Aula 10 - Equações não lineares e otimização

Pedro Alencar - 12.11.2025

Slide 1: Título + objetivos da aula.

Slide 2: Exemplos hidrológicos de equações não lineares.

Slide 3: Definição matemática + métodos iterativos.

Slide 4: Método de Newton-Raphson (passo a passo).

Slide 5: Otimização – conceitos chave (função objetivo, restrições).

Slide 6: Métodos de otimização (determinísticos vs estocásticos).

Slide 7: Aplicações em hidrologia (infiltração, calibração, reservatórios).

Slide 8: Preparação para prática em R (pacotes `optim`, `uniroot`, `nleqslv`).

Foco da aula de hoje

Compreender o papel das equações não lineares e da otimização em problemas de hidrologia.

Aplicar métodos numéricos clássicos (bisseção, Newton-Raphson) para resolver equações não lineares.

Explicar os conceitos fundamentais de otimização (função objetivo, restrições, mínimo local vs global).

Relacionar problemas teóricos de otimização com aplicações práticas em hidrologia (ex.: infiltração, reservatórios, calibração).

I**mplementar** soluções em **R**

1. Equações não lineares na hidrologia

- Muitos processos hidrológicos resultam em **equações não lineares** que não têm solução direta
  - Infiltração do solo (Green-Ampt) $F(t) = K_s\, t + \psi\, \Delta\theta\, \ln\left(1 + \frac{F(t)}{\psi\, \Delta\theta}\right)$
  - Escoamento superficial (Manning) $Q = \frac{1}{n} A R^{2/3} S^{1/2}$
  - Recessão de hidrogramas $Q = Q_0 e^{-f_c t}$
  - …

1. Equações não lineares na hidrologia

- Outros tantos problemas em hidrologia envolvem **otimização** e são essenciais para estimar parâmetros e calibrar modelos.
  - Ajuste de curva-chave $\min_{a,b} \sum_{i=1}^{N} \left(Q_i - a(h_i - h_0)^b\right)^2$
  - Operação ótima de reservatórios $\min_{Q(t)} \sum_{t=1}^{T} \left[c_1(D(t) - V(t))^2 + c_2(Q(t) - Q_{\text{target}})^2\right]$
  - Estimativa de parâmetros de infiltração (Green-Ampt) $\min_{K_s,\psi} \sum_{i=1}^{N} \left(F_{\text{obs}}(t_i) - F_{\text{GA}}(t_i; K_s, \psi)\right)^2$
  - …

Equações não-lineares

- Definição 1: Uma equação é dita não-linear quando tem forma $f(x) = 0$ e seus termos se relacionam a partir de funções não-lineares (e.g. potencia, exponenciais, funções trigonométricas, etc.)

Ex:

- $x^2 - 2 = 0$
- $e^{-x} - x = 0$
- $sin(x) - x/2 = 0$

Equações não-lineares

- Definição 1: Uma equação é dita não-linear quando tem forma $f(x) = 0$ e seus termos se relacionam a partir de funções não-lineares (e.g. potencia, exponenciais, funções trigonométricas, etc.)

Ex:

