

Capítulo 8

Introdução à Otimização

No contexto de otimização, os problemas são tratados usando as seguintes definições:

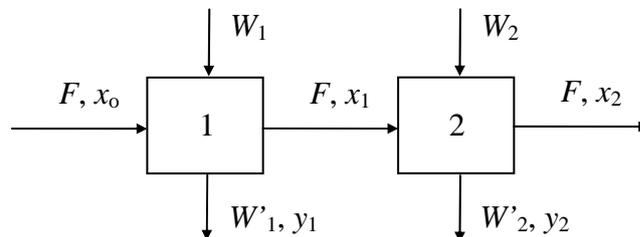
função objetivo: é a função matemática cujo máximo ou mínimo deseja-se determinar.

variáveis de decisão: são as variáveis independentes que aparecem na função objetivo. Correspondem, em número, ao excesso de variáveis em relação ao número de equações (restrições de igualdade), isto é, o **grau de liberdade** do sistema.

restrições: são os limites impostos ao sistema ou estabelecidos pelas leis naturais que governam o comportamento do sistema, a que estão sujeitas as variáveis de decisão. As restrições podem ser de igualdade (equações) ou de desigualdade (inequações).

região de busca: ou região viável, é a região do espaço definido pelas variáveis de decisão, delimitada pelas restrições, em cujo interior ou em cuja fronteira se localiza o ótimo da função objetivo.

Exemplo 8.1: No processo de extração por solvente puro, ilustrado abaixo, deseja-se encontrar a condição de operação com a maior lucratividade possível.



onde W_i e W'_i são vazões mássicas de solvente, F é a vazão mássica de água, x_i é a massa de soluto por unidade de massa de água e y_i é a massa de soluto por unidade de massa de solvente. Uma análise econômica gerou a seguinte expressão do lucro do sistema:

$$\text{lucro: } L = R - C$$

$$\text{receita: } R = P_s (W'_1 y_1 + W'_2 y_2)$$

$$\text{custo: } C = P_x (W_1 + W_2)$$

$$\text{restrição: } R > C$$

onde P_s é o preço do soluto no extrato, P_x é o preço do solvente puro. Uma análise técnica gerou as seguintes relações restritivas:

balanços de massa para o soluto:

$$F x_0 - W'_1 y_1 - F x_1 = 0$$

$$F x_1 - W'_2 y_2 - F x_2 = 0$$

balanços de massa para o solvente:

$$W_1 - W'_1 - s F = 0$$

$$W_2 + s F - W'_2 - s F = 0$$

relações de equilíbrio:

$$y_1 = m x_1$$

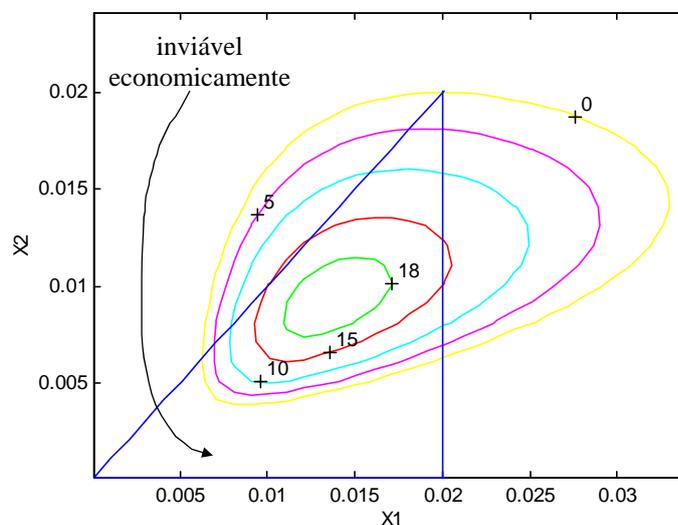
$$y_2 = m x_2$$

onde s é a solubilidade do solvente em água (massa de solvente / massa de água) e m é a constante de equilíbrio entre as fases. Portanto, dados F , x_0 , s , m , P_s e P_x , o problema de extrair o soluto da água da maneira mais lucrativa possível, consiste em maximizar L em função das condições de operação. Este exemplo possui também 6 equações (4 equações de balanço de massa e 2 equações de equilíbrio) e 8 variáveis (W_i , W'_i , y_i , x_1 e x_2), tendo, portanto, 2 variáveis de decisão, ou dois graus de liberdade. Eliminando as equações de igualdade e tomando x_1 e x_2 como variáveis de decisão, a região de busca para o problema de otimização fica delimitada pelas seguintes restrições de desigualdade:

$$x_0 > x_1 > x_2 > 0$$

$$L(x_1, x_2) = a - b x_2 - c / x_1 - d x_1 / x_2 > 0$$

onde $a = F [P_s x_0 + P_x (2 / m - s)]$, $b = F P_s$, $c = F P_x x_0 / m$ e $d = F P_x / m$. A figura abaixo ilustra a região de busca para $F = 1,0 \times 10^4$ kg-água / h, $x_0 = 0,02$ kg-soluto / kg-água, $s = 7,0 \times 10^{-4}$ kg-solvente / kg-água, $m = 4,0$ kg-água / kg-solvente, $P_s = 0,4$ R\$ / kg-soluto e $P_x = 0,01$ R\$ / kg-solvente.

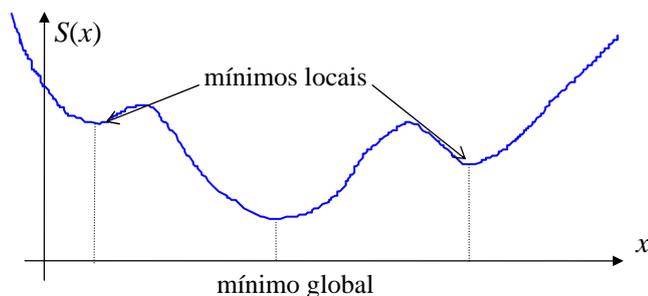


A formulação do problema de otimização para este exemplo é a seguinte:

$$\begin{aligned} \max_{x_1, x_2} \quad & L(x_1, x_2) \\ \text{sujeito a:} \quad & L(x_1, x_2) > 0 \\ & x_0 > x_1 \\ & x_1 > x_2 \\ & x_2 > 0 \end{aligned}$$

8.1 Condição de otimalidade

Seja uma função $S: X \subseteq \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}$. Diz-se que x^* é um mínimo global (ou absoluto) de S se $S(x^*) \leq S(x) \forall x \in X$, e que x^* é um mínimo local (ou relativo) de S se existe $\varepsilon > 0$, tal que $S(x^*) \leq S(x) \forall x$ tal que $\|x - x^*\| < \varepsilon$. Se as desigualdades forem estritas, isto é, $S(x^*) < S(x)$ tem-se mínimos globais e locais estritos.



Um subconjunto K de um espaço vetorial X é dito convexo se $\forall x_1, x_2 \in K$ e $0 \leq \alpha \leq 1$:

$$\alpha x_1 + (1 - \alpha) x_2 \in K$$

e apresenta as seguintes propriedades:

- $\beta K = \{x \in K / x = \beta y, y \in K\}$ é convexo para $\forall \beta \in \mathfrak{R}$;
- $K + L$ e $K \cap L$ são convexas para \forall subconjunto convexo L de X .

Seja K um convexo não vazio do \mathfrak{R}^n . A função $S: K \rightarrow \mathfrak{R}$ é dita convexa se $\forall x_1, x_2 \in K$ e $0 \leq \alpha \leq 1$:

$$S[\alpha x_1 + (1 - \alpha) x_2] \leq \alpha S(x_1) + (1 - \alpha) S(x_2)$$

A função $S(x)$ é estritamente convexa se a desigualdade for estrita. Uma função $T(x)$ é côncava se a função $S(x) = -T(x)$ for convexa.

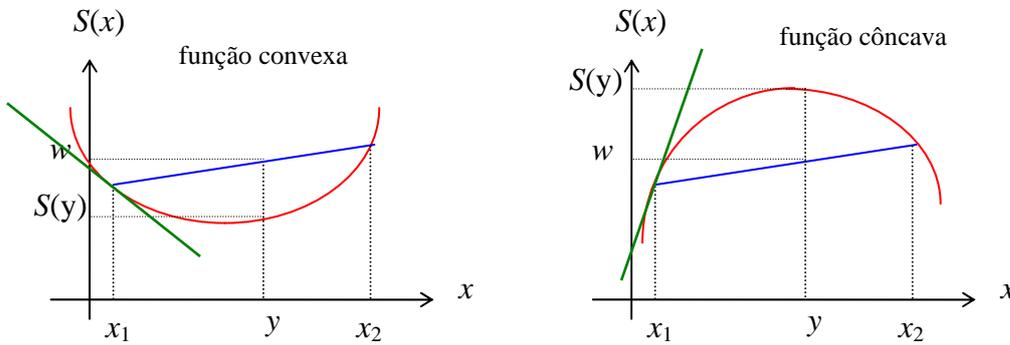
Sejam $S(x), S_i(x), i=1,2,\dots,n$, funções convexas em um convexo não vazio K do \mathfrak{R}^n , então as seguintes propriedades são apresentadas:

- $S(x)$ é contínua em qualquer ponto do interior de K ;
- as seções $K_\varepsilon = \{x \in K / S(x) \leq \varepsilon\}$ são conjuntos convexas;

- c) $S(x) = \sum_{i=1}^n S_i(x)$ é uma função convexa. Se no mínimo uma $S_i(x)$ é estritamente convexa, então $S(x)$ é estritamente convexa;
- d) $\beta S(x)$ é convexa para $\beta > 0 \in \mathfrak{R}$.
- e) se todas $S_i(x) < \infty \forall x \in K$, então $S(x) = \max\{S_1(x), S_2(x), \dots, S_n(x)\}$ é convexa.

Se $S(x)$ é convexa então um mínimo local é também global e se a função é estritamente convexa o mínimo global é único.

