

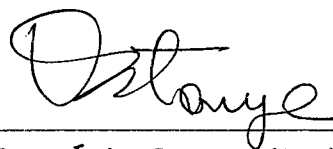
TÍTULO: - "FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DE UM MÉTODO DE MINIMIZAÇÕES SEM RESTRIÇÕES PARA PONTOS INTERIORES."

MESTRANDO: - CARLOS ROBERTO SANCHES.

Esta tese foi julgada adequada para a obtenção do título de


"MESTRE EM CIÊNCIAS"

Especialidade em "MATEMÁTICA" e aprovada na sua forma final pelo Curso de Pós-Graduação.

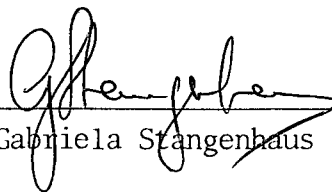


Prof. Plínio Stange (Dr.)-Coordenador.

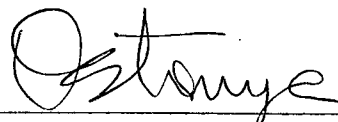
BANCA EXAMINADORA:



Prof. William Glenn Whitley (PHD)-Membro.



Prof. Gabriela Stangenhuis (Dr^a)-Membro.



Prof. Plínio Stange (Dr.) - Orientador.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DE UM MÉTODO DE MINIMIZAÇÕES
SEQUENCIAIS SEM RESTRIÇÕES PARA PONTOS INTERIORES.

CARLOS ROBERTO SANCHES
FLORIANÓPOLIS
1983

Ao

TEOTÔNIO VILELA

(pelo exemplo de garra.)

RESUMO
=====

Este trabalho tem como objetivo mais forte formular matematicamente um método de minimizações sequenciais sem restrições para pontos interiores, que é aplicado na resolução de problemas de programação não linear, que pretendem determinar um ponto x^* que minimiza uma função $f(x)$, sujeita a restrições de desigualdade ($g_i(x) \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, m$), com $x \in R^n$.

AGRADECIMENTOS

- Ao professor Plínio Stange, pela sugestão / do assunto, por seu eficiente acompanhamento na pesquisa, sugestões e correções apresentadas.

- À Fundação Universidade Federal de Mato / Grosso que permitiu e possibilitou a realização deste trabalho.

- À minha mulher Helena e aos meus filhos / Pedro, Thiago, João e Rita, pela compreensão das "minhas ausências" durante a realização deste trabalho.

- A todos que, de alguma forma, colaboraram.

Eu queria escrever poemas de amor
Que falassem da mulher amada
Do homem : e da natureza.

Várias vezes tentei,
Jamais consegui.
Não sei se estou de mal com a vida
- Ou me policio demais;

Será que só enxergo um lado?
- Ou existe apenas um;
Será a pretensa seriedade?
- Ou incoerência;
Será visão única?
- Ou falta de opção.

Será que sou eu?

É... Mais uma vez não consegui!

CARLOS.

ABSTRACT

This work has its principal objective the mathematical formulation of an unconstrained sequential minimization method for interior / points, which is applied to solve a nonlinear programming problem, which / determines a point x^* which minimizes a function $f(x)$ subject to inequality constraints $g_i(x) \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, m$ and $x \in R^n$.

ÍNDICE

ÍTEM	Págs.
Introdução	10
CAPÍTULO I	
1.1 - Histórico.	12
1.2 - Noções sobre a Topologia do Espaço Euclidiano.	14
1.2.1 - O Espaço Vetorial \mathbb{R}^n	14
1.2.2 - Produto Interno e Norma.	15
1.2.3 - Bolas e Conjuntos Limitados.	17
1.2.4 - Sequências no Espaço Euclidiano.	17
1.2.5 - Aplicações Contínuas	19
1.2.6 - Conjuntos Abertos.	20
1.2.7 - Conjuntos Fechados	20
1.2.8 - Conjuntos Compactos.	21
1.3 - Aplicações Diferenciáveis.	21
1.3.1 - Definição.	21
1.3.2 - Regra da Cadeia.	26
1.3.3 - O Teorema de Schwarz	28
1.3.4 - Fórmula de Taylor.	28
1.3.5 - Pontos Críticos	29
1.3.6 - Teorema da Função Implícita.	31
1.4 - Condições de Otimalidade para Extremos com Restrições .	31a
1.4.1 - Condições Necessárias de 1ª Ordem para Extremos com Restrições de desigualdade	31a
1.4.2 - Condições Necessárias e Suficientes de 2ª Ordem.	40
1.5 - Algoritmos e Transformações Algorítmicas	43
1.5.1 - O Conjunto Solução e a Convergência de Algoritmos.	44
1.5.2 - Transformações Fechadas e Convergência	45
1.5.3 - Composição de Transformações Algorítmicas.	48

CAPÍTULO II

2.1 - Técnicas de Minimizações sem Restrições para Pontos interiores.	50
2.1.1 - Formulação Geral de Algoritmos de Minimizações por Pontos Interiores	53
2.1.2 - Demonstração da Convergência do Algoritmo para Pontos Interiores.	56
2.2 - Extrapolação em Técnicas de Minimizações sem Restrições.	62
2.2.1 - Análise da Trajetória de Mínimos Locais sem Restrições em Técnicas para Pontos Interiores.	62
2.2.2 - Análise da Trajetória Isolada.	66
2.3 - Programação Convexa	72
2.3.1 - Convexidade, Definições e Propriedades	73
2.3.2 - Programação Convexa	75
2.4 - Outras Técnicas para Minimizações sem Restrições por pontos Interiores	78
2.4.1 - Substituição de r_k pelo vetor $(r_{k_1}, \dots, r_{k_m})$	78
2.4.2 - Algoritmo de Minimização sem Restrições por pontos Interiores, sem Parâmetros	84
2.4.3 - Versão Contínua das Técnicas para Pontos Interiores.	88

CAPÍTULO III

3.1 - Otimizações sem Restrições	90
3.1.1 - Busca Unidimensional sem Usar Derivadas.	90
3.1.2 - O Método de Fibonacci	92
3.1.3 - Fechamento da Transformação Algorítmica para Busca Unidimensional	97
3.1.4 - Busca Multidimensional Usando Derivadas	98
3.1.5 - O Método do Decrescimento Máximo	98
3.1.6 - O Método de Newton.	103
3.1.7 - Métodos que Usam Direções Conjugadas	108
3.1.8 - Método de Davidon-Fletcher-Powell	111
3.2 - Método para se Determinar um Ponto Interior Inicial Viável	117
3.3 - Determinação do Valor Inicial de r	119
3.4 - Aceleração por Extrapolação	120
3.5 - Procedimentos Computacionais	123
Bibliografia	128

INTRODUÇÃO

O objetivo maior deste trabalho é formular matematicamente um método sequencial de minimizações sem restrições para pontos interiores, que é aplicado na resolução de problemas de programação não linear / sujeitos a restrições de desigualdades. A preocupação matemática está relacionada a vários fatores entre os quais podemos citar o "respeito" generalizado de certos setores técnico-científicos do Brasil, por tudo o que é impresso por computadores, situação essa que possibilita a utilização precipitada da máquina na resolução de problemas gerais de otimização colhendo-se com esta utilização dissabores, resultados errôneos (ou imprecisos) e perda de recursos, tão limitados no nosso país, além de não contribuir para a absorção da tecnologia em questão, tornando-nos eternos dependentes e, conseqüentemente, importadores das mesmas.

Os métodos que discutiremos estão baseados nas transformações de um problema dado, de otimização com restrições de desigualdade em uma seqüência de problemas sem restrições.

Com o objetivo de facilitar a nossa discussão formularemos o problema para então esboçarmos a idéia básica. A pretensão é determinar uma solução x^* do problema:

$$\text{Minimizar } f(x) \tag{A}$$

Sujeita a

$$g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

$$x \in R^n.$$

A idéia geral é transformar (A) em um problema sem restrições ou em uma seqüência de problemas sem restrições da forma

$$\min_{x \in R^n} \theta[x, u(r)] = \min_{x \in R^n} f(x) + \sum_{i=1}^m u_i B[g_i(x)],$$

onde r é um parâmetro, $\{u_i(r)\}$ são pesos, que tem o objetivo de eliminar o efeito das restrições na função $\theta[x, u(r)]$, $B[g_i(x)]$, se for satisfatoriamente escolhida, comporta-se bem quando $g_i(x) \longrightarrow 0$. Geralmente,

o método seleciona uma sequência $\{r_k\}$, para todo $r_k > 0$ e $r_k \rightarrow 0$, qdo. $k \rightarrow \infty$, e determina um mínimo sem restrições de $\theta[x, u(r)]$, o qual existe sob condições apropriadas.

Sob as escolhas apropriadas de $\{r_k\}$ e $B[g_i(x)]$ o resultado fundamental é que $\lim_{k \rightarrow \infty} x(r_k) = x^*$, é um ponto de mínimo do problema original (A). Demonstraremos, para várias propostas de transformações como acima, elaborando, matematicamente, escolhas de r_k e $B[g_i(x)]$ sob condições determinadas que $\theta(x_k, u_k) \rightarrow f(x^*)$, um mínimo da função objetivo do problema proposto (A), que

$\lim_{k \rightarrow \infty} \theta[x_k, u_i(r_k)] - f(x^*) = 0$; isto é, a função Θ (chamada função auxiliar ou de transformação) converge para o mesmo valor da função objetivo do problema (A) com restrições.

Além das várias propostas de como obter a função $\theta[x, u(r)]$, estudaremos outras funções que utilizam apenas um parâmetro para todas as restrições e funções de transformações que não usam parâmetros.

Estudos suplementares serão feitos que contribuem satisfatoriamente para a convergência mais rápida do método, assim como propostas de como selecionar matematicamente, os parâmetros r_k , um ponto interior / inicial (necessário para o método), métodos mais eficientes para otimizações das funções sem restrições, propostas que, de um modo geral, contribuem para a eficiência do método aqui proposto, que sob várias opiniões é um dos métodos que serão mais utilizados a partir de agora para a resolução de problemas de programação não linear com restrições, em razão da maior abrangência em termos de problemas, de métodos já desenvolvidos para / otimizações sem restrições, além da pesquisa de novos métodos. Mordacai / [06], por exemplo, afirma " que estamos entrando na era da resolução de problemas de programação não linear com restrições através de problemas / sem restrições."

Entre as várias contribuições pessoais, citamos:

- (1) - organização do trabalho;
- (2) - participação na formulação matemática, além da estruturação e demonstração da maioria das proposições matemáticas;
- (3) - reunião, em um único texto, de todas as informações / matemáticas básicas, dos métodos auxiliares e aplicações ;
- (4) - a da proposta da aplicação computacional do método / que reúne, no mesmo algoritmo, todos os aspectos vantajosos estudados no presente trabalho.

CAPÍTULO I

Introdução. - Este capítulo é composto de cinco seções; na primeira pretendemos organizar um histórico das idéias iniciais / propostas sobre o assunto; na segunda, fazer um levantamento de conceitos básicos sobre a topologia do Espaço Euclidiano R^n ; na terceira, relacionar conceitos e teoremas, essenciais ao desenvolvimento do trabalho, referentes a aplicações diferenciáveis; na quarta, já com maior rigor matemático, estudar as condições de otimalidade para a existência de pontos críticos não degenerados e isolados de problemas com restrições de desigualdade; na quinta e última seção, desenvolver os / conceitos, menos conhecidos, de algoritmo e transformação algorítmica, que serão utilizados tanto na linguagem quanto nas demonstrações das propostas básicas do nosso trabalho.

1.1. - Histórico. - Em 1934, R Courant sugeriu, após / estudar as condições de $f(x) + t.g^2(x)$ quando $t \rightarrow \infty$, analisar o movimento com restrições para satisfazer $g(x) = 0$ em termos do movimento sem restrições. A sugestão foi motivada por considerações físicas e / não foi dada diretamente como técnica para resolver um problema de programação matemática.

Em 1951, H. W. Kuhn e A.W. Tucker publicaram os seus resultados sobre condições necessárias e suficientes de otimalidade, caracterizando a solução do problema de programação convexa não linear (uma estruturação do estudo realizado por Kuhn-Tucker e evoluções no / sentido de problemas de programação não linear gerais serão desenvolvidos na seção 1.4).

Em 1951, G.B Dantzig formulou o problema de programação linear e ofereceu a primeira versão do método simplex.

Em 1954 e 1955 uma série de considerações foram feitas / sobre a função penalidade (ou função barreira) com um procedimento computacional.

K. R. Frisch introduziu o "método potencial logarítmico" baseado na utilização do gradiente da função, no interior da região viável,

$f(x) + \sum_{i=1}^m \alpha_i \ln g_i(x)$, para obter a convergência para a solução do problema (A), que repetimos aqui, por conveniência.

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } f(x) \\ &\text{sujeita a} \end{aligned} \tag{A}$$

$$\begin{aligned} &g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ &x \in R^n. \end{aligned}$$

Os α_i são constantes específicas. É evidente que a função barreira logarítmica representa uma das classes de propostas para resolver o problema (A) e constitui um dos objetos do presente trabalho (ver capítulo II).

Em 1959 surgiu a idéia de uma função barreira que faz / cumprir a viabilidade, que é muito próxima da função logarítmica de / Frisch, proposta acima.

Esta é a função $f(x) + t \cdot \sum_{i=1}^m [g_i(x)]^{-1}$, proposta por C.W. Carrol e utilizada por ele para obter uma solução aproximada de problemas de porte moderado. Resolvendo o problema (A) que minimiza esta função na região onde $g_i(x) \geq 0$, para todo i , tal que $t_k > 0$ e $t_k \rightarrow 0$. Assim, obtém-se / um ponto de mínimo correspondente $x(t_k)$, e pontos de acumulação de / $\{x(t_k)\}$ resolvem (A), quando o procedimento for válido. A consequência usual, isto é, a anulação do termo barreira no limite, segue necessariamente. A proposta foi intuitiva, demonstrações não foram dadas, e os argumentos foram dados baseados em algumas indicações de resultados computacionais. A validação teórica e demonstração da eficiência computacional foram realizadas por Anthony V. Fiacco e Garth P. McCormick durante vários anos culminando, em 1968, com a publicação de [04]. Faremos uma reorganização do estudo acima neste trabalho (ver capítulo II).

Uma versão interessante de "um método de centros" foi / mostrada por Fiacco e McCormick, em 1965, para um problema de programação convexa do tipo (A) em R^n . O interior da região viável deve ser não vazio para a validade do método. A função utilizada é

$[f(x_k) - f(x)]^{-1} + \sum_{i=1}^m [g_i(x)]^{-1}$, onde x_1 é um ponto interior e o conjunto $\{x: g_i(x) \geq 0, i = 0, 1, \dots, m\}$ não é vazio. O método é também conhecido por "Método para pontos interiores sem parâmetros" (ver capítulo II).

Finalmente, a partir de uma idéia propsta por K. J. / Arrow e L. Hurwicz, em 1951, que evidenciava um "método diferencial" para resolver problemas de programação convexa, Fiacco e McCormick / desenvolveram a função $f(x) + e^{-t} \sum_{i=1}^m [g_i(x)]^{-1}$, onde o parâmetro é substituído por uma função decrescente do "tempo". Tal método é conveniente para ser usado em um computador analógico, e também será / estruturado no capítulo II, do presente texto; (para um histórico / melhor ver [04]).

1.2 - Noções sobre a Topologia do Espaço Euclidiano.

1.2.1 - O Espaço Vetorial.- Seja n um número natural.

O espaço Euclidiano n -dimensional é o produto cartesiano de n fatores iguais a R :

$$R^n = R \times R \times \dots \times R.$$

Os pontos de R^n são todas as n -uplas /

$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ cujas coordenadas x_1, x_2, \dots, x_n são números reais. $R^1 = R$ é a reta, isto é, o conjunto dos números reais. R^2 é o plano, ou seja, o conjunto dos pares ordenados (x, y) de números reais. R^3 é o espaço euclidiano tri-dimensional da geometria euclidiana tradicional, cujos pontos são os ternos ordenados (x, y, z) . As vezes é conveniente considerar $R^0 = \{0\}$ o "espaço dimensão zero".

No espaço vetorial R^n , destaca-se a base canônica, / ou base natural $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$, formado pelos vetores / $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$, $e_2 = (0, 1, \dots, 0)^T$, ..., $e_n = (0, 0, \dots, 1)^T$, onde T significa o vetor coluna transposto.

Dado $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ em R^n , tem-se $x = x_1 e_1 + \dots + x_n e_n$.

A base canônica do espaço euclidiano permite estabelecer uma bijeção natural entre o conjunto $\mathcal{L}(R^m; R^n)$ das aplicações (ou transformações lineares) $A: R^m \longrightarrow R^n$ e o conjunto $M(m \times n)$ das matrizes reais (a_{ij}) com n linhas e m colunas. A matriz (a_{ij}) correspondente a transformação linear A definida por:

$$A \cdot e_j = \sum_{i=1}^n a_{ij} e_i, \quad (j = 1, 2, \dots, m), \quad (1.2.1)$$

portanto a matriz (a_{ij}) da transformação linear $A: R^m \longrightarrow R^n$ tem como colunas os m vetores $A \cdot e_j = (a_{1j}, \dots, a_{nj})^T \in R^n$, imagens (ou transformadas) por A dos vetores da base canônica do R^m .

Reciprocamente, dada uma matriz (a_{ij}) com n linhas e m colunas, as igualdades / (1.2.1) definem os valores de uma aplicação linear $A: R^m \longrightarrow R^n$ nos m vetores da base canônica, o que é suficiente para definir o valor de A em qualquer vetor $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T$, já que $Ax = x_1 Ae_1 + \dots + x_m Ae_m$.

Cada matriz real $n \times m$ pode ser considerada como um ponto do espaço euclidiano R^{nm} , escrevendo-se as suas colunas, uma após a outra, numa linha. Então podemos substituir o conjunto $\mathcal{L}(R^m; R^n)$ das aplicações lineares de R^m em R^n , pelo conjunto $M(n \times m)$ das matrizes reais com n linhas e m colunas, ou pelo espaço euclidiano nm -dimensional R^{nm} .

Os funcionais lineares $f: R^n \longrightarrow R$ representam um tipo simples de aplicações lineares. Dado o funcional linear f , sejam $a_1 = f(e_1), \dots, a_n = f(e_n)$ os valores que ele assume nos vetores da base canônica. Para $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, com

$x = \sum x_i e_i$, logo $f(x) = \sum x_i f(e_i)$, ou $f(x) = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n$. Notar que (a_1, \dots, a_n) é a matriz $1 \times n$ da aplicação linear f .

Uma aplicação $\phi: R^m \times R^n \longrightarrow R^p$ chama-se bilinear quando for linear separadamente em relação a cada uma das suas variáveis. Portanto, temos:

$$\phi(x + x', y) = \phi(x, y) + \phi(x', y);$$

$$\phi(x, y + y') = \phi(x, y) + \phi(x, y');$$

$$\phi(\alpha x, y) = \alpha \phi(x, y);$$

$$\phi(x, \alpha y) = \alpha \phi(x, y),$$

quaisquer que sejam $x, x' \in R^m, y, y' \in R^n$ e $\alpha \in R$, se ϕ for bilinear então, para $x = (x_1, \dots, x_m)^T$ e $y = (y_1, \dots, y_n)^T$, arbitrários, temos:

$\phi(x, y) = \phi(\sum x_i e_i, \sum y_j e_j) = \sum x_i y_j \phi(e_i, e_j)$, de modo que ϕ fica inteiramente determinada pelos mn valores. $\phi(e_i, e_j) \in R^p$ que assume nos pares ordenados de vetores básicos (e_i, e_j) . Notar que $\phi(x, 0) = \phi(0, y) = 0$ para quaisquer que sejam $x \in R^m, y \in R^n$.

1.2.2 - Produto Interno e Norma.

Um produto interno num espaço vetorial real E é uma transformação que faz corresponder a cada par de vetores $x, y \in E$ um número real, indicado por $\langle x, y \rangle$, de modo que, para quaisquer $x, x', y \in E$ e $\alpha \in R$ tenhamos:

$$(1) \langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle;$$

$$(2) \langle x + x', y \rangle = \langle x, y \rangle + \langle x', y \rangle;$$

$$(3) \langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle = \langle x, \alpha y \rangle;$$

$$(4) x \neq 0, \text{ então } \langle x, x \rangle > 0.$$

Podemos dizer que um produto interno é uma função real simétrica, bilinear, definida positiva, $E \times E \longrightarrow R$.

Aqui consideraremos sempre o produto interno canônico do espaço euclidiano R^n , $\langle x, y \rangle = x_1 y_1 + \dots + x_n y_n$, onde $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ e $y = (y_1, \dots, y_n)^T$.

Dado $x \in R^n$, escrevemos $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2}$. Logo $\|x\|^2 = \langle x, x \rangle$, $\|x\| = 0 \iff x = 0$ e $\|x\| > 0 \iff x \neq 0$. O número $\|x\|$ chama-se norma euclidiana ou comprimento do vetor $x \in R^n$.

Dois vetores $x, y \in R^n$ são ortogonais quando $\langle x, y \rangle = 0$.

Um caso menos banal de ortogonalidade é o seguinte: dados $x, y \in R^n$, com $y \neq 0$ e pondo-se

$$\alpha = \frac{\langle x, y \rangle}{\|y\|^2}, \text{ o vetor } z = x - \alpha y \text{ é ortogonal a } y, \text{ pois}$$

$$\begin{aligned} \langle z, y \rangle &= \langle x - \alpha y, y \rangle = \langle x, y \rangle - \alpha \langle y, y \rangle = \langle x, y \rangle - \alpha \|y\|^2 = \\ &= \langle x, y \rangle - \frac{\langle x, y \rangle}{\|y\|^2} \cdot \|y\|^2 = \langle x, y \rangle - \langle x, y \rangle = 0. \end{aligned}$$

Teorema 1.2.1 - (Desigualdade de Cauchy-Schwarz). Para todo $x, y \in R^n$ temos $|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \cdot \|y\|$. A igualdade é válida se, e somente se, um dos valores x, y for múltiplo escalar do outro.

(Para demonstração ver [01], pág. 7).

A norma euclidiana $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$ tem as propriedades:

- (1) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$;
- (2) $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$;
- (3) $x \neq 0$, então $\|x\| > 0$.

Geralmente, uma norma sobre um espaço vetorial E é qualquer função real $\| \cdot \|: E \longrightarrow R$ que satisfaz as propriedades acima.

Há uma grande quantidade de normas que se podem considerar no espaço euclidiano R^n . A euclidiana tem a sua definição motivada pelo cálculo do comprimento de um vetor no plano em coordenadas cartesianas. Ela será sempre a considerada neste trabalho, a não ser menção em contrário. Consideremos outras duas normas que serão eventualmente utilizadas no nosso desenvolvimento:

$$\begin{aligned} \|x\|_m &= \max |x_1|, \dots, |x_n|, \text{ (norma do máximo);} \\ \|x\|_s &= |x_1| + \dots + |x_n|, \text{ (norma da soma).} \end{aligned}$$

1.2.3 - Bolas, Conjuntos Convexos e Conjuntos Limitados.

Definição de Bola. - Uma bola aberta de centro $a \in \mathbb{R}^n$ e raio $r > 0$ é o conjunto dos pontos $x \in \mathbb{R}^n$ cuja distância ao ponto a é menor do que r . Assim, $B(a;r) = \{ x \in \mathbb{R}^n : \|x - a\| < r \}$.

Analogamente, temos uma bola fechada $B[a;r]$ e uma esfera $S[a;r]$, ambas com centro a e raio r , dadas por

$$B[a;r] = \{ x \in \mathbb{R}^n : \|x - a\| \leq r \}, \text{ e}$$

$$S[a;r] = \{ x \in \mathbb{R}^n : \|x - a\| = r \}, \text{ e segue que}$$

$$B[a;r] = B(a;r) \cup S[a;r].$$

Definição (Conjunto Convexo) - Sejam $x, y \in \mathbb{R}^n$. O segmento de reta de extremos x, y é conjunto $[x, y] = \{ (1 - \lambda)x + \lambda y : 0 \leq \lambda \leq 1 \}$.

Um subconjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ diz-se convexo quando contém qualquer segmento de reta cujos extremos pertençam a X , ou seja $x, y \in X$, então $[x, y] \subset X$.

Definição de Conjunto Limitado. - Um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ diz-se limitado quando existir um número real $c > 0$ tal que $\|x\| \leq c$ para todo $x \in X$. Logo X está contido na bola fechada de centro na origem e raio c .

Se existir alguma bola $B[a;r]$, de centro arbitrário, contendo X então, para $x \in X$, temos $\|x - a\| \leq r$. Tomando $c = r + \|a\|$, temos $x \in X \implies \|x\| = \|x - a + a\| \leq \|x - a\| + \|a\| \leq r + \|a\| = c$, logo X é limitado. Assim, um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ é limitado se, e somente se, estiver contido em alguma bola (cujo centro não é necessariamente a origem).

1.2.4 - Sequências no Espaço Euclidiano. - Uma sequência em \mathbb{R}^n é uma aplicação $x: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}^n$, definida no conjunto \mathbb{N} dos números naturais. O valor que essa aplicação assume no número k é indicado com x_k e chama-se o k -ésimo termo da sequência. Usaremos as notações $\{x_k\}, \{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ ou $\{x_1, \dots, x_k, \dots\}$ para indicar a sequência cujo k -ésimo termo é $x_k \in \mathbb{R}^n$.

Uma subsequência de $\{x_k\}$ é uma restrição da sequência a um conjunto infinito $N' = \{k_1 < k_2 < \dots < k_i < \dots\}$, $N' \subset \mathbb{N}$. A subsequência é indicada pelas notações $\{x_k\}_{k \in N'}$, $\{x_{k_i}\}_{i \in N'}$ ou $\{x_{k_1}, \dots, x_{k_i}, \dots\}$.

Diz-se que uma sequência $\{x_k\}$ é limitada quando o conjunto dos termos for limitado em \mathbb{R}^n , ou seja, quando existir um número real $c > 0$ tal que $\|x_k\| \leq c$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

Uma sequência $\{x_k\}$ em \mathbb{R}^n equivale a n sequências de números reais, pois para cada $k \in \mathbb{N}$ temos $x_k = \{x_{k1}, \dots, x_{kn}\}$ onde $x_{ki} = \Pi_i(x_k) =$

i -ésima coordenada de x_k ($i = 1, 2, \dots, n$) (Π_i é a i -ésima projeção do produto cartesiano \mathbb{R}^n no seu fator \mathbb{R}). As n -seqüências $\{x_{ki}\}_{k \in \mathbb{N}}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) são chamadas as seqüências das coordenadas de $\{x_k\}$. Assim, por exemplo no plano \mathbb{R}^2 , uma seqüência de pontos $z_k = (x_k, y_k)$ é o mesmo que um par de seqüências $\{x_k\}$, $\{y_k\}$ de números reais.

Imediatamente, a partir do teorema: "Um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ é limitado se, e somente se, suas projeções $X_1 = \Pi_1(X)$, $X_2 = \Pi_2(X)$, ..., $X_n = \Pi_n(X)$ forem conjuntos limitados em \mathbb{R} ", temos que uma seqüência $\{x_k\}$ em \mathbb{R}^n é limitada se, e somente se, cada uma das suas seqüências de coordenadas $\{x_{ki}\}_{k \in \mathbb{N}}$ ($1 \leq i \leq n$) for limitada em \mathbb{R} .

O ponto $a \in \mathbb{R}^n$ é o limite da seqüência de pontos $x_k \in \mathbb{R}^n$ quando, para cada $\varepsilon > 0$, dado, for possível obter $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que $\forall k > k_0 \implies \|x_k - a\| < \varepsilon$. Dizemos então que $\{x_k\}$ converge para a , ou tende para a e escrevemos $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = a$, $\lim_{k \in \mathbb{N}} x_k = a$, ou simplesmente $x_k \rightarrow a$.

Quando existir o limite $a = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k$, dizemos que a seqüência $\{x_k\}$ é convergente. Caso contrário, que $\{x_k\}$ é divergente.

Uma seqüência $\{x_k\}$ chama-se crescente quando $x_1 < x_2 < \dots$; isto é, quando $x_k < x_{k+1}$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Se tivermos $x_k \leq x_{k+1}$ para todo k , a seqüência chama-se não decrescente.

Analogamente, quando $x_k > x_{k+1}$ para todo k , a seqüência chama-se decrescente e, chamada não crescente quando $x_k \geq x_{k+1}$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

As seqüências crescentes, não decrescentes, decrescentes e não crescentes são chamadas monótonas.

Teorema 1.2.2 - Uma seqüência $\{x_k\}$ em \mathbb{R}^n converge para o ponto $a = (a_1, \dots, a_n)$ se, e somente se, para cada $i = 1, 2, \dots, n$, tivermos $\lim_{k \rightarrow \infty} x_{ki} = a_i$, ou seja, cada coordenada x_k converge para a coordenada correspondente de a .

Corolário 1.2.1 - Dadas as seqüências convergentes de pontos $x_k, y_k \in \mathbb{R}^n$ e $\alpha_k \in \mathbb{R}$, sejam $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = a$, $\lim_{k \rightarrow \infty} y_k = b$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k = \alpha$. Então

- (1) $\lim_{k \rightarrow \infty} (x_k + y_k) = a + b$;
- (2) $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k x_k = \alpha a$;
- (3) $\lim_{k \rightarrow \infty} \langle x_k, y_k \rangle = \langle a, b \rangle$;
- (4) $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_k\| = \|a\|$.

Teorema 1.2.3 - (Bolzano-Weierstrass) - Toda seqüência limitada em \mathbb{R}^n possui uma subseqüência convergente.

(para demonstração do teorema 1.2.2, corolário 1.2.1 e teorema 1.2.3 ver [01], pags. 15-16).

Definição (Ponto de Acumulação) - Seja $X \subset \mathbb{R}^n$. Um ponto $a \in \mathbb{R}^n$, chama-se ponto de acumulação do conjunto X quando toda bola aberta de centro a contém algum ponto de X , diferente de a ; isto é, para todo $\varepsilon > 0$, deve existir $x \in X$ tal que $0 < \|x - a\| < \varepsilon$.

1.2.5 - Aplicações Contínuas. - Seja $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação definida no conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$. Diz-se que f é contínua no ponto $a \in X$, quando para qualquer $\varepsilon > 0$, pode-se obter $\delta > 0$, tal que todo ponto $x \in X$, cuja distância ao ponto a seja menor do que δ , seja transformado por f num ponto $f(x)$ de distância a $f(a)$ menor que ε . Em outras palavras.

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0: x \in X, \|x - a\| < \delta \implies \|f(x) - f(a)\| < \varepsilon.$$

Em termos de bolas abertas, a continuidade de f no ponto a , se exprime da seguinte forma: para toda bola aberta B' de centro $f(a)$ em \mathbb{R}^n existe uma bola aberta B de centro a em \mathbb{R}^n tal que $f(B \cap X) \subset B'$.

Se $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$ for contínua em todos os pontos do conjunto X , dizemos simplesmente que f é uma aplicação contínua.

Observamos que se $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$ for contínua, então para $Y \subset X$, a restrição $f|_Y$ será uma aplicação contínua.

Um caso trivial de continuidade é o seguinte: - se a for um ponto isolado do conjunto X , então toda aplicação $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$ será necessariamente contínua no ponto a , pois existe $\delta > 0$ tal que $B(a; \delta) \cap X = \{a\}$ ($a \in X \subset \mathbb{R}^n$ é ponto isolado de X se, e somente se, $\exists \varepsilon > 0: B(a; \varepsilon) \cap X = \{a\}$). Assim, para qualquer $\varepsilon > 0$ dado, tomamos este valor de δ e temos $x \in X, \|x - a\| < \delta \implies x = a \implies \|f(x) - f(a)\| = 0 < \varepsilon$.

Teorema 1.2.4 - A composta de duas aplicações contínuas é contínua; mais precisamente, dados $X \subset \mathbb{R}^m, Y \subset \mathbb{R}^n, f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$ contínua no ponto $a \in X$, com $f(X) \subset Y, g: Y \longrightarrow \mathbb{R}^p$ contínua no ponto $b = f(a)$, então $g \circ f: X \longrightarrow \mathbb{R}^p$ é contínua no ponto a .

Teorema 1.2.5 - Uma aplicação $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definida no conjunto $X \subset \mathbb{R}^m$, é contínua num ponto $a \in X$ se, e somente se, cada uma das coordenadas (funções) $f_i = \Pi_{0i} f: X \longrightarrow \mathbb{R}$ for contínua no ponto a .

Corolário 1.2.2 - Dadas $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^m$ e $g: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$, seja $(f, g): X \longrightarrow \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{n+m}$ definida por $(f, g)(x) = (f(x), g(x))$. Então (f, g) é contínua se, e somente se, f e g forem contínuas.

Os teoremas 1.2.4 e 1.2.5 são instrumentos de grande utilidade para estabelecer a continuidade de certas aplicações. Vejamos alguns exemplos:

Sejam $X \subset \mathbb{R}^m$ e $f, g: X \longrightarrow \mathbb{R}^n, \alpha: X \longrightarrow \mathbb{R}$ aplicações contínuas, então são aplicações contínuas:

$$\begin{aligned}
f + g: X &\longrightarrow \mathbb{R}^n, & (f + g)(x) &= f(x) + g(x); \\
\alpha f: X &\longrightarrow \mathbb{R}^n, & (\alpha f)(x) &= \alpha(x) \cdot f(x); \\
\langle f, g \rangle: X &\longrightarrow \mathbb{R}^n, & \langle f, g \rangle(x) &= \langle f(x), g(x) \rangle.
\end{aligned}$$

Teorema 1.2.6 - Uma aplicação $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definida no subconjunto $X \subset \mathbb{R}^m$, é contínua no ponto $a \in X$ se, e somente se, para toda sequência de pontos $x_k \in X$ com $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = a$, tivermos $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = f(a)$.

(para demonstração dos teoremas 1.2.4, 1.2.5 e 1.2.6 ver [01] págs. 24 a 26).

1.2.6 - Conjuntos Abertos. - Seja X um conjunto do espaço euclidiano \mathbb{R}^n . Um ponto $a \in X$ chama-se ponto interior a X quando for centro de alguma bola aberta contida em X ; isto é, quando existir $\delta > 0$ tal que $\|x - a\| < \delta \implies x \in X$. O interior de X é o conjunto $\text{Int } X$, ou X^o , formado pelos pontos interiores a X . Quando $x \in X^o$, dizemos que o conjunto V é uma vizinhança do ponto x .

Um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ chama-se aberto quando todos os seus pontos forem interiores; isto é, quando para cada $x \in X$ existir $\delta > 0$ tal que $B(x; \delta) \subset X$. Assim X é aberto se, e somente se, $X^o = X$.

Dados um conjunto X e um ponto $a \in \mathbb{R}^n$, há três possibilidades que se excluem mutuamente: ou $a \in X^o$, $a \in (\mathbb{R}^n - X)^o$ ou então toda bola aberta de centro a contém pontos de X e pontos do complementar de X . Os pontos com esta última propriedade constituem ∂X , que chamamos a fronteira de X . Os pontos $y \in \partial X$ são chamados de pontos de fronteira de X .

1.2.7 - Conjuntos Fechados. - Um ponto $a \in \mathbb{R}^n$ diz-se aderente a um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ quando for limite de uma sequência de pontos desse conjunto. Por exemplo, todo $a \in X$ é aderente a X , pois podemos escrever $a = \lim x_k$, com $x_k = a$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Mas a pode ser aderente a X sem pertencer a X , aqui, a é necessariamente um ponto de acumulação do conjunto X . Por exemplo, se $X = B(0; 1) \subset \mathbb{R}^n$ for uma bola de centro na origem e raio 1 em \mathbb{R}^n , o ponto $e_1 = (1, 0, \dots, 0)$ não pertence a X . Mas tomando $x_k = \{1 - 1/k, 0, \dots\}$, vemos que $x_k \in X$ para todo $k \in \mathbb{N}$ e $\lim x_k = e_1$, logo e_1 é aderente a X .

O conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ chama-se fechado quando contém todos os seus pontos aderentes; isto é quando $X = \bar{X}$. Onde o conjunto de pontos aderentes a X chama-se fecho de X e é indicado por \bar{X} . dos

Dizer que $X \subset \mathbb{R}^n$ é fechado significa, portanto, o seguinte: /
 se $\lim x_k = a$ e $x_k \in X$ para todo $k \in \mathbb{N}$, então $a \in X$. Por exemplo, uma bola /
 fechada $B[a; r]$ é um subconjunto fechado do espaço \mathbb{R}^n pois se $\|x\| \leq r$ para /
 todo k e $\lim x_k = b$ então $\|b\| = \lim \|x_k\| \leq r$. Daí resulta que o fecho de /
 todo conjunto limitado $X \subset \mathbb{R}^n$ é limitado. De fato, temos $X \subset B$, onde B é uma /
 bola fechada. Logo $\overline{X} \subset \overline{B} = B$, donde X é limitado.

1.2.8 - Conjuntos Compactos. - Dizemos que um conjunto $K \subset \mathbb{R}^n$ /
 é compacto quando ele for limitado e fechado.

Em virtude do teorema de Bolzano-Weierstrass (ver 1.2.4), um /
 conjunto $K \subset \mathbb{R}^n$ é compacto se, e somente se, toda sequência de pontos $x_k \in K$ /
 possuir uma subsequência que converge para um ponto de K .

As seguintes propriedades decorrem imediatamente da definição:

(1) - K_1, \dots, K_p compactos em \mathbb{R}^n , então $K_1 \cup K_2 \cup \dots \cup K_p$ /
 é compacto;

(2) - A intersecção de uma família qualquer de compactos /
 $K_\lambda \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto compacto;

(3) - Se $K \subset \mathbb{R}^m$ e $L \subset \mathbb{R}^n$ forem compactos, então o produto car /
 tesiano $K \times L$ é um conjunto compacto.

Teorema 1.2.7 - Seja $f: X \longrightarrow \mathbb{R}^n$ contínua no conjunto /
 $X \subset \mathbb{R}^n$. Para todo subconjunto compacto, sua imagem $f(K)$ é compacta.

Corolário 1.2.3 (Weierstrass) - Toda função real contínua /
 $f: K \longrightarrow \mathbb{R}$, definida num compacto $K \subset \mathbb{R}^m$, atinge o seu máximo e seu mínimo /
 em K ; isto é, existem pontos x_0 e $x_1 \in K$ tais que $f(x_0) \leq f(x) \leq f(x_1)$ para /
 qualquer $x \in K$.

(Ver a demonstração do teorema 1.2.7 e corolário 1.2.3 em /
 [01], pág. 44).

1.3 - Aplicações Diferenciáveis.

1.3.1 - Definição (Diferenciabilidade de uma Aplicação). - /
 Uma aplicação f é diferenciável no ponto a quando, para pequenos valores de /
 h , o acréscimo $f(a + h) - f(a)$ for, aproximadamente, uma função linear de h . /
 Mais precisamente: A aplicação $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, diz- /
 se diferenciável no ponto $a \in U$ quando existir uma aplicação linear /
 $T: \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$ tal que

$$f(a + h) - f(a) = T \cdot h + r(h), \text{ onde } \lim_{h \rightarrow 0} \frac{r(h)}{\|h\|} = 0.$$

Aqui, supõe-se que $a + h \in U$, para que $f(a + h)$ tenha sentido. Como U é aberto, existe $\delta > 0$ tal que $\|h\| < \delta$, então $a + h \in U$. A igualdade acima é a definição do "resto" $r(h)$. Uma vez dada T , a diferenciabilidade de f no ponto a tem a sua essência na afirmação de que $r(h)$ é um infinitésimo / em relação a h , o que se exprime com $\lim_{h \rightarrow 0} [r(h)/\|h\|] = 0$. Ou em termos explícitos: para todo $\epsilon > 0$ existe $\delta > 0$ tal que $0 < \|h\| < \delta$, então $\|r(h)\| < \epsilon \|h\|$.

Em alguns casos, para evitar as exceções causadas pelo denominador zero, é conveniente pôr o resto sob a forma $r(h) = \rho(h) \cdot \|h\|$, onde ρ é definida, para todo h tal que $a + h \in U$, por $\rho(h) = [r(h)/\|h\|]$, se $h \neq 0$ e $\rho(0) = 0$. Então a diferenciabilidade de f no ponto a se exprime como, $f(a + h) - f(a) = T \cdot h + \rho(h) \cdot \|h\|$, onde $\lim_{h \rightarrow 0} \rho(h) = 0$, de modo que ρ é contínua no ponto zero.

Toda aplicação diferenciável num ponto é evidentemente, contínua nesse ponto.

Vejam agora uma interpretação da transformação linear $T: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ que ocorre na definição acima.

Seja $f: U \rightarrow \mathbb{R}^n$ definida num aberto $U \subset \mathbb{R}^m$. A derivada direcional de f no ponto $a \in U$, relativamente a um vetor $h \in \mathbb{R}^m$, é, por definição $\frac{\partial f}{\partial h}(a) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + th) - f(a)}{t} \in \mathbb{R}^n$, quando o limite existir.

Podemos visualizar $\frac{\partial f}{\partial h}(a)$ do seguinte modo: Seja $\delta > 0$ tal que o segmento de reta aberto $(a - \delta h, a + \delta h)$ esteja contido em U . O caminho retilíneo $\lambda: (-\delta, \delta) \rightarrow U$ dado por $\lambda(t) = a + th$, é transformado por f no caminho $f \circ \lambda: t \rightarrow f(a + th)$, no espaço \mathbb{R}^n . A derivada direcional $\frac{\partial f}{\partial h}(a)$ é o vetor velocidade de $f \circ \lambda$ no instante $t = 0$.

Se $f = (f_1, \dots, f_n)$, então

$$\frac{\partial f}{\partial h}(a) = \left[\frac{\partial f_1}{\partial h}(a), \dots, \frac{\partial f_n}{\partial h}(a) \right].$$

Quando $h = e_j$ for o j -ésimo vetor da base canônica de \mathbb{R}^m , escrevemos

$$\frac{\partial f}{\partial x_j}(a) \text{ em vez de } \frac{\partial f}{\partial e_j}(a). \text{ Assim, } \frac{\partial f}{\partial x_j}(a) = \left[\frac{\partial f_1}{\partial x_j}(a), \dots, \frac{\partial f_n}{\partial x_j}(a) \right]^T$$

Supondo f diferenciável no ponto a , para todo $h \in \mathbb{R}^m$ e qual quer $t \in \mathbb{R}$ suficientemente pequeno, tem-se

$$f(a + th) - f(a) = T \cdot th + \rho(th) \cdot \|t \cdot h\|, \text{ com } \lim_{t \rightarrow 0} \rho(th) = 0.$$

Como $T \cdot th = t \cdot Th$ e $\|th\| = |t| \cdot \|h\|$, segue-se que, para $t \neq 0$,

$$\frac{f(a+h) - f(a)}{t} = Th + \rho(th) \cdot \|h\|, \text{ donde } \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{t} = Th, \text{ portanto}$$

$$Th = \frac{\partial f}{\partial h}(a).$$

Em particular, vemos que é única a transformação linear T que fornece a boa "aproximação" para o acréscimo $f(a+h) - f(a)$ na vizinhança / do ponto a . Ela é chamada a derivada de f no ponto a e é indicada por $f'(a)$.

Portanto, se $f:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, for diferenciável no ponto $a \in U$, sua derivada é a aplicação linear / $f'(a): \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$, caracterizada por

$$f(a+h) - f(a) = f'(a) \cdot h + r(h), \text{ com } \lim_{h \rightarrow 0} \frac{r(h)}{\|h\|} = 0,$$

ou,
$$f(a+h) - f(a) = f'(a) \cdot h + \rho(h) \|h\|, \text{ com } \lim_{h \rightarrow 0} \rho(h) = 0.$$

As vezes usa-se também a notação $Df(a)$ em vez de $f'(a)$.

A transformação linear $f'(a): \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$ possui, em relação / às bases canônicas de \mathbb{R}^m e \mathbb{R}^n , uma matriz $n \times m$ chamada a matriz Jacobiana de f no ponto a , indicada com a notação $Jf(a)$. Suas colunas são os vetores

$$f'(a)e_j = \left[\frac{\partial f_1}{\partial x_j}(a), \dots, \frac{\partial f_n}{\partial x_j}(a) \right]^T. \text{ Assim,}$$

$$Jf(a) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(a) \right], \text{ onde } f_1, \dots, f_n: U \longrightarrow \mathbb{R} \text{ são as funções /}$$

coordenadas de f . Observar que

$$Jf(a) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(a) \right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m}(a) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_m}(a) \end{bmatrix}$$

Observações:

(1) - Funções Reais. - A derivada de uma função diferenciável $f:U \longrightarrow \mathbb{R}$, $U \subset \mathbb{R}^m$, em um ponto $a \in U$, é um elemento de $\mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}) = (\mathbb{R}^m)^*$ igual o espaço dual de \mathbb{R}^m . Ou seja, $f'(a)$ é um funcional linear. Nesse caso, a notação tradicional $df(a)$ é usada, em vez de $f'(a)$, e $df(a)$ é chamada a diferencial de f no ponto a .

A matriz jacobiana de $f'(a) = df(a)$ tem uma linha e m colunas:

$$Jf(a) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(a), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_m}(a) \right].$$

Os números $\partial f / \partial x_i(a)$ são as coordenadas do funcional linear $df(a)$ relativas à base canônica de $(\mathbb{R}^m)^*$, espaço dual de \mathbb{R}^m . Recordemos que esta base $\{e_1, \dots, e_m\}$ de $(\mathbb{R}^m)^*$ é caracterizada pela propriedade de que, dado qualquer vetor $v = (a_1, \dots, a_m)^T \in \mathbb{R}^m$, $e_i \cdot v = a_i$. Podemos, portanto, escrever $df(a) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) \cdot e_i$.

