leq \|z - (1 - t)\bar{z} - tx\| = \|z - \bar{z} + t(\bar{z} - x)\|.$$

Assim,

$$\|z - \bar{z}\|^2 \leq \|z - \bar{z} + t(\bar{z} - x)\|^2 = \|z - \bar{z}\|^2 + 2t(z - \bar{z})^T(\bar{z} - x) + t^2\|\bar{z} - x\|^2.$$

Como $t > 0$, temos que $2(z - \bar{z})^T(x - \bar{z}) \leq t\|\bar{z} - x\|^2$. Passando o limite quando $t \rightarrow 0$, obtemos

$$(z - \bar{z})^T(x - \bar{z}) \leq 0,$$

completando a demonstração (veja ilustração na Figura 3.3). \square

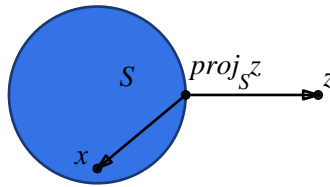


Figura 3.3: ilustração do Teorema 3.6.

3.2 Funções convexas

As funções que trataremos agora tem ótimas propriedades, particularmente no contexto de otimização.

Definição 3.7 *Seja $C \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo. Dizemos que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em C quando*

$$f((1 - t)x + ty) \leq (1 - t)f(x) + tf(y),$$

para todos $x, y \in C$ e $t \in [0, 1]$.

Apesar deste conceito ser muito simples, pode não ser tão fácil provar diretamente da definição que uma função é convexa, mesmo ela sendo elementar. Verifique isto nos exercícios abaixo.

Exercícios 3.8

1. Mostre, pela definição, que a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x^2$ é convexa.

Dica. $(x + t(y - x))^2 = x^2 + 2tx(y - x) + t^2(y - x)^2 \leq x^2 + 2tx(y - x) + t(y - x)^2$. \square

2. Faça o mesmo para $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = e^x$.

Dica. Como $e^d \geq 1 + d$, temos $e^x \geq e^z + e^z(x - z)$ e $e^y \geq e^z + e^z(y - z)$. Multiplique a primeira por $(1 - t)$ e a segunda por t para obter $e^{(1-t)x+ty} \leq (1 - t)e^x + te^y$. \square

Veja na Figura 3.4 uma função convexa e outra não convexa.

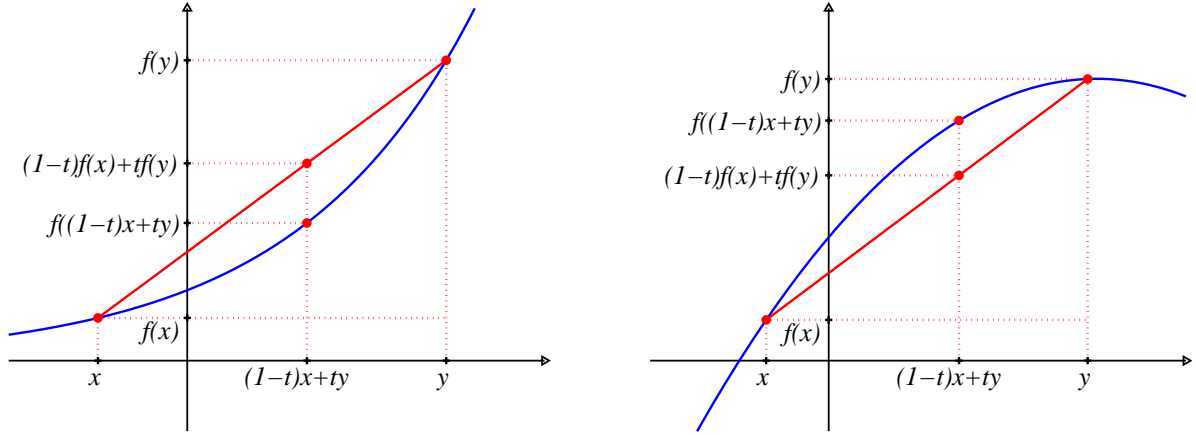


Figura 3.4: funções convexas e não convexas.

O teorema seguinte justifica o fato de funções convexas serem muito bem vistas em otimização.

Teorema 3.9 *Sejam $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo e $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa. Se $a \in C$ é minimizador local de f , então a é minimizador global de f .*

Demonstração. Seja $\delta > 0$ tal que $f(a) \leq f(x)$, para todo $x \in B(a, \delta) \cap C$. Dado $y \in C$, $y \notin B(a, \delta)$, tome $0 < t < \frac{\delta}{\|y - a\|}$. Assim, o ponto $x = (1 - t)a + ty$ satisfaz $\|x - a\| = t\|y - a\| < \delta$ e portanto, $x \in B(a, \delta) \cap C$ (veja a Figura 3.5). Deste modo temos

$$f(a) \leq f(x) \leq (1 - t)f(a) + tf(y),$$

donde segue que $f(a) \leq f(y)$. \square

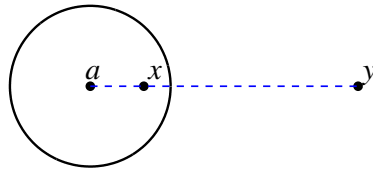


Figura 3.5: auxiliar para o Teorema 3.9.

Quando temos diferenciabilidade, podemos caracterizar a convexidade de forma mais simples. Apresentamos a seguir dois resultados importantes.

Teorema 3.10 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo. A função f é convexa em C se, e somente se,*

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

para todos $x, y \in C$.

Demonstração. Seja f convexa. Para $x, y \in C$ e $t \in (0, 1]$ quaisquer, definindo $d = y - x$, temos $x + td \in C$ e

$$f(x + td) = f((1 - t)x + ty) \leq (1 - t)f(x) + tf(y).$$

Portanto,

$$f(y) - f(x) \geq \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{f(x + td) - f(x)}{t} = \nabla f(x)^T d = \nabla f(x)^T(y - x).$$

Para provar a recíproca, considere $z = (1 - t)x + ty$ e observe que

$$f(x) \geq f(z) + \nabla f(z)^T(x - z) \quad \text{e} \quad f(y) \geq f(z) + \nabla f(z)^T(y - z).$$

Multiplicando a primeira por $(1 - t)$ e a segunda por t obtemos

$$(1 - t)f(x) + tf(y) \geq f((1 - t)x + ty),$$

completando a demonstração. \square

O teorema acima tem uma interpretação geométrica simples: dados $a, x \in C$, temos $f(x) \geq f(a) + \nabla f(a)^T(x - a)$, ou seja, uma função convexa está sempre acima da sua aproximação linear. A Figura 3.6 ilustra o teorema.

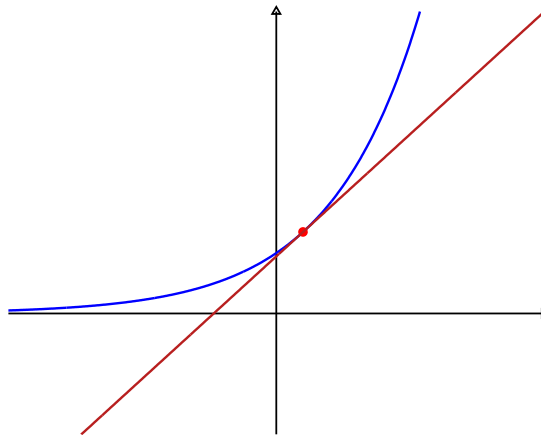


Figura 3.6: aproximação linear de f .

O Teorema 3.10 também tem uma consequência forte em otimização, dada no seguinte resultado.

Corolário 3.11 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa, diferenciável e $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo. Se $\nabla f(\bar{x})^T(y - \bar{x}) \geq 0$, para todo $y \in C$, então \bar{x} é um minimizador global de f em C . Em particular, todo ponto estacionário é minimizador global.*

A Figura 3.7 ilustra uma situação que satisfaz as condições do Corolário 3.11 e outra onde isto não se verifica.

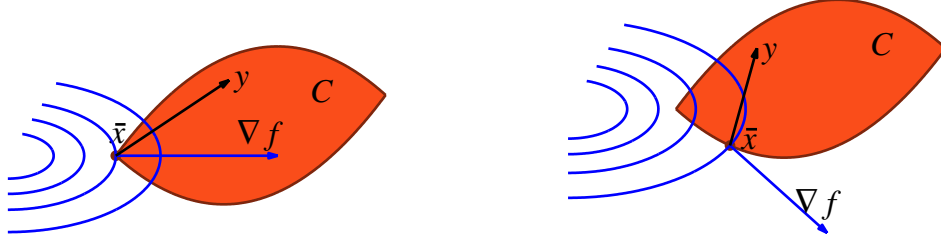


Figura 3.7: ilustração do Corolário 3.11.

O próximo teorema nos fornece outro critério para caracterizar convexidade.

Teorema 3.12 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^2 e $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo.*

- (i) *Se $\nabla^2 f(x) \geq 0$, para todo $x \in C$, então f é convexa em C .*
- (ii) *Se f é convexa em C e $\text{int}(C) \neq \emptyset$, então $\nabla^2 f(x) \geq 0$, para todo $x \in C$.*

Demonstração. (i) Dados $x \in C$ e $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $x + d \in C$, temos que

$$f(x + d) = f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x + td) d$$

para algum $t \in (0, 1)$. Como $\nabla^2 f(x) \geq 0$, concluímos que $f(x + d) \geq f(x) + \nabla f(x)^T d$. Pelo Teorema 3.10, f é convexa.

(ii) Considere primeiro $x \in \text{int}(C)$. Dado $d \in \mathbb{R}^n$, temos que $x + td \in C$, para t suficientemente pequeno. Portanto, pela convexidade de f e pelo desenvolvimento de Taylor, obtemos

$$0 \leq f(x + td) - f(x) - t \nabla f(x)^T d = \frac{t^2}{2} d^T \nabla^2 f(x) d + r(t),$$

onde $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{r(t)}{t^2} = 0$. Dividindo por t^2 e passando o limite, obtemos $d^T \nabla^2 f(x) d \geq 0$. Agora considere $x \in C$, arbitrário. Como existe $y \in \text{int}(C)$, o Exercício 3.1 garante que todos os pontos do segmento $(x, y]$ estão em $\text{int}(C)$. Pelo que já provamos, dados $d \in \mathbb{R}^n$ e $t \in (0, 1]$, vale $d^T \nabla^2 f((1 - t)x + ty) d \geq 0$. Fazendo $t \rightarrow 0^+$, obtemos $d^T \nabla^2 f(x) d \geq 0$, completando a demonstração. \square

3.3 Exercícios do capítulo

- 3.1.** Sejam $C \in \mathbb{R}^n$ convexo, $x \in \partial C$ e $y \in \text{int}(C)$. Mostre que $(x, y] \subset \text{int}(C)$.
- 3.2.** Mostre que o interior de um conjunto convexo é convexo.
- 3.3.** Sejam $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ linear e $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo. Mostre que $T(C)$ é convexo.
- 3.4.** Seja $S \subset \mathbb{R}^n$ convexo. Mostre que o fecho \overline{S} é convexo.
- 3.5.** Sejam $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo e $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ convexa. Mostre que o conjunto $\Gamma \subset C$ onde f atinge seu valor mínimo é convexo.
- 3.6.** Mostre que $\left(\frac{x}{2} + \frac{y}{3} + \frac{z}{12} + \frac{w}{12}\right)^4 \leq \frac{x^4}{2} + \frac{y^4}{3} + \frac{z^4}{12} + \frac{w^4}{12}$.
- 3.7.** Seja $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo. A função $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa se, e somente se, o seu epigrafo $\text{epi}(f) = \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1} \mid x \in C, y \geq f(x) \right\}$ é convexo.
- 3.8.** Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x_1^2 - x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_1 + \frac{2}{3}x_2 + e^{x_1+x_2}$. Mostre que f é convexa.
- 3.9.** Considere C um conjunto convexo e $f, g : C \rightarrow \mathbb{R}$ funções convexas.
- (a) Mostre que $f + g$ é convexa.
 - (b) A diferença $f - g$ é uma função convexa? Justifique.
 - (c) Que condição sobre $a \in \mathbb{R}$, garante que a função af é convexa.
- 3.10.** Refazer os Exercícios 3.8 da Seção 3.2 usando o Teorema 3.10 e também usando o Teorema 3.12.

Capítulo 4

Algoritmos

Em um problema de otimização, dificilmente conseguimos resolver, de forma direta, o sistema (normalmente não linear) de n equações e n incógnitas dado por $\nabla f(x) = 0$. O Exemplo 2.15 do Capítulo 2 é um caso muito raro. Normalmente, a solução é obtida por meio de um processo iterativo. Consideramos um ponto inicial x^0 , obtemos um ponto melhor x^1 e repetimos o processo gerando uma sequência $(x^k) \subset \mathbb{R}^n$ na qual a função objetivo decresce.

Basicamente temos três aspectos concernentes aos métodos de otimização. O primeiro consiste na criação do algoritmo propriamente dito, que deve levar em conta a estrutura do problema e as propriedades satisfeitas pelas soluções, entre outras coisas.

O segundo aspecto se refere às sequências geradas pelo algoritmo, onde a principal questão é se tais sequências realmente convergem para uma solução do problema. Um algoritmo é dito globalmente convergente quando para qualquer sequência (x^k) gerada pelo algoritmo e qualquer ponto de acumulação \bar{x} de (x^k) , temos que \bar{x} é estacionário. Apresentamos na Seção 4.3 uma discussão mais detalhada deste conceito.

O terceiro ponto a ser considerado é a velocidade com que a sequência converge para uma solução, o que é conhecido como convergência local (veja a Seção 1.1.2). Naturalmente, para fins práticos, não basta que uma sequência seja convergente. É preciso que uma aproximação do limite possa ser obtida em um tempo razoável. Deste modo, bons algoritmos são os que geram sequências que convergem rapidamente para uma solução.

Vamos agora descrever um modelo geral de algoritmo para o Problema (2.1). No Capítulo 5, estudaremos algoritmos específicos, analisando os aspectos mencionados acima. Algumas referências para este assunto são [5, 17].

4.1 Algoritmos de descida

Uma forma geral de construir um algoritmo consiste em escolher, a partir de cada ponto obtido, uma direção para dar o próximo passo. Uma possibilidade razoável é determinar uma direção segundo a qual f decresce.

Definição 4.1 Considere uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ e uma direção $d \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que d é uma direção de descida para f , a partir de \bar{x} , quando existe $\delta > 0$ tal que $f(\bar{x} + td) < f(\bar{x})$, para todo $t \in (0, \delta)$.

Apresentamos abaixo uma condição suficiente para uma direção ser de descida.

Teorema 4.2 Se $\nabla f(\bar{x})^T d < 0$, então d é uma direção de descida para f , a partir de \bar{x} .

Demonstração. Sabemos que

$$\nabla f(\bar{x})^T d = \frac{\partial f}{\partial d}(\bar{x}) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(\bar{x} + td) - f(\bar{x})}{t}.$$

Pela hipótese e pela preservação do sinal, existe $\delta > 0$ tal que

$$\frac{f(\bar{x} + td) - f(\bar{x})}{t} < 0,$$

para todo $t \in (-\delta, \delta)$, $t \neq 0$. Portanto, $f(\bar{x} + td) < f(\bar{x})$, para todo $t \in (0, \delta)$, o que completa a demonstração. \square

Quando $n = 2$ ou $n = 3$, podemos interpretar geometricamente o Teorema 4.2, dizendo que as direções que formam um ângulo obtuso com $\nabla f(\bar{x})$ são de descida. Veja a Figura 4.1.

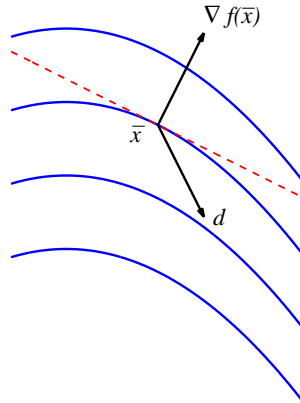


Figura 4.1: ilustração do Teorema 4.2.

Exemplo 4.3 Sejam $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 - x_2^2)$ e $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Se $d = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$ é tal que $d_1 \leq 0$, então d é uma direção de descida para f , a partir de \bar{x} .

Resolução. Temos $\nabla f(\bar{x})^T d = d_1$. Caso $d_1 < 0$, podemos aplicar o Teorema 4.2 para concluir o que se pede. Entretanto, se $d_1 = 0$, não podemos usar o teorema, mas basta notar que $f(\bar{x} + td) = f\left(\begin{pmatrix} 1 \\ td_2 \end{pmatrix}\right) = f(\bar{x}) - \frac{(td_2)^2}{2}$. A Figura 4.2 ilustra este caso. \square

Exemplo 4.4 Considere a mesma função do Exemplo 4.3 e $\bar{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$. O que podemos dizer sobre $d = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$?

Resolução. Não podemos aplicar o Teorema 4.2, pois $\nabla f(\bar{x})^T d = 0$. Procedendo de modo análogo ao exemplo anterior, obtemos $f(\bar{x} + td) = f\left(\begin{pmatrix} t \\ -1 \end{pmatrix}\right) = f(\bar{x}) + \frac{t^2}{2}$. Portanto, a função cresce ao longo de d . A Figura 4.2 ilustra este exemplo. \square

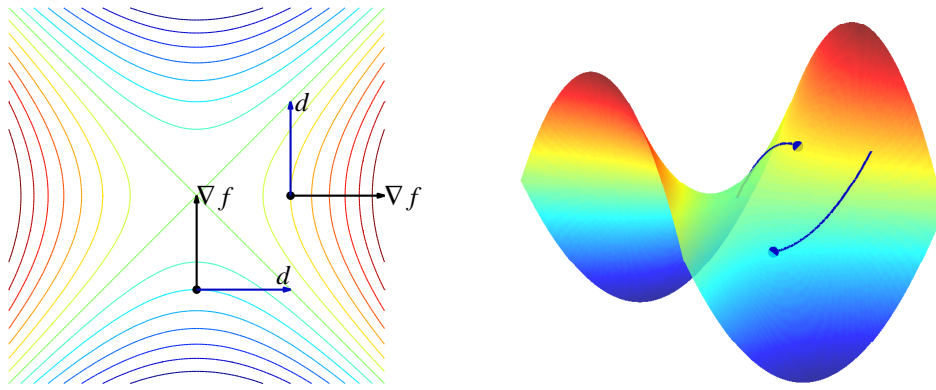


Figura 4.2: ilustração dos Exemplos 4.3 e 4.4.

Os dois exemplos anteriores mostram que nada se pode afirmar, a princípio, quando $\nabla f(\bar{x})^T d = 0$.

Vamos agora apresentar um algoritmo básico para minimizar f e discutir a sua convergência.

Algoritmo 4.5 *Algoritmo básico*

Dado: $x^0 \in \mathbb{R}^n$

$k = 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x^k) \neq 0$

 Calcule d^k tal que $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$

 Escolha $t_k > 0$ tal que $f(x^k + t_k d^k) < f(x^k)$

 Faça $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$

$k = k + 1$

O Algoritmo 4.5 ou encontra um ponto estacionário em um número finito de iterações ou gera uma sequência ao longo da qual f decresce. A questão agora é saber se esta sequência tem algum ponto de acumulação e, caso afirmativo, se este ponto é estacionário. Infelizmente, não podemos tirar conclusões boas. Considere $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x^2$ e as sequências $x^k = 1 + \frac{1}{k+1}$ e $y^k = (-1)^k + \frac{(-1)^k}{k+1}$. Ambas

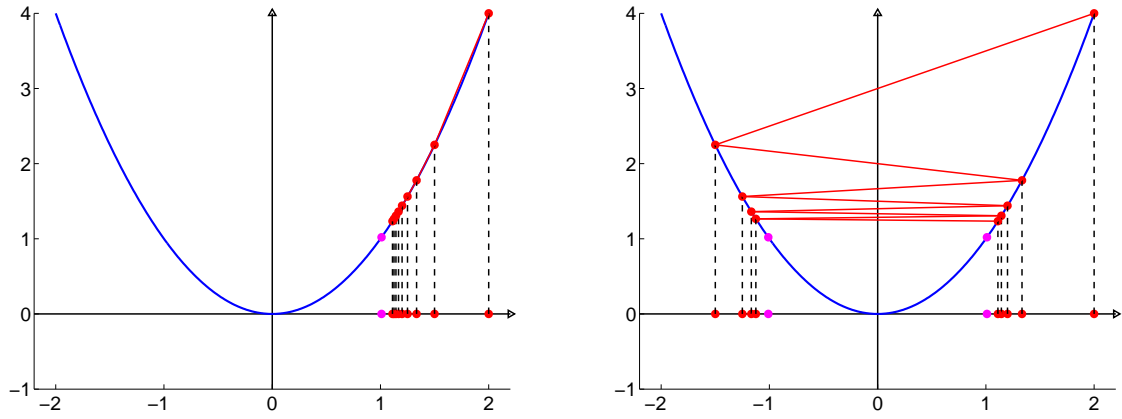


Figura 4.3: o Algoritmo 4.5 pode não encontrar um ponto estacionário.

podem ser obtidas pelo algoritmo, $x^k \rightarrow 1$ e (y^k) tem dois pontos de acumulação, 1 e -1 . Entretanto, nenhum desses pontos é estacionário. Veja a Figura 4.3. \square

Deste modo, se queremos garantir convergência, a escolha da direção d^k e do tamanho do passo t_k , no Algoritmo 4.5, não pode ser arbitrária. Discutiremos na próxima seção como obter t_k , tendo dada uma direção. A determinação de uma direção de busca será tratada no Capítulo 5.

4.2 Métodos de busca unidirecional

Dada uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ e uma direção de descida $d \in \mathbb{R}^n$, queremos encontrar $\bar{t} > 0$ tal que

$$f(\bar{x} + \bar{t}d) < f(\bar{x}).$$

Como vimos anteriormente precisamos balancear o tamanho do passo t com o decréscimo promovido em f . Veremos duas abordagens para este problema. A primeira consiste em fazer uma busca exata a partir do ponto \bar{x} segundo a direção d . A segunda procura uma redução suficiente de f que seja de certo modo proporcional ao tamanho do passo.

4.2.1 Busca exata - método da seção áurea

Nosso objetivo neste caso é ambicioso e consiste em minimizar f a partir do ponto \bar{x} na direção d (veja a Figura 4.4). Mais precisamente, temos que resolver o problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f(\bar{x} + td) \\ &\text{sujeito a} && t > 0. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Este problema é, em geral, difícil de se resolver. Entretanto, para certas funções especiais, existem algoritmos para resolvê-lo. Veremos adiante tais funções, bem como

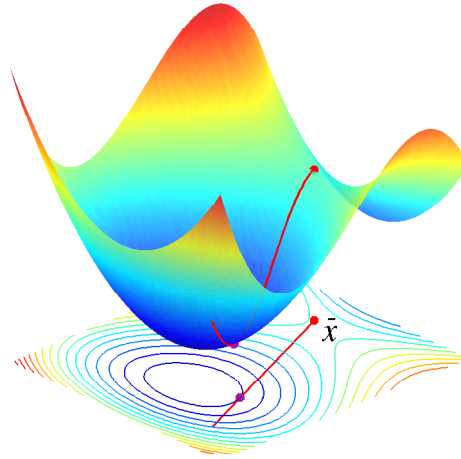


Figura 4.4: busca unidirecional exata.

um algoritmo. Antes porém vamos fazer um exemplo que pode ser resolvido de forma direta.