Para ilustrar, define-se $y = \alpha x_1 + (1 - \alpha) x_2$ e $w = \alpha S(x_1) + (1 - \alpha) S(x_2)$



Seja X um conjunto aberto não vazio do \mathfrak{R}^n e $S(x)$ uma função diferenciável em $x^0 \in X$. Se $S(x)$ é convexa em x^0 , então

$$S(x) - S(x^0) \geq \nabla^T S(x^0)(x - x^0)$$

Para uma função $S(x)$ diferenciável em X ,

$$S(x) \text{ é convexa} \Leftrightarrow S(x^2) - S(x^1) \geq \nabla^T S(x^1)(x^2 - x^1) \quad \forall x_1, x_2 \in X.$$

Seja X um conjunto aberto não vazio do \mathfrak{R}^n e $S(x)$ uma função duas vezes diferenciável em $x^0 \in X$. Se $S(x)$ é convexa em x^0 , então $\nabla^2 S(x^0)$ é positiva semidefinida. Para uma função $S(x)$ duas vezes diferenciável em X ,

$$S(x) \text{ é convexa} \Leftrightarrow \nabla^2 S(x) \text{ é positiva semidefinida} \quad \forall x \in X.$$

Seja K um conjunto convexo não vazio do \mathfrak{R}^n , $x^0 \in K$ e d um vetor não nulo tal que $(x^0 + \alpha d) \in K$ para um $\alpha > 0$ suficientemente pequeno. Então, a derivada direcional de $S(x)$ no ponto x^0 , ao longo da direção d , denotada por $S'(x^0, d)$, é definida pelo seguinte limite (incluindo $\pm\infty$):

$$S'(x^0, d) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{S(x^0 + \alpha d) - S(x^0)}{\alpha} \approx \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} (\nabla^T S(x^0) d + \alpha d^T \nabla^2 S(x^0) d)$$

Portanto, a derivada direcional no ponto x^0 é dada por $S'(x^0, d) = \nabla^T S(x^0) d$.

8.1.1 Otimização sem restrição

No caso da otimização sem restrições, onde se deseja encontrar os pontos extremos da função objetivo:

$$\min_{x \in \mathfrak{R}^n} S(x) \quad \text{ou} \quad \max_{x \in \mathfrak{R}^n} S(x)$$

tem-se as seguintes condições de otimalidade.

- Condição necessária de primeira ordem:

Para que x^* seja um mínimo (máximo) local da função $S(x)$, diferenciável em x^* , é necessário que:

$$\nabla S(x^*) = 0$$

- Condição necessária de segunda ordem:

Para que x^* seja um mínimo (máximo) local da função $S(x)$, duas vezes diferenciável em x^* , é necessário que:

$$\nabla S(x^*) = 0 \quad \text{e que}$$

$$H(x^*) \equiv \nabla^2 S(x^*) \text{ seja positiva (negativa) semidefinida}$$

onde $H(x^*)$ é chamada de matriz Hessiana.

Observa-se que estas condições são apenas necessárias porque os termos de primeira e segunda ordem podem estar nulos, deixando ainda dúvida sobre a natureza de x^* .

- Condição suficiente:

Seja $S(x)$ duas vezes diferenciável em x^* tal que:

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

$$H(x^*) \text{ seja positiva (negativa) definida}$$

então x^* é um mínimo (máximo) local estrito de S .

Pode-se analisar a condição da matriz Hessiana, $H(x^*)$, pelas seguintes formas:

- 1) Pela sua contribuição no termo de segunda ordem da expansão em série de Taylor em torno do ponto ótimo.

$$S(x) - S(x^*) = \frac{1}{2} (x - x^*)^T H(x^*) (x - x^*) + \dots$$

- 2) Pelos sinais dos valores característicos de $H(x^*)$.

Decompondo a matriz Hessiana em seus valores e vetores característicos:

$$H(x^*) = V \Lambda V^{-1}$$

onde V é a matriz dos vetores característicos (nas colunas) e Λ é a matriz dos valores característicos (na diagonal). Definindo $z(x) = V^{-1} (x - x^*)$ e lembrando que sendo a matriz Hessiana simétrica então $V^{-1} = V^T$ (matriz ortogonal) e $(x - x^*)^T V = z^T$. Desta forma a expansão em série de Taylor pode ser escrita como:

$$S(x) - S(x^*) = \frac{1}{2} z^T \Lambda z + \dots = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \lambda_i z_i^2 + \dots$$

3) Pelos sinais dos determinantes das primeiras menores principais de $H(x^*)$ (critério de Sylvester).

A menor M_{ij} de uma matriz H é definida como a matriz obtida pela remoção da i -ésima linha e da j -ésima coluna de H . Uma *menor principal* de ordem k é uma matriz obtida pela remoção de quaisquer $n - k$ colunas e suas linhas correspondentes de uma matriz de ordem n . A *primeira menor principal* de ordem k de uma matriz H , denotada por $M_k(H)$, é obtida pela remoção das últimas $n - k$ colunas e linhas da matriz H . Observa-se que os determinantes das primeiras menores principais de ordem $1, 2, \dots, n$ da matriz Λ são, respectivamente: $\lambda_1, \lambda_1\lambda_2, \dots, \lambda_1\lambda_2\lambda_3\cdots\lambda_n$.

Na tabela a seguir apresenta-se as relações entre a matriz Hessiana e as três formas de analisar a sua condição.

$H(x^*)$	Taylor	λ	$\Delta_k = \det(M_k)$
positiva semidefinida	$x^T H x \geq 0$	≥ 0	≥ 0
positiva definida	$x^T H x > 0$	> 0	> 0
negativa semidefinida	$x^T H x \leq 0$	≤ 0	$(-1)^k \Delta_k \geq 0$
negativa definida	$x^T H x < 0$	< 0	$(-1)^k \Delta_k > 0$
não definida	$x^T H x > 0$ $x^T H x < 0$	> 0 < 0	\neq dos acima

Desta forma, pode-se afirmar que x^* é:

- ponto de mínimo local se $H(x^*)$ for positiva definida, $S(x) > S(x^*)$
- ponto de máximo local se $H(x^*)$ for negativa definida, $S(x) < S(x^*)$
- ponto de sela se $H(x^*)$ for não definida, ora $S(x) > S(x^*)$ e ora $S(x) < S(x^*)$

Nas situações onde $H(x^*)$ é semidefinida deve-se ainda investigar os termos de ordem superior da expansão em série de Taylor.

Se $S(x)$ é convexa então as condições de otimalidade simplificam-se, porque as condições de segunda ordem são equivalentes à convexidade local da função.

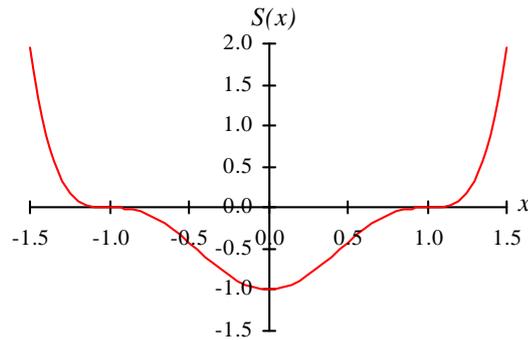
Exemplo 8.2: $S(x) = (x^2 - 1)^3$

$$\nabla S(x) = 6x(x^2 - 1)^2 \rightarrow \nabla S(x) = 0 \quad \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 1 \\ x_3 = -1 \end{cases}, \text{ satisfazem a condição necessária de primeira}$$

ordem;

$H(x) = (x^2 - 1)(30x^2 - 6) \rightarrow H(x_1) = 6; H(x_2) = 0; H(x_3) = 0$ satisfazem a condição necessária de segunda ordem; contudo somente x_1 satisfaz a condição suficiente. Neste caso (univariável) x_2 e x_3 são pontos de inflexão, como pode ser visto no gráfico abaixo, ou avaliando o valor da derivada terceira de $S(x)$ nestes pontos:

$$\nabla^3 S(x) = 24x(5x^2 - 3) \rightarrow \nabla^3 S(x_2) = 48 \neq 0 \text{ e } \nabla^3 S(x_3) = -48 \neq 0.$$



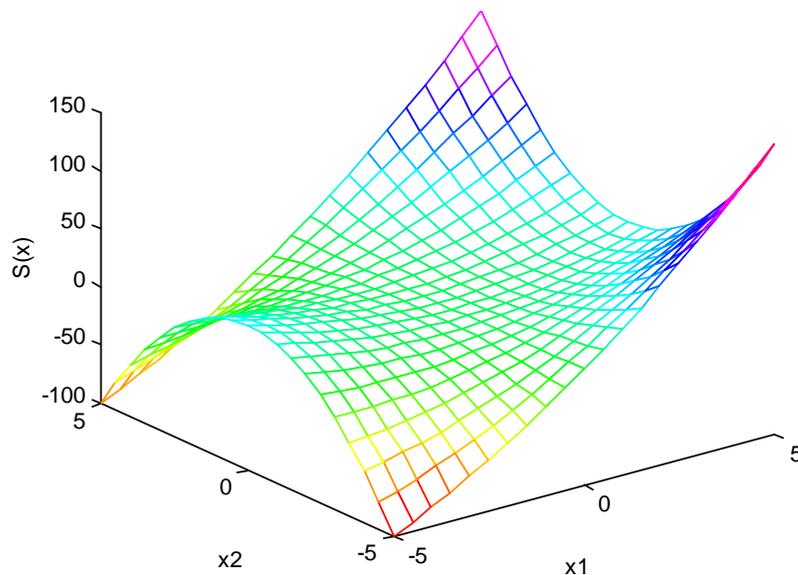
Exemplo 8.3: $S(x_1, x_2) = x_1^2 + x_1 x_2^2$

$$\nabla S(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 + x_2^2 \\ 2x_1 x_2 \end{bmatrix}$$

então, $x_1^* = x_2^* = 0$, e:

$$H(x) = \begin{bmatrix} 2 & 2x_2 \\ 2x_2 & 2x_1 \end{bmatrix} \rightarrow H(x^*) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

isto é, uma matriz positiva semidefinida. O gráfico abaixo ilustra a função $S(x)$, onde se observa que $x^* = 0$ não é um ponto de mínimo. Fazendo a mesma análise com a mudança de variável $y = x_2^2$, verifica-se que a origem é um ponto sela.