Frequentemente os funcionais e_i são escritos como dx_i , já que os e_i podem ser interpretados como as funções coordenadas $x_i: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$, que a cada $x = (x_1, \dots, x_m)^T$ fazem corresponder sua i -ésima coordenada x_i (ver 1.2.1). Como estas funções são lineares, tem-se que $dx_i(x) = x_i$ para cada $x \in \mathbb{R}^m$.

Escrevemos então

$$df(a) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) dx_i.$$

Isto significa que o funcional linear $df(a)$ se exprime como combinação linear dos funcionais dx_i , sendo $\partial f / \partial x_i(a)$ os coeficientes da combinação linear. Finalmente, valendo a igualdade acima para todo $a \in U$, podemos escrever

$$df = \sum_{i=1}^m \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) dx_i.$$

(2) - O Gradiente de uma Função Diferenciável. - O produto interno natural induz um isomorfismo entre \mathbb{R}^m e seu dual $(\mathbb{R}^m)^*$. Tal isomorfismo faz corresponder a cada vetor $v \in \mathbb{R}^m$ o funcional $v^* \in (\mathbb{R}^m)^*$ com $v^*(x) = \langle v, x \rangle$ para todo vetor $x \in \mathbb{R}^m$. Se $v = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)^T$ então $v^*(e_1) = \alpha_1, \dots, v^*(e_m) = \alpha_m$, logo a matriz de v^* em relação à base canônica é $(\alpha_1, \dots, \alpha_m)$. A existência deste isomorfismo é responsável pelo fato de que no cálculo vetorial clássico não ocorrem funcionais lineares: em vez de um funcional, toma-se o produto interno $\langle v, x \rangle$ de um vetor fixo v por um vetor variável x . A própria expressão $\Phi(x) = c_1 x_1 + \dots + c_m x_m$ que dá o valor do funcional $\Phi(x)$ é o produto interno de x pelo vetor $v = (c_1, \dots, c_m)^T$, ou seja, $\Phi = v^*$.

Dada uma função diferenciável $f: U \rightarrow \mathbb{R}$, definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, definimos o gradiente de f no ponto $a \in U$ como o vetor $\nabla f(a)$, que corresponde ao funcional $df(a)$ segundo o isomorfismo acima descrito. Isto significa, por definição, que

$\langle \nabla f(a), e_i \rangle = df(a)e_i$; (aqui $df(a)$ identificada com a sua matriz), em -
tão

$$\nabla f(a) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(a), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_m}(a) \right]^T.$$

Teorema 1.3.1 - Seja $f:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$.

As seguintes afirmações são equivalentes:

- (i) - f é diferenciável e a aplicação derivada $f':U \longrightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ é contínua;
- (ii) - as funções coordenadas $f_1, \dots, f_n:U \longrightarrow \mathbb{R}$ da aplicação diferenciável f possuem derivadas parciais contínuas $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}:U \longrightarrow \mathbb{R}$;
- (iii) - Para cada $h \in \mathbb{R}^n$, existe a derivada direcional $\partial f / \partial h(x)$ em qualquer ponto $x \in U$ e a aplicação $\partial f / \partial h:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ é contínua. (Para demonstração ver [01], pág. 249).

Diz-se que a aplicação $f:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ é de classe C^1 no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, e escreve-se $f \in C^1$ para significar que f cumpre uma das (e, portanto todas as) condições do teorema acima.

Em particular, $f \in C^1$ se, e somente se, cada uma das suas coordenadas for de classe C^1 .

Uma aplicação $f:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, diz-se/ duas vezes diferenciável no ponto $a \in U$ quando existir um aberto V , com $a \in V \subset U$, para o qual se cumprem as condições abaixo:

- (1) - f é diferenciável em V e a aplicação derivada $f':V \longrightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ é a diferencial no ponto a ;
- (2) - cada derivada parcial $\partial f_i / \partial x_j:V \longrightarrow \mathbb{R}$ é uma função diferenciável no ponto a ;
- (3) - para cada vetor $h \in \mathbb{R}^m$, a derivada direcional $\partial f / \partial h:V \longrightarrow \mathbb{R}^n$ é uma aplicação diferenciável no ponto a .

Como no teorema 1.3.1 as três condições acima são equivalentes, de modo que f cumpre uma delas se, e somente se, cumprir todas.

Quando $f:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ for duas vezes diferenciável no ponto $a \in U \subset \mathbb{R}^m$, sua derivada segunda no ponto a é uma aplicação bilinear. $f''(a): \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$, cujo valor no ponto $(v, w) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$ é o vetor $f''(a) \cdot v \cdot w = \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{\partial f}{\partial v} \right) (a) \in \mathbb{R}^n$. Como é natural escreveremos $\frac{\partial^2 f}{\partial w \partial v}(a)$.

Uma aplicação $f:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ diz-se de classe C^2 no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$ quando for diferenciável e sua derivada $f':U \longrightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ for de classe C^1 .

Isto equivale a dizer que, para $i \in \{1, \dots, n\}$ e $j, k \in \{1, \dots, m\}$ arbitrários, existem e são contínuas as derivadas segundas

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k} : U \longrightarrow \mathbb{R} \quad \text{das funções coordenadas de } f.$$

Por indução, dizemos que a aplicação $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definida / no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, é k vezes diferenciável no ponto $a \in U$, quando f for diferenciável num aberto V , com $a \in V \subset U$, e a aplicação derivada / $f': V \longrightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ for $k-1$ vezes diferenciável no ponto a , o que equivale a dizer que, para todo vetor $h \in \mathbb{R}^m$, a derivada direcional $\partial f / \partial h$ é uma / aplicação $k-1$ vezes diferenciável no ponto a , ou ainda, que as derivadas parciais $\partial f_i / \partial x_i : V \longrightarrow \mathbb{R}$ são todas funções $k-1$ vezes diferenciáveis no ponto a

Quando $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ for k vezes diferenciável no ponto a , define-se a k -ésima derivada (ou, derivada de ordem k) de f no ponto a como a / aplicação k -linear

$f^{(k)}(a) : \mathbb{R}^m \times \dots \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$, cujo valor no ponto / $(v_1, \dots, v_k) \in \mathbb{R}^m \times \dots \times \mathbb{R}^m$ é o vetor

$$f^{(k)}(a) \cdot v_1 \dots v_k = \frac{\partial^k f}{\partial v_k \partial v_{k-1} \dots \partial v_1} (a) \in \mathbb{R}^n.$$

A aplicação $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ diz-se de classe C^k no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$ quando for diferenciável e a sua derivada $f': U \longrightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ for uma aplicação de classe C^{k-1} .

Definimos a importante classe C^∞ das aplicações infinitamente / diferenciáveis como sendo a intersecção de todas as classes C^k ; $C^\infty = C^0 \cap C^1 \cap \dots$. Assim $f \in C^\infty$ se, e somente se, possuir derivadas de todas as ordens em cada / ponto de U . É claro que $C^\infty \subset \dots \subset C^k \subset \dots \subset C^1 \subset C^0$ (C^0 , por conveniência, indicará o conjunto das aplicações contínuas).

1.3.2 - Regra da Cadeia.

Teorema 1.3.2 (Regra da Cadeia)- Sejam $U \subset \mathbb{R}^m$ e $V \subset \mathbb{R}^n$ conjuntos abertos, $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação diferenciável no ponto $x_0 \in U$, com $f(x_0) \in V$, $g: V \longrightarrow \mathbb{R}^p$ uma aplicação diferenciável no ponto $y_0 = f(x_0) \in V$. Então a aplicação composta $g \circ f: U \longrightarrow \mathbb{R}^p$ é diferenciável no ponto x_0 e / $(g \circ f)'(x_0) = g'(y_0) \circ f'(x_0) = g'(f(x_0)) \circ f'(x_0) : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^p$.

Corolário 1.3.1 - Se $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$, $g: V \longrightarrow \mathbb{R}^p$ forem ambas / de classe C^k e $f(U) \subset V$, então $g \circ f: U \longrightarrow \mathbb{R}^p$ será também de classe C^k .

Corolário 1.3.2 - Sejam $Jf(x_0) = [\partial f_i / \partial x_j(x_0)]$, /

$Jg(x_0) = \left[\frac{\partial g_i}{\partial x_j}(f(x_0)) \right]$ e $J(g \circ f)(x_0) = \left[\frac{\partial (g_i \circ f)}{\partial x_j}(x_0) \right]$ as matrizes jacobianas das aplicações f , g e $g \circ f$ nos pontos indicados. Supondo-se f diferenciável no ponto x_0 e g diferenciável no ponto $f(x_0)$, tem-se

$$J(g \circ f)(x_0) = Jg(f(x_0)) \cdot Jf(x_0).$$

Observar que Jf é uma matriz $n \times m$ e Jg é $p \times n$ e $J(g \circ f)$ é $p \times m$. / Como as matrizes jacobianas são simplesmente as matrizes das derivadas, a igualdade $J(g \circ f)(x_0) = Jg(f(x_0)) \cdot Jf(x_0)$ é apenas a formulação da regra da cadeia em termos matriciais e não transformações lineares. Pela definição de multiplicação de matrizes temos, para cada $i = 1, 2, \dots, p$ e cada $j = 1, \dots, m$,

$$\frac{\partial (g_i \circ f)}{\partial x_j}(x_0) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial g_i}{\partial y_k}(f(x_0)) \cdot \frac{\partial f_k}{\partial x_j}(x_0).$$

Se f e g forem diferenciáveis em todos os pontos dos seus domínios, podemos / escrever, para quaisquer $i \in \{1, \dots, p\}$ e $j \in \{1, \dots, m\}$

$$\frac{\partial (g_i \circ f)}{\partial x_j} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial g_i}{\partial y_k} \circ f \right) \cdot \frac{\partial f_k}{\partial x_j}: U \longrightarrow \mathbb{R}$$

Corolário 1.3.3 - Seja $f:U \longrightarrow V$ uma bijeção de classe C^k ($k \geq 1$) entre abertos $U, V \subset \mathbb{R}^m$. Se a sua inversa $f^{-1}:V \longrightarrow U$ for diferenciável, então $f^{-1} \in C^k$. Diz-se então que f é um difeomorfismo de classe C^k .

Quando $f:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ for diferenciável no aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, tem / sentido, em cada ponto $x \in U$, considerar o determinante $Jf(x)$, da matriz / jacobiana $Jf(x)$, chamado determinante jacobiano de f no ponto x . Para que f seja um difeomorfismo é necessário que se tenha $\det Jf(x) \neq 0$ para todo $x \in U$.

Corolário 1.3.4 - (Regras de Derivação) - Sejam $f, g:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ diferenciáveis no ponto $x_0 \in U \subset \mathbb{R}^m$ e c um número real. Então $f+g:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ e $cf:U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ são diferenciáveis no ponto x_0 , com

$$(f+g)'(x_0) = f'(x_0) + g'(x_0) \quad \text{e} \quad (cf)'(x_0) = cf'(x_0).$$

Quando $n = 1$ e $g(x_0) \neq 0$ para todo $x \in U$, então $f/g:U \longrightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável / no ponto a , com

$$(f/g)' = \frac{g(x_0)f'(x_0) - f(x_0)g'(x_0)}{g(x_0)^2}.$$

Finalmente, se $\Phi:\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^p$ for bilinear, então / $\Phi(f, g):U \longrightarrow \mathbb{R}^p$, definida por $x \longrightarrow \Phi(f(x), g(x))$, é diferenciável no ponto x_0 com

$[\Phi(f, g)]'(x_0)h = \Phi(f'(x_0)h, g(x_0)) + \Phi(f(x_0), g'(x_0)h)$. Se $f, g \in C^k$ então $f+g, cf, f/g, \Phi(f, g) \in C^k$.

Em particular, quando $n = 1$ e $\phi: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ for a multiplicação de números reais, então

$$\phi(f, g) = f \cdot g \text{ e } (cf)'(x_0) = f'(x_0) \cdot g(x_0) + f(x_0) \cdot g'(x_0).$$

(para a demonstração do teorema 1.3.2 e seus corolários ver [01], págs. 257 a 262 ou [02], págs. 19 a 23).

1.3.3 - Teorema de Schwarz.

Teorema 1.3.3 - Seja $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação de classe C^2 ($U \subset \mathbb{R}^m$, aberto). Para cada $x \in U$, a segunda derivada $f''(x) \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$, é uma aplicação bilinear simétrica.

Corolário 1.3.5 - Seja $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^m$ de classe C^k . Então para cada $x \in U$, a k -ésima derivada $f^{(k)}(x) \in \mathcal{L}_k(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^m)$ é uma aplicação k -linear simétrica.

Corolário 1.3.6 - Sejam $U \subset \mathbb{R}^m$ e $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação de classe C^k . Para cada inteiro α , $1 \leq \alpha \leq k$, as derivadas parciais mistas de ordem α ,

$$\frac{\partial^\alpha f}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_\alpha}}(x), \quad 1 \leq i_1, \dots, i_\alpha \leq m,$$
 não dependem da ordem em que forem efetuadas as derivações.

(Para demonstração do teorema 1.3.3 e seus corolários ver [02] págs. 53-54).

1.3.4 - Fórmula de Taylor. - Dado um vetor $h \in \mathbb{R}^m$, escreveremos $h^{(j)} = (h, \dots, h) \in \mathbb{R}^m \times \dots \times \mathbb{R}^m$, para indicar a j -upla de vetores iguais a h . Assim, se $\phi: \mathbb{R}^m \times \dots \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$ for uma aplicação j -linear, $\phi \cdot h^{(j)}$ significará $\phi(h, \dots, h)$.

Aplicações j -lineares restritas a j -uplas da forma $h^{(j)}$ desempenham o papel de polinômios homogêneos de grau j (com m variáveis, se $h \in \mathbb{R}^m$) quando não se deseja usar coordenadas.

Teorema 1.3.4 (Taylor Infinitesimal) - Seja $U \subset \mathbb{R}^m$ aberto. Se f for s vezes diferenciável em U e, um ponto $a \in U$ existir $f^{(s+1)}(a)$, então/

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \dots + \frac{1}{(s+1)!} f^{(s+1)}(a)h^{(s+1)} + r(h),$$

onde $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{r(h)}{\|h\|^{(s+1)}} = 0$.

Teorema 1.3.5 (Taylor com Resto de Lagrange) - Supondo $[a, a+h] \subset U$, $f: U \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe C^{p+1} , $p+1$ vezes diferenciável no segmento $(a, a+h)$, então existe $\theta \in (0, 1)$ tal que

$$r_p(h) = \frac{h^{p+1}}{(p+1)!} d^{p+1}f(a + \theta h) \quad e,$$

$$f(a + h) = f(a) + f'(a)h + 1/(2!)f''(a)h^2 + \dots + \frac{1}{p!}f^{(p)}(a) \cdot h^p + r_p(h).$$

Observações:

(1) Usaremos $f^{(i)}(a) = D^i f(a)$, então, para o teorema 1.3.5

$$f(a + h) = \sum_{i=0}^p h^i \frac{D^i f(a)}{i!} + r_p(h).$$

(2) Utilizaremos também as aproximações de uma função $f(x)$ em torno de x_k :

(i) $f(x) \approx f(x_k) + \nabla^T f(x_k)(x - x_k)$, onde $\nabla f(x_k)$ é o gradiente de $f(x_k)$ e $h = x - x_k$;

(ii) $f(x) \approx f(x_k) + \nabla^T f(x_k)(x - x_k) + 1/2(x - x_k)^T \nabla^2 f(x_k)(x - x_k)$, onde $\nabla^2 f(x_k)$ é a matriz Hessiana de $f(x)$, avaliada em x_k , que será definida a seguir.

3 - Uma aplicação $f: U \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definida no subconjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^m$, chama-se analítica em U quando for C^∞ em U e, para cada $x \in U$, existe $\delta > 0$ tal que $\|h\| < \delta$ acarrete $x + h \in U$ e,

$$f(x + h) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{h^i}{i!} D^i f(x).$$

Isto é, a série de Taylor converge, na vizinhança da cada ponto de U , para o valor da aplicação f .

1.3.5 - Pontos Críticos.

Definição. - A diferencial segunda $D^2 f(a)$ é chamada a forma / Hessiana da função f no ponto a , conforme a definição abaixo:

Uma forma quadrática $H: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ é uma função cujo valor num vetor $h = (h_1, \dots, h_n)^T$ é dado por $\sum_{i,j=1}^n a_{ij} h_i h_j$, onde (a_{ij}) é uma matriz simétrica $n \times n$. Indica-se com a notação $h^T H h$ ou $h^T \nabla^2 f(a) h$ o valor da forma quadrática H no vetor h . Dessa maneira,

$$h^T H h = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} h_i h_j.$$

A forma Hessiana da função duas vezes diferenciável $f: U \longrightarrow \mathbb{R}$ no ponto $x \in U$ será indicada com $H(x)$, $H_f(x)$ ou $\nabla^2 f(x)$ caso seja necessário / ser mais explícito. Sabemos que $H(x) = D^2 f(x)$, portanto

$$h^T H(x) h = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) h_i h_j.$$

O teorema de Schwarz, teorema 1.3.3, garante que a matriz $\left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right]$,

chamada Hessiana de f no ponto x , é simétrica.

Definição. - Dada uma função diferenciável $f:U \rightarrow R$, um ponto $a \in U$ chama-se ponto crítico de f quando $df(a) = 0$ (ou $\nabla f(a) = 0$); / isto é,

$\frac{\partial f}{\partial x_1}(a) = \dots = \frac{\partial f}{\partial x_m}(a) = 0$. Diz-se que a função f tem/ um máximo (respectivamente, um mínimo) local no ponto $a \in U$ quando existir/ $\delta > 0$ tal que $\|h\| < \delta$ então $f(a+h) \leq f(a)$ (resp., $f(a) \leq f(a+h)$)/

Se f possuir um máximo local (ou mínimo local) no ponto a , / então a é um ponto crítico de f .

O ponto crítico a diz-se não degenerado quando a matriz / Hessiana nesse ponto for inversível; isto é,

$$\det \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a) \right) \neq 0.$$

Teorema 1.3.6 - Se $f:U \rightarrow R$ de classe C^2 . Todo ponto / crítico não degenerado $a \in U$ é um ponto crítico isolado.

O teorema 1.3.6 é uma consequência imediata do teorema seguinte.

Teorema 1.3.6a. - Seja $F = (f_1, \dots, f_n):U \rightarrow R^n$, onde cada $f_i:U \rightarrow R$ ($1 \leq i \leq n$) é diferenciável no ponto $a \in U \subset R^n$. Se a matriz $n \times n$, $H = [\partial f_i / \partial x_j(a)]$, tiver determinante não nulo então existe $\delta > 0$ tal / que $0 < \|x - a\| < \delta$ implica $F(x) \neq F(a)$. (Para obter o teorema 1.3.6 a / partir de 1.3.6a, basta tomar $f_i = \partial f / \partial x_i$; então $\partial f_i / \partial x_j = \partial^2 f / \partial x_j \partial x_i$).

Corolário 1.3.7 - O conjunto dos pontos críticos não degenerados de uma função de classe C^2 é enumerável.

Corolário 1.3.8 - Se todos os pontos críticos de uma função/ $f:U \rightarrow R$ de classe C^2 , não são degenerados, então em cada compacto $K \subset U$ há apenas um número finito deles.

Teorema 1.3.7 - Seja $f:U \rightarrow R$ uma função de classe C^2 , / $a \in U$ um ponto crítico de f e H a forma quadrática Hessiana de f no ponto a . Então

(i) - Se H for definida positiva ⁽¹⁾, a é um ponto de mínimo local não degenerado;

(ii) - Se H for definida Negativa ⁽²⁾, a é um ponto de máximo local não degenerado;

(iii) Se H for indefinida ⁽³⁾ a não é ponto de máximo local e nem de mínimo local para f .

(Para demonstração de 1.3.4, 1.3.5, 1.3.6, 1.3.6a e 1.3.7 e corolários 1.3.7 e 1.3.8 ver [01] págs. 150 a 158).

1.3.6 - Teorema da Função Implícita. - Uma decomposição em soma direta do tipo $R^{n+m} = R^n + R^m$ significa escolher uma partição $\{e_1, \dots, e_{n+m}\} = \{e_{i_1}, \dots, e_{i_n}\} \cup \{e_{j_1}, \dots, e_{j_m}\}$ da base canônica de R^{n+m} . Dada a partição, pomos $R^m \subset R^{n+m}$ como sendo o subespaço gerado pelos vetores $\{e_{j_1}, \dots, e_{j_m}\}$. Portanto R^{n+m} é a soma direta desses dois subespaços e escrevemos $R^{n+m} = R^n \oplus R^m$.

Dada uma decomposição em soma direta $R^{n+m} = R^n \oplus R^m$, escrevemos os elementos de R^{n+m} como pares $z = (x, y)$, $x \in R^n$ e $y \in R^m$.

Dada uma aplicação linear sobrejetiva $T: R^{n+m} \rightarrow R^n$, existe uma decomposição em soma direta do tipo $R^{n+m} = R^n \oplus R^m$ tal que $T|_{R^n}: R^n \rightarrow R^n$ é um isomorfismo. Basta observar que os vetores Te_1, \dots, Te_{n+m} geram o R^n , portanto é possível selecionar dentre eles uma base $\{Te_{i_1}, \dots, Te_{i_n}\}$.

Desta forma, no teorema 1.3.8 abaixo, a decomposição em soma direta $R^{n+m} = R^n \oplus R^m$ pode ser sempre tomada com R^n e R^m gerados pelos eixos coordenados.

Teorema 1.3.8 - (Teorema da Função Implícita)- Sejam $U \subset R^{n+m}$ e $f: U \rightarrow R^n$ uma aplicação de classe C^k ($k \geq 1$). Suponhamos que $R^{n+m} = R^n \oplus R^m$ seja uma decomposição em soma direta tal que, para $z_0 = (x_0, y_0) \in U$, a primeira derivada parcial $\partial_1 f(z_0): R^n \rightarrow R^n$ seja um isomorfismo (equivalentemente, o determinante Jacobiano $\det Jf(z_0) = (\partial_1 f_i(x_0) / \partial x_i)$ é diferente de zero), então existem abertos V, Z (onde $y_0 \in V \subset R^m$, $z_0 \in Z \subset U$) com a seguinte propriedade: Para cada $y \in V$ há um único $\xi(y) \in R^n$ tal que $(\xi(y), y) \in Z$, $f(\xi(y), y) = c$. A aplicação $\xi: V \rightarrow R^n$ assim definida é de classe C^k e sua derivada é dada por $\xi'(y) = -[\partial_1 f(\xi(y), y)]^{-1} \cdot \partial_2 f(\xi(y), y)$. A aplicação ξ diz-se definida implicitamente pela equação $f(x, y) = c$.

(1) Dizemos que uma forma quadrática é definida positiva quando tivermos $h^T H h > 0$ para todo $h \neq 0$ em R^n :

(2) Uma forma quadrática H é definida negativa quando tivermos $h^T H h < 0$ para todo $h \neq 0$ em R^n ;

(3) Uma forma quadrática será indefinida quando existirem vetores h_1, h_2 em R^n tais que $h_1^T H h_1 > 0$ e $h_2^T H h_2 < 0$.

(Para demonstração ver [01], pág. 297, ou [02] pág. 73, ou ainda, [03], págs. 219-220)

1.4 - Condições de Otimalidade para Extremos com Restrições.

1.4.1 - Condições Necessárias de 1ª Ordem para Extremos com Restrições de Desigualdade.

Fazemos um estudo sobre condições necessárias de 1ª ordem para problemas com restrições de desigualdade.

Iniciamos formulando o problema de programação matemática a ser discutido tanto na presente seção, como em todo o trabalho:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar } f(x) & \\ \text{Sujeita a} & \end{array} \quad \text{(A)} \quad (1.4.1)$$

$$\begin{array}{ll} g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m & (1.4.2) \\ x \in X \subset \mathbb{R}^n. & \end{array}$$

As funções f e g_1, \dots, g_m são supostas como sendo de classe C^1 , para as condições de 1ª ordem, sobre algum conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$. Seja $D \subset X$ o conjunto viável, ou domínio viável, para o problema (A); isto é, conjunto dos pontos $x \in X$ satisfazendo (1.4.2). Os elementos que pertencem a este conjunto são chamados pontos viáveis.

Um ponto $x^* \in D$ é um ponto de mínimo local do problema (A), ou uma solução local de (A), se existir $\delta > 0$ tal que $f(x) \geq f(x^*)$, (1.4.3) para todo $x \in D \cap V(x^*, \delta)$ (Bola, ou vizinhança, de centro x^* e raio δ). Se (1.4.3) for satisfeita para todo $x \in D$ então x^* é um mínimo global, ou solução global do problema (A).

Antes de continuarmos esse estudo necessitamos de:

(i) Teorema 1.4.1 - Suponhamos que $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja de classe C^1 em x^* . Se existir um vetor z tal que $z^T \nabla f(x^*) < 0$ então existe $\lambda > 0$ tal que $f(x^* + \lambda z) < f(x^*)$ para cada λ suficientemente pequeno, desde que z seja uma direção de decréscimo de f para x^* .

Demonstração. - Pela diferenciabilidade de f em x^* , devemos ter $f(x^* + \lambda z) = f(x^*) + df(x^*) \cdot \lambda z + \lambda \|z\| \rho(\lambda z)$, com $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho(\lambda z) = 0$. Como $df(x^*) = \nabla f(x^*)$, podemos escrever, (ver seção 1.3),

$$f(x^* + \lambda z) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^T \lambda z + \lambda \|z\| \rho(\lambda z), \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho(\lambda z) = 0,$$

ou

$$\frac{f(x^* + \lambda z) - f(x^*)}{\lambda} = \nabla f(x^*)^T \cdot z + \|z\| \rho(\lambda z), \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho(\lambda z) = 0.$$

Desde que $\nabla f(x^*)^T z < 0$ e $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho(\lambda z) = 0$, existe $\lambda > 0$, suficientemente pequeno, tal que $\nabla f(x^*)^T z + \frac{\lambda}{\|z\|} \rho(\lambda z) < 0$. Como queríamos demonstrar. \square

(ii) Definição. - Seja D um conjunto não vazio, $D \subset \mathbb{R}^n$, e seja $x^* \in \bar{D}$, (fecho de D , ver seção 1.2.7). Um cone de direções viáveis de D para x^* , denotado por Z , é dado por

$$Z = \{ z : z \neq 0, \text{ e } x^* + \lambda z \in D, \text{ para todo } \lambda \in (0, \delta) \text{ para algum } \delta > 0 \}.$$

Observamos que a partir da definição acima, é claro que um pequeno movimento partindo de x^* na direção de um $z \in Z$ é guiado por pontos/viáveis. Além disso, do teorema 1.4.1, se $z^T \nabla f(x^*) < 0$, então z é uma direção satisfatória, já que procuramos minimizar $f(x)$; isto é, partindo de x^* um pequeno movimento na direção de z reduzirá o valor de f . Como mostra o teorema 1.4.2 que segue, se x^* for um ponto de mínimo local e se $z^T \nabla f(x^*) < 0$, então $z \notin Z$; isto é, uma condição necessária para otimalidade/local é que toda a direção satisfatória não seja uma direção viável. Este fato é ilustrado pela figura que segue, onde os vértices dos cones F_0 e Z são tomados em x^* , por conveniência.

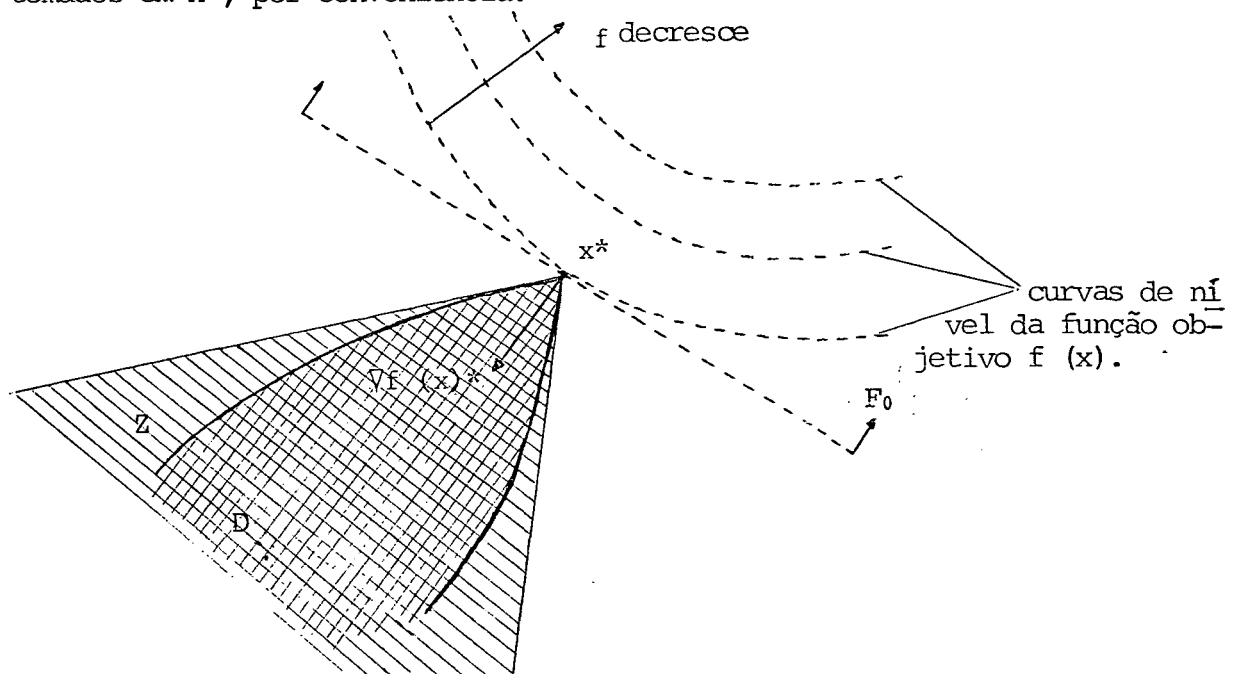


Figura 1.4.1 - Ilustração da condição necessária $F_0 \cap Z = \emptyset$.

Voltando à nossa análise sobre as condições de otimalidade de 1ª ordem para o problema (A), observamos que uma condição necessária de otimalidade local para x^* é que $F_0 \cap Z = \emptyset$; F_0 é um semi-espaço aberto definido em termos do vetor gradiente $\nabla f(x^*)$, e Z é um cone de direções viáveis, que não é necessariamente definido em termos dos gradientes das funções envolvidas.

Como o teorema 1.4.2 seguinte indica, poderemos definir um cone Z_0 em termos dos gradientes das restrições $g_i(x)$, $i = 1, \dots, m$, tal que $Z_0 \subset Z$. Desde que a condição $F_0 \cap Z = \emptyset$ deve ser satisfeita para x^* , e desde que $Z_0 \subset Z$, então $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$ é também uma condição necessária de otimalidade. Daí, como F_0 e Z_0 são definidos em termos dos vetores gradientes, usaremos a condição $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$ para desenvolver as condições de otimalidade creditadas a Kuhn-Tucker.

Teorema 1.4.2 - Sejam $g_i: R^n \rightarrow R$, $i = 1, \dots, m$ e $D \subset R^n$ um conjunto aberto não vazio. Consideremos o problema (A). Seja x^* um ponto viável, e seja $I(x^*) = \{i: g_i(x^*) = 0\}$. Além disso, suponhamos que f e g_i , para $i \in I(x^*)$ sejam diferenciáveis em x^* e que g_i para $i \notin I(x^*)$ seja contínua em x^* . Se x^* for uma solução ótima local, então $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$, onde /

$$F_0 = \{z: z^T \nabla f(x^*) < 0\}$$

$$Z_0 = \{z: g_i(x^*)^T z \geq 0\}, \quad (i \in I(x^*)).$$

Demonstração. - Seja $z \in Z_0$. Desde que $x^* \in D$ e D é aberto, / existe um $\delta_1 > 0$ tal que $x^* + \lambda z \in D$, $\lambda \in (0, \delta_1)$. (1.4.4)

Também, desde que $z \in Z_0$, $z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0$ para cada $i \in I(x^*)$, e analogamente / ao teorema 1.4.1, existe $\delta_2 > 0$ tal que

$$g_i(x^* + \lambda z) \geq g_i(x^*) = 0, \quad \text{para } \lambda \in (0, \delta_2) \text{ e } i \in I(x^*). \quad (1.4.5)$$

Finalmente, desde que $g_i(x^*) > 0$ e g_i é contínua em x^* se $i \notin I(x^*)$, existe / $\delta_3 > 0$ tal que $g_i(x^* + \lambda z) > 0$, para $\lambda \in (0, \delta_3)$ e $i \notin I(x^*)$. (1.4.6)

A partir de (1.4.4), (1.4.5) e (1.4.6) é claro que pontos da forma $x^* + \lambda z$ / são viáveis para o problema (A) para cada $\lambda \in (0, \delta)$, onde $\delta = \min(\delta_1, \delta_2, \delta_3)$. Assim $z \in Z$, onde Z é um cone das direções da região viável para x^* . Ainda necessitamos mostrar que:

$$(a) F_0 \cap Z = \emptyset$$

$$(b) F_0 \cap Z_0 = \emptyset.$$

Demonstraremos (a) por contradição. Suponhamos que existe um / vetor $z \in F_0 \cap Z$. Então pelo teorema 1.4.1, existe $\lambda > 0$, suficientemente pequeno, tal que $f(x^* + \lambda z) < f(x^*)$, para cada $\lambda > 0$, {suficientemente pequeno} (1.4.7)

Além disso, pela definição (ii), $x^* + \lambda z \in D$, $\lambda > 0$. (1.4.8)

A suposição que x^* seja uma solução ótima local do problema não é compatível com (1.4.7) e (1.4.8) (Observar ilustração anterior), e concluímos que / $F_0 \cap Z = \emptyset$.

Para demonstrarmos (b) observamos que na primeira parte da / demonstração a partir de

$z \in Z_0$ mostramos que $z \in Z$, ou seja $Z_0 \subset Z$ e, como $F_0 \cap Z = \emptyset$, por (a), temos que $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$, logo a demonstração está completa. \square

Há vários casos onde as condições necessárias do teorema 1.4.2 são satisfeitas trivialmente também por pontos não ótimos. Alguns desses casos são discutidos a seguir.

Suponhamos \bar{x} sendo um ponto viável tal que $\nabla f(\bar{x}) = 0$. Claramente, $F_0 = \{z: z^T \nabla f(\bar{x}) < 0\} = \emptyset$ e daí $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$. Assim, todo ponto \bar{x} com $\nabla f(\bar{x}) = 0$ satisfaz a condição de otimalidade do teorema 1.4.2. Também, para todo \bar{x} com $\nabla g_i(\bar{x}) = 0$ para algum i satisfaz aquelas condições. Consideremos agora o seguinte exemplo com uma restrição de igualdade:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } f(x) \\ & \text{Sujeita a } g(x) = 0. \end{aligned}$$

A restrição de igualdade $g(x) = 0$ pode ser trocada pelas desigualdades $g_1(x) = g(x) > 0$ e $g_2(x) = -g(x) \geq 0$. Seja \bar{x} um ponto viável qualquer. Então $g_1(\bar{x}) = g_2(\bar{x}) = 0$. Notar que $\nabla g_1(\bar{x}) = -\nabla g_2(\bar{x})$ e, portanto, não existe z tal que $\nabla g_1(\bar{x})^T z > 0$ e $\nabla g_2(\bar{x})^T z > 0$. Portanto $Z_0 = \emptyset$ e, daí $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$. Por outro lado, a condição necessária do teorema 1.4.2 é satisfeita por todas as soluções viáveis e daí a sua fraca utilidade.

Necessitamos de mais alguns conceitos antes de tratarmos das condições de otimalidade de Kuhn-Tucker.

(1) Definição - Um hiperplano H em \mathbb{R}^n é uma coleção de pontos da forma $\{x: p^T x = \alpha\}$, onde p é um vetor não nulo de \mathbb{R}^n e $\alpha \in \mathbb{R}$. O vetor p é chamado o vetor normal do hiperplano. Um hiperplano define dois semi-espacos fechados $H^+ = \{x: p^T x \geq \alpha\}$ e $H^- = \{x: p^T x \leq \alpha\}$ e dois semi-espacos abertos $\{x: p^T x > \alpha\}$ e $\{x: p^T x < \alpha\}$.

Observamos que se $x \in \mathbb{R}^n$, então $x \in H^+$, ou $x \in H^-$, ou ainda $x \in H^+ \cap H^-$. Também, um hiperplano H e o correspondente semi-espaco podem ser escritos em relação a um ponto $\bar{x} \in H$. Se $\bar{x} \in H$, então $p^T \bar{x} = \alpha$, e daí todo $x \in H$ deve satisfazer $p^T x - p^T \bar{x} = \alpha - \alpha = 0$, isto é, $p^T (x - \bar{x}) = 0$. Daí temos $H^+ = \{x: p^T (x - \bar{x}) \geq 0\}$ e $H^- = \{x: p^T (x - \bar{x}) \leq 0\}$. A figura que se segue mostra um hiperplano H passando por \bar{x} e possuindo um vetor normal p . (Figura 1.4.2)

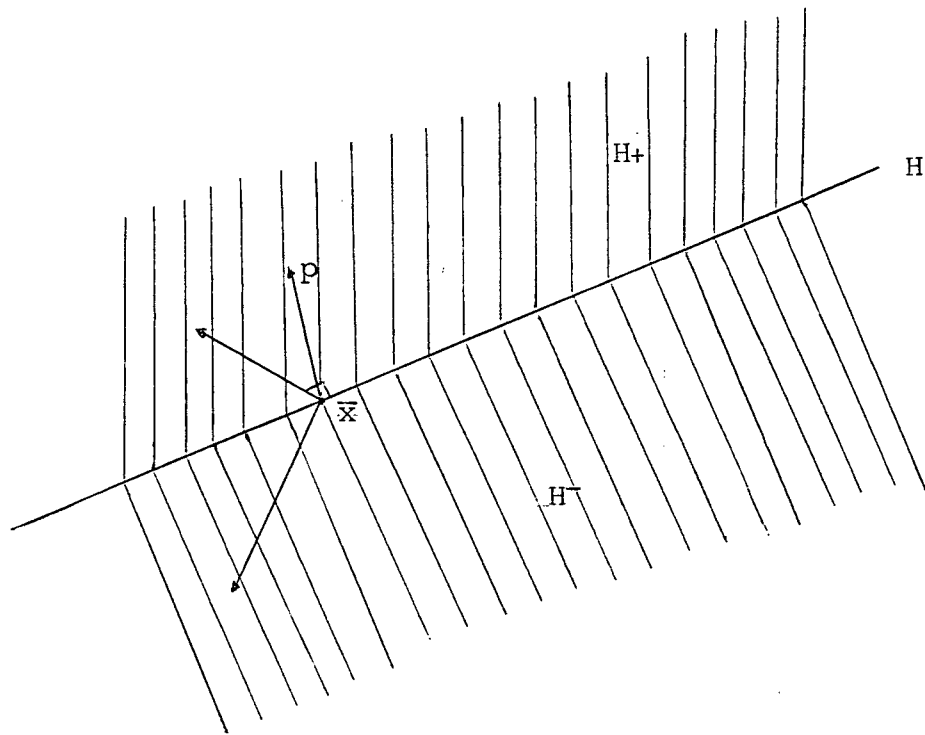
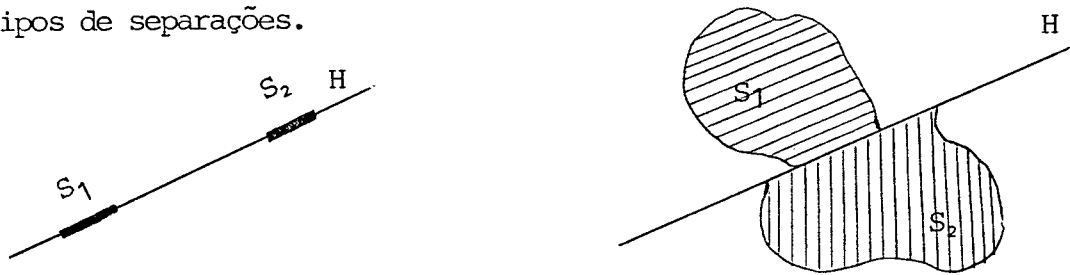


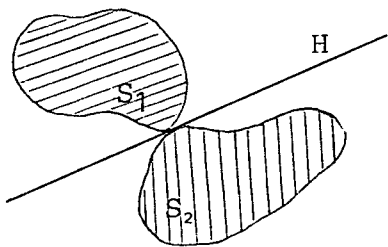
Figura 1.4.2

(2) Definição. - Sejam S_1 e S_2 conjuntos não vazios em \mathbb{R}^n . Um hiperplano $H = \{x: p^T x = \alpha\}$ é dito separadôr de S_1 e S_2 se $p^T x \geq \alpha$ para/ cada $x \in S_1$ e $p^T x \leq \alpha$ para cada $x \in S_2$. As figuras abaixo, seguintes, mos tram tipos de separações.

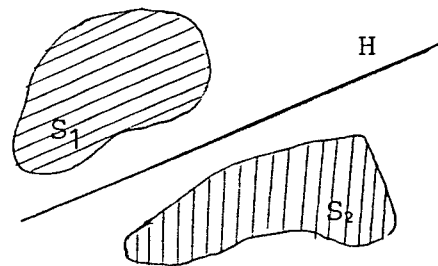


(a) separação imprópria.

(b) separação própria



(c) separação estrita.



(d) separação forte.

($p^T x > \alpha$ para cada $x \in S_1$ e $p^T x < \alpha$ para cada $x \in S_2$)

($p^T x > \alpha + \epsilon$, para cada $x \in S_1$ e $p^T x < \alpha$, para cada $x \in S_2$)

Figura 1.4.3.

(3) Observações. - Dados um conjunto $S \subset \mathbb{R}^n$, não vazio e um ponto $y \notin S$, devemos ter:

(3.1) - Existe um hiperplano que separa estritamente S e y , ou

(3.2) - Existe um hiperplano que separa fortemente S e y .

(3.3) - Existe um vetor p tal que $p^T y > \sup\{p^T x : x \in S\}$, ou

(3.4) Existe um vetor p tal que $p^T y < \inf\{p^T x : x \in S\}$.

Notar que (3.1) e (3.2) são equivalentes somente se y for um ponto.

(4) - O teorema de Farkas foi extensivamente usado na formulação das condições de otimalidade de problemas de programação linear e não linear. O teorema pode ser formulado como segue:

Seja A uma matriz $m \times n$ e $c \in \mathbb{R}^n$. Um e somente um dos seguintes sistemas possui solução:

Sistema 1. $Ax \leq 0$ e $c^T x > 0$, para qualquer $x \in \mathbb{R}^n$;

Sistema 2. $A^T y = c$ e $y \geq 0$, para algum $y \in \mathbb{R}^m$.

Demonstração. - Suponhamos que o sistema 2 tenha solução; isto é, existe $y \geq 0$ tal que $A^T y = c$. Seja x tal que $Ax \leq 0$. Então $c^T x = y^T Ax \leq 0$. Daí o sistema 1 não possui solução. Formemos o conjunto $S = \{x : x = A^T y, y \geq 0\}$. Notar que $c \notin S$. A partir da observação (3), suponhamos que exista um vetor $p \in \mathbb{R}^n$ e um escalar α tal que $p^T c > \alpha$ e $p^T x \leq \alpha$, para todo $x \in S$. Desde que $0 \in S$, então $\alpha \geq 0$ e daí $p^T c > 0$. Também $p^T A^T y = y^T Ap \leq \alpha$ para todo $y \geq 0$. Desde que $y \geq 0$ pode ser tomado arbitrariamente grande, a última desigualdade implica que $Ap \leq 0$. Logo, construímos um vetor $p \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ap \leq 0$ e $p^T c > 0$. Daí o sistema 1 possui uma solução, e o teorema está demonstrado. ■

Observamos que se as colunas de A^T forem a_1, a_2, \dots, a_m , então o sistema 2 possui uma solução se c permanecer no cone convexo gerado por a_1, a_2, \dots, a_m . O sistema 1 possui uma solução se o cone fechado $\{x : Ax \leq 0\}$ e o semi-espaco aberto $\{x : c^T x > 0\}$ possuírem uma intersecção não vazia. Observe as figuras: (fig. 1.4.4)

Definição: - Definimos a função lagrangiana associada ao problema (A), como

$$L(u, x) = f(x) - \sum_{i=1}^m u_i g_i(x), \text{ e podemos demonstrar o seguinte/}$$

teorema:

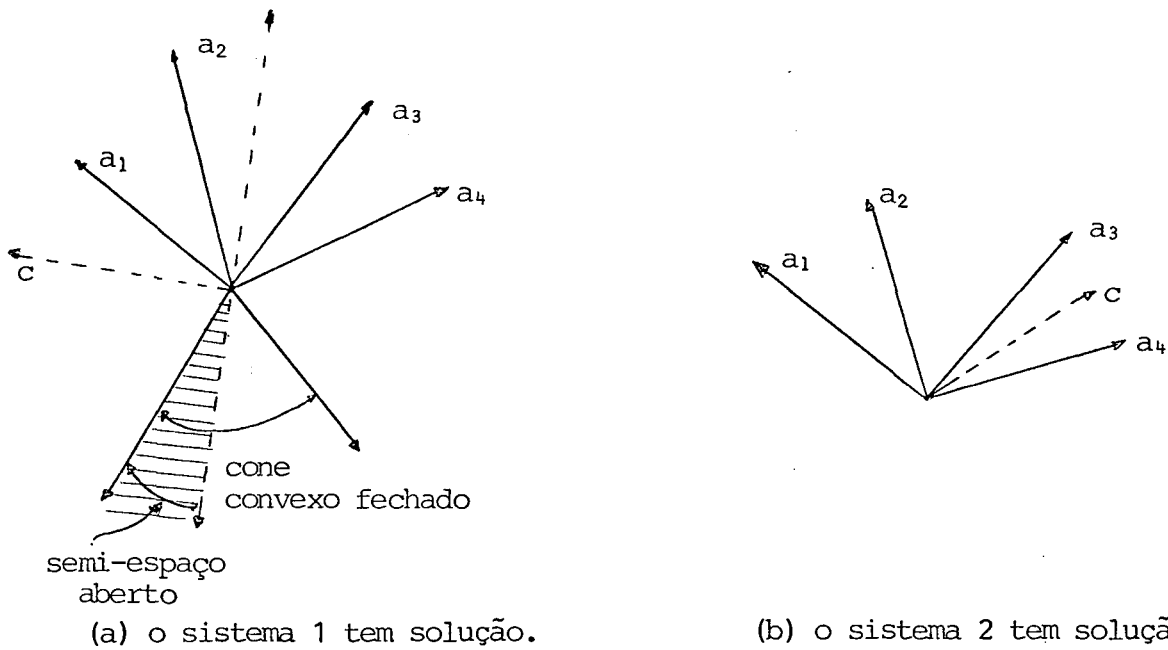


Figura 1.4.4

Teorema 1.4.3 - (Existência dos Multiplicadores de Lagrange).