- $x^2 - 2 = 0$
- $e^{-x} - x = 0$
- $sin(x) - x/2 = 0$

- **Plotando em R**

Resolução de equações não lineares
Método de Newton-Raphson

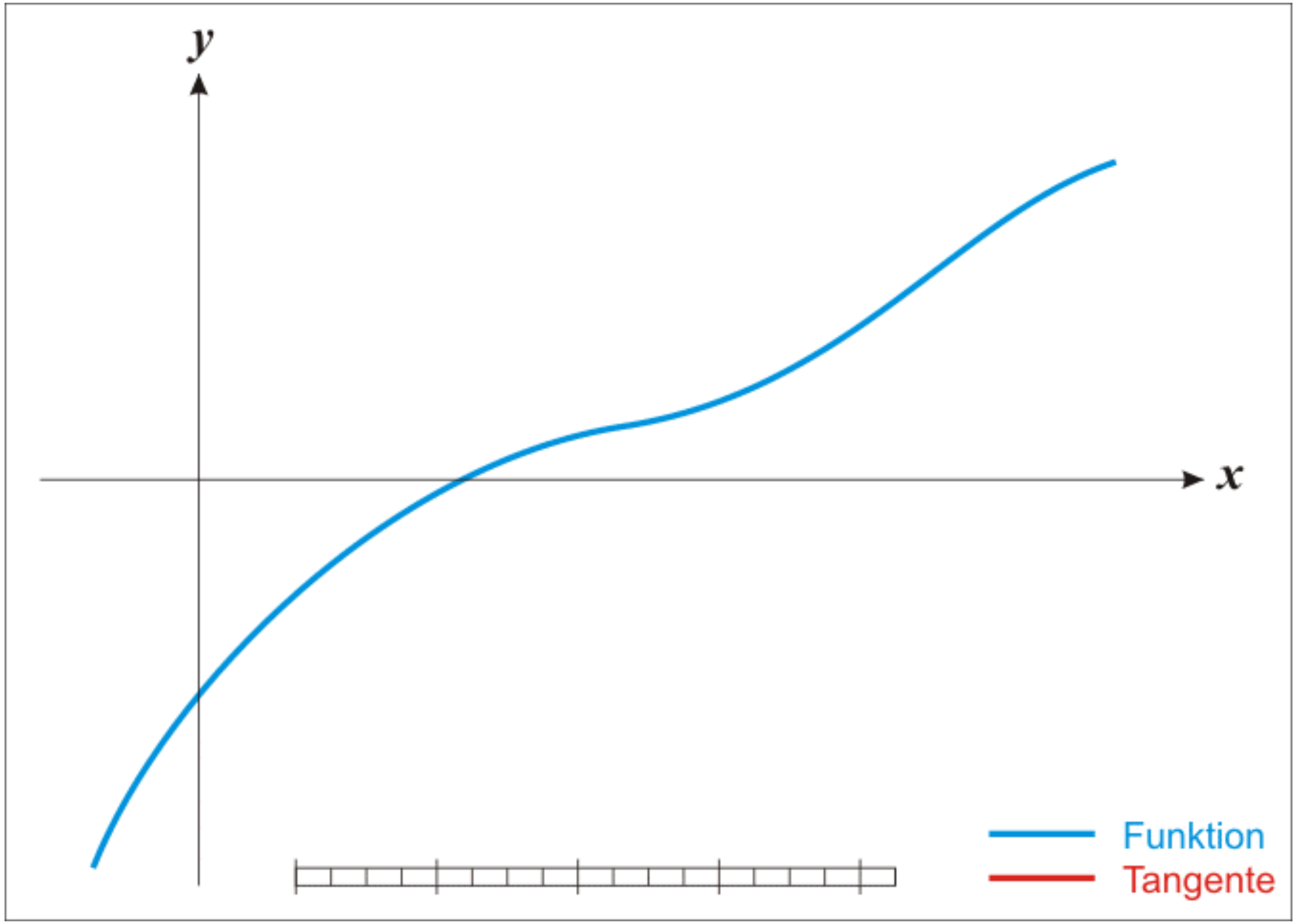
- É um método **iterativo** para encontrar uma **raiz** de uma função não linear $f(x) = 0$. A ideia central é linearizar localmente a função $f(x)$ por uma expansão de Taylor de primeira ordem e usar o ponto onde essa reta tangente cruza o eixo x como próxima aproximação.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

- Cada iteração melhora a aproximação da raiz, desde que:
  - $f(x)$ seja diferenciável
  - $f'(x) \neq 0$ na proximidade da raiz
  - o ponto inicial x_0 esteja suficientemente próximo da solução

Resolução de equações não lineares

Método de Newton-Raphson



Link

Resolução de equações não lineares

Método de Newton-Raphson

- Implementando em R…

Resolução de equações não lineares

Método de Newton-Raphson

- Exercício 1: Encontrar F (infiltração acumulada) para t = 2h na equação de Green–Ampt

$$F(t) = K_s\, t + \psi\, \Delta\theta\, \ln\left(1 + \frac{F(t)}{\psi\, \Delta\theta}\right),$$

Com $K_s = 5$ cm/h e $\psi\Delta\theta = 2$ cm

Note que:

- Não é possível resolver analiticamente

Otimização

Otimização é o processo de encontrar o valor de uma variável (ou conjunto de variáveis) que minimiza ou maximiza uma função objetivo, respeitando possíveis restrições.

Componentes principais:

- **Função objetivo:** expressão matemática que define o desempenho ou o erro a ser minimizado ou maximizado.
  Exemplo: minimizar o erro entre vazões observadas e simuladas.
  $f(x) = \Sigma\ (Qobs - Qsim(x))^2$

- **Variáveis de decisão:** parâmetros ou valores ajustáveis para otimizar o desempenho do modelo.
  Exemplo: parâmetros de infiltração ou de escoamento superficial.

- **Restrições:** limites físicos ou matemáticos impostos às variáveis.
  Exemplo: $0 < Ks < 100$ mm/h

- **Solução ótima:** o conjunto de variáveis que resulta no menor (ou maior) valor possível da função objetivo dentro das restrições.