Exemplo 4.6 Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$, $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $d = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$. Faça a busca exata a partir de \bar{x} , na direção d .

Resolução. Note primeiro que d é de fato uma direção de descida, pois

$$\nabla f(\bar{x})^T d = (-1 \ -2) \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} = -5 < 0.$$

Para fazer a busca, considere

$$\varphi(t) = f(\bar{x} + td) = f \begin{pmatrix} 1 + 3t \\ t \end{pmatrix} = \frac{11t^2}{2} - 5t + \frac{3}{2},$$

cujo minimizador satisfaz $\varphi'(t) = 11t - 5 = 0$. Assim,

$$\bar{t} = \frac{5}{11} \quad \text{e} \quad \bar{x} + \bar{t}d = \frac{1}{11} \begin{pmatrix} 26 \\ 5 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 2,36 \\ 0,45 \end{pmatrix}.$$

A Figura 4.5 ilustra este exemplo. □

Na prática é claro que os problemas são bem mais complexos que o Exemplo 4.6 e só podem ser resolvidos por meio de algoritmos. Vamos agora definir função unimodal, para a qual existem algoritmos para minimizá-la. Em seguida veremos o algoritmo da seção áurea, que encontra um ponto próximo de um minimizador com a precisão que se

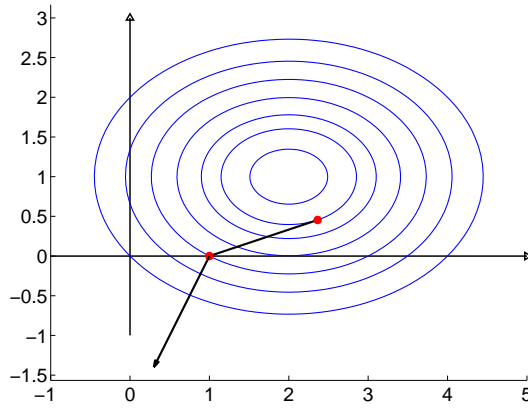


Figura 4.5: ilustração do Exemplo 4.6.

queira. Este algoritmo será então aplicado para a função $\varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$\varphi(t) = f(\bar{x} + td).$$

Definição 4.7 *Uma função contínua $\varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ é dita unimodal quando admite um conjunto de minimizadores $[t_1, t_2]$, é estritamente decrescente em $[0, t_1]$ e estritamente crescente em $[t_2, \infty)$.*

Para facilitar a descrição do algoritmo, vamos considerar a Figura 4.6.

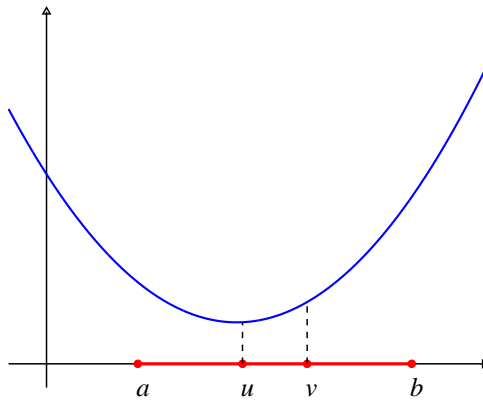


Figura 4.6: seção áurea.

Suponha que um minimizador de φ pertence ao intervalo $[a, b]$.

- (i) Considere $a < u < v < b$ em $[0, \infty)$.
- (ii) Se $\varphi(u) < \varphi(v)$ então o trecho $[v, b]$ não pode conter um minimizador e pode ser descartado.
- (iii) Se $\varphi(u) \geq \varphi(v)$ então o trecho $[a, u]$ pode ser descartado.
- (iv) Particione o intervalo que ficou e repita o processo.

Vamos discutir agora como particionar o intervalo $[a, b]$. A obtenção deste intervalo, que deve conter um minimizador de φ , será tratada adiante.

Uma estratégia que parece natural é dividir o intervalo em três partes iguais, ou seja, definir

$$u = a + \frac{1}{3}(b - a) \quad \text{e} \quad v = a + \frac{2}{3}(b - a).$$

Assim, descartamos $\frac{1}{3}$ do intervalo corrente a cada etapa. Entretanto, esta forma de particionar o intervalo tem uma desvantagem. Precisamos fazer duas novas avaliações de função por etapa, pois o ponto que sobrou, u ou v , não pode ser aproveitado. Veja a Figura 4.7.

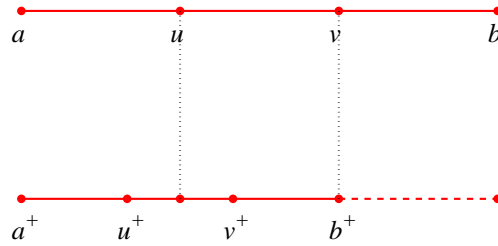


Figura 4.7: partição do intervalo $[a, b]$.

Uma estratégia que veremos ser mais inteligente consiste em escolher os pontos u e v que dividem o segmento $[a, b]$ na razão áurea, de acordo com a seguinte definição.

Definição 4.8 Um ponto c divide o segmento $[a, b]$ na razão áurea quando a razão entre o maior segmento e o segmento todo é igual à razão entre o menor e o maior dos segmentos. Tal razão é conhecida como o número de ouro e vale $\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0,618$.

Desta forma, temos que u e v devem satisfazer

$$\frac{b - u}{b - a} = \frac{u - a}{b - u} \quad \text{e} \quad \frac{v - a}{b - a} = \frac{b - v}{v - a}.$$

Considerando θ_1 e θ_2 tais que

$$u = a + \theta_1(b - a) \quad \text{e} \quad v = a + \theta_2(b - a), \quad (4.2)$$

obtemos

$$1 - \theta_1 = \frac{\theta_1}{1 - \theta_1} \quad \text{e} \quad \theta_2 = \frac{1 - \theta_2}{\theta_2}. \quad (4.3)$$

Portanto, $\theta_1 = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \approx 0,382$ e $\theta_2 = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0,618$. Salientamos que $\theta_1 + \theta_2 = 1$ e

$$\theta_2^2 = \theta_1. \quad (4.4)$$

Uma das vantagens da divisão na razão áurea em relação à divisão em três partes iguais é que descartamos mais de 38% do intervalo ao invés de 33,33%. Outra vantagem

se refere a economia em avaliação de função como veremos a seguir.

No processo iterativo, a cada etapa descartamos o intervalo $[a, u]$ ou $[v, b]$, obtendo um novo segmento que deverá ser particionado novamente. Indicamos por $[a^+, b^+]$ o novo intervalo que será particionado pelos pontos u^+ e v^+ .

Conforme veremos no próximo resultado, o ponto u é aproveitado na próxima etapa e passa a ser v^+ quando descartamos $[v, b]$. Assim, o valor da função $\varphi(u)$ é aproveitado para a próxima etapa.

Lema 4.9 *Na seção áurea, se $[v, b]$ é descartado então $v^+ = u$.*

Demonstração. Como $[v, b]$ foi descartado $b^+ = v$ e $a^+ = a$. Portanto, usando 4.2, temos que

$$v^+ = a^+ + \theta_2(b^+ - a^+) = a + \theta_2(v - a)$$

Usando (4.2) novamente e a relação (4.4), obtemos

$$v^+ = a + \theta_2^2(b - a) = a + \theta_1(b - a) = u,$$

completando a prova. □

A Figura 4.8 ilustra esta propriedade.

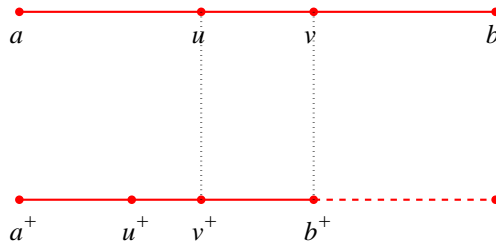


Figura 4.8: partição do intervalo $[a, b]$.

Exercícios 4.10

1. Mostre que θ_1 e θ_2 , dados por (4.3), satisfazem $\theta_1 + \theta_2 = 1$ e $\theta_2^2 = \theta_1$.
2. Prove que se $[a, u]$ é descartado na seção áurea, então $u^+ = v$.

Apresentamos agora o algoritmo da seção áurea, que tem duas fases. Na primeira, obtemos um intervalo $[a, b]$ que contém um minimizador de φ . A idéia desta etapa é considerar um intervalo inicial $[0, 2\rho]$, com $\rho > 0$, e ampliá-lo, deslocando para a direita, até que um crescimento de φ seja detectado.

Na segunda fase, o intervalo $[a, b]$ é reduzido, por meio do descarte de subintervalos, até que reste um intervalo de tamanho suficiente para que uma precisão ε seja alcançada.

Algoritmo 4.11 *Seção Áurea*

Dados: $\rho > 0$; $\varepsilon > 0$

Fase 1: Obtenção do intervalo $[a, b]$

$a_0 = 0$, $s_0 = \rho$ e $b_0 = 2\rho$

$k = 0$

REPITA enquanto $\varphi(b_k) < \varphi(s_k)$

$a_{k+1} = s_k$, $s_{k+1} = b_k$ e $b_{k+1} = 2b_k$

$k = k + 1$

$a = a_k$, $b = b_k$

Fase 2: Obtenção de $\bar{t} \in [a, b]$

$a_0 = a$, $b_0 = b$

$u_0 = a_0 + \theta_1(b_0 - a_0)$, $v_0 = a_0 + \theta_2(b_0 - a_0)$

$k = 0$

REPITA enquanto $b_k - a_k > \varepsilon$

SE $\varphi(u_k) < \varphi(v_k)$

$a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = v_k$, $v_{k+1} = u_k$, $u_{k+1} = a_{k+1} + \theta_1(b_{k+1} - a_{k+1})$

SENÃO

$a_{k+1} = u_k$, $b_{k+1} = b_k$, $u_{k+1} = v_k$, $v_{k+1} = a_{k+1} + \theta_2(b_{k+1} - a_{k+1})$

$k = k + 1$

Defina $\bar{t} = \frac{u_k + v_k}{2}$

Caso φ seja unimodal, o Algoritmo 4.11 funciona perfeitamente e encontra uma aproximação para um minimizador dentro de uma tolerância dada. Caso a função não seja unimodal, o algoritmo pode não ser eficaz.

4.2.2 Busca inexata - condição de Armijo

Em muitas situações não convém aplicar a busca exata, ou porque φ não é unimodal, ou pelo alto custo computacional de se fazer uma busca exata a cada iteração do Algoritmo 4.5. O método de Armijo procura uma boa redução da função ao longo da direção, sem tentar minimizá-la.

Considere então um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, uma direção de descida $d \in \mathbb{R}^n$ e $\eta \in (0, 1)$. Basicamente, a regra de Armijo encontra $\bar{t} > 0$ tal que

$$f(\bar{x} + \bar{t}d) \leq f(\bar{x}) + \eta \bar{t} \nabla f(\bar{x})^T d. \quad (4.5)$$

A condição acima significa que queremos mais que uma simples redução em f . Esta redução deve ser proporcional ao tamanho do passo. O próximo resultado garante que isto pode ser de fato obtido.

Teorema 4.12 *Considere uma função diferenciável $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, uma direção de descida $d \in \mathbb{R}^n$ e $\eta \in (0, 1)$. Então existe $\delta > 0$ tal que*

$$f(\bar{x} + td) \leq f(\bar{x}) + \eta t \nabla f(\bar{x})^T d,$$

para todo $t \in [0, \delta)$.

Demonstração. Caso $\nabla f(\bar{x})^T d = 0$, o resultado segue da definição de direção de descida. Suponha então que $\nabla f(\bar{x})^T d < 0$. Assim, como $\eta < 1$, temos

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(\bar{x} + td) - f(\bar{x})}{t} = \nabla f(\bar{x})^T d < \eta \nabla f(\bar{x})^T d.$$

Portanto, existe $\delta > 0$ tal que

$$\frac{f(\bar{x} + td) - f(\bar{x})}{t} < \eta \nabla f(\bar{x})^T d,$$

para todo $t \in (0, \delta)$. Isto implica que

$$f(\bar{x} + td) \leq f(\bar{x}) + \eta t \nabla f(\bar{x})^T d,$$

o que completa a demonstração. \square

Tanto do ponto de vista computacional quanto teórico, é importante que o tamanho de passo \bar{t} , satisfazendo (4.5), não seja muito pequeno. Uma maneira de garantir tal propriedade consiste em iniciar com $t = 1$ e, se necessário, reduzir t até que (4.5) seja satisfeita. Sintetizamos isto no seguinte algoritmo.

Algoritmo 4.13 *Busca de Armijo*

Dados: $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, $d \in \mathbb{R}^n$ (direção de descida), $\eta \in (0, 1)$

$t = 1$

REPITA enquanto $f(\bar{x} + td) > f(\bar{x}) + \eta t \nabla f(\bar{x})^T d$

$t = 0,8t$

A condição de Armijo pode parecer artificial mas na realidade pode ser interpretada de forma bem interessante. Considere a função $\varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$\varphi(t) = f(\bar{x} + td).$$

A aproximação de primeira ordem de φ em torno de $t = 0$, também chamada de modelo linear, é

$$p(t) = \varphi(0) + t\varphi'(0) = f(\bar{x}) + t\nabla f(\bar{x})^T d.$$

Assim, podemos reescrever a relação (4.5) como

$$\varphi(0) - \varphi(\bar{t}) = f(\bar{x}) - f(\bar{x} + \bar{t}d) \geq \eta(p(0) - p(\bar{t})).$$

Isto significa que procuramos um passo cuja redução na função objetivo seja pelo menos uma fração η da redução obtida no modelo linear. Veja uma ilustração na Figura 4.9. Note também nesta figura a reta dada por

$$q(t) = f(\bar{x}) + \eta t \nabla f(\bar{x})^T d.$$

A condição de Armijo é satisfeita para os pontos tais que φ está abaixo de q .

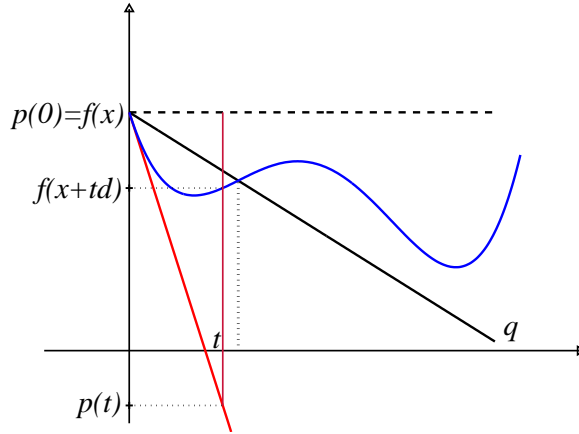


Figura 4.9: interpretação da condição de Armijo.

O método de Armijo não encontra um ponto próximo a um minimizador unidirecional, mas é muito eficiente. Para algoritmos bem projetados, faz um número muito pequeno de cálculos de função, sendo portanto muito rápido.

Exemplo 4.14 Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$, $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $d = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$. Faça uma busca de Armijo a partir de \bar{x} , na direção d .

Resolução. Temos que d é uma direção de descida, pois

$$\nabla f(\bar{x})^T d = (-1 \ -2) \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} = -5 < 0.$$

Além disso, a relação $f(\bar{x} + td) \leq f(\bar{x}) + \eta t \nabla f(\bar{x})^T d$ pode ser escrita como

$$f \begin{pmatrix} 1 + 3t \\ t \end{pmatrix} \leq f \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \eta t (-1 \ -2) \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix},$$

o que equivale a

$$t \leq \frac{10(1 - \eta)}{11}.$$

Por exemplo, se $\eta = \frac{1}{4}$, então qualquer t satisfazendo $t \leq \frac{15}{22} \approx 0,6818$ é aceitável. Começando com $t = 1$, teremos o passo recusado. Então fazemos $t = 0,8 \times 1 = 0,8$, que

também é recusado. Enfim, fazendo $t = 0,8 \times 0,8 = 0,64$, teremos o passo aceito. Assim,

$$\bar{t} = 0,64 \quad \text{e} \quad \bar{x} + \bar{t}d = \begin{pmatrix} 2,92 \\ 0,64 \end{pmatrix}.$$

Veja a Figura 4.10. □

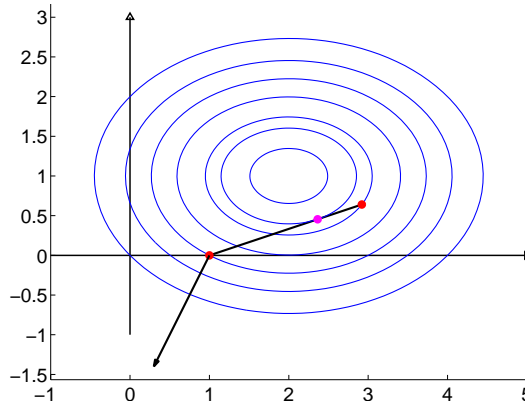


Figura 4.10: ilustração do Exemplo 4.14.

Salientamos que, normalmente, não conseguimos explicitar t , na condição de Armijo, como fizemos no exemplo anterior e portanto, temos que seguir os passos do Algoritmo 4.13, testando a desigualdade para cada valor particular de t .

4.3 Convergência global de algoritmos

Nesta seção discutiremos a convergência global de algoritmos de descida. Primeiro, vamos considerar o Algoritmo 4.5 com a direção definida por uma transformação do gradiente via matrizes definidas positivas. Em seguida, apresentaremos uma discussão mais geral sobre convergência de algoritmos, sintetizada no Teorema de Polak [20].

4.3.1 Convergência global de algoritmos de descida

Seja $H : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ uma função contínua que associa a cada $x \in \mathbb{R}^n$ uma matriz definida positiva $H(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Assim, se $\nabla f(x) \neq 0$, temos que $d = -H(x)\nabla f(x)$ é uma direção de descida. De fato, $\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T H(x)\nabla f(x) < 0$.

Temos assim uma maneira de obter direções de descida para o Algoritmo 4.5. Para facilitar, vamos reescrever o algoritmo com esta escolha da direção de busca. A determinação do tamanho do passo pode ser feita pela busca exata ou de acordo com o critério de Armijo, pelo Algoritmo 4.13.

Algoritmo 4.15 *Algoritmo de descida*

Dado: $x^0 \in \mathbb{R}^n$

$k = 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x^k) \neq 0$

Defina $d^k = -H(x^k)\nabla f(x^k)$

Obtenha $t_k > 0$ tal que $f(x^k + t_k d^k) < f(x^k)$

Faça $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$

$k = k + 1$

Vamos analisar a convergência global do Algoritmo 4.15 de acordo com a seguinte definição.

Definição 4.16 *Um algoritmo é dito globalmente convergente quando para qualquer sequência (x^k) gerada pelo algoritmo e qualquer ponto de acumulação \bar{x} de (x^k) , temos que \bar{x} é estacionário.*

Nos dois teoremas que seguem, vamos supor que a função f , a ser minimizada, é de classe \mathcal{C}^1 .

Teorema 4.17 *O Algoritmo 4.15, com o tamanho do passo calculado pela busca exata, é globalmente convergente.*

Demonstração. Sejam (x^k) uma sequência gerada pelo algoritmo e \bar{x} um ponto de acumulação de (x^k) , digamos $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} \bar{x}$. Suponha por absurdo que \bar{x} não seja estacionário, isto é, $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$. Assim, $\bar{d} = -H(\bar{x})\nabla f(\bar{x})$ é uma direção de descida, o que garante a existência de $\bar{t} > 0$ tal que $\delta = f(\bar{x}) - f(\bar{x} + \bar{t}\bar{d}) > 0$. Considere $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $h(x) = f(x) - f(x - \bar{t}H(x)\nabla f(x))$. Como h é contínua, temos que $h(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} h(\bar{x}) = \delta$. Portanto,

$$f(x^k) - f(x^k + \bar{t}d^k) = h(x^k) \geq \frac{\delta}{2},$$

para todo $k \in \mathbb{N}'$, suficientemente grande. Deste modo, como t_k foi obtido pela busca exata, podemos concluir que

$$f(x^{k+1}) = f(x^k + t_k d^k) \leq f(x^k + \bar{t}d^k) \leq f(x^k) - \frac{\delta}{2},$$

ou seja,

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq \frac{\delta}{2}, \quad (4.6)$$

para todo $k \in \mathbb{N}'$, suficientemente grande. Por outro lado, pela continuidade de f , temos $f(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} f(\bar{x})$. Como a sequência $(f(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ é decrescente, o Teorema 1.12 garante que $f(x^k) \rightarrow f(\bar{x})$, contradizendo (4.6). \square

Se utilizarmos a busca de armijo para calcular t_k , também podemos garantir a convergência.

Teorema 4.18 *O Algoritmo 4.15, com o tamanho do passo calculado pela condição de Armijo (Algoritmo 4.13), é globalmente convergente.*

Demonstração. Sejam (x^k) uma sequência gerada pelo algoritmo e \bar{x} um ponto de acumulação de (x^k) , digamos $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} \bar{x}$. Suponha por absurdo que \bar{x} não seja estacionário, isto é, $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$. Pela continuidade de f , temos $f(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} f(\bar{x})$. Como a sequência $(f(x^k))$ é monótona não crescente, podemos aplicar o Teorema 1.12 para concluir que $f(x^k) \rightarrow f(\bar{x})$. Por outro lado, pela condição de Armijo, temos

$$f(x^{k+1}) = f(x^k + t_k d^k) \leq f(x^k) + \eta t_k \nabla f(x^k)^T d^k.$$

Usando a definição de d^k e a positividade de $H(x^k)$, obtemos

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq \eta t_k \nabla f(x^k)^T H(x^k) \nabla f(x^k) \geq 0.$$

Portanto, $t_k \nabla f(x^k)^T H(x^k) \nabla f(x^k) \rightarrow 0$. Mas

$$\nabla f(x^k)^T H(x^k) \nabla f(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} \nabla f(\bar{x})^T H(\bar{x}) \nabla f(\bar{x}) \neq 0,$$

donde segue que $t_k \xrightarrow{\mathbb{N}'} 0$. Então, $t_k < 1$, para todo $k \in \mathbb{N}'$, suficientemente grande. Pelo Algoritmo 4.13, o passo $\frac{t_k}{0,8}$ existiu e foi recusado. Assim,

$$f(x^k + t_k d^k) \leq f(x^k) + \eta t_k \nabla f(x^k)^T d^k \quad \text{e} \quad f\left(x^k + \frac{t_k}{0,8} d^k\right) > f(x^k) + \eta \frac{t_k}{0,8} \nabla f(x^k)^T d^k.$$

Como a função $\xi(t) = f(x^k + t d^k) - f(x^k) - \eta t \nabla f(x^k)^T d^k$ é contínua, o teorema do valor intermediário garante a existência de $s_k \in \left[t_k, \frac{t_k}{0,8}\right]$ tal que $\xi(s_k) = 0$, isto é,

$$f(x^k + s_k d^k) - f(x^k) = \eta s_k \nabla f(x^k)^T d^k.$$

Aplicando agora o teorema do valor médio (Teorema 1.41), obtemos

$$\nabla f(x^k + \theta_k s_k d^k)^T (s_k d^k) = f(x^k + s_k d^k) - f(x^k) = \eta s_k \nabla f(x^k)^T d^k,$$

com $\theta_k \in (0, 1)$. Portanto,

$$\nabla f(x^k + \theta_k s_k d^k)^T H(x^k) \nabla f(x^k) = \eta \nabla f(x^k)^T H(x^k) \nabla f(x^k).$$

Como $s_k \xrightarrow{\mathbb{N}'} 0$, pois $s_k \in \left[t_k, \frac{t_k}{0,8}\right]$ e $t_k \xrightarrow{\mathbb{N}'} 0$, podemos concluir que

$$\nabla f(\bar{x})^T H(\bar{x}) \nabla f(\bar{x}) = \eta \nabla f(\bar{x})^T H(\bar{x}) \nabla f(\bar{x}),$$

o que é uma contradição. □

4.3.2 Teorema de Polak

Apresentamos aqui alguns conceitos gerais sobre convergência de algoritmos. Basicamente, se o passo for eficiente, no sentido de que, perto de um ponto não desejável a função objetivo “decrece bastante”, então o algoritmo não erra. Esta condição, que será formalizada a seguir, é conhecida como critério de Polak [20] para convergência global de algoritmos.