Suponhamos que $x^* \in D \subset X$. Então $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$ se, e somente se, existir um vetor u^* tal que

$$\nabla_x L(x^*, u^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(x^*) = 0; \tag{1.4.7}$$

$$u_i^* g_i(x^*) = 0, i=1, \dots, m; \tag{1.4.8}$$

$$u_i^* \geq 0. \tag{1.4.9}$$

Demonstração. - A princípio relembremos que ,

$F_0 = \{z: z^T \nabla f(x^*) < 0\}$ e $Z_0 = \{z: z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, i \in I(x^*)$. O conjunto Z_0 nunca é vazio, já que a origem sempre pertence a ele, e $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$ / se, e somente se, para todo z satisfazendo

$$(a) z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, i \in I(x^*), \text{ tivermos}$$

$$(b) z^T \nabla f(x^*) \geq 0.$$

Segue do teorema de Farkas (sistema 2) que (b) é verdadeira para todo z que satisfaça (a), se, e somente se, existir um vetor $u^* \geq 0$ / tal que

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(x^*) \text{ ou } \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(x^*) = 0.$$

Fazendo $u_i^* = 0$ para $i \notin I(x^*)$, concluímos que $F_0(x^*) \cap Z_0(x^*) = \emptyset$ se, e somente se, (1.4.7) a (1.4.9) forem satisfeitas. \square

É preciso saber, na aplicação do teorema 1.4.3, determinar / se o conjunto $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$. Claramente, supondo-se que as funções sejam diferenciáveis, $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$ é condição necessária e suficiente para a existência do vetor u^* , chamado variável dual ou multiplicador de Lagrange. Observamos também que o teorema 1.4.3 reduz a condição necessária geométrica de otimalidade $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$, do teorema 1.4.2, a uma formulação em ter -

dos gradientes da função objetivo e das restrições correspondentes.

Várias condições foram impostas para garantir $F_0 \cap Z_0 = \emptyset$ / para um mínimo local. Primeiro formularemos uma condição que restringe as / funções restrições por uma condição de regularidade chamada qualificação / das restrições, introduzidas por Kuhn-Tucker (1951).

Atualmente essas condições de regularidade são chamadas con- dições de 1ª ordem. Iniciamos nossa discussão introduzindo a noção de "Co -- ne das Tangentes."

Definição. - (Cone das Tangentes). - Se $S \subset \mathbb{R}^n$ não vazio, e seja $x^* \in \bar{S}$. O cone das tangentes de S para x^* , denotado por T , é o conjun- to de todas as direções z tais que $z = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k (x_k - x^*)$, onde $\lambda_k > 0$, / $x_k \in S$ para cada k , e $x_k \rightarrow x^*$.

Lema 1.4.1 - (Qualificação de 1ª Ordem das Restrições).- Seja $S \subset \mathbb{R}^n$, não vazio, e $x^* \in S$. Além disso, suponhamos que $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja diferenciável para x^* . Se x^* resolver localmente o problema:

Minimizar $f(x)$

Sujeita a $x \in S$,

então $F_0 \cap T = \emptyset$, onde $F_0 = \{z: z^T \nabla f(x^*) < 0\}$ e T é o cone das tangentes / de S para x^* .

Demonstração.- Seja $z \in T$; isto é, $z = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k (x_k - x^*)$, on- de $\lambda_k > 0$, $x_k \in S$ para cada k , e $x_k \rightarrow x^*$.

(Observar que se z pertencer ao cone das tangentes então existe uma sequên- cia viável $\{x_k\}$ convergindo para x^* tal que as direções das cordas $x_k - x^*$ convergem para z).

Por diferenciabilidade de f para x^* , temos

$$f(x_k) - f(x^*) = \nabla f(x^*)^T (x_k - x^*) + \|x_k - x^*\| \rho(x_k - x^*),$$

$$\lim_{x_k \rightarrow x^*} \rho(x_k - x^*) = 0. \text{ (Ver seção 1.3).}$$

Notando que a otimalidade local de x^* , para k convenientemen- te grande, temos $f(x_k) \geq f(x^*)$, e a partir da expressão acima

$$\nabla f(x^*)^T (x_k - x^*) + \|x_k - x^*\| \rho(x_k - x^*) \geq 0.$$

Multiplicando por $\lambda_k > 0$ e fazendo o limite quando $k \rightarrow \infty$, a desigual -- dade acima implica que $z^T \nabla f(x^*) \geq 0$. Logo mostramos que $z \in T$ implica que / $z^T \nabla f(x^*) \geq 0$, e daí $F_0 \cap T = \emptyset$, e a demonstração está completa. ■

No teorema 1.4.4, que segue, formularemos as condições de / Kuhn-Tucker sobre a qualificação das restrições T .

Teorema 1.4.4 - (Condições Necessárias de 1ª Ordem de Kuhn-Tucker). - Se as funções f, g_1, \dots, g_m forem diferenciáveis para x^* e se / a qualificação de 1ª ordem das restrições for satisfeita para x^* ($F_0 \cap T = \emptyset$), então a condição necessária para que x^* seja um ponto de mínimo local do problema (A) é que exista u^* tal que (x^*, u^*) satisfaça:

$$g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.4.10)$$

$$u_i g_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.4.11)$$

$$u_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.4.12)$$

$$\nabla L(x, u) = 0. \quad (1.4.13)$$

Demonstração. - Do lema 1.4.1 $F_0 \cap T = \emptyset$, onde $F_0 = \{z: z^T \nabla f(x^*) < 0\}$ e $T = \{z: z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, \text{ para } i \in I(x^*)\}$ é o cone das tangentes da região viável para x^* . Por outro lado o seguinte sistema / $z^T \nabla f(x^*) < 0, z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, \text{ para } i \in I(x^*)$ não possui solução, pelo teorema de Farkas; Além disso, pelo teorema 1.4.3, existe u^* tal que (1.4.10) a (1.4.13) sejam satisfeitas, e a demonstração está completa. ■

As condições de Kuhn-Tucker foram desenvolvidas por muitos / autores sob várias qualificações das restrições. Apresentamos, a seguir, / uma das mais importantes.

Definição: (Qualificação de 1ª Ordem das Restrições). - Seja / x^* um ponto satisfazendo $g_i(x) \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$, e supônhamos que as / funções $g_i(x)$ sejam de classe C^1 . Então a qualificação de 1ª ordem das res - trições é satisfeita para x^* se para algum valor não nulo de z , tal que / $z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0$ para todo $i \in I(x^*)$, z for tangente a um arco de classe C^1 , / arco partindo de x^* e contido na região viável.

Para este fim um arco é um caminho diferenciável $\alpha(\theta)$ em \mathbb{R}^n parametrizado pela variável $\theta \geq 0$ no intervalo $[0, \epsilon]$, $\epsilon \geq 0$, então temos $\alpha(0) = x^*$ e $\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\alpha(\theta) - \alpha(0)}{\theta}$. Denotaremos esta tangente por $D\alpha(\theta)$ e a / sua derivada segunda por $D^2\alpha(\theta)$, se for duas vezes diferenciável.

Para concluir esta subseção relembremos o teorema, (ver seção 1.2).

Teorema 1.4.5 - (Condições Necessárias de 1ª Ordem para um Mí - nimo sem Restrições). - A condição necessária para que uma função diferenciá - vel tenha um mínimo local sem restrições em um ponto x^* é que $\nabla f(x^*) = 0$.

O estudo realizado até aqui dá uma caracterização de 1ª Ordem para um mínimo local, que envolve as derivadas parciais de 1ª ordem / das funções do problema. Não examina, contudo, a curvatura das funções, / que é examinada pelas derivadas parciais de 2ª ordem. Curvatura é a distinção entre as funções lineares e não lineares. As condições necessárias de primeira ordem indicam que x^* é um candidato a ponto de mínimo. Mostraremos a seguir que as condições de 2ª ordem dão a informação adicional para que x^* seja um ponto de mínimo local do problema (A).

1.4.2 - Condições Necessárias e Suficientes de 2ª Ordem. - /

Os resultados seguintes foram obtidos por Fiacco e McCormick [04].

Na discussão que segue vamos supor que as funções f e g_i , / $i = 1, 2, \dots, m$, do problema (A) sejam de classe C^2 . Uma qualificação de 2ª ordem das restrições será formulada primeiro. Seja $x \in X$ e definamos

$$\tilde{Z}_0(x^*) = \{z: z^T \nabla g_i(x^*) = 0, i \in I(x^*)\} \quad (1.4.14)$$

Uma qualificação de 2ª ordem das restrições é satisfeita para $x \in D \subset X$ se todo $z \in \tilde{Z}_0(x^*)$, não nulo, for tangente a um arco duas vezes diferenciável contido na fronteira D ; isto é, para cada $z \in \tilde{Z}_0(x^*)$ existe um caminho de classe C^2 definido sobre $[0, \epsilon] \subset \mathbb{R}$ com imagem em \mathbb{R}^n tal que $\alpha(0) = x^*$,

$$g_i(\alpha(\theta)) = 0, i \in I(x^*), \quad (1.4.15)$$

para cada $0 \leq \theta < \epsilon$, $\epsilon > 0$, e

$$\frac{d\alpha(0)}{d\theta} = \lambda z \quad (1.4.16)$$

para $\lambda > 0$. Temos então

Teorema 1.4.6 (Condições Necessárias de 2ª Ordem). - Seja / x^* uma solução do problema (A). Suponhamos que as qualificações de 1ª e 2ª ordens das restrições sejam satisfeitas e que exista u^* tal que (1.4.10) e (1.4.13), (ver teorema 1.4.4), sejam satisfeitas por (x^*, u^*) , então a condição necessária para x^* ser de mínimo local do problema (A) é que para / $z \neq 0$ tal que $z \in \tilde{Z}_0(x^*)$, tenhamos

$$z^T [\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla^2 g_i(x^*)] z \geq 0. \quad (1.4.17)$$

Demonstração. - Seja $z \neq 0$, $z \in \tilde{Z}_0(x^*)$, e $\alpha(\theta)$ o caminho definido na qualificação de 2ª ordem das restrições; isto é, $\alpha(0) = x^*$, / $d\alpha(0)/d\theta = z$ (desde que $\tilde{Z}_0(x^*)$ é um cone, podemos supor sem perda de generalidade, que $\lambda=1$). Fazendo $\frac{d^2 \alpha(0)}{d\theta^2} = w$, a partir de (1.4.15) e da regra da cadeia, (ver subseção 1.3.2), segue que:

$$\frac{dg_i(\alpha(0))}{d\theta} = \nabla g_i(x^*) \cdot \frac{d\alpha(0)}{d\theta} = 0 \quad e,$$

$$\frac{d^2g_i(\alpha(0))}{d\theta^2} = \nabla^2 g_i(x^*) \cdot \frac{d\alpha(0)}{d\theta} \frac{d\alpha(0)}{d\theta} + \frac{d^2\alpha(0)}{d\theta^2} \nabla g_i(x^*) = 0.$$

como $d\alpha(0)/d\theta = z$ e $d^2\alpha(0)/d\theta^2 = w$, obtemos

$$\frac{d^2g_i(\alpha(0))}{d\theta^2} = z^T \nabla^2 g_i(x^*) z + w^T \nabla g_i(x^*) = 0. \quad (1.4.18)$$

De (1.4.7) a (1.4.9) do teorema 1.4.3 (Existência dos multiplicadores de Lagrange), e da definição de $Z_0(x^*)$, obtemos

$$\frac{df(\alpha(0))}{d\theta} = z^T \nabla f(x^*) = z^T \left[\sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(x^*) \right] = 0. \quad (1.4.19)$$

Desde que x^* é de mínimo local e

$$(df(\alpha(0)))/d\theta = 0, \text{ segue que } d^2f(\alpha(0))/d\theta^2 \geq 0, \text{ isto é,}$$

$$\frac{d^2f(\alpha(0))}{d\theta^2} = z^T \nabla^2 f(x^*) z + w^T \nabla f(x^*) \geq 0. \quad (1.4.20)$$

Multiplicando (1.4.18) pela correspondente u^* , subtraindo de (1.4.20) e usando (1.4.7) a (1.4.9) do teorema 1.4.3, temos

$$z^T [\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla^2 g_i(x^*)] z \geq 0.$$

Que é exatamente (1.4.17), e o teorema está demonstrado. ■

As dificuldades em se verificar a qualificação de 2ª ordem / das restrições são equivalentes àquelas encontradas na verificação de 1ª / ordem. Há, entretanto, uma situação relativamente simples que implica as qualificações de 1ª ordem e 2ª ordem das restrições. Se os vetores $\nabla g_i(x)$, $i \in I(x) = \{i: g_i(x) = 0\}$ forem linearmente independentes, então os / dois tipos de qualificação das restrições estarão satisfeitas para $x \in D$ (Ver [04]).

O desenvolvimento seguinte estabelece um teste de suficiê- / cia, envolvendo derivadas parciais de 2ª ordem, que garante quando um ponto / será de mínimo local do problema (A).

Denotando por $\hat{I}(x^*)$ o conjunto dos índices i para os quais / $g_i(x^*) = 0$ e $u_i^* g_i(x^*) = 0$, $\nabla L(x^*, u^*) = 0$ sejam satisfeitas por $u_i^* > 0$ (es- / tritamente positivo). Assim $\hat{I}(x^*)$ é um subconjunto de $I(x^*)$. Fazendo $\tilde{Z}_0(x^*) = \{z: z^T \nabla g_i(x^*) = 0, i \in \hat{I}(x^*), z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, i \in I(x^*)\}$, / observamos que $\tilde{Z}_0(x^*) \subset Z_0(x^*) = \{z: z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0\}$. Temos, então, as se- / quentes condições de suficiência, demonstradas por Mc Cormick.

Teorema 1.4.7 - (Condições Suficientes de 2ª Ordem) - Seja x^* um ponto viável para o problema (A). Se existir um vetor u^* satisfazendo: /

$$u_i^* g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.4.21)$$

$$u_i^* \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.4.22)$$

$$\nabla L(x^*, u^*) = 0 \quad (1.4.23)$$

e se para todo $z \neq 0$ tal que $z \in \hat{Z}_0(x^*)$, seguir que

$$z^T [\nabla L(x^*, u^*)] z > 0, \quad (1.4.24)$$

então x^* é um ponto de mínimo local isolado (localmente único) do problema / (A).

Demonstração. - Vamos supor que (1.4.21) a (1.4.23) sejam satisfeitas por x^* mas que ele não seja de mínimo local isolado. Então existe/ uma seqüência $\{z_k\}$ de pontos viáveis $z_k \neq x^*$ convergindo para x^* tal que para cada z_k

$$f(x^*) \geq f(z_k). \quad (1.4.25)$$

Fazendo $z_k = x^* + \lambda_k y_k$, onde $\lambda_k > 0$ e $\|y_k\| = 1$, sem perda de generalidade podemos supor que a seqüência $\{\lambda_k, y_k\}$ converge para $(0, \bar{y}), \|y_k\| = 1$. Desde que os pontos viáveis, z_k , por diferenciabilidade, temos

$$g_i(z_k) - g_i(x^*) = \lambda_k y_k^T \nabla g_i(x^*) + \lambda_k \|y_k\| \rho(\lambda_k y_k) \geq 0, \quad \text{onde } \lim_{\lambda_k \rightarrow 0} \rho(\lambda_k y_k) = 0. \quad (1.4.26)$$

e a partir de (1.4.25),

$$f(z_k) - f(x^*) = \lambda_k y_k^T \nabla f(x^*) + \lambda_k \|y_k\| \rho(\lambda_k y_k) \leq 0, \quad \text{onde } \lim_{\lambda_k \rightarrow 0} \rho(\lambda_k y_k) = 0. \quad (1.4.27)$$

Dividindo (1.4.26) e (1.4.27) por λ_k e calculando o limite, obtemos /

$$\bar{y}^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, \quad i \in I(x^*) \quad (1.4.28)$$

$$\bar{y}^T \nabla f(x^*) \leq 0. \quad (1.4.29)$$

Suponhamos que (1.4.28) seja satisfeita com a estrita desigualdade para algum $i \in \hat{I}(x^*)$. Então combinando (1.4.23) e (1.4.28),

$$\bar{y}^T \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m u_i^* \bar{y}^T \nabla g_i(x^*) > 0 \quad (1.4.30)$$

contradizendo (1.4.29). Portanto, $\bar{y}^T \nabla g_i(x^*) = 0$ para todo $i \in I(x^*)$ e desde que $\bar{y} \in \hat{Z}_0(x^*)$, a partir do teorema de Taylor (ver seção 1.3.4), temos /

$$g_i(z_k) = g_i(x^*) + \lambda_k y_k^T \nabla g_i(x^*) + 1/2 \lambda_k^2 y_k^T \nabla^2 g_i(x^* + \theta_k \lambda_k y_k) \geq 0, \quad \theta \in (0, 1), \quad i=1, \dots, m \quad (1.4.31)$$

$$e \quad f(z_k) = f(x^*) + \lambda_k y_k^T \nabla f(x^*) + 1/2 \lambda_k^2 y_k^T \nabla^2 f(x^* + \theta_k \lambda_k y_k) \leq 0, \quad \theta \in (0, 1). \quad (1.4.32)$$

Multiplicando (1.4.31) pelo correspondente u_i^* e subtraindo de (1.4.32), vem

$$\lambda_k y_k^T \{ \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(x^*) \} + 1/2 \lambda_k^2 y_k^T [\nabla^2 f(x^* + \theta_k \lambda_k y_k) - \sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x^* + \theta_k \lambda_k y_k)] y_k \leq 0.$$

A expressão entre chaves é anulada por (1.4.23). Dividindo a porção restante por $\lambda_k^2/2$ e calculando o limite ($\lambda_k \rightarrow 0$), obtemos

$$\bar{y}^T [\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla^2 g_i(x^*)] \bar{y} \leq 0. \tag{1.4.33}$$

Desde que \bar{y} não é nulo e pertence a $\hat{Z}_0(x^*)$, segue que (1.4.33) contradiz (1.4.24). ▀

Observar que (1.4.24) é simétrica definida positiva (ver seção 1.3.4).

Corolário 1.4.1 -As condições suficientes, para que um ponto / seja de mínimo local, isolado, sem restrições de uma função f de classe C^2 , / são que

$$\nabla f(x^*) = 0 \text{ e}$$

$$y^T \nabla^2 f(x^*) y > 0, \text{ para todo } y \text{ não nulo.}$$

1.5 - Algoritmos e Transformações Algorítmicas.

Consideremos o problema: - minimizar $f(x)$, sujeita a $x \in D$, / onde f é a função objetivo e D é a região viável. Um procedimento para a so- / lução ou um algoritmo para resolver este problema pode ser visto como um pro- / cesso iterativo que gera uma sequência de pontos de acordo com um conjunto / ordenado de instruções, juntamente com um critério de parada.

A Transformação Algorítmica. - Dado um vetor x_k e aplicando as / instruções do algoritmo, obtemos um novo ponto x_{k+1} . Este processo pode ser / delineado por uma transformação algorítmica A . Esta é geralmente de ponto a / conjunto e designa para cada ponto do domínio D um subconjunto de D . Assim, / dado um ponto inicial x_1 , a transformação algorítmica gera uma sequência / x_1, x_2, \dots , onde $x_{k+1} \in A(x_k)$ para cada k . A transformação de x_k em x_{k+1} / constitui uma iteração do algoritmo. Apresentamos aqui um exemplo dado em [5] / Exemplo 1.

Consideremos o problema:

$$\text{Minimizar } x^2$$

$$\text{sujeita a } x \geq 1,$$

onde a solução ótima é $x^* = 1$. Seja a transformação algorítmica de ponto a / ponto dada por $A(x) = (x + 1)/2$. Pode-se verificar facilmente que a sequência / obtida pela aplicação da transformação A , para qualquer ponto de partida, con

verge para a solução ótima $x^* = 1$. Com $x_1 = 4$, o algoritmo gera a sequência $\{4, 2, 5, 1, 75, 1, 375, 1, 1875, \dots\}$ como ilustrado na figura (1.4.5a) que segue.

Para o mesmo problema, consideremos a transformação A de ponto a conjunto, definida por:

$$A(x) = \begin{cases} [1, 1/2(x + 1)], & \text{se } x \geq 1 \\ [1/2(x + 1), 1], & \text{se } x < 1 \end{cases}$$

Como mostra a figura (1.4.5b), a imagem de um ponto x qualquer é um intervalo fechado, e qualquer ponto do intervalo pode ser escolhido como o sucessor de x. Partindo de qualquer x_1 o algoritmo converge para $x^* = 1$. Com $x_1 = 4$, a sequência $\{4, 2, 1, 2, 1, 02, \dots\}$ é um resultado possível do algoritmo. De forma diferente do exemplo anterior, outras sequências podem resultar desta transformação algorítmica.

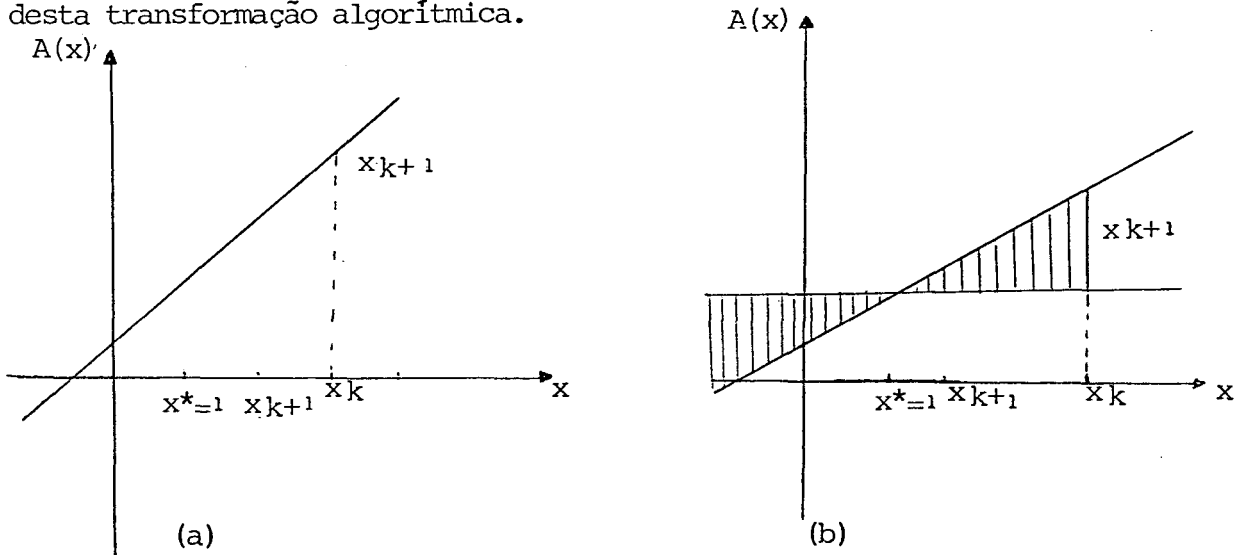


Figura 1.4.5

1.5.1 - O Conjunto Solução e a Convergência de Algoritmos. -

Consideremos o problema de programação não-linear:

minimizar $f(x)$

sujeita a $x \in D$.

Uma propriedade desejável num algoritmo para resolver o problema acima é que ele gere uma sequência de pontos que convirjam para a solução ótima global. Em muitos casos, entretanto, podemos obter tal solução com resultados menos favoráveis. De fato, em consequência da não convexidade, do porte do problema, ou de outras dificuldades, pode ocorrer de o procedimento iterativo parar quando for alcançado algum ponto do conjunto solu

ção S. Seguem alguns conjuntos típicos de soluções para problema mencionado:

1. $S = \{x^*: x^* \text{ é uma solução ótima local do problema}\};$
2. $S = \{x^*: x^* \in D, f(x^*) \leq b\}$, onde b é um valor aceitável da função objetivo;
3. $S = \{x^*: x^* \in D, f(x^*) < L.I + \epsilon\}$, onde $\epsilon > 0$ é uma tolerância aceitável, e L.I é o limite inferior da função objetivo;
4. $S = \{x^*: x^* \in D, f(x^*) - f(\bar{x}) < \epsilon\}$, onde $f(\bar{x})$ é um mínimo global, e $\epsilon > 0$ estiver especificado. Assim, em geral, a convergência de algoritmos é feita em relação ao conjunto solução. Em particular, uma transformação algorítmica $A: X \rightarrow X$ é convergente sobre $Y \subset X$, se, partindo de algum ponto inicial $x_1 \in Y$ o limite de qualquer subsequência convergente da sequência x_1, x_2, \dots , gerada pelo algoritmo, pertence ao conjunto solução/S. Fazendo S ser o conjunto de soluções ótimas globais no exemplo 1., é óbvio que os dois algoritmos formulados são convergentes sobre a reta real.

1.5.2 - Transformações Fechadas e Convergências. — Introduziremos aqui a noção de transformações fechadas e então o teorema da convergência. O significado do conceito de fechamento tornar-se-á claro a partir do seguinte exemplo e da discussão subsequente, dados em [05].

Exemplo 2.

Consideremos o problema:

Minimizar x^2
 sujeita a $x \geq 1$.

Seja o conjunto S, o conjunto de soluções ótimas globais, isto é, $S = \{1\}$. Consideremos a transformação algorítmica definida por:

$$A(x) = \begin{cases} [3/2 + 1x/4, 1 + 1x/2], & \text{se } x \geq 2 \\ [1/2(x + 1), & \text{se } x < 2 \end{cases}$$

A transformação está ilustrada na figura que segue. Obviamente, para algum ponto inicial $x_1 \geq 2$, qualquer sequência gerada pela transformação A converge para o ponto $\bar{x} = 2$. Notar que $\bar{x} \notin S$. Por outro lado, para $x_1 < 2$, qualquer sequência gerada pelo algoritmo converge para $x^* = 1$. Neste exemplo o algoritmo converge para o intervalo $(-\infty, 2)$ mas não converge para um ponto/no conjunto S sobre o intervalo $[2, \infty)$.

O exemplo acima mostra a importância do ponto inicial x_1 onde a convergência para um ponto em S é determinada se $x_1 < 2$ mas não ocorre no caso contrário.

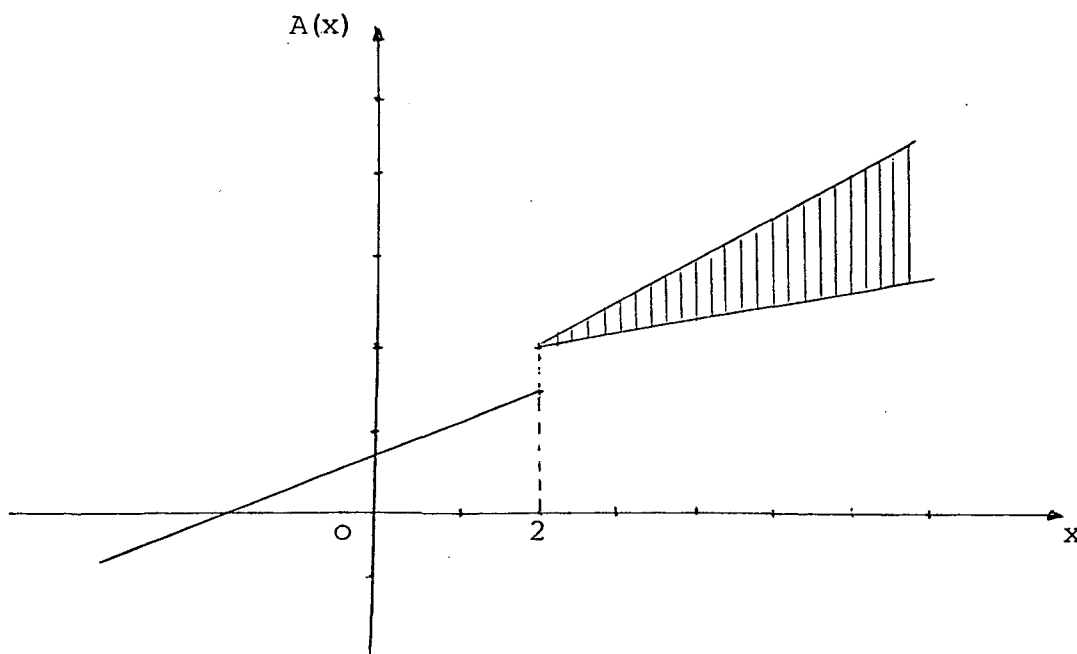


Figura 1.4.6

Notar que cada um dos algoritmos dos exemplos 1. e 2. satisfazem as condições seguintes:

(1) dado um ponto viável $x_k \geq 1$, todo ponto sucessor x_{k+1} é também viável; isto é, $x_{k+1} \geq 1$;

(2) dado um ponto viável $x_k \notin S$, todo ponto sucessor x_{k+1} satisfaz $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, onde $f(x) = x^2$. Por outro lado, a função objetivo é decrescente para $x_k \rightarrow x^*$;

(3) dado um ponto viável $x_k \in S$; isto é, $x_k = 1$, um ponto sucessor está também em S ; $x_{k+1} = 1$.

Apesar das similaridades acima mencionadas entre os algoritmos, os dois algoritmos do exemplo 1. convergem para $x^* = 1$, enquanto que o exemplo 2. não converge para $x^* = 1$ para nenhum ponto inicial $x_1 \geq 2$. A razão disto é que a transformação algorítmica do exemplo 2. não é "fechada", para $x = 2$. A noção de uma transformação fechada, a qual generaliza a de uma função contínua, é dada a seguir:

Definição. (Transformação Algorítmica Fechada). - Sejam X e Y conjuntos fechados, não vazios, em R^m, R^n , respectivamente. Seja $A: X \rightarrow Y$ uma transformação de ponto a conjunto. A transformação A é dita fechada para $x \in X$ se $x_k \in X, x_k \rightarrow x$ e $y_k \in A(x_k), y_k \rightarrow y$, implicar que $y \in A(x)$. A transformação A é dita fechada sobre $Z \subset X$ se ela for fechada para cada ponto em Z .

O exemplo 2. mostra uma transformação de ponto a conjunto que não é fechada para $x=2$. Em particular a sequência $\{x_k\}$ com $x_k = 2 - 1/k$ converge para $x=2$, e a sequência $\{y_k\}$ com $y_k = 3/2 - 1/2k$ converge para $y = 3/2$, mas $y \notin A(x) = \{2\}$. O exemplo 1 mostra duas transformações algorítmicas que são fechadas.

Teorema 1.5.1 - (Teorema da Convergência de Transformações - Algorítmicas). - Seja X um conjunto fechado, não vazio, em \mathbb{R}^n , e seja $S \subset X$, não vazio, o conjunto solução. Seja $A: X \longrightarrow X$ uma transformação ponto a conjunto. Dado $x_1 \in X$, a sequência $\{x_k\}$ é gerada iterativamente, como segue:

Se $x_k \in S$ então para; caso contrário tomar $x_{k+1} \in A(x_k)$, substituir k por $k+1$ e repetir. Suponhamos que a sequência x_1, x_2, \dots , gerada / pelo algoritmo esteja contida num subconjunto compacto de X , e que exista uma função contínua α , chamada função decrescente, tal que $\alpha(y) < \alpha(x)$ se $x \in S$ e $y \in A(x)$. Se a transformação A for fechada sobre o complementar de S , então ou o algoritmo para em um número finito de passos com um ponto em S ou gera / uma sequência infinita $\{x_k\}$ tal que:

1. - Toda subsequência convergente de $\{x_k\}$ possui um limite / em S ; isto é, todo ponto de acumulação de $\{x_k\}$ pertence a S ;
2. - $\alpha(x_k) \longrightarrow \alpha(x)$ para algum $x \in S$.

Demonstração. Se para alguma iteração um ponto x_k em S for gerado, então o algoritmo para. Agora suponhamos que uma sequência infinita $\{x_k\}$ seja gerada. Seja $\{x_k\}_L$ alguma subsequência convergente com limite $x \in X$. / Desde que α é contínua, então para $k \in L$, $\alpha(x_k) \longrightarrow \alpha(x)$. Assim, para um dado $\varepsilon > 0$, existe um k' tal que, ($k' \in L$)

$$\alpha(x_k) - \alpha(x) < \varepsilon, \text{ para } k \geq k' \text{ com } k \in L. \quad (1.5.1)$$

Agora para $k' > k$. Desde que α é uma função decrescente, $\alpha(x_k) < \alpha(x_{k'})$, e a partir de (1.5.1), temos:

$$\alpha(x_k) - \alpha(x) = \alpha(x_k) - \alpha(x_{k'}) + \alpha(x_{k'}) - \alpha(x) < 0 + \varepsilon = \varepsilon.$$

Desde que isto vale para todo $k > k'$, e desde que $\varepsilon > 0$, arbitrário, então /

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha(x_k) = \alpha(x). \quad (1.5.2)$$

Mostraremos agora que $x \in S$. Por contradição, suponhamos que $x \notin S$, e consideremos a sequência $\{x_{k+1}\}$. Esta sequência está contida num / subconjunto de X , e daí possui uma subsequência $\{x_{k+1}\}_L$ com limite x^* em X . Notando (1.5.2), é claro que $\alpha(x^*) = \alpha(x)$. Desde que A é fechada para x , e para $k \in \bar{L}$, $x_k \longrightarrow x$, $x_{k+1} \in A(x_k)$, e $x_{k+1} \longrightarrow x^*$, então $x^* \in A(x)$, pela definição de transformação fechada. Portanto, $\alpha(x^*) < \alpha(x)$, contradizendo o fato que $\alpha(x^*) = \alpha(x)$. Assim, $x \in S$ e a parte 1 do teorema está demonstrada. Isto, juntamente com (1.5.2), mostra que a parte 2 do teorema mantém-se válida, e a demonstração está completa. ■

Corolário 1.5.1 - Sob as condições do teorema, se S for unitário $\{x^*\}$, então toda sequência $\{x_k\}$ converge para x^* .

Notar que se o ponto x_k não estiver próximo do conjunto solução S , então o algoritmo gera um novo ponto x_{k+1} , tal que $\alpha(x_{k+1}) < \alpha(x_k)$. A função α é chamada uma função decrescente. Em muitos casos, α é escolhida como a própria função objetivo, e assim o algoritmo gera uma sequência de / pontos com valores da função objetivo. No entanto, se f for diferenciável, α pode ser escolhida como $\alpha(x) = \|\nabla f(x)\|$ para um problema de otimização / sem restrições.

1.5.3 - Composição de Transformações.

Definição.- Sejam X, Y e Z conjuntos fechados não vazios em $\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n$ e \mathbb{R}^p , respectivamente. Sejam $B: X \longrightarrow Y$ e $C: Y \longrightarrow Z$ transformações de ponto a conjunto. A transformação algorítmica $A = CB$ é definida como uma transformação de ponto a conjunto $A: X \longrightarrow Z$, com

$$A(x) = U \{C(y) : y \in B(x)\}.$$

A figura seguinte, 1.4.7, ilustra a definição.

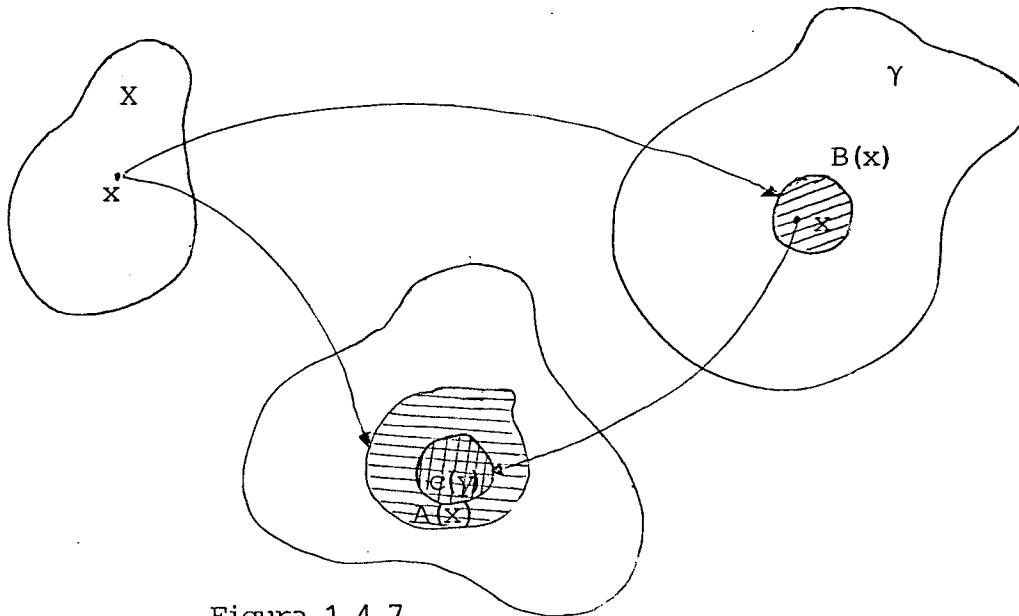


Figura 1.4.7

Teorema 1.5.2 - Sejam X, Y e Z conjuntos fechados não vazios em $\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n$ e \mathbb{R}^p , respectivamente. Sejam $B: X \longrightarrow Y$ e $C: Y \longrightarrow Z$ transformações de ponto a conjunto, e consideremos a transformação composta $A = CB$. / Suponhamos que B seja fechada para x e que C seja fechada sobre $B(x)$. Além / disso, suponhamos que se $x_k \longrightarrow x$ e $y_k \in B(x_k)$, então existe uma subseqüência convergente de $\{y_k\}_L$. Então A é fechada para x .

Demonstração.— Sejam $x_k \longrightarrow x$, $z_k \in A(x_k)$ e $z_k \longrightarrow z$. Necesitamos mostrar que $z \in A(x)$. Pela definição de A , para cada k , existe um $y_k \in B(x_k)$ tal que $z_k \in C(y_k)$. Pela hipótese existe uma subsequência $\{y_k\}_L$ / com limite y . Desde que B é fechada para x , então $y \in B(x)$. Além disso, / desde que C é fechada sobre $B(x)$ ela é fechada para y , e daí $z \in C(y)$. Assim, $z \in C(y) \in CB = A(x)$ e consequentemente, A é fechada para x . \square

CAPÍTULO II

Introdução. - Este capítulo é composto por quatro seções. Na primeira seção, fazemos um estudo geral sobre as técnicas de minimização sem restrições para pontos interiores formulando, de maneira geral, uma classe / de algoritmos que se aplicam a problemas com restrições de desigualdade, / transformando-os em problemas sem restrições. Além disso, demonstraremos a convergência dos mesmos. Na segunda, estudaremos "extrapolações" em técnicas / de minimizações sem restrições, que serão básicas para o desenvolvimento das "fórmulas de extrapolação" (Ver capítulo III), que aceleram a convergência / dos algoritmos acima citados. Na terceira, relacionaremos conceitos fundamen- tais sobre programação convexa, de interesse na continuidade do trabalho. Na quarta, apresentaremos outras técnicas de minimizações sem restrições que podem ser empregadas na resolução do problema (A).

2.1 - Técnicas de Minimizações sem Restrições para Pontos Inte- riores. - Diversos algoritmos para resolver problemas de programação não line ar podem ser deduzidos das condições de suficiência dadas na seção 1.4.2 pa- ra um ponto ser de mínimo local sem restrições. Esses algoritmos, incluindo / os discutidos neste capítulo, podem ser estudados a partir daquelas condições

O presente capítulo trata de problemas onde não há restrições- de igualdade; isto é, problemas da forma:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } f(x) \\ & \text{Sujeita a} \\ & g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \tag{A}$$

Suponhamos, temporariamente, que em torno da solução local x^* do problema (A) exista uma vizinhança na qual as restrições ($g_i(x) \geq 0$) podem ser estritamente satisfeitas; isto é, existam pontos x_0 tais que $g_i(x_0) > 0, i = 1, \dots, m$. Também que a estrita complementaridade (1.4.21); isto é, $u_i^* > 0$, se $g_i(x^*) = 0$.

Procedendo formalmente, consideremos uma perturbação das condições suficientes (1.4.21) a (1.4.24) para x^* ser de mínimo local. Suponhamos que as seguintes condições sejam satisfeitas, para um ponto $[x(r), u(r)]$ próximo de (x^*, u^*) para r pequeno:

$$g_i(x) > 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (2.1.1)$$

$$u_i g_i(x) = r, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (2.1.2)$$

$$u_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (2.1.3)$$

$$\nabla f(x) - \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(x) = 0, \quad (2.1.4)$$

e para cada y tal que ,

$$y^T \nabla g_i[x(r)] = 0, \text{ para todo } i \in I(x^*) = \{i: g_i(x^*) = 0\},$$

(sob as condições da nossa suposição $I(x^*) = \hat{I}(x^*) = \{i: u_i > 0\}$).

$$y^T \{ \nabla^2 f[x(r)] - \sum_{i \in I(x^*)} u_i \nabla^2 g_i[x(r)] \} y > 0. \quad (2.1.5)$$

Determinando cada u_i em (2.1.2) e substituindo em (2.1.4), vem

$$\nabla f[x(r)] - \sum_{i=1}^m \frac{r}{g_i[x(r)]} \nabla g_i[x(r)] = 0. \quad (2.1.6)$$

A equação (2.1.6) determina que o gradiente da função (chamada penalidade logarítmica ou barreira logarítmica)

$$P(x,r) = f(x) - r \cdot \sum_{i=1}^m \ln g_i(x) \quad (2.1.7)$$

se anula para $x(r)$; isto é, a condição necessária de 1ª ordem, (ver teorema 1.4.4) para $x(r)$, ser de mínimo local sem restrições de $P(x, r)$ é satisfeita.

A matriz das derivadas de 2ª ordem de P é:

$$\nabla^2 P(x,r) = \nabla^2 f[x(r)] - \sum_{i=1}^m \frac{r}{g_i[x(r)]} \nabla^2 g_i[x(r)] + \sum_{i=1}^m \nabla g_i[x(r)] \frac{r}{g_i^2[x(r)]} \nabla^T g_i[x(r)]. \quad (2.1.8)$$

O subsequente resultado segue, sob condições convenientes, especificado pela / teoria agora desenvolvida. Tacitamente, suponhamos que $r \rightarrow 0$, $x(r) \rightarrow x^*$.

Então $\frac{r}{g_i[x(r)]}$ e $\frac{r}{g_i^2[x(r)]}$ tendem a zero para todo $i \notin I(x^*)$; isto é, /

todo i onde $\lim_{r \rightarrow 0} g_i[x(r)] = g_i(x^*) > 0$. Ignorando estas restrições, as quais não têm importância para $\nabla^2 P(x,r)$, já que $r \rightarrow 0$. Da condição de 2ª ordem " perturbada" (2.1.5) aplicada em (2.1.8) vem que

$$y^T \nabla^2 P[x(r), r] y > 0, \text{ para todo } y \text{ tal que } y^T \nabla g_i[x(r)] = 0, \text{ para todo } i \in I(x^*).$$

(notar que isto também cobre a possibilidade que $I(x^*) = \emptyset$). Desde que

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{r}{g_i^2[x(r)]} = +\infty, \text{ para todo } i \in I(x^*) \text{ segue de (2.1.8) /}$$

que se $I(x^*) = \emptyset$, $y^T \nabla^2 P[x(r), r] y > 0$ onde r é suficientemente pequeno, para para todo y tal que $y^T \nabla g_i[x(r)] \neq 0$.

Assim $\nabla^2 P[x(r), r]$ é uma matriz definida positiva satisfazendo a condição de suficiência de 2ª ordem (1.4.24) para $x(r)$ ser de mínimo local sem restrições de $P(x, r)$.

Indicamos até aqui que as condições de 1ª e 2ª ordens para λ que $P(x, r)$ tenha um mínimo local sem restrições para $x(r)$ são implicadas pela perturbação daquelas condições, que são satisfeitas por x^* . Isto não é rigoroso. Em particular não demonstramos que $x(r)$ existe satisfazendo (2.1.1) a (2.1.5). Um rigoroso estabelecimento deste fato sob suposições de continuidade e compacidade é dado na subseção 2.1.2 para uma classe geral de funções λ sem restrições.