Otimização

Classificação geral dos métodos

- **Determinísticos**
  - Baseiam-se em gradientes (derivadas) e seguem uma trajetória previsível.
  - Exemplo: método de Newton, gradiente descendente, método de Levenberg–Marquardt.
  - Vantagens: rápidos e eficientes quando a função é suave.
  - Desvantagens: podem ficar presos em mínimos locais.
- **Estocásticos**
  - Usam aleatoriedade e busca global para evitar mínimos locais.
  - Exemplo: algoritmo genético, simulated annealing, particle swarm optimization.
  - Vantagens: exploram melhor o espaço de soluções.
  - Desvantagens: mais lentos e exigem maior número de avaliações da função.
- **Aplicações em hidrologia**
  - Calibração de modelos de infiltração.
  - Estimação de parâmetros de reservatórios.
  - Ajuste de modelos chuva-vazão.
  - Planejamento ótimo de operação de reservatórios.

Otimização

Solução deterministica simples

Data uma função $f(x)$, todos os pontos ótimos *locais* devem respeitar:

1. Ponto Crítico: $f'(x) = 0$

2. Não é ponto de inflexão: $f''(x) \neq 0$

   - se $f''(x) < 0$, *x* é um ponto de máxima local (ou global)

   - se $f''(x) > 0$, *x* é um ponto de mínima local (ou global)

Resolução de equações não lineares

Método de Newton-Raphson

- Exercício 2: Encontre o ponto que minimiza ou maximiza a seguinte equação $f(x) = sin(2x) - cos(x/2)$ com $x \in (-2\pi, 2\pi)$

Resolução de equações não lineares
Método dos multiplicadores de Lagrange

- Em muitos problemas físicos e hidrológicos, existem **restrições** (por exemplo, conservação de massa, limites de armazenamento, ou balanço hídrico).

- O método de **Lagrange** permite encontrar máximos ou mínimos de uma função sujeita a restrições de igualdade.

Resolução de equações não lineares

Método dos multiplicadores de Lagrange

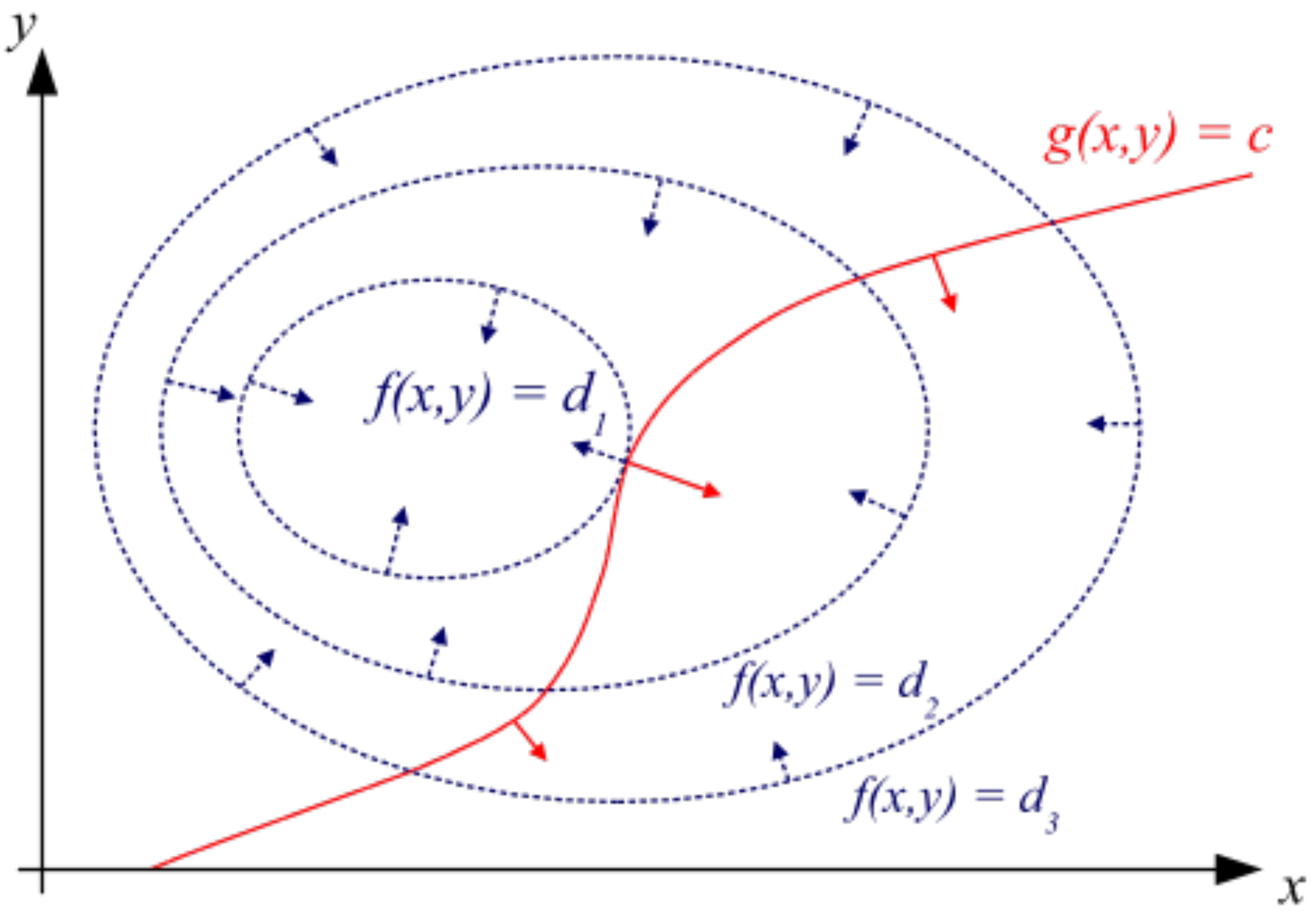
- Em muitos problemas físicos e hidrológicos, existem **restrições** (por exemplo, conservação de massa, limites de armazenamento, ou balanço hídrico).
- O método de **Lagrange** permite encontrar máximos ou mínimos de uma função sujeita a restrições de igualdade.