8.1.2 Otimização com restrições

Seja o problema de otimização sujeito a restrições de igualdade, $h(x)$, e desigualdade, $g(x)$:

$$\begin{aligned} & \min S(x) \\ \text{sujeito a:} & \quad h_j(x) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \\ & \quad g_j(x) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, p \\ & \quad x \in X \subseteq \mathfrak{R}^n \end{aligned}$$

onde $S(x)$, $g(x)$, e $h(x) \in C^2$. O conjunto de todos os pontos viáveis é definido por:

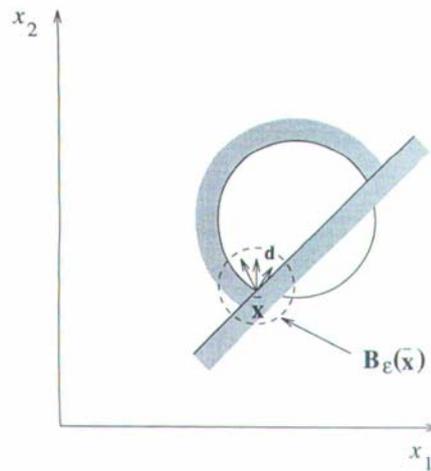
$$K = \{x \in X \subseteq \mathfrak{R}^n / h(x) = 0, g(x) \leq 0\}$$

Uma restrição de desigualdade $g_j(x)$ é chamada de *ativa* em um ponto viável \bar{x} se $g_j(\bar{x}) = 0$, caso contrário ela é uma *restrição inativa*. As restrições ativas restringem a região de viabilidade, enquanto que as inativas não impõem restrição alguma na vizinhança do ponto \bar{x} , definida pela hipersfera de raio ε em torno deste ponto, denotada por $B_\varepsilon(\bar{x})$.

Um vetor d é chamado de *vetor de direção viável* a partir do ponto \bar{x} se existe uma hipersfera de raio ε tal que:

$$(\bar{x} + \lambda d) \in \{B_\varepsilon(\bar{x}) \cap K\} \text{ para todo } 0 \leq \lambda \leq \frac{\varepsilon}{\|d\|}.$$

O conjunto de vetores de direções viáveis a partir de \bar{x} é chamado de *cone de direções viáveis* de K no ponto \bar{x} . A figura abaixo ilustra estas definições.



Se $d \neq 0$, então \bar{x} deve satisfazer as seguintes condições:

$$d^T \nabla h(\bar{x}) = 0$$

$$d^T \nabla g(\bar{x}) \leq 0 \text{ para as } g(\bar{x}) \text{ ativas, pois } g(x) \approx g(\bar{x}) + \lambda \nabla^T g(\bar{x}) d \leq 0$$

e se $d^T \nabla S(\bar{x}) < 0$, então d é uma direção viável e promissora, isto é,

$$S(\bar{x} + \lambda d) < S(\bar{x}) \text{ para todo } 0 \leq \lambda \leq \frac{\varepsilon}{\|d\|}, \text{ pois } S(x) - S(\bar{x}) \approx \lambda \nabla^T S(\bar{x}) d < 0.$$

Se $\bar{x} = x^*$ é um ponto de mínimo local do problema, então para um λ suficientemente pequeno, tem-se:

$$S(x^*) \leq S(x^* + \lambda d).$$

A idéia chave para desenvolver as condições necessárias e suficientes para um problema de otimização com restrições é transformá-lo em um problema de otimização sem restrições e aplicar as condições para este caso. Uma forma de fazer esta transformação é através da introdução de uma função auxiliar, chamada de função de Lagrange, $L(x, \lambda, \mu)$, definida como:

$$L(x, \lambda, \mu) = S(x) + \lambda^T h(x) + \mu^T g(x) \quad , \quad \mu \geq 0$$

onde λ e μ são os multiplicadores de Lagrange associados com as restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente (μ são também conhecidos como multiplicadores de Kuhn-Tucker). Deste modo, o problema transformado torna-se:

$$\max_{\lambda, \mu \geq 0} \min_x L(x, \lambda, \mu)$$

onde os multiplicadores λ associados com as restrições de igualdade, $h(x) = 0$, assumem sinais positivos quando $h(x) \geq 0$ e negativos quando $h(x) \leq 0$. No ponto ótimo tem-se:

$$L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = S(x^*)$$

Cada multiplicador de Lagrange indica o quão sensível é a função objetivo em relação à restrição associada. Por exemplo, se as restrições de igualdade são perturbadas por um vetor b , isto é, $h_b(x) = b$, então:

$$\nabla_b S(x^*) = -\lambda^*.$$

Note que neste caso a função de Lagrange tem a forma:

$$L(x, \lambda) = S(x) + \lambda^T [h_b(x) - b]$$

e sua sensibilidade em relação ao parâmetro b é dada por:

$$\nabla_b L = \nabla_b^T x [\nabla_x S(x) + \nabla_x^T h_b(x) \lambda] + \nabla_b^T \lambda [h_b(x) - b] - \lambda$$

Como os termos entre colchetes da expressão acima devem ser nulos no ponto ótimo (condição necessária de primeira ordem), então:

$$\nabla_b L(x^*, \lambda^*) = -\lambda^* \quad \text{e} \quad \nabla_b S(x^*) = -\lambda^*$$

$$\text{pois} \quad \nabla_b L(x^*, \lambda^*) = \nabla_b S(x^*) + \nabla_b^T \lambda [h_b(x^*) - b] + \nabla_b^T h_b(x^*) \lambda^* - \lambda^* \quad ,$$

$$h_b(x) = b \quad \text{e} \quad \nabla_b h_b(x) = I$$

Portanto, o valor de $S(x)$ aumenta ou diminui a partir de $S(x^*)$ com um aumento ou diminuição em b , dependendo do sinal de λ^* . Por isso, os multiplicadores de Lagrange são também conhecidos como “*shadow prices*” ou “*custos marginais*” das restrições, porque a mudança no valor ótimo da função objetivo por unidade de acréscimo no lado direito da restrição de igualdade é dado por λ^* .

Exemplo 8.4: Seja o seguinte problema de otimização com restrição

$$\min S(x) = (x_1 - 5)^2 + (x_2 - 5)^2$$

$$\text{sujeito a: } h(x) = x_1 - x_2 = 0$$

Introduzindo uma perturbação na restrição de igualdade do tipo: $x_1 - x_2 = b$, então a função de Lagrange toma a forma:

$$L(x, \lambda) = (x_1 - 5)^2 + (x_2 - 5)^2 + \lambda (x_1 - x_2 - b)$$

cujos gradientes nulos com relação a x_1 , x_2 e λ leva ao seguinte sistema de equações:

$$2(x_1 - 5) + \lambda = 0$$

$$2(x_2 - 5) - \lambda = 0$$

$$x_1 - x_2 - b = 0$$

resultando na solução ótima: $x_1^* = 5 + b/2$, $x_2^* = 5 - b/2$ e $\lambda^* = -b$.

Deste modo $S(x^*) = b^2/2$ e $\nabla_b S(x^*) = b = -\lambda^*$.

Para entender a origem da função de Lagrange, o ótimo do exemplo acima deve satisfazer as seguintes condições:

$$dS = \frac{\partial S}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial S}{\partial x_2} \delta x_2 = 0$$

$$dh = \frac{\partial h}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial h}{\partial x_2} \delta x_2 = 0$$

Se $S(x)$ fosse uma função sem restrição, então as suas duas derivadas parciais seriam nulas no ponto ótimo e $dS(x^*)$ seria nulo para quaisquer valores das variações δx_1 e δx_2 . Entretanto, como as variáveis x_1 e x_2 estão restritas (δx_1 e δx_2 não são independentes), as duas derivadas parciais de $S(x)$ não podem ser arbitrariamente igualadas a zero. Contudo, $S(x)$ deve ser um extremo no ponto ótimo e portanto $dS(x^*) = 0$. A segunda condição, $dh(x^*) = 0$, existe porque $h(x) = 0$. Para se obter uma solução (δx_1 e δx_2) não trivial do sistema de equações acima, a matriz dos coeficientes do sistema:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial S}{\partial x_1} & \frac{\partial S}{\partial x_2} \\ \frac{\partial h}{\partial x_1} & \frac{\partial h}{\partial x_2} \end{bmatrix}$$

deve ter determinante nulo, ou seja, as linhas da matriz são linearmente dependentes:

$$\frac{\partial S}{\partial x_1} + \lambda \frac{\partial h}{\partial x_1} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial S}{\partial x_2} + \lambda \frac{\partial h}{\partial x_2} = 0$$

Então, definindo uma função auxiliar: $L(x, \lambda) = S(x) + \lambda^T h(x)$

as condições acima são satisfeitas se: $\nabla_x L(x, \lambda) = 0$. Para que a restrição de igualdade, $h(x) = 0$, seja também satisfeita é necessário que $\nabla_\lambda L(x, \lambda) = 0$. Portanto, no ponto ótimo é necessário que $\nabla L(x^*, \lambda^*) = 0$.

A existência dos multiplicadores de Lagrange depende da forma das restrições, e estará garantida se e somente se os gradientes das restrições de desigualdade ativas, $\nabla g_j(x^*)$, e das restrições de igualdade, $\nabla h(x^*)$, forem linearmente independentes. Por exemplo, no caso de um problema somente com restrições de igualdade, a condição necessária de primeira ordem para $L(x, \lambda)$ fica:

$$\nabla_x S(x) + [\nabla_x h(x)]^T \lambda = 0$$

cuja solução para λ existirá somente se a matriz $\nabla_x h(x)$ possuir posto completo, m , isto é, estar composta por m vetores linearmente independentes.

• Condição necessária de primeira ordem de Karush-Kuhn-Tucker (KKT):

Para que x^* seja um ótimo local do problema com restrições, com $S(x)$, $g(x)$, e $h(x)$ diferenciáveis em x^* , é necessário que:

os gradientes das restrições de desigualdade ativas, $\nabla g_j(x^*)$, e das restrições de igualdade, $\nabla h(x^*)$, sejam linearmente independentes (*qualificação de segunda ordem* das restrições), e que as seguintes condições sejam satisfeitas:

