Otimização

por
Mílton Procópio de Borba

1. Otimização sem restrições

Seja f: D → R, convexa, isto é, $f[\lambda.p + (1-\lambda).q] \geq \lambda.f(p) + (1-\lambda)f(q)$, $\forall$ p e q em D e $\forall \lambda \in [0, 1]$. Maximizar f, significa encontrar o maior valor da função no seu domínio D, isto é, achar o ponto ótimo $m \in D$ e f(m) tal que $f(m) \geq f(x)$, $\forall x \in D$. Minimizar f é equivalente a maximizar (-f).

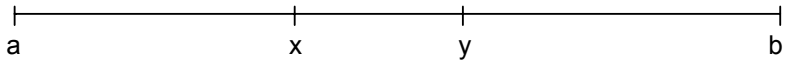
1.1. Função Real

Consideraremos, inicialmente, o caso em que D é um intervalo real [a , b].

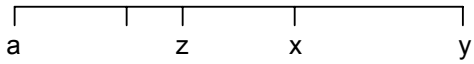
1.1.a. Método de Newton

Lembrando que o máximo ocorre no ponto m, onde f'(m)=0, buscamos este ponto m usando o método iterativo de Newton para encontrar a raiz de f'(x). Fazemos $X_0=(a+b)/2$, por exemplo, e iterativamente, $X_{k+1}= X_k - f'(X_k) / f''(X_k)$, convergirá para esta raiz.
Lembrando que $f'(X_k) \approx [f(X_k+h)-f(X_k)]/h$ e que $f''(X_k) \approx [f(X_k+h) -2f(X_k)+ f(X_k-h)]/h^2$, podemos evitar de calcular as derivadas de f, e fazer: $X_{k+1}= X_k - h.[f(X_k+h) -f(X_k)]/[f(X_k+h) -2f(X_k)+ f(X_k-h)]$.

Na prática, nos satisfazemos com um novo subintervalo $[\alpha , \beta] \subset [a , b]$, tal que $m \in [\alpha , \beta]$.
Começa-se a dividir o intervalo [a , b] em três subintervalos, pela colocação de dois pontos x e y eqüidistantes dos extremos, isto é x-a = b-y.



Se f(x) > f(y) então se abandona o subintervalo [y , b] (caso contrário, [a , x]).
O novo intervalo [a , y] será novamente subdividido pelos pontos z e x :



Se f(z) > f(x) então se abandona o subintervalo [x , y] (caso contrário, [a , z]).
Sucessivamente, obteremos intervalos cada vez menores, contendo o ponto "ótimo"
A posição destes pontos (x, y, z, ..) de subdivisões deve ser adequadamente escolhida, segundo um dos critérios abaixo.

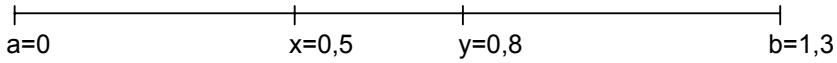
1.1.b. Busca de Fibonacci

Consiste em usar a seqüência {1,1,2,3,5,8,13,… } de Fibonacci, definida por F(0) = 1, F(1)=1 e F(k+2) = F(k) + F(k+1), para todo k>1.

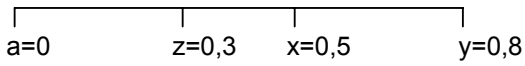
Neste caso, deve-se definir antecipadamente quantas subdivisões N serão feitas, montar a seqüência de Fibonacci até F(N) e começar a primeira subdivisão com (b-x)/(b-a)=F(N-1)/F(N). A segunda subdivisão será com (y-z)/(y-a) = F(N-2)/F(N-1). Continuamos até usarmos a razão F(2)/F(3) = 2/3 para obtermos três subintervalos de mesmo tamanho (1/F(N) menor) e abandonar um dos dois extremos.

Para decidir qual dos dois intervalos restantes deve ficar, podemos utilizar um ponto próximo (20% do intervalo) do meio, como última subdivisão. Isto é equivalente a redefinir, depois de definida a seqüência de Fibonacci, F(1) = 1,2. E só parar quando usar a relação F(2)/F(1).