Uma outra função sem restrições resultante da "perturbação" é obtida fazendo-se $u_i = \lambda_i^2$, $i = 1, 2, \dots, m$, satisfazendo, assim a não negatividade exigida em (2.1.3) para os u_i . Claramente $u_i g_i(x) = 0$ é equivalente a $\lambda_i g_i(x) = 0$. A perturbação possível $\lambda_i g_i(x) = r > 0$, $i = 1, 2, \dots, m$, e a solução para $\lambda_i = \frac{r}{g_i(x)}$, substituída em (2.1.4) dá

$$\nabla f[x(r)] - \sum_{i=1}^m \frac{r^2}{g_i^2[x(r)]} \cdot \nabla g_i[x(r)] = 0, \quad (2.1.9)$$

que é o gradiente de

$$P_1(x, r) = f(x) + r^2 \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i[x]}, \quad (2.1.10)$$

que se anula para $x(r)$. A análise para esta função é análoga à feita para a função barreira logarítmica $P(x, r)$, indicando que as condições de 1ª e 2ª ordens, para x^* ser de mínimo local sem restrições, implicam que $x(r)$ (para r pequeno) satisfaz as condições de 1ª ordem e 2ª ordem para $x(r)$ ser de mínimo local sem restrições de $P(x, r)$.

Os algoritmos para minimizações sem restrições oriundos desses comentários são sumarizados a seguir. Determinar um mínimo local sem restrições de $P(x, r)$ ou $P_1(x, r)$ na região onde as restrições do problema (A) são estritamente satisfeitas. Se r for muito pequeno devemos demonstrar que um mínimo local sem restrições de uma ou outra dessas funções é um mínimo local do problema com restrições.

Técnicas de minimizações sem restrições da classe representada pelas funções $P(x, r)$ e $P_1(x, r)$ são chamados métodos para pontos interiores. Esses processos movimentam-se no interior da região viável rumo a solução. Observar que a classe de técnicas de minimizações sem restrições também pode ser descrita para pontos exteriores; isto é, processos que convergem para um mínimo local por pontos não viáveis. Esses processos não serão abordados neste trabalho (Ver [04]).

2.1.1 - Formulação Geral de Algoritmos de Minimização por Pontos Interiores. - Considerar o problema:

Minimizar $f(x)$

Sujeita a

(A)

$$g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Uma classe geral de algoritmos de minimizações sem restrições para pontos interiores aplicados ao problema (A) é dada a seguir.

Seja B um funcional de x com as propriedades:

- (1) que $B(x)$ seja contínuo na região $D^0 = \{x: g_i(x) > 0, i = 1, \dots, m\}$;
- (2) se $\{x_k\}$ for uma seqüência infinita de pontos em D^0 convergindo para x_B tal que $g_i(x_B) = 0$, para pelo menos um i , então $\lim_{k \rightarrow \infty} B(x_k) = +\infty$.

Seja $s(r)$ um funcional de r com a seguinte propriedade: - se $r_1 > r_2 > 0$, então $s(r_1) > s(r_2) > 0$ e se $\{r_k\}$ for uma seqüência infinita tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = 0$, então $\lim_{k \rightarrow \infty} s(r_k) = 0$.

Definição.- Uma técnica de minimização para pontos interiores é formulada como segue:

(1) definir a função $U(x, r_1) = f(x) + s(r_1)B(x)$, onde r_1 é um número positivo. Iniciar determinando um ponto $x_0 \in D^0$. Se tal ponto não estiver disponível imediatamente, mostraremos na seção 3.2, que ele pode ser obtido por repetidas aplicações do método que estamos formulando agora;

(2) partir de x_0 para o ponto $x(r_1)$ que é um mínimo local de $U(x, r_1)$ na região viável, $D = \{x: g_i(x) \geq 0, i = 1, 2, \dots, m\}$. Presumivelmente $x(r_1)$ será de mínimo sem restrições desde que pertença a D^0 ; caso contrário $U(x, r) = +\infty$, contradizendo que $x(r_1)$ seja de mínimo local sem restrições de U em D ;

(3) prosseguir de $x(r_1)$ para um mínimo local de $U(x, r_2)$, onde $r_1 > r_2 > 0$;

(4) continuar assim, até um mínimo local de $U(x, r_k)$ a partir de $x(r_{k-1})$, para uma seqüência monótona decrescente $\{r_k\}$, (Ver seção 1.2.4).

A conjectura (a ser provada) é que, sob condições apropriadas a seqüência de mínimos locais sem restrições existe e que seu ponto limite é a solução local do problema (A).

Idéia Subjacente. - O termo $s(r)B(x)$ pode ser considerado um termo "penalidade" somado à função objetivo $f(x)$, garantindo que o ponto de mínimo da função $U(x, r)$ pertence ao interior da região viável. Isto pode ser visto intuitivamente. Consideremos a trajetória de decrescimento de $U(x, r_1)$ (é importante a velocidade de decrescimento) partindo de x_0 . Por suposição $g_i(x_0) > 0$, para todo i , e, assim $U(x, r_1)$ existe e terá um valor finito. Desde que a mencionada trajetória define uma curva ao longo da qual $U(x, r_1)$ é continuamente decrescente, nenhum ponto da trajetória pode produzir um valor de $U(x, r_1)$ excedendo $U(x_0, r_1)$. Desde que a fronteira é definida por $g_i(x) = 0$ para pelo menos um i , $U(x, r_1) \rightarrow \infty$ para todo ponto da fronteira. Conseqüentemente, a fronteira nunca pode ser atingida pela trajetória descrita (supondo a sua existência) e o ponto de mínimo de $U(x, r_1)$ deve ser um ponto interior.

Em geral, quando r for reduzido como prescreve o método, o "peso" do fator penalidade (ou barreira) está diminuído, enquanto o "peso" da função objetivo está aumentado. Logo, progressos podem ser realizados na minimização de $f(x)$, sempre mantendo a viabilidade.

Uma característica da motivação dessa aproximação será agora sugerida. A função objetivo pode ser reduzida em valor, simultaneamente assegurando a não violação das restrições.

Outra motivação para a transformação do problema original (A), com restrições, em uma sequência de problemas sem restrições é que muitos métodos, para minimizações sem restrições, são conhecidos e muitos mais serão ainda desenvolvidos. Assim, se a transformação for válida, torna-se possível resolver muitos problemas com restrições utilizando-se estes procedimentos.

Para ilustrar um algoritmo sem restrições para pontos interiores, consideremos o seguinte exemplo, dado em [04], com alguns detalhes.

Exemplo 1.

Minimizar $x_1 + x_2$

Sujeita a

$$g_1(x_1, x_2) = -x_1^2 + x_2 \geq 0,$$

$$g_2(x_1, x_2) = x_1 \geq 0.$$

Para a função $U(x, r)$ usaremos a função barreira logarítmica apresentada anteriormente. Assim $s(r) = r$ e $B(x) = -\sum_{i=1}^m \ln g_i(x)$. As escolhas de s e B satisfazem as exigências estabelecidas acima. Então

$$P(x, r) = x_1 + x_2 - r \cdot \ln(-x_1^2 + x_2) - r \cdot \ln x_1.$$

Este problema simples pode ser resolvido analiticamente usando-se o fato que a função $P(x, r)$ é duas vezes diferenciável.

Usando a condição necessária de 1ª ordem temos:

$$\frac{\partial P}{\partial x_1} = 1 + r \cdot \frac{2x_1}{-x_1 + x_2} - \frac{r}{x_1} = 0, \quad (a)$$

e

$$\frac{\partial P}{\partial x_2} = 1 - r \cdot \frac{1}{-x_1 + x_2} = 0. \quad (b)$$

Resolvendo, obtemos:

$$\frac{r}{-x_1 + x_2} = 1 \Rightarrow -x_1^2 + x_2 = r \Rightarrow x_2 = r + x_1^2, \text{ de (b).}$$

Substituindo em (a), vem

$$\begin{aligned} x_1[-x_1^2 + x_1^2 + r] + 2rx_1^2 - r(-x_1^2 + r + x_1^2) &= 0 \Rightarrow \\ rx_1 + 2rx_1^2 - r^2 = 0, \text{ ou } 2x_1^2 + x_1 - r &= 0 \Rightarrow \\ x_1(r) &= \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 8r}}{4}. \end{aligned}$$

Desde que x_1 deve ser não negativo, somente $x_1(r) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 8r}}{4}$ é de interesse. Então como $x_2 = r + x_1^2$, temos $x_2(r) = \frac{(-1 + \sqrt{1 + 8r})^2}{16} + r$.

Que estes valores de $x_1(r)$ e $x_2(r)$ determinam um mínimo local segue imediatamente da observação que eles satisfazem as condições suficientes $\nabla P(x, r) = 0$ e $y^T \nabla^2 P(x, r)y > 0$ para todo y não nulo, (ver 1.4.2). Na tabela 2.1.1 que segue são mostrados os valores de $x_1(r)$ e $x_2(r)$ para quatro valores diferentes de r .

i	r_i	$x_1(r)$	$x_2(r)$
1	1,000	0,500	1,250
2	0,500	0,309	0,595
3	0,250	0,183	0,283
4	0,100	0,085	0,107

Tabela 2.1.1

Na figura 2.1.1 abaixo, o problema é mostrado geometricamente e são indicados os pontos correspondentes para aqueles valores de r . No limite, para $r_k \rightarrow 0$, $[x_1(r_k), x_2(r_k)]^T$ tende para $(0, 0)^T$, que é a solução do problema.

Neste problema há somente um mínimo local sem restrições para cada valor de r e o mesmo possui solução única. Para outros problemas, que

possuem vários mínimos locais, há uma sequência de mínimos locais sem restrições convergindo para cada conjunto de mínimos locais sem restrições. O estabelecimento preciso e provas desse fato são dados na seção seguinte.

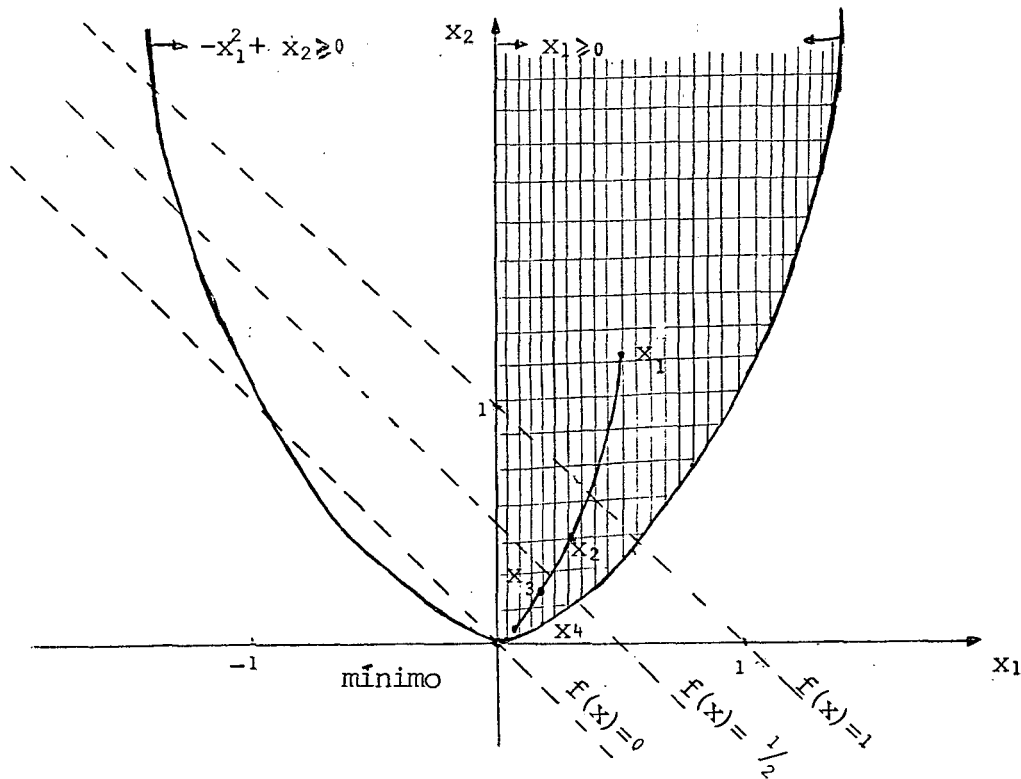


Figura 2.1.1. - A região hachurada é viável.

2.1.2 - Demonstração da Convergência do Algoritmo para Pontos Interiores. - Aqui é demonstrada a existência do mínimo da função $U(x, r)$ sem restrições do problema (A), sob certas propriedades topológicas.

Lema 2.1.1 - Se f for uma função contínua de x sobre um conjunto compacto não vazio V , (Ver seção 1.2.8), então existe um escalar v^* finito e um ponto $x^* \in V$, onde $f(x^*) = v^* = \min_V f(x)$
(Para demonstração ver 1.2.8)

Corolário 2.1.1 - Suponhamos que D seja um conjunto fechado, S um conjunto compacto, e $D^\circ \cap S \neq \emptyset$, onde D° é o interior de D . Se $F(x)$ for uma função contínua sobre $D^\circ \cap S$ com a propriedade que para toda sequência $\{x_k\}$ com $x_k \in (D^\circ \cap S)$ e $x_k \rightarrow y, y \in [(D - D^\circ) \cap S], \lim_{k \rightarrow \infty} F(x_k) = +\infty$; então existe um escalar \bar{v} , finito e um ponto $\bar{x} \in (D^\circ \cap S)$ tal que

$$F(\bar{x}) = \bar{v} = \min_{D^\circ \cap S} F(x).$$

Demonstração. - Seja x_0 algum ponto de $D^0 \cap S$ e
 $W = \{x: F(x) \leq F(x_0), x \in D^0 \cap S\}$. Se $\{x_k\}$ for uma seqüência na qual cada
 $x_k \in W$, então se $x_k \longrightarrow y$, $y \in (D^0 \cap S)$ ou $y \in [(D-D^0) \cap S]$ pois
 $y \in (D \cap S)$, desde que $D \cap S$ seja compacto. Entretanto se $y \in [(D-D^0) \cap S]$,
 $F(x_k) \longrightarrow \infty$ de modo que $x_k \notin W$ para k grande, o que é uma contradição. Por
tanto $y \in (D^0 \cap S)$. Além disso, desde que $F(x_k) \leq F(x_0)$, para todo k , a
continuidade de F em $D^0 \cap S$ implica em $F(y) \leq F(x_0)$. Assim W é fechado e
também limitado; isto é, compacto. Assim $F(x)$ atinge um mínimo em W . A conclu
são segue do fato que $\inf_{D^0 \cap S} F(x) = \min_W F(x)$. \square

Definição. - Um ponto $x^* \in D$ é de mínimo local finito do pro
blema (A) se x^* pertencer ao interior do conjunto compacto V para o qual
 $f(x^*) = v^* = \min_{D \cap V} f(x)$ (Ver 1.4).

Definição. - Seja $U(x, r)$ uma função para minimizações sem res
trições para pontos interiores. Então um ponto $x(r)$ é de mínimo local sem res
trições, finito, de $U(x, r)$ se existir um conjunto compacto V tal que
 $U[x(r), r] = \min_{V \cap D^0} U(x, r)$, e $x(r)$ pertencer ao interior do conjunto V .

Antes de demonstrarmos a convergência do algoritmo, um teorema
fundamental relativo a conjuntos compactos de mínimos locais é necessário.

Teorema 2.1.1 - (Existência do Conjunto Compacto) - Se um con
junto de mínimos locais A^* do problema (A) for um conjunto compacto, isolado
(Ver subseção 1.2.5), não vazio, então existe um conjunto compacto S tal que
 $A^* \subset S^0$, e para todo $y \in D \cap S$, se $y \notin A^*$, então $f(y) > v^*$, onde $v^* = \min_{D \cap S} f(x)$.

Demonstração. - Desde que A^* é um conjunto compacto, isolado,
existe um conjunto fechado E que contém A^* tal que $E^0 \cap A = A^*$, onde A é o
conjunto de todos os mínimos locais com valor v^* . Também existem conjuntos
compactos $\{S_k\}$, onde $\lim_{k \rightarrow \infty} S_k = A^*$ e $A^* \subset S_k^0 \subset E^0$. Se a conclusão do teorema
for falsa então existe, para cada k , $x_k \in D \cap S_k$ tal que $f(x_k) \leq v^*$ e $x_k \notin A^*$,
para todo k , desde que A^* é fechado e desde que $\{x_k\}$ deve ter uma subseqü
ência $\{x_{k_j}\}$ tal que $x_{k_j} \longrightarrow \bar{x} \in A^*$ (Ver 1.2.4).

Se $f(x_{k_j}) < v^* = f(\bar{x})$ para todo j , as observações acima impli
cam que \bar{x} não é de mínimo local do problema (A), em contradição à definição
de A^* . Se $f(x_{k_j}) = v^*$ para algum $j = \bar{j}$, então, por construção de $\{S_{k_j}^0\}$, deve
existir e ser o valor mínimo de $f(x)$ em $D \cap S_{k_j}$, $j \geq \bar{j}$. Mas desde que
 $x_k \in S_{k_j}^0$ para k suficientemente grande, x_k é de mínimo local de $f(x)$ em
 D com valor v^* . Assim $x_k \in A$ para k grande. Mas x_k pertence também a $S_k \subset E^0$.
Daí $x_k \in E^0 \cap A = A^*$. \square

Para uso computacional é necessário relacionar o conjunto S mais diretamente com as funções do problema. Se elas forem contínuas pode-se mostrar que definem $S = \{x: g_i(x) \geq -\lambda, i = 1, \dots, m, f(x) \leq v^* + \lambda\}$ demonstrando ser $\lambda > 0$ suficientemente pequeno.

Estamos agora em condições de demonstrar a convergência dos algoritmos para solução do problema (A).

Teorema 2.1.2 (Convergência do Conjunto Compacto de Mínimos / Locais do Algoritmo para Pontos Interiores).

Se: (a) - as funções f, g_1, \dots, g_m forem contínuas, (b) - a função $U(x, r) = f(x) + s(r)B(x)$ for uma função para minimização sem restrições para pontos interiores (B e s satisfazem as propriedades dadas em 2.1.1), (c) - Um conjunto A^* de pontos que são de mínimos locais correspondentes ao mínimo local de valor v^* for um conjunto não vazio, isolado e compacto (d) - Se pelo menos um ponto de A^* for do fecho de D^0 , e, (e) $\{r_k\}$ for uma seqüência estritamente convergindo para 0, então:

(i) existe um conjunto compacto S , como dado no teorema 2.1.1, tal que $A^* \subset S^0$ e para r_k pequeno existe um ponto de mínimo sem restrições de $U(x, r)$ sobre $D^0 \cap S^0$ e todo ponto limite de alguma subsequência $\{x_k\}$ de pontos de mínimos de $U(x, r)$ pertence a A^* ;

$$(ii) \lim_{k \rightarrow \infty} s(r_k)B[x(r_k)] = 0;$$

$$(iii) \lim_{k \rightarrow \infty} f[x(r_k)] = v^*;$$

$$(IV) \lim_{k \rightarrow \infty} U[x(r_k), r_k] = v^*;$$

(v) $\{f[x(r_k)]\}$ é uma seqüência não crescente, e

(vi) $\{B[x(r_k)]\}$ é uma seqüência monótona não decrescente.

Demonstração. - Da hipótese (c) e do teorema 2.1.1 temos que existe um conjunto compacto S tal que $A^* \subset S^0$, $f(y) > v^*$ e $y \notin A^*$. Mostraremos que para este conjunto S , (i) a (iv) são satisfeitas.

Definamos x_k de forma que $U(x_k, r_k) = \min_{D^0 \cap S} U(x, r_k)$.

A existência de x_k é garantida pela continuidade das funções do problema e a continuidade da função barreira $B(x)$, as quais implicam a continuidade da função $U(x, r)$ em $D^0 \cap S$, por (b) e pelo corolário 2.1.1. Deste, também concluímos que cada $x_k \in (D^0 \cap S)$.

Seja y_0 um dos pontos limites da sequência convergente $\{x_k\}$. Claramente, $y_0 \in D \cap S$. Denotemos a subsequência que converge para y_0 também por $\{x_k\}$. Necessitamos mostrar que $y_0 \in A^*$. Primeiro mostraremos que $y_0 \in D$. Se $y_0 \notin D$, então $g_i(x_k) = 0$ para algum i , e assim $\liminf U(x, r) = +\infty$. Mas pela hipótese (d) existe pelo menos um $x_0 \in (D \cap S)^k \xrightarrow{k \rightarrow \infty}$ para o qual $\lim_{k \rightarrow \infty} U(x_0, r_k) = f(x_0) < +\infty$, o que contradiz a suposição que x_k minimiza $U(x, r)$ para k grande. Assim, $y_0 \in (D \cap S)$ e, portanto $y_0 \in D$.

Agora mostraremos que $y_0 \in A^*$. Suponhamos também que $y_0 \notin A^*$. Então pela propriedade básica do conjunto S , $f(y_0) > v^*$. Pela hipótese (d) existe $x_0 \in D^0 \cap S$, onde $v^* < f(x_0) < f(y_0)$. Então $\liminf_{k \rightarrow \infty} U(x_k, r_k) \geq f(y_0) >$

$f(x_0) = \lim_{k \rightarrow \infty} U(x_0, r_k)$, que contradiz a suposição que x_k minimiza $U(x, r)$ para k grande. Mas desde que $A^* \subset S^0$, para k convenientemente grande x_k deve pertencer a $D^0 \cap S^0$ e daí determinar o mínimo de $U(x, r)$, o que prova (i).

Definamos $U(x_k, r_k) = \min_{D^0 \cap S} U(x, r_k)$. Mas pela definição dada no início de 2.1.2 $\min_{D^0 \cap S} U(x, r_k) = U[x(r_k), r_k]$. De (i), vem:

$$v^* = f(y_0) = \lim_{k \rightarrow \infty} \inf U(x_k, r_k). \text{ Como}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf U(x_k, r_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} \min_{D^0 \cap S} U(x, r_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} U[x(r_k), r_k], \text{ então}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} U[x(r_k), r_k] = v^*, \text{ o que é exatamente (iv);}$$

Também temos de (i), $f(y_0) = v^* = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k)$. Mas $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} f[x(r_k)]$. Portanto, $\lim_{k \rightarrow \infty} f[x(r_k)] = v^*$, o que demonstra (iii);

De (iv), temos $\lim_{k \rightarrow \infty} U[x(r_k), r_k] = v^*$. Mas

$$\lim_{k \rightarrow \infty} U[x(r_k), r_k] = \lim_{k \rightarrow \infty} \{f[x(r_k)] + s(r_k)B[x(r_k)]\} =$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f[x(r_k)] + \lim_{k \rightarrow \infty} s(r_k)B[x(r_k)]. \text{ Como, por (iii) } \lim_{k \rightarrow \infty} f[x(r_k)] = v^*, \text{ então}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} s(r_k)B[x(r_k)] = 0, \text{ e (ii) está demonstrada.}$$

Para demonstrar (v) e (vi) seja $s(r_k) > s(r_{k+1}) > 0$, pela hipótese (e). Desde que $B[x(r_k)] \geq 0$ se $g_i[x(r_k)] > 0$, $i = 1, 2, \dots, m$, então: $f[x(r_k)] + s(r_k)B[x(r_k)] \geq f[x(r_k)] + s(r_{k+1})B[x(r_k)]$, para cada $x(r_k) \in (D \cap S)$. Assim, observando (i), existem $x(r_k)$ e $x(r_{k+1})$ tais que:

(a) $f[x(r_k)] + s(r_k)B[x(r_k)] \leq f[x(r_{k+1})] + s(r_k)B[x(r_{k+1})]$ e,

(b) $f[x(r_{k+1})] + s(r_k)B[x(r_{k+1})] \leq f[x(r_k)] + s(r_{k+1})B[x(r_{k+1})]$; somando membro a membro (a) e (b), vem:

$$f[x(r_k)] + s(r_k)B[x(r_k)] + f[x(r_{k+1})] + s(r_{k+1})B[x(r_{k+1})] \leq f[x(r_{k+1})] + s(r_k).$$

$B[x(r_{k+1})] + f[x(r_k)] + s(r_{k+1})B[x(r_k)]$, e reorganizando obtemos:

$$s(r_k)B[x(r_k)] - s(r_k)B[x(r_{k+1})] \leq s(r_{k+1})B[x(r_k)] - s(r_{k+1})B[x(r_{k+1})]$$

ou

$$s(r_k) \{B[x(r_k)] - B[x(r_{k+1})]\} \leq s(r_{k+1}) \{B[x(r_k)] - B[x(r_{k+1})]\}.$$

Daí, $[s(r_k) - s(r_{k+1})] \{B[x(r_k)] - B[x(r_{k+1})]\} \leq 0$. Como $[s(r_k) - s(r_{k+1})] > 0$, então $B[x(r_k)] \leq B[x(r_{k+1})]$. Logo, $\{B[x(r_k)]\}$ é uma sequência monótona não / decrescente, e (vi) fica demonstrada.

Agora, retornando as desigualdades (a) e (b) acima e reorganizando-as, temos:

$$f[x(r_k)] - f[x(r_{k+1})] \leq s(r_k) \{B[x(r_{k+1})] - B[x(r_k)]\}$$

e

$$f[x(r_{k+1})] - f[x(r_k)] \leq s(r_{k+1}) \{B[x(r_k)] - B[x(r_{k+1})]\}.$$

Multiplicando a segunda desigualdade por $s(r_k)/s(r_{k+1})$, o que é possível em razão da suposição que $s(r_k) > s(r_{k+1}) > 0$, obtemos:

$$\{f[x(r_{k+1})] - f[x(r_k)]\} \cdot \frac{s(r_k)}{s(r_{k+1})} \leq s(r_k) \{B[x(r_k)] - B[x(r_{k+1})]\}.$$

Somando membro a membro esta desigualdade com (a), acima, vem:

$\{f[x(r_{k+1})] - f[x(r_k)]\} \cdot \left(\frac{s(r_k)}{s(r_{k+1})} - 1\right) \leq 0$. Como $\frac{s(r_k)}{s(r_{k+1})} - 1 > 0$, então $f[x(r_{k+1})] - f[x(r_k)] \leq 0$. Logo, $f[x(r_{k+1})] \leq f[x(r_k)]$, e (v) está demonstrada. ■

Fiacco Mc Cormick [04] utilizam o exemplo que segue para nos - trar uma aplicação do teorema 2.1.2.

Exemplo.

Minimizar x_2

Sujeita a $x_2 - \text{sen } x_1 - x_1/2 \geq 0$.

Considerando a função barreira logarítmica para a função / $U(x, r)$: $P(x, r) = x_2 - r \cdot \ln(x_2 - \text{sen } x_1 - x_1/2)$. Desde que esta função é duas vezes diferenciável usaremos recursos analíticos para determinar o(s) / mínimo(s) local (is) de $P(x, r)$. Então:

$$a) \frac{r(\cos x_1 + 1/2)}{(x_2 - \text{sen } x_1 - x_1/2)} = 0.$$

e,

$$b) 1 - \frac{r}{(x_2 - \text{sen } x_1 - x_1/2)} = 0.$$

São dois os conjuntos de soluções viáveis, pois de (a), $r(\cos x_1 + 1/2) = 0$ / temos, $\cos x_1 = -1/2$ o que implica, $x_1 = 2\pi/3 \pm 2n\pi$; $n = 0, 1, \dots$, ou

$x_1 = 4\pi/3 \pm 2n\pi$; $n = 0, 1, \dots$, e substituindo em (b), vem
 $x_2 = \text{sen}(2\pi/3 \pm 2n\pi) - \pi/3 \pm n\pi + r$; $n = 0, 1, \dots$, ou,
 $x_2 = \text{sen}(4\pi/3 \pm 2n\pi) - 2\pi/3 \pm n\pi + r$; $n = 0, 1, \dots$, Para determinar a matriz das derivadas de 2ª ordem de $P(x, r)$ usaremos:

$$(a') \frac{\partial P'}{\partial x_1} = \cos x_1 + 1/2 \quad e \quad (b') \frac{\partial P'}{\partial x_2} = \frac{x_2 - \text{sen } x_1 - x_1/2}{r}; \quad \text{Logo,}$$

$$\frac{\partial^2 P'}{\partial x_1^2} = -\text{sen } x_1; \quad \frac{\partial^2 P'}{\partial x_1 \partial x_2} = 0; \quad \frac{\partial^2 P'}{\partial x_2^2} = 1/r \quad e \quad \frac{\partial^2 P'}{\partial x_2 \partial x_1} = 1/r(-\cos x_1 - 1/2).$$

Mas calculando $\frac{\partial^2 P'}{\partial x_2 \partial x_1}$, para os valores de $x_1(r)$ acima, vem, para:

$x_1(r) = 2\pi/3 \pm 2n\pi$; $n = 0, 1, \dots$, $\frac{\partial^2 P'}{\partial x_2 \partial x_1} = 1/r[-\cos(2\pi/3 \pm 2n\pi) - 1/2] = 0$, e
 para $x_1(r) = 4\pi/3 \pm 2n\pi$, $n = 0, 1, \dots$,

$$\frac{\partial^2 P'}{\partial x_2 \partial x_1} = 1/r[-\cos(4\pi/3 \pm 2n\pi) - 1/2] = 0, \quad \text{então}$$

$$\nabla^2 P(x, r) = \begin{bmatrix} -\text{sen}[x_1(r)] & 0 \\ 0 & 1/r \end{bmatrix}.$$

Para $x_1(r) = 2\pi/3 \pm 2n\pi$, $\nabla^2 P(x, r)$ não é uma matriz definida positiva. Para $x_1(r) = 4\pi/3 \pm 2n\pi$, ela é definida positiva e, portanto, satisfaz as condições de suficiência para um mínimo local. Assim, existem infinitas trajetórias, uma para cada mínimo local do problema. Duas delas são mostradas na figura 2.1.2 e quatro dos seus elementos estão na tabela abaixo:

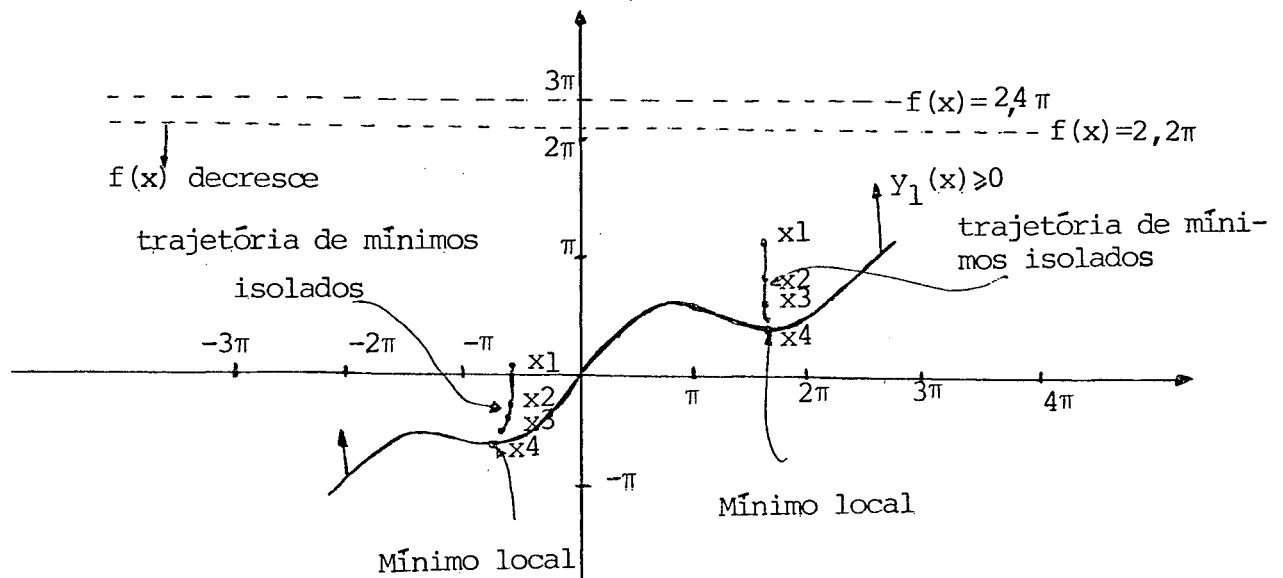


Figura 2.1.2 - Convergência dos mínimos locais sem restrições.

i	r_i	$x_1(r)$ $n=0$	$x_2(r)$	$x_1(r)$ $n=-1$	$x_2(r)$
1	2.0	$4\pi/3$	$(1.027)\pi$	$-2\pi/3$	$(0.028)\pi$
2	1.0	$4\pi/3$	$(0.709)\pi$	$-2\pi/3$	$(-0.29)\pi$
3	0.5	$4\pi/3$	$(0.550)\pi$	$-2\pi/3$	$(-0.499)\pi$
4	0.1	$4\pi/3$	$(0.423)\pi$	$-2\pi/3$	$(-0.576)\pi$

Tabela 2.1.1 - Valores de quatro pontos que pertencem a duas trajetórias.

Corolário 2.1.2 - Se x^* for um ponto de mínimo local, isolado, correspondente ao mínimo local de valor v^* , e as hipóteses (a), (b) e (c) do teorema 2.1.2 forem satisfeitas então a sequência $\{x(r_k)\}$ converge para x^* .

Demonstração. - Da hipótese (e) do teorema 2.1.2 $\{r_k\}$ é uma sequência estritamente decrescente convergindo para zero. Devemos mostrar / que $\lim_{r_k \rightarrow 0} x(r_k) = x^*$. Suponhamos que o $\lim_{r_k \rightarrow 0} x(r_k) \neq x^*$. Então $f(x^*) \neq v^*$ e $f(x^*) \neq \lim_{r_k \rightarrow 0} f[x(r_k)]$, que contradiz (iii) do teorema 2.1.2 (Observar que / $r_k \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$). Portanto, $\lim_{r_k \rightarrow 0} x(r_k) = x^*$ e $\{x(r_k)\}$ converge/ para x^* . ■

2.2 - "Extrapolações" em Técnicas de Minimizações sem Restrições.

Observando a figura 2.1.2 nota-se que quando um conjunto de mínimos locais contém um único ponto, existe uma trajetória única de mínimos locais sem restrições convergindo para aquele ponto. Além disso, espera-se, ao examinar alguns pontos da trajetória, dar uma informação a respeito do ponto/final, o mínimo local para o qual ela está convergindo.

A nossa intenção, agora, é explorar trajetórias de mínimos sem restrições convergindo para conjuntos de pontos isolados de mínimos sob / certas condições de diferenciabilidade das funções do problema. Os resultados desta seção têm importantes aplicações computacionais, que serão tratadas no capítulo final.

2.2.1 - Análise da Trajetória de Mínimos Locais sem Restrições em Técnicas para Pontos Interiores.

As condições necessárias para definir-se uma trajetória única/ de mínimos locais sem restrições são fortes e é necessário provar a existên - cia de pontos convergindo para o mínimo local. Não insistiremos literalmente

restrições de $U(x, r) = f(x) + r.B[g(x)]$, definida em 2.1.1, em D^0 , convergindo para x^* .

Demonstração. - A parte (i) é uma exposição do que foi demonstrado no teorema 1.4.7. A independência de todas as restrições ativas produz o resultado que $x \in \bar{D}^0$; isto é, há pontos em D^0 arbitrariamente próximos de x^* . Daí todas as hipóteses do corolário 2.1.2 estão satisfeitas, e existe, para r suficientemente pequeno, pelo menos uma trajetória $x(r)$ de mínimos locais sem restrições convergindo para x^* . Que existe uma função definindo uma trajetória isolada, isto é, a função é contínua e todo ponto da trajetória é um mínimo sem restrições e isolado, será demonstrado em vários estágios.

(1) Os u_i^* para os quais $\nabla f(x^*) - \sum_{i \in I(x^*)} u_i^* \nabla g_i(x^*) = 0$, como formulado no teorema 1.4.7 são únicos. Isto segue diretamente da condição que os $\nabla g_i(x^*)$ são linearmente independentes para $i \in I(x^*)$. De fato, $u^* = (G^T G)^{-1} G^T \nabla f(x^*)$, onde $G = \{\nabla g_i(x^*)\}$, $i \in I(x^*)$.

(2) para todo $x(r_k)$,

$$\nabla_x U[x(r_k), r_k] = \nabla_x f[x(r_k)] + \nabla_x B[g[x(r_k)]] \cdot r_k = 0, \quad (2.2.1)$$

pois todo $x(r_k) \in D^0$ é ponto de mínimo local sem restrições de $U(x, r)$, as funções do problema são diferenciáveis em x , B é diferenciável em g_i para $g_i > 0$, e também da condição necessária de 1ª ordem para mínimos locais sem restrições. Usando a regra da cadeia (ver 1.3.2),

$$\nabla_x f[x(r_k)] + \nabla_x g[x(r_k)] \cdot \nabla_g B[g[x(r_k)]] \cdot r_k = 0. \quad (2.2.2)$$

(3) Definamos,

$$u_i(r_k) = - \frac{\partial B_i\{g_i[x(r_k)]\}}{\partial g_i} \cdot r_k, \quad i = 1, 2, \dots, m. \text{ Então o limite de}$$

$u_i(r_k)$, quando $r_k \rightarrow 0$, é único e igual a u_i^* , $i = 1, \dots, m$. Para demonstrar isto, notar (2.2.2) que pode ser escrita

$$\nabla f[x(r_k)] - \sum_{i=1}^m u_i(r_k) \nabla g_i[x(r_k)] = 0. \quad (2.2.3)$$

Claramente, para todo i onde $g_i(x^*) > 0$, $\lim_{k \rightarrow \infty} u_i(r_k)$ existe e é igual a zero.

Seja $d_k = \sum_{i=1}^m u_i(r_k)$. Agora, se $m \geq 1$, então $d_k > 0$, (se $m=0$ estaremos lidando com um problema sem restrições e (3) é satisfeita trivialmente). Seja ainda

$$v_i(r_k) = \frac{u_i(r_k)}{d_k}, \quad i = 1, 2, \dots, m, \text{ e } d = \lim_{k \rightarrow \infty} \inf d_k. \text{ Se } d = +\infty, \text{ então}$$

dividindo (2.2.3) por d_k e calculando o limite para $k \rightarrow \infty$, vem

$\sum_{i \in I(x^*)} \bar{v}_i \nabla g_i(x^*) = 0$, para um conjunto de \bar{v}_i não negativo onde $\sum_{i \in I(x^*)} \bar{v}_i = 1$. Mas isto contradiz a independência dos $\nabla g_i(x^*)$ (para todo $i \in I(x^*)$).

na unicidade da trajetória, mas antes, se é isolada, ou localmente única, teremos que considerar o parâmetro r uma variável contínua para a qual $U(x,r)$ será minimizada, em vez de nos restringirmos a valores discretos de $\{r_k\}$, o que vinha sendo feito até agora.

Definição. Uma função vetorial $x(r)$ definida em $(0, r_0)$ é uma trajetória isolada de mínimos locais sem restrições de $U(x,r)$ em $D^0 = \{x: g_i(x) > 0, i = 1, \dots, m\}$ se $x(r)$ for contínua e $x(\bar{r})$ for de mínimo local sem restrições isolado de $U(x,\bar{r})$ para qualquer $\bar{r} \in (0, r_0)$.

Também modificamos as exigências feitas sobre $B(x)$ e $s(r)$. Em vez de ser simplesmente uma função de x (ver 2.1.1), B é agora definida como função de x através das funções restrições $g = (g_1, \dots, g_m)$. Seja $B(g)$ definida por $B(g) = \sum_{i=1}^m B_i(g_i)$ uma função de classe C^2 de g_i , onde cada $g_i > 0$ tem as seguintes propriedades:

Se $\{g_i[x(r_k)]\}$ for uma sequência infinita de pontos onde $g_i[x(r_k)] > 0$ para cada k , e $\lim_{k \rightarrow \infty} g_i[x(r_k)] = 0$, então $\lim_{k \rightarrow \infty} B_i\{g_i[x(r_k)]\} = +\infty$.

Além disso, se $g_i[x(r_0)] > 0$, então $\frac{\partial B_i\{g_i[x(r_0)]\}}{\partial g_i} < 0$, $\frac{\partial^2 B\{g_i[x(r_0)]\}}{\partial g_i^2} > 0$, e

$\frac{\partial^2 B_i}{\partial g_i^2}$ é uma função monótona decrescente de g_i .

Para simplificar a apresentação da generalidade na função $s(r)$ faremos $s(r) = r$. Observamos que estas condições para $B[g(x)]$ e $s(r)$ satisfazem as propriedades dadas em 2.1.1, para $U(x,r)$ ser uma função para minimizações sem restrições por pontos interiores, e conseqüentemente todos os teoremas demonstrados até aqui continuam válidos.

Teorema 2.2.1 - (Existência da Trajetória Isolada). Se: /

- (a) as funções $\{g_i\}$ e f forem de classe C^2 ;
- (b) para x^* existir u^* tal que as condições suficientes / (1.4.21) a (1.4.24), para x^* ser de mínimo local com restrições do problema (A), forem satisfeitas, e $I(x^*) = \hat{I}(x^*) = \{i: u_i^* > 0\}$;
- (c) os vetores ∇g_i (para todo $i \in I(x^*)$) forem linearmente independentes; e
- (d) $B(g)$ satisfizer as condições já exigidas, então
 - (i) x^* é um ponto de mínimo local isolado com restrições do problema (A), (seja $v^* = f(x^*)$);
 - (ii) as variáveis u^* ($i = 1, \dots, m$) são únicas e são explicitamente geradas por qualquer técnica de minimização sem restrições por pontos interiores;
 - (iii) existe uma trajetória $x(r)$ isolada, de classe C^1 , de mínimos locais sem

Se $d < +\infty$, e $u(r_0)$ representar qualquer ponto de acumulação da seqüência $\{u(r_k)\}$, então de (2.2.3),

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i \in I(x^*)} u_i(r_0) \nabla g_i(x^*).$$

Pela independência dos $\nabla g_i(x^*)$, $u_i(r_0) = u_i^*$ (para todo $i \in I(x^*)$). O que completa a demonstração de (ii) do teorema.

(4) Para todo i onde $u_i^* > 0$,

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} r_k \frac{\partial^2 B_i [g_i(x_k)]}{\partial g_i^2} = +\infty.$$

Para facilitar, seja $g_i[x(r_k)]$ escrita como $g_i(x_k)$ e $B_i[g_i(x_k)]$. Seja $j = j(k) < k$ um índice disponível para todo k de modo que $r_j > 2r_k$, $g_i(x_j) > g_i(x_k)$, e $\lim_{k \rightarrow \infty} r_j = 0$. Desde que $\{r_k\}$ é uma seqüência decrescente que tende a zero, tal índice está sempre disponível quando k for suficientemente grande. Agora,

$$r_k \left[\frac{\partial B_i [g_i(x_j)]}{\partial g_i} - \frac{\partial B_i [g_i(x_k)]}{\partial g_i} \right] \leq r_k [g_i(x_j) - g_i(x_k)] \cdot \frac{\partial^2 B_i [g_i(x_k)]}{\partial g_i^2},$$

usando a monotonicidade sobre $\partial^2 B_i / \partial g_i^2$. Também,

$$\frac{r_j}{2} \cdot \frac{\partial B_i [g_i(x_j)]}{\partial g_i} \leq r_k \cdot \frac{\partial B_i [g_i(x_j)]}{\partial g_i}, \quad (r_j > 2r_k, \frac{\partial B_i [g_i(x_j)]}{\partial g_i} < 0).$$

Daí, $0 < u_i^*/2 = \liminf_{k \rightarrow \infty} [1/2 \cdot r_j \cdot \frac{\partial B_i [g_i(x_j)]}{\partial g_i} - r_k \cdot \frac{\partial B_i [g_i(x_k)]}{\partial g_i}] \leq$

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} [g_i(x_j) - g_i(x_k)] r_k \cdot \frac{\partial^2 B_i [g_i(x_k)]}{\partial g_i^2}.$$

(lembrar que $j = j(k)$). A parte (4) segue da última desigualdade.

(5) Para r_k suficientemente pequeno a matriz $\nabla^2 U[x(r_k), r_k]$ é definida positiva. Usando a regra da cadeia, (r)

$$\nabla^2 U(x_k, r_k) = \nabla^2 f(x_k) - \sum_{i=1}^m u_i(r_k) \nabla^2 g_i(x_k) + \sum_{i=1}^m \nabla g_i(x_k) \cdot \frac{\partial^2 B_i [g_i(x_k)]}{\partial g_i^2} r_k \nabla^T g_i(x_k), \quad (2.2.4)$$

(x_k representa $x(r_k)$). Ignorando em (2.2.4) todas as matrizes $\nabla^2 g_i(x_k)$, para i onde $u_i^* = 0$, desde que têm uma contribuição desprezível para $\nabla^2 U(x_k, r_k)$ quando $r_k \rightarrow 0$, observando $z^T \nabla^2 U(x_k, r_k) z$, onde z é um vetor normalizado tal que $z^T \nabla g_i(x^*) \neq 0$ para algum i onde $u_i^* > 0$, vem $z^T \nabla^2 U(x_k, r_k) z > 0$, quando r_k for suficientemente pequeno, já que a contribuição do 3º termo de (2.2.4) é

$\geq |z^T \nabla g_i(r_k)|^2 r_k \cdot \frac{\partial^2 B_i[g_i(x_k)]}{\partial g_i^2}$, que tende a $+\infty$ (ver (4)) e claramente domina todos os outros termos.