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = \nabla S(x^*) + (\lambda^*)^T \nabla h(x^*) + (\mu^*)^T \nabla g(x^*) = 0$$

$$h(x^*) = 0$$

$$g(x^*) \leq 0$$

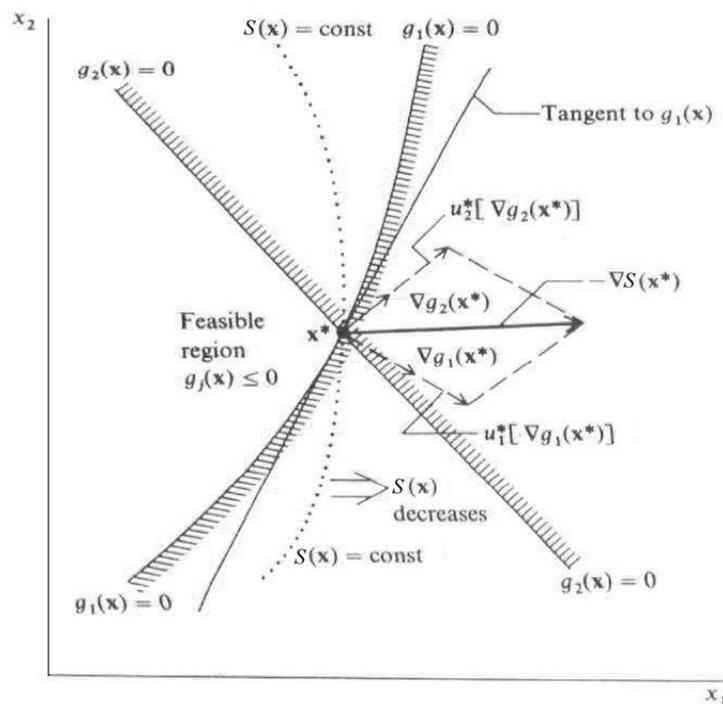
$$\mu_j^* g_j(x^*) = 0, j = 1, 2, \dots, p \text{ (condições de complementaridade)}$$

$$\mu^* \geq 0$$

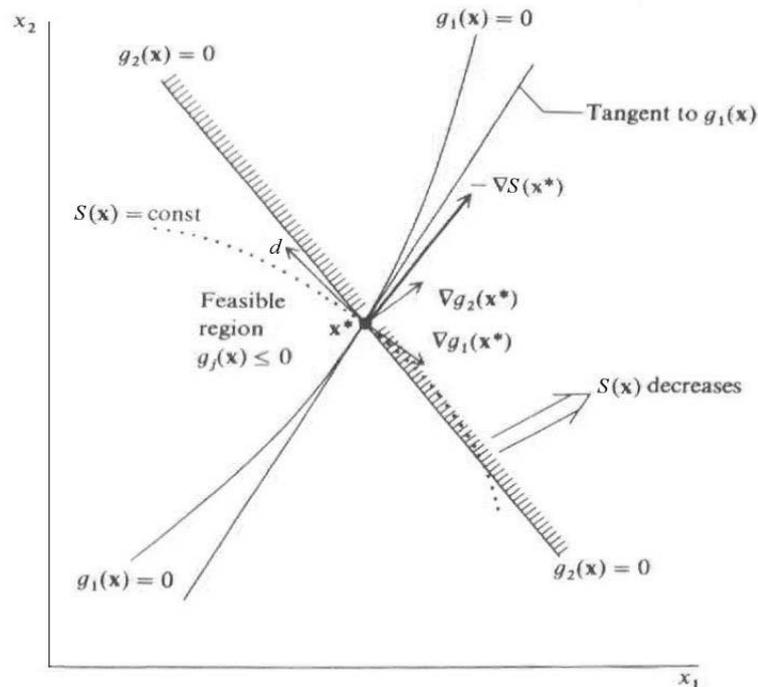
A condição do gradiente nulo, $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = 0$, implica em:

$$(\lambda^*)^T \nabla h(x^*) + (\mu^*)^T \nabla g(x^*) = -\nabla S(x^*)$$

que interpretada graficamente, figura abaixo, mostra que o vetor $\nabla S(x^*)$ pertence ao cone das direções viáveis, formado pelo negativo dos gradientes das restrições de igualdade e desigualdade ativas (uma vez que $\mu_j^* = 0$ para as restrições inativas).



Supondo que $\nabla S(x^*)$ caia fora do cone das direções viáveis, então haveria uma direção d tal que $d^T \nabla S(x^*) < 0$, $d^T \nabla g(x^*) \leq 0$ e $d^T \nabla h(x^*) = 0$, isto é, existiria um ponto melhor que x^* , como ilustra a figura abaixo.



- Condição necessária de segunda ordem de KKT:

Para que x^* seja um mínimo local do problema com restrições, com $S(x)$, $g(x)$, e $h(x)$ duas vezes diferenciáveis em x^* , é necessário que:

a condição de primeira ordem de KKT seja satisfeita e, que a matriz Hessiana da função de Lagrange, $\nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)$, seja positiva semidefinida para todo vetor não nulo d tal que:

$$d^T \nabla h_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$d^T \nabla g_j(x^*) = 0 \text{ para as } g_j(x^*) \text{ ativas}$$

$$\text{isto é, } d^T \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d \geq 0.$$

- Condição suficiente de KKT:

Para que x^* seja um mínimo local do problema com restrições, com $S(x)$, $g(x)$, e $h(x)$ duas vezes diferenciáveis em x^* , é suficiente que:

a condição de primeira ordem de KKT seja satisfeita e, que a matriz Hessiana da função de Lagrange, $\nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)$, seja positiva definida para todo vetor não nulo d tal que:

$$d^T \nabla h_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$d^T \nabla g_j(x^*) = 0 \text{ para as } g_j(x^*) \text{ ativas } \{g_j(x^*) = 0 \text{ e } \mu_j^* > 0\}$$

$$d^T \nabla g_j(x^*) \leq 0 \text{ para as } g_j(x^*) \text{ inativas } \{g_j(x^*) < 0 \text{ e } \mu_j^* = 0\}$$

$$\text{isto é, } d^T \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d > 0.$$

A positividade da matriz Hessiana com restrição, isto é:

$$d^T \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d > 0 \quad \forall d \in \{d / d^T \nabla h_i(x^*) = 0, d^T \nabla g_j(x^*) = 0, d \neq 0\}$$

é garantida se todas as raízes do polinômio característico

$$p(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda I - \nabla_x^2 L & M \\ M^T & 0 \end{vmatrix} = 0$$

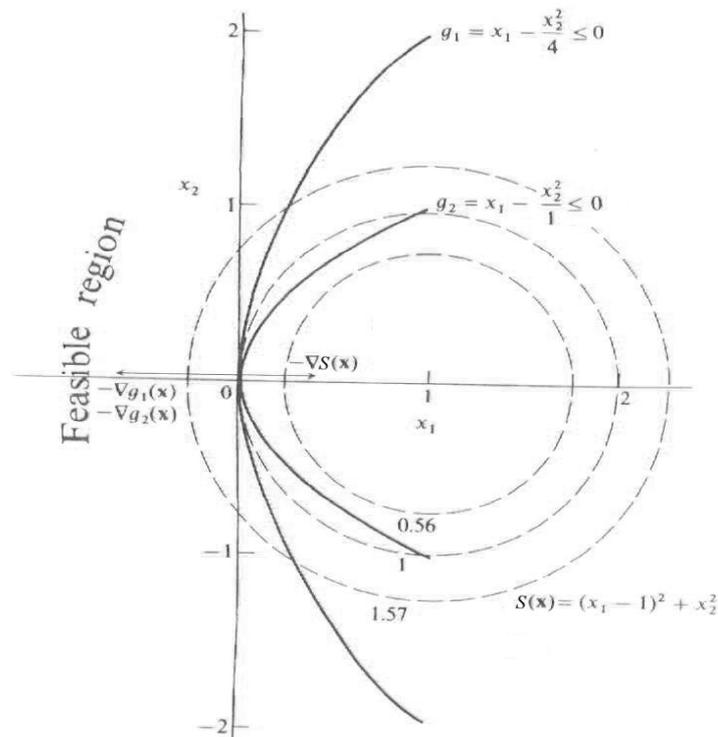
forem positivas, onde M é a matriz formada pelos gradientes de $h(x^*)$ e $g(x^*)$ ativas, isto é, a matriz tal que $d^T M = 0$, com $m+p^a < n$ e com posto completo (p^a é o número de restrições g ativas). O mesmo critério se aplica para semipositividade, negatividade e seminegatividade, com os respectivos sinais das raízes.

Exemplo 8.5: Verificar as condições necessárias e suficientes para o seguinte problema (Edgar & Himmelblau, 1988 , pg. 314):

$$\begin{aligned} \min S(x) &= (x_1 - 1)^2 + x_2^2 \\ \text{sujeito a: } g_1(x) &= x_1 - x_2^2 / 4 \leq 0 \end{aligned}$$

Exemplo 8.6: Verificar as condições necessárias e suficientes para o problema com a mesma função objetivo do exemplo 8.5, mas usando a seguinte restrição:

$$g_2(x) = x_1 - x_2^2 \leq 0$$



8.2 Métodos diretos

Neste texto abordaremos somente alguns métodos de otimização sem restrição, cujo problema a ser resolvido é:

$$\min_{x \in \mathfrak{R}^n} S(x) \quad \text{ou} \quad \max_{x \in \mathfrak{R}^n} S(x)$$

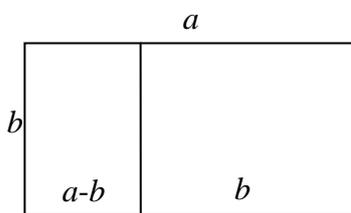
como $\max_{x \in \mathfrak{R}^n} S(x)$ é equivalente a $\min_{x \in \mathfrak{R}^n} -S(x)$, os métodos descritos a seguir são para problemas de minimização. Os métodos existentes para a solução deste problema podem ser agrupados em duas categorias:

- 1) métodos que não usam derivadas (métodos de busca, métodos diretos);
- 2) métodos que usam derivadas (métodos analíticos, métodos da métrica variável, métodos indiretos).

Como regra geral, na solução de problemas sem restrição, os métodos que usam derivadas convergem mais rapidamente que os métodos de busca. Por outro lado, os métodos de busca não requerem regularidade e continuidade da função objetivo e, principalmente o cálculo de derivadas primeira ou segunda de $S(x)$.