Definição 4.19 *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e \mathcal{P} uma propriedade qualquer. Dizemos que $\bar{x} \in \Omega$ é desejável quando satisfaz a propriedade \mathcal{P} .*

Dado um conjunto fechado $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e uma propriedade \mathcal{P} , considere o seguinte problema geral

(P) Encontrar um ponto desejável $\bar{x} \in \Omega$.

Definição 4.20 *Um algoritmo é dito globalmente convergente quando para qualquer sequência (x^k) gerada pelo algoritmo e qualquer ponto de acumulação \bar{x} de (x^k) , temos que \bar{x} é desejável.*

Um algoritmo que gera apenas sequências que não tem pontos de acumulação é um algoritmo globalmente convergente. De fato, não podemos encontrar uma sequência gerada pelo algoritmo com um ponto de acumulação não desejável. Veja o Exemplo 4.21.

Exemplo 4.21 *O algoritmo*

Dado: $x^0 \in \mathbb{R}$

$k = 0$

REPITA

$$x^{k+1} = x^k - 1$$

$$k = k + 1$$

gera sequências sem pontos de acumulação, pois $|x^m - x^n| \geq 1$ para todos $m, n \in \mathbb{N}$.

Definição 4.22 *Considere uma função $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Dizemos que um algoritmo é de descida para o problema (P), com relação a φ , quando para qualquer sequência (x^k) gerada pelo algoritmo temos $\varphi(x^{k+1}) \leq \varphi(x^k)$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Tal função é chamada função de mérito.*

Teorema 4.23 (Polak, 1968) *Considere o problema (P) e suponha que existe uma função de mérito contínua $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que para toda sequência (x^k) gerada pelo algoritmo e todo ponto $\bar{x} \in \Omega$ não desejável, existe uma vizinhança V de \bar{x} e uma constante $\gamma > 0$ tais que se $x^k \in V$, então $\varphi(x^{k+1}) \leq \varphi(x^k) - \gamma$. Então todo ponto de acumulação de (x^k) é desejável.*

Demonstração. Sejam (x^k) uma sequência gerada pelo algoritmo e \bar{x} um ponto de acumulação de (x^k) , digamos $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} \bar{x}$. Suponha por absurdo que \bar{x} não seja desejável. Então existe uma vizinhança V de \bar{x} e uma constante $\gamma > 0$ tais que

$$\varphi(x^{k+1}) \leq \varphi(x^k) - \gamma,$$

se $x^k \in V$. Como $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} \bar{x}$, podemos redefinir \mathbb{N}' , se necessário, de modo que $x^k \in V$, para todo $k \in \mathbb{N}'$. Assim,

$$\varphi(x^k) - \varphi(x^{k+1}) \geq \gamma, \quad (4.7)$$

para todo $k \in \mathbb{N}'$. Por outro lado, utilizando a continuidade de φ , temos $\varphi(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} \varphi(\bar{x})$. Como a sequência $(\varphi(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ é monótona não crescente, podemos aplicar o Teorema 1.12 para concluir que $\varphi(x^k) \rightarrow \varphi(\bar{x})$, o que contradiz 4.7. Portanto, \bar{x} é desejável. \square

4.4 Exercícios do capítulo

4.1. Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$ e $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Mostre que $d = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ é uma direção de descida para f e faça a busca exata a partir de \bar{x} , na direção d .

4.2. Sejam $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2)$, $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $d = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$. Mostre que se $d_1 < 0$, então d é uma direção de descida para f , a partir de \bar{x} . Estude o caso $d_1 = 0$.

4.3. Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c$, onde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz definida positiva, $b \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$.

(a) Mostre que se $\nabla f(x)^T d = 0$, então d é uma direção de subida a partir de x .

(b) Suponha que d é uma direção de descida a partir de x . Mostre que a busca exata fornece $\bar{t} = -\frac{\nabla f(x)^T d}{d^T A d}$.

4.4. Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c$, onde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz definida positiva, $b \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$. Sabemos que a busca exata a partir de x , na direção de descida d , fornece $\bar{t} = -\frac{\nabla f(x)^T d}{d^T A d}$. Mostre que se \bar{t} satisfaz a condição de Armijo

$$f(x + \bar{t}d) \leq f(x) + \eta \bar{t} \nabla f(x)^T d,$$

então $\eta \leq \frac{1}{2}$.

4.5. Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c$, onde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz definida positiva, $b \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$. Sejam \bar{x} o minimizador de f e $d \in \mathbb{R}^n$ um autovetor de A associado ao autovalor λ . Faça uma busca exata a partir do ponto $x = \bar{x} + d$, na direção $d = -\nabla f(x)$. Qual é a interpretação geométrica deste exercício?

4.6. Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}^2$ e $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\nabla f(\bar{x}) = 0$ e $\nabla^2 f(\bar{x})$ não é semidefinida positiva. Prove que existe uma direção de descida d em \bar{x} .

Capítulo 5

Métodos de Otimização

Vamos agora discutir os métodos para resolver o Problema (2.1). Algumas referências para este assunto são [5, 9, 17].

5.1 Método de Cauchy

Um dos métodos mais conhecidos para minimizar uma função é o método clássico do gradiente, também chamado método de Cauchy. Neste método, a direção de busca em cada iteração é o oposto do vetor gradiente da função objetivo no ponto corrente. A justificativa desta escolha se baseia no fato de que, dentre as direções ao longo das quais f decresce, a direção oposta ao gradiente é a de decrescimento mais acentuado. De fato, se $d = -\nabla f(x)$ e $v \in \mathbb{R}^n$ é tal que $\|v\| = \|d\|$, então

$$\frac{\partial f}{\partial d}(x) = \nabla f(x)^T d = -\|\nabla f(x)\|^2 = -\|\nabla f(x)\|\|v\| \leq \nabla f(x)^T v = \frac{\partial f}{\partial v}(x).$$

5.1.1 Algoritmo

O algoritmo de Cauchy é exatamente o Algoritmo 4.15, com $H(x^k) = I \in \mathbb{R}^{n \times n}$, para todo $k \in \mathbb{N}$.

Algoritmo 5.1 *Cauchy*

Dado: $x^0 \in \mathbb{R}^n$

$k = 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x^k) \neq 0$

Defina $d^k = -\nabla f(x^k)$

Obtenha $t_k > 0$ tal que $f(x^k + t_k d^k) < f(x^k)$

Faça $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$

$k = k + 1$

A Figura 5.1 mostra 4 iterações do algoritmo com a busca exata aplicado para minimizar uma função quadrática convexa. Esta figura sugere duas propriedades do algoritmo. Uma delas, formalizada no Exercício 5.2, é o fato de duas direções consecutivas serem ortogonais. A outra propriedade se refere à convergência, que será discutida na próxima seção.

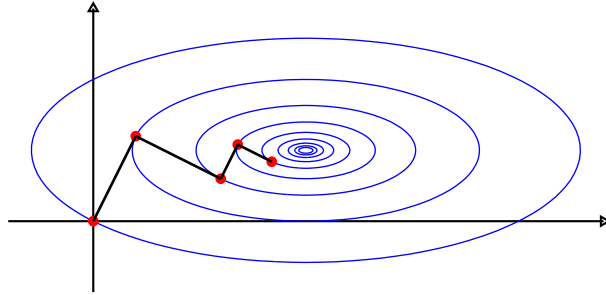


Figura 5.1: passos do algoritmo de Cauchy.

5.1.2 Convergência global

A convergência global do Algoritmo de Cauchy é uma consequência imediata do que foi estabelecido no Capítulo 4.

Teorema 5.2 *O Algoritmo 5.1, com o tamanho do passo t_k calculado pela busca exata, é globalmente convergente, segundo a Definição 4.16. O mesmo resultado vale se utilizarmos a busca de Armijo para calcular t_k .*

Demonstração. Segue diretamente dos Teoremas 4.17 e 4.18, com $H(x) = I \in \mathbb{R}^{n \times n}$. \square

Salientamos que a convergência no caso da busca de Armijo é assegurada se utilizarmos o Algoritmo 4.13 para calcular t_k . Caso o tamanho do passo seja escolhido apenas pela relação (4.5), ele pode ficar arbitrariamente pequeno e o algoritmo pode não convergir. Veja o Exercício 5.3 no final do capítulo.

5.1.3 Velocidade de convergência

Os resultados mais importantes sobre a velocidade de convergência do algoritmo de Cauchy são revelados quando a função objetivo é quadrática. Vamos então considerar

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c, \quad (5.1)$$

com $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definida positiva. Assim, f é convexa e tem um único minimizador \bar{x} , que é global e satisfaz

$$A\bar{x} + b = \nabla f(\bar{x}) = 0. \quad (5.2)$$

Mostraremos agora que, usando a norma euclidiana, a sequência gerada pelo método de Cauchy com busca exata converge linearmente para \bar{x} , com taxa de convergência $\sqrt{1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_n}}$.

Primeiramente, note que o passo ótimo é dado por

$$t_k = \frac{(d^k)^T d^k}{(d^k)^T A d^k}. \quad (5.3)$$

De fato, basta fazer $\nabla f(x^k + t d^k)^T d^k = \frac{d}{dt} f(x^k + t d^k) = 0$.

No que segue, para facilitar a notação, vamos supor que $\bar{x} = 0$ e $f(\bar{x}) = 0$, isto é,

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T A x. \quad (5.4)$$

Isto não tira a generalidade do resultado em virtude do Exercício 5.7.

Lema 5.3 Dado $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, considere $d = -Ax$. Então,

$$\frac{d^T d}{d^T A d} \leq \frac{x^T A x}{x^T A^2 x}.$$

Demonstração. Temos $x^T A x = d^T A^{-1} d$ e $x^T A^2 x = d^T d$. Portanto,

$$\frac{d^T d}{d^T A d} \frac{x^T A^2 x}{x^T A x} = \frac{(d^T d)^2}{(d^T A d)(d^T A^{-1} d)}. \quad (5.5)$$

Como $A > 0$, existe $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que $A = G G^T$. Fazendo $u = G^T d$ e $v = G^{-1} d$, temos que $u^T v = d^T d$, $u^T u = d^T A d$ e $v^T v = d^T A^{-1} d$. Pela desigualdade de Cauchy-Schwarz, podemos concluir de (5.5) que

$$\frac{d^T d}{d^T A d} \frac{x^T A^2 x}{x^T A x} \leq 1,$$

completando a prova. □

Teorema 5.4 Considere a função quadrática dada em (5.4) e a sequência (x^k) gerada pelo Algoritmo 5.1, com busca exata. Se $\gamma = \sqrt{1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_n}}$, então,

$$\|x^{k+1}\|_2 \leq \gamma \|x^k\|_2,$$

para todo $k \in \mathbb{N}$.

Demonstração. Como $d^k = -\nabla f(x^k) = -A x^k$, temos

$$\begin{aligned} \|x^{k+1}\|_2^2 &= (x^k + t_k d^k)^T (x^k + t_k d^k) \\ &= (x^k)^T x^k + 2t_k (x^k)^T d^k + t_k^2 (d^k)^T d^k \\ &= \|x^k\|_2^2 - 2t_k (x^k)^T A x^k + t_k^2 (x^k)^T A^2 x^k. \end{aligned}$$

Usando (5.3) e o Lemma 5.3, obtemos

$$\|x^{k+1}\|_2^2 \leq \|x^k\|_2^2 - 2t_k(x^k)^T Ax^k + t_k(x^k)^T Ax^k = \|x^k\|_2^2 - t_k(x^k)^T Ax^k.$$

Caso $x^k = 0$ não há nada a fazer. Suponha então que $x^k \neq 0$. Usando novamente (5.3), obtemos

$$\frac{\|x^{k+1}\|_2^2}{\|x^k\|_2^2} \leq 1 - \frac{(d^k)^T d^k}{(d^k)^T A d^k} \frac{(x^k)^T A x^k}{(x^k)^T x^k}.$$

Utilizando o Lema 1.36, segue que

$$\frac{\|x^{k+1}\|_2^2}{\|x^k\|_2^2} \leq 1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_n},$$

completando a prova. \square

Este teorema tem uma interpretação geométrica interessante. As curvas de nível de f são elipsóides cuja excentricidade depende da diferença entre o maior e o menor autovalor de A . Se $\lambda_1 = \lambda_n$, então as curvas de nível são esferas e a convergência ocorre em um único passo. Entretanto, se $\lambda_1 \ll \lambda_n$, então os elipsóides ficam muito excêntricos e a convergência se dá de forma lenta. Veja ilustração na Figura 5.2.

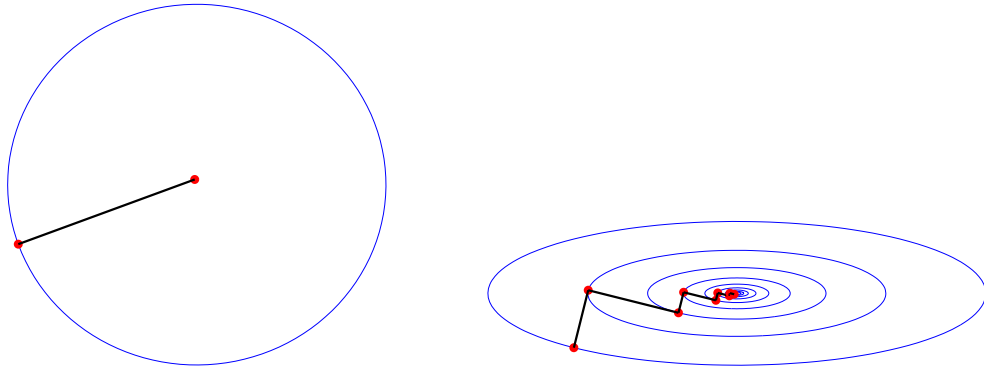


Figura 5.2: Excentricidade no algoritmo de Cauchy.

Salientamos que o resultado encontrado na literatura estabelece a convergência linear da sequência $(f(x^k))$, o que implica na convergência linear da sequência (x^k) , na norma induzida pela hessiana da quadrática. Para mais detalhes veja [11, 17].

Os resultados estabelecidos para funções quadráticas podem ser estendidos para funções gerais, como vemos no seguinte teorema, demonstrado em [17].

Teorema 5.5 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^2 . Suponha que $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ seja um minimizador local de f , com $\nabla^2 f(\bar{x})$ definida positiva, e que a sequência (x^k) , gerada pelo algoritmo de Cauchy, com busca exata, converge para \bar{x} . Então a sequência $(f(x^k))$ converge linearmente para $f(\bar{x})$ com taxa não superior a $\left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^2$, onde λ_1 e λ_n são o menor e o maior autovalor de $\nabla^2 f(\bar{x})$, respectivamente.*

5.2 Método de Newton

O método de Newton é uma das ferramentas mais importantes em otimização. Tanto o algoritmo básico quanto suas variantes são muito utilizados para minimização.

5.2.1 Motivação

Considere uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^2 . Nosso objetivo consiste em encontrar um minimizador de f . De acordo com as condições necessárias de otimalidade, devemos resolver o sistema de n equações e n incógnitas dado por $\nabla f(x) = 0$.

Generalizando, considere $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe \mathcal{C}^1 e o problema de resolver o sistema (normalmente não linear)

$$F(x) = 0.$$

Como na maioria das vezes não conseguimos resolvê-lo de forma direta, os processos iterativos constituem a forma mais eficiente de lidar com tais situações.

A idéia é aproximar F por seu polinômio de Taylor de primeira ordem. Dada uma estimativa \bar{x} , considere o sistema linear

$$F(\bar{x}) + J_F(\bar{x})(x - \bar{x}) = 0, \quad (5.6)$$

onde J_F representa a matriz jacobiana de F . Caso $J_F(\bar{x})$ seja inversível, o sistema (5.6) pode ser resolvido, fornecendo

$$x^+ = \bar{x} - (J_F(\bar{x}))^{-1} F(\bar{x}).$$

Isto corresponde a uma iteração do método de Newton para resolução de equações (veja a Figura 5.3).

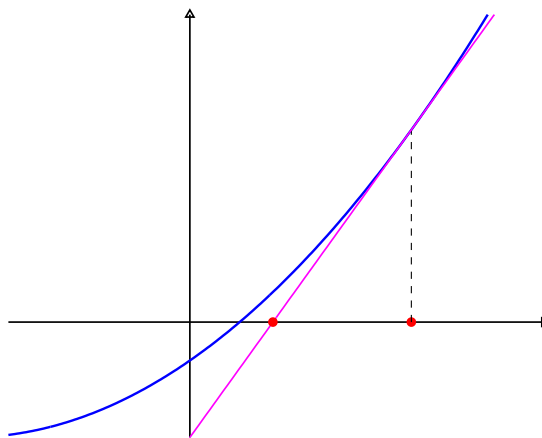


Figura 5.3: uma iteração do método de Newton.

Voltando agora ao problema de minimizar f , aplicamos a estratégia acima para

$F = \nabla f$, obtendo

$$x^+ = \bar{x} - (\nabla^2 f(\bar{x}))^{-1} \nabla f(\bar{x}). \quad (5.7)$$

5.2.2 Algoritmo

Com base na relação (5.7) podemos agora formalizar o método de Newton para minimizar a função f . Basicamente, temos três variantes no algoritmo. Uma delas é o método “puro”, onde não fazemos busca unidirecional e aceitamos o passo completo ($t_k = 1$, para todo $k \in \mathbb{N}$). As outras duas fazem uso de busca (exata ou Armijo).

Algoritmo 5.6 *Newton*

Dado: $x^0 \in \mathbb{R}^n$

$k = 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x^k) \neq 0$

Defina $d^k = -(\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k)$

Determine o tamanho do passo $t_k > 0$

Faça $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$

$k = k + 1$

Note que o Algoritmo de Newton pode ser considerado situação particular do Algoritmo 4.15, com $H(x^k) = (\nabla^2 f(x^k))^{-1}$, para todo $k \in \mathbb{N}$.

Diferentemente do que acontece no Algoritmo de Cauchy, o passo de Newton pode não estar bem definido, caso a matriz Hessiana $\nabla^2 f(x^k)$ seja singular. Além disso, mesmo que o passo d^k seja calculado, esta direção pode não ser de descida. Entretanto, se $\nabla^2 f(x^k)$ é definida positiva, então o passo d^k está bem definido e é uma direção de descida.

O passo de Newton também pode ser obtido por uma abordagem diferente da que foi exposta acima. Para isto considere a aproximação de Taylor de segunda ordem de f , dada por

$$p(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T \nabla^2 f(x^k) (x - x^k).$$

Com o objetivo de minimizar p , fazemos

$$\nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) = \nabla p(x) = 0,$$

obtendo exatamente o passo d^k do Algoritmo 5.6. A Figura 5.4 ilustra esta abordagem. O primeiro gráfico mostra, para $n = 1$, a função e o modelo, bem como os pontos x^k e x^{k+1} . O outro gráfico ilustra o passo para $n = 2$. Neste caso, mostramos as curvas de nível da função e do modelo, bem como os pontos x^k e x^{k+1} .

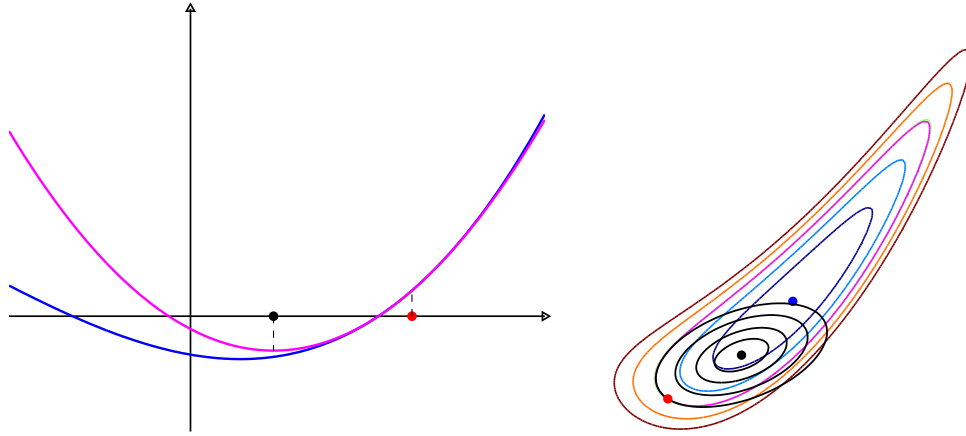


Figura 5.4: uma iteração do método de Newton.

Esta última abordagem sugere que se o método de Newton for aplicado em uma função quadrática, então basta uma iteração para resolver o problema. De fato, considere a quadrática dada em (5.1). Dado $x^0 \in \mathbb{R}^n$, o passo obtido é

$$d^0 = -(\nabla^2 f(x^0))^{-1} \nabla f(x^0) = -A^{-1}(Ax^0 + b) = -x^0 - A^{-1}b.$$

Portanto, o minimizador \bar{x} é obtido em um só passo, pois

$$x^1 = x^0 + d^0 = -A^{-1}b = \bar{x}.$$

5.2.3 Convergência

Como já observamos antes, a direção de Newton pode não ser de descida. Portanto, não garantimos convergência global quando o problema a ser resolvido envolver uma função arbitrária. No entanto, para uma classe de funções convexas, podemos tirar conclusões positivas, pois podemos aplicar o que foi estabelecido no Capítulo 4.