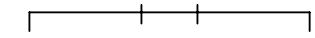
Como exemplo, vamos supor que [a,b] = [0, 1,3] e queremos um intervalo final de comprimento não superior a 0,1. Fazemos N=6, F(6) = 13 para obter:



Se f(x) > f(y) o novo intervalo [a , y] = [0, 0,8] será assim subdividido:



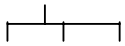
Se f(z) > f(x), então teremos



Se f(z) > f(t), então teremos

v=0,38

Se f(u) > f(z), então teremos



Restando [α , β] = [z , u] = [0,3 , 0,38] (se f(v) > f(u), caso contrário, [0,38 , 0,5]).

1.1.c. Busca pela Seção Áurea

Neste caso, a relação (b-x)/(b-a) = (y-z)/(y-a) = k é constante, até o final das subdivisões.
Aqui não é necessário antecipar o número de etapas

Usando que (y-z) = (x-a) e (b-x) = (y-a), encontramos que k = [-1+$\sqrt{5}$]/2 ≈ 0,618

e 1/k = = [1+$\sqrt{5}$]/2 ≈ 1,618

1.2. Função de mais variáveis

Neste caso, o Domínio D é um conjunto convexo do R^n, isto é, dados dois pontos p e q em D, teremos que o ponto [λ.p + (1-λ) q] pertencerá a D, para qualquer λ entre 0 e 1.

Partindo-se de um ponto P_0 (x_1, x_2, …,x_n) em D (estimativa inicial), caminharemos na direção do Gradiente de f, para encontrar outro ponto P_1 que otimiza f:

Como Grad(f) = [g_1, g_2, …,g_n], devemos encontrar t $\in$ [a, b] tal que f(x_1+t.g_1, x_2+t.g_2, …,x_n+t.g_n) seja "ótimo". Isto recai no problema de otimizar f de uma variável t real, como em 1.1.

Este ponto P_1 encontrado será o novo ponto de partida. Novamente se calcula o Grad(f) e acha-se o novo t tal que f(P_1) + t. Grad(f) seja ótimo. O processo pára quando Grad(f) ≈ 0.

Obs.: no caso em que f for quadrática (do segundo grau), o ponto ótimo pode ser determinado pela solução do sistema de equações lineares que se forma ao igualar a zero todas as derivadas parciais de f.

2. Otimização com restrições

2.1. Multiplicadores de Lagrange

Seja o problema de otimizar f: D → R, sujeito a r_k(x_1, x_2, …,x_n)=0 para k = 1,2,…, Q.
Este problema é equivalente a otimizar a função definida por
F(x_1, x_2, …,x_n, λ_1, λ_2,…, λ_Q) = f(x_1, x_2, …,x_n) + λ_1.r_1(x_1, x_2, …,x_n) + … + λ_Q.r_2(x_1, x_2, …,x_n).
Assim recaímos no caso 1.2, com mais Q variáveis.

2.2. Exemplo

Maximizar f(x,y,z) = x -yz/2 -xy/2 +y/2, sujeito a x^2 + y^2 + z^2 =1.
Eqüivale a maximizar F(x,y,z,λ) = x -yz/2 -xy/2 +y/2 +λ.(x^2 + y^2 + z^2 -1).

2.3. Restrição de domínio

Seja o problema de otimizar f: D → R, sujeito a $d_k(x_1, x_2, \ldots, x_n)>0$ para k = 1,2,…, Q.
Se o novo subdomínio de D delimitado pelas d_k ainda constituem um conjunto convexo, este problema é equivalente a otimizar a função definida por
$F(x_1, x_2, \ldots, x_n, R) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) + R.[1/d_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) + \ldots + 1/d_Q(x_1, x_2, \ldots, x_n)]$, com R>0 cada vez menor. Este termo introduzido é chamado de função de repulsão da fronteira.
Assim recaímos numa seqüência de casos 1.2, com mais uma variável (R).