8.2.1 Método da seção áurea

É um método de busca monovariável, onde a cada iteração o intervalo de busca é reduzido por um fator α , chamado de razão áurea, obtido pela relação geométrica abaixo (retângulo áureo):



$$\frac{a-b}{b} = \frac{b}{a}$$

$$\left(\frac{b}{a}\right)^2 + \frac{b}{a} - 1 = 0$$

$$\alpha = \frac{b}{a} = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} = 0,618$$

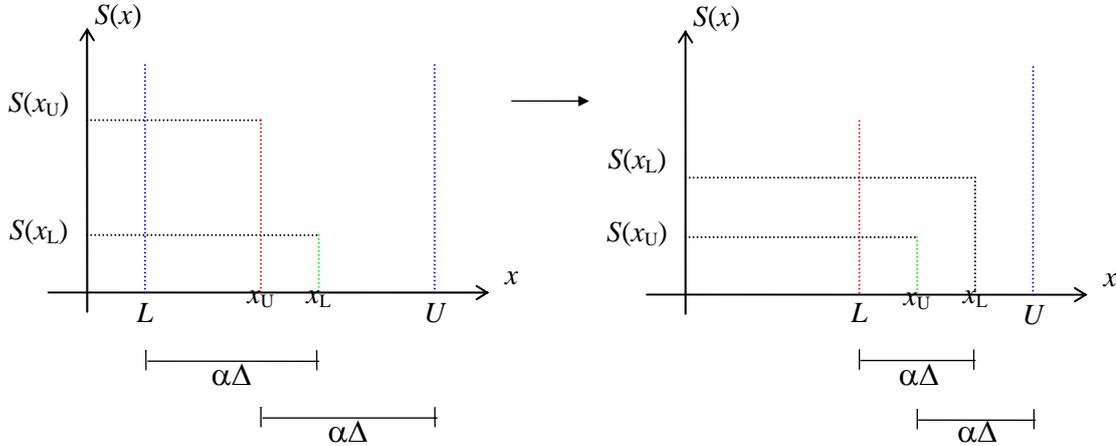
Outras escolhas do fator α levariam a métodos similares, como por exemplo o método da biseção para $\alpha = 0,5$. Contudo, a vantagem da razão áurea está na redução do número de cálculos da função objetivo, em função da propriedade deste método de conservar o retângulo áureo a cada iteração. Outro método com características similares a seção áurea é a busca de **Fibonacci**.

algoritmo

- 1) Determinar o intervalo de busca $[L^0, U^0]$ que contém o ponto de mínimo
- 2) Fazer $k \leftarrow 0, \Delta^0 \leftarrow U^0 - L^0,$
 $x_L^0 \leftarrow L^0 + \alpha \Delta^0, S_L^0 \leftarrow S(x_L^0),$
 $x_U^0 \leftarrow U^0 - \alpha \Delta^0, S_U^0 \leftarrow S(x_U^0),$
- 3) **Se** $S(x_U^k) > S(x_L^k),$ **então** $L^{k+1} \leftarrow x_U^k, x_U^{k+1} \leftarrow x_L^k, S_U^{k+1} \leftarrow S_L^k$
senão $U^{k+1} \leftarrow x_L^k, x_L^{k+1} \leftarrow x_U^k, S_L^{k+1} \leftarrow S_U^k$
- 4) Fazer $k \leftarrow k + 1$ e $\Delta^k \leftarrow U^k - L^k,$

Se $S(x_U^{k-1}) > S(x_L^{k-1})$, então $x_L^k \leftarrow L + \alpha \Delta^k$, $S_L^k \leftarrow S(x_L^k)$
 senão $x_U^k \leftarrow U - \alpha \Delta^k$, $S_U^k \leftarrow S(x_U^k)$

5) Se $\Delta^k > \varepsilon$ (tolerância), então (ir para 3)
 senão FIM.



8.2.2 Método das aproximações polinomiais sucessivas

Na verdade é uma classe de métodos de busca monovariável, que aproxima a função $S(x)$ por uma interpolação polinomial, $P_n(x)$:

$$P_n(x) = \sum_{j=1}^n \ell_j(x) S(x_j)$$

onde $\ell_j(x) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \frac{(x - x_k)}{(x_j - x_k)}$ são os interpoladores de Lagrange. Quando a derivada de $S(x)$

está disponível, então ela também é usada na aproximação polinomial:

$$P_{2n-1}(x) = \sum_{j=1}^n [h_1(x) S(x_j) + h_2(x) \nabla S(x_j)]$$

onde $h_1(x) = \ell_j^2(x) [1 - 2(x - x_j) \nabla \ell_j(x_j)]$ e $h_2(x) = \ell_j^2(x) (x - x_j)$ são os interpoladores de Hermite.

Interpolação quadrática ou método de Coggins (ou DSC-Powell)

O método de G.F. Coggins (1964) ou de Davies-Swann-Campey-Powell (1964) aproxima a função $S(x)$ por uma interpolação quadrática, $P_2(x)$:

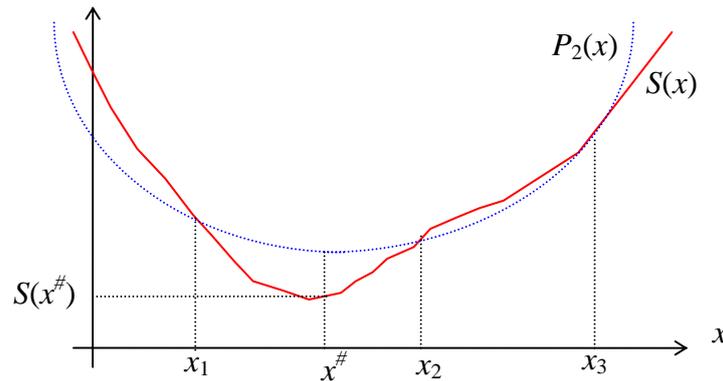
$$P_2(x) = \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} S(x_1) + \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} S(x_2) + \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} S(x_3)$$

calculando o mínimo desta função quadrática, isto é, $\frac{dP_2}{dx} = 0$, tem-se:

$$x^\# = \frac{1}{2} \frac{(x_2^2 - x_3^2)S(x_1) + (x_3^2 - x_1^2)S(x_2) + (x_1^2 - x_2^2)S(x_3)}{(x_2 - x_3)S(x_1) + (x_3 - x_1)S(x_2) + (x_1 - x_2)S(x_3)}$$

algoritmo

- 1) Determinar o intervalo de busca $[x_1, x_3]$
- 2) Calcular $S_1 \leftarrow S(x_1)$, $S_3 \leftarrow S(x_3)$, $x_2 \leftarrow (x_1 + x_3) / 2$ e $S_2 \leftarrow S(x_2)$
- 3) Calcular $x^\# \leftarrow \frac{1}{2} \frac{(x_2^2 - x_3^2)S_1 + (x_3^2 - x_1^2)S_2 + (x_1^2 - x_2^2)S_3}{(x_2 - x_3)S_1 + (x_3 - x_1)S_2 + (x_1 - x_2)S_3}$ e $S^\# \leftarrow S(x^\#)$
- 4) Se $|x^\# - x_i| < \epsilon$ para algum $i = 1, 2, 3$, **então FIM.**
- 5) Se $(x_3 - x^\#)(x^\# - x_2) > 0$, **então** $k \leftarrow 1$
 senão $k \leftarrow 3$
- 6) Se $S^\# < S_2$, **então** $x_k \leftarrow x_2$, $S_k \leftarrow S_2$ e $k \leftarrow 2$
- 7) $x_{4-k} \leftarrow x^\#$, $S_{4-k} \leftarrow S^\#$ e (ir para 3).

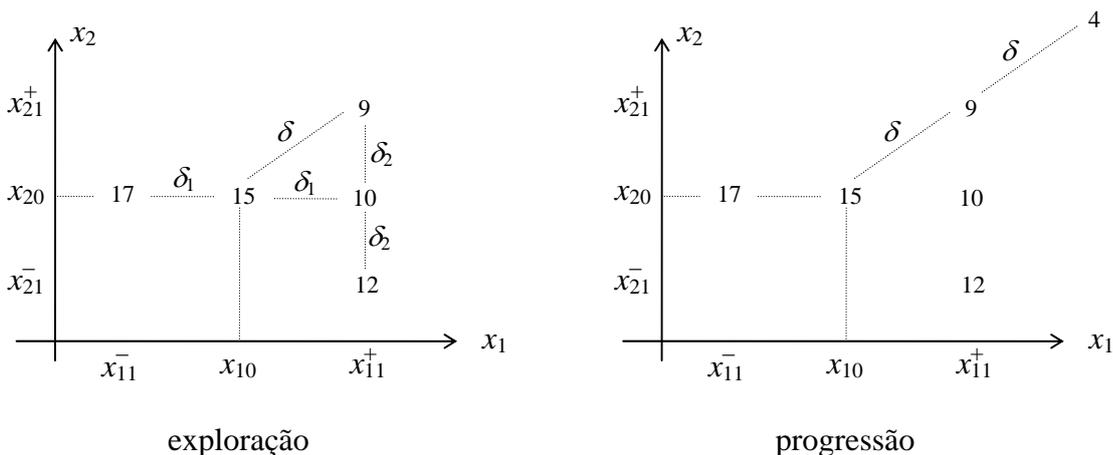


8.2.3 Método de Hooke & Jeeves

É um método de busca multivariável dividido em duas fases (R. Hooke e T.A. Jeeves, 1962):

fase de exploração: estimar a direção provável do extremo, a partir de um ponto inicial (ponto base).

fase de progressão: progredir na direção provável do extremo enquanto o valor da função objetivo for diminuindo.



algoritmo

Partida:

- 1) Determinar a região de busca $[L_i, U_i]$, $(i = 1, 2, \dots, n)$
- 2) Selecionar o ponto base inicial x_{i_0} $(i = 1, 2, \dots, n)$
- 3) Calcular o valor $S_0 \leftarrow S(x_0)$ da função objetivo em x_0

- 4) Selecionar os incrementos iniciais δ_i e as respectivas tolerâncias ε_i ($i = 1, 2, \dots, n$)
- 5) Tomar a primeira direção de busca ($k \leftarrow 1$)

Fase de Exploração:

- 6) Calcular $x_{ko}^- \leftarrow x_{ko} - \delta_k$ (sentido negativo)
- 7) **Se** x_{ko}^- estiver fora da região de busca, **então** insucesso em k^- (ir para 10)
- 8) Calcular o valor de $S_o^- \leftarrow S(x_o^-)$
- 9) **Se** $S_o^- > S_o$ **então** insucesso em k^-
senão sucesso em k^- e fazer $x_{ko} \leftarrow x_{ko}^-$ e $S_o \leftarrow S_o^-$ (ir para 14)
- 10) Calcular $x_{ko}^+ \leftarrow x_{ko} + \delta_k$ (sentido positivo)
- 11) **Se** x_{ko}^+ estiver fora da região de busca, **então** insucesso em k^+ (ir para 14)
- 12) Calcular o valor de $S_o^+ \leftarrow S(x_o^+)$
- 13) **Se** $S_o^+ > S_o$ **então** insucesso em k^+
senão sucesso em k^+ e fazer $x_{ko} \leftarrow x_{ko}^+$ e $S_o \leftarrow S_o^+$
- 14) **Se** já foram exploradas todas as direções ($k = n$) **então** (ir para 15)
senão tomar a direção seguinte $k \leftarrow k + 1$ e (ir para 6)
- 15) **Se** houve sucesso em alguma direção **então** (ir para 17)
- 16) **Se** $\delta_i \leq \varepsilon_i \quad \forall i$ **então** FIM.
senão $\delta_i \leftarrow \delta_i / 2 \quad \forall i$ tal que $\delta_i > \varepsilon_i$ (ir para 5)