Teorema 5.7 *Suponha que $\nabla^2 f(x)$ é definida positiva, para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Então o Algoritmo 5.6, com o tamanho do passo t_k calculado pela busca exata, é globalmente convergente, segundo a Definição 4.16. O mesmo resultado vale se utilizarmos a busca de Armijo para calcular t_k .*

Demonstração. Segue diretamente dos Teoremas 4.17 e 4.18, com $H(x) = (\nabla^2 f(x))^{-1}$. \square

Para estabelecer propriedades de convergência local, vamos precisar dos seguintes resultados.

Lema 5.8 *Suponha que $\nabla^2 f(\bar{x}) > 0$. Então existem constantes $\delta > 0$ e $M > 0$ tais que*

$$\nabla^2 f(x) > 0 \quad e \quad \|(\nabla^2 f(x))^{-1}\| \leq M,$$

para todo $x \in B(\bar{x}, \delta)$.

Demonstração. Seja $\lambda > 0$ o menor autovalor de $\nabla^2 f(\bar{x})$. Pela continuidade de $\nabla^2 f$, existe $\delta > 0$ tal que

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(\bar{x})\| < \frac{\lambda}{2}, \quad (5.8)$$

para todo $x \in B(\bar{x}, \delta)$. Assim, dado $d \in \mathbb{R}^n$, com $\|d\| = 1$, podemos usar o Lema 1.36 e concluir que

$$d^T \nabla^2 f(x) d = d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + d^T [\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(\bar{x})] d \geq \lambda - \frac{\lambda}{2} = \frac{\lambda}{2},$$

provando que $\nabla^2 f(x)$ é definida positiva para todo $x \in B(\bar{x}, \delta)$. Para provar a outra afirmação, considere $x \in B(\bar{x}, \delta)$. Vamos denotar $A = \nabla^2 f(\bar{x})$ e $B = \nabla^2 f(x)$. Usando novamente o Lema 1.36, agora aplicado em A^2 , obtemos

$$\|Ad\|^2 = d^T A^2 d \geq \lambda^2 \|d\|^2,$$

para todo $d \in \mathbb{R}^n$. Portanto, usando (5.8), concluímos que

$$\|Bd\| = \|Ad + (B - A)d\| \geq \|Ad\| - \|(B - A)d\| \geq \lambda \|d\| - \frac{\lambda}{2} \|d\| = \frac{\lambda}{2} \|d\|.$$

Considere agora $y \in \mathbb{R}^n$, com $\|y\| = 1$. Aplicando a relação acima para $d = B^{-1}y$, concluímos que

$$1 = \|y\| = \|BB^{-1}y\| \geq \frac{\lambda}{2} \|B^{-1}y\|.$$

Portanto, para $M = \frac{2}{\lambda}$, temos $\|(\nabla^2 f(x))^{-1}\| = \|B^{-1}\| \leq M$, completando a demonstração. \square

Lema 5.9 *Sejam $U \subset \mathbb{R}^n$ aberto convexo e $\beta = \sup_{x,y \in U} \|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\|$. Então*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y) - \nabla^2 f(y)(x - y)\| \leq \beta \|x - y\|,$$

para todos $x, y \in U$.

Demonstração. Fixado $y \in U$, considere $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ dada por $h(x) = \nabla f(x) - \nabla^2 f(y)x$. Assim,

$$\|J_h(x)\| = \|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq \beta,$$

para todo $x \in U$. Usando a desigualdade do valor médio, obtemos

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y) - \nabla^2 f(y)(x - y)\| = \|h(x) - h(y)\| \leq \beta \|x - y\|,$$

completando a demonstração. \square

Lema 5.10 *Seja $U \subset \mathbb{R}^n$ aberto e convexo. Se $\nabla^2 f$ é lipschitz com constante L , então*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y) - \nabla^2 f(y)(x - y)\| \leq L\|x - y\|^2,$$

para todos $x, y \in U$.

Demonstração. Fixados $x, y \in U$, defina $\beta = L\|x - y\|$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ dada por $h(z) = \nabla f(z) - \nabla^2 f(y)z$. Assim, para todo $z \in [x, y]$, temos

$$\|J_h(z)\| = \|\nabla^2 f(z) - \nabla^2 f(y)\| \leq L\|z - y\| \leq L\|x - y\| = \beta.$$

Usando a desigualdade do valor médio, obtemos

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y) - \nabla^2 f(y)(x - y)\| = \|h(x) - h(y)\| \leq \beta\|x - y\| = L\|x - y\|^2,$$

completando a demonstração. □

O próximo resultado estabelece a convergência quadrática do método de Newton puro, isto é, com $t_k = 1$, para todo $k \in \mathbb{N}$.

Teorema 5.11 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^2 . Suponha que $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ seja um minimizador local de f , com $\nabla^2 f(\bar{x})$ definida positiva. Então existe $\delta > 0$ tal que se $x^0 \in B(\bar{x}, \delta)$, o Algoritmo 5.6, aplicado com $t_k = 1$ para todo $k \in \mathbb{N}$, gera uma sequência (x^k) tal que:*

- (i) $\nabla^2 f(x^k)$ é definida positiva, para todo $k \in \mathbb{N}$;
- (ii) (x^k) converge superlinearmente para \bar{x} ;
- (iii) Se $\nabla^2 f$ é lipschitz, então a convergência é quadrática.

Demonstração. Sejam δ e M as constantes definidas no Lema 5.8 e $U = B(\bar{x}, \delta)$. Assim, se $x^k \in U$, o passo de Newton está bem definido e, como $\nabla f(\bar{x}) = 0$, vale

$$x^{k+1} - \bar{x} = (\nabla^2 f(x^k))^{-1}(\nabla f(\bar{x}) - \nabla f(x^k) - \nabla^2 f(x^k)(\bar{x} - x^k)). \quad (5.9)$$

Podemos diminuir δ , se necessário, de modo que $\sup_{x, y \in U} \|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| < \frac{1}{2M}$. Pelos Lemas 5.8 e 5.9, concluímos que

$$\|x^{k+1} - \bar{x}\| \leq \frac{1}{2}\|x^k - \bar{x}\|.$$

Isto prova que a sequência (x^k) está bem definida, que $x^k \in U$, para todo $k \in \mathbb{N}$ e que $x^k \rightarrow \bar{x}$, donde segue (i). Vejamos que a convergência é superlinear. Dado $\varepsilon > 0$, considere $\delta_0 < \delta$ tal que $\sup_{x, y \in U_0} \|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| < \frac{\varepsilon}{M}$, onde $U_0 = B(\bar{x}, \delta_0)$. Tome $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$x^k \in U_0$, para todo $k \geq k_0$. Aplicando novamente os Lemas 5.8 e 5.9 na relação (5.9), obtemos

$$\|x^{k+1} - \bar{x}\| \leq \varepsilon \|x^k - \bar{x}\|,$$

provando assim (ii). Finalmente, se $\nabla^2 f$ é lipschitz, podemos usar os Lemas 5.8 e 5.10 em (5.9) para obter

$$\|x^{k+1} - \bar{x}\| \leq ML \|x^k - \bar{x}\|^2,$$

completando a demonstração. \square

5.3 Método de região de confiança

O método de região de confiança define um modelo da função objetivo e uma região em torno do ponto corrente na qual confiamos no modelo. Calculamos então, um minimizador aproximado do modelo na região de confiança. Caso este ponto forneça uma redução razoável no valor da função objetivo ele é aceito e repete-se o processo. Caso contrário, pode ser que o modelo não represente adequadamente a função. Neste caso, o ponto é recusado e o tamanho da região é reduzido para encontrar um novo minimizador. Em geral, a direção do passo pode mudar quando o tamanho da região é alterado. Isto significa que a filosofia deste método é diferente da que aparece nos métodos discutidos anteriormente. A idéia até então era fixar uma direção e, em seguida, determinar quanto caminhar nesta direção para reduzir a função objetivo. Agora, dizemos primeiro quanto podemos caminhar e depois calculamos a direção.

Vamos considerar uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^2 e, dado um ponto $x^k \in \mathbb{R}^n$, o modelo quadrático de f em torno de x^k definido por

$$q_k(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T B_k (x - x^k),$$

onde $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pode ser a hessiana $\nabla^2 f(x^k)$ ou qualquer outra matriz simétrica que satisfaça $\|B_k\| \leq \beta$, para alguma constante $\beta > 0$, independente de $k \in \mathbb{N}$.

O modelo definido acima aproxima bem a função f numa vizinhança de x^k . Vamos portanto considerar $\Delta_k > 0$ e a região

$$\{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^k\| \leq \Delta_k\},$$

em que confiamos no modelo. Para simplificar a notação, considere

$$d = x - x^k \quad \text{e} \quad m_k(d) = q_k(x^k + d).$$

Na primeira etapa do método, resolvemos (possivelmente de forma aproximada) o sub-

problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && m_k(d) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \\ &\text{sujeito a} && \|d\| \leq \Delta_k, \end{aligned} \quad (5.10)$$

obtendo um passo d^k . A outra etapa consiste em avaliar o passo. Esperamos que o ponto $x^k + d^k$ proporcione uma redução na função objetivo que seja no mínimo uma fração da redução do modelo. Para formalizar este conceito definimos a redução real na função objetivo e a redução predita pelo modelo como

$$ared = f(x^k) - f(x^k + d^k) \quad \text{e} \quad pred = m_k(0) - m_k(d^k).$$

Vamos também considerar seguinte razão, que será usada na avaliação do passo.

$$\rho_k = \frac{ared}{pred}. \quad (5.11)$$

O passo d^k será aceito quando a razão ρ_k for maior que uma constante $\eta > 0$ dada. Neste caso, definimos $x^{k+1} = x^k + d^k$ e repetimos o processo. Caso contrário, recusamos o passo d^k , reduzimos o raio Δ_k e resolvemos o subproblema (5.10) com o novo raio. A Figura 5.5 ilustra um passo do método de região de confiança. Note que no gráfico da direita o minimizador irrestrito do modelo está na região de confiança. Neste caso, se $B_k = \nabla^2 f(x^k)$, então o passo de região de confiança é exatamente o passo de Newton.

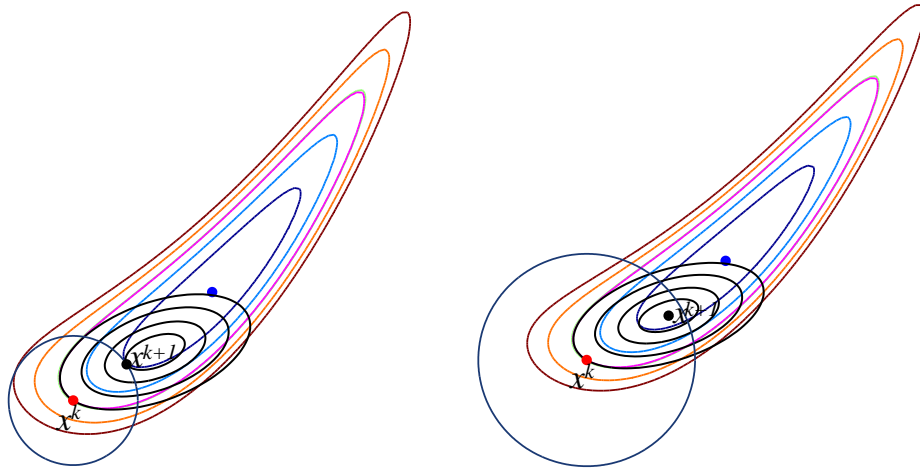


Figura 5.5: uma iteração do método de região de confiança.

5.3.1 Algoritmo

Vamos agora formalizar a discussão anterior no seguinte algoritmo, que se baseia no proposto em [18]. Também consideramos importante citar [3], uma referência moderna sobre métodos de região de confiança,

Algoritmo 5.12 *Região de confiança*

Dados: $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\bar{\Delta} > 0$, $\Delta_0 \in (0, \bar{\Delta})$ e $\eta \in [0, \frac{1}{4})$:

$k = 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x^k) \neq 0$

Obtenha d^k , solução “aproximada” de (5.10)

Calcule ρ_k usando (5.11)

SE $\rho_k > \eta$

$$x^{k+1} = x^k + d^k$$

SENÃO

$$x^{k+1} = x^k$$

SE $\rho_k < \frac{1}{4}$

$$\Delta_{k+1} = \frac{\Delta_k}{2}$$

SENÃO

SE $\rho_k > \frac{3}{4}$ e $\|d^k\| = \Delta_k$

$$\Delta_{k+1} = \min \{2\Delta_k, \bar{\Delta}\}$$

SENÃO

$$\Delta_{k+1} = \Delta_k$$

$k = k + 1$

Note que $\nabla m_k(0) = \nabla f(x^k)$. Assim, se entramos no REPITA do Algoritmo 5.12, então $\nabla m_k(0) \neq 0$ e portanto a redução predita será positiva. Outra observação é que aumentamos o raio quando a redução da função objetivo é grande e o passo d^k está na fronteira da região de confiança. Se o passo fica estritamente dentro da região, podemos inferir que o raio atual Δ_k não interfere no progresso do algoritmo e podemos deixar inalterado o seu valor para a próxima iteração.

5.3.2 O passo de Cauchy

Vamos discutir agora como obter uma solução aproximada do subproblema (5.10) que seja suficiente para garantir a convergência global do Algoritmo 5.12. Isto é importante pois muitas vezes não conseguimos resolver o subproblema de forma exata. O passo de Cauchy, que definiremos abaixo, fornece uma redução no modelo que nos permite provar a convergência do algoritmo.

Para facilitar o desenvolvimento, vamos denotar $g_k = \nabla f(x^k)$. Definimos o passo de Cauchy como sendo o minimizador de m_k ao longo da direção oposta ao gradiente, sujeito a região de confiança, isto é,

$$d_c^k = -t_k g_k, \quad (5.12)$$

onde $t_k > 0$ é solução do problema

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & m_k(-tg_k) = f(x^k) - t\|g_k\|^2 + \frac{1}{2}t^2 g_k^T B_k g_k \\ \text{sujeito a} \quad & \|tg_k\| \leq \Delta_k. \end{aligned} \quad (5.13)$$

A Figura 5.6 mostra o ponto de Cauchy em uma iteração k . Nesta figura, as elipses

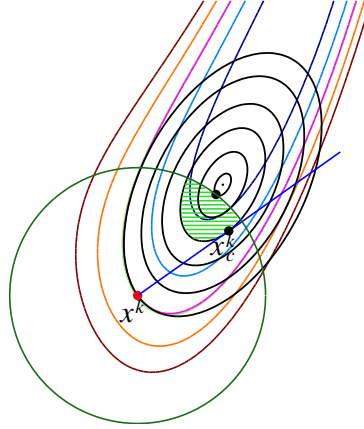


Figura 5.6: o ponto de Cauchy e pontos “melhores”.

representam as curvas de nível do modelo m_k . A área hachurada corresponde ao conjunto de pontos que satisfazem a relação

$$pred \geq m_k(0) - m_k(d_c^k). \quad (5.14)$$

Esta condição será a base de uma das hipóteses na análise de convergência, isto é, vamos supor que a solução aproximada do subproblema (5.10) seja pelo menos tão boa quanto a solução de Cauchy.

Vamos agora fazer uma estimativa da redução do modelo no passo de Cauchy.

Lema 5.13 *O passo de Cauchy, definido em (5.12), satisfaz*

$$m_k(0) - m_k(d_c^k) \geq \frac{1}{2}\|g_k\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|} \right\}.$$

Demonstração. Primeiramente, vamos obter t_k , solução do Problema 5.13, isto é, o minimizador da função quadrática

$$\xi(t) = f(x^k) - t\|g_k\|^2 + \frac{1}{2}t^2 g_k^T B_k g_k$$

no intervalo $0 \leq t \leq \frac{\Delta_k}{\|g_k\|}$. Para isto considere dois casos: $g_k^T B_k g_k > 0$ e $g_k^T B_k g_k \leq 0$.

(i) Se $g_k^T B_k g_k > 0$, então a função ξ é convexa (veja a Figura 5.7) e tem minimizador irrestrito

$$t^* = \frac{\|g_k\|^2}{g_k^T B_k g_k}. \quad (5.15)$$

Dois subcasos podem ocorrer. O primeiro é quando $t^* \leq \frac{\Delta_k}{\|g_k\|}$. Neste caso temos $t_k = t^*$ e portanto

$$m_k(0) - m_k(d_c^k) = \frac{1}{2} \frac{\|g_k\|^4}{g_k^T B_k g_k}.$$

Usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz, obtemos

$$m_k(0) - m_k(d_c^k) \geq \frac{1}{2} \frac{\|g_k\|^2}{\|B_k\|}. \quad (5.16)$$

No segundo subcaso temos $t^* > \frac{\Delta_k}{\|g_k\|}$, o que implica que o minimizador de ξ está na fronteira. Assim, usando (5.15), obtemos

$$t_k = \frac{\Delta_k}{\|g_k\|} < \frac{\|g_k\|^2}{g_k^T B_k g_k}, \quad (5.17)$$

implicando em

$$t_k^2 g_k^T B_k g_k < t_k \|g_k\|^2 = \|g_k\| \Delta_k.$$

Portanto,

$$m_k(d_c^k) < f(x^k) - \|g_k\| \Delta_k + \frac{1}{2} \|g_k\| \Delta_k = f(x^k) - \frac{1}{2} \|g_k\| \Delta_k,$$

donde segue que

$$m_k(0) - m_k(d_c^k) > \frac{1}{2} \|g_k\| \Delta_k. \quad (5.18)$$

(ii) Agora o caso em que $g_k^T B_k g_k \leq 0$, fornecendo

$$m_k(d_c^k) = f(x^k) - t_k \|g_k\|^2 + \frac{1}{2} t_k^2 g_k^T B_k g_k \leq f(x^k) - t_k \|g_k\|^2. \quad (5.19)$$

Neste caso, a função ξ é decrescente para $t \geq 0$ (veja a Figura 5.7) e assim o ponto de Cauchy também está na fronteira da região de confiança, ou seja, $t_k = \frac{\Delta_k}{\|g_k\|}$. Portanto, por (5.19),

$$m_k(0) - m_k(d_c^k) \geq \|g_k\| \Delta_k \geq \frac{1}{2} \|g_k\| \Delta_k. \quad (5.20)$$

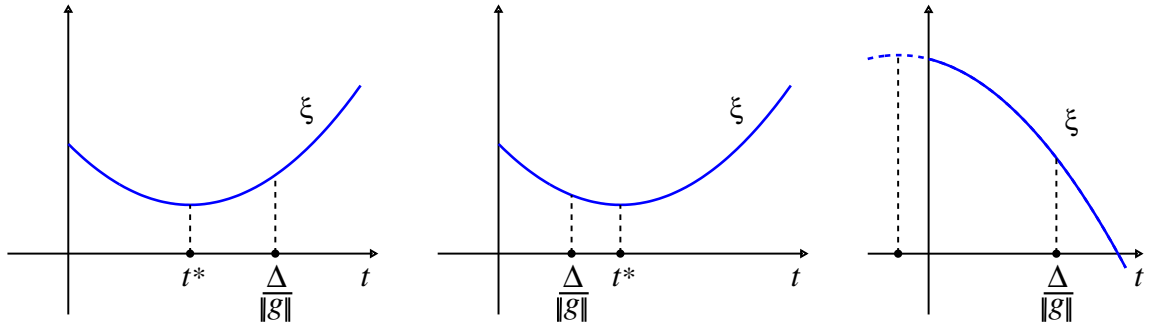
De (5.16), (5.18) e (5.20) segue que

$$m_k(0) - m_k(d_c^k) \geq \frac{1}{2} \|g_k\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|} \right\},$$

o que demonstra o resultado. □

5.3.3 Convergência

Para estabelecer a convergência do método de região de confiança vamos supor que o Algoritmo 5.12 gera uma sequência infinita (x^k) em \mathbb{R}^n e que são satisfeitas as

Figura 5.7: a função ξ .

seguintes hipóteses.

H1 A função objetivo f é de classe \mathcal{C}^1 , com ∇f Lipschitz.

H2 A solução aproximada d^k de (5.10) satisfaz

$$\text{pred} = m_k(0) - m_k(d^k) \geq c_1 \|\nabla f(x^k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\|B_k\|} \right\},$$

onde $c_1 > 0$ é uma constante.

H3 O passo d^k satisfaz $\|d^k\| \leq \gamma \Delta_k$, para alguma constante $\gamma \geq 1$.

H4 A função f é limitada inferiormente no conjunto de nível

$$N = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x^0)\}.$$

H5 As Hessianas B_k são uniformemente limitadas, isto é, que existe uma constante $\beta > 0$ tal que $\|B_k\| \leq \beta$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

As Hipóteses H1, H4 e H5 são comuns em análise de convergência. Em vista do Lema 5.13, a Hipótese H2 significa obter um passo cuja redução no modelo seja proporcional àquela obtida pelo passo de Cauchy. A condição assumida em H3 significa que o passo pode exceder a região de confiança, contanto que permaneça dentro de algum múltiplo fixo do raio.

O primeiro resultado nos dá uma estimativa da razão ρ_k , definida em (5.11).

Lema 5.14 Suponha que sejam satisfeitas as Hipóteses H1-H5. Então existe uma constante $c > 0$ tal que

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{c\Delta_k^2}{\|\nabla f(x^k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\beta} \right\}}.$$

Demonstração. Pelo teorema do valor médio, temos

$$f(x^k + d^k) = f(x^k) + \nabla f(x^k + \theta_k d^k)^T d^k,$$

com $\theta_k \in (0, 1)$. Portanto,

$$ared - pred = \frac{1}{2}(d^k)^T B_k d^k - (\nabla f(x^k + \theta_k d^k) - \nabla f(x^k))^T d^k,$$

Usando o fato de que ∇f é Lipschitz e a desigualdade de Cauchy-Schwarz, podemos concluir que existe $c_0 > 0$ tal que

$$|ared - pred| \leq c_0 \Delta_k^2.$$

Assim,

$$|\rho_k - 1| = \left| \frac{ared - pred}{pred} \right| \leq \frac{c_0 \Delta_k^2}{c_1 \|\nabla f(x^k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\beta} \right\}},$$

provando o lema para $c = \frac{c_0}{c_1}$. □

O próximo teorema já nos permite concluir algo sobre convergência, a saber, que se a sequência (x^k) for limitada, então ela possui um ponto de acumulação estacionário.