Para aqueles valores de z , onde $z^T \nabla g_i(x^*) = 0$ (para todo i tal que $u_i^* > 0$), desde que as condições de suficiência do teorema 1.4.7 são supostas satisfeitas, então para r_k suficientemente pequeno

$$z^T \{ \nabla^2 f[x(r_k)] - \sum_{i=1}^m u_i(r_k) \nabla^2 g_i[x(r_k)] \} z > 0.$$

Se todo $u_i^* = 0$, notar que as condições implicam que x^* é de mínimo local sem restrições de $f(x)$. (o 3º termo de (2.2.4) sempre dá valor positivo quando multiplicado por z^2 , desde que $\partial^2 B_i[g_i(x_0)] / \partial g_i^2$ seja positivo quando $g_i(x_0) > 0$, $i = 1, 2, \dots, m$). Portanto, (5) está demonstrada.

(6) Para r_k suficientemente pequeno, qualquer $x(r_k)$ é de mínimo local isolado sem restrições de $U(x, r_k)$. Isto segue diretamente da parte (5) de 2.2.3) e do corolário 1.4.1.

(7) Para r_k suficientemente pequeno, em relação a qualquer $x(r_k)$ existe uma única função $x(r)$, uma vez diferenciável, tal que $x(r_0)$ é de mínimo local isolado sem restrições de $U(x, r_0)$. Além disso, $x(r)$ é definida para $r_k \geq r > 0$.

A existência de $x(r)$ numa vizinhança de r_k pode ser demonstrada a partir do teorema da função implícita, (ver 1.3.6), como segue. Para $x(r_k)$, de (2.2.3),

$$\nabla f[x(r_k)] - \sum_{i=1}^m u_i(r_k) \nabla g_i[x(r_k)] = 0. \tag{2.2.5}$$

Este é um sistema de n equações a $n+1$ variáveis. A matriz Jacobiana de (2.2.5) em relação a x é a matriz em (2.2.4). Em (5) foi demonstrado que, para r_k suficientemente pequeno, $\nabla^2 U[x(r_k), r_k]$ é definida positiva e, portanto, tem inversa. O teorema da função implícita pode ser usado desde que o Jacobiano de (2.2.5) não seja nulo. Então numa vizinhança de r_k há uma única função $x(r)$, uma vez diferenciável, passando através de $x(r_k)$ escolhido e tal que

$$\nabla f[x(r)] - \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i[x(r)] = 0.$$

Para $r \rightarrow r_k$, $x(r) \rightarrow x(r_k)$, $\nabla^2 U[x(r), r]$ é definida positiva e $x(r)$ define uma trajetória, continuamente diferenciável, de mínimos locais para todo $r_k \geq r > 0$. Seja $r_0 = \inf r$, para o qual $x(r)$ descreve uma trajetória de mínimos locais sem restrições. Seja $x(r_0)$ um ponto de acumulação de $x(r)$ quando $r \rightarrow r_0$. A existência de $x(r)$ está garantida pelo teorema 2.1.1 (já que pertence ao conjunto compacto dado pelo teorema). Desde que as funções envolvidas sejam contínuas, claramente (2.2.3) é satisfeita para $x(r_0)$.

Que $\nabla^2 U[x(r_0), r_0]$ é definida positiva pode ser visto supondo-se que r_k seja suficientemente pequeno já que para todo vetor unitário z tal que $z^T \nabla g_i(x^*) = 0$ (para todo i onde $u_i^* > 0$),

$$z^T \{ \nabla^2 f[x(r_k)] - \sum_{i=1}^m u_i(r_k) \nabla^2 g_i[x(r_k)] \} z > \epsilon_1 > 0,$$

e tal que $z^T \{ \nabla^2 U[x(r_k), r_k] \} z$ é dominado pelo 3º termo de (2.2.4) para qualquer outro z . Claramente, então $\nabla^2 U[x(r_0), r_0]$ é definida positiva, demonstrando que $x(r_0)$ é também de mínimo local isolado sem restrições. Daí existe uma vizinhança de r_0 e a função $x(r)$ pode ser estendida e definida para r nesta vizinhança, desde que r_0 não seja o ínfimo de todo $0 < r < r_k$, para o qual $x(r)$ define uma trajetória isolada, uma vez diferenciável, de mínimos / sem restrições. Isto contradiz a nossa suposição e, portanto, mostramos que existe uma trajetória isolada para $r_k \geq r \geq 0$. \square

2.2.2 - Análise da Trajetória Isolada.

Após estabelecer que sob certas condições há uma trajetória / isolada de pontos convergindo para um mínimo local, isolado, sem restrições. Mostraremos que sob as mesmas condições aquela trajetória terá uma ordem de diferenciabilidade em relação a r ($r > 0$). A partir de agora suporemos que estamos tratando com pontos de mínimos locais sem restrições sobre uma trajetória isolada.

É possível ser explícito quanto as derivadas de $x(r)$ em relação a r para $r > 0$. Desde que (2.2.1),

$$\nabla_x U[x(r), r] = \nabla_x f[x(r_k)] + r \nabla_x B[g[x(r)]] = 0,$$

é uma igualdade em r , podemos diferenciá-la obtendo

$$\nabla^2 U[x(r), r] = \nabla^2 f[x(r)] Dx(r) + \nabla^2 B[x(r)] Dx(r) r + \nabla B[x(r)] = 0,$$

ou,

$$\nabla^2 U[x(r), r] = \{ \nabla^2 f[x(r)] + r \nabla^2 B[x(r)] \} Dx(r) + \nabla B[x(r)] = 0, \text{ que implica,}$$

$$\nabla^2 U[x(r), r] Dx(r) + \nabla B[x(r)] = 0. \tag{2.2.6}$$

Sob condições do teorema 2.2.1, a matriz que multiplica $Dx(r)$ em (2.2.6) / possui inversa e então $Dx(r) = -\{ \nabla^2 U[x(r), r] \}^{-1} \nabla B[x(r)]$. Então a derivada de $x(r)$ em relação a r , existe para $r > 0$. Se diferenciarmos (2.2.6) novamente e em relação a r , temos

$$\nabla^2 U[x(r), r] D^2 x(r) + \frac{d \nabla^2 U[x(r), r]}{dr} Dx(r) + \nabla^2 B[x(r)] Dx(r) = 0.$$

Também para $D^2 x(r)$ a existência da inversa de $\nabla^2 U[x(r), r]$ é exigida, assim como a existência das derivadas parciais de 3ª ordem de f e g em relação a x , e as derivadas parciais de 3ª ordem de B em relação a g_1, \dots, g_m .

Continuando desta maneira, é possível obtermos explicitamente, todas as derivadas $D^{k-1}x(r)$ em termos das derivadas $D^i x(r)$, ($i = 1, \dots, k-2$), e derivadas parciais das funções do problema até no máximo de grau k (isto é garantido pelo teorema da função implícita, ver 1.3.6, desde que as funções do problema sejam de classe C^k). Um possível uso deste fato será tentar aproximar a solução de $x^* = x(0)$ usando-se uma aproximação finita da série de Taylor (ver 1.3.4),

$$x(0) \approx \sum_{i=1}^p \frac{D^i[x(r_1)](r_1)^i (-1)^i}{i!}. \quad (2.2.7)$$

Exatamente minimizando para $r = r_1$ e usando a técnica iterativa, descrita acima, para gerar as derivadas sucessivas de $D^i x(r)$ pode-se obter uma aproximação da solução usando o desenvolvimento em série de potências (2.2.7).

Chamamos a atenção para os fatos:

(a) f e $\{g_i\}$ dever ser analíticas, assim como B deve ser analítica de g (ver definição 1.3.4), para que $x(r)$ seja analítica numa vizinhança de $r_1 > 0$, onde $x(r)$ é uma trajetória isolada de mínimos locais sem restrições de $U(x, r)$;

(b) Devemos ter garantia de que r_1 , sendo convenientemente pequeno, o domínio de analiticidade de $x(r)$ em torno de r_1 inclua $r = 0$.

Estes fatos serão explicitados na análise que será feita a seguir, para a "nossa" função barreira logarítmica.

Mostraremos agora que o exemplo dado na seção 2.1.1 pode ser resolvido, por apenas uma minimização sem restrições, usando (2.2.7).

O exemplo seguinte:

Minimizar $x_1 + x_2$

Sujeita a

$$g_1(x_1, x_2) = -x_1^2 + x_2 \geq 0,$$

$$g_2(x_1, x_2) = x_1 \geq 0.$$

Aproveitando os resultados obtidos com a 1ª minimização sem restrições da seção 2.1, ou seja

$$x_1(r) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 8r}}{4} = 0,0500, \quad (r = 0,055)$$

e

$$x_2(r) = \frac{(-1 + \sqrt{1 + 8r})^2}{4} + r = 0,0575, \quad (r = 0,055).$$

Claramente, as funções do problema são infinitamente diferenciáveis. As derivadas, para $r = 0,055$, são dadas na tabela 2.2.1 com as avaliações baseadas nelas. Derivando $x_1(r)$ e $x_2(r)$ em relação a r , sucessivamente, obtemos:

(a) $Dx_1(r) = 0 + 1/4 \cdot 1/2(1 + 8r)^{-1/2} \cdot 8 = (1 + 8r)^{-1/2}$, e

(b) $Dx_2(r) = 2/16(-1 + \sqrt{1 + 8r}) \cdot 1/2(1 + 8r)^{-1/2} \cdot 8 + 1 =$

$$\frac{-1 + \sqrt{1 + 8r}}{2}(1 + 8r)^{-1/2} = 2x_1 Dx_1 + 1.$$

De (a) e (b), vem :

(c) $D^2x_1(r) = -4(1 + 8r)^{-3/2}$ e $D^2x_2(r) = 2(Dx_1)^2 + 2x_1 D^2x_1$, e, de (c)

$D^3x_1(r) = 48(1 + 8r)^{-5/2}$ e $D^3x_2(r) = 6Dx_1 D^2x_1 + 2x_1 D^3x_1$.

Derivada	Expressão	Valor num.	Aval.Solução
$Dx_1(r)$	$(1+8r)^{-1/2}$	0,8333	0,00417
$Dx_2(r)$	$2x_1 Dx_1 + 1$	1,0833	-0,00208
$D^2x_1(r)$	$-4(1+8r)^{-3/2}$	-2,3145	0,00067
$D^2x_2(r)$	$2(Dx_1)^2 + 2x_1 D^2x_1$	1,1573	-0,00033
$D^3x_1(r)$	$48(1 + 8r)^{-5/2}$	19,2875	0,00014
$D^3x_2(r)$	$6(Dx_1)^2 D^2x_1 + 2x_1 D^3x_1$	7,7153	-0,00054

Tabela 2.2.1

Observamos que as estimativas do ótimo estão convergindo. A / convergência não é rápida. Se tivéssemos começado com um valor menor de r, as estimativas teriam convergido mais rapidamente.

Análise da Trajetória para a Função Barreira Logarítmica para r = 0.

Mostraremos que sob condições apropriadas, existem trajetórias com diferentes ordens de diferenciabilidade (em relação a r) convergindo para pontos de mínimos locais isolados. A questão é se existem ou não os limites dessas derivadas para r = 0. Uma hipótese adicional é necessária para / provar que esses limites são finitos. Isto porque quando eles forem finitos/ é possível desenvolver um esquema baseado no uso dos valores de x(r) ao longo desta trajetória para fazer uma estimativa de $x^* = x(0)$, corretamente, / (ver seção 3.4 para aplicações computacionais).

Entre as análises possíveis desses limites para alguma função de minimização sem restrições por pontos interiores, a escolha precisa / de r_q para o qual $d[x(0)]/dr_q$ (e todas as derivadas sucessivas) seja finita depende da particular escolha de $B(x)$. Agora, seja $B(x) = -\sum_{i=1}^m \ln g_i(x)$. Nossa função para minimizações sem restrições é então

$$P(x, r) = f(x) - r \cdot \sum_{i=1}^m \ln g_i(x). \tag{2.2.8}$$

Retomando os resultados do teorema 2.2.1 as duas igualdades / em r que são satisfeitas para $x(r)$, aplicadas à função barreira logarítmica (2.2.8), nos dão

$$\nabla f[x(r)] - \sum_{i=1}^m u_i(r) \nabla g_i[x(r)] = 0, \tag{2.2.9}$$

e

$$u_i(r) g_i[x(r)] = r, \quad i = 1, 2, \dots, m. \tag{2.2.10}$$

(Para formas diferentes de $B(x)$, (2.2.10) deve ser modificada. Para a função $P_1(x, r) = f(x) + r^2 \cdot \sum_{i=1}^m 1/g_i(x)$ a igualdade (2.2.10) será substituída por $u_i^{1/2}(r) g_i[x(r)] = r$, e as derivadas em relação a r calculadas de maneira similar como a seguinte). Consideremos x e u como funções de r . Diferenciando em relação a r vem

$$\nabla^2 f[x(r)] Dx(r) - \sum_{i=1}^m u_i(r) \nabla^2 g_i[x(r)] Dx(r) - \sum_{i=1}^m \nabla g_i[x(r)] Du_i(r) = 0$$

e

$$u_i(r) \nabla^T g_i[x(r)] Dx(r) + g_i[x(r)] Du_i(r) = 1, \text{ ou em forma matricial}$$

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f - \sum u_i \nabla^2 g_i & -\nabla g_1 & \dots & -\nabla g_m \\ u_1 \nabla^T g_1 & g_1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & & & g_m \\ u_m \nabla^T g_m & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Dx(r) \\ Du_1(r) \\ \vdots \\ Du_m(r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \tag{2.2.11}$$

Onde a matriz em (2.2.11) é avaliada para $[x(r), u(r)]$. Para demonstrarmos que $\lim_{k \rightarrow \infty} [Dx(r), Du(r)]$ existe é suficiente demonstrarmos que as $m+n$ equações de

(2.2.9) e (2.2.10) em (x, u, r) para $r = 0$ são unicamente satisfeitas por (x^*, u^*) ; isto é, a matriz Jacobiana de (2.2.9) e (2.2.10) em relação as $m+n$ variáveis, componentes de (x, u) , possui uma inversa para $r = 0$. Essa matriz com valor em (x^*, u^*) é a mesma que a matriz dada em (2.2.11), quando calculamos o limite para $r \rightarrow 0$. Este fato exige o seguinte teorema.

Teorema 2.2.2 - (Existência de $Dx(0)$, $Du(0)$). - Se:

- (a) - as funções f e $\{g_i\}$ forem duas vezes diferenciáveis;
- (b) - os gradientes $\{\nabla g_i(x^*)\}$ (para todo $i \in I(x^*)$) forem linearmente independentes;
- (c) - a estrita complementaridade se mantém para $u_i^* g_i(x^*) = 0$, $i = 1, 2, \dots, m$; isto é, $u_i^* > 0$ se $g_i(x^*) = 0$, e
- (d) - as condições de suficiência (1.4.21) a (1.4.24) para que x^* seja ponto de mínimo local sem restrições do problema (A) forem satisfeitas por (x^*, u^*) ; então existe uma única função $[x(r), u(r)]$, continuamente / diferenciável, satisfazendo (2.2.9) e (2.2.10), para a qual (quando $r > 0$) / $x(r)$ descreve uma trajetória isolada de mínimos locais de $P(x, r)$, $x(r) \rightarrow x^*$ e $u(r) \rightarrow u^*$. Além disso se as funções f e $\{g_i\}$ forem diferenciáveis / até a ordem k , então as funções $[x(r), u(r)]$ possuem derivadas de ordem $k-1$ ($D^{k-1}x(r)$, $D^{k-1}u(r)$) numa vizinhança de $r = 0$.

Demonstração.- Necessitamos somente mostrar que a matriz em / (2.2.11) é não singular para (x^*, u^*) e então aplicarmos o teorema da função / implícita, (ver 1.3.6), para obtermos a função diferenciável $[x(r), u(r)]$. Desde que ela é única e satisfaz (2.2.9) e (2.2.10), $x(r)$ deve ser uma trajetória isolada (quando $r > 0$) cuja existência foi demonstrada no teorema 2.2.1; isto é, sob as condições de complementaridade estrita, há somente uma trajetória isolada convergindo para x^* . Para demonstrarmos a existência da inversa / necessitamos somente mostrar que não há solução além da trivial (nula) do sistema, (ver [07], pág. 25),

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla^2 g_i(x^*) & -\nabla g_1(x^*) & \dots & -\nabla g_m(x^*) \\ u_1^* \nabla^T g_1(x^*) & g_1(x^*) & & \\ \vdots & & \ddots & \\ u_m^* \nabla^T g_m(x^*) & & & g_m(x^*) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_{21} \\ \vdots \\ z_{2m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.2.12)$$

Obviamente $z_{2i} = 0$, para todo i tal que $g_i(x^*) > 0$. Também $u_i^* \nabla^T g_i(x^*) z_1 = 0$, para todo i tal que $g_i(x^*) = 0$ (para todo $i \in I(x^*)$). (2.2.13)

Mas desde que a estrita complementaridade foi suposta satisfeita, (2.2.13) / implica $\nabla^T g_i(x^*) z_1 = 0$ (para todo $i \in I(x^*)$). É claro então que

$$\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla^2 g_i(x^*) = \nabla^2 f(x^*) - \sum_{i \in I(x^*)} u_i^* \nabla^2 g_i(x^*).$$

Pré multiplicando (2.2.12) por $[z_1^T, z_2^T]$, obtemos

$$z_1^T [\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i \in I(x^*)} u_i^* \nabla^2 g_i(x^*)] z_1 + \sum_{i=1}^m (z_{2_i})^2 \cdot g_i(x^*) = 0.$$

Mas quando $g_i(x^*) = 0$, $(z_{2_i})^2 g_i(x^*) = 0$, e, a partir da igualdade acima, $z_{2_i} = 0$, para $g_i(x^*) > 0$. Assim

$$z_1^T [\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i \in I(x^*)} u_i^* \nabla^2 g_i(x^*)] z_1 = 0. \quad (2.2.14)$$

Mas desde que z_1^T é ortogonal a todo ∇g_i , $i \in I(x^*)$, veja (2.2.13).

De (1.2.24) temos $z_1^T \nabla^2 P(x^*, u^*) z_1 > 0$, se $z_1 \neq 0$. Assim $z_1 = 0$. Então de (2.2.12), vem

$$\sum_{i \in I(x^*)} z_{2_i} \nabla g_i(x^*) = 0. \quad (2.2.15)$$

Já que os $\nabla g_i(x^*)$, para $i \in I(x^*)$, foram supostos linearmente independentes, $z_{2_i} = 0$ para todo $i \in I(x^*)$. Mas acima foi mostrado que $z_{2_i} = 0$ para todo $i \notin I(x^*)$. Assim $z_2 = 0$ para todas as soluções de (2.2.12), igualmente $z_2 = 0$.

A última parte do teorema segue diretamente do teorema da função implícita dada na subseção 1.3.6. \square

A necessidade da estrita complementaridade para implicar a existência de $dx(0)/dr$ (e todas as derivadas) é ilustrado pelo seguinte exemplo:

Minimizar x_2

Sujeita a

$$-x_1^2 + x_2 \geq 0,$$

$$x_1 \geq 0.$$

A solução será $x^* = (0, 0)^T$, com $g_1(x^*) = g_2(x^*) = 0$, e para determinarmos u_1^* , u_2^* , devemos observar:

a) $u_1^* \geq 0; \quad u_2^* \geq 0;$

b) $u_1^* g_1(x^*) = 0; \quad u_2^* g_2(x^*) = 0$, e

c) $\nabla P(x^*, u^*) = 0$.

De (b) $u_1^* \cdot 0 = 0$, então $u_1^* \in \mathbb{R}$ (qualquer), e

$u_2^* \cdot 0 = 0$, então $u_2^* \in \mathbb{R}$ (qualquer).

De (c) $\nabla P(x^*, u^*) = \nabla f(x^*) - u_1^* \nabla g_1(x^*) - u_2^* \nabla g_2(x^*) = 0$, então

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} - u_1^* \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} - u_2^* \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

ou, $\left\{ \begin{array}{l} -u_1^*(0) - u_2^* \cdot 1 = 0 \implies u_1^* \in \mathbb{R} \quad \text{e} \quad u_2^* = 0 \\ 1 - u_1^* - 0 \cdot u_2^* = 0 \implies u_1^* = 1. \end{array} \right.$

Logo, $(u_1^*, u_2^*) = (1, 0)$. Chamamos a atenção para o fato que a hipótese (c), estrita complementaridade, do teorema 2.2.2 não está satisfeita. A função bareira logarítmica aplicada neste problema transforma-o em

$$P(x, r) = x_2 - r \cdot \ln(-x_1^2 + x_2) - r \cdot \ln x_1.$$

Aplicando a condição necessária para a existência de ponto estacionário, temos :

$$\frac{\partial P}{\partial x_1} = \frac{2x_1 r}{-x_1^2 + x_2} - \frac{r}{x_1} = 0, \text{ e } \frac{\partial P}{\partial x_2} = 1 - \frac{r}{-x_1^2 + x_2} = 0. \text{ Então}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 2x_1^2 r - r(-x_1^2 + x_2) = 0 \\ -x_1^2 + x_2 - r = 0 \end{array} \right. \quad \text{ou,} \quad \left\{ \begin{array}{l} 2x_1^2 r + rx_1^2 - rx_2 = 0 \\ x_2 = x_1^2 + r \end{array} \right.$$

que implica, $3rx_1^2 - r(x_1^2 + r) = 0$, ou $2rx_1^2 - r^2 = 0$.

Daí, $x_1 = \pm \sqrt{r/2}$, e como $x_1 \geq 0$, então $x_1(r) = (r/2)^{1/2}$ e $x_2(r) = 3r/2$.

Ainda que $d^i x(r_1)/dr_1^i$ existam para todo $r_1 > 0$, o valor limite quando $r_1 \rightarrow 0$ é $+\infty$, pois $dx_1(r)/dr = (1/4) \cdot (r/2)^{-1/2}$. Portanto, / há necessidade da estrita complementaridade ($u_1^* > 0$, se $g_1(x^*) = 0$), para a existência de $d[x(0)]/dr$ (e todas as derivadas sucessivas).

A analiticidade da função $P(x, r) = f(x) - r \cdot \sum_{i=1}^m \ln g_i(x)$ mantém-se para $r = 0$ sob estas mesmas condições, quando as funções do problema forem analíticas (ver 1.3.4).

Corolário 2.2.1 (Analiticidade de $x(r)$ para $r = 0$)- Se incluirmos nas hipóteses do teorema 2.2.2 que as funções e $\{g_i\}$ sejam reais analíticas, há uma única função analítica $x(r)$ numa vizinhança de $r = 0$, a qual, para $r > 0$, define uma trajetória de mínimos locais sem restrições, que converge para $x^* = x(0)$.

Demonstração.- A demonstração segue a partir da existência da inversa da matriz em (2.2.12), da analiticidade das funções envolvidas, e da forma apropriada do teorema da função implícita, já r_eferenciado. ■

2.3 - Programação Convexa.

Não faremos aqui um desenvolvimento amplo da teoria de programação convexa e dualidade, pois a literatura, sobre elas é vasta, como por / exemplo [05] ou [06]. Necessitamos apenas de alguns conceitos para continuarmos o nosso desenvolvimento.

Até aqui a condição mais forte sobre as funções do problema / foi a ordem de suas derivadas. Os teoremas foram demonstrados em torno de mínimos locais; isto é, dando informações numa vizinhança daqueles pontos. Para a importante classe de problemas, chamados de programação convexa, informações locais são também globais. Uma propriedade forte é que mínimos / locais são globais.

Desenvolveremos conceitos básicos sobre a teoria da dualidade e mostraremos que as propriedades básicas de convexidade transferem-se para algoritmos de minimizações sem restrições.

Vários resultados adicionais importantes sobre convexidade estão a seguir:

- (i) uma solução local x^* é solução global do problema (A);
- (ii) a função usada para transformar o problema (A) em uma sequência de minimizações sem restrições preserva as propriedades de convexidade, desde que seja feita uma restrição adicional (ver teorema 2.3.5 a seguir).
- (iii) Uma relação entre o "primal" e o "dual" será evidenciada e explorada pelos métodos dados a aqui.

2.3.1 - Convexidade: Definições e Propriedades.

Começaremos rerepresentando a definição de conjunto convexo, dada na seção 1.2.

Definição. - Um conjunto $T \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo se toda a combinação convexa de pontos em T pertencer também a T , (ou equivalentemente, todo segmento de reta que une dois pontos de T pertence também a T); isto é, para todo $\lambda \in [0, 1]$, e para todo $x_1, x_2 \in T$, $[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \in T$.

Lema 2.3.1 - A interseção de um número finito de conjuntos convexos é um conjunto convexo; isto é, se cada S_i ($i = 1, \dots, m$) for um conjunto convexo, então $S = \bigcap_{i=1}^m S_i$ é convexo.

Demonstração. - Se S for unitário ou vazio o lema é trivial. Se x_1 e x_2 forem dois pontos de S , então pela definição de interseção $x_1 \in S_i$ ($i = 1, \dots, m$), $x_2 \in S_i$ ($i = 1, \dots, m$), e, também $[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \in S_i$ ($i = 1, \dots, m$), daí $[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \in \bigcap_{i=1}^m S_i$. □

Definição: - Uma função f é convexa de x sobre um conjunto convexo não vazio S se para todo par de pontos $x_1, x_2 \in S$, e todo $\lambda \in [0, 1]$, $f[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2)$. (2.3.1)

A função é estritamente convexa se a desigualdade (2.3.1) for estrita quando $0 < \lambda < 1$ e $x_1 \neq x_2$.

Se f for de classe C^1 para $x \in S$, então uma definição equivalente de uma função convexa é:

$$f(x_2) \geq f(x_1) + (x_2 - x_1)^T \nabla f(x_1), \quad (2.3.2)$$

para todo $x_1, x_2 \in S$; f é estritamente convexa em S se a desigualdade (2.3.2) for estrita, sempre que $x_1 \neq x_2$.

Lema 2.3.2 - Se $f(x)$ for uma função convexa sobre um conjunto S , então, para todo $k \in \mathbb{R}$, $S_k = \{x: f(x) \leq k, x \in S\}$ será um conjunto convexo.

Demonstração. - Se S_k for unitário ou vazio o lema é trivial. /
Se x_1 e x_2 forem dois pontos em S_k , então $\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 \in S$, /
 $f[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) \leq \lambda k + (1 - \lambda)k = k$. Assim,
 $[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \in S_k$. ■

Lema 2.3.3 - Se f_1, \dots, f_m forem funções convexas sobre um /
conjunto S , então $f(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x)$ será uma função convexa em S . (S convexo).

Demonstração. - Se x_1 e x_2 forem dois pontos em S ,
 $f[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] = \sum_{i=1}^m f_i[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \leq \sum_{i=1}^m [\lambda f_i(x_1) + (1 - \lambda)f_i(x_2)] =$
 $= \lambda \sum_{i=1}^m f_i(x_1) + (1 - \lambda) \sum_{i=1}^m f_i(x_2) = \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2)$. ■

Definição. - Uma função $g(x)$ é côncava sobre um conjunto convexo S se $-g(x)$ for uma função convexa sobre S .

Vários fatos seguem da definição de concavidade e dos lemas demonstrados para as funções convexas.

Se $g(x)$ for uma função côncava sobre um conjunto convexo S , então:

(i) $g[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \geq \lambda g(x_1) + (1 - \lambda)g(x_2)$, onde $\lambda \in [0, 1]$,
 $x_1, x_2 \in S$; (2.3.3)

(ii) $g(x_1) \leq g(x_2) + (x_1 - x_2)^T \nabla g(x_2)$, onde $x_1, x_2 \in S$, quando
 g for de classe C^1 ; (2.3.4)

(iii) $T_k = \{x: g(x) \geq k, x \in S\}$ é um conjunto convexo (possivelmente vazio), para todo $k \in \mathbb{R}$; (2.3.5)

(iv) se $g_i, i = 1, \dots, p$, forem funções côncavas em S , então /
 $g(x) = \sum_{i=1}^p g_i(x)$ será uma função côncava em S . (2.3.6)

2.3.2 Programação Convexa.

Definição: - Um problema, com restrições de desigualdade, de programação convexa é escrito:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } f(x) \\ & \text{Sujeita a} \qquad \qquad \qquad (C) \\ & \qquad \qquad \qquad g_i(x) > 0, \quad i=1, \dots, m, \qquad (2.3.7) \end{aligned}$$

onde $f(x)$ é uma função convexa e cada $g_i(x)$ côncava.

A forte propriedade que todo mínimo local de (C) é mínimo global é demonstrada pelo teorema seguinte.

Teorema 2.3.1 - (Propriedade da Convexidade: Local e Global).

Toda solução local x^* do problema de programação convexa (C) é uma solução global.

Demonstração. Segue da concavidade das propriedades e lemas da subseção 2.3.1 que $D = \{x: g_i(x) \geq 0, i=1, \dots, m\}$ é um conjunto convexo, e que se x_1, x_2 satisfazem (2.3.7), então $\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2$ satisfaz (2.3.7) para todo $\lambda \in [0, 1]$. Já que x^* é de mínimo local, segue da definição de mínimo local que existe um conjunto compacto S , tal que $x^* \in S^o$, e

$$f(x^*) = v^* = \min f(x).$$

$$D \cap S$$

Seja x_0 algum outro ponto em D , mas não necessariamente em S . Seja λ tal que $[\lambda x^* + (1 - \lambda)x_0] \in (D \cap S)$, e $\lambda \in (0, 1)$, então pela convexidade de f , $f[\lambda x^* + (1 - \lambda)x_0] \leq \lambda f(x^*) + (1 - \lambda) f(x_0)$, o que implica

$$f(x_0) \geq \frac{f[\lambda x^* + (1 - \lambda)x_0] - \lambda f(x^*)}{1 - \lambda} \geq \frac{f(x^*) - \lambda f(x^*)}{1 - \lambda}$$

(x^* é de mínimo local em $D \cap S$), ou

$$f(x_0) \frac{(1 - \lambda) f(x^*)}{1 - \lambda} = f(x^*). \text{ Logo, } x^* \text{ é}$$

também global. \square

Para problemas de programação convexa quando as funções forem de classe C^1 as condições de Kuhn-Tucker de 1.^a ordem (teorema 1.4.4), são também suficientes para que x^* , satisfazendo (2.3.7), seja mínimo local sem restrições, e pelo teorema 1 acima, também global do problema (C). Este resultado é sumarizado pelo teorema que segue.

Teorema 2.3.2. (Teorema de Suficiência de Kuhn-Tucker).

Se as funções f e $\{g_i\}$ forem de classe C^1 , então a condição suficiente para que x^* , satisfazendo (2.3.7), seja uma solução do problema de programação convexa (C) é que existam escalares u_1^*, \dots, u_m^* , tais que:

$$u_i^* g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.3.8)$$

$$u_i^* \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.3.9)$$

$$\nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(x^*) = 0. \quad (2.3.10)$$

Demonstração. - Seja $x_0 \neq x^*$, x_0 satisfazendo as restrições do problema (2.3.7). Então,

$$f(x_0) \geq f(x_0) - \sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x_0) \geq f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x^*) + (x_0 - x^*)^T [\nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(x^*)].$$

(A última desigualdade deve-se à convexidade de f , (2.3.2), e à concavidade das g_i 's, (2.3.4)); e daí $f(x_0) \geq f(x^*)$, por (2.3.8) a (2.3.10).

Desde que a qualificação de 1ª ordem das restrições - lema 1.4.1 e (2.3.8) a (2.3.10) do teorema 2.3.2 sejam satisfeitas, as condições necessárias e suficientes, para x^* ser de mínimo local sem restrições ficam estabelecidas, com referência ao problema (C).

É de interesse observar que automaticamente as condições de 2ª ordem ficam satisfeitas, pois a matriz $\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla^2 g_i(x^*)$ é semi-definida positiva (ver 1.3.5) quando f for convexa e as g_i 's côncavas (supondo-se a diferenciabilidade de 2ª ordem).

Teoria da Dualidade.

Para problemas de programação convexa foi desenvolvida a teoria da dualidade, ou programação dual. Este estudo é baseado no fato que / (2.3.10), que estabelece uma das condições para que x^* seja a solução do problema (C), também estabelece que x^* é de mínimo sem restrições da função Lagrangiana convexa $L(x^*, u^*)$. Esta proposição é uma propriedade somente de / problemas de programação convexa. Chamaremos o problema (C) o problema primal usando exatamente (2.3.9) e (2.3.10), ignorando a exigência ou viabilidade / do primal ($g_i(x) \geq 0, i = 1, \dots, m$), e as condições de complementaridade / (2.3.8). A forma diferencial básica do dual é para se determinar (x_D, u_D) , / que resolve o problema:

$$\begin{aligned} &\text{Maximizar } L(x, u) \\ &\text{Sujeita a} \end{aligned} \quad (D)$$

$$\nabla_x L(x, u) = 0, \quad (2.3.11)$$

$$u_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (2.3.12)$$

Este problema é o dual de (C).

Teorema 2.3.3 - Se f e $- \{g_i\}$ forem funções convexas, $y \in D$, /
for algum primal viável, e (x_0, u_0) qualquer ponto dual viável, então /
 $f(y) \geq L(x_0, u_0)$.

Demonstração.-

$$\begin{aligned} f(y) &\geq f(y) - \sum_{i=1}^m u_{0i} g_i(y_i) \geq f(x_0) - \sum_{i=1}^m u_{0i} g_i(x_0) + (y-x_0)^T [\nabla f(x_0) - \sum_{i=1}^m u_{0i} \nabla g_i(x_0)] = \\ &= f(x_0) - \sum_{i=1}^m u_{0i} g_i(x_0) = L(x_0, u_0). \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Uma das aplicações do teorema 2.3.3 é que se pontos duais viáveis forem gerados por algoritmos que resolvem (C) então o limite inferior v^* , o valor ótimo de (C), estará disponível (Veja observação (ii) a seguir).

Teorema 2.3.4 - (Existência da Solução Dual). - Se a qualificação de 1ª ordem das restrições for satisfeita para x^* (lema 1.4.1), uma solução do problema (C), então existe uma solução do problema (D), e o valor máximo de L é igual ao valor mínimo de f para $x \in D$.

Demonstração.- Seja u^* , cuja existência para x^* está garantida pelo teorema 1.4.4, da seção 1.4 (Condições Necessárias de Kuhn-Tucker). Pelo teorema 2.3.3 $L(x^*, u^*) = v^*$. Usando (2.3.8) ($u_i^* g_i(x^*) = 0$, $i = 1, \dots, m$), /
 $L(x^*, u^*) = v^*$, e assim (x^*, u^*) deve ser uma solução de (D). \blacksquare

Em certos casos é possível modificar (D) e eliminar a dependência de x . O problema (D) pode ser formulado somente em termos da maximização / do problema em u , dando correto "sabor dual" ao mesmo. No entanto, não trataremos destes fatos no presente trabalho (Ver [05] ou [06]).

Teorema 2.3.5 - (Convexidade da Função sem Restrições). - Se B for uma função convexa decrescente de $g = (g_1, \dots, g_m)^T$ para $g > 0$, onde cada g_i é uma função côncava, então $B[g_i(x)]$ será uma função convexa de x em /
 $D^0 = \{x: g(x) > 0\}$. Além disso, se f for uma função convexa de x , então /
 $U(x, r_k) = f(x) + r_k B[g(x)]$ será uma função convexa em D^0 com $r_k > 0$.

Demonstração.- Suponhamos que $x_1, x_2 \in D^0$, então para $0 \leq \lambda \leq 1$
 $g[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2] \geq \lambda g(x_1) + (1 - \lambda)g(x_2) > 0$. (Concavidade de cada compo —
nente de g). Daí $B\{g[\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2]\} \leq B[\lambda g(x_1) + (1 - \lambda)g(x_2)]$, (B é uma/
função decrescente de g , por hipótese), e
 $B[\lambda g(x_1) + (1 - \lambda)g(x_2)] \leq B[\lambda g(x_1)] + (1 - \lambda)B[g(x_2)]$, (2.3.13)
(Convexidade de B em g , por hipótese).

Já que f é convexa, por hipótese, $B[g(x)]$ convexa, por (2.3.13) e a soma das funções convexas é convexa, pelo lema 2.3.3, então

$U(x, r) = f(x) + r_k B[g(x)]$ é uma função convexa de x em D^0 com $r_k > 0$, e a demonstração está completa. ■

Observações:

(i) as funções $\sum_{i=1}^m 1/g_i(x)$ e $-\sum_{i=1}^m \ln g_i(x)$ são definidas decrescentes e convexas em g , quando $g > 0$;

(ii) em relação à função barreira logarítmica e a propriedade / do dual dada no teorema 2.3.3, é possível determinar a diferença entre os valores da função objetivo primal e dual para o mínimo do primeiro r , e assim resolver o problema em apenas uma minimização sem restrições. Suponhamos que se deseje conhecer o valor ótimo da função objetivo que seja menor do que ϵ . Seja / $r_1 = \epsilon/m$. Então

$$f[x(r_1)] \geq v^* \geq f[x(r_1)] - \sum_{i=1}^m \frac{r_1}{g_i[x(r_1)]} g_i[x(r_1)] =$$

$$= f[x(r_1)] - \sum_{i=1}^m \epsilon/m = f[x(r_1)] - \epsilon; \text{ Assim, o valor ótimo é /}$$

determinado menor do que ϵ .

2.4 - Outras Técnicas para Minimizações sem Restrições, por Pontos Interiores.

2.4.1 - Substituição de r_k pelo vetor (r_{k1}, \dots, r_{km}) . - Um m)

Um bom algoritmo para minimizações sem restrições possui muitas propriedades. Primeiro, ele deve ser capaz de tirar vantagem da escolha inicial de r . Assim, se a própria escolha do valor do parâmetro implicar que x_0 (ponto inicial) seja um mínimo sem restrições da função $U(x, r)$, o algoritmo deve iniciar determinando/ esse ponto. Também, se x_0 estiver próximo da solução com restrições, então o algoritmo seleciona os parâmetros de modo que os pontos que minimizam a função $U(x, r)$ estejam também próximos da solução do problema original. Um algoritmo / ideal antecipará quais restrições não são importantes para a solução, ignorando-as no procedimento computacional. Se a solução para um problema com restrições for no momento, sem restrições, será interessante que o algoritmo dê a solução do problema em apenas uma minimização sem restrições da função $U(x, r)$. Para esse fim, modificamos o algoritmo para minimizações sem restrições, desenvolvido em 2.1.1, como a seguir. Selecionamos valores não negativos de $\{r_{ki}\}$, / $i = 1, \dots, m$, tais que a função auxiliar seja da forma

$$V(x, \{r_{ki}\}) = f(x) + \sum_{i=1}^m r_{ki} B_i[g_i(x)]. \quad (2.4.1)$$

Esta é uma função de minimização sem restrições para pontos interiores, que é aplicada ao problema (A), como definida em 2.1.

Um algoritmo "revisado" é dado a seguir:

- (1) usando algum critério selecionamos valores r_{1i} , $i=1, \dots, m$, onde $r_{1i} \geq 0$, para todo i ;
- (2) minimizamos $V(x, \{r_{1i}\})$ em D^0 . Se durante o curso da minimização alguma g_i tornam-se inviável e o correspondente $r_{1i} = 0$, fixamos para ele um valor estritamente positivo e continuamos minimizando a função $V(x, \{r_{1i}\})$, partido do último ponto viável em D^0 , que foi obtido;
- (3) suponhamos que $V(x, \{r_{1i}\})$ seja minimizada. Para toda g_i , $1 \leq i \leq m$ e $r_{1i} > 0$, o "peso" r_{2i} sobre $B_i(g_i)$ é selecionado tal que $0 < r_{2i} \leq r_{1i}$. Para os outros valores $r_{2i} = r_{1i} = 0$;
- (4) aplicamos algum método para a minimização de $V(x, \{r_{2i}\})$ (ver seção 3.1);
- (5) continuamos o processo pela sequência $\{r_{ki}\}$, $k = 1, \dots$, onde $\lim_{k \rightarrow \infty} r_{ki} = 0$, $i=1, \dots, m$, e $g_i(x_k) > 0$, e x_k é de mínimo sem restrições de $V(x, \{r_{ki}\})$ em D^0 .

Este algoritmo modificado converge para soluções locais do problema (A) sob as mesmas condições do algoritmo apresentado na seção 2.1. Isto ocorre porque, como antes, a escrita viabilidade é mantida em D^0 .

Uma questão interessante é com relação ao critério de seleção dos valores "pesos", que podem reduzir as exigências computacionais para resolver o problema de programação. Oferecemos duas sugestões de como selecioná-los e mostramos exemplos da eficiência na escolha.

Critério 1.

Seja x_0 um ponto dado. Procedendo de acordo com o algoritmo, quando alguma g_i ($1 \leq i \leq m$) for violada, um $r_{1i} > 0$ é atribuído à correspondente $B_i(g_i)$ de acordo com a "regra de cálculo", definida abaixo, e o algoritmo prossegue do "último ponto interior viável". Se a "regra de cálculo" determina $r_{1i} = 0$, para algum i , então este parâmetro é substituído por algum valor "pequeno", positivo.

Critério 2.

Regra de Cálculo. Se para algum ponto y um subconjunto de valores de $\{r_{ki}\}$ deve ser escolhido, escolhem-se valores não negativos que minimizam a norma do gradiente da função $V(x, \{r_{ki}\})$ para aquele ponto.

Portanto temos que resolver o seguinte problema de programação quadrática:

$$\text{Minimizar } \|b - As\|^2 \quad (2.4.2)$$

Sujeita a

$$s \geq 0.$$

Escolhendo $\{r_{k_i}\}$ de acordo com a regra de cálculo devemos resolver o problema de programação convexa acima, onde a função objetivo é uma forma quadrática definida positiva e as restrições são simplesmente negativas.

Expandindo (2.4.2), temos

$$\|b - As\|^2 = \langle b - As, b - As \rangle.$$

Sejam ∇g_i , $i = 1, \dots, m$ os vetores colunas de A e $f(s) = \|b - As\|^2$. Então

$\nabla f(s_i) = 2 \langle -\nabla g_i, b - \nabla g_i s_i \rangle$ e aplicando a condição necessária para a existência de ponto crítico, obtemos:

$$2 \langle -\nabla g_i, b - \nabla g_i s_i \rangle = 0, \text{ que implica}$$

$$-b^T \nabla g_i + \nabla^T g_i \nabla g_i s_i = 0 \text{ e daí}$$

$$s_i = \frac{b^T \nabla g_i}{\nabla^T g_i \nabla g_i} \quad (2.4.3)$$

O exemplo seguinte, dado em [04], ilustra o algoritmo aqui proposto.

$$\text{Minimizar } x_1 + x_2$$

Sujeita a

$$g_1(x_1, x_2) = -x_1^2 + x_2 + 2 \geq 0,$$

$$g_2(x_1, x_2) = -x_1^2 - x_2 + 2 \geq 0,$$

$$g_3(x_1, x_2) = -x_1 - x_2 + 3 \geq 0.$$

O problema está representado na figura 2.4.1, abaixo:

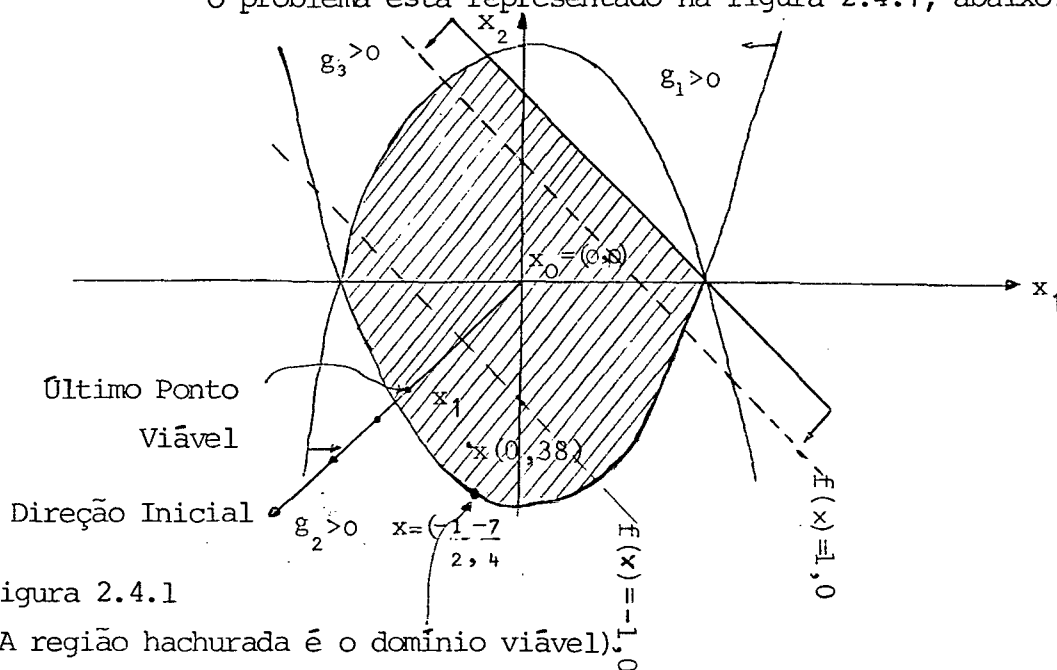


Figura 2.4.1

(A região hachurada é o domínio viável).