Fase de Progressão:

- 17) Tomar $x_{i1} \leftarrow x_{io} \pm \delta_i$ (e, opcionalmente, $\delta_i \leftarrow 2\delta_i$) para todas as direções que houve sucesso
- 18) **Se** x_1 estiver fora da região de busca, **então** insucesso na progressão (ir para 16)
- 19) Calcular o valor de $S_1 \leftarrow S(x_1)$
- 20) **Se** $S_1 > S_o$ **então** insucesso na progressão (ir para 5)
senão sucesso na progressão e fazer $x_o \leftarrow x_1$ e $S_o \leftarrow S_1$ (ir para 17)

8.2.4 Método de busca de limites

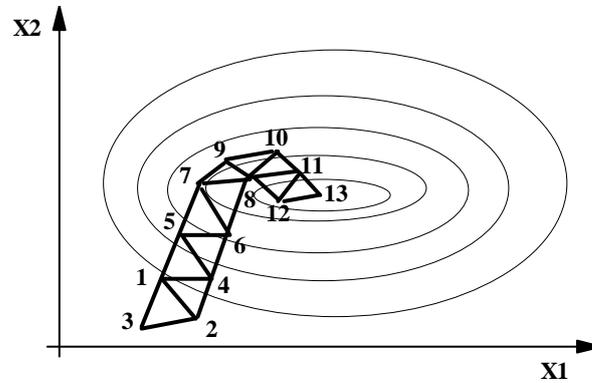
A maioria dos métodos de busca necessita da definição do intervalo de busca, que contém o ponto extremo, para garantirem a determinação do ótimo. Segue abaixo um algoritmo de busca para a determinação de um intervalo $[x_o, x_1]$ que contém um ponto de mínimo.

algoritmo

- 1) Escolher um ponto inicial, x_o , e um passo inicial, α , calcular $S_o \leftarrow S(x_o)$, $k \leftarrow 0$
- 2) Calcular $x_1 \leftarrow x_o + \alpha$ e $S_1 \leftarrow S(x_1)$
- 3) **Se** $S_o \leq S_1$, **então** $\alpha \leftarrow -\alpha$, $k \leftarrow k + 1$ e (ir para 6)
- 4) $S_o \leftarrow S_1$, $\alpha \leftarrow 2\alpha$, $x_1 \leftarrow x_o + \alpha$ e $S_1 \leftarrow S(x_1)$
- 5) **Se** $S_o > S_1$, **então** (ir para 4)
senão $k \leftarrow 1$ (ir para 7)
- 6) **Se** $k < 2$, **então** (ir para 2)
- 7) $x_o \leftarrow x_o + \alpha(k - 1)$, $I \leftarrow [x_o, x_1]$, FIM.

8.2.5 Método dos poliedros flexíveis

É um método de busca multivariável (J.A. Nelder e R. Mead, 1964), onde o pior vértice de um poliedro com $n + 1$ vértices é substituído por um novo vértice colinear com o vértice antigo e o centróide, como ilustra a figura abaixo.



As coordenadas do centróide são dadas por:

$$x_{0,j} = \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^{n+1} x_{i,j} - x_{h,j} \right] \quad j = 1, 2, \dots, n$$

onde $x_{h,j}$ é o pior vértice.

O algoritmo envolve quatro operações de busca, que para o caso da minimização da função objetivo têm as seguintes formas:

$$\begin{array}{l}
 \text{1) Reflexão: } \left\{ \begin{array}{l} x_R^k \leftarrow x_0^k + \alpha (x_0^k - x_h^k) \quad , \quad \alpha > 0 \\ \text{onde } S(x_h^k) \leftarrow \max \{ S(x_1^k), \dots, S(x_{n+1}^k) \} \end{array} \right. \\
 \left. \begin{array}{l} \text{Se } S(x_R^k) \leq S(x_c^k) = \min \{ S(x_1^k), \dots, S(x_{n+1}^k) \}, \\ \text{então } x_E^k \leftarrow x_0^k + \gamma (x_R^k - x_0^k) \quad , \quad \gamma > 1 \\ \text{Se } S(x_E^k) < S(x_R^k), \text{ então } x_h^{k+1} \leftarrow x_E^k \\ \text{senão } x_h^{k+1} \leftarrow x_R^k \\ k \leftarrow k + 1 \quad (\text{ir para 1}) \end{array} \right. \\
 \text{2) Expansão: } \left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right.
 \end{array}$$

$$4) \text{ Redução: } \left\{ \begin{array}{l} \text{Se } S(x_R^k) > S(x_h^k), \text{ então } x_i^{k+1} \leftarrow x_\ell^k + \frac{1}{2}(x_i^k - x_\ell^k) \\ i = 1, 2, \dots, n+1 \\ k \leftarrow k+1 \quad (\text{ir para 1}) \end{array} \right.$$

O critério usado por Nelder e Mead para terminar a busca é o seguinte:

$$\left\{ \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} [S(x_i^k) - S(x_0^k)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \leq \varepsilon.$$

8.2.6 Métodos estocásticos

São métodos onde caminhos aleatórios são construídos na seqüência dos passos em busca do ótimo. Existe uma boa variedade de métodos que se enquadram nesta categoria, tais como os algoritmos genéticos, busca aleatória adaptativa, *simulated annealing*, PSO, etc. O *Particle Swarm Optimization* (PSO) é um algoritmo que tem como fundamento o comportamento de organismos sociais tais como uma revoada de pássaros ou um cardume de peixes, onde cada indivíduo da população (partícula) modifica sua posição com o tempo (geração). A velocidade e posição de uma partícula são modificadas de acordo com a experiência do indivíduo e a dos demais componentes da população, valendo-se de sua melhor posição e a melhor posição do conjunto, dadas por:

$$\begin{aligned} v_i^{k+1} &= w v_i^k + c_1 \alpha_i^{k+1} (p_i^k - x_i^k) + c_2 \beta_i^{k+1} (g^k - x_i^k) \\ x_i^{k+1} &= x_i^k + v_i^{k+1} \end{aligned}$$

onde x_i^k é a posição da partícula i na iteração k , v_i^k sua velocidade, p_i^k sua melhor posição até a iteração k , g^k é a melhor posição dentro todas as partículas até a iteração k , α_i^k e β_i^k são números aleatórios entre 0 e 1, w (fator de inércia) e c_1 e c_2 são parâmetros de sintonia do método. Para valores elevados de w , tem-se uma melhor busca global e para valores pequenos tem-se uma melhor busca local. $c_2 > c_1$ favorece o refinamento da solução já obtida, ou seja, a busca local, ao passo que $c_2 < c_1$ favorece a busca global, já que cada partícula segue o seu próprio caminho.

algoritmo

- 1) Inicialização: construção de x_i^0 e v_i^0 aleatoriamente, $k = 0$.
- 2) Avalia-se a aptidão de cada partícula e atualiza-se p_i^k e g^k .
- 3) Calcula-se a nova velocidade v_i^{k+1} e posição x_i^{k+1} , $k \leftarrow k+1$
- 4) **Se** $k < \text{número máximo de iterações}$ **então** (ir para 2)

No passo (4) pode-se também adotar outros critérios de parada, como por exemplo, um determinado número de iterações sem haver mudança no valor de g^k .

8.3 Métodos indiretos

Estes métodos têm como equação básica para o processo iterativo:

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k W(x^k) \nabla S(x^k)$$

onde α_k é o tamanho do passo, $d^k = -W(x^k) \nabla S(x^k)$ é o vetor direção e

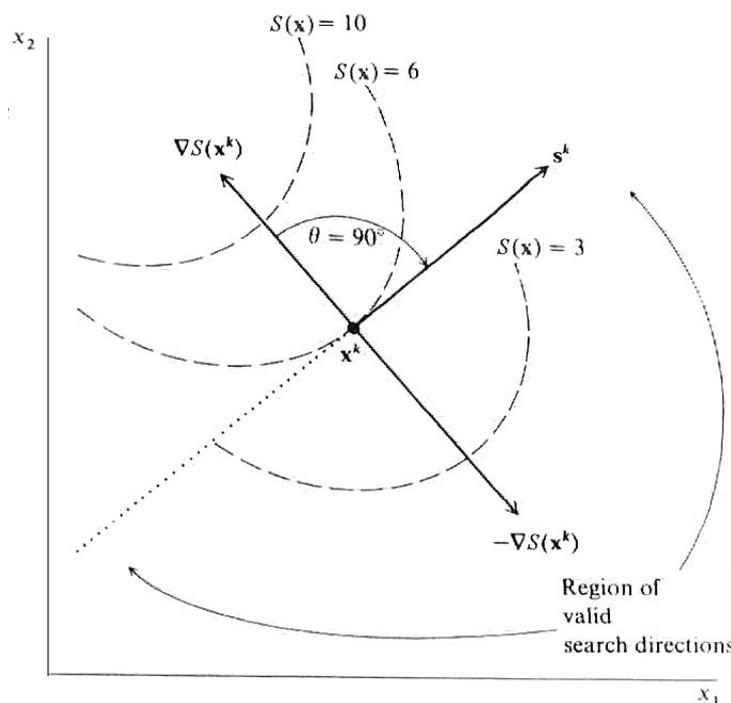
$W(x^k)$ é a matriz direção (inversa da matriz Hessiana ou uma aproximação desta)

Em qualquer método de otimização, uma boa direção de busca deve reduzir (para o caso da minimização) o valor da função objetivo, isto é, $S(x^{k+1}) < S(x^k)$. Tal direção, d^k , satisfaz o seguinte critério em cada ponto:

$$\nabla^T S(x^k) d^k < 0$$

ou em outras palavras, o ângulo (θ) formado entre os vetores $\nabla S(x^k)$ e d^k deve ser sempre maior que 90° , ou seja:

$$\nabla^T S(x^k) d^k = |\nabla^T S(x^k)| |d^k| \cos \theta < 0 \Leftrightarrow \theta > 90^\circ$$

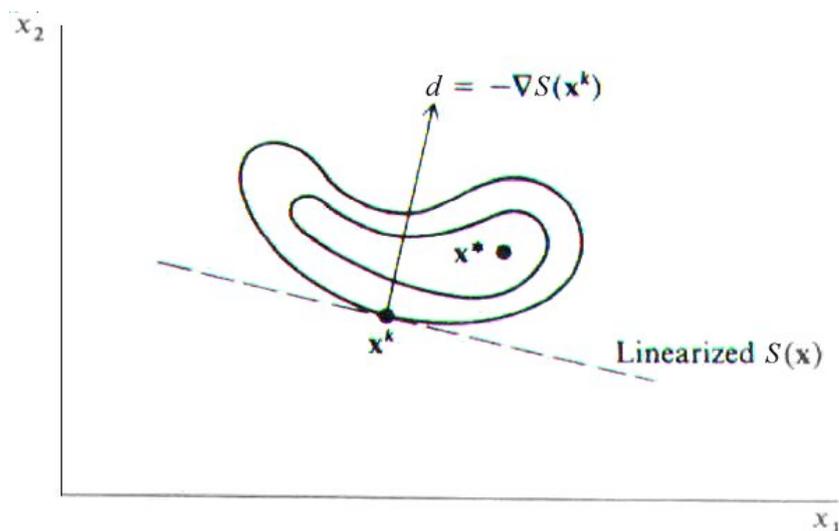


Como a otimização sem restrições é equivalente a encontrar a solução do sistema de equações não-lineares $F(x) = \nabla S(x) = 0$ (daí vem a origem do nome dos métodos indiretos), pode-se utilizar todos os métodos disponíveis para a solução de $F(x) = 0$. Por exemplo, na utilização do método de Newton-Raphson, a matriz Jacobiana é a própria matriz Hessiana.