Teorema 5.15 *Suponha que sejam satisfeitas as Hipóteses H1-H5. Então*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0.$$

Demonstração. Suponha por absurdo que isto seja falso. Então existe $\varepsilon > 0$ tal que $\|\nabla f(x^k)\| \geq \varepsilon$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Considere $\tilde{\Delta} = \min \left\{ \frac{\varepsilon}{\beta}, \frac{\varepsilon}{2c} \right\}$, onde β e c são as constantes do Lema 5.14. Se $\Delta_k \leq \tilde{\Delta}$, então

$$\Delta_k \leq \frac{\varepsilon}{\beta} \leq \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\beta} \quad \text{e} \quad \Delta_k \leq \frac{\varepsilon}{2c}.$$

Portanto, pelo Lema 5.14,

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{c \Delta_k}{\varepsilon} \leq \frac{1}{2}.$$

Assim, $\rho_k \geq \frac{1}{2} > \frac{1}{4}$ e pelo Algoritmo 5.12 temos $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$. Isto significa que o raio é reduzido somente se $\Delta_k > \tilde{\Delta}$, caso em que $\Delta_{k+1} = \frac{\Delta_k}{2} > \frac{\tilde{\Delta}}{2}$. Podemos então concluir que

$$\Delta_k \geq \min \left\{ \Delta_0, \frac{\tilde{\Delta}}{2} \right\}, \tag{5.21}$$

para todo $k \in \mathbb{N}$. Considere agora o conjunto

$$\mathcal{K} = \left\{ k \in \mathbb{N} \mid \rho_k \geq \frac{1}{4} \right\}.$$

Dado $k \in \mathcal{K}$, pelo mecanismo do Algoritmo 5.12 e pela Hipótese H2 temos

$$\begin{aligned} f(x^k) - f(x^{k+1}) &= f(x^k) - f(x^k + d^k) \\ &\geq \frac{1}{4} (m_k(0) - m_k(d^k)) \\ &\geq \frac{1}{4} c_1 \varepsilon \min \left\{ \Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta} \right\}. \end{aligned}$$

Em vista de (5.21), temos que existe uma constante $\tilde{\delta} > 0$ tal que

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq \tilde{\delta}, \quad (5.22)$$

para todo $k \in \mathcal{K}$. Por outro lado, a sequência $(f(x^k))$ é não crescente e, por H4, limitada inferiormente, donde segue que $f(x^k) - f(x^{k+1}) \rightarrow 0$. Portanto, de (5.22), podemos concluir que o conjunto \mathcal{K} é finito. Assim, $\rho_k < \frac{1}{4}$, para todo $k \in \mathbb{N}$ suficientemente grande e então Δ_k será reduzido à metade em cada iteração. Isto implica $\Delta_k \rightarrow 0$, o que contradiz (5.21). Deste modo, a afirmação no teorema é verdadeira. \square

Finalmente, podemos provar a convergência global do método de região de confiança.

Teorema 5.16 *Suponha que sejam satisfeitas as Hipóteses H1-H5. Então*

$$\nabla f(x^k) \rightarrow 0.$$

Demonstração. Suponha por absurdo que para algum $\varepsilon > 0$ o conjunto

$$\mathcal{K} = \{k \in \mathbb{N} \mid \|\nabla f(x^k)\| \geq \varepsilon\}$$

seja infinito. Dado $k \in \mathcal{K}$, considere o primeiro índice $l_k > k$ tal que $\|\nabla f(x^{l_k})\| \leq \frac{\varepsilon}{2}$. A existência de l_k é assegurada pelo Teorema 5.15. Como ∇f é Lipschitz, temos

$$\frac{\varepsilon}{2} \leq \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{l_k})\| \leq L \|x^k - x^{l_k}\|,$$

para alguma constante $L > 0$. Portanto,

$$\frac{\varepsilon}{2L} \leq \|x^k - x^{l_k}\| \leq \sum_{j \in \mathcal{S}_k} \|x^j - x^{j+1}\| \leq \sum_{j \in \mathcal{S}_k} \gamma \Delta_j, \quad (5.23)$$

onde $\mathcal{S}_k = \{j \in \mathbb{N} \mid k \leq j < l_k \text{ e } x^{j+1} \neq x^j\}$. Pelo mecanismo do Algoritmo 5.12, Hipótese H2 e definição de l_k , temos

$$\begin{aligned} f(x^k) - f(x^{l_k}) &= \sum_{j \in \mathcal{S}_k} (f(x^j) - f(x^{j+1})) \\ &\geq \sum_{j \in \mathcal{S}_k} \eta (m_j(x^j) - m_j(x^{j+1})) \\ &\geq \sum_{j \in \mathcal{S}_k} \eta c_1 \varepsilon \min \left\{ \Delta_j, \frac{\varepsilon}{\beta} \right\}. \end{aligned}$$

Definindo $\tilde{\delta} = \min \left\{ \frac{\eta c_1 \varepsilon^2}{2\gamma L}, \frac{\eta c_1 \varepsilon^2}{\beta} \right\}$ e usando (5.23), obtemos

$$f(x^k) - f(x^{l_k}) \geq \tilde{\delta}, \quad (5.24)$$

para todo $k \in \mathcal{K}$. Por outro lado, a sequência $(f(x^k))$ é não crescente e, por H4, limitada inferiormente, donde segue que $f(x^k) - f(x^{k+1}) \rightarrow 0$, contradizendo (5.24). Deste modo, a afirmação no teorema é verdadeira. \square

Uma consequência imediata do Teorema 5.16 é que todo ponto de acumulação de uma sequência gerada pelo Algoritmo 5.12 é estacionário. De fato, se $x^k \xrightarrow{\mathbb{N}'} \bar{x}$, então a continuidade de ∇f garante que $\nabla f(x^k) \xrightarrow{\mathbb{N}'} \nabla f(\bar{x})$. Por outro lado, pelo Teorema 5.16, temos $\nabla f(x^k) \rightarrow 0$. Assim, $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

Vamos reapresentar agora o Lema 5.14 e o Teorema 5.15, mas com uma hipótese mais fraca que H1. Vamos substituir a condição de Lipschitz de ∇f pela continuidade uniforme.

Lema 5.17 *Suponha que f seja de classe \mathcal{C}^1 e que sejam satisfeitas as Hipóteses H2-H5. Então*

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{\gamma \Delta_k \left(\frac{\beta}{2} \gamma \Delta_k + \sup_{t \in [0,1]} \{ \|\nabla f(x^k + td^k) - \nabla f(x^k)\| \} \right)}{c_1 \|\nabla f(x^k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\beta} \right\}},$$

onde c_1 , γ e β são as constantes das Hipóteses H2, H3 e H5, respectivamente.

Demonstração. Pelo teorema do valor médio, temos

$$f(x^k + d^k) = f(x^k) + \nabla f(x^k + \theta_k d^k)^T d^k,$$

com $\theta_k \in (0, 1)$. Portanto,

$$ared - pred = \frac{1}{2} (d^k)^T B_k d^k - (\nabla f(x^k + \theta_k d^k) - \nabla f(x^k))^T d^k,$$

Usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz e as Hipóteses H3 e H5, obtemos

$$|ared - pred| \leq \gamma \Delta_k \left(\frac{\beta}{2} \gamma \Delta_k + \sup_{t \in [0,1]} \{ \|\nabla f(x^k + td^k) - \nabla f(x^k)\| \} \right).$$

Notando que $|\rho_k - 1| = \left| \frac{ared - pred}{pred} \right|$ e usando H2, completamos a prova. \square

Teorema 5.18 *Suponha que f seja de classe \mathcal{C}^1 , com ∇f uniformemente contínua e que sejam satisfeitas as Hipóteses H2-H5. Então*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0.$$

Demonstração. Suponha por absurdo que isto seja falso. Então existe $\varepsilon > 0$ tal que $\|\nabla f(x^k)\| \geq \varepsilon$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Pela continuidade uniforme de ∇f , existe $\delta > 0$ tal que se $\|d^k\| \leq \delta$, então

$$\sup_{t \in [0,1]} \{ \|\nabla f(x^k + td^k) - \nabla f(x^k)\| \} \leq \frac{c_1 \varepsilon}{4\gamma}. \quad (5.25)$$

Considere $\tilde{\Delta} = \min \left\{ \frac{\varepsilon}{\beta}, \frac{\delta}{\gamma}, \frac{c_1 \varepsilon}{2\beta\gamma^2} \right\}$, onde c_1 , γ e β são as constantes das Hipóteses H2, H3 e H5, respectivamente. Se $\Delta_k \leq \tilde{\Delta}$, então

$$\Delta_k \leq \frac{\varepsilon}{\beta} \leq \frac{\nabla f(x^k)}{\beta}, \quad \gamma \Delta_k \leq \delta \quad \text{e} \quad \frac{\gamma^2 \beta \Delta_k}{2c_1 \varepsilon} \leq \frac{1}{4}. \quad (5.26)$$

Portanto, pelo Lema 5.17 e pelas relações (5.25) e (5.26),

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{\gamma}{c_1 \varepsilon} \left(\frac{\beta}{2} \gamma \Delta_k + \frac{c_1 \varepsilon}{4\gamma} \right) = \frac{\gamma^2 \beta \Delta_k}{2c_1 \varepsilon} + \frac{1}{4} \leq \frac{1}{2}.$$

Assim, $\rho_k \geq \frac{1}{2} > \frac{1}{4}$ e pelo Algoritmo 5.12 temos $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$. Isto significa que o raio é reduzido somente se $\Delta_k > \tilde{\Delta}$, caso em que $\Delta_{k+1} = \frac{\Delta_k}{2} > \frac{\tilde{\Delta}}{2}$. Podemos então concluir que

$$\Delta_k \geq \min \left\{ \Delta_0, \frac{\tilde{\Delta}}{2} \right\}, \quad (5.27)$$

para todo $k \in \mathbb{N}$. Considere agora o conjunto

$$\mathcal{K} = \left\{ k \in \mathbb{N} \mid \rho_k \geq \frac{1}{4} \right\}.$$

Dado $k \in \mathcal{K}$, pelo mecanismo do Algoritmo 5.12 e pela Hipótese H2 temos

$$\begin{aligned} f(x^k) - f(x^{k+1}) &= f(x^k) - f(x^k + d^k) \\ &\geq \frac{1}{4} (m_k(0) - m_k(d^k)) \\ &\geq \frac{1}{4} c_1 \varepsilon \min \left\{ \Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta} \right\}. \end{aligned}$$

Em vista de (5.27), temos que existe uma constante $\tilde{\delta} > 0$ tal que

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq \tilde{\delta}, \quad (5.28)$$

para todo $k \in \mathcal{K}$. Por outro lado, a sequência $(f(x^k))$ é não crescente e, por H4, limitada inferiormente, donde segue que $f(x^k) - f(x^{k+1}) \rightarrow 0$. Portanto, de (5.28), podemos concluir que o conjunto \mathcal{K} é finito. Assim, $\rho_k < \frac{1}{4}$, para todo $k \in \mathbb{N}$ suficientemente grande e então Δ_k será reduzido à metade em cada iteração. Isto implica $\Delta_k \rightarrow 0$, o que contradiz (5.27). Deste modo, a afirmação no teorema é verdadeira. \square

5.3.4 O método dogleg

Como vimos, o passo de Cauchy já é suficiente para provar a convergência global do Algoritmo 5.12. No entanto, podemos acelerar o método obtendo uma solução aproximada do subproblema (5.10) que seja melhor que a de Cauchy. Uma forma é dada pelo método dogleg, que cumpre tal objetivo, obtendo inclusive o ponto de Newton, caso ele esteja dentro da bola.

Este método se aplica quando a Hessiana do modelo é definida positiva. Consiste em minimizar o modelo, sujeito a região de confiança, na poligonal que liga os pontos x^k , x_u^k e x_N^k , sendo x^k o ponto corrente, x_u^k o minimizador do modelo na direção oposta ao gradiente e x_N^k o minimizador irrestrito do modelo, isto é, o ponto de Newton. Na Figura 5.8 ilustramos duas situações. Uma em que x_u^k está na bola e outra quando x_u^k está fora. O ponto obtido pelo método dogleg é indicado por x_d^k . Também está representado o ponto x_Δ^k , minimizador global do modelo na bola.

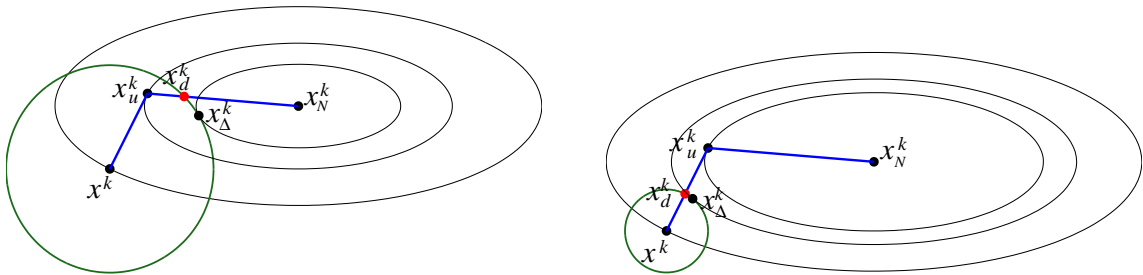


Figura 5.8: o método dogleg.

A Figura 5.9 mostra a trajetória do ponto dogleg, x_d^k , bem como da solução exata do subproblema (5.10), x_Δ^k , ambas como função do raio da região de confiança.

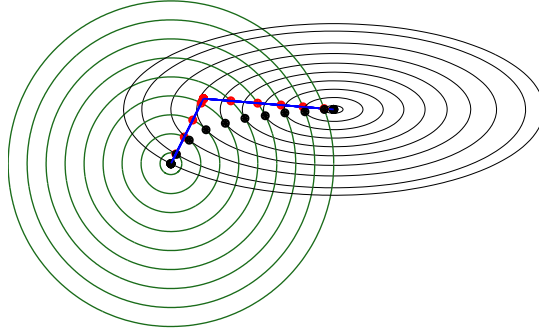


Figura 5.9: trajetórias do método dogleg e solução exata do subproblema (5.10).

Para verificar que este método está bem definido, vamos mostrar agora que o modelo decresce ao longo da poligonal e que a distância ao ponto corrente cresce quando caminhamos na poligonal, saindo de x^k indo para x_N^k . Isto significa que esta poligonal cruza a fronteira da bola no máximo uma vez, justamente no ponto dogleg. Se o raio for suficientemente grande, a poligonal estará inteiramente contida na bola, e neste caso, teremos $x_d^k = x_N^k$.

Lema 5.19 *Seja $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz definida positiva. Dado $d \in \mathbb{R}^n$, temos*

$$(d^T d)^2 \leq (d^T B d)(d^T B^{-1} d).$$

Demonstração. Como $B > 0$, existe $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que $B = LL^T$. Fazendo $u = L^T d$ e $v = L^{-1}d$, temos que $u^T v = d^T d$, $u^T u = d^T B d$ e $v^T v = d^T B^{-1} d$. Assim, o resultado segue diretamente da desigualdade de Cauchy-Schwarz. \square

Lema 5.20 *Sejam $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz definida positiva e $g \in \mathbb{R}^n$. Considere a quadrática*

$$m(d) = g^T d + \frac{1}{2} d^T B d$$

e os minimizadores de m ,

$$a = -\frac{g^T g}{g^T B g} g \quad e \quad b = -B^{-1} g,$$

ao longo de $-g$ e irrestrito, respectivamente. Então,

- (i) *O modelo é não crescente ao longo da poligonal $[0, a] \cup [a, b]$;*
- (ii) *A função $d \in [0, a] \cup [a, b] \rightarrow \|d\|_2$ é crescente.*

Demonstração. (i) Para o trecho $[0, a]$ a afirmação segue diretamente da definição de a . Vejamos então que $\xi(t) = m(a + t(b - a))$ é não crescente. Temos

$$\xi'(t) = \nabla m(a + t(b - a))^T (b - a) = [B(a + t(b - a)) + g]^T (b - a).$$

Usando o fato de que $b = -B^{-1}g$, obtemos

$$\xi'(t) = (1-t)(Ba + g)^T(b - a). \quad (5.29)$$

Substituindo as expressões de a e b , segue que

$$(Ba)^T(b - a) = -\frac{g^T g}{g^T Bg} g^T Bb + \frac{g^T g}{g^T Bg} g^T Ba = \frac{(g^T g)^2}{g^T Bg} - \frac{g^T g}{g^T Bg} g^T B \left(\frac{g^T g}{g^T Bg} g \right) = 0$$

e

$$g^T(b - a) = -g^T B^{-1}g + \frac{(g^T g)^2}{g^T Bg} = \frac{(g^T g)^2 - (g^T Bg)(g^T B^{-1}g)}{g^T Bg}.$$

Portanto, de (5.29) e do Lema 5.19, podemos concluir que $\xi'(t) \leq 0$, para $t \leq 1$. Isto implica, em particular, que m é não crescente no trecho $[a, b]$.

(ii) No trecho $[0, a]$ a afirmação é imediata. Vamos então provar que $\zeta(t) = \|a + t(b - a)\|_2^2$ é crescente. Note primeiro que

$$\zeta'(t) = 2(a^T(b - a) + t\|b - a\|_2^2).$$

Pelo Lema 5.19, temos que

$$a^T(b - a) = \left(\frac{g^T g}{g^T Bg} \right) \frac{(g^T Bg)(g^T B^{-1}g) - (g^T g)^2}{g^T Bg} \geq 0,$$

o que implica que $\zeta'(t) \geq 0$, para todo $t \geq 0$. Portanto, ζ é não decrescente. Finalmente, usando Lema 3.3, podemos concluir que ζ é estritamente crescente. \square

5.4 Exercícios do capítulo

5.1. Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, diferenciável em \bar{x} e sejam $d^1, \dots, d^n \in \mathbb{R}^n$ vetores linearmente independentes. Suponha que o mínimo de $f(\bar{x} + td^j)$ com $t \in \mathbb{R}$ ocorra em $t = 0$ para cada $j = 1, \dots, n$. Prove que $\nabla f(\bar{x}) = 0$. Isso implica que f tem um mínimo local em \bar{x} ?

5.2. Mostre que no método de Cauchy com busca exata temos $d^{k+1} \perp d^k$.

5.3. Mostre que o método de Cauchy com busca de Armijo pode não convergir se o tamanho do passo for obtido apenas satisfazendo a relação (4.5), ao invés da utilização do Algoritmo 4.13.

5.4. Desenhe as curvas de nível da função $f(x) = x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1 - 8x_2$. Encontre o ponto \bar{x} que minimiza f . Prove que o método do gradiente, aplicado a partir de $x^0 = 0$ não pode convergir para \bar{x} em um número finito de passos, se usarmos busca linear exata. Há algum ponto x^0 para o qual o método converge em um número finito de passos?

5.5. Seja f uma função quadrática com Hessiana definida positiva. Prove que se ao aplicarmos o método do gradiente a partir de um certo x^0 , com $\nabla f(x^0) \neq 0$, encontramos a solução em uma iteração, então $v = x^1 - x^0$ é um autovetor da Hessiana. Reveja o Exercício 4.5.

5.6. Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}^1$. Defina $x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f(x^k)$, onde $t_k \geq \bar{t} > 0$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Suponha que $x^k \rightarrow \bar{x}$. Prove que $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

5.7. Considere $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $h(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c$, onde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz definida positiva, $b \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$. Sejam \bar{x} o minimizador de h ,

$$f(x) = h(x + \bar{x}) - h(\bar{x}) = \frac{1}{2}x^T A x$$

e (x^k) a sequência gerada pelo método de Cauchy com busca exata aplicado em f . Defina $y^k = x^k + \bar{x}$. Mostre que o método de Cauchy com busca exata aplicado em h , a partir de y^0 , gera justamente a sequência (y^k) .

5.8. Considere um número real $a > 0$. Mostre que o método de Newton para resolver a equação $x^2 - a = 0$ é dado por

$$x^{k+1} = \frac{1}{2} \left(x^k + \frac{a}{x^k} \right).$$

5.9. Seja $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 - x_2)^2 + \frac{1}{2}(1 - x_1)^2$. Qual é o minimizador de f ? Faça uma iteração do método de Newton para minimizar f a partir de $x^0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$. É um bom passo? Antes de decidir, calcule $f(x^0)$ e $f(x^1)$.

5.10. A Figura 5.10 ilustra uma situação na qual o método de Newton (para equações) pode falhar. A função é dada por $f(x) = x^4 - x^2$. Determine quais devem ser os pontos iniciais para que isto aconteça.

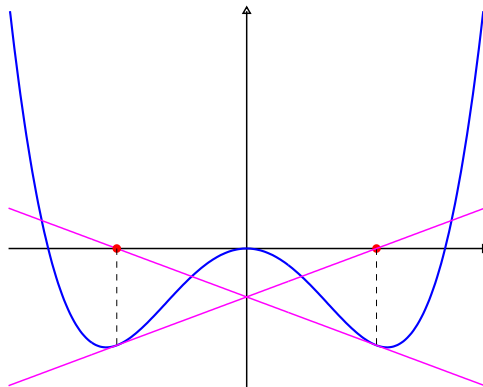


Figura 5.10: o método de Newton pode falhar.

5.5 Implementação computacional

O objetivo deste trabalho é a programação dos métodos estudados. Vamos avaliar e comparar o desempenho dos métodos. Para cada método programado apresentar as seguintes informações:

1. Contador de iterações;
2. Função objetivo;
3. Norma do gradiente;
4. Gráficos em \mathbb{R}^2 , mostrando iterações e função objetivo;
5. Gráficos em \mathbb{R}^2 , mostrando iterações e norma do gradiente;
6. Gráficos em \mathbb{R}^2 , mostrando as curvas de nível da função objetivo e a trajetória da sequência para o caso $n = 2$.

5.5.1 Funções para teste

5.1. $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1 - 8x_2$.

5.2. $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = (x_1 - x_2^2)(x_1 - \frac{1}{2}x_2^2)$. Note que $\bar{x} = 0$ é o único ponto estacionário de f e não é minimizador.

5.3. $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = 2x_1^3 - 3x_1^2 - 6x_1x_2(x_1 - x_2 - 1)$.

5.4. $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \frac{1}{2} \sin x_1 \sin x_2 + \frac{1}{2} e^{x_1^2 + x_2^2}$.

5.5. $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$.

Capítulo 6

Otimização com Restrições

Nosso objetivo neste capítulo é discutir as condições de otimalidade para o problema geral de otimização que consiste em

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeito a} && g(x) \leq 0 \\ &&& h(x) = 0, \end{aligned} \tag{6.1}$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ são funções continuamente diferenciáveis. O conjunto

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) \leq 0, h(x) = 0\} \tag{6.2}$$

é chamado conjunto viável.

A abordagem que apresentamos para a obtenção das condições de Karush-Kuhn-Tucker é baseada na teoria de cones, cujo apelo geométrico é a principal característica. Algumas referências para este assunto são [1, 2, 4, 6, 8].