2. 4. Exemplo

Maximizar $f(x,y) = x.y^{1/2}$, sujeito a $2x + y \leq 5$, $x \geq 0$ e $y \geq 0$.
Equivale a maximizar F(x,y,R) = x.y1/2 + R.[1/(5-2x -y) + 1/ x + 1/y] com $R \geq 0$, cada vez menor.

3. Máximos e mínimos algebricamente

3.1. Pontos críticos

Como nas funções de uma variável, os extremos (máximos e mínimos) ocorrem numa(s) destas situações (*pontos críticos*): Primeiras derivadas parciais nulas;
Primeiras derivadas parciais não definidas
Fronteira do domínio de definição da função.

3.2.Máximo, mínimo ou ponto de sela?

A verificação se um ponto crítico é *máximo* ou *mínimo* (ou não) envolve ou estudo do valor da função e dos sinais das primeiras derivadas nas proximidades do ponto crítico ou dos sinais das segundas derivadas no ponto.

Nas funções de duas variáveis, não temos pontos de inflexão, como em funções de uma variável. Podemos ter um *ponto de sela*, quando numa direção a função atinge um máximo num ponto e em outra direção, um mínimo no mesmo ponto.
O nome se dá pela semelhança com uma *sela* de cavalo: máximo na direção das pernas do cavaleiro (transversal ao cavalo) e mínimo na direção longitudinal (dorso) do cavalo.

3.3.Esquemas dos sinais

Nos pontos críticos, onde as primeiras derivadas se anulam e as segundas derivadas são definidas, vale a decisão pelo *Hesseano* = $det \begin{vmatrix} F_{xx} & F_{xy} \\ F_{yx} & F_{yy} \end{vmatrix}$
$< 0 \Rightarrow$ Ponto de sela
$> 0 \Rightarrow$ Máximo ($F_{xx} < 0$) ou mínimo ($F_{xx} > 0$)

Obs.: Quando *Hesseano* > 0 , o sinal de F_{xx} é o mesmo que de F_{yy} .

3.4.Exemplo

Seja a temperatura $T(x , y) = x^2 + y^2 - 2x + 5y - 10$ na parte interior do disco no plano XoY dado por $D = \{ (x , y) / x^2 + y^2 < 1 \}$, os pontos críticos são:

Primeiras derivadas parciais nulas $\Rightarrow$ $\begin{cases} \partial T/\partial x = 2x - 2 = 0 \Rightarrow \\ \partial T/\partial y = 2y + 5 = 0 \Rightarrow \end{cases}$ $\boxed{\begin{matrix} x = 1 \\ y = -5/2 \end{matrix}}$ $\Rightarrow$ *fora do domínio*

Primeiras derivadas parciais não definidas $\Rightarrow$ *não é o caso*

Fronteira do domínio de definição da função $\Rightarrow$ $x^2 + y^2 = 1 \Rightarrow$ $\begin{cases} T_1(x) = -9 - 2x - 5\sqrt{1 - x^2} \\ T_2(x) = -9 - 2x + 5\sqrt{1 - x^2} \end{cases}$

$T'_1(x) = -2 + 5x/\sqrt{1 - x^2} = 0 \Rightarrow$
$T'_2(x) = -2 - 5x/\sqrt{1 - x^2} = 0 \Rightarrow$
$\boxed{\begin{matrix} x = 2/\sqrt{29} \Rightarrow \\ x = -2/\sqrt{29} \Rightarrow \end{matrix}}$
$T_1 = -9 - \sqrt{29} \approx -14{,}4^oC \Rightarrow$ *mínima.*
$T_2 = -9 + \sqrt{29} \approx -3{,}6^oC \Rightarrow$ *máxima.*

Finalmente, nos extremos do domínio ($x = -1$ e $x = 1$) , temos $T = -7ºC$ e $11ºC \Rightarrow$ *não extremo.*

3.5.Máximos e mínimos condicionados (multiplicadores de Lagrange)

Quando procuramos os extremos de uma função $f(t, x, y)$ sujeita a uma restrição $\phi(t, x, y) = 0$, podemos fazer como no exemplo acima da temperatura na fronteira do círculo, onde $f(x,y) = T(x,y)$ e $\phi(x,y) = x^2+y^2-1$, substituído $y = \sqrt{1 - x^2}$ em $T(x,y)$ e ficamos com uma variável a menos.
O inconveniente, é que poderemos ter algumas expressões algébricas por substituir.