8.3.1 Métodos gradientes

Utilizam somente a primeira derivada da função objetivo, caso em que $W(x^k) = I$:

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla S(x^k)$$



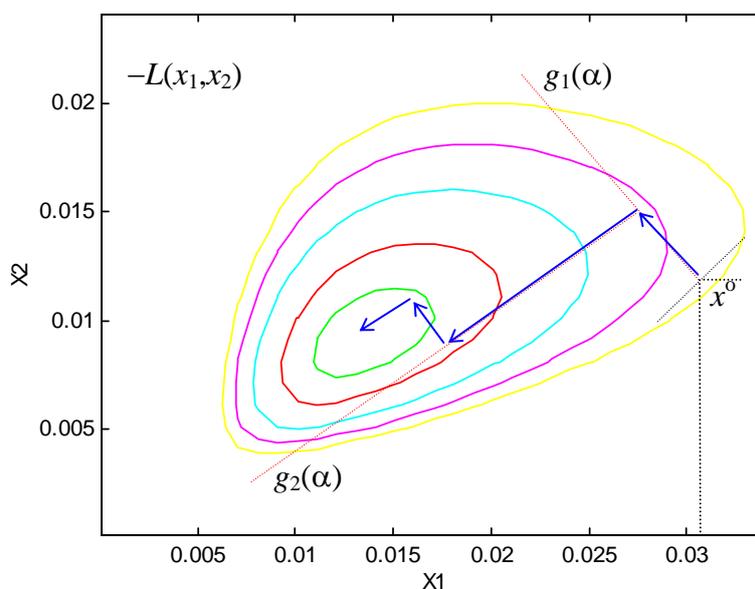
Quando α_k é escolhido de modo a minimizar:

$$g_k(\alpha) = S(x^k - \alpha \nabla S(x^k)) \quad , \quad \alpha > 0$$

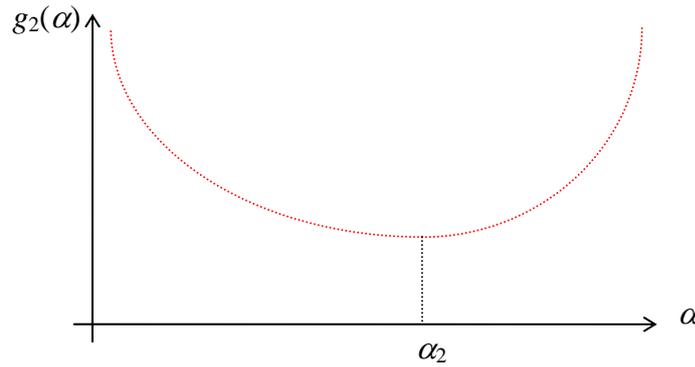
tem-se o método da maior descida (“steepest descent”), cujo algoritmo básico pode ser escrito da seguinte forma.

algoritmo

- 1) Escolher um ponto inicial x^0 , $k \leftarrow 0$
- 2) Calcular $d^k \leftarrow -\nabla S(x^k)$
- 3) Encontrar α_k tal que $S(x^k + \alpha_k d^k) = \min_{\alpha > 0} g_k(\alpha) = S(x^k + \alpha d^k)$
- 4) Calcular $x^{k+1} \leftarrow x^k + \alpha_k d^k$
- 5) **Se** o critério de convergência não foi satisfeito, **então** $k \leftarrow k + 1$ (ir para 2)
- 6) FIM.



A minimização de $g_k(\alpha)$, conhecida como *função de mérito*, também chamada de busca em linha (“linesearch”), pode ser realizada com o uso de qualquer método de minimização univariável. Para ilustrar esta função, a figura abaixo mostra a função $g_2(\alpha)$ do problema acima:



Aproximando $S(x)$ por uma função quadrática:

$$S(x^{k+1}) \approx S(x^k) + \nabla^T S(x^k)(x^{k+1} - x^k) + \frac{1}{2}(x^{k+1} - x^k)^T H(x^k)(x^{k+1} - x^k)$$

ou de forma similar:

$$g_k(\alpha) = S(x^k + \alpha d^k) \approx S(x^k) + \alpha \nabla^T S(x^k) d^k + \frac{1}{2} \alpha^2 (d^k)^T H(x^k) d^k$$

que minimizando em relação a α , $\frac{dg_k}{d\alpha} = 0$, resulta:

$$\alpha^* = \alpha_k = -\frac{\nabla^T S(x^k) d^k}{(d^k)^T H(x^k) d^k} = \frac{(d^k)^T d^k}{(d^k)^T H(x^k) d^k}$$

Contudo, a equação acima não é utilizada para o cálculo de α nos métodos gradientes, pois exigiria o cálculo da segunda derivada da função objetivo. Neste caso, se utiliza, em geral, métodos de busca para a sua seleção.

8.3.2 Método de Newton

Faz uso da segunda derivada da função objetivo, caso em que $W(x^k) = [H(x^k)]^{-1}$:

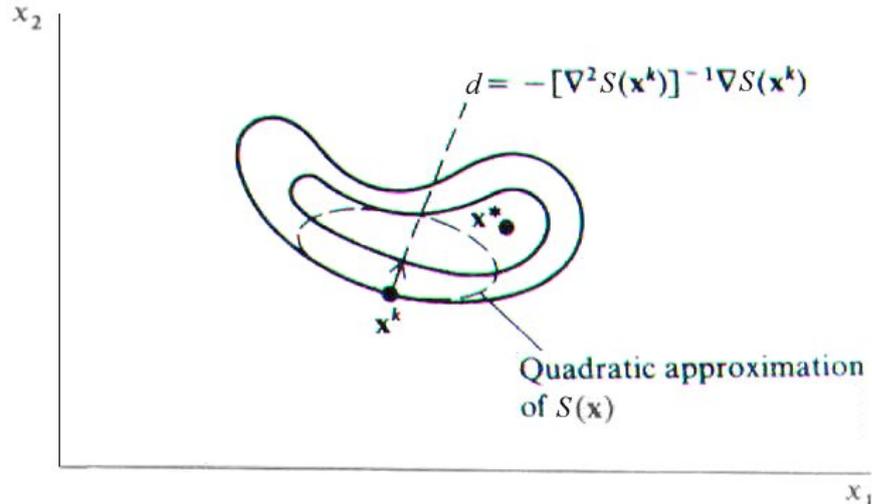
$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k [H(x^k)]^{-1} \nabla S(x^k)$$

que é resultado da minimização da aproximação de $S(x)$ por uma função quadrática:

$$S(x) \approx S(x^k) + \nabla^T S(x^k) \Delta x^k + \frac{1}{2} (\Delta x^k)^T H(x^k) \Delta x^k$$

onde $\Delta x^k = x - x^k$, na direção Δx^k , isto é: $\frac{\partial S}{\partial \Delta x_i^k} = 0$

$$\Delta x^k = -[H(x^k)]^{-1} \nabla S(x^k)$$



Neste caso α_k ou é um parâmetro de relaxação do processo iterativo $0 < \alpha_k \leq 1$, ou é um fator de correção da inversa da matriz Hessiana, caso esta não seja atualizada em todas as iterações. A positividade da matriz Hessiana deve estar sempre garantida para evitar a migração para um ponto sela. E, para assegurar a convergência do método de Newton, a correção Δx^k deve ser tal que $S(x^{k+1}) < S(x^k)$.

Uma maneira de assegurar a positividade da matriz Hessiana é através da modificação de Levenberg-Marquardt, que adiciona um fator ajustável na diagonal da matriz Hessiana, ou em sua inversa:

$$\tilde{H}(x^k) = H(x^k) + \beta_k I \quad , \quad \beta_k > -\min\{\lambda_i\}$$

$$W(x^k) = [H(x^k)]^{-1} + \gamma_k I \quad , \quad \gamma_k > -\min\{1/\lambda_i\}$$

onde λ_i são os valores característicos de $H(x^k)$.