Exemplo 6.1 *Verifique que o ponto $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ é a solução global do problema*

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \\ &\text{sujeito a} && g_1(x) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \\ &&& g_2(x) = x_1^2 - x_2 \leq 0. \end{aligned} \tag{6.3}$$

Resolução. Dado $x \in \Omega$, temos $x_1^2 \leq x_2 \leq 2 - x_1$, o que implica que $x_1^2 + x_1 - 2 \leq 0$, ou seja, $-2 \leq x_1 \leq 1$. Portanto,

$$f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \geq (x_1 - 2)^2 \geq 1 = f(\bar{x}),$$

Na Figura 6.1 ilustramos este problema. Note que $-\nabla f(\bar{x})$ é uma combinação positiva de $\nabla g_1(\bar{x})$ e $\nabla g_2(\bar{x})$. Isto informalmente significa que para diminuir o valor de f temos que sair do conjunto viável. O que faremos neste capítulo é formalizar esta afirmação. \square

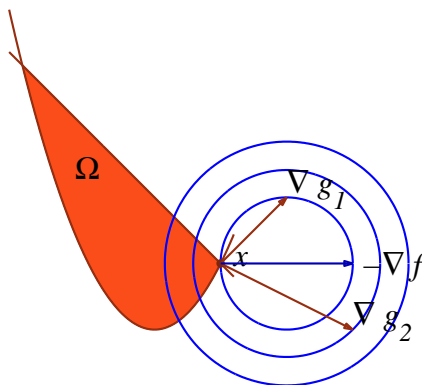


Figura 6.1: ilustração do Exemplo 6.1.

6.1 Cones

Vamos discutir nesta seção alguns aspectos gerais da teoria de cones que serão fundamentais para estabelecer as condições de KKT. Dentre outras coisas destacamos o clássico Lema de Farkas, que será tratado em uma versão geométrica.

Definição 6.2 Um subconjunto não vazio $C \subset \mathbb{R}^n$ é um cone quando, para todo $t \geq 0$ e $d \in C$ tem-se $td \in C$.

Informalmente, um cone é um conjunto de direções. Note que o vetor nulo pertence a qualquer cone. Além disso, um cone é um conjunto ilimitado. Na Figura 6.2 temos dois exemplos de cones, um convexo e outro não.

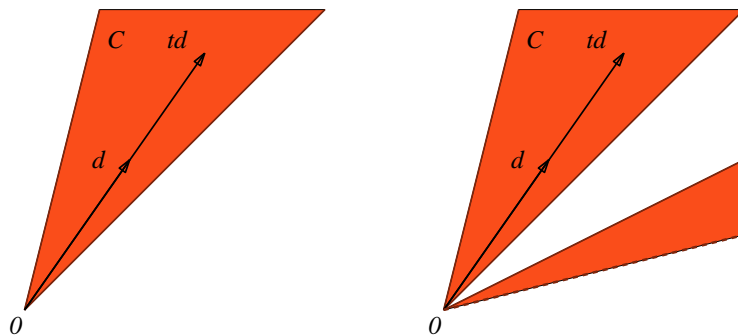


Figura 6.2: exemplos de cone.

Exercícios 6.3

1. Sejam $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $v_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $v_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Mostre que

$$S = \{x_1v_1 + x_2v_2 + x_3v_3 \mid x_j \geq 0, j = 1, 2, 3\}$$

é um cone e faça um esboço de S .

2. Sejam $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ e $C = \{By \mid y \in \mathbb{R}^m, y \geq 0\}$. Mostre que C é um cone convexo.

Um exemplo de cone que será útil mais adiante é o de cone polar, que em \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 pode ser caracterizado pelos vetores que formam um ângulo maior ou igual a 90° com os elementos de um conjunto dado.

Definição 6.4 Dado um conjunto $S \subset \mathbb{R}^n$, definimos o polar de S por

$$P(S) = \{p \in \mathbb{R}^n \mid p^T x \leq 0, \forall x \in S\}.$$

A Figura 6.3 ilustra o polar de alguns conjuntos.

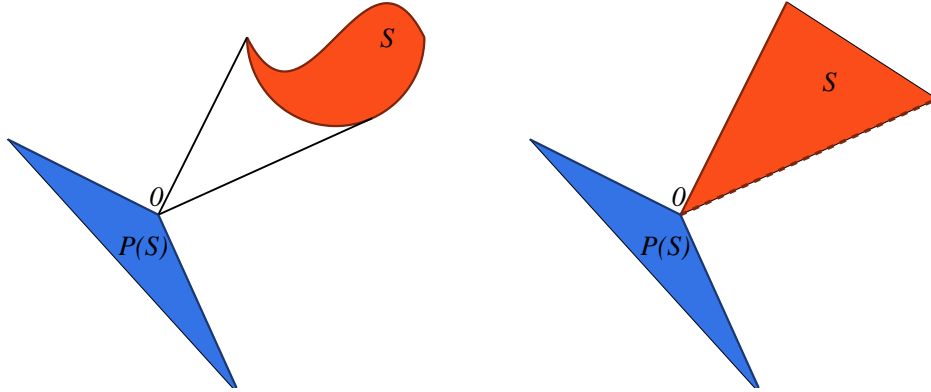


Figura 6.3: exemplos de cone polar.

Lema 6.5 Dado $S \subset \mathbb{R}^n$, $P(S)$ é cone, convexo e fechado.

Demonstração. Dados $t \geq 0$ e $d \in P(S)$ temos $(td)^T x = t(d^T x) \leq 0$, para todo $x \in S$. Assim, $td \in P(S)$, o que significa que $P(S)$ é um cone. Para verificar a convexidade, considere $u, v \in P(S)$ e $t \in [0, 1]$. Para qualquer $x \in S$, temos que

$$((1-t)u + tv)^T x = (1-t)u^T x + tv^T x \leq 0.$$

Assim $(1-t)u + tv \in P(S)$, provando que $P(S)$ é convexo. Para mostrar que $P(S)$ é fechado, considere uma sequência $(d^k) \subset P(S)$ com $d^k \rightarrow d$. Dado $x \in S$, temos $(d^k)^T x \leq 0$, logo $d^T x \leq 0$. Portanto, $d \in P(S)$, completando a demonstração. \square

Exercícios 6.6

1. Sejam A e B subconjuntos não vazios de \mathbb{R}^n . Se $A \subset B$, então $P(B) \subset P(A)$.
2. Sejam $A = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1/2 & -1 \end{pmatrix}$ e $C = \{d \in \mathbb{R}^2 \mid Ad \leq 0\}$. Mostre que C é um cone e represente geometricamente. Diga se o cone C pode ser obtido como o polar de algum conjunto S .
3. Repita o exercício anterior considerando $A = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1/2 & -1 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1/2 & -1 \end{pmatrix}$ e $S = \{d \in \mathbb{R}^2 \mid Ad \leq 0\} \cup \{d \in \mathbb{R}^2 \mid Bd \leq 0\}$.

Como a própria Figura 6.3 sugere, aplicar o polar duas vezes nem sempre fornece o conjunto original. No entanto, temos o seguinte resultado.

Lema 6.7 *Dado $S \subset \mathbb{R}^n$, temos $S \subset P(P(S))$.*

Demonstração. Considere $x \in S$ e $C = P(S)$. Dado $d \in C$, temos $x^T d \leq 0$. Logo $x \in P(C) = P(P(S))$, completando a demonstração (veja ilustração na Figura 6.4). \square

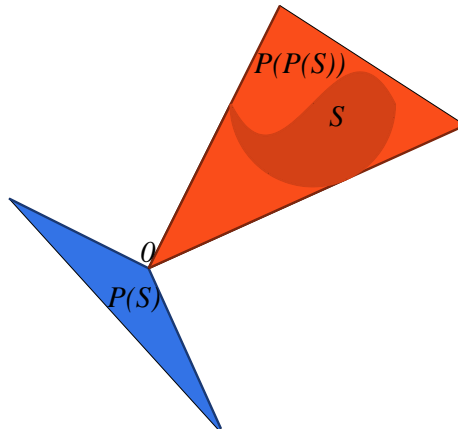


Figura 6.4: ilustração do Lema 6.7.

Basicamente, temos três motivos que impedem a igualdade entre o duplo polar e o conjunto: o fato de não ser cone, não ser convexo ou não ser fechado. Estas situações aparecem na Figura 6.5. O clássico Lema de Farkas, apresentado em seguida, garante a igualdade.

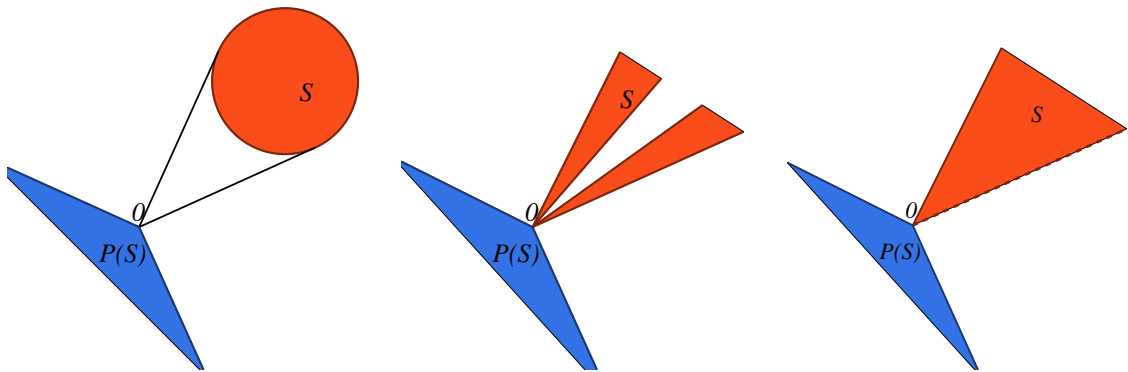


Figura 6.5: situações onde não vale $S = P(P(S))$.

Lema 6.8 (Farkas) *Considere $C \subset \mathbb{R}^n$ um cone convexo fechado não vazio. Então $P(P(C)) = C$.*

Demonstração. Em virtude do Lema 6.7 basta mostrar que $P(P(C)) \subset C$. Considere então $z \in P(P(C))$. Seja $\bar{z} = \text{proj}_C(z) \in C$. Vamos provar que $z = \bar{z}$. Pelo Teorema 3.6,

$$(z - \bar{z})^T (x - \bar{z}) \leq 0, \quad (6.4)$$

para todo $x \in C$. Como C é um cone, $x = 0$ e $x = 2\bar{z}$ são elementos de C . Assim,

$$-\bar{z}^T(z - \bar{z}) \leq 0 \quad \text{e} \quad \bar{z}^T(z - \bar{z}) \leq 0,$$

donde segue que

$$\bar{z}^T(z - \bar{z}) = 0. \quad (6.5)$$

Substituindo isto em (6.4), podemos concluir que $(z - \bar{z})^T x \leq 0$, para todo $x \in C$. Portanto, $(z - \bar{z}) \in P(C)$. Como $z \in P(P(C))$, temos que $(z - \bar{z})^T z \leq 0$. Usando (6.5), obtemos

$$\|z - \bar{z}\|^2 = (z - \bar{z})^T z - (z - \bar{z})^T \bar{z} = (z - \bar{z})^T z \leq 0,$$

o que implica que $z = \bar{z} \in C$, completando a demonstração. \square

Outra propriedade muito importante se refere ao cone gerado por um conjunto finito de vetores, dada no lema abaixo. A demonstração apresentada aqui é direta, mas existem outras formas de provar este resultado. Uma delas segue dos Exercícios 6.7 e 6.8, no final do capítulo.

Lema 6.9 *Dados os vetores $v_1, v_2, \dots, v_m \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, o conjunto*

$$C = \left\{ \sum_{i=1}^m y_i v_i \mid y_i \geq 0, \ i = 1, \dots, m \right\}$$

é um cone convexo e fechado (veja ilustração na Figura 6.6).

Demonstração. Considerando a matriz $B = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_m) \in \mathbb{R}^{n \times m}$, temos

$$C = \{By \mid y \in \mathbb{R}^m, \ y \geq 0\}.$$

Para mostrar que C é cone, tome $d = By \in C$ e $t \geq 0$. Assim, $td = B(ty) \in C$, pois $ty \geq 0$. A convexidade segue da relação $(1-t)By + tBw = B((1-t)y + tw)$. Agora a parte difícil: provar que C é fechado. Faremos por indução em m .

(i) $m = 1$. Seja $(d^k) \subset C$, tal que $d^k \rightarrow d$. Temos $d^k = y^k v_1$, com $y^k \geq 0$. Assim,

$$\|v_1\|^2 y^k = v_1^T d^k \rightarrow v_1^T d,$$

implicando em $y^k \rightarrow y$, onde $y = \frac{v_1^T d}{\|v_1\|^2} \geq 0$, pois $y^k \geq 0$. Portanto, $d^k = y^k v_1 \rightarrow y v_1$ e assim, $d = y v_1 \in C$.

(ii) Suponha que o lema seja válido para $m - 1$. Vamos provar que vale para m . Considere primeiro o caso em que $\text{posto}(B) = m$. Seja $(d^k) \subset C$, tal que $d^k \rightarrow d$. Então, $d^k = B y^k$, com $y^k \geq 0$. Deste modo,

$$B^T B y^k = B^T d^k \rightarrow B^T d,$$

donde segue que $y^k \rightarrow y$, com $y = (B^T B)^{-1} B^T d$. Como $y^k \geq 0$, temos $y \geq 0$. Portanto, $d^k = B y^k \rightarrow B y$ e assim, $d = B y \in C$.

Suponha agora que $\text{posto}(B) < m$. Assim, as colunas de B são linearmente dependentes. Isto implica que existe $\gamma \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$B\gamma = 0 \quad (6.6)$$

e $\gamma_i > 0$ para algum $i = 1, \dots, m$. Considere, para cada $j = 1, \dots, m$, a matriz

$$B_j = (v_1 \cdots v_{j-1} \ v_{j+1} \cdots v_m) \in \mathbb{R}^{n \times (m-1)},$$

obtida suprimindo a j -ésima coluna de B . Usando a hipótese de indução, temos que o conjunto

$$C_j = \{B_j z \mid z \in \mathbb{R}^{m-1}, z \geq 0\}$$

é fechado para todo $j = 1, \dots, m$. Portanto, a união $\bigcup_{j=1}^m C_j$ é um conjunto fechado. Para concluir a demonstração, vamos mostrar que $C = \bigcup_{j=1}^m C_j$. Para isso, tome inicialmente $d \in C$. Então $d = B y$, para algum $y \geq 0$. Considere

$$\bar{t} = \max \left\{ -\frac{y_i}{\gamma_i} \mid \gamma_i > 0 \right\},$$

onde γ é dado por (6.6). Assim, para todo i tal que $\gamma_i > 0$, temos $y_i + \bar{t}\gamma_i \geq 0$. Além disso, como $\bar{t} \leq 0$, também vale $y_i + \bar{t}\gamma_i \geq 0$ para cada i tal que $\gamma_i \leq 0$. Seja j tal que $\bar{t} = -\frac{y_j}{\gamma_j}$. Definindo $\bar{y} = y + \bar{t}\gamma$, temos que $\bar{y} \geq 0$ e $\bar{y}_j = 0$. Portanto, usando (6.6), obtemos

$$d = B y = B(y + \bar{t}\gamma) = B\bar{y} \in C_j,$$

Como a inclusão $\bigcup_{j=1}^m C_j \subset C$ é imediata, completamos a prova. □

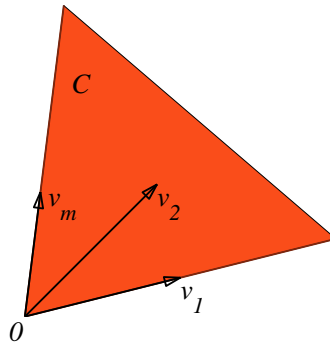


Figura 6.6: ilustração do Lema 6.9.

O Lema 6.9 pode ser usado para estabelecer uma relação entre a versão geométrica do Lema de Farkas (Lema 6.8) e sua forma algébrica, muito encontrada na literatura.

Lema 6.10 (Farkas algébrico) *Considere $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $c \in \mathbb{R}^n$. Então exatamente um dos dois sistemas abaixo tem solução.*

$$Ax \leq 0 \quad e \quad c^T x > 0 \quad (6.7)$$

$$A^T y = c \quad e \quad y \geq 0. \quad (6.8)$$

Demonstração. Se o sistema (6.8) tem solução, então $c = A^T y$ com $y \geq 0$. Assim, dado $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax \leq 0$, temos $c^T x = y^T Ax \leq 0$, o que implica que (6.7) não tem solução. Suponha agora que o sistema (6.8) não tem solução. Portanto,

$$c \notin C = \{A^T y \mid y \geq 0\}.$$

Pelos Lemas 6.8 e 6.9 temos $C = P(P(C))$. Logo, $c \notin P(P(C))$, o que significa que existe $x \in P(C)$ tal que $c^T x > 0$. Além disso,

$$(Ax)^T y = x^T A^T y \leq 0,$$

para todo $y \geq 0$. Em particular, tomando $y = e_j$, $j = 1, \dots, m$, obtemos

$$Ax \leq 0,$$

Assim, o sistema (6.7) tem solução. □

Mesmo sendo uma versão algébrica, o Lema 6.10 pode ser interpretado geometricamente, conforme vemos na Figura 6.7. Os vetores $v_1, v_2, \dots, v_m \in \mathbb{R}^n$ são as linhas de A . No lado esquerdo temos o caso em que o sistema (6.7) tem solução. No lado direito (6.8) tem solução.

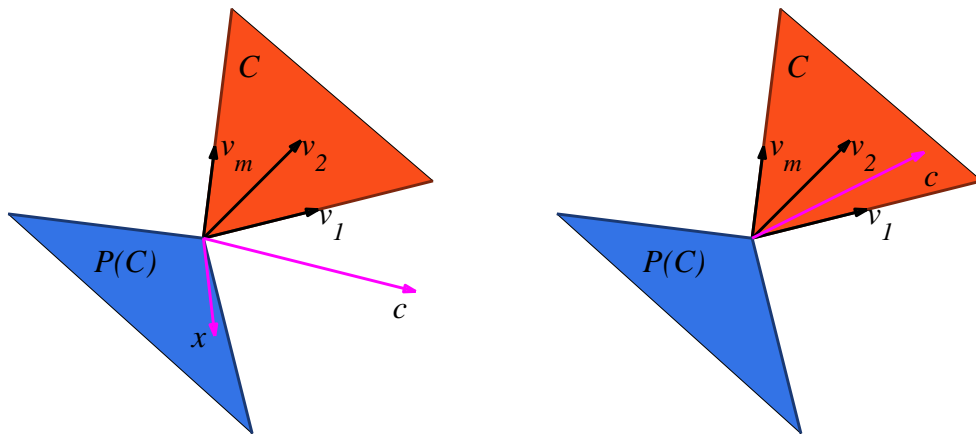


Figura 6.7: ilustração do Lema 6.10.

Note que provamos a versão algébrica do Lema de Farkas utilizando a versão geométrica. No entanto, também é possível mostrar que a versão algébrica implica na versão geométrica para um certo conjunto C . Veja o Exercício 6.6 no final do capítulo.

Temos agora as ferramentas necessárias para provar as condições necessárias de otimalidade para problemas com restrições de igualdade e desigualdade.

6.2 Condições de Karush-Kuhn-Tucker

Para estabelecer o Teorema de KKT, vamos estudar os cones relacionados com o problema geral de otimização definido em (6.1). Alguns desses cones podem ser interpretados como aproximações lineares do conjunto viável (6.2).

Definição 6.11 *Seja $\bar{x} \in \Omega$. Uma restrição de desigualdade g_i é dita ativa em \bar{x} , se $g_i(\bar{x}) = 0$. Caso $g_i(\bar{x}) < 0$, dizemos que g_i é inativa em \bar{x} .*

Vamos denotar por $A(\bar{x})$ o conjunto de índices das restrições de desigualdade ativas em um ponto viável \bar{x} , isto é,

$$A(\bar{x}) = \{i \mid g_i(\bar{x}) = 0\}.$$

6.2.1 O cone viável linearizado

A primeira forma de aproximar o conjunto viável Ω é dada na seguinte definição.

Definição 6.12 *Dado $\bar{x} \in \Omega$, definimos o cone viável linearizado de Ω em torno de \bar{x} por*

$$D(\bar{x}) = \{d \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(\bar{x})^T d \leq 0, \forall i \in A(\bar{x}) \text{ e } \nabla h_j(\bar{x})^T d = 0, \forall j = 1, \dots, m\}.$$

Note que o conjunto $D(\bar{x})$ pode ser visto como um conjunto viável, onde linearizamos as restrições de desigualdade ativas e todas as de igualdade. Isto se deve ao fato de que

$$\nabla g_i(\bar{x})^T d = g_i(\bar{x}) + \nabla g_i(\bar{x})^T d \approx g_i(\bar{x} + d)$$

para $i \in A(\bar{x})$ e

$$\nabla h_j(\bar{x})^T d = h_j(\bar{x}) + \nabla h_j(\bar{x})^T d \approx h_j(\bar{x} + d).$$

Na Figura 6.8 temos algumas das situações que surgem quando consideramos o cone $D(\bar{x})$. Na primeira, temos desigualdades e os gradientes ativos são linearmente independentes. Isto confere uma certa regularidade ao conjunto Ω , que é “bem” aproximado por $D(\bar{x})$ em uma vizinhança de \bar{x} . Na segunda, temos uma igualdade e também podemos dizer que $D(\bar{x})$ é uma boa aproximação para Ω . No entanto, a última situação mostra um caso onde o cone é uma reta, mas o conjunto viável é uma região do plano. Note que, neste caso, os gradientes ativos são linearmente dependentes.

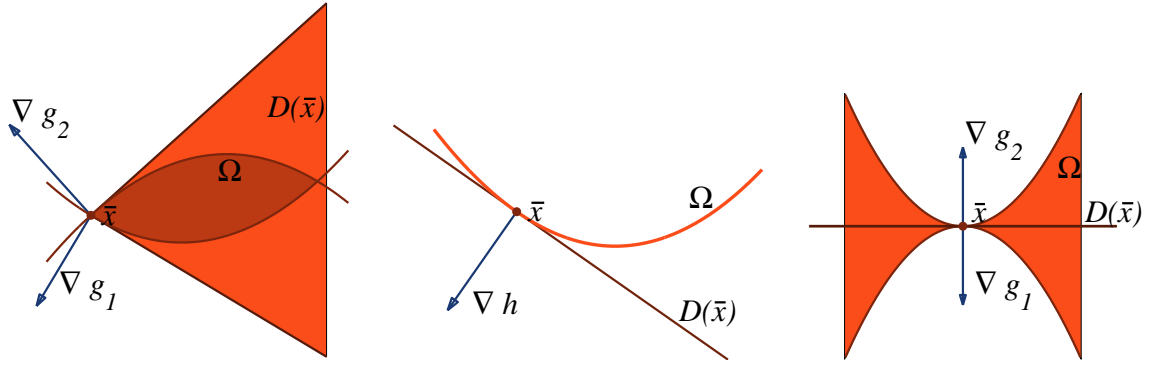


Figura 6.8: exemplos ilustrando o cone viável linearizado.