Vamos supor que o ponto de partida seja $x_0 = (0, 0)$, e a função auxiliar a função barreira logarítmica, ou seja,

$$V(x, \{r_{k_i}\}) = x_1 + x_2 - r_{k_1} \ln(-x_1^2 + x_2 + 2) - r_{k_2} \ln(-x_1^2 - x_2 + 2) - r_{k_3} \ln(-x_1 - x_2 + 3).$$

Tentando minimizar $f(x)$, suponhamos que escolhemos dar um passo decrescente na direção do seu gradiente $(1, 1)^T$, usando algum processo para governar o "tamanho" do passo; eventualmente alcançamos um ponto que viola a restrição g_1 . Seleccionamos algum ponto interior viável ao longo da reta, por exemplo $(-1 + \epsilon, -1 + \epsilon)$, onde $\epsilon > 0$. Seja $\epsilon = 0,1$ dando $g_1(x_1, x_2) = 0,29$; $\nabla g_1 = (1,8; 1,0)$, pois $\nabla g_1 = (-2x_1, 1,0)$ e $\nabla g_1(-0,9; 0,9) = (1,8; 1,0)$. A regra do cálculo exige minimização da norma do gradiente da função $V(x, \{r_{k_i}\})$. Para este exemplo, o gradiente em $(-0,9; -0,9)$ é

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{r_{11}}{0,29} \begin{bmatrix} 1,8 \\ 1,0 \end{bmatrix}.$$

Resolvendo o problema de programação quadrática:

$$\text{Minimizar } \left\| \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - r_{11} \begin{bmatrix} 6,21 \\ 3,45 \end{bmatrix} \right\|$$

Sujeita a

$$r_{11} \geq 0,$$

temos que r_{11} resolve este problema com valor 0,38, usando (2.4.3). Nossa função sem restrições é agora $V(x, r_{11}) = x_1 + x_2 - (0,38) \ln(-x_1^2 + x_2 + 2)$. Usando meios analíticos usuais, determinamos o ponto mínimo de $V(x, r_{11})$, $x(0,38) = -0,50$, $x_2 = -1,37$; desde que $(-0,50; -1,37)^T$ é viável em relação a g_2 e g_3 . Se V for minimizada por meios numéricos (Ver capítulo III) r_{12} e r_{13} nunca seriam introduzidos. Assim o esforço computacional é consideravelmente reduzido, se comparado com o método proposto inicialmente, o qual havia assegurado valores positivos e minimizado uma função mais difícil.

A escolha do "último ponto interior viável" ao longo da reta que fura a "restrição fronteira" não é arbitrária como pode parecer.

Se $V(x, \{r_{1_i}\}) = \bar{V}_1(x)$ denotar a forma corrente para o método da função barreira, a denotar o índice da restrição a ser considerada para V_1 , z denotar o ponto onde a reta emanando de algum ponto x_0 interior para g_a fura sua fronteira e se \bar{x} denotar o último ponto interior viável, então $\bar{x} = x_0 + \lambda(z - x_0)$, onde λ é suposto tendendo a 1.

O problema de solucionar r_{1_a} de acordo com a regra de cálculo, é

$$\text{Minimizar } \left\| W_1(\bar{x}) - \frac{r_{1a}}{g_a(\bar{x})} \nabla g_a(\bar{x}) \right\|$$

Sujeita a

$$r_{1a} \geq 0.$$

Obviamente, para \bar{x} numa vizinhança de z , desde que $\nabla V_1(z)$ é supostamente finito o r_{1a} ótimo, que é dado por:

(i) fazendo

$$M = \left\| W_1(\bar{x}) - \frac{r_{1a}}{g_a(\bar{x})} \nabla g_a(\bar{x}) \right\| = \left\langle W_1(\bar{x}) - \frac{r_{1a}}{g_a(\bar{x})} \nabla g_a(\bar{x}), W_1(\bar{x}) - \frac{r_{1a}}{g_a(\bar{x})} \nabla g_a(\bar{x}) \right\rangle;$$

(ii) aplicando a condição necessária $\nabla M(r_{1a}) = 0$,

$$\nabla M(r_{1a}) = 2 \cdot \left\langle \frac{-1}{g_a(\bar{x})} \nabla g_a(\bar{x}), W_1(\bar{x}) - \frac{r_{1a}}{g_a(\bar{x})} \nabla g_a(\bar{x}) \right\rangle = 0, \text{ e}$$

$$-\frac{\nabla g_a(\bar{x})^T}{g_a(\bar{x})} \cdot W_1(\bar{x}) + \frac{r_{1a}}{g_a(\bar{x})} \cdot \left\| \nabla g_a(\bar{x}) \right\|^2 = 0, \text{ que implica}$$

$$r_{1a} = \frac{\nabla g_a(\bar{x})^T W_1(\bar{x})}{\left\| \nabla g_a(\bar{x}) \right\|^2} g_a(\bar{x}), \tag{2.4.4}$$

deve ser positivo. Isto ocorre porque, se o produto interno no numerador de / (2.4.4) fosse negativo, a corrente função sem restrição geralmente seria minimizada para um ponto interior a g_a e ela não poderia ser adicionada à função / barreira. Está claro de (2.4.4) que o raio $r_{1a}(\bar{x})/g_a(\bar{x})$ tende a uma constante quando $\bar{x} \rightarrow z (\lambda \rightarrow 1)$. A constante é:

$$W_a = \frac{W_1(z)^T \nabla g_a(z)}{\left\| \nabla g_a(z) \right\|^2} \tag{2.4.5}$$

(desde que g_a seja côncava, isto se $\nabla g_a(x) = 0$ para todo x , para um ponto onde $g(x) = 0$, não existe interior para a região $g_a(x) > 0$. Daí podemos supor / $\nabla g_a(z) \neq 0$, e assim W_a fica bem definida).

Para a função barreira logarítmica, como observado no final da seção 2.3, é possível determinar a diferença entre os valores da função objetivo primal e dual para o primeiro mínimo sem restrições fazendo-se a apropriada seleção de r_1 . Obviamente a mesma observação deve ser feita para a seleção dos diferentes r_{1i} , um para cada restrição. Assim a escolha do último ponto interior deve ser tal que não viole a fronteira ($g_a = 0$) e possibilite uma estimativa do valor da solução ótima para o primeiro mínimo sem restrições. Suponhamos que a tolerância seja $\epsilon > 0$. Então W_a será aproximada (todo ponto próximo / de z dará uma aproximação para (2.4.5)), λ escolhido tal que

$$g_a(\bar{x}) = g[x_0 + \lambda(z - x_0)] = \frac{\epsilon/m}{W_a}.$$

Então r_{1_a} é dado como: $r_{1_a} = g_a(\bar{x})W_a$. Logo a contribuição do a-ésimo termo / barreira para a diferença entre os valores primal e dual será:

$$\frac{r_{1_a}}{g_a(x_1)} g_a(x_1) = g_a(x_1)W_a = \frac{\epsilon}{m}, \text{ onde } x_1 \text{ é um mínimo sem restrições de } V(x, \{r_{1_i}\}).$$

Usando o critério de seleção no problema analisado, vemos como/ a escolha do próximo r inicial leva a eficiências computacionais. O problema é:

Minimizar x_2

Sujeita a

$$g_1(x_1, x_2) = -(x_1+1)^2 - x_2^2 + 4 \geq 0,$$

$$g_2(x_1, x_2) = -(x_1-1)^2 - x_2^2 + 4 \geq 0,$$

$$g_3(x_1, x_2) = -x_1 - x_2 + 2 \geq 0.$$

O ponto interior de partida é $x_0 = (0, -1)$. Notamos que, desprezando qual função barreira será usada, o algoritmo de programação quadrática associado é independente delano seguinte sentido. O problema é

$$\text{Minimizar } \left\| \nabla f(x_0) - N(x_0)W \right\|^2$$

Sujeita a

$$W \geq 0,$$

onde $N(x_0)$ é a matriz dos gradientes das restrições calculados para x_0 . Se W_0 for a solução do problema, então

$$r_{1_i} = \frac{-W_i}{\partial B_i(x_0)/\partial g_i}.$$

Suponhamos que um algoritmo para pontos interiores seja aplicado para todas as restrições. Então para o exemplo devemos resolver o problema de progração quadrática.

$$\text{Minimizar } \left\| \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -2 & 2 & -1 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \end{bmatrix} \right\|^2$$

Sujeita a

$$W_1, W_2, W_3 \geq 0.$$

$$\text{Pois, } \nabla g_1(x_0) = \begin{bmatrix} -2 \\ 2 \end{bmatrix}; \quad \nabla g_2(x_0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}; \quad \nabla g_3(x_0) = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} \text{ e } \nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

A escolha ótima dos W_{0_i} é $(1/4, 1/4, 0)$, (Ver (2.4.3) ou (2.4.5)). Se usarmos a função barreira logarítmica para as três funções, então desde que / $\partial B_i/\partial g_i = -1/g_i$, teremos

$$r_{11} = \frac{-W_{0i}}{\partial B_i / \partial g_i}, \quad r_{1i} = [g_1(x_0)] \cdot (1/4) = 2 \cdot (1/4) = 1/2,$$

$$r_{12} = [g_2(x_0)] \cdot (1/4) = 2 \cdot (1/4) = 1/2,$$

$$r_{13} = [g_3(x_0)] \cdot 0 = 0.$$

Se usarmos a função $B_i(g_i) = 1/g_i$, e então $\frac{\partial B_i}{\partial g_i} = -\frac{1}{(g_i)^2}$, logo

$$r_{11} = [g_1(x_0)]^2 \cdot (1/4) = 4 \cdot (1/4) = 1,$$

$$r_{12} = [g_2(x_0)]^2 \cdot (1/4) = 4 \cdot (1/4) = 1,$$

$$r_{13} = [g_3(x_0)]^2 \cdot 0 = 0.$$

Vários resultados interessantes seguem independentemente de qual seja a função usada.

A terceira restrição, que não é necessária para a solução, pois o peso associado é nulo, não entrará nos cálculos.

Neste exemplo a escolha do r_1 dá o valor zero para norma do gradiente da função sem restrições. Desde que é um problema de programação convexa temos um mínimo sem restrições para começar, e assim um ponto dual viável.

As duas funções barreiras dão um valor dual de $f - \sum W_i g_i$. Assim, se v^* for um valor ótimo já o temos detectado, desde que

$f - \sum W_i g_i = -1 - (1/4) \cdot 2 - 0,1 = -2 \leq v^* \leq -1 = f$. A solução para este problema (valor) é aproximadamente $-1,732$. Neste problema a seleção do r inicial usando programação quadrática é muito eficaz. Estas vantagens são maiores para problemas grandes.

2.4.2 - Algoritmo de Minimização sem Restrições para Pontos Interiores se Parâmetros.

Para os problemas de programação tratados neste trabalho, ou seja

Minimizar $f(x)$

Sujeita a

$$g_i(x) \geq 0, \quad i=1, \dots, m, \text{ onde}$$

$D^0 = \{x: g_i(x) > 0, \quad i=1, \dots, m\}$ é um conjunto não vazio, é possível descrever uma classe geral de algoritmos para pontos interiores que possuem as propriedades:

(A)

(a) a seleção da sequência estritamente decrescente $\{r_k\}$ de parâmetros não negativos usados como pesos, não é necessária;

(b) cada minimização sem restrições (por exemplo para a iteração k) depende somente do valor da função objetivo para o ponto de partida, x_{k-1} , um mínimo sem restrições da iteração $k-1$;

(c) a sequência de pontos interiores viáveis possui valores da função objetivo f_0, f_1, \dots, f_k , os quais formam uma sequência estritamente decrescente, partindo do ponto inicial x_0 .

Sob as condições usuais esses valores convergem localmente.

É crucial para o desenvolvimento a caracterização da função, a partir de agora chamada função Q , definida como segue.

Seja $z = (z_0, \dots, z_m)^T$ um vetor positivo de dimensões $m+1$. A função $Q(x)$ é uma função Q quando:

(i) $Q(z)$ for contínua para $z > 0$, e

(ii) $\{z_i\}$ for uma sequência infinita de vetores, onde $z_i > 0$, para todo i , e \bar{z} é o limite de $\{z_i\}$ com a propriedade que $\bar{z}_j = 0$, para algum j , então $\lim_{i \rightarrow \infty} \inf Q(z_i) = \alpha$ (possivelmente infinito), onde $\alpha > Q(z)$ para todo $z > 0$.

Os passos do algoritmo estão a seguir.

(1) seja $x_0 \in D^0$ o ponto de partida para o processo;

(2) seja $D_1 = \{x: f(x) \leq f(x_0); x \in D\}$;

(3) definir $Q_1(x) = Q[-f(x) + f(x_0), g_1(x), \dots, g_m(x)]$, onde Q é uma função Q ;

(4) determinar um mínimo local de $Q_1(x)$ em D_1 . Todo mínimo local se existir, será sem restrições, desde que todo ponto na fronteira de D_1 dá maior valor de $Q_1(x)$ do que pontos interiores de D_1 ;

(5) se $D_k = \{x: f(x) \leq f(x_{k-1}); x \in D\}$, minimizar $Q_k(x) = Q[-f(x) + f(x_{k-1}), g_1(x), \dots, g_m(x)]$ em D_k para $k = 1, \dots, m$, assim gerando uma sequência de mínimos $\{x_k\}$;

(6) claramente, se $D_k^0 \neq \emptyset$, então $f(x_k) < f(x_{k-1})$. O processo aproximará algum mínimo local de f em D .

Um exemplo de uma função Q é

$$Q(x) = \frac{1}{f(x_k) - f(x)} + \sum_{i=1}^m 1/g_i(x).$$

Observa-se que a função Q acima está estritamente relacionada com a função $P_1(x, r) = f(x) + r^2 \cdot \sum_{i=1}^m 1/g_i(x)$.

As condições sob as quais o algoritmo converge são similares às aquelas para algoritmos de minimizações sem restrições para pontos interiores dados na seção 2.1, teorema 2.1.2.

Teorema 2.4.1 - (Convergência de Algoritmos para Pontos Interiores sem Parâmetros, para Conjuntos Compactos de Soluções Locais). Se,

- (a) as funções f, g_1, \dots, g_m forem contínuas;
- (b) D° não for vazio;
- (c) $A^* \cap D^\circ \neq \emptyset$ (A^* é definido a seguir);
- (d) A^* for um conjunto não vazio e compacto de pontos que são de mínimos locais do problema (A), com o mínimo v^* ;
- (e) a função $Q_k[-f(x) + f(x_{k-1}), g_1(x), \dots, g_m(x)]$, para $k = 1, \dots$, é uma função Q. Então
 - (i) se $D_k^\circ \neq \emptyset$, existirá um ponto x_k que é de mínimo local de Q_k em D_k° , e todo ponto limite da sequência $\{x_k\}$ limitada, será de mínimo local com valor v^* , e
 - (ii) se $D_k^\circ = \emptyset$ para algum k finito, x_{k-1} será de mínimo local com valor v^* ; isto é, x_{k-1} é uma solução sem restrições de (A).

Demonstração. - Seja x_0 ponto inicial pertencente ao interior/ de $D \cap S$, onde S é o conjunto compacto dado no teorema 2.1.1. A não ser que $f(x_0) = v^*$, $D_1^\circ \cap S$ não é vazio. Por uma modificação trivial do corolário 2.1.1 e a definição de $Q_1(x)$, existe um ponto de mínimo $x_1 \in (D_1^\circ \cap S)$. Desde que $(D_1^\circ \cap S) \subset D_1^\circ$, x_1 é de mínimo local sem restrições de $Q_1(x)$ em D_1° . A mesma observação mantém-se para todo k para o qual $D_k^\circ \neq \emptyset$.

Se, para algum k , $D_k^\circ = \emptyset$, então existe x tal que $x \in (D^\circ \cap S)$ e $f(x) < f(x_{k-1})$, com $x_{k-1} \in D^\circ$. Então x_{k-1} deve ser de mínimo local sem restrições de f em D . Desde que $x_{k-1} \in D^\circ$, ele é de mínimo local sem restrições de $f(x)$, e $x_{k-1} \in S$, do teorema 2.1.1, temos $f(x_{k-1}) = v^*$.

A compacidade de S implica que $\{x_k\}$ possui uma subsequência / convergente (Ver seção 1.2.4), a qual será denotada também por $\{x_k\}$. Portanto, podemos supor que $x_k \longrightarrow \bar{x} \in D \cap S$.

Se $D_k^\circ \neq \emptyset$ para todo k , então $f(x_k) < f(x_{k-1})$. Assim a sequência de valores $\{f_k\}$ é uma sequência estritamente decrescente e tem limite / $v^* \leq \bar{v}$. Devemos mostrar que $\bar{v} = v^*$.

Suponhamos $\bar{v} > v^*$. Já que o valor de Q_k para este mínimo é / $Q_k(x) = Q[-f(x_k) + f(x_{k-1}), g_1, \dots, g_m]$, e $[-f(x_k) + f(x_{k-1})] \longrightarrow 0$, quando $k \longrightarrow \infty$, $g_i(x_k) \longrightarrow g_i(\bar{x})$, para todo i , pela definição da função $Q(x)$ se - gua que $\lim_k \inf Q_k(x_k) = \alpha$, onde $\alpha > Q_k(x_0)$, para todo $x_0 \in (D^\circ \cap S)$. Seja x_0 tal que $\bar{x}_0 \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \varepsilon^\infty (D^\circ \cap S)$ e $v^* < f(x_0) < \bar{v}$. Tal x_0 existe pela nossa presente / suposição e pela hipótese (c).

Notar que $x_0 \in D_k^0$ para todo k . Assim, se $\bar{v} > v^*$, existe um ponto em $D_k^0 \cap S$ que dá para Q_k um valor menor que $Q_k(x_k)$ quando k for grande. Isto contradiz o fato que x_k minimiza $Q_k(x_k)$ em $D_k^0 \cap S$. Então $\bar{v} = v^*$. \square

A seguir um exemplo deste algoritmo dado em [04].

Minimizar $x_1 x_2$

Sujeita a $x_1 \geq 0,$
 $x_2 \geq 0.$

Vamos supor que $x_0 = (1/2, 2)^T$ seja um ponto interior inicial. Incluimos a restrição $f(x_0) - x_1 x_2 = 1 - x_1 x_2 \geq 0$, e aplicamos a função barreira logarítmica/para as três restrições, obtemos então $Q_1(x) = -\ln(1 - x_1 x_2) - \ln(x_1) - \ln(x_2)$, como a função a ser minimizada. Diferenciando e resolvendo, vem

$$\frac{\partial Q_1}{\partial x_1} = \frac{x_2}{1 - x_1 x_2} - \frac{1}{x_1} = 0; \quad \frac{\partial Q_1}{\partial x_2} = \frac{x_1}{1 - x_1 x_2} - \frac{1}{x_2} = 0, \text{ com } 1 - x_1 x_2 \neq 0, \quad /$$

$x_1 \neq 0$ e $x_2 \neq 0$. Igualando as duas equações acima obtemos

$$\frac{x_2}{1 - x_1 x_2} - \frac{1}{x_1} = \frac{x_1}{1 - x_1 x_2} - \frac{1}{x_2}, \text{ e daí}$$

$(2x_1 x_2 - 1)(1 - x_1 x_2) x_2 = (-x_1 x_2 - 1)(1 - x_1 x_2) x_1$, que implica
 $[(2x_1 x_2 - 1)(1 - x_1 x_2)](x_2 - x_1) = 0$, ou $2x_1 x_2 - 1 = 0$, ou $x_2 - x_1 = 0$; então
 $x_2 = x_1$ e $x_1 = \pm \sqrt{(2/4)} = \pm \sqrt{2}/2$, mas como $x_1 > 0$, só $x_1 = \sqrt{2}/2$ interessa. Logo
 $x_2 = x_1 = \sqrt{2}/2$ e o ponto $x_1 = (\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2)^T$.

Agora incluimos a restrição: $1/2 - x_1 x_2 \geq 0$, pois
 $f(\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2) = 1/2$, com a qual temos, $Q_2(x) = -\ln(1/2 - x_1 x_2) - \ln(x_1) - \ln(x_2)$.
 A solução é $x_2 = (1/2, 1/2)^T$, (para obter x_2 basta repetir o processo para minimizar $Q_1(x)$). Continuando assim, obtemos $x_k = (2^{-k/2}, 2^{-k/2})^T$, que tende a $(0, 0)^T$ quando $k \rightarrow \infty$, o que é mostrado geometricamente a seguir.

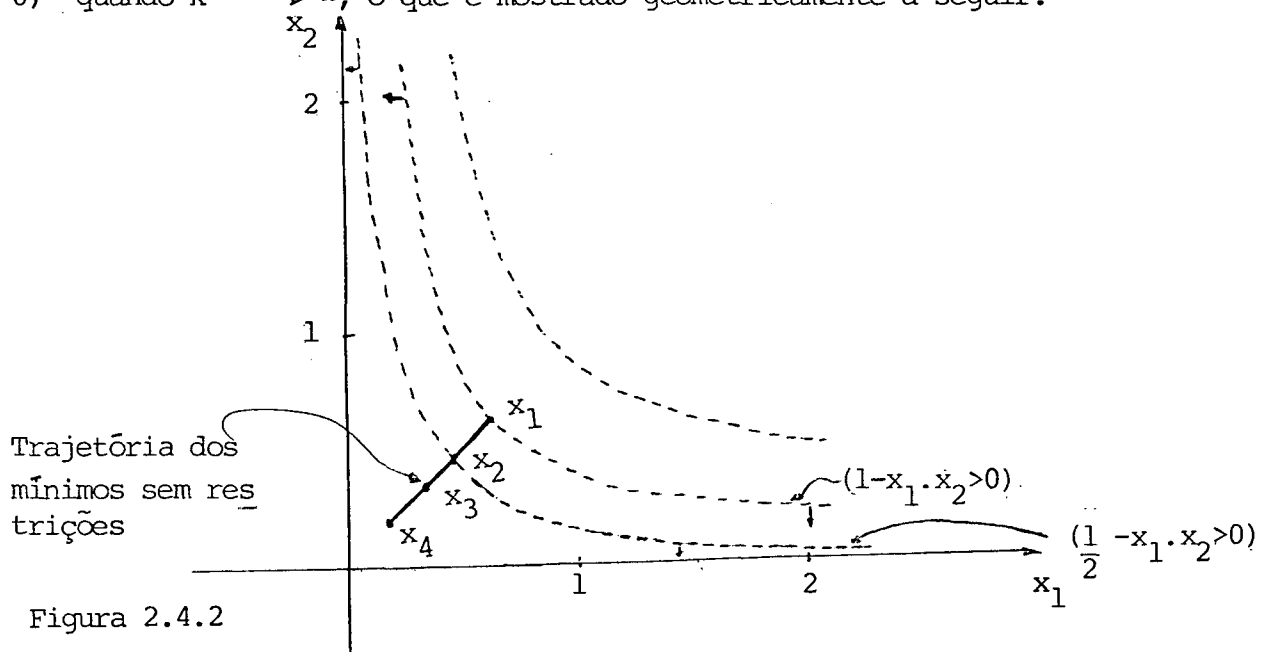


Figura 2.4.2

2.4.3 - Versão Contínua das Técnicas para Pontos Interiores.

Uma variação natural das técnicas sem restrições para pontos / interiores é fazer o parâmetro r mudar continuamente como função decrescente / do tempo e resolver uma equação diferencial da forma $dx/dt = -\nabla_x U(x, t)$. Movimento análogo ao método de Cauchy chamado de decrescimento máximo (ver seção / 3.1). Este método é bem adequado a computadores analógicos.

Sejam $r = e^{-t}$ e $U(x, r) = f(x) + r \cdot \sum_{i=1}^m 1/g_i(x)$. Então

$$P(x, t) = f(x) + e^{-t} \cdot \sum_{i=1}^m 1/g_i(x), \text{ e } dx/dt = -[\nabla f(x) - e^{-t} \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i(x)} \nabla g_i(x)].$$

(2.4.6)

Pode-se, sob certas condições gerais do teorema 2.1.2, demonstrar que resolvendo-se (2.4.6) obtemos uma geração de pontos satisfazendo as condições de 1ª ordem (1.4.10) a (1.4.13). Isto é realizado pelo teorema 2.4.2 que / segue. Felizmente as condições necessárias de 1ª ordem são suficientes para / que um ponto de mínimo local seja uma solução global se o problema for de pro - gramação convexa.

Teorema 2.4.2 - (Estabilidade dos Pontos Estacionários da Função Lagrangiana). - Se,

- (a) f, g_1, \dots, g_m forem funções continuamente diferenciáveis;
- (b) D^0 não for vazio;
- (c) o fecho de D^0 for D , e
- (d) o conjunto de pontos A^* que são de mínimos locais correspondentes ao valor v^* , for um conjunto compacto, isolado e não vazio, então existe um conjunto $N^* \supset A^*$ e um $t_0 > 0$ tal que, para o ponto inicial (x_0, t_0) , onde $x_0 \in N^*$, todo ponto limite x^* da solução de (2.4.6) satisfaz (1.4.10) a (1.4.13) (onde o ponto u^* correspondente é também gerado pela equação diferencial). No - tar que u^* não é necessariamente finito.

Demonstração. - Pela regra da cadeia,

$$\frac{dP}{dt} = \nabla f(x) dx/dt - e^{-t} \cdot \sum_{i=1}^m 1/g_i(x) - e^{-t} \cdot \sum_{i=1}^m 1/[g_i(x)]^2 \nabla g_i(x) dx/dt.$$

Como, $dx/dt = -\nabla_x P(x, t) = -[\nabla f(x) - e^{-t} \sum_{i=1}^m 1/[g_i(x)]^2 \nabla g_i(x)]$, temos

$$\frac{dP}{dt} = -[\nabla f(x) - e^{-t} \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i(x)} \nabla g_i(x)] \cdot [\nabla f(x) - e^{-t} \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i(x)} \nabla g_i(x)] - e^{-t} \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i(x)},$$

logo

$$\frac{dP}{dt} = -|\nabla P[x(t), t]|^2 - e^{-t} \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i[x(t)]} < 0, \tag{2.4.7}$$

quando $x(t) \in D^0$. Assim, se $x(0) \in D^0$, a trajetória gerada por (2.4.6) nunca / sai da região viável, desde que P possua nela infinitos valores, contradizendo / a propriedade da monotonicidade estritamente decrescente assegurada por / (2.4.7).

Seja agora S um conjunto compacto ($S \supset A^*$) cuja existência é ga- rantida pelo teorema 2.1.1 (em relação à nossa hipótese (d)). Pela continua- de e pela definição de $P(x, t)$ pode-se supor que $P(x, t) \geq v^* + \lambda$ sobre a fron- teira de $S \cap D$ para todo $\lambda > 0$. Seja $N^* = S \cap D^0 \cap \{x: f(x) \leq v^* + \lambda/2\}$. O con- junto N^* não é vazio, pelas nossas condições (a), (b) e (c) (a equação (2.4.6) é bem definida pela hipótese (a)). Seja t_0 tal que $e^{-t_0} \sum_{i=1}^m 1/g_i(x_0) \leq \lambda/2$. Des- de que $P[x(t), t]$ decresce estritamente, $x(t)$ pode não existir no compacto / $S \cap D$. Expandindo $P(x, t)$ através da série de Taylor (ver 1.3.4), temos /

$$P[x(2t), 2t] - P[x(t), t] = t\{-|\nabla P[x(\xi), \xi]|^2 - e^{-\xi} \sum_{i=1}^n \frac{1}{g_i[x(\xi)]}\}, \quad (2.4.8)$$

onde $t < \xi < 2t$.

Desde que o termo do 1º membro tende a zero quando $t \rightarrow \infty$, ca- da termo entre chaves do 2º membro de (2.4.8) deve tender a zero. Seja

$$u_i(t) = \frac{e^{-t}}{g_i[x(t)]^2}, \quad i = 1, \dots, m. \quad (2.4.9)$$

Então todo ponto limite de $[x(t), u(t)]$ satisfaz as condições necessárias de / 1ª ordem (1.4.10) a (1.4.13), para todo ponto de mínimo local com restrições.

Em geral (2.4.6) pode atingir somente um ponto estacionário / (em x) da função Lagrangiana $L(x, u) = f(x) - \sum u_i g_i(x)$.

Para problemas de programação convexa este fato é suficiente pa- ra assegurar a convergência para a solução global.

CAPÍTULO III

Introdução.- Este capítulo é composto de cinco seções; na primeira, faremos um estudo sobre alguns métodos de otimização sem restrições, os quais serão usados no nosso algoritmo, proposto na seção 3.5, para resolver os problemas considerados neste trabalho; na segunda, formularemos uma proposta de como se obter um ponto interior viável inicial; na terceira, evidenciamos as "fórmulas de extrapolação" baseadas no estudo realizado em 2.2 que são de grande eficiência para acelerarmos a convergência do método; na quarta, determinaremos critérios para obtenção do valor inicial de r ; na quinta, proporemos procedimentos computacionais, de forma ordenada e sequencial, além de um sumário dos mesmos.

3.1 - Otimização sem Restrições.

A otimização sem restrições trabalha com problemas que minimizam ou maximizam funções na ausência de restrições. Nesta seção discutiremos a minimização de uma função de uma variável e de uma função de várias variáveis. Ainda que muitos problemas práticos de otimização possuam restrições que / devem ser satisfeitas, o estudo das técnicas para otimização sem restrições é importante por várias razões. Muitos algoritmos resolvem um problema com restrições convertendo-o em uma sequência de problemas sem restrições (um dos quais é o objetivo deste trabalho). Além disso, outra classe de métodos baseia-se em determinar uma direção e então minimizar ao longo dela. Esta busca unidimensional é equivalente a minimizar uma função de uma variável sem restrições ou com restrições simples, tais como o limite superior e inferior da variável.

3.1.1 - Busca Unidimensional sem Usar Derivadas.

A busca unidimensional é a espinha dorsal de muitos algoritmos para resolver um problema de programação não linear. Dado um ponto x_k , determinar uma direção s_k e então um "comprimento conveniente" do passo λ_k , obtendo /

um novo ponto $x_{k+1} = x_k + \lambda_k s_k$; o processo é então repetido. Para obtermos o comprimento do passo λ_k necessitamos resolver um subproblema: Minimizar $f(x_k + \lambda s_k)$, o qual é uma busca unidimensional na variável λ . A minimização pode ser para todo λ , λ não negativo, ou tal que $x_k + \lambda s_k$ seja viável.

Consideremos a função θ de uma variável, λ , a ser minimizada. Uma tentativa para minimizar θ é fazer a sua derivada θ' igual a zero e então determinar λ . Notar, entretanto que θ é usualmente definida implicitamente em termos da função f de várias variáveis. Em particular, dados os vetores x e s $\theta(\lambda) = f(x + \lambda s)$. Se f for diferenciável, então $\theta'(\lambda) = s^T \nabla f(x + \lambda s)$. Portanto, para obter λ com $\theta'(\lambda) = 0$, devemos resolver a equação $s^T \nabla f(x + \lambda s) = 0$, que não é linear em λ . Além disso, λ satisfazendo $\theta'(\lambda) = 0$ não é necessariamente de mínimo; ele pode ser de mínimo local, de máximo local, ou ainda um ponto de sela. Por estas razões, e exceções feitas a alguns casos especiais, evitamos minimizar θ igualando a sua derivada a zero. Em lugar disto, recorreremos a alguma técnica numérica para resolver tal problema.

A seguir discutiremos um método que não usa derivadas para minimizar uma função θ de uma variável sobre um intervalo fechado e limitado. Mas, antes porém, necessitamos de algumas noções preliminares.

Intervalo de Incerteza. - Consideremos o problema de busca unidimensional: minimizar $\theta(\lambda)$, sujeita a $a \leq \lambda \leq b$. Desde que a locação exata do mínimo de θ sobre $[a, b]$ não é conhecida, este intervalo é chamado intervalo de dúvida, ou de incerteza. Durante o procedimento da busca, procuraremos excluir porções desse intervalo que não contenham o ponto mínimo; em geral, $[a, b]$ é chamado intervalo de incerteza, se um ponto de mínimo local $\bar{\lambda}$ pertencer a ele, embora o seu valor não seja conhecido.

O teorema 3.1.1 a seguir, mostra que se a função θ for convexa num intervalo, então o intervalo de incerteza pode ser reduzido avaliando-se para dois pontos do intervalo.

Teorema 3.1.1 - Seja $\theta: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ convexa sobre o intervalo $[a, b]$. Sejam $\lambda, \mu \in [a, b]$ tais que $\lambda < \mu$. Se $\theta(\lambda) > \theta(\mu)$, então $\theta(z) \geq \theta(\mu)$ para todo $z \in [a, \lambda]$. Se $\theta(\lambda) \leq \theta(\mu)$, então $\theta(z) \geq \theta(\lambda)$ para todo $z \in (\mu, b]$.

Demonstração. - Suponhamos que $\theta(\lambda) > \theta(\mu)$ e seja $z \in [a, \lambda]$. Por contradição vamos supor que $\theta(z) < \theta(\mu)$. Desde que λ pode ser escrito como combinação linear convexa de z e μ , pela suposição que θ seja convexa,

(pontos da forma: $mx_1 + (1 - m)x_2$, onde $m \in [0, 1]$ são chamados combinações lineares convexas de x_1 e x_2 , se x_1 e x_2 pertencerem a conjunto convexo), temos $\theta(\lambda) = \theta[mz + (1-m)\mu] = \theta(mz) + \theta[(1-m)\mu] = m\theta(z) + (1-m)\theta(\mu)$, onde $m \in [0, 1]$. Como estamos supondo $\theta(z) < \theta(\mu)$, temos: $\theta(\lambda) < m\theta(\mu) + (1 - m)\theta(\mu) = \theta(\mu)$, o que contradiz $\theta(\lambda) > \theta(\mu)$. Logo, $\theta(z) \geq \theta(\mu)$. A segunda parte do teorema pode ser mostrada similarmente. ■

A partir do teorema 3.1.1, se $\theta(\lambda) > \theta(\mu)$, o novo intervalo de incerteza será $[\lambda, b]$. Por outro lado, se $\theta(\lambda) \leq \theta(\mu)$, o novo intervalo será $[a, \mu]$. Estes casos são ilustrados na figura 3.1.1



Figura 3.1.1

3.1.2 - O Método de Fibonacci.

Antes de desenvolvermos o método necessitamos de algumas propriedades da sequência de Fibonacci que agora apresentamos.

Entre os assuntos tratados no trabalho "Liber Abacci" (Livro do Ábaco), escrito em 1202 pelo matemático italiano Fibonacci (abreviatura de / filius Bonacci, ou seja, filho de Banacci), encontramos a sequência numérica / F_1, \dots, F_N , na qual todo termo, a partir do terceiro, é igual a soma dos dois anteriores, e daí para $N > 2$, temos

$$F_N = F_{N-1} + F_{N-2} \tag{3.1.1}$$

Observamos que a relação (3.1.1) não permite por si só calcular os termos da sequência. Infinitas sequências podem ser encontradas que satisfazem esta condição, por exemplo,

- 2, 5, 7, 12, 19, ...,
- 1, -5, -6, -11, ...,
- 1, 3, 4, 7, 11, ..., etc

Daí, para determinar univocamente a sequência é preciso alguma condição adicional. Consideremos o caso especial importante: A sequência quando $F_1 = 1$ e $F_2 = 1$. A condição (3.1.1) nos fornece a possibilidade de calcular / todos os outros termos da sequência. É fácil comprovar que os primeiros termos são: 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, ...

Em memória ao autor esta seqüência é chamada de seqüência de Fibonacci e seus elementos números de Fibonacci.

Vamos definir a seqüência por

$$\begin{aligned} F_0 &= F_1 = 1 \\ F_N &= F_{N-1} + F_{N-2}, \quad N = 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

Mas, também, ela pode ser obtida diretamente como função de seu índice. Para / esse fim estudemos as seqüências distintas $F_1, F_2, \dots, F_N, \dots$ que satisfazem a equação

$$F_N = F_{N-1} + F_{N-2} \quad (3.1.2a)$$

Diremos que todas as seqüências são soluções de (3.1.2a).

A partir de agora indicaremos por V, V', V'' as seqüências / $v_1, v_2, \dots; v'_1, v'_2, \dots, e v''_1, v''_2, \dots$

Demonstraremos, primeiro, dois lemas elementares.

Lema 3.1.1 - Se V for uma solução da equação (3.1.2a) e c uma / constante, a seqüência cV (ou seja cv_1, cv_2, \dots) também é uma solução desta / equação.

Demonstração. - Multiplicando por c os dois membros de $v_N = v_{N-1} + v_{N-2}$, obtemos $cv_N = cv_{N-1} + cv_{N-2}$. ■

Lema 3.1.2 - Se as seqüências V' e V'' forem soluções da equa - ção (3.1.2a), a soma $V' + V''$ também é solução desta equação.

Demonstração. - Por hipótese, temos $v'_N = v'_{N-1} + v'_{N-2}$ e $v''_N = v''_{N-1} + v''_{N-2}$. Somando membro a membro, encontramos

$v'_N + v''_N = (v'_{N-1} + v''_{N-1}) + (v'_{N-2} + v''_{N-2})$. Logo o lema está demons - trado. ■

Sejam agora V' e V'' duas soluções não proporcionais da equação (3.1.2a); isto é, duas soluções da equação tais que qualquer que seja a constan - te c existe um número N para o qual $v'_N / v''_N \neq c$. Mostraremos que toda soluçã - o da equação (3.1.2a) pode ser representada por

$$V = c_1 V' + c_2 V'' \quad (3.1.3)$$

onde c_1 e c_2 são constantes. Por essa razão pode-se dizer que (3.1.3) é a solu - ção geral da equação (3.1.2a).

Demonstraremos primeiro que sendo V' e V'' duas soluções não pro - porcionais da equação (3.1.2a), temos

$$v'_1 / v''_1 \neq v'_2 / v''_2 \quad (3.1.4)$$

(ou seja, que a não proporcionalidade se manifesta já nos primeiros termos das seqüências V' e V'').

Por absurdo. Suponhamos que para duas soluções não proporcionais V' e V'' da equação (3.1.2a) tenhamos

$$v_1'/v_1'' = v_2'/v_2'' \quad (3.1.5)$$

Formando a proporção

$$\frac{v_1' + v_2'}{v_1'' + v_2''} = \frac{v_2'}{v_2''}, \quad (V' \text{ e } V'' \text{ são soluções da equação (3.1.2a),}$$

então

$v_3'/v_3'' = v_2'/v_2''$ e $v_3' = v_2' + v_1'$). Analogamente, por indução, comprovamos que $v_3'/v_3'' = v_4'/v_4'' = \dots = v_N'/v_N'' = \dots$

Portanto, de (3.1.5) resulta que as seqüências V' e V'' são proporcionais, o que contradiz nossa hipótese e daí a relação (3.1.4) é válida.

Tomemos agora a seqüência V , solução da equação (3.1.2a). Como vimos na introdução, esta seqüência fica perfeitamente determinada se os seus dois primeiros termos v_1 e v_2 forem indicados.

Determinamos os valores de c_1 e c_2 de modo que

$$c_1 v_1' + c_2 v_2'' = v_1 \quad \text{e} \quad c_1 v_2' + c_2 v_2'' = v_2.$$

Neste caso, a soma $c_1 V' + c_2 V''$ coincidirá, devido aos lemas 3.1.1 e 3.1.2, com a sucessão V .

Em virtude da condição (3.1.4), o sistema de equações tem solução em relação a c_1 e c_2 quaisquer que sejam v_1 e v_2 :

$$c_1 = \frac{v_1 v_2'' - v_2 v_1''}{v_1 v_2'' - v_1'' v_2'} \quad \text{e} \quad c_2 = \frac{v_1' v_2 - v_2' v_1}{v_1' v_2'' - v_1'' v_2'}$$

(da condição (3.1.4) temos que o denominador das frações é diferente de zero). Introduzindo em (3.1.3) os valores obtidos para c_1 e c_2 encontramos a representação exigida da seqüência V .

Daí, para descrever todas as soluções não proporcionais da equação (3.1.2a) basta encontrar duas soluções não proporcionais da mesma. Busquemos estas soluções entre as progressões cujos primeiros termos são iguais a 1. Tomemos, pois a progressão $1, v, v^2, \dots$. Para que tenhamos uma solução da equação (3.1.2a) é suficiente que para todo N a igualdade

$$v^{N-2} + v^{N-1} = v^N, \text{ seja satisfeita. Dividindo por } v^{N-2} \text{ obtemos } 1 + v = v^2.$$

As raízes da equação, são $v_1 = [1 + \sqrt{5}]/2$ e $v_2 = [1 - \sqrt{5}]/2$. O número

$v_1 = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 1,618$ é conhecido como razão da seção áurea, tida pelos gregos antigos como a proporção mais estética entre dois elementos adjacentes [13].

$$(2) \theta(\lambda_k) \leq \theta(\mu_k).$$

De (3.1.9) e fazendo $N = n-k$ em (3.1.7), vem

$$b_{k+1} - a_{k+1} = \mu_k - a_k = a_k + \frac{(F_{n-k})}{F_{n-k+1}} (b_k - a_k) = \frac{(F_{n-k})}{F_{n-k+1}} (b_k - a_k). \quad (3.1.11)$$

Logo, para os dois casos, o intervalo de incerteza é reduzido pelo fator

$$\frac{(F_{n-k})}{F_{n-k+1}}.$$

Mostraremos agora que para a iteração $k+1$, $\lambda_{k+1} = \mu_k$ ou

$\mu_{k+1} = \lambda_k$, desde que $\theta(\lambda_k) > \theta(\mu_k)$. Então pelo teorema 3.1.1, e observando (3.1.9), segue que

$$\lambda_{k+1} = a_k + \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}} (b_k - a_k) = \mu_k.$$

Similarmente, se $\theta(\lambda_k) \leq \theta(\mu_k)$, pode-se verificar facilmente que $\mu_{k+1} = \lambda_k$. Assim, nos dois casos, somente uma observação é necessária para a iteração $k+1$.

Em suma, para a primeira iteração são feitas duas avaliações e, para cada iteração subsequente, somente uma é necessária. Assim, para a iteração $n-2$ completamos $n-1$ avaliações funcionais. Além disso, a última observação pode ser feita para o médio entre λ_{n-1} e μ_{n-1} , desde que $1/2(b_{n-1} - a_{n-1})$ seja o comprimento do intervalo de incerteza $[a_n, b_n]$.

A Escolha do Número de Observações.

O método de Fibonacci exige que o número total de observações n seja escolhido de antemão. Isto porque as avaliações são dadas por (3.1.8) e (3.1.9) que dependem de n . A partir de (3.1.10) e (3.1.11), o comprimento do intervalo de incerteza é reduzido, para a iteração k , pelo fator F_{n-k}/F_{n-k+1} . Daí, para o final de $n - 1$ iterações, onde n é o total de observações a serem feitas, o comprimento do intervalo é reduzido de $b_1 - a_1$ para $b_n - a_n$, onde $b_n - a_n = (b_1 - a_1)/F_n$. Daí, n deve ser escolhido tal que $(b_1 - a_1)/F_n$ reflita a exatidão exigida.

Sumário do Método da Busca de Fibonacci.

Passo Inicial. - Escolher um comprimento final admissível do intervalo de incerteza $\ell > 0$ e uma constante $\varepsilon > 0$. Seja $[a_1, b_1]$ o intervalo de incerteza inicial. Escolher o número de observações n tal que

$$F_n > (b_1 - a_1)/\ell.$$

$$\text{Seja } \lambda_1 = a_1 + \frac{F_{n-2}}{F_n} (b_1 - a_1) = a_1 + 0,382(b_1 - a_1) \text{ e}$$

$$\mu_1 = a_1 + \frac{F_{n-1}}{F_n} (b_1 - a_1) = a_1 + 0,618(b_1 - a_1), \text{ por (3.1.6a).}$$

Avaliar $\theta(\lambda_1)$ e $\theta(\mu_1)$, fazer $k = 1$ e ir para o passo principal.

Passo Principal.

(1) se $\theta(\lambda_k) > \theta(\mu_k)$, ir para (2) e, se $\theta(\lambda_k) \leq \theta(\mu_k)$, ir para (3);

(2) seja $a_{k+1} = \lambda_k$ e $b_{k+1} = b_k$. Além disso, $\lambda_{k+1} = \mu_k$ e $\mu_{k+1} = a_{k+1} + [F_{n-k-1}]/(F_{n-k})(b_{k+1}-a_{k+1})$; se $k = n-2$, ir para (5); caso contrário, avaliar $\theta(\mu_{k+1})$ e ir para (4);

(3) seja $a_{k+1} = a_k$ e $b_{k+1} = \mu_k$. Além disso, $\mu_{k+1} = \lambda_k$ e $\lambda_{k+1} = a_{k+1} + [F_{n-k-2}]/(F_{n-k})(b_{k+1}-a_{k+1})$. Se $k = n-2$, ir para (5); caso contrário, avaliar $\theta(\lambda_{k+1})$ e ir para (4);

(4) substituir k por $k+1$ e ir para (1);

(5) seja $\lambda_n = \lambda_{n-1}$ e $\mu_n = \mu_{n-1} + \epsilon$. Se $\theta(\lambda_n) > \theta(\mu_n)$, fazer $a_n = \lambda_n$ e $b_n = b_{n-1}$. Caso contrário, se $\theta(\lambda_n) \leq \theta(\mu_n)$, fazer $a_n = a_{n-1}$ e $b_n = \lambda_n$. Pare; a solução ótima pertence ao intervalo $[a_n, b_n]$.

Bazaraa [5] ilustra o Método de Fibonacci com o seguinte exemplo:

$$\text{Minimizar } \lambda^2 + 2\lambda$$

Sujeita a

$$-3 \leq \lambda \leq 5.$$

Observar que a função é estritamente convexa sobre o intervalo e que o mínimo ocorre para $\lambda = -1$. Reduziremos o intervalo de incerteza para um cujo comprimento seja no máximo 0,2. Daí, devemos ter $F_n > 8/0,2 = 40$, desde que $n = 9$. Adotamos a constante $\epsilon = 0,01$.

As duas primeiras avaliações são feitas para

$$\lambda_1 = -3 + F_7/F_9 \cdot 8 = -3 + 0,328 \times 8 = 0,054545 \quad \text{e,}$$

$$\mu_1 = -3 + F_8/F_9 \cdot 8 = -3 + 0,618 \times 8 = 1,945454.$$

Notar que $\theta(\lambda_1) < \theta(\mu_1)$. Daí o intervalo de incerteza é $[-3,0; 1,945454]$.