Outra possibilidade é analisar os extremos da função auxiliar $F(t, x, y, \lambda) = f(t, x, y) + \lambda.\phi f(t, x, y)$.
Temos uma variável a mais (e não a menos), mas sem muito "algebrismo" a fazer.

3.6.Exemplo novamente

No nosso exemplo da temperatura $T(x , y) = x^2 + y^2 - 2x + 5y - 10$ na fronteira do disco no plano XoY dado por $D = \{ (x , y) / x^2 + y^2 < 1 \}$, teremos $F(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 - 2x + 5y - 10 + \lambda.(x^2 + y^2 - 1)$

$$\left|\begin{array}{l} \partial F/\partial x = 2x - 2 + 2\lambda x = 0 \\ \partial F/\partial y = 2y + 5 + 2\lambda y = 0 \\ \partial F/\partial \lambda = x^2 + y^2 - 1 = 0 \end{array}\right| \quad \left|\begin{array}{l} x = -2/\sqrt{29}\ ;\ y = 5/\sqrt{29}\ ;\ \lambda = -1 - \sqrt{29}/2 \\ x = 2/\sqrt{29}\ ;\ y = -5/\sqrt{29}\ ;\ \lambda = -1 + \sqrt{29}/2 \end{array}\right| \quad \begin{array}{l} T_1 = -9 - \sqrt{29} \approx -14{,}4ºC \text{ (mínima)} \\ T_2 = -9 + \sqrt{29} \approx -3{,}6ºC \text{ (máxima)} \end{array}$$

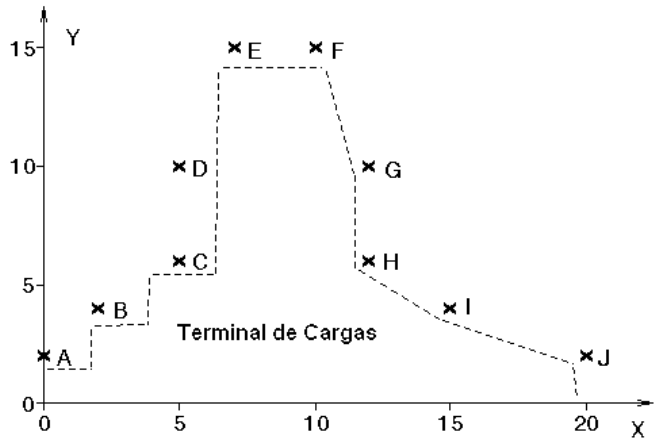
Problema envolvendo Programação Não-Linear

1. Resolva graficamente o seguinte programa não-linear:
min $Z = (x - 1)^2 + (y - 1)^2$,
sujeito a: $y - x = 1/2$,
$x + y \leq 1$,
$x \geq 0, y \geq 0$,

2. No terminal do aeroporto de Gotham City há 10 portões de chegada (A a J). Uma representação geométrica do terminal é dada abaixo, com a localização dos portões dada por:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
x	0	2	5	5	7	10	12	12	15	20
y	2	4	6	10	15	15	10	6	4	2

As bagagens que chegam nos vôos são descarregadas nestes portões e transportadas a um ponto de recolhimento por passageiros. É estimado que o número de peças de bagagem chegando por dia em cada portão (A a J) é : 3600, 2500, 1800, 2200, 1000, 4500, 5600, 1400, 1800 e 3000, respec.
Onde deve estar localizado o ponto de retirada de bagagens de modo a minimizar o movimento de bagagens ?


Y
15
10
5
0
0
5
10
15
20
X
A
B
C
D
E
F
G
H
I
J
Terminal de Cargas