Exercícios 6.13

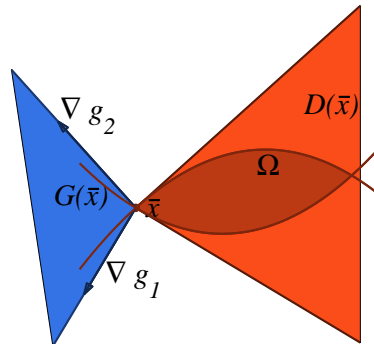
1. Mostre que $D(\bar{x})$ é um cone convexo fechado não vazio.
2. Sejam $g_1, g_2 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dadas por $g_1(x) = x_1^2 - 2x_1 - x_2$ e $g_2(x) = x_1^2 - 2x_1 + x_2$ e $\bar{x} = 0$. Represente geometricamente o conjunto viável e o cone $D(\bar{x})$.

6.2.2 O cone gerado pelos gradientes das restrições

Outro cone relacionado com o problema de otimização é cone gerado pelos gradientes das restrições. Mais precisamente, dado $\bar{x} \in \Omega$, considere o conjunto

$$G(\bar{x}) = \left\{ \sum_{i \in A(\bar{x})} \mu_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j \nabla h_j(\bar{x}) \mid \mu_i \geq 0, \forall i \in A(\bar{x}) \right\}. \quad (6.9)$$

Este conjunto tem duas propriedades muito importantes, que provaremos a seguir. Uma delas é que seu polar é justamente o cone $D(\bar{x})$. A outra propriedade diz que $G(\bar{x})$ é um cone convexo fechado. Veja a Figura 6.9.


 Figura 6.9: o cone $G(\bar{x})$.

Lema 6.14 Dado $\bar{x} \in \Omega$, temos que $D(\bar{x}) = P(G(\bar{x}))$.

Demonstração. Dados $d \in D(\bar{x})$ e $s \in G(\bar{x})$, temos

$$d^T s = \sum_{i \in A(\bar{x})} \mu_i d^T \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j d^T \nabla h_j(\bar{x}).$$

Como $d \in D(\bar{x})$, temos $d^T \nabla g_i(\bar{x}) \leq 0$ para todo $i \in A(\bar{x})$ e $d^T \nabla h_j(\bar{x}) = 0$ para todo $j = 1, \dots, m$. Assim, $d^T s \leq 0$, pois $\mu_i \geq 0$. Portanto, $d \in P(G(\bar{x}))$. Para provar a inclusão contrária, tome $d \in P(G(\bar{x}))$. Então, $d^T s \leq 0$, para todo $s \in G(\bar{x})$. Em particular, como $\nabla g_i(\bar{x}) \in G(\bar{x})$, para $i \in A(\bar{x})$, temos

$$d^T \nabla g_i(\bar{x}) \leq 0. \quad (6.10)$$

Além disso, para todo $j = 1, \dots, m$, $\nabla h_j(\bar{x})$ e $-\nabla h_j(\bar{x})$ são elementos de $G(\bar{x})$. Logo,

$$d^T \nabla h_j(\bar{x}) \leq 0 \quad \text{e} \quad d^T (-\nabla h_j(\bar{x})) \leq 0,$$

implicando em $d^T \nabla h_j(\bar{x}) = 0$. Disto e de (6.10), decorre que $d \in D(\bar{x})$, o que completa a demonstração. \square

Lema 6.15 *O conjunto $G(\bar{x})$ definido em (6.9) é um cone convexo fechado.*

Demonstração. Note que um elemento qualquer de $G(\bar{x})$ pode ser escrito como

$$\sum_{i \in A(\bar{x})} \mu_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{\lambda_j \geq 0} \lambda_j \nabla h_j(\bar{x}) + \sum_{\lambda_j < 0} (-\lambda_j) (-\nabla h_j(\bar{x}))$$

com $\mu_i \geq 0$ para todo $i \in A(\bar{x})$. Desta forma, temos

$$G(\bar{x}) = \{By \mid y \geq 0\},$$

onde B é a matriz cujas colunas são $\nabla g_i(\bar{x})$, $\nabla h_j(\bar{x})$ e $-\nabla h_j(\bar{x})$, $i \in A(\bar{x})$ e $j = 1, \dots, m$. Pelo Lema 6.9, temos o resultado desejado. \square

Tendo em vista os Lemas 6.8 e 6.15, podemos reescrever o Lema 6.14 como

$$P(D(\bar{x})) = G(\bar{x}). \quad (6.11)$$

Esta relação é a chave da demonstração das condições de KKT.

6.2.3 O cone tangente

Veremos nesta seção um outro cone que também aproxima o conjunto viável Ω , mas diferentemente do cone $D(\bar{x})$, que se baseia nas derivadas das restrições, este novo cone considera os vetores que tangenciam ou “penetram” em Ω .

Definição 6.16 Uma direção $d \in \mathbb{R}^n$ é dita tangente a $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ a partir de $\bar{x} \in \Omega$ quando é nula ou existe uma sequência de pontos viáveis $(x^k) \subset \Omega$ tal que $x^k \rightarrow \bar{x}$ e

$$\frac{x^k - \bar{x}}{\|x^k - \bar{x}\|} \rightarrow \frac{d}{\|d\|}.$$

Na Figura 6.10 ilustramos este conceito. Na esquerda o conjunto viável é uma curva definida por uma restrição de igualdade, na qual representamos uma direção tangente d e a convergência indicada na definição. Na outra ilustração o conjunto viável é uma região determinada por duas restrições de desigualdade. Nesta figura aparecem algumas direções tangentes. Note que uma direção que “penetra” no conjunto viável também satisfaz a Definição 6.16.

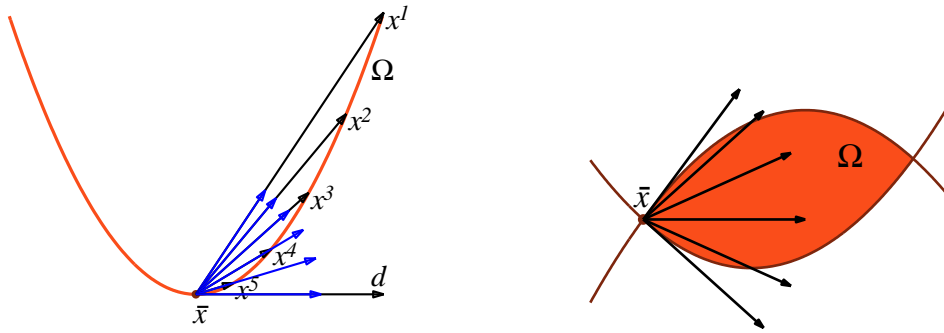


Figura 6.10: direções tangentes.

Segue diretamente da definição que se d é tangente, o mesmo vale para td , qualquer que seja $t \geq 0$. Assim, o conjunto formado pelos vetores tangentes a Ω em \bar{x} é um cone, chamado de cone tangente a Ω no ponto \bar{x} e denotado por $T(\bar{x})$.

Exemplo 6.17 Considere as funções $g_1, g_2 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dadas por $g_1(x) = x_1^2 - 2x_1 - x_2$ e $g_2(x) = x_1^2 - 2x_1 + x_2$. Determine o cone tangente $T(\bar{x})$, associado ao conjunto viável $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid g(x) \leq 0\}$ em torno do ponto $\bar{x} = 0$.

Resolução. Sejam $x^k = \begin{pmatrix} s_k \\ t_k \end{pmatrix}$ uma sequência de pontos de Ω e $d = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ tais que

$$x^k \rightarrow \bar{x} \quad \text{e} \quad \frac{x^k - \bar{x}}{\|x^k - \bar{x}\|} \rightarrow \frac{d}{\|d\|}. \quad (6.12)$$

Vamos provar que $-2d_1 \leq d_2 \leq 2d_1$. Como $x^k \in \Omega$, temos $s_k^2 - 2s_k \leq t_k \leq 2s_k - s_k^2$. Portanto,

$$\frac{s_k^2 - 2s_k}{\sqrt{s_k^2 + t_k^2}} \leq \frac{t_k}{\sqrt{s_k^2 + t_k^2}} \leq \frac{2s_k - s_k^2}{\sqrt{s_k^2 + t_k^2}}. \quad (6.13)$$

De (6.12), podemos concluir que

$$s_k \rightarrow 0 \quad , \quad \frac{s_k}{\sqrt{s_k^2 + t_k^2}} \rightarrow \frac{d_1}{\|d\|} \quad \text{e} \quad \frac{t_k}{\sqrt{s_k^2 + t_k^2}} \rightarrow \frac{d_2}{\|d\|}.$$

Assim, passando o limite na relação (6.13), obtemos $\frac{-2d_1}{\|d\|} \leq \frac{d_2}{\|d\|} \leq \frac{2d_1}{\|d\|}$, donde segue que

$$T(\bar{x}) \subset \{d \in \mathbb{R}^2 \mid -2d_1 \leq d_2 \leq 2d_1\}.$$

Para provar a inclusão contrária, tome primeiro $d = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$. Considere

$$s_k = \frac{1}{k}, \quad t_k = 2s_k - s_k^2 \quad \text{e} \quad x^k = \begin{pmatrix} s_k \\ t_k \end{pmatrix}.$$

Assim, $x^k \rightarrow \bar{x}$, $\frac{s_k}{\sqrt{s_k^2 + t_k^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 + (2 - s_k)^2}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{5}}$ e $\frac{t_k}{\sqrt{s_k^2 + t_k^2}} \rightarrow \frac{2}{\sqrt{5}}$. Portanto,

$\frac{x^k - \bar{x}}{\|x^k - \bar{x}\|} \rightarrow \frac{d}{\|d\|}$. Considere agora $d = \begin{pmatrix} 1 \\ \gamma \end{pmatrix}$, com $\gamma \in [0, 2]$. Para todo $k \in \mathbb{N}$,

suficientemente grande, temos $\gamma < 2 - \frac{1}{k}$, implicando em $y^k = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} 1 \\ \gamma \end{pmatrix} \in \Omega$. Além disso,

$$y^k \rightarrow \bar{x} \quad \text{e} \quad \frac{y^k - \bar{x}}{\|y^k - \bar{x}\|} \rightarrow \frac{d}{\|d\|}.$$

Como $T(\bar{x})$ é um cone, podemos concluir que todo vetor $d \in \mathbb{R}^2$ tal que $0 \leq d_2 \leq 2d_1$ é tangente. O caso $-2d_1 \leq d_2 \leq 0$ é análogo. Com isto, obtemos

$$T(\bar{x}) = \{d \in \mathbb{R}^2 \mid -2d_1 \leq d_2 \leq 2d_1\}.$$

Na Figura 6.11 representamos o cone $T(\bar{x})$. □

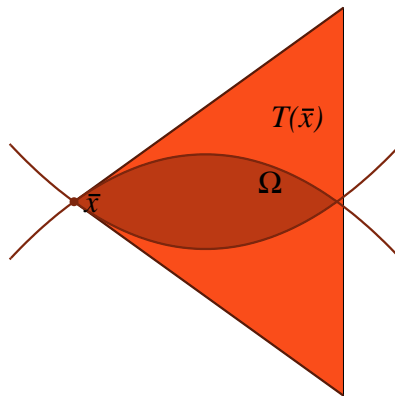


Figura 6.11: o cone tangente do Exemplo 6.17.

No Exemplo 6.17 temos a igualdade entre os cones $T(\bar{x})$ e $D(\bar{x})$, mas isto não é regra geral. Aliás, o cone tangente pode não ser convexo. No entanto, pode-se mostrar que é fechado (veja o Exercício 6.9).

Exemplo 6.18 Considere $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ e $h : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dadas por $g(x) = -x$ e $h(x) = x_1 x_2$. Determine os cones $D(\bar{x})$, $G(\bar{x})$ e $T(\bar{x})$, associados ao conjunto viável $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid g(x) \leq 0, h(x) = 0\}$ em torno do ponto $\bar{x} = 0$.

Resolução. Temos $\nabla g_1(\bar{x}) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\nabla g_2(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ e $\nabla h(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. Assim,

$$D(\bar{x}) = \{(d_1, d_2) \mid d_1 \geq 0, d_2 \geq 0\}, \quad G(\bar{x}) = \{(d_1, d_2) \mid d_1 \leq 0, d_2 \leq 0\}$$

e

$$T(\bar{x}) = \{(d_1, d_2) \mid d_1 \geq 0, d_2 \geq 0, d_1 d_2 = 0\}.$$

Na Figura 6.12 estão representados estes cones. Note que $T(\bar{x}) \neq D(\bar{x})$ e $T(\bar{x})$ não é convexo. □

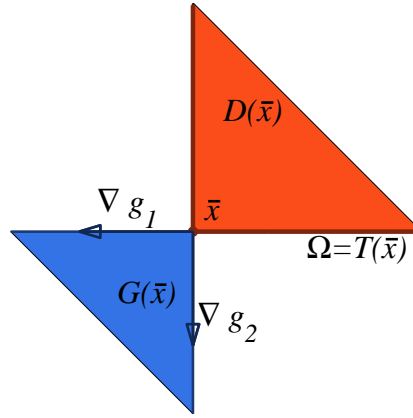


Figura 6.12: exemplo onde $T(\bar{x}) \neq D(\bar{x})$.

O próximo resultado estabelece uma relação entre os cones $T(\bar{x})$ e $D(\bar{x})$.

Lema 6.19 Dado $\bar{x} \in \Omega$, temos $T(\bar{x}) \subset D(\bar{x})$.

Demonstração. Considere $d \in T(\bar{x})$, $d \neq 0$. Então existe uma sequência $(x^k) \subset \Omega$ tal que $x^k \rightarrow \bar{x}$ e $\frac{x^k - \bar{x}}{\|x^k - \bar{x}\|} \rightarrow \frac{d}{\|d\|}$. Pela diferenciabilidade de g e h segue que

$$g(x^k) = g(\bar{x}) + \nabla g(\bar{x})^T (x^k - \bar{x}) + o(\|x^k - \bar{x}\|)$$

e

$$h(x^k) = h(\bar{x}) + \nabla h(\bar{x})^T (x^k - \bar{x}) + o(\|x^k - \bar{x}\|).$$

Como $x^k, \bar{x} \in \Omega$, temos, para $i \in A(\bar{x})$ e $j = 1, \dots, m$,

$$\nabla g_i(\bar{x})^T \frac{(x^k - \bar{x})}{\|x^k - \bar{x}\|} + \frac{o(\|x^k - \bar{x}\|)}{\|x^k - \bar{x}\|} \leq 0 \quad \text{e} \quad \nabla h_j(\bar{x})^T \frac{(x^k - \bar{x})}{\|x^k - \bar{x}\|} + \frac{o(\|x^k - \bar{x}\|)}{\|x^k - \bar{x}\|} = 0.$$

Passando o limite, obtemos $\nabla g_i(\bar{x})^T \frac{d}{\|d\|} \leq 0$ e $\nabla h_j(\bar{x})^T \frac{d}{\|d\|} = 0$. Assim, $d \in D(\bar{x})$, completando a prova. \square

6.2.4 O teorema de Karush-Kuhn-Tucker

Temos agora todas as ferramentas para provar as condições de KKT. Vamos começar com um resultado que também pode ser visto como uma condição necessária de otimalidade: em um minimizador, toda direção tangente é de subida.

Lema 6.20 *Se $\bar{x} \in \Omega$ é um minimizador local do Problema 6.1, então $\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0$, para todo $d \in T(\bar{x})$.*

Demonstração. Seja $d \in T(\bar{x})$, $d \neq 0$. Então existe uma sequência $(x^k) \subset \Omega$ tal que $x^k \rightarrow \bar{x}$ e $\frac{x^k - \bar{x}}{\|x^k - \bar{x}\|} \rightarrow \frac{d}{\|d\|}$. Por outro lado, temos

$$0 \leq f(x^k) - f(\bar{x}) = \nabla f(\bar{x})^T (x^k - \bar{x}) + o(\|x^k - \bar{x}\|),$$

para todo k suficientemente grande. Dividindo por $\|x^k - \bar{x}\|$ e passando o limite obtemos $\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0$, completando a prova. \square

Na Figura 6.13 ilustramos uma situação que satisfaz as condições do Lema 6.20 e outra onde isto não se verifica.

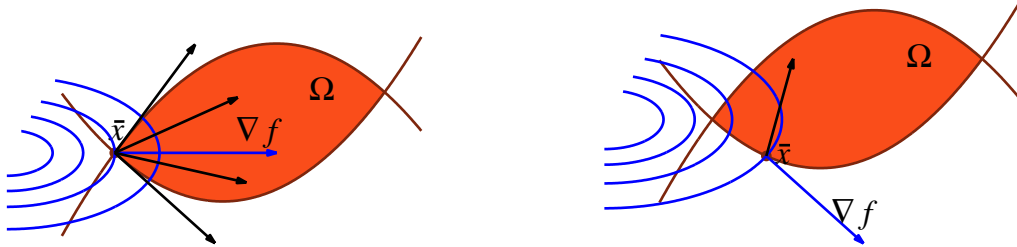


Figura 6.13: em um minimizador, direções tangentes são de subida.

O Lema 6.20 tem um interesse teórico, pois será usado para provar o Teorema de KKT. No entanto, este lema é pouco prático, no sentido de que não podemos usá-lo para calcular os possíveis minimizadores. O teorema seguinte nos dá esta possibilidade.

Teorema 6.21 (KKT) *Seja $\bar{x} \in \Omega$ um minimizador local do Problema 6.1 e suponha que $P(T(\bar{x})) = P(D(\bar{x}))$, então existem $\bar{\mu} \in \mathbb{R}^p$ e $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tais que*

$$-\nabla f(\bar{x}) = \sum_{i=1}^p \bar{\mu}_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m \bar{\lambda}_j \nabla h_j(\bar{x}),$$

$$\bar{\mu}_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, p,$$

$$\bar{\mu}_i g_i(\bar{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p.$$

Demonstração. Pelo Lema 6.20, temos $-\nabla f(\bar{x})^T d \leq 0$, para todo $d \in T(\bar{x})$. Assim, usando a hipótese e a relação (6.11), obtemos

$$-\nabla f(\bar{x}) \in P(T(\bar{x})) = P(D(\bar{x})) = G(\bar{x}).$$

Isto significa que existem $\mu_i \geq 0$, $i \in A(\bar{x})$ e $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tais que

$$-\nabla f(\bar{x}) = \sum_{i \in A(\bar{x})} \mu_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j \nabla h_j(\bar{x}).$$

Definindo $\bar{\mu}_i = \begin{cases} \mu_i, & \text{para } i \in A(\bar{x}) \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$ e $\bar{\lambda} = \lambda$, completamos a prova. \square

Exemplo 6.22 Vamos refazer o Exemplo 6.1 usando KKT. O problema é dado por

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \\ \text{sujeito a} \quad & g_1(x) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \\ & g_2(x) = x_1^2 - x_2 \leq 0. \end{aligned} \tag{6.14}$$

Resolução. Note primeiro que o conjunto viável é compacto. De fato, como

$$x_1^2 \leq x_2 \leq 2 - x_1,$$

temos $x_1^2 + x_1 - 2 \leq 0$. Portanto, $-2 \leq x_1 \leq 1$ e $0 \leq x_2 \leq 4$. O minimizador deve satisfazer

$$-2 \begin{pmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 1 \end{pmatrix} = \mu_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \mu_2 \begin{pmatrix} 2x_1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{6.15}$$

além de $\mu_i \geq 0$ e $\mu_i g_i(x) = 0$, $i = 1, 2$. Como nenhum ponto de Ω cumpre $x_1 = 2$, pelo menos um dos multiplicadores deve ser não nulo. Veremos agora que os dois são não nulos. De fato, se fosse $\mu_1 = 0$ e $\mu_2 > 0$, teríamos $x_1^2 - x_2 = 0$ (restrição ativa) e $x_2 > 1$ (relação (6.15)). Assim, $x_1 \leq -1$, o que contradiz (6.15). Por outro lado, se $\mu_1 > 0$ e $\mu_2 = 0$, então $x_1 + x_2 = 2$ (restrição ativa) e $x_1 - 2 = x_2 - 1$ (relação (6.15)). Assim, $x_1 = \frac{3}{2}$, o que também é uma contradição. Agora fica fácil resolver o sistema KKT, pois $x_1 + x_2 = 2$ e $x_1^2 = x_2$, fornecem $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $\tilde{x} = \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \end{pmatrix}$. Como \tilde{x} não satisfaz (6.15) para $\mu_i \geq 0$, a solução é \bar{x} com multiplicador $\bar{\mu} = \begin{pmatrix} 2/3 \\ 2/3 \end{pmatrix}$. Reveja a Figura 6.1, que ilustra este problema. \square

6.3 Exercícios do capítulo

6.1. Seja $S = \{d \in \mathbb{R}^2 \mid d \geq 0, d_1 d_2 = 0\}$. Mostre que S é um cone não convexo, determine o polar de S e represente geometricamente.

6.2. Para cada um dos conjuntos abaixo, diga se é um cone e represente geometricamente.

(a) $S = \{d \in \mathbb{R}^2 \mid d_1^2 - d_2 \leq 0\}$.

(b) $S = \{d \in \mathbb{R}^2 \mid d_1^2 - d_2 \geq 0\}$.

6.3. Suponha que S_1 e S_2 sejam cones do \mathbb{R}^n . Mostre que $S = S_1 \cup S_2$ é um cone e que $P(S) = P(S_1) \cap P(S_2)$.

6.4. Sejam $u = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$, $v = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $\bar{x} = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$. Represente geometricamente o cone $S = \{\mu_1 u + \mu_2 v \mid \mu_j \geq 0, j = 1, 2\}$ e a sua translação $\bar{x} + S = \{\bar{x} + d \mid d \in S\}$.

6.5. Se $S \subset \mathbb{R}^n$ e $0 \in \text{int}(S)$, então $P(S) = \{0\}$.

6.6. Sejam $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ e $C = \{By \mid y \in \mathbb{R}^m, y \geq 0\}$. Usando o Lema 6.10, mostre que $P(P(C)) = C$.

6.7.[Caratheodory] Sejam $B = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_m) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ e $C = \{By \mid y \in \mathbb{R}^m, y \geq 0\}$. Considere o conjunto $\mathcal{J} = \{J \subset \{1, \dots, m\} \mid \{v_j \mid j \in J\} \text{ é LI}\}$. Usando idéias da demonstração do Lema 6.9, mostre que $C = \bigcup_{J \in \mathcal{J}} C_J$, onde $C_J = \{B_J y_J \mid y_J \geq 0\}$.

6.8. Sejam $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ e $C = \{By \mid y \in \mathbb{R}^m, y \geq 0\}$. Usando o Exercício 6.7, mostre que C é um conjunto fechado.

6.9. Considere $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e $\bar{x} \in \Omega$. Então $T(\bar{x})$ é um conjunto fechado.

6.10. Considere $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ dada por

$$g(x) = \begin{pmatrix} -x_1^2 - x_2 \\ -x_1^2 + x_2 \end{pmatrix}.$$

Usando idéias similares às do Exemplo 6.17, determine o cone $T(\bar{x})$, associado ao conjunto viável $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid g(x) \leq 0\}$ em torno do ponto $\bar{x} = 0$. Obtenha também o cone $D(\bar{x})$.