O processo é repetido e os resultados obtidos estão reunidos na tabela 3.1.1.

Os valores θ que são computados para cada iteração estão indicados por um *.

Observar que para $k = 8$, $\lambda_k = \mu_k = \lambda_{k-1}$, daí não são necessárias avaliações

funcionais para esse estágio. Para $k = 9$, $\lambda_k = \lambda_{k-1} = -0,963636$ e

$\mu_k = \lambda_k + \epsilon = -0,953636$. Já que $\theta(\mu_k) > \theta(\lambda_k)$, o intervalo de incerteza final $[a_9, b_9]$ é $[-1,109091; -0,963636]$, cujo comprimento $l = 0,145455$. Um ponto de mínimo aproximado pode ser o ponto médio $-1,035364$.

k	a_k	b_k	λ_k	μ_k	$\theta(\lambda_k)$	$\theta(\mu_k)$
1	-3,000000	5,000000	0,054545	1,945454	0,112065*	7,675699*
2	-3,000000	1,945454	-1,109091	0,054545	-0,988099*	0,112065
3	-3,000000	0,054545	-1,836363	-1,109091	-0,300497*	-0,988099
4	-1,836363	0,054545	-1,109091	-0,672727	-0,988099	-0,892892*
5	-1,836363	-0,672727	-1,399999	-1,109091	-0,840001*	-0,988099
6	-1,399999	-0,672727	-1,109091	-0,963636	-0,988099	-0,998677*
7	-1,109091	-0,672727	-0,963636	-0,818182	-0,998677	-0,966942*
8	-1,109091	-0,818182	-0,963636	-0,963636	-0,998677	-0,998677
9	-1,109091	-0,963636	-0,963636	-0,963636	-0,998677	-0,997850*

Tabela 3.1.1 - Sumário dos resultados para o Método de Fibonacci.

Observamos acima que o comprimento final l do intervalo final de incerteza, que reflete o grau de exatidão desejado, o número de observações n pode ser obtido satisfazendo a condição $F_n \geq (b_1 - a_1)/l$; então, o número de observações n necessárias é uma função do raio $(b_1 - a_1)/l$.

3.1.3 -Fechamento da Transformação Algorítmica para Busca Unidimensional.

Desde que buscas unidimensionais são componentes de muitos algoritmos de programação não linear, mostramos agora que procedimentos de busca / unidimensional definem uma transformação fechada.

Considerar o problema:

Minimizar $\theta(\lambda)$

Sujeita a

$$\lambda \in L,$$

onde $\theta(\lambda) = f(x + \lambda s)$, e L é um intervalo fechado em R . Este problema de busca unidimensional pode ser definido pela transformação algorítmica $M:R^n \times R^n \rightarrow R^n$, definida por: $M(x, s) = \{y: y=x + \bar{\lambda}s, \text{ para algum } \bar{\lambda} \in L \text{ e } f(y) \leq f(x + \lambda s), \forall \lambda \in L\}$. Notar que M é geralmente uma transformação de ponto a conjunto que pode ter mais que um mínimo y . O teorema abaixo mostra que a transformação M é fechada. / Assim, se a transformação D que determina a direção s for também fechada, então pelo teorema 1.5.1 a transformação algorítmica $A = MD$ é fechada.

Teorema 3.1.2 - Sejam $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e L um intervalo em \mathbb{R} . Consideremos a transformação de busca unidimensional $M: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ definida / por $M(x, s) = \{y: y=x + \bar{\lambda}s, \text{ para algum } \bar{\lambda} \in L \text{ e } f(y) \leq f(x + \lambda s) \text{ para cada } \lambda \in L\}$. Se f for contínua para x , e $s \neq 0$ então M é fechada para (x, s) .

Demonstração. - Suponhamos que $(x_k, s_k) \rightarrow (x, s)$ e que, $y_k \rightarrow y$, onde $y_k \in M(x_k, s_k)$. Devemos mostrar que $y \in M(x, s)$. Primeiro notamos que $y_k = x_k + \lambda_k s_k$, onde $\lambda_k \in L$. Desde que $s \neq 0$, então $s_k \neq 0$ para k convenientemente grande, e daí

$$\lambda_k = \frac{\|y_k - x_k\|}{\|s_k\|} . \text{ Fazendo o limite quando } k \rightarrow \infty, \text{ então } \lambda_k \rightarrow \bar{\lambda}, \text{ onde}$$

$$\bar{\lambda} = \frac{\|y - x\|}{\|s\|} , \text{ e daí } y = x + \bar{\lambda}s. \text{ Além disso, desde que } \lambda_k \in L, \text{ para cada } k,$$

e desde que L é fechado, então $\bar{\lambda} \in L$. Agora para $\lambda \in L$ e notando que $f(y_k) \leq f(x_k + \lambda s_k)$, fazendo o limite quando $k \rightarrow \infty$, e notando a continuidade da f , concluímos que $f(y) \leq f(x + \lambda s)$. Assim $y \in M(x, s)$ e a demonstração está completa. \square

3.1.4 - Busca Multidimensional Usando Derivadas.

Um problema geral de programação não linear sem restrições é:

Minimizar $f(x)$

Sujeita a $x \in \mathbb{R}^n$, (B)

onde $f(x)$ é a função objetivo. Vamos considerar agora como resolver este problema por algoritmos que fazem uso da 1ª e 2ª derivadas de $f(x)$. Discutiremos/alguns métodos que usam derivadas na determinação das direções procuradas. Em particular, o método do decrescimento máximo e o método de Newton.

3.1.5 - O Método do Decrescimento Máximo.

Sabemos que o gradiente da função objetivo $f(x)$ para todo ponto x é um vetor que indica a direção do maior crescimento (local) da $f(x)$. Claramente, então, um deslocamento na direção oposta ao gradiente da $f(x)$, isto é, na direção do decrescimento máximo, para o ponto x_k é ortogonal as curvas de nível de $f(x)$ para x_k . Podemos definir a direção do decrescimento máximo normalizada (ou unitária), por

$$s_k = - \frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|} . \tag{3.1.12}$$

Então a transição de x_k para x_{k+1} é dada por

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \cdot \frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|}$$

ou

$$(3.1.13)$$

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|},$$

onde λ_k é um escalar tal que $\Delta x_k = \lambda_k s_k$, já que $x_{k+1} = x_k + \lambda_k s_k$.

O método determina a direção para a otimização mas não tamanho do passo dado, de modo que o passo da escolha de λ . Em razão de apenas um passo na direção do decrescimento máximo nem sempre atingir um ponto mínimo de $f(x)$, a equação (3.1.13) deve ser aplicada repetidamente até que o ponto de mínimo seja atingido. Para o ponto de mínimo o valor de cada elemento de vetor gradiente será igual a zero (ver 1.4). Um caso especial de uma função objetivo, se $f(x) = 1/2 \cdot x^T A x$, então $\nabla f(x_k) = A x_k$, pode ser substituído em (3.1.13).

O método do decrescimento máximo pode parar qualquer tipo de ponto crítico, isto é, para um ponto onde os elementos gradiente de $f(x)$ são nulos, que é a condição necessária para a existência do ponto crítico. O ponto crítico pode ser testado examinando-se a matriz Hessiana da função objetivo (ver subseção 1.3.5).

Se o ponto x_{k+1} for determinado usando-se (3.1.13), então $f(x)$ pode ser minimizada formalmente computando-se λ na solução de

$\frac{df(x_k + \lambda s_k)}{d\lambda} = 0$. Para um exemplo específico, suponhamos que $f(x)$ seja uma função quadrática. Usando a aproximação da função objetivo $f(x)$ pela série de Taylor (truncada) em torno de x_k (ver 1.3.5):

(a) $f(x) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k)$, ou a aproximação quadrática,

(b) $f(x) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + 1/2 \cdot (x - x_k)^T \cdot \nabla^2 f(x_k) (x - x_k)$, trocando-se $(x - x_k)$ por λs_k em (b), obtemos:

(c) $\frac{df(x_k + \lambda s_k)}{d\lambda} = 0 = \nabla f(x_k)^T s_k + \lambda s_k^T H s_k$, pois

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &= f(x_k) + \nabla f(x_k)^T \lambda s_k + 1/2 \lambda s_k^T \nabla^2 f(x_k) \lambda s_k = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T \lambda s_k + 1/2 \lambda s_k^T \nabla^2 f(x_k) \lambda s_k = \\ &= f(x_k) + \nabla f(x_k)^T \lambda s_k + 1/2 s_k^T \nabla^2 f(x_k) \lambda^2 s_k, \text{ por (b), e} \end{aligned}$$

$$\frac{df(x_{k+1})}{d\lambda} = \frac{df(x_k + \lambda s_k)}{d\lambda} = 0 + \nabla f(x_k)^T s_k + s_k^T \nabla^2 f(x_k) \lambda s_k.$$

De (c), vem a relação para λ_k ,

$$\lambda_k = \frac{-\nabla f(x_k)^T s_k}{s_k^T H s_k}$$

$$(3.1.14)$$

Uma característica interessante do procedimento de otimização / para a função quadrática é que $\nabla f(x_{k+1})$ seja ortogonal a s_k , demonstrada a seguir.

Observar que se $f(x) = a + x^T b + 1/2 \cdot x^T H x$, então o gradiente de $f(x)$ é:

$$\nabla f(x) = b + Hx, \text{ de modo que } \nabla f(x_0) = b + Hx_0$$

$$\vdots$$

$$\nabla f(x_k) = b + Hx_k.$$

Introduzindo cada expressão de $\nabla f(x_k)$ em (c), acima, vem

$$(b + Hx_k)^T s_k + s_k^T H \lambda_k s_k = 0, \text{ e introduzindo } x_{k+1} - x_k \text{ para } \lambda_k s_k \text{ e rearranjando,}$$

$$s_k^T (b + Hx_k) + s_k^T H (x_{k+1} - x_k) = 0,$$

ou,

$$s_k^T (b + Hx_{k+1}) = s_k^T \nabla f(x_{k+1}) = 0. \quad (3.1.15)$$

Em outras palavras, o gradiente calculado em x_{k+1} é ortogonal a direção s_k .

Se um valor do escalar λ for fixado ou ajustado para o método/ do decréscimo máximo, o valor de λ deve ser controlado cuidadosamente para evitar outro crescimento inesperado de $f(x)$ ou um número excessivo de passos / para se atingir a solução. O primeiro evento ocorrerá se λ for muito grande, e o segundo se λ for muito pequeno, ou seja se λ for tão grande que resulta uma/ oscilação em torno do ponto mínimo (ilustrado na figura 3.1.2).

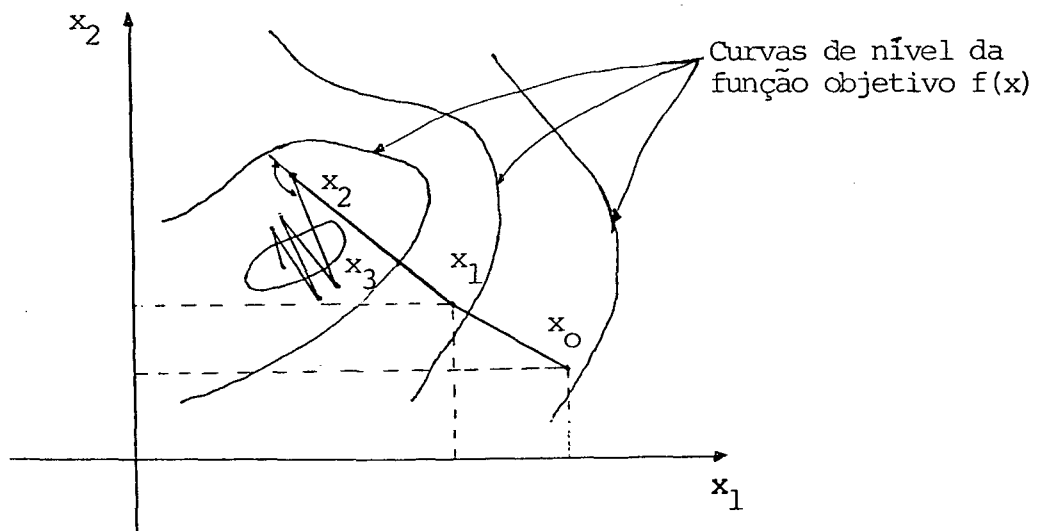


Figura 3.1.2 - Oscilação no método do decréscimo máximo.

Assim, o valor de λ deve ser reduzido para que o mínimo seja aproximado. Um método possível de controle do λ envolve um critério baseado no ângulo θ entre direções sucessivas na minimização. Por exemplo, se o ângulo / for menor que um valor dado, então λ será multiplicado por alguma constante / pré-determinada α ; se o ângulo for maior, então λ será dividido por α .

Sumário do Algoritmo do Decrescimento Máximo.

Dado um ponto inicial x_0 , o algoritmo efetua uma busca unidimensional ao longo da direção $-\nabla f(x_0)$, ou equivalentemente, $\frac{-\nabla f(x_0)}{\|\nabla f(x_0)\|}$.

Um sumário é dado a seguir.

Passo Inicial. - Seja $\epsilon > 0$. Escolher um ponto de partida x_0 ; fazer $k = 1$ e ir para o passo principal.

Passo Principal. - Se $\|\nabla f(x_k)\| < \epsilon$; pare; Caso contrário, seja $s_k = -\nabla f(x_k)$ e λ_k uma solução ótima do problema:

$$\text{Minimizar } f(x_k + \lambda s_k)$$

Sujeita a

$$\lambda \geq 0.$$

Tomar $x_{k+1} = x_k + \lambda s_k$, trocar k por $k+1$ e repetir o passo principal.

Bazaraa [05] utiliza o exemplo a seguir para ilustrar o método/ do decrescimento máximo.

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2.$$

Seja $x_0 = (0,000; 3,000)$ o ponto inicial. Os resultados numéricos obtidos são dados na tabela 3.1.2 abaixo. Após sete iterações, o ponto / $x_8 = (2,28; 1,15)^T$ é determinado. O algoritmo para já que $\|\nabla f(x_8)\| = 0,09$ é pequeno. Observar que o ponto que minimiza o problema é $(2,000; 1,000)$.

Exemplo do procedimento para uma iteração.

$$f(x_1, x_2) = (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2, \text{ então}$$

$$\partial f / \partial x_1 = 4(x_1 - 2)^3 + 2(x_1 - 2x_2) \quad \text{e,} \quad \partial f / \partial x_2 = 2(x_1 - 2x_2) \cdot (-2), \text{ logo}$$

$$[\partial f / \partial x_1]_{x_0} = -32 - 12 = -44,00; \quad \text{e} \quad [\partial f / \partial x_2]_{x_0} = 24, \quad \nabla f(x_0) = (-44,0; 24,0)^T,$$

$$\|\nabla f(x_0)\| = \sqrt{25,12} \approx 5,012 \quad \text{e} \quad s_1 = -\nabla f(x_0) = (44,0; -24,0)^T. \text{ Como } x_{k+1} = x_k + \lambda_k s_k,$$

então para obtermos λ_1 necessitamos resolver o problema:

$$\text{Minimizar } (44\lambda_1 - 2)^4 + [44\lambda_1 - 2(3 - 24\lambda_1)]^2$$

$$\text{Sujeita a } \lambda_1 \geq 0.$$

k	x_k $f(x_k)$	$\nabla f(x)$	$\ \nabla f(x)\ $	$s_k = -\nabla f(x_k)$	λ_k	x_{k+1}
1	(0,00;3,00) 52,00	(-44,00;24,00)	50,12	(44,00;-24,00)	0,062	(2,70;1,51)
2	(2,70;1,51) 0,34	(0,73;1,28)	1,47	(-0,73; -1,28)	0,24	(2,52;1,20)
3	(2,52;1,20) 0,09	(0,80;-0,48)	0,93	(-0,80; 0,48)	0,11	(2,43;1,25)
4	(2,43;1,25) 0,04	(0,18; 0,28)	0,33	(-0,18;-0,28)	0,31	(2,37;1,16)
5	(2,37;1,16) 0,02	(0,30;-0,20)	0,36	(-0,30; 0,20)	0,12	(2,33;1,18)
6	(2,33;1,18) 0,01	(0,08; 0,12)	0,14	(-0,08;-0,12)	0,36	(2,30;1,14)
7	(2,30;1,14) 0,009	(0,15;-0,08)	0,17	(-0,15; 0,08)	0,13	(2,28;1,15)
8	(2,28;1,15) 0,007	(0,05; 0,08)	0,09			

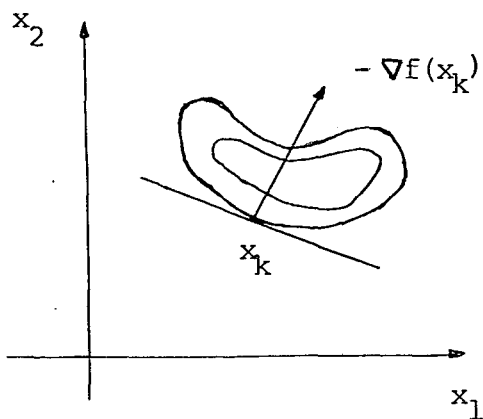
Tabela 3.1.2 - Resultados numéricos obtidos com o método do decrescimento máximo.

O λ_1 que resolve este problema é 0,062 (ver em 3.5 uma boa proposta para resolver este problema) e daí $x_2 = (2,70; 1,51)^T$. A partir de x_2 repetir o processo para x_3 e assim sucessivamente, para obter os outros valores.

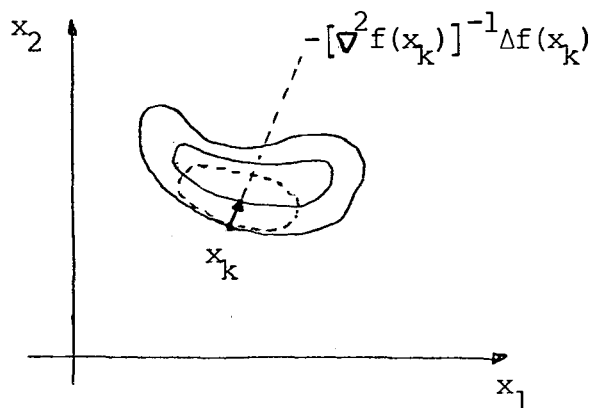
Métodos que Usam Derivadas de 2ª Ordem.

A busca da direção do decrescimento máximo pode ser interpretada como uma aproximação linear da função (veja figura 3.1.3). Por outro lado, métodos que utilizam derivadas de 2ª ordem, entre os quais está o método de Newton, originam-se da aproximação quadrática de $f(x)$ dada por

(a) $f(x) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + 1/2 \cdot (x - x_k)^T \nabla^2 f(x_k) (x - x_k)$, (ver 1.3.4), fazem uso da informação dada pelas derivadas de 2ª ordem de $f(x)$ em relação às variáveis independentes.



(a) Decrescimento máximo (aproximação de 1ª ordem-linearização de $f(x)$ em x_k).



(b) Método de Newton (aproximação de 2ª ordem-quadrática de $f(x)$ em x_k).

Figura 3.1.3

3.1.6 - Método de Newton.

A direção s para o método de Newton é obtida como segue. Se $(x - x_k)$ da equação (a) acima for substituído por $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$, a aproximação/quadrática de $f(x)$ em termos de Δx_k será:

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T \Delta x_k + 1/2 \Delta x_k^T \nabla^2 f(x_k) \Delta x_k. \tag{3.1.16}$$

O ponto de mínimo de $f(x)$ na direção de Δx_k é obtido diferenciando-se $f(x)$ em relação a cada uma das componentes de Δx e igualando-se o resultado a zero, ou seja, diferenciando (3.1.16) obtemos

ou,

$$\nabla f(x_{k+1}) = 0 + \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k) \Delta x_k = 0$$

$$\nabla^2 f(x_k) \Delta x_k = -\nabla f(x_k), \text{ e finalmente,}$$

$$\Delta x_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k), \text{ onde } [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \text{ é a inversa da matriz Hessiana definida em 1.3.5.}$$

Introduzindo Δx_k como acima em $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$, obtemos

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k). \quad (3.1.17)$$

Se $f(x)$ for quadrática, somente uma iteração será necessária para determinar um ponto de mínimo de $f(x)$. Mas, para uma função objetivo não linear genérica, um mínimo de $f(x)$ não será determinado em apenas uma iteração, pois a equação (3.1.17) é simplesmente modificada para

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|}, \text{ introduzindo-se um parâmetro } \lambda, /$$

que determina o tamanho do passo, na equação (3.1.11) e então

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \frac{[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)}{\|[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)\|}. \quad (3.1.18)$$

O raio $\frac{\lambda_k}{\|[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)\|}$ é justamente um escalar $\bar{\lambda}_k^*$ e a equação (3.1.18).

é mais frequentemente usada como $x_{k+1} = x_k - \lambda_k^* H^{-1}(x_k) \nabla f(x_k)$. (3.1.19)

Observar que a direção buscada s é agora dada por $s_k = -H^{-1}(x_k) \nabla f(x_k)$.

A equação (3.1.19) é aplicada iterativamente, como é (3.1.13), até que algum critério de parada seja satisfeito. Também observar que na equação (3.1.19) é necessário inverter-se a matriz Hessiana, e deve-se ter cautela no uso de alguma técnica que garanta uma matriz inversa definida positiva e que derivadas parciais de 2ª ordem analíticas devem ser avaliadas ou, aproximadas, o que pode não ser prático em alguns casos. O critério para garantir a convergência do método de Newton, supondo-se que a função $f(x)$ seja duas vezes diferenciável, é que a inversa da matriz Hessiana de $f(x)$ seja definida positiva.

Se a equação (3.1.17) for usada, o método de Newton automaticamente proporciona uma sequência de comprimentos dos passos correspondentes às distâncias de $f(x)$ para sucessivos valores de x_k .

Bazaraa [05] utiliza o exemplo seguinte para ilustrar o método de Newton, o qual foi também usado o método do decrescimento máximo.

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2.$$

Um sumário dos resultados numéricos obtidos é dado na tabela /
 3.1.3. Para cada iteração x_{k+1} é dado por $x_{k+1} = x_k - H(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$. Após seis iterações, o ponto $x_7 = (1,83; 0,91)^T$ é determinado. Para esse ponto $\|\nabla f(x_7)\| = 0,04$, e o processo está terminado.

Convergência do Método de Newton.

Há casos em que a sequência de pontos gerados pelo método de /
 Newton pode não convergir. A razão para isto é que $H(x_k)$ pode ser singular e daí x_{k+1} não ser bem definido. Ainda que exista $H(x_k)^{-1}$, $f(x_{k+1})$ não é necessariamente menor que $f(x_k)$. Entretanto, se o ponto de partida estiver convenientemente próximo de x^* tal que $\nabla f(x^*) = 0$ e $H(x^*)$ for não singular, então o método de Newton é bem definido e converge para x^* . Isto é demonstrado no teorema 3.1.3 que segue, que demonstra que todas as condições do teorema 1.5.1 (convergência de transformações algorítmicas) são satisfeitas quando a função decrescente α for dada por $\alpha(x) = \|x - x^*\|$.

Teorema 3.1.3 - (Convergência do Método de Newton) - Seja /
 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável. Consideremos o algoritmo para o método de Newton definido pela transformação $A(x) = x - H(x)^{-1} \nabla f(x)$. Seja x^* tal que $\nabla f(x^*) = 0$ e suponhamos que existam $k_1, k_2 > 0$ com $k_1 k_2 < 1$ tais que

$$(1) \|H(x)^{-1}\| \leq k_1$$

$$(2) \frac{\|\nabla f(x^*) - \nabla f(x) - H(x)(x^* - x)\|}{\|x^* - x\|} \leq k_2, \text{ para cada } x \text{ satisfazendo}$$

$\|x - x^*\| \leq \|x_1 - x^*\|$, então o algoritmo converge para x^* . Estamos /
 também supondo que $H^{-1}(x)$ existe.

Demonstração. - Seja o conjunto solução $S = \{x^*\}$ e seja /
 $X = \{x: \|x - x^*\| \leq \|x_1 - x^*\|\}$. Demonstraremos a convergência usando o teorema 1.5.1. Notar que X é compacto e que a transformação A é fechada sobre X . Agora mostraremos que $\alpha(x) = \|x - x^*\|$ é uma função decrescente. Seja $x \in X$, e suponhamos que $x \neq x^*$. Seja $y \in A(x)$. Então, pela definição de A e desde que $\nabla f(x^*) = 0$, temos:

$$y - x^* = (x - x^*) - H(x)^{-1} [\nabla f(x) - \nabla f(x^*)] = H(x)^{-1} [\nabla f(x^*) - \nabla f(x) - H(x)(x^* - x)].$$

Observando (1) e (2) segue que:

$$\|y - x^*\| = \|H(x)^{-1} [\nabla f(x^*) - \nabla f(x) - H(x)(x^* - x)]\| \leq \|H(x)^{-1}\| \cdot \|\nabla f(x^*) - \nabla f(x) - H(x)(x^* - x)\|$$

$\leq k_1 k_2 \|x - x^*\| < \|x - x^*\|$. Isto mostra que α é sem dúvida uma função /
 decrescente e, de acordo com o corolário 1.5.1 para o nosso conjunto /
 $S = \{x^*\}$, $\{x_k\}$ converge para x^* .

k	x_k $f(x_k)$	$\nabla f(x_k)$	$H(x_k)$	$H(x_k)^{-1}$	$-H(x_k)^{-1}\nabla f(x_k)$	x_{k+1}
1	(0,00;3,00) 52,00	(-44; 24)	$\begin{bmatrix} 50 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{384}$ $\begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 50 \end{bmatrix}$	(0,67;-2,67)	(0,67;0,33)
2	(0,67;0,33) 3,13	(-9,39;-0,04)	$\begin{bmatrix} 23,23 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{169,84}$ $\begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 23,23 \end{bmatrix}$	(0,44; 0,23)	(1,11;0,56)
3	(1,11;0,56) 0,63	(-2,84;-0,04)	$\begin{bmatrix} 11,5 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{76}$ $\begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 11,50 \end{bmatrix}$	(0,30;0,14)	(1,41;0,70)
4	(1,41;0,70) 0,12	(-0,80;-0,04)	$\begin{bmatrix} 6,18 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{33,44}$ $\begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 6,18 \end{bmatrix}$	(0,20;0,10)	(1,61;0,80)
5	(1,61;0,80) 0,02	(-0,22;-0,04)	$\begin{bmatrix} 3,83 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{16,64}$ $\begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 3,83 \end{bmatrix}$	(0,13;0,07)	(1,74;0,87)
6	(1,74;0,87) 0,005	(-0,07; 0,00)	$\begin{bmatrix} 2,81 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{6,48}$ $\begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 2,81 \end{bmatrix}$	(0,09;0,04)	(1,83;0,91)
7	(1,83;0,91) 0,0009	(0,003;-0,04)				

Tabela 3.1.3 - Resultados numéricos para o Método de Newton.

Uma Modificação do Método de Newton.

Discutiremos aqui uma modificação do método de Newton que garanta a convergência independentemente do ponto inicial. Dado x , consideremos a direção $s = -B\nabla f(x)$, onde B é uma matriz simétrica definida positiva a ser determinada posteriormente. O ponto sucessor é $y = x + \lambda s$, onde λ é uma solução ótima do problema:

$$\text{Minimizar } f(x + \lambda s)$$

$$\text{Sujeita a } \lambda \geq 0.$$

Seja a matriz B definida por $(\epsilon I + H)^{-1}$, onde $H = H(x)$. O escalar $\epsilon > 0$ é determinado como a seguir.

Sejam $\delta > 0$, e $\epsilon \geq 0$ um escalar pequeno que torna todos os autovalores da matriz $(\epsilon I + H)$ menores ou iguais a δ . Desde que os autovalores de $\epsilon I + H$ sejam todos positivos, $\epsilon I + H$ é definida positiva e inversível. Em particular, $B = (\epsilon I + H)^{-1}$ é também definida positiva (um escalar $\lambda \in \mathbb{R}$ é um autovalor de uma matriz quadrada A se, e somente se, λ for uma raiz do polinômio característico $\det(xI - A)$, ver [07] pág. 177). Desde que os autovalores da matriz dependem continuamente dos seus elementos, ϵ é uma função contínua de x , e daí a transformação algorítmica de ponto a ponto $D: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ definida por $D(x) = (x, s)$ é contínua. (Ver 1.5.2). Portanto, a transformação algorítmica $A = MD$, onde M é a transformação unidimensional usual sobre $\{\lambda: \lambda \geq 0\}$ (ver teorema 3.1.2).

Sejam $S = \{x^*: \nabla f(x^*) = 0\}$ e $x \notin S$. Desde que B é definida positiva, $s = -B\nabla f(x) \neq 0$, e pelo teorema 3.1.2 (fechamento da transformação algorítmica para busca unidimensional), segue que M é fechada para (x, s) . Além disso, D é uma função contínua e pelo teorema 1.5.2 (convergência de transformações compostas), $A = MD$ é fechada sobre o complementar de S .

Para completar a demonstração necessitamos especificar uma função decrescente contínua (teorema 1.5.1). Suponhamos que $x \notin S$, e $y \in A(x)$. / Notamos que $\nabla f(x)^T s = -\nabla f(x)^T B \nabla f(x) < 0$, desde que B seja definida positiva e $\nabla f(x) \neq 0$. Assim, s é uma direção decrescente de f para x , e $f(y) < f(x)$. Portanto, f é sem dúvida uma função decrescente. Supondo que a sequência gerada pelo algoritmo está contida num conjunto compacto, pelo teorema 1.5.1, segue que o presente algoritmo converge.

É preciso notar que se um pequeno autovalor de $H(x)$ for menor / ou igual a δ , então como os pontos $\{x_k\}$ gerados pelo algoritmo tendem a x^* , ϵ_k será igual a zero. Assim, $s_k = -H(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$, e o algoritmo se equivale ao de Newton.

3.1.7 Métodos que Usam Direções Conjugadas.

Discutiremos procedimentos que são baseados no importante conceito de conjugacidade. Alguns desses procedimentos usam derivadas e entre eles daremos atenção ao método de Davidon-Fletcher-Powell. A noção de conjugacidade definida a seguir é muito útil para a minimização sem restrições. Em particular, se a função objetivo for quadrática, então pesquisando-se ao longo das direções conjugadas, o ponto de mínimo será obtido em, no máximo, n iterações.

Definição.- Seja H uma matriz simétrica $n \times n$. Os vetores, s_1, \dots, s_k são chamados H -conjugados ou simplesmente conjugados se eles forem linearmente independentes e se $s_i^T H s_j = 0$, par $i \neq j$.

O exemplo a seguir ilustra a noção de conjugacidade e o significado de otimizar ao longo de direções conjugadas para funções quadráticas.

Considerar o problema:

$$\text{Minimizar } -12x_2 + 4x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1x_2.$$

Primeiro vamos determinar a matriz Hessiana.

De $f(x_1, x_2) = -12x_2 + 4x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1x_2$ obtemos:

$$\partial f / \partial x_1 = 8x_1 - 4x_2; \quad \partial f / \partial x_2 = -12 + 8x_2 - 4x_1; \quad \partial^2 f / \partial x_1^2 = 8; \quad \partial^2 f / \partial x_2^2 = 8;$$

$$\partial^2 f / \partial x_2 \partial x_1 = \partial^2 f / \partial x_1 \partial x_2 = -4, \text{ portanto, } H = \begin{bmatrix} 8 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}.$$

Agora geramos duas direções s_1 e s_2 . Suponhamos $s_1^T = (1, 0)$. Então $s_2^T = (a, b)$ deve satisfazer

$$0 = s_1^T H s_2 = (1, 0) \begin{bmatrix} 8 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = 8a - 4b.$$

E em particular, podemos escolher $a = 1$ e $b = 2$. Notar que as direções conjugadas não são únicas. Se minimizarmos a função objetivo f partindo de $x_0 = (-1/2, 1)^T$ ao longo da direção s_1 , obtemos o ponto $x_1 = (1/2, 1)^T$; agora partindo de x_1 e minimizando ao longo de s_2 obtemos $x_2 = (1, 2)^T$. Notar que x_2 é o ponto que determina o mínimo de f .

Duas curvas de nível da função objetivo e o caminho percorrido para atingir o ponto ótimo são mostrados na figura 3.1.4. Pode-se verificar que partindo de algum ponto e minimizando ao longo de s_1 e s_2 , o ponto de ótimo é obtido em apenas dois estágios.

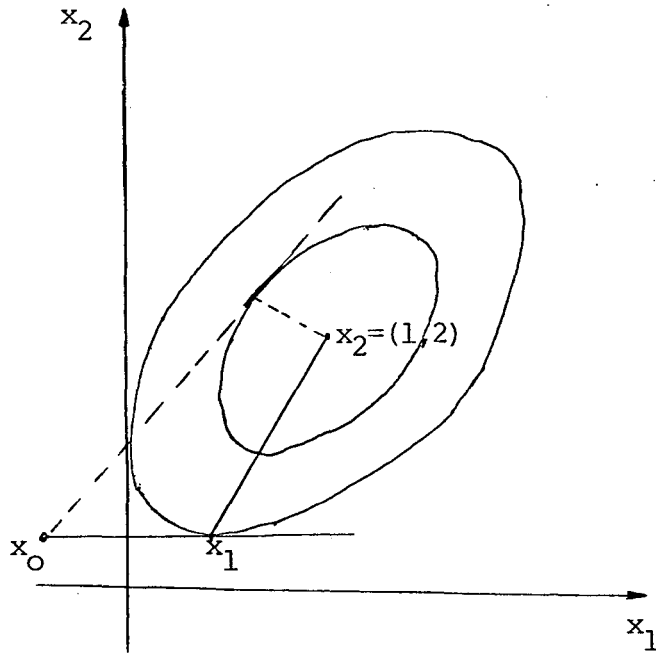


Figura 3.4.1 Ilustração de duas direções conjugadas para o problema.

Otimização de Funções Quadráticas: Convergência Finita.

O exemplo anterior mostra que uma função quadrática pode ser / minimizada em, no máximo, n estágios, desde que pesquisemos ao longo de direções conjugadas da matriz Hessiana. Este resultado é sempre válido para funções quadráticas, como demonstra o teorema 3.1.4 que segue. Isto, juntamente / com o fato que uma função qualquer pode ser representada por sua aproximação quadrática na vizinhança do ponto ótimo, torna a noção de conjugacidade muito útil para otimizar funções quadráticas e não quadráticas.

Teorema 3.1.4.—Seja $f(x) = c^T x + 1/2 x^T H x$, onde H é a matriz simétrica $n \times n$. Sejam s_1, \dots, s_n H -conjugadas, e x_1 um ponto de partida arbitrário. Para $k = 1, \dots, n$, seja λ_k uma solução ótima do problema:

$$\text{Minimizar } f(x_k + \lambda s_k)$$

Sujeita a

$$\lambda \in R,$$

e seja $x_{k+1} = x_k + \lambda_k s_k$. Então para $k = 1, \dots, n$, devemos ter:

$$(i) \nabla f(x_{k+1})^T s_j = 0, \text{ para } j = 1, \dots, k;$$

$$(ii) \nabla f(x_1)^T s_k = \nabla f(x_k)^T s_k;$$

(iii) x_{k+1} é uma solução ótima do problema:

Minimizar $f(x)$

Sujeita a

$$x - x_1 \in L(s_1, \dots, s_k),$$

onde $L(s_1, \dots, s_k)$ é um subespaço linear gerado por s_1, \dots, s_k ; isto é, $L(s_1, \dots, s_k) = \{ \sum_{j=1}^k \mu_j s_j : \mu_j \in \mathbb{R} \text{ para cada } j \}$. Em particular x_{n+1} é um ponto de mínimo de f sobre \mathbb{R}^n

Demonstração. - Para a demonstração de (i) primeiro devemos notar que $f(x_j + \lambda s_j)$ encontra um mínimo para λ somente se $\nabla f(x_j + \lambda s_j)^T s_j = 0$; isto é, se $\nabla f(x_{j+1})^T s_j = 0$. Assim (i) vale para $j = k$. Para $j < k$, notar que

$$\nabla f(x_{k+1}) = c + Hx_{k+1} = c + Hx_{j+1} + H\left(\sum_{i=j+1}^k \lambda_i s_i\right) = \nabla f(x_{j+1}) + H\left(\sum_{i=j+1}^k \lambda_i s_i\right). \quad (3.1.20)$$

($x_2 = x_1 + \lambda_1 s_1, x_3 = x_2 + \lambda_2 s_2 = x_1 + \lambda_1 s_1 + \lambda_2 s_2, \dots$). Por conjugacidade, $s_i^T H s_j = 0$ para $i = j+1, \dots, k$. Assim, de (3.1.20) segue que $\nabla f(x_{k+1})^T s_j = 0$, pois

$$\begin{aligned} \nabla f(x_{k+1})^T s_j &= \nabla f(x_{j+1})^T s_j + H\left(\sum_{i=j+1}^k \lambda_i s_i\right)^T s_j = \\ &= \nabla f(x_{j+1})^T s_j + s_j^T H\left(\sum_{i=j+1}^k \lambda_i s_i\right) = 0. \end{aligned}$$

(x_{j+1} , para $j \leq k$, minimiza f e $\nabla f(x_{j+1}) = 0$), e (i) está satisfeita.

Substituindo k por $k-1$ e fazendo $j = 0$ em (3.1.20), temos $\nabla f(x_k) = \nabla f(x_1) + H\left(\sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i s_i\right)$, para $k \geq 2$. Multiplicando por s_k^T e notando que $s_k^T H s_i = 0$, para $i = 1, \dots, k-1$, $s_k^T \nabla f(x_k) = s_k^T \nabla f(x_1) + s_k^T H\left(\sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i s_i\right)$, que implica $\nabla f(x_k)^T s_k = \nabla f(x_1)^T s_k$ e (ii) está demonstrada (observar que (ii) é satisfeita trivialmente por $k = 1$).

Para (iii), desde que $s_i^T H s_j = 0$, para $i \neq j$, temos

$$f(x_{k+1}) = f\left[x_1 + \left(x_{k+1} - x_1\right)\right] = f\left(x_1 + \sum_{j=1}^k \lambda_j s_j\right) = f(x_1) + \nabla f(x_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \lambda_j s_j\right) + 1/2 \sum_{j=1}^k \lambda_j^2 s_j^T H s_j, \quad (3.1.21)$$

já que f é convexa, por hipótese, e (3.1.21) é a aproximação de $f(x_{k+1})$ pela série de Taylor dada em 1.3.4. Suponhamos agora que $(x - x_1) \in L(s_1, \dots, s_k)$. Então x pode ser escrito como $x_1 + \sum_{j=1}^k \lambda_j s_j$. Como em (3.1.21), temos

$$f(x) = f(x_1) + \nabla f(x_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \mu_j s_j\right) + 1/2 \sum_{j=1}^k \mu_j^2 s_j^T H s_j. \quad (3.1.22)$$

Para completar a demonstração necessitamos mostrar que $f(x) \geq f(x_{k+1})$. Por tradição, vamos supor que $f(x) < f(x_{k+1})$. Então por (3.1.21) e (3.1.22) devemos ter

$$\nabla f(x_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \mu_j s_j \right) + 1/2 \sum_{j=1}^k \mu_j^2 s_j^T H s_j < \nabla f(x_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \lambda_j s_j \right) + 1/2 \sum_{j=1}^k \lambda_j^2 s_j^T H s_j. \quad (3.1.23)$$

Pela definição de λ_j , notamos que $f(x_j + \lambda_j s_j) \leq f(x_j + \mu_j s_j)$ para cada j . Portanto, $f(x_j) + \lambda_j \nabla f(x_j)^T s_j + 1/2 \lambda_j^2 s_j^T H s_j \leq f(x_j) + \mu_j \nabla f(x_j)^T s_j + 1/2 \mu_j^2 s_j^T H s_j$.

Por (ii) $\nabla f(x_j)^T s_j = \nabla f(x_1)^T s_j$ e substituindo na desigualdade acima, obtemos/
 $\lambda_j \nabla f(x_1)^T s_j + 1/2 \lambda_j^2 s_j^T H s_j \leq \mu_j \nabla f(x_1)^T s_j + 1/2 \mu_j^2 s_j^T H s_j. \quad (3.1.24)$

Supondo (3.1.24) válida para $j = 1, \dots, k$, isto contradiz (3.1.23). Assim, x_{k+1} é um ponto de mínimo sobre os múltiplos $x_1 + L(s_1, \dots, s_k)$. Em particular desde que s_1, \dots, s_k são linearmente independentes, então $L(s_1, \dots, s_n) = \mathbb{R}^n$ e daí x_{n+1} é um ponto que minimiza f sobre \mathbb{R}^n . Isto completa a demonstração. ■

Geração de Direções Conjugadas.

Estudaremos um método para a geração de direções conjugadas de formas quadráticas. Este método devido a Davidon-Fletcher-Powell, fornece um poderoso algoritmo para a otimização de funções quadráticas e não quadráticas.

3.1.8 - O Método de Davidon-Fletcher-Powell.

Este método foi proposto originalmente por Davidon (1959) e depois desenvolvido por Fletcher e Powell (1963). Ele é também conhecido como o método variável métrico. Pertence a uma classe geral de procedimentos quase Newtonianos, onde as direções procuradas são da forma $-D_j \nabla f(y)$. A direção do gradiente é assim desviada pré-multiplicando-a por $-D_j$, onde o D_j é uma matriz $n \times n$ simétrica e definida positiva que aproxima a inversa da matriz Hessiana. Para a determinação do passo seguinte, D_{j+1} é formada adicionando-se a D_j duas matrizes simétricas, cada uma de posto um. Por esta razão este esquema é algumas vezes chamado correção de posto dois. (Seja uma matriz $n \times n$. O posto de A é o número máximo de colunas literalmente independentes da matriz A).

Sumário do Método de Davidon-Fletcher-Powell.

Faremos um sumário do método que otimiza uma função diferenciável de várias variáveis. Em particular, se a função for quadrática, então como mostraremos depois, o método produz direções conjugadas e para após uma iteração completa, isto é, após pesquisar uma vez ao longo de cada uma das direções conjugadas.

Passo Inicial. - Seja $\epsilon > 0$. Escolher um ponto inicial x_1 e uma matriz simétrica definida positiva D_1 . Fazer $y_1 = x_1$, $k = j = 1$ e ir para o passo principal.

Passo Principal. -

(1) - Se $\|\nabla f(y_1)\| < \epsilon$, pare; caso contrário, sejam $s_j = -D_j \nabla f(y_1)$ e λ_j uma solução ótima do problema:

$$\text{Minimizar } f(y_1 + \lambda s_j)$$

Sujeita a $\lambda \geq 0$.

Fazer $y_{j+1} = y_j + \lambda_j s_j$. Se $j < n$, ir para o passo 2. Se $j = n$, fazer $y_1 = x_{k+1} = y_{n+1}$, substituir k por $k+1$, fazer $j = 1$ e repetir o passo 1.

(2) - Construir D_{j+1} , como a seguir.

$$D_{j+1} = D_j + \frac{p_j p_j^T}{p_j^T q_j} - \frac{D_j q_j q_j^T D_j}{q_j^T D_j q_j} \tag{3.1.25}$$

onde $p_j = \lambda_j s_j$ (3.1.26)

$q_j = \nabla f(y_{j+1}) - \nabla f(y_j)$. (3.1.27)

Substituir j por $j+1$ e repetir o passo 1.

Bazaraa [05] utiliza o exemplo seguinte para ilustrar o método de Davidon-Fletcher-Powell.

Consideremos o problema:

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2.$$

Os resultados numéricos são dados na tabela 3.1.5. Para cada iteração, para $j = 1, 2$, s_j é dado por $-D_j \nabla f(y_j)$, onde D_1 é a matriz identidade e D_2 é obtida de (3.1.25) a (3.1.27). Para a iteração $k = 1$, temos:

$p_1 = \lambda_1 s_1 = (2,7;-1,49)^T$ e $q_1 = \nabla f(y_{j+1}) - \nabla f(y_j) = (44,73;-22,72)^T$ pois, partindo de $x_1 = (0,00;3,00)^T = y_1$, obtemos

$$\nabla f(y_1) = \begin{bmatrix} -44,00 \\ 24,00 \end{bmatrix} \text{ e } s_1 = -D_1 \nabla f(y_1) = - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -44,00 \\ 24,00 \end{bmatrix}, \text{ logo,}$$

$s_1 = (44,00;-24,00)^T$. Fazendo $x_2 = x_1 + \lambda_1 s_1$ temos que resolver o problema:

$$\text{Minimizar } f(\lambda) = (44,00\lambda - 2)^4 + [44,00\lambda - 2(3,00 - 24,00\lambda)]^2$$

Sujeita a $\lambda \geq 0$.