- Queremos otimizar:
  - Minimizar ou maximizar $f(x, y)$
  - Sujeito a restrições $g(x, y) = 0$

Resolução de equações não lineares

Método dos multiplicadores de Lagrange

- Queremos otimizar:
  - Minimizar ou maximizar $f(x, y)$
  - Sujeito a restrições $g(x, y) = 0$



Link

Resolução de equações não lineares

Método dos multiplicadores de Lagrange

Em vez de tratar a restrição separadamente, construímos uma **função Lagrangiana**:

$$\mathfrak{L}(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda g(x, y),$$

onde λ (lambda) é o multiplicador de Lagrange e $\mathfrak{L}$ é a função lagrangiana

Resolução de equações não lineares

Método dos multiplicadores de Lagrange

Em vez de tratar a restrição separadamente, construímos uma **função Lagrangiana**:

$$\mathfrak{L}(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda g(x, y),$$

onde λ (lambda) é o multiplicador de Lagrange e $\mathfrak{L}$ é a função lagrangiana

Para o ponto ótimo, o gradiente da Lagrangiana deve ser nulo:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathfrak{L}}{\partial x} = 0 \\ \dfrac{\partial \mathfrak{L}}{\partial y} = 0 \\ \dfrac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \lambda} = 0 \end{cases}$$

Essas três equações são resolvidas simultaneamente para encontrar (x*, y*, λ*).

Resolução de equações não lineares

Método dos multiplicadores de Lagrange

Exemplo: Minimizar $f(x, y) = x^2 + y^2$, sujeito a $g(x, y) = x + y - 1 = 0$

Resolução de equações não lineares

Método dos multiplicadores de Lagrange

Exercicio 3: A função de produção agrícola é dada por: $P(x, y) = 100\sqrt{xy}$, onde:

P = produção (toneladas); x = quantidade de fertilizante A (kg); y = quantidade de fertilizante B (kg)

Sujeito à restrição orçamentária $20x + 30y = 6000$, onde

20 = custo por kg do fertilizante A ($/kg); 30 = custo por kg do fertilizante B ($/kg); 6000 = orçamento total disponível ($)

<u>Encontrar a quantidade ótima de fertilizantes A e B para maximizar a produção P usando o método dos multiplicadores de Lagrange</u>

Resolução de equações não lineares

Método dos multiplicadores de Lagrange

Exercicio 4: A função de produção agrícola é dada por: $P(x, y) = 100\sqrt{xy}$, onde:

P = produção (toneladas); x = quantidade de fertilizante A (kg); y = quantidade de fertilizante B (kg)

Sujeito à restrição orçamentária $20x + 30y = 6000$, onde

20 = custo por kg do fertilizante A ($/kg); 30 = custo por kg do fertilizante B ($/kg); 6000 = orçamento total disponível ($)

<u>Encontrar a quantidade ótima de fertilizantes A e B para maximizar a produção P usando o método dos multiplicadores de Lagrange</u>