6.11. Escreva as condições de KKT para o problema de minimizar $f(x) = x_1 x_2$ na circunferência $x_1^2 + x_2^2 = 1$. Encontre os minimizadores e represente geometricamente.

6.12. Dadas $f(x) = (x_1 - 3)^2 + 2\left(x_2 - \frac{1}{3}\right)^2$, $g_1(x) = \frac{x_1^2}{3} - x_2$ e $g_2(x) = \frac{x_1^2}{2} + x_2 - \frac{5}{6}$, considere $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid g_1(x) \leq 0, g_2(x) \leq 0\}$. Encontre, geometricamente, o minimizador de f em Ω . Escreva as condições de KKT.

6.13. Considere o problema

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -x_1 \\ \text{s. a} \quad & g_1(x) = x_2 - (1 - x_1)^3 \leq 0 \\ & g_2(x) = -x_2 \leq 0 \end{aligned} \quad .$$

Mostre que $x^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ é um minimizador, mas as condições KKT não se verificam.

6.14. Faça o mesmo para o problema

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -x_1 \\ \text{s. a} \quad & g_1(x) = x_2 + (x_1 - 1)^3 \leq 0 \\ & g_2(x) = -x_2 + (x_1 - 1)^3 \leq 0. \end{aligned}$$

6.15. Encontre o ponto da curva $x_2 = x_1(3 - x_1)$ que está mais próximo do ponto $\begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix}$.

6.16. Mostre que o problema abaixo tem um minimizador global e encontre-o usando KKT.

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 + x_2 + \cdots + x_n \\ \text{s. a} \quad & x_1 x_2 \cdots x_n = 1 \\ & x \geq 0 \end{aligned} \quad .$$

Conclua que $\sqrt[n]{x_1 x_2 \cdots x_n} \leq \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n}$.

6.17. Mostre que o problema abaixo tem 4 minimizadores globais e encontre-os usando KKT.

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \\ \text{s. a} \quad & x_1 x_2 x_3 = 1 \end{aligned} \quad .$$

6.18. Mostre que o problema abaixo pode ter 1 ou 2 minimizadores globais, dependendo do valor de $c > 0$. Faça uma representação geométrica.

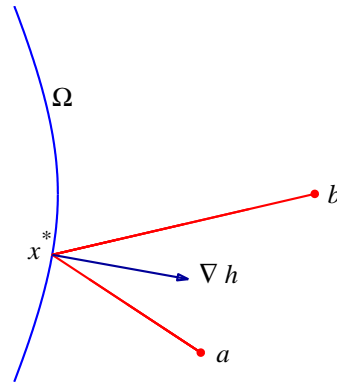
$$\begin{aligned} \min \quad & x_1^2 + (x_2 - 1)^2 \\ \text{s. a} \quad & x_2 \leq c x_1^2 \end{aligned} \quad .$$

6.19. Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz definida positiva. Considere os problemas

$$\begin{aligned} \min \quad & x^T x \\ \text{s. a} \quad & x^T A x = 1 \end{aligned} \quad \text{e} \quad \begin{aligned} \min \quad & x^T A x \\ \text{s. a} \quad & x^T x = 1 \end{aligned} \quad .$$

Mostre que minimizadores destes problemas são autovetores de A e obtenha o autovalor como função do autovetor correspondente.

6.20. Princípio de Fermat na ótica. Sejam $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid h(x) = 0\}$ e $a, b \in \mathbb{R}^2$ conforme a figura abaixo. Mostre que se x^* minimiza a soma das distâncias aos pontos a e b , dentre os pontos de Ω , então o vetor $\nabla h(x^*)$ forma ângulos iguais com $a - x^*$ e $b - x^*$. (Sugestão: mostre primeiro que se $u, v \in \mathbb{R}^2$ são vetores de mesma norma e $w = u + v$, então w forma ângulos iguais com u e v .)



Capítulo 7

Dicas e soluções dos exercícios

Apresentamos neste capítulo dicas ou soluções para alguns dos exercícios propostos no texto.

Capítulo 1

1.9. (\implies) Seja $Q = \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & C \end{pmatrix}$, onde $A \in \mathbb{R}^{k \times k}$. Se $x \in \mathbb{R}^k$ é não nulo, então

$$x^T A x = \begin{pmatrix} x^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = y^T Q y > 0.$$

Portanto, A é definida positiva, o que implica que seus autovalores são positivos e assim $\det(A) > 0$.

(\impliedby) Vamos provar por indução em n . Para $n = 1$ não há o que provar. Suponha que a propriedade é válida para $n - 1$ e considere $Q = \begin{pmatrix} A & b \\ b^T & c \end{pmatrix}$, onde $A \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$, $b \in \mathbb{R}^{n-1}$ e $c \in \mathbb{R}$. Assim, os determinantes principais de A são positivos. Pela hipótese de indução, A é definida positiva. Dado $y \in \mathbb{R}^n$, caso $y_n = 0$, temos

$$y^T Q y = \begin{pmatrix} x^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & b \\ b^T & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = x^T A x > 0.$$

Caso $y_n \neq 0$, podemos escrever $y = y_n \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix}$. Deste modo temos

$$y^T Q y = y_n^2 \begin{pmatrix} x^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & b \\ b^T & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix} = y_n^2 (x^T A x + 2b^T x + c).$$

Para concluir a demonstração basta mostrar que $f(x) = x^T A x + 2b^T x + c > 0$, o que será feito provando que $f(x) \geq f(x^*) > 0$, onde $x^* = -A^{-1}b$. Note que A é de fato inversível

pois $\det(A) > 0$. Fazendo $v = x - x^*$, temos

$$\begin{aligned} f(x) &= (x^* + v)^T A(x^* + v) + 2b^T(x^* + v) + c \\ &= f(x^*) + 2v^T(Ax^* + b) + v^T Av \\ &= f(x^*) + v^T Av \geq f(x^*). \end{aligned}$$

Além disso,

$$\begin{aligned} f(x^*) &= (x^*)^T Ax^* + 2b^T x^* + c \\ &= (x^*)^T(-b) + 2(x^*)^T b + c \\ &= b^T x^* + c = c - b^T A^{-1}b. \end{aligned}$$

Finalmente,

$$Q = \begin{pmatrix} A & b \\ b^T & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ b^T A^{-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & b \\ 0 & c - b^T A^{-1}b \end{pmatrix}.$$

Como $(c - b^T A^{-1}b) \det(A) = \det(Q) > 0$ e $\det(A) > 0$, temos $f(x^*) = c - b^T A^{-1}b > 0$.

Capítulo 2

2.3. Temos $\nabla f(x) = 2 \begin{pmatrix} 2ax_1(x_1^2 - x_2) + b(x_1 - 1) \\ a(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix}$. Logo, o único ponto estacionário de f é $\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Além disso, $\nabla^2 f(x) = 2 \begin{pmatrix} 6ax_1^2 - 2ax_2 + b & -2ax_1 \\ -2ax_1 & a \end{pmatrix}$ e portanto, $\nabla^2 f(\bar{x}) = 2 \begin{pmatrix} 4a + b & -2a \\ -2a & a \end{pmatrix} > 0$, o que significa que \bar{x} é minimizador local de f . A última parte do exercício decorre de $\det(\nabla^2 f(x)) = 8a^2(x_1^2 - x_2) + 4ab$.

2.5. Suponha por absurdo que \bar{x} não seja um minimizador global de f . Então existe $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que $f(\hat{x}) < f(\bar{x})$. Considere $A = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \geq \bar{f}\}$. O conexo $[\bar{x}, \hat{x}]$ tem um ponto de A e um ponto de A^c . Pelo Teorema da Alfândega, existe $y \in [\bar{x}, \hat{x}] \cap \partial A$. Vejamos que $f(y) = \bar{f}$. De fato, existem sequências $(y^k) \subset A$ e $(z^k) \subset A^c$ tais que $y^k \rightarrow y$ e $z^k \rightarrow y$. Portanto, $f(y^k) \rightarrow f(y)$ e $f(z^k) \rightarrow f(y)$. Como $f(y^k) \geq \bar{f}$ e $f(z^k) < \bar{f}$, temos $f(y) = \bar{f}$. Além disso, y não é minimizador local, pois $f(z^k) < \bar{f} = f(y)$.

Outra solução (sem usar o Teor. da Alfândega). Defina $g : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ por $g(t) = f(x(t))$, onde $x(t) = (1 - t)\bar{x} + t\hat{x}$. Seja $t^* = \sup\{t \in [0, 1] \mid g(t) \geq \bar{f}\}$. Temos $g(t^*) \geq \bar{f}$. Além disso, $g(1) < \bar{f}$, o que implica $t^* < 1$. Então existe uma sequência $(s_k) \in (t^*, 1]$ com $s_k \rightarrow t^*$. Portanto $g(s_k) < \bar{f}$ e, por continuidade, $g(t^*) \leq \bar{f}$. Concluimos assim que $x^* = x(t^*)$ satisfaz $f(x^*) = \bar{f}$, mas não é minimizador local, pois $f(x(s_k)) < \bar{f}$.

Capítulo 3

3.1. Provaremos que se $B(y, \varepsilon) \subset C$, $t \in (0, 1]$ e $z = (1 - t)x + ty$, então $B(z, t\varepsilon) \subset C$. Veja a Figura 7.1. Tome $w \in B(z, t\varepsilon)$. Sabemos que existe $(x^k) \subset C$ tal que $x^k \rightarrow x$. Definindo $q^k = \frac{1}{t}w - \frac{1-t}{t}x^k$, temos $w = (1 - t)x^k + tq^k$ e $q^k \rightarrow \frac{1}{t}w - \frac{1-t}{t}x$. Além disso, $\|\frac{1}{t}w - \frac{1-t}{t}x - y\| = \frac{1}{t}\|w - (1-t)x - ty\| < \varepsilon$. Portanto, existe $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que $\|q^{k_0} - y\| < \varepsilon$, o que implica que $q^{k_0} \in C$. Consequentemente, $w = (1 - t)x^{k_0} + tq^{k_0} \in C$.

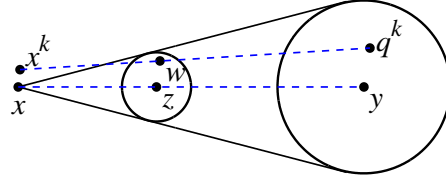


Figura 7.1: ilustração do Exercício 3.1.

Capítulo 4

4.2. Temos $\nabla f(\bar{x})^T d = d_1$. Caso $d_1 < 0$, podemos aplicar o Teorema 4.2 para concluir o que se pede. Para $d_1 = 0$ temos $f(\bar{x} + td) = f\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ td_2 \end{smallmatrix}\right) = f(\bar{x}) + \frac{(td_2)^2}{2}$. Portanto, a função cresce ao longo de d .

4.3. (a) Note que $f(x + v) - f(x) = \frac{1}{2}v^T Av + \nabla f(x)^T v$. Assim, como $\nabla f(x)^T d = 0$, temos

$$f(x + td) - f(x) = \frac{t^2}{2}d^T Ad \geq 0,$$

para todo $t \in \mathbb{R}$. Portanto, a função cresce ao longo de d .

(b) Considere $\varphi(t) = f(x + td)$. Então,

$$\varphi'(t) = \nabla f(x + td)^T d = (A(x + td) + b)^T d = \nabla f(x)^T d + t d^T Ad.$$

Igualando a zero, temos o resultado desejado.

4.4. Temos $f(x + td) - f(x) = \frac{t^2}{2}d^T Ad + t\nabla f(x)^T d$. Assim, a condição de Armijo pode ser reescrita como

$$\frac{(\bar{t})^2}{2}d^T Ad + \bar{t}\nabla f(x)^T d \leq \eta \bar{t}\nabla f(x)^T d.$$

Mas $\bar{t} = -\frac{\nabla f(x)^T d}{d^T Ad}$, o que implica $(\bar{t})^2 d^T Ad = -\bar{t}\nabla f(x)^T d$. Portanto,

$$\frac{1}{2}\bar{t}\nabla f(x)^T d \leq \eta \bar{t}\nabla f(x)^T d.$$

Como $\bar{t}\nabla f(x)^T d < 0$, temos que $\eta \leq \frac{1}{2}$.

Capítulo 5

5.3. Considere $f(x) = x^2$ e $d = -f'(x) = -2x$. A condição de Armijo com $\alpha = 1/2$ é dada por

$$(x + \lambda d)^2 < x^2 + \frac{1}{2}\lambda(2x)(-2x).$$

Equivalentemente, $2\lambda xd + \lambda^2 d^2 < -2\lambda x^2$, ou ainda $4\lambda^2 x^2 < 2\lambda x^2$, o que significa $\lambda < 1/2$.

Definindo $x^0 = 1$ e escolhendo $\lambda_k = \frac{1}{2^{k+2}}$, temos

$$x^{k+1} = x^k + \frac{1}{2^{k+2}}(-2x^k) = x^k \left(1 - \frac{1}{2^{k+1}}\right).$$

Note que $x^k = \left(1 - \frac{1}{2}\right) \left(1 - \frac{1}{2^2}\right) \cdots \left(1 - \frac{1}{2^k}\right)$ e (x^k) é uma sequência decrescente de números positivos. Vamos provar que $\bar{x} = \lim_{k \rightarrow \infty} x^k > 0$, o que significa que \bar{x} não é estacionário.

Primeiramente note que por ser $g(x) = -\ln(x)$ uma função convexa, tomando $x \in [1/2, 1]$, temos $x = (1-t)1/2 + t$, com $t \in [0, 1]$, $1-t = 2(1-x)$ e

$$g(x) < (1-t)g(1/2) + tg(1) = 2(1-x)\ln 2 = (1-x)\ln 4.$$

Assim,

$$g(x^k) = \sum_{j=1}^k g\left(1 - \frac{1}{2^j}\right) < \sum_{j=1}^k \left(\frac{1}{2^j}\right) \ln 4 < \ln 4 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{2^j} = \ln 4$$

e, consequentemente, $x^k = \frac{1}{\exp(g(x^k))} > \frac{1}{4}$. Deste modo, $\bar{x} = \lim_{k \rightarrow \infty} x^k \geq \frac{1}{4}$, completando a prova.

5.7. Temos $\nabla f(x) = \nabla h(x + \bar{x})$ e $\nabla^2 f = \nabla^2 h = A$. Além disso,

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k)}{\nabla f(x^k)^T A \nabla f(x^k)} \nabla f(x^k).$$

Somando \bar{x} e notando que $\nabla f(x^k) = \nabla h(x^k + \bar{x}) = \nabla h(y^k)$, obtemos

$$y^{k+1} = y^k - \frac{\nabla h(y^k)^T \nabla h(y^k)}{\nabla h(y^k)^T A \nabla h(y^k)} \nabla h(y^k).$$

Capítulo 6

6.5. Suponha por absurdo que existe $u \in P(S)$, $u \neq 0$. Como $0 \in \text{int}(S)$, existe $\delta > 0$ tal que $v = \delta u \in S$. Como $u \in P(S)$, v também pertence, pois $P(S)$ é um cone. Por outro lado, $v \in S$, donde segue que $v^T v \leq 0$ o que é uma contradição.

6.6. Pelo Lema 6.7, basta mostrar que $P(P(C)) \subset C$. Para isso, considere $c \in P(P(C))$, $A = B^T$ e $x \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$Ax \leq 0. \quad (7.1)$$

Portanto, $x^T(A^T y) = (Ax)^T y \leq 0$, para todo $y \geq 0$, donde segue que $x \in P(C)$. Como $c \in P(P(C))$, obtemos

$$c^T x \leq 0,$$

que junto com (7.1) significa que o primeiro sistema no Lema 6.10 não tem solução. Então o segundo sistema do lema é possível, ou seja, $c \in C$.

6.7. Dado $d \in C$, temos $d = By$, para algum $y \geq 0$. Caso $\text{posto}(B) = m$, temos $d \in \bigcup_{J \in \mathcal{J}} C_J$, pois $J = \{1, \dots, m\} \in \mathcal{J}$. Caso contrário, existe $\gamma \in \mathbb{R}^m \setminus \{0\}$ tal que $B\gamma = 0$. Assim, $d = By = B(y + t\gamma)$, para todo $t \in \mathbb{R}$. Escolhendo \bar{t} tal que $\bar{y} = y + \bar{t}\gamma \geq 0$ e $\bar{y}_j = 0$ para algum j (veja os detalhes na demonstração do Lema 6.9), obtemos $d = B\bar{y} = B_J \bar{y}_J$, onde $J = \{1, \dots, m\} \setminus \{j\}$. Repetindo este argumento até que $J \in \mathcal{J}$, concluímos o exercício.

6.8. Considere primeiro o caso em que $\text{posto}(B) = m$. Seja $(d^k) \subset C$, tal que $d^k \rightarrow d \neq 0$. Então, $d^k = By^k$, com $y^k \geq 0$. Sem perda de generalidade, podemos supor que $\frac{y^k}{\|y^k\|} \rightarrow u$, com $\|u\| = 1$. Deste modo,

$$\frac{1}{\|y^k\|} d^k = B \left(\frac{y^k}{\|y^k\|} \right) \rightarrow Bu \neq 0.$$

Como (d^k) é convergente, temos que (y^k) é limitada e, novamente s.p.g., vamos supor que $y^k \rightarrow y$. Assim, $d^k = By^k \rightarrow By$, com $y \geq 0$. Portanto, $d = By \in C$. O caso em que $\text{posto}(B) < m$ decorre imediatamente do que fizemos acima e do Exercício 6.7, tendo em vista que a união finita de fechados é um conjunto fechado.

6.9. Considere $(d^k) \subset T(\bar{x})$, com $d^k \rightarrow d$. Vamos mostrar que $d \in T(\bar{x})$. Isto é imediato se $d = 0$. Suponha então que $d \neq 0$ e que (s.p.g.) $d^k \neq 0$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Fixado $k \in \mathbb{N}$, como $d^k \in T(\bar{x})$, existe sequência $(x^{k,j})_{j \in \mathbb{N}} \subset \Omega$ Tal que

$$x^{k,j} \xrightarrow{j} \bar{x} \quad \text{e} \quad q^{k,j} = \frac{x^{k,j} - \bar{x}}{\|x^{k,j} - \bar{x}\|} \xrightarrow{j} \frac{d^k}{\|d^k\|}.$$

Assim, existe $j_k \in \mathbb{N}$ tal que

$$\|x^k - \bar{x}\| < \frac{1}{k} \quad \text{e} \quad \left\| q^k - \frac{d^k}{\|d^k\|} \right\| < \frac{1}{k},$$

onde $x^k = x^{k,j_k}$ e $q^k = q^{k,j_k}$. Passando o limite em k , obtemos $x^k \rightarrow \bar{x}$ e

$$\left\| q^k - \frac{d}{\|d\|} \right\| \leq \left\| q^k - \frac{d^k}{\|d^k\|} \right\| + \left\| \frac{d^k}{\|d^k\|} - \frac{d}{\|d\|} \right\| \rightarrow 0.$$

Portanto, $\frac{x^k - \bar{x}}{\|x^k - \bar{x}\|} = q^k \rightarrow \frac{d}{\|d\|}$, implicando em $d \in T(\bar{x})$.

6.17. Seja \bar{x} um minimizador global do problema

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \\ \text{s. a} \quad & x_1 x_2 x_3 = 1 \\ & x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 3 \end{aligned} .$$

A existência de \bar{x} é garantida pois o conjunto viável deste problema é compacto. Como

$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ cumpre as restrições acima, temos que $f(\bar{x}) \leq f(\tilde{x}) = 3$. Afirmamos que \bar{x}

é solução global do problema original. De fato, seja $x \in \mathbb{R}^3$ tal que $x_1 x_2 x_3 = 1$. Caso $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 3$, temos $f(\bar{x}) \leq f(x)$. Por outro lado, se $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 > 3$, então $f(\bar{x}) \leq 3 < x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = f(x)$.

Referências Bibliográficas

- [1] M. S. Bazaraa, H. D. Sherali, and C. M. Shetty. *Nonlinear Programming Theory and Algorithms*. John Wiley, New York, 2nd edition, 1993.
- [2] D. P. Bertsekas, A. Nedić, and A. E. Ozdaglar. *Convex Analysis and Optimization*. Athena Scientific, Belmont, USA, 2003.
- [3] A. R. Conn, N. I. M. Gould, and Ph. L. Toint. *Trust-Region Methods*. MPS-SIAM Series on Optimization, SIAM, Philadelphia, 2000.
- [4] R. G. Eustáquio. Condições de otimalidade e de qualificação para problemas de programação não linear. Master's thesis, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 2007.
- [5] A. Friedlander. *Elementos de Programação Não-Linear*. Unicamp.
- [6] J-B. Hiriart-Urruty and C. Lemarechal. *Convex Analysis and Minimization Algorithms I*. Springer-Verlag, New York, 1993.
- [7] A. Howard and C. Rorres. *Álgebra Linear com Aplicações*. Bookman, Porto Alegre, 8nd edition, 2001.
- [8] A. Izmailov and M. Solodov. *Otimização: Condições de Otimalidade, Elementos de Análise Convexa e Dualidade*, volume 1. IMPA, Rio de Janeiro, 2005.
- [9] A. Izmailov and M. Solodov. *Otimização: Métodos Computacionais*, volume 2. IMPA, Rio de Janeiro, 2007.
- [10] F. John. Extremum Problems with Inequalities as Subsidiary Conditions. In O. E. Neugebauer K. O. Friedrichs and J. J. Stoker, editors, *Studies and Essays: Courant Anniversary Volume*, pages 187–204. Wiley-Interscience, New York, 1948.
- [11] E. W. Karas, A. M. Mota, and A. A. Ribeiro. On the convergence rate of the cauchy algorithm in the l_2 norm. Technical report, Federal University of Paraná, Brazil, 2005.
- [12] H. W. Kuhn and A. W. Tucker. Nonlinear programming. In J. Neyman, editor, *Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, pages 481–492. University of California Press, Berkeley, CA, 1951.

- [13] Harold W. Kuhn. Nonlinear programming: a historical view. In R. W. Cottle and C. E. Lemke, editors, *Nonlinear Programming*, volume IX, pages 1–26. SIAM-AMS Proceedings, American Mathematical Society, Providence, RI, New York, 1976.
- [14] Steven J. Leon. *Álgebra Linear com Aplicações*. Rio de Janeiro, 1999.
- [15] E. L. Lima. *Curso de Análise*, volume 1. IMPA, Rio de Janeiro, Brasil, 1981.
- [16] E. L. Lima. *Curso de Análise*, volume 2. IMPA, Rio de Janeiro, Brasil, 1981.
- [17] D. G. Luenberger. *Linear and Nonlinear Programming*. Addison - Wesley Publishing Company, New York, 1986.
- [18] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, 1999.
- [19] A. L. Peressini, F. E. Sullivan, and Jr J. J. Uhl. *The Mathematics of Nonlinear Programming*. Springer-Verlag, New York, 1st edition, 1988.
- [20] E. Polak. *Computational Methods in Optimization: A Unified Approach*. Academic Press, New York, 1971.