λ_1 que resolve este problema é $\lambda_1 = 0,0062$, logo

$$p_1 = 0,062 \begin{bmatrix} 44,00 \\ -24,00 \end{bmatrix} = (2,7;-1,49)^T,$$

$$x_2 = \begin{bmatrix} 0,00 \\ 3,00 \end{bmatrix} + 0,062 \begin{bmatrix} 44,00 \\ -24,00 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2,70 \\ 1,51 \end{bmatrix}$$

e $\nabla f(y_2) = (0,73; 1,28)^T$. Daí

$$q_1 = \begin{bmatrix} 0,73 \\ 1,28 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -44,00 \\ 24,00 \end{bmatrix} = (44,73; -22,72)^T.$$

Para o cálculo de D_2 , usando (3.1.25), fazemos:

$$D_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\begin{bmatrix} 2,7 \\ -1,49 \end{bmatrix} \cdot (2,7; -1,49)}{(2,7; -1,49) \begin{bmatrix} 44,73 \\ -22,72 \end{bmatrix}} - \frac{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 44,73 \\ -22,72 \end{bmatrix} (44,73; -22,72) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}{(44,73; -22,72) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 44,73 \\ -22,72 \end{bmatrix}}$$

Então,

$$D_2 = \begin{bmatrix} 0,25 & 0,38 \\ 0,38 & 0,81 \end{bmatrix}.$$

Para a iteração 2 temos $p_1 = (0,1; 0,05)^T$ e $q_1 = (-0,7; 0,8)^T$, e finalmente para a iteração 3 $p_1 = (-0,02; 0,02)^T$ e $q_1 = (-0,04; 0,24)^T$. O ponto y_{j+1} é computado otimizando-se ao longo da direção s_j partindo de y_j , para $j = 1, 2$. O procedimento está terminado para o ponto $y_2 = (2,115; 1,058)^T$ na quarta iteração, / já que $\|\nabla f(y_2)\| = 0,0006$ é suficientemente pequeno.

O lema 3.1.3 que segue mostra que cada matriz D_j é definida positiva e s_j é uma direção de crescimento.

Lema 3.1.3 - Sejam $y_1 \in \mathbb{R}^n$ e D_1 uma matriz simétrica definida / positiva inicial. Para $j = 1, \dots, n$, seja $y_{j+1} = y_j + \lambda s_j$, onde $s_j = -D_j \nabla f(y_j)$, e λ_j resolve o problema:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } f(y_j + \lambda s_j) \\ &\text{Sujeita a } \lambda \geq 0. \end{aligned}$$

Além disso, para $j = 1, \dots, n-1$, seja D_{j+1} dada por (3.1.25) a (3.1.27). Se $\nabla f(y_j) \neq 0$ para $j = 1, \dots, n$, então D_1, \dots, D_n são simétricas e definidas / positivas desde que s_1, \dots, s_n sejam direções decrescentes.

Demonstração - Demonstraremos o resultado por indução. Para $j=1$ D_1 é simétrica e definida por hipótese. Além disso, $\nabla f(y_j)^T s_1 = -\nabla f(y_1)^T D_1 \nabla f(y_1) < 0$, desde que D_1 é definida positiva. Então s_1 é uma direção de decrescimento. Supondo-se que os resultados se mantêm satisfeitos para $j \leq n - 1$, mostraremos / que eles são satisfeitos para $j + 1$. Seja x um vetor não nulo em \mathbb{R}^n ; então por (3.1.25), temos:

Iter. k	x_k $f(x_k)$	j	y_j $f(y_j)$	$\nabla F(y_j)$	$\ \nabla F(y_j)\ $	D_j	s_j	λ_j	y_{j+1}
1	(0,00;3,00) 52,00	1	(0,00;3,00) 52,00	(-44,00;24,00)	50,12	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(44,00;-24,00)	0,062	(2,70;1,51)
2	(2,55;1,22) 0,1036	2	(2,70;1,51) 0,34	(0,73; 1,28)	1,47	$\begin{bmatrix} 0,25 & 0,38 \\ 0,38 & 0,81 \end{bmatrix}$	(-0,67;-1,31)	0,22	(2,55;1,22)
2	(2,55;1,22) 0,1036	1	(2,55;1,22) 0,1036	(0,89;-0,44)	0,99	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(-0,89;0,44)	0,11	(2,45;1,27)
2	(2,45;1,27) 0,0490	2	(2,45;1,27) 0,0490	(0,18; 0,36)	0,40	$\begin{bmatrix} 0,65 & 0,45 \\ 0,45 & 0,46 \end{bmatrix}$	(-0,28;-0,25)	0,64	(2,27;1,11)
3	(2,27;1,11) 0,008	1	(2,27;1,11) 0,008	(0,18;-0,20)	0,27	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(-0,18; 0,20)	0,10	(2,25;1,13)
2	(2,25;1,13) 0,004	2	(2,25;1,13) 0,004	(0,04; 0,04)	0,06	$\begin{bmatrix} 0,80 & 0,38 \\ 0,38 & 0,31 \end{bmatrix}$	(-0,05;-0,03)	2,64	(2,12;1,05)
4	(2,12;1,05) 0,0005	1	(2,12;1,05) 0,0005	(0,05; 0,04)	0,09	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(-0,05; 0,08)	0,10	(2,115;1,058)
2	(2,115;1,058) 0,0002	2	(2,115;1,058) 0,0002	(0,004;0,004)	0,006				

Tabela 3.1.5 - Resultados numéricos para o método de Davidon-Fletcher -Powell

$$x^T D_{j+1} x = x^T D_j x + \frac{(x^T p_j)^2}{p_j^T q_j} - \frac{(x^T D_j q_j)^2}{q_j^T D_j q_j} \quad (3.1.28)$$

Desde que D_j é uma matriz simétrica definida positiva, existe uma matriz simétrica definida positiva $D_j^{(1/2)}$ tal que $D_j = D_j^{(1/2)} D_j^{(1/2)}$. Seja $a = D_j^{(1/2)} x$ e $b = D_j^{(1/2)} q_j$. Então,

$$x^T D_j x = a^T a, \quad q_j^T D_j q_j = b^T b \quad \text{e} \quad x^T D_j q_j = a^T b. \quad \text{Substituindo em (3.1.28), temos:}$$

$$x^T D_{j+1} x = \frac{(a^T a)(b^T b) - (a^T b)^2}{b^T b} + \frac{(x^T p_j)^2}{p_j^T q_j} \quad (3.1.29)$$

Pela desigualdade de Schwartz (teorema 1.2.1), $(a^T a)(b^T b) \geq (a^T b)^2$. Assim, para mostrarmos que $x^T D_{j+1} x \geq 0$, é suficiente mostrar que $p_j^T q_j > 0$ e que $b^T b > 0$. A partir de (3.1.26) e (3.1.27), segue que

$$p_j^T q_j = \lambda_j s_j^T [\nabla f(y_{j+1}) - \nabla f(y_j)].$$

Notar que $s_j^T \nabla f(y_{j+1}) = 0$, (ver teorema 3.1.4) e, por definição, $s_j = -D_j \nabla f(y_j)$. Substituindo na equação acima, vem

$$p_j^T q_j = \lambda_j \nabla f(y_j)^T D_j \nabla f(y_j). \quad (3.1.30)$$

Notar que $\nabla f(y_j) \neq 0$ por hipótese e que D_j é definida positiva, então $\nabla f(y_j)^T D_j \nabla f(y_j) > 0$ (ver definição 1.3.5). Além disso, s_j é uma direção de decrescimento e daí $\lambda_j > 0$. Portanto, de (3.1.30), $p_j^T q_j > 0$.

Mostraremos agora que $x^T D_{j+1} x > 0$ (definida positiva). Por contradição, suponhamos que $x^T D_{j+1} x = 0$. Isto somente é possível se $(a^T a)(b^T b) = (a^T b)^2$. Primeiro notamos que $(a^T a)(b^T b) = (a^T b)^2$ somente se $a = \lambda b$; isto é, $D_j^{(1/2)} x = \lambda D_j^{(1/2)} q_j$. Assim $x = \lambda q_j$. Desde que $x \neq 0$, $\lambda \neq 0$. Agora $0 = p_j^T x = p_j^T q_j$ contradiz $p_j^T q_j > 0$ e $\lambda \neq 0$. Portanto, $x^T D_{j+1} x > 0$, e D_{j+1} é definida positiva.

Como $\nabla f(y_{j+1}) \neq 0$ e D_{j+1} é definida positiva, $\nabla f(y_{j+1})^T s_{j+1} = -\nabla f(y_{j+1})^T D_{j+1} \nabla f(y_{j+1}) < 0$ e s_{j+1} é uma direção decrescente. \square

Caso Quadrático.

Se a função f for quadrática, então pelo teorema 3.1.5 seguinte as direções s_1, \dots, s_n geradas pelo método de Davidon-Fletcher-Powell são conjugadas. Portanto, pelo teorema 3.1.4 (Otimização de Funções Quadráticas; convergência finita) na sua parte (iii), o método para após uma iteração completa. Além disso, a matriz D_{n+1} obtida para a última das iterações é precisamente a inversa da matriz Hessiana.

Teorema 3.1.5 - Seja H uma matriz simétrica definida positiva e consideremos o problema:

$$\text{Minimizar } f(x) = c^T x + 1/2 x^T H x$$

Sujeita a
 $x \in \mathbb{R}^n$.

Suponhamos que o problema seja resolvido pelo método de Davidon-Fletcher-Powell. Seja y_1 o ponto inicial e D_1 uma matriz simétrica definida positiva. Em particular, para $j = 1, \dots, n$, seja λ_j uma solução ótima do problema:

$$\text{Minimizar } f(y_j + \lambda s_j)$$

Sujeita a
 $\lambda \geq 0$,

e tomando $y_{j+1} = y_j + \lambda_j s_j$, onde $s_j = -D_j \nabla f(y_j)$ e D_j determinada por (3.1.25) a (3.1.27). Se $\nabla f(y_j) \neq 0$ para cada j , então as direções s_1, \dots, s_n são H-conjugadas e $D_{n+1} = H^{-1}$. Além disso y_{n+1} é uma solução ótima para o problema.

Demonstração. - Primeiro mostraremos que para algum j com $1 \leq j \leq n$, devemos ter as seguintes condições:

(1) s_1, \dots, s_j são linearmente independentes;

(2) $s_i^T H s_k = 0$ para $i \neq k; k \leq j$;

(3) $D_{j+1} H p_k = p_k$, ou equivalentemente, $D_{j+1} H s_k = s_k$ para $1 \leq k \leq j$,

onde $p_k = \lambda_k s_k$. Demonstraremos por indução. Para $j = 1$, $\{s_1\}$ é linearmente independente e $s_i^T H s_1 = 0$ para $i \neq 1$ (pela definição de conjugacidade) e, portanto (1) e (2) estão satisfeitas para $j = 1$. Para (3), primeiro notamos que para todo k , temos $H p_k = q_k$ pois $f(y_{k+1}) = c^T y_{k+1} + 1/2 y_{k+1}^T H y_{k+1}$, que implica

$$\nabla f(y_{k+1}) = c + H(y_k + \lambda_k s_k), \text{ ou } (y_{k+1}) = y_k + \lambda_k s_k, \text{ ou}$$

$$\nabla f(y_{k+1}) = c + H y_k + H p_k, \text{ (} p_k = \lambda_k s_k \text{)}. \text{ Como } \nabla f(y_k) = c + H y_k, \text{ temos}$$

$$H p_k = \nabla f(y_{k+1}) - \nabla f(y_k) = q_k \text{ (ver 3.1.27)} \quad (3.1.31)$$

Em particular, $H p_1 = q_1$. Assim, fazendo $j = 1$ em (3.1.25) obtemos

$$D_2 H p_1 = \left[D_1 + \frac{p_1 p_1^T}{p_1^T q_1} - \frac{D_1 q_1 q_1^T D_1}{q_1^T D_1 q_1} \right] q_1 = p_1. \text{ Logo (3) é satisfeita para } j=1.$$

Agora vamos supor que (1), (2) e (3) sejam satisfeitas para $j \leq n-1$. Para mostrar que elas são verdadeiras para $j+1$, primeiro relembremos a parte (i) do teorema 3.1.4 - $(\nabla f(y_{j+1}))^T s_i = 0$, para $i \leq j$. Pela hipótese da indução de (3), $s_i = D_{j+1} H s_i$, para $i \leq j$. Assim, para $i \leq j$, temos

$$0 = s_i^T \nabla f(y_{j+1}) = s_i^T H D_{j+1} \nabla f(y_{j+1}) = -s_i^T H s_{j+1}.$$

Em razão da hipótese da indução na parte (2), a equação acima mostra que (2) também mantém-se para $j+1$.

Agora mostraremos que (3) mantém-se para $j+1$. Fazendo $k \leq j + 1$,

$$D_{j+2} H_{p_k} = \left[D_{j+1} + \frac{p_{j+1} p_{j+1}^T}{p_{j+1}^T q_{j+1}} - \frac{D_{j+1} q_{j+1} q_{j+1}^T D_{j+1}}{q_{j+1}^T D_{j+1} q_{j+1}} \right] H_{p_k}. \quad (3.1.32)$$

Observando (3.1.31) e fazendo $k = j+1$ em (3.1.32) segue que $D_{j+1} H_{p_{j+1}} = p_{j+1}$. Agora tomando $k \leq j$. Já que (2) mantém-se para $j+1$, então

$$p_{j+1}^T H_{p_k} = \lambda_k \lambda_{j+1} s_{j+1}^T H_{s_k} = 0. \quad (3.1.33)$$

Notando a hipótese da indução em (3), (3.1.31) e a hipótese da indução em (3), temos

$$q_{j+1}^T D_{j+1} H_{p_k} = q_{j+1}^T p_k = p_{j+1}^T H_{p_k} = \lambda_{j+1} \lambda_k s_{j+1}^T H_{s_j} = 0. \quad (3.1.34)$$

Substituindo (3.1.33) e (3.1.34) em (3.1.32) e notando a hipótese da indução / em (3), temos $D_{j+2} H_{p_k} = D_{j+1} H_{p_k} = p_k$. Assim (3) mantém-se para $j+1$.

Para terminar o argumento da indução, necessitamos somente mostrar que (1) é verdadeira para $j+1$. Suponhamos que $\sum_{i=1}^{j+1} \alpha_i s_i = 0$. Multiplicando por $s_{j+1}^T H$ e notando que (2) é verdadeira para $j+1$, segue que $\alpha_{j+1} s_{j+1}^T H s_{j+1} = 0$. Por hipótese, $\nabla f(y_{j+1}) \neq 0$ e pelo lema 3.1.3 D_{j+1} é definida positiva, então $s_{j+1}^T H s_{j+1} \neq 0$ e daí $\alpha_{j+1} = 0$. Isto implica que $\sum_{i=1}^j \alpha_i s_i = 0$ e s_1, \dots, s_j são linearmente independentes pela hipótese da indução, $\alpha_i = 0$, para $i = 1, \dots, j$. Assim, s_1, \dots, s_{j+1} são linearmente independentes e (1) mantém-se para $j+1$. Então a indução está completa. Em particular, a conjugacidade de s_1, \dots, s_n segue a partir de (1) e (2) fazendo-se $j = n$.

Agora seja $j = n$ em (3). Então $D_{k+1} H_{s_k} = s_k$ para $k = 1, \dots, n$. Se fizermos D inversível, então $D_{n+1} H = I$, o que é possível, se e somente se, $D_{n+1} = H^{-1}$. Finalmente, y_{n+1} é uma solução ótima, pelo teorema 3.1.4. \square

3.2 - Método para Determinar um Ponto Interior Inicial.

Aplicando o próprio método aqui desenvolvido, fazemos agora uma proposta para obtenção de um ponto inicial - que deve estar no interior do domínio viável - caso o mesmo não seja disponível. O desenvolvimento deste procedimento foi realizado por Fiacco [09] e é, com pequenas modificações, revisto/aqui.

O problema é determinar um ponto que satisfaça o conjunto de desigualdades $g_i(x) > 0$, $i = 1, \dots, m$, como exige o método das barreiras. Para determinarmos tal ponto seguimos o seguinte caminho:

Passo Inicial. - Vamos supor que x_0 seja dado, mas que não satisfaça todas as restrições. Fazendo $k = 0$ vamos para o passo principal,

Passo Principal.

(1) Seja $I = \{i: g_i(x) > 0\}$. Se $I = \{1, 2, \dots, m\}$, paramos; / com x_k satisfazendo $g_i(x_k) > 0$ para todo i . Caso contrário, selecionamos $j \notin I$ e vamos para (2);

(2) usamos o método da função barreira para resolver o problema seguinte, partindo de x_k ,

minimizar $g_j(x)$

sujeita a

$$g_i(x) > 0, \text{ para todo } i \in I.$$

Seja x_{k+1} a solução ótima. Se $g_j(x_{k+1}) > 0$, e se o conjunto $\{x: g_i(x) \leq 0, \text{ com } i = 1, \dots, m\}$ for vazio, paramos. Caso contrário, substituímos k por $k+1$ e repetimos o passo 1.

Este é um problema auxiliar. A cada iteração um novo ponto é computado no processo de otimização de $g_j(x)$, o qual satisfaz uma ou mais restrições previamente violadas. Se após m iterações o conjunto $\{x: g_i(x) \leq 0\}$ não / tornar-se vazio não existe tal ponto e, conseqüentemente, o problema é considerado inviável.

Exemplo: Usar o procedimento acima para determinar um ponto, / satisfazendo $g_1(x_1, x_2) = -x_1 + x_2 + 2 > 0$ e $g_2(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2 > 0$, partindo do ponto $(3,0)$. Verificamos que $g_1(3,0) = -1 < 0$ e $g_2(3,0) = 9 >> 0$.

Então formulamos o problema:

Minimizar $g_1(x)$

Sujeita a $g_2(x) > 0$.

Aplicando o método da função barreira, temos:

$$P(x, r) = -x_1 + x_2 + 2 - r \cdot \ln(x_1^2 + x_2).$$

Resolvendo para $r_1 = 1$,

$$P(x, r_1) = -x_1 + x_2 + 2 - \ln(x_1^2 + x_2).$$

Aplicando a condição necessária de 1ª ordem, obtemos:

$$\partial P / \partial x_1 = -1 - 2x_1 / (x_1^2 + x_2) = 0 \quad \text{e} \quad \partial P / \partial x_2 = 1 - 1 / (x_1^2 + x_2) = 0. \text{ Daí,}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -x_1^2 - x_2 - 2x_1 = 0, \text{ que implica } x_1 = -1/2 \text{ e } x_2 = 3/4. \\ x_1^2 + x_2 - 1 = 0 \end{array} \right.$$

Logo obtemos $x_1 = (-1/2, 3/4)$ e verificamos que $g_1(x_1) = 1/2 + 3/4 + 2 > 0$, / ($g_2(x_1) = 1/4 + 3/4 > 0$, permanece não violada), então $g_i(x_1) > 0$ para $i=1, 2$, e, portanto um ponto inicial interior é $x_1 = (-1/2, 3/4)$.

3.3 - Determinação do Valor Inicial de r.

Na seção 2.4 foram resolvidas maneiras para a escolha de pesos para cada termo da função sem restrições. Aqui vamos supor que o mesmo valor / de r seja aplicado para todas as restrições. Este estudo foi proposto inicialmente por Fiacco e McCormick [11] e avaliado, experimentalmente, por Himmelblau [12]. Procuramos detalhar este estudo com o objetivo de facilitar aplicações / práticas.

O valor inicial de r, r_1 , e o fator $c > 1$ que reduz o valor de r após cada minimização (ver seção 3.4) de $P(x, r) = f(x) - r \cdot \sum_{i=1}^m \ln g_i(x)$, aqui considerada, são parâmetros que devem ser dados numericamente. Teoricamente, a convergência está assegurada para $r_1 > 0$ e $c > 1$. A questão principal é saber/ quais valores desses parâmetros reduzem o total de cálculos computacionais/ para se obter a solução do problema.

Nesta seção várias escolhas de r_1 são discutidas. A primeira a ser olhada é a seleção de $r_1 = \epsilon > 0$, onde ϵ é pequeno. Isto, quase sempre, mostra que o ponto de mínimo $P(x, r)$ está próximo do ponto de mínimo com restrições x^* da função objetivo $f(x)$, isto é, a solução do problema original pode ser aproximada em apenas uma minimização da função $P(x, r)$.

Entretanto, experiências computacionais mostram que os valores de r_1 são melhores quando obtidos a partir da condição necessária para a existência de pontos críticos, ou seja r_1 é uma função do ponto inicial x_0 . Formulamos agora um critério baseados nessas considerações.

Critério 1. - Desde que a condição necessária para que $P(x, r)$ seja minimizada é anularem-se as derivadas parciais de 1ª ordem, uma escolha natural de r_1 será dada pelo r que minimiza a norma do gradiente de $P(x, r)$ / para x_0 , isto é,

$$\min_{r_1} \left\| \nabla P(x_0, r) \right\|^2 = \min_{r_1} \left\| \nabla f(x_0) - r_1 \cdot \sum_{i=1}^m \frac{\nabla g_i(x_0)}{g_i(x_0)} \right\|^2.$$

Para determinar r_1 faremos, convenientemente, $M(x_0) = \sum_{i=1}^m \ln g_i(x_0)$. Então

$$\min_{r_1} \left\| \nabla P(x_0, r_1) \right\|^2 = \min_{r_1} \left\| \nabla f(x_0) - r_1 \nabla M(x_0) \right\|^2.$$

$$\text{Como, } \left\| \nabla f(x_0) - r_1 \nabla M(x_0) \right\|^2 = \langle \nabla f(x_0) - r_1 \nabla M(x_0), \nabla f(x_0) - r_1 \nabla M(x_0) \rangle,$$

Derivando em relação a r_1 e igualando a zero, obtemos:

$$2 \cdot \langle -\nabla M(x_0), \nabla f(x_0) - r_1 \nabla M(x_0) \rangle = 0, \text{ que implica}$$

$$2[-\nabla f(x_0)^T \nabla M(x_0) + r_1 \nabla M(x_0)^T \nabla M(x_0)] = 0,$$

$$\text{ou, } r_1 = \frac{\nabla f(x_0)^T \nabla M(x_0)}{\|\nabla M(x_0)\|^2} . \quad (3.3.1)$$

Critério 2. - Himmelblau [12] sugere a escolha inicial de $r_1 = 1$, o que é muito prático.

Redução de r. - Em relação a como reduzir r após cada minimização da função $P(x, r)$, fazemos duas observações:

- (1) é vantajosa a mudança de r por um fator constante, e
- (2) o esforço necessário para se obter uma solução ótima do problema (A) praticamente independe da escolha do fator redutor de r.

O primeiro ponto aparece a partir das fórmulas de extrapolação/ de 1ª ordem (ver 3.4). Daí, nossa escolha de r para a iteração k+1 é simplesmente dada por $r_{k+1} = r_k/c$, onde $c > 1$.

"O fator usado para reduzir r após cada minimização não tão importante quanto o método para selecionar o valor inicial de r_1 " (1)

3.4 - Aceleração por Extrapolação.

Demonstramos na seção 2.2 que existe uma trajetória local única, continuamente diferenciável, que produz para o valor de r um valor de x para o qual $P(x, r)$ é minimizada. Isto sugere a possibilidade de estimarmos valores / que tendam para a solução do problema, além da estimativa para x^* que minimiza P quando $r \rightarrow 0$.

Fiacco-McCormick propuseram este estudo em [10].

Uma ferramenta computacional muito poderosa está disponível / quando as condições que garantem a existência de $D^1[x(0)]$ são satisfeitas como desenvolvidas na seção 2.2. Na discussão seguinte aquelas condições são supostas satisfeitas.

Suponhamos que a função P seja minimizada univocamente por $r_1 > r_2 > \dots > r_p > 0$ para os correspondentes x_1, \dots, x_p . Um polinômio em r que produz x_1, \dots, x_p é dado por um conjunto de equações da forma /

$$x_k = \sum_{j=0}^{p-1} a_j (r_k)^j, \quad k = 1, \dots, p, \quad (3.4.1)$$

onde os vetores a_j são vetores com n componentes.

O determinante da matriz $\begin{bmatrix} r_1^0 & \dots & r_p^0 \\ \vdots & & \vdots \\ r_1^{p-1} & \dots & r_p^{p-1} \end{bmatrix}$,

(1) Fiacco McCormick - [11]

(Chamado determinante de Vandermonde), é igual a $\prod_{i < j} (r_j - r_i)$ e, desde que $r_j \neq r_i$ ($i \neq j$), R é não singular. Assim, os vetores a_j são univocamente determinados por (3.4.1). Então $\sum_{j=0}^{p-1} a_j (r_j)^j$ é uma aproximação de $x(r)$ no intervalo $[0, r_1]$ e $x(0) = x^*$ (uma solução) é aproximada por a_0 . Que esta aproximação converge para a solução e o fato que as estimativas são melhoradas com cada mínimo determinado é visto a seguir. A exata expansão em série de Taylor de $x(r_k)$ em torno de $x(0)$ é:

$$x(r_k) = \sum_{j=0}^{p-1} r_k^j \cdot \frac{D^j x(0)}{j!} + \epsilon_k, \quad k = 1, \dots, p, \quad (3.4.2)$$

onde $\epsilon_k = \frac{r_k^p}{k!} \left[\frac{d^p x_1(n_{1k})}{dr^p}, \dots, \frac{d^p x_n(n_{nk})}{dr^p} \right], 0 \leq n_{jk} \leq r_k, j = 1, \dots, n /$
(ver seção 1.3.4).

Como (3.4.1) é igual a (3.4.2) temos

$$\sum_{j=0}^{p-1} a_j r_k^j = \sum_{j=0}^{p-1} r_k^j \cdot \frac{D^j x(0)}{j!} + \epsilon_k, \quad k = 1, \dots, p, \quad \text{ou}$$

$$\begin{cases} a_0 r_1^0 + \dots + a_{p-1} r_1^{p-1} \\ \vdots \\ a_0 r_p^0 + \dots + a_{p-1} r_p^{p-1} \end{cases} = \begin{cases} r_1^0 \frac{x(0)}{0!} + \dots + r_1^{p-1} \frac{D^{p-1} x(0)}{(p-1)!} + \epsilon_1 \\ \vdots \\ r_p^0 x(0) + \dots + r_p^{p-1} \frac{D^{p-1} x(0)}{(p-1)!} + \epsilon_p \end{cases}$$

ou ainda,

$$(a_0, \dots, a_{p-1})^T \begin{bmatrix} r_1^0 & \dots & r_p^0 \\ \vdots & & \vdots \\ r_1^{p-1} & \dots & r_p^{p-1} \end{bmatrix} = (x(0), \dots, \frac{D^{p-1} x(0)}{(p-1)!})^T \begin{bmatrix} r_1^0 & \dots & r_p^0 \\ \vdots & & \vdots \\ r_1^{p-1} & \dots & r_p^{p-1} \end{bmatrix} + (\epsilon_1, \dots, \epsilon_p).$$

Fazendo $A = (a_0, a_1, \dots, a_{p-1})^T$,

$$R = \begin{bmatrix} r_1^0 & \dots & r_p^0 \\ \vdots & & \vdots \\ r_1^{p-1} & \dots & r_p^{p-1} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathcal{E} = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_p), \quad \text{temos}$$

$$AR = (x(0), \dots, \frac{D^{p-1} x(0)}{(p-1)!})^T \cdot R + \mathcal{E}, \quad \text{que implica}$$

$$[A - (x(0), \dots, \frac{D^{p-1} x(0)}{(p-1)!})^T] \cdot R = \mathcal{E} \quad \text{e}$$

$$A - [x(0), \dots, \frac{D^{p-1} x(0)}{(p-1)!}]^T = \mathcal{E} R^{-1} \quad (R \text{ é inversível})$$

e, finalmente

$$[a_0 - x(0), a_1 - \frac{D^1 x(0)}{1!}, \dots, \frac{D^{p-1} x(0)}{(p-1)!}]^T = [\epsilon_1, \dots, \epsilon_p] \begin{bmatrix} r_1^0, \dots, r_1^0 \\ \vdots \\ r_1^{p-1}, \dots, r_p^{p-1} \end{bmatrix}.$$

Portanto, $a_0 - x(0) = \epsilon_1 r_1^0 + \dots + \epsilon_p r_p^{p-1}$. Claramente, então, a diferença entre a_0 e $x(0)$ é da ordem de r_1^p . Assim, quando $r_1 \rightarrow 0$, $a_0 \rightarrow x(0)$. Mais importante, as estimativas usando p mínimos são melhores que as que usam $p-1$ mínimos. Quando $r_{k+1} = r_k/c$ ($c > 1$), uma estrutura particular dessas equações prepara o desenvolvimento de um esquema iterativo simples baseada no uso de um número / dado de termos do polinômio. Observamos que a_j não precisa ser calculado para / se obter estas estimativas.

Vamos supor que a trajetória $x(r)$ seja aproximadamente linear / em $r^{1/2}$ quando $r \rightarrow 0$; além disso, que determinamos k mínimos ($k=1, \dots, p$) de $P(x, r)$, então

$$x(r_k) \approx x(0) + a_1 r_k^{1/2}, \tag{3.4.3}$$

e

$$x(r_k/c) \approx x(0) + a_1 (r_k/c)^{1/2}, \tag{3.4.4}$$

onde $x(0)$ é o valor de $x(r_k)$ quando $r_k \rightarrow 0$. A estimativa da solução do problema de programação não linear é dada resolvendo-se as equações (3.4.3) e / (3.4.4) para $x(0)$; Assim,

$$\begin{cases} x(0) \approx x(r_k) - a_1 r_k^{1/2} & \text{ou, } x(0) \approx x(r_k) - c^{1/2} x(r_k/c) + c^{1/2} x(0); \\ a_1 r_k^{1/2} \approx c^{1/2} x(r_k/c) - c^{1/2} x(0). \end{cases}$$

Logo,
$$x(0) \approx \frac{c^{1/2} x(r_k/c) - x(r_k)}{c^{1/2} - 1}. \tag{3.4.5}$$

Observando este resultado, temos a confirmação de que os a_j não precisam ser / determinados, como afirmamos acima. Além disso, também importante, que a partir de $x(r_k)$ podemos fazer uma estimativa do mínimo seguinte $P(x, r)$, após reduzirmos r_k ($r_{k+1} = r_k/c$, $c > 1$), utilizando as equações (3.4.3) e (3.4.4), temos:

$$x(r_k) \approx x(0) + a_1 (r_k)^{1/2}$$

$$x(r_k/c) \approx x(0) + a_1 (r_k/c)^{1/2}, \text{ e para o novo mínimo}$$

$$x(r_k/c^2) \approx x(0) + a_1 (r_k/c^2)^{1/2}.$$

Dai's temos, subtraindo a 2ª da 3ª equação,

$$x(r_k/c^2) - x(r_k/c) \approx a_1 [(r_k/c^2)^{1/2} - (r_k/c)^{1/2}], \text{ que implica}$$

$$x(r_k/c^2) \approx x(r_k/c) + a_1 \left[\frac{(r_k)^{1/2} - c^{1/2}(r_k)^{1/2}}{c} \right].$$

Como a_1 não foi calculado explicitamente podemos usar as equações (3.4.3) e / (3.4.4) para eliminá-lo da expressão acima, subtraindo (3.4.3) de (3.4.4) obtemos

$$x(r_k/c) - x(r_k) \approx a_1 [(r_k/c)^{1/2} - r_k^{1/2}], \text{ que implica}$$

$$a_1 \approx \frac{x(r_k/c) - x(r_k)}{(r_k/c)^{1/2} - r_k^{1/2}} = \frac{c^{1/2} [x(r_k/c) - x(r_k)]}{(1 - c^{1/2}) r_k^{1/2}}.$$

Substituindo este valor de a_1 na equação acima, encontramos:

$$x(r_k/c^2) \approx x(r_k/c) + \frac{c^{1/2} [x(r_k/c) - x(r_k)]}{(1 - c^{1/2}) r_k^{1/2}} \cdot \frac{(1 - c^{1/2}) r_k^{1/2}}{c}$$

ou,

$$x(r_k/c^2) \approx x(r_k/c) + 1/c^{1/2} [x(r_k/c) - x(r_k)]. \quad (3.4.6)$$

É claro que após a estimativa do novo mínimo de $P(x, r)$ ser realizada, podemos fazer uma estimativa nova do ótimo, $x(0)$, utilizando (3.4.5) para $x(r_k/c)$ e $x(r_k/c^2)$.

3.5 - Procedimentos Computacionais.

Um teste vital para a justificação da presente organização teórica para resolver os problemas propostos neste trabalho é a viabilidade de / sua implementação computacional. Nesta seção as questões computacionais implícitas no desenvolvimento teórico são discutidas com detalhes.

O algoritmo que será desenvolvido visa minimizações sequências sem restrições para pontos interiores, como definido no capítulo II, seção 2.1. Para defini-lo vamos supor que a função barreira logarítmica seja aplicada para todas as restrições. O problema a ser resolvido é:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } f(x) \\ &\text{Sujeita a} \\ &g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (A) \quad (3.5.1)$$

A função sem restrições, usando o método desenvolvido neste trabalho, tem a forma

$$P(x, r) = f(x) - r_k \cdot \sum_{i=1}^m \ln g_i(x). \quad (3.5.2)$$

Muitos dos resultados computacionais são gerais e podem ser aplicados para minimizar outras funções sem restrições.

Os passos a seguir, são passos gerais do algoritmo computacional.

Passo 1. - Obter um ponto $x_0 \in D^0 = \{x: g_i(x) > 0, i=1, \dots, m\}$. /
 Se tal ponto não estiver imediatamente disponível podemos, como na seção 3.2, /
 determiná-lo através da utilização do próprio método das funções barreiras. /

Passo 2. - Determinar r_1 , o valor inicial de r . Para a função /
 $P(x, r)$ (3.5.2), vamos supor que um valor de r funciona como peso para todas //
 as restrições. Como discutido anteriormente na seção 2.4, há vários critérios //
 para a escolha de pesos diferentes para cada restrição. A discussão, quando //
 exatamente, um valor de r for usado, está contida na seção 3.3, e também, uma //
 proposta para a redução de r após cada iteração.

Passo 3. - Determinar o mínimo sem restrições de $P(x, r_k)$ para /
 o corrente valor de r_k . Este passo constitui-se no maior trabalho exigido para
 algoritmos sem restrições. Na seção 3.1 desenvolvemos métodos para minimizações
 sem restrições, com os quais faremos nossa proposta:

(3.1) A direção, na qual $P(x, r_k)$ decresce, é obtida a partir /
 das direções propostas: - (a) pelo método do decrescimento máximo (oposta à do
 gradiente de $P(x, r_k)$); - (b) pelo método de Newton (oposta à do gradiente de
 $P(x, r_k)$ multiplicado pela inversa da matriz Hessiana de $P(x, r_k)$); - (c) pelo
 método de Davidon-Fletcher-Powell (a direção do gradiente é desviada multipli-
 cando-a por $-D_k$, onde D_k é uma matriz simétrica, definida positiva, que aproxi-
 ma a inversa da matriz Hessiana). Métodos que foram tratados na seção 3.1. Mais
 explicitamente,

$$(a) s_k = - \frac{\nabla P(x, r_k)}{\|\nabla P(x, r_k)\|} \quad \text{ou, } s_k = -\nabla P(x, r_k), \quad (3.5.3)$$

$$(b) s_k = -[\nabla^2 P(x, r_k)]^{-1} \nabla P(x, r_k), \quad (3.5.4)$$

$$(c) s_k = -D_k \nabla P(x, r_k). \quad (3.5.5)$$

(3.2) Após uma das direções ser determinada, nosso método empre-
 ga o método de Fibonacci (busca unidimensional) estudado na seção 3.1. O obje-
 tivo de (3.2) é com a escolha e cálculo do escalar λ , onde

$$x_{k+1} = x_k + \lambda s_k. \quad (3.5.6)$$

O método determinará λ tal que

$$P(x_{k+1}, r_k) = \min_{\lambda \geq 0} P(x_k + \lambda s_k, r_k), (x_k + \lambda s_k \in D^0).$$

Este é um problema de otimização unidimensional. Quando P for estritamente con-
 vexa um mínimo local em λ será um mínimo global. Desde que a função P não cres-
 ça indefinidamente quando a fronteira da região viável é aproximada, as minimi-
 zações aqui permanecem sem restrições e necessariamente confinadas ao interior
 da região viável.

Estudamos na seção 3.1 como avaliar λ através de um procedimento de busca unidimensional que utiliza as propriedades da sequência de Fibonacci. Apresentamos aqui uma adaptação sequencial de passos baseados naquele estudo.

Seja $\bar{\lambda}$ o ponto que determina um mínimo de $P(x_{k+1}, r_k)$ sobre um intervalo que contém λ , então:

Passo a. - Primeiro é determinada uma cota superior para $\bar{\lambda}$ (para a 1ª cota inferior, fazemos $a_1 = 0$); b_1 é determinado avaliando-se a função P para sucessivos pontos onde os valores de λ estão no limite do raio de Fibonacci, $1,618 \approx (1 + \sqrt{5})/2$ (ver seção 3.1); isto é,

$b_1 = \sum_{i=1}^{\bar{i}} (1,618)^i$, onde \bar{i} é um inteiro, pequeno e não negativo, tal que

$$P[x_k + \sum_{i=0}^{\bar{i}} (1,618)^i s_k] \geq P(x_k, r_k),$$

por exemplo \bar{i} sendo o menor inteiro positivo que satisfaça a desigualdade acima.

Passo b. - O intervalo que contém $\bar{\lambda}$ é reduzido computando-se dois valores λ_1 e μ_1 que pertencem ao intervalo,

$$\lambda_1 = a_1 + 0,382(b_1 - a_1)$$

e,

$$\mu_1 = a_1 + 0,618(b_1 - a_1).$$

Passo c. - Os valores de P dos pontos (interiores) correspondentes a λ_1 e μ_1 são comparados.

c.1 - Se $P(x_k + \lambda_1 s_k, r_k) < P(x_k + \mu_1 s_k, r_k)$, então $a_1 \leq \bar{\lambda} \leq \mu_1$.

Em razão da propriedade dos números de Fibonacci $0,328/0,618 = 0,618$, fazemos $b_2 = \mu_1$, $\mu_2 = \lambda_1$ e $a_2 = a_1$ e recalculamos λ_2 como $\lambda_2 = a_2 + 0,382(b_2 - a_2)$ e repetimos o passo c.

c.2 - Se $P(x_k + \lambda_1 s_k, r_k) > P(x_k + \mu_1 s_k, r_k)$, então fazemos $a_2 = \lambda_1$, $\lambda_2 = \mu_1$ e $b_2 = b_1$, computamos $\mu_2 = a_2 + 0,618(b_2 - a_2)$ e repetimos o passo c.

c.3 - Se $P(x_k + \lambda_1 s_k, r_k) = P(x_k + \mu_1 s_k, r_k)$, fazemos $b_2 = \lambda_1$, $a_2 = \mu_1$ e retornamos ao passo b.

Passo d. - Quando $b_n - a_n$ for aceitavelmente pequeno, $\bar{\lambda}$ será aproximado por

$$\bar{\lambda} = (b_n + a_n)/2, \text{ e } x_{k+1} = x_k + \bar{\lambda} s_k.$$

Modificações desse procedimento são feitas no passo (a) quando o ponto testado não for do interior da região viável. Neste caso, o valor de P a ser considerado terá valor infinito e o correspondente λ será um limite superior de $\bar{\lambda}$. Também para o passo (b) tiramos vantagem computacional quando um ou mais pontos interiores forem computados no passo (a). (Para funções não convexas, se o valor de P para o ponto interior da esquerda for muito grande então o ponto final da esquerda torna-se imediatamente o ponto final da direita e o processo é retomado no passo (b)).

Na introdução da subseção 3.1.1 foram feitos comentários a respeito de por que não minimizar $P(x_k + \lambda s_k)$ fazendo a sua derivada igual a zero.

Passo 4. - Consideramos aqui a aceleração por extrapolação desenvolvida na seção 3.4. A não ser que algum processo que acelere a convergência/ seja aplicado, o método das funções barreiras converge para um extremo com restrições, mas muito lentamente; isto é, próximo a fronteira o processo é lento. Daí vários valores sucessivos de r_k , como propostos na seção 3.4, são usados/ para a obtenção de mínimos sucessivos de $P(x, r_k)$ e sucessivos x_k correspondentes. Para aplicação deste procedimento utilizar as fórmulas desenvolvidas na seção 3.4, para $k > 1$, ou seja, fazendo $r_{k+1} = r_k/c$ ($c > 1$),

$x(r_k) \approx x(0) + a_1 (r_k)^{1/2}$, $x(r_k/c) \approx x(0) + a_1 (r_k/c)^{1/2}$, onde o valor $x(0)$ é o valor de $x(r_k)$, quando $r_k \rightarrow 0$. Para uma estimativa da solução do problema, temos

$$x(0) \approx \frac{c^{1/2} x(r_k/c) - x(r_k)}{c^{1/2} - 1}.$$

Passo 5. - Aqui trataremos do critério de parada do método. Se um dos três métodos propostos na seção 3.1, e sugeridos para uso no passo (3), for utilizado, então as computações estarão terminadas se $\|\nabla P(x, r_k)\| < \epsilon$, para $\epsilon > 0$, ϵ suficientemente pequeno.

Se a estimativa $x(0)$ dada no passo (4) satisfizer este critério de parada, então $x(0)$ minimizará também, aproximadamente, o problema original, com $\epsilon > 0$, aceitável, já que $x(0)$ é o valor de $x(r_k)$ quando $r_k \rightarrow 0$. Se não, ir para o passo seis.

Passo 6. - Selecionamos $r_{k+2} = r_k/c^2$, $c > 1$. Fazemos uma estimativa do ponto de mínimo de $x(r_{k+2})$ através de (3.4.6),

$$x(r_k/c^2) \approx x(r_k/c) + 1/c^{1/2} [x(r_k/c) - x(r_k)].$$

A partir desta estimativa podemos fazer uma nova estimativa de $x(0)$ usando $x(r_k/c)$ e $x(r_k/c^2)$ como no passo 4.

Se a estimativa satisfizer o critério de parada (passo 5), o problema está resolvido. Caso contrário, continuar o processo a partir do passo 3.

Sumário do Algoritmo Computacional.

O algoritmo resolve o problema:

Minimizar $f(x)$

Sujeita a $g_i(x) \geq 0, i = 1, \dots, m,$
 $x \in R^n.$

Aplicando uma das funções sem restrições propostas neste trabalho ao problema, por exemplo a função barreira logarítmica, temos

$$P(x, r_k) = f(x) - r_k \cdot \sum_{i=1}^m \ln g_i(x).$$

Passo 1. - Obter um ponto inicial $x_0 \in D^0 = \{x: g_i(x) > 0, i=1, \dots, m\}$. Se tal ponto não estiver disponível pode-se obtê-lo aplicando-se o próprio método das funções barreiras (ver seção 3.2);

Passo 2. - Determinar r_1 , o valor inicial de r (ver seção 3.3.);

Passo 3. - Determinar o mínimo sem restrições de $P(x, r_k)$, para o corrente valor de r_k , usando um dos métodos propostos na seção 3.1. Reduzir o valor inicial de r_1 dividindo-o por uma constante $c > 1$. Determinar o mínimo local sem restrições de $P(x, r_k)$ para $r_{k+1} = r_k/c$;

Passo 4. - Fazer uma estimativa do ótimo usando a fórmula de extrapolação

$$x(0) = \frac{c^{1/2} x(r_k/c) - x(r_k)}{c^{1/2} - 1} \quad (\text{ver seção 3.4})$$

Passo 5. - Seja $\epsilon > 0$, ϵ aceitavelmente pequeno. Se $\|VP(x, r_k)\| < \epsilon$, para o ótimo estimado acima, parar; caso contrário ir para o passo 6.

Passo 6. - Selecionar $r_{k+2} = r_k/c^2$. Fazer uma estimativa do ponto de mínimo $x(r_{k+2})$ através da fórmula de extrapolação

$$x(r_k/c^2) = x(r_k/c) + 1/c^{1/2} [x(r_k/c) - x(r_k)], \quad (\text{ver seção 3.4}).$$

Fazer uma nova estimativa do ótimo, $x(0)$, como no passo 4. Se esta estimativa/satisfizer $\|VP(x, r_k)\| < \epsilon$, parar; caso contrário retornar ao passo 3.

BIBLIOGRAFIA

- [01] - LIMA, Elon L., Curso de Análise - Vol. 2. CNPQ-Projeto Euclides Brasília -
lia, 1981
- [02] - LIMA, Elon L., Análise no Espaço \mathbb{R}^n . Edit. Univ. Brasília. Brasília, 1970.
- [03] - RUDIN, Walter, Princípios de Análise Matemática. Ao Livro Técnico S/A e
Edit. Univ. Brasília. Brasília, 1971.
- [04] - FIACCO & McCORMICK, Anthony and Garth P., Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Technics. John Willey and Sons,/
Inc., McLean. Virginia, 1968.
- [05] - BAZARAA & SHETTY, Mokhtar S. and C. M., Nonlinear Programming, Theory and Algorithms- John Willey and Sons. New York, 1979.
- [06] - AVRIEL, Mardacai, Nonlinear Programming: Analysis and Methods. Prentice-Hall, Inc. Englewood Clifs. New Jersey, 1976.
- [07] - HOFMANN & KUNZE, Keneth and Ray, Álgebra Linear. Editora da USP, Edit.-
Polígono, São Paulo, 1971.
- [08] - VOROBIOV, M. N., Números de Fibonacci. Editorial MIR, Moscou, 1974.
- [09] - FIACCO, A. V., Comments on The Paper of C. W. Carroll. Operations Res.,
9:184-185, 1961.
- [10] - FIACCO & McCORMICK, A. V. and G. P., Extensions of Sumt for Nonlinear / Programming: Equality Constraints and Extrapolation. Management /
Science, Vol. 12, nº 11, pp. 816 - 828, 1966.
- [11] - FIACCO & McCORMICK, A. V. and G.P., Computational Algorithm for The Sequential Unconstrained Minimization Technique for Nonlinear Programming. Management Science, Vol. 10 nº 4, pp. 601-617, 1964.
- [12] - HIMMELBLAU, D. M., Applied Nonlinear Programming. McGraw-Hill Book Com -
pany, New York, 1972.
- [13] - NOVAES, Antônio G., Métodos de Otimização - Aplicações aos Transportes.
São Paulo, 1978.