Em particular, quando o método de Newton é utilizado para a solução de problemas de mínimos quadrados, ele é comumente referenciado na literatura como método de Gauss-Newton. Sendo que uma das aplicações é a solução de sistemas de equações não-lineares, $F(x) = 0$, transformados em problemas de mínimos quadrados ao procurar minimizar o quadrado dos resíduos, isto é,

$$S(x) = F^T(x) F(x) = \sum_{i=1}^m f_i^2(x)$$

neste caso $\nabla S(x^k) = 2 J^T(x^k) F(x^k)$ e $H(x^k) = 2 J^T(x^k) J(x^k) + 2 Q(x^k)$, onde $J(x) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right]_{i,j}$ é

a matriz Jacobiana do sistema, $Q(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x) H_i(x)$ e $H_i(x)$ é a matriz Hessiana da função $f_i(x)$. Quando $f_i(x^k) \rightarrow 0$ para $x^k \rightarrow x^*$, então $Q(x^k)$ tende a zero, e as direções de busca do método de Gauss-Newton para o problema de mínimos quadrados:

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \|J(x^k) d - F(x^k)\|^2$$

são equivalentes as direções do método de Newton, ou seja:

$$d^k = -[J^T(x^k) J(x^k)]^{-1} J^T(x^k) F(x^k) \approx -[H(x^k)]^{-1} \nabla S(x^k)$$

8.3.3 Método do gradiente conjugado

Utiliza somente a primeira derivada da função objetivo, gerando uma seqüência de direções que são combinações lineares do gradiente:

$$d^{k+1} = \varepsilon_{k+1} d^k - \nabla S(x^{k+1})$$

onde a nova direção é conjugada com a direção anterior com respeito a Hessiana:

$$(d^{k+1})^T H(x^k) d^k = 0$$

e $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$, onde α_k é obtido de forma similar ao método da maior descida. Para calcular ε_{k+1} , faz-se a aproximação quadrática de $S(x)$, de onde obtém-se:

$$\nabla S(x) \approx \nabla S(x^k) + H(x^k) (x - x^k)$$

e portanto: $\nabla S(x^{k+1}) - \nabla S(x^k) = H(x^k) (x^{k+1} - x^k) = H(x^k) \alpha_k d^k$, que multiplicado por d^{k+1} à esquerda, resulta:

$$(d^{k+1})^T [\nabla S(x^{k+1}) - \nabla S(x^k)] = \alpha_k (d^{k+1})^T H(x^k) d^k = 0$$

substituindo a equação para d^{k+1} na expressão acima, tem-se:

$$[\varepsilon_{k+1} d^k - \nabla S(x^{k+1})]^T [\nabla S(x^{k+1}) - \nabla S(x^k)] = 0,$$

mas devido a ortogonalidade entre a direção de busca e o gradiente da função objetivo no mínimo desta direção $(d^k)^T \nabla S(x^{k+1}) = 0$ e para a aproximação quadrática $\nabla^T S(x^{k+1}) \nabla S(x^k) = 0$, resultando em:

$$\varepsilon_{k+1} = - \frac{\nabla^T S(x^{k+1}) \nabla S(x^{k+1})}{(d^k)^T \nabla S(x^k)} = \frac{\nabla^T S(x^{k+1}) \nabla S(x^{k+1})}{\nabla^T S(x^k) \nabla S(x^k)}$$

a última igualdade resulta do fato de $d^k = \varepsilon_k d^{k-1} - \nabla S(x^k)$, que multiplicado por $\nabla S(x^k)$ à direita:

$$(d^k)^T \nabla S(x^k) = \varepsilon_k (d^{k-1})^T \nabla S(x^k) - \nabla^T S(x^k) \nabla S(x^k) = -\nabla^T S(x^k) \nabla S(x^k),$$

pois $(d^{k-1})^T \nabla S(x^k) = 0$, pela mesma razão acima.

algoritmo

- 1) Escolher um ponto inicial x^0
- 2) Calcular $d^0 \leftarrow -\nabla S(x^0)$, $k \leftarrow 0$
- 3) Encontrar α_k tal que $S(x^k + \alpha_k d^k) = \min_{\alpha > 0} g_k(\alpha) = S(x^k + \alpha d^k)$
- 4) Calcular $x^{k+1} \leftarrow x^k + \alpha_k d^k$ e $\nabla S(x^{k+1})$
- 5) **Se** o critério de convergência foi satisfeito, **então** FIM.
- 6) Calcular $d^{k+1} \leftarrow -\nabla S(x^{k+1}) + d^k \frac{\nabla^T S(x^{k+1}) \nabla S(x^{k+1})}{\nabla^T S(x^k) \nabla S(x^k)}$, $k \leftarrow k + 1$
- 7) **Se** $k = n$, isto é, realizou n direções L.I. **então** fazer $x^0 \leftarrow x^k$ e (ir para 2)
senão (ir para 3)

8.4 Método dos mínimos quadrados

Seja uma relação envolvendo m variáveis independentes x_1, x_2, \dots, x_m com uma variável dependente y :

$$y_{\text{mod}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot f_i(\mathbf{x}), \text{ sendo } a_0, a_1, \dots, a_n \text{ os chamados } n+1 \text{ parâmetros do } \textit{modelo}.$$

$$\text{Assim: } \frac{\partial y_{\text{mod}}(\mathbf{x}, \mathbf{a})}{\partial a_k} = f_k(\mathbf{x}) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n.$$

Nesse caso diz-se que a função é **linear** nos parâmetros.

Deseja-se determinar os n parâmetros do modelo que *minimizem* a *função objetivo* que é a

$$\text{soma dos quadrados dos erros: } S(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} [y_{\text{exp},j} - y_{\text{mod}}(\mathbf{x}_j, \mathbf{a})]^2 = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} \left[y_{\text{exp},j} - \sum_{i=0}^n a_i \cdot f_i(\mathbf{x}_j) \right]^2$$

$$\text{Logo: } \frac{\partial S(\mathbf{a})}{\partial a_k} = -2 \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} f_k(\mathbf{x}_j) \cdot \left[y_{\text{exp},j} - \sum_{i=0}^n a_i \cdot f_i(\mathbf{x}_j) \right] \equiv 0$$

$$\text{Ou seja: } \sum_{i=0}^n \left[\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} f_k(\mathbf{x}_j) \cdot f_i(\mathbf{x}_j) \right] \cdot a_i = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} f_k(\mathbf{x}_j) \cdot y_{\text{exp},j}$$

$$\text{Adotando a notação matricial: } \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{n+1}; \mathbf{y}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} y_{\text{exp},1} \\ y_{\text{exp},2} \\ \vdots \\ y_{\text{exp},N_{\text{exp}}} \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{N_{\text{exp}}};$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} f_0(\mathbf{x}_1) & f_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & f_n(\mathbf{x}_1) \\ f_0(\mathbf{x}_2) & f_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & f_n(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_0(\mathbf{x}_{N_{\text{exp}}}) & f_1(\mathbf{x}_{N_{\text{exp}}}) & \cdots & f_n(\mathbf{x}_{N_{\text{exp}}}) \end{pmatrix}.$$

Assim:

$$[\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}]_{\text{linha } k} = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} f_k(\mathbf{x}_j) \cdot f_i(\mathbf{x}_j) \text{ e } [\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{y}_{\text{exp}}]_{\text{elemento } k} = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} f_k(\mathbf{x}_j) \cdot y_{\text{exp},j}$$

Resultando no sistema linear:

$$[\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}] \cdot \mathbf{a} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{y}_{\text{exp}} \Rightarrow \mathbf{a} = [\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}]^{-1} \cdot (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{y}_{\text{exp}})$$

Uma forma de ajuste bastante empregada é o *ajuste polinomial*, neste caso:

$f_i(\mathbf{x}) = x^i$ para $i = 0, \dots, n$, assim:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N_{\text{exp}}} & \cdots & x_{N_{\text{exp}}}^n \end{pmatrix}$$

No caso particular de $n = 1$ tem-se o *ajuste linear* quando:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{N_{\text{exp}}} \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_{N_{\text{exp}}} \end{pmatrix}$$

$$\text{Assim: } \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} = \begin{pmatrix} N_{\text{exp}} & \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i \\ \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i & \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i^2 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{y}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} y_{\text{exp},i} \\ \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i \cdot y_{\text{exp},i} \end{pmatrix} \text{ ou seja:}$$

$$\begin{pmatrix} N_{\text{exp}} & \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i \\ \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i & \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} y_{\text{exp},i} \\ \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i \cdot y_{\text{exp},i} \end{pmatrix},$$

dividindo ambos os membros por N_{exp} e definindo os *valores médios*:

$$\langle x \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i}{N_{\text{exp}}}, \quad \langle y_{\text{exp}} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} y_{\text{exp},i}}{N_{\text{exp}}}, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i^2}{N_{\text{exp}}} \text{ e } \langle x \cdot y_{\text{exp}} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} x_i \cdot y_{\text{exp},i}}{N_{\text{exp}}} \text{ resulta:}$$

$$\boxed{\begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle y_{\text{exp}} \rangle \\ \langle x \cdot y_{\text{exp}} \rangle \end{pmatrix}}$$

Quando a equação do modelo é *não-linear* nos parâmetros, pode se proceder da seguinte maneira (método de Gauss-Newton): considerando $\mathbf{a}^{(k)}$ o valor do vetor dos parâmetros na iteração k , lineariza-se a equação do modelo em torno de $\mathbf{a}^{(k)}$, resultando em:

$$y_{\text{mod}, \text{linearizado}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = y_{\text{mod}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}^{(k)}) + \sum_{i=0}^n [a_i - a_i^{(k)}] \cdot f_i^{(k)}(\mathbf{x}) = \hat{y}_{\text{mod}}^{(k)}(\mathbf{x}) + \sum_{i=0}^n a_i \cdot f_i^{(k)}(\mathbf{x}),$$

$$\text{sendo } f_i^{(k)}(\mathbf{x}) = \left. \frac{\partial y_{\text{mod}}(\mathbf{x}, \mathbf{a})}{\partial a_i} \right|_{\mathbf{a}^{(k)}} \text{ e } \hat{y}_{\text{mod}}^{(k)}(\mathbf{x}) = y_{\text{mod}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}^{(k)}) - \sum_{i=0}^n a_i^{(k)} \cdot f_i^{(k)}(\mathbf{x})$$

O valor de $\mathbf{a}^{(k+1)}$ na próxima iteração ($k+1$) é então calculado por:

$$\boxed{\mathbf{a}^{(k+1)} = [\mathbf{A}_k^T \cdot \mathbf{A}_k]^{-1} \cdot (\mathbf{A}_k^T \cdot \mathbf{y}_{\text{exp}}^{(k)})}$$

$$\text{Sendo: } \mathbf{y}_{\text{exp}}^{(k)} = \begin{pmatrix} y_{\text{exp},1} - \hat{y}_{\text{mod}}^{(k)}(\mathbf{x}_1) \\ y_{\text{exp},2} - \hat{y}_{\text{mod}}^{(k)}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ y_{\text{exp},N_{\text{exp}}} - \hat{y}_{\text{mod}}^{(k)}(\mathbf{x}_{N_{\text{exp}}}) \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{N_{\text{exp}}} \text{ e}$$

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} f_0^{(k)}(\mathbf{x}_1) & f_1^{(k)}(\mathbf{x}_1) & \cdots & f_n^{(k)}(\mathbf{x}_1) \\ f_0^{(k)}(\mathbf{x}_2) & f_1^{(k)}(\mathbf{x}_2) & \cdots & f_n^{(k)}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_0^{(k)}(\mathbf{x}_{N_{\text{exp}}}) & f_1^{(k)}(\mathbf{x}_{N_{\text{exp}}}) & \cdots & f_n^{(k)}(\mathbf{x}_{N_{\text{exp}}}) \end{pmatrix}$$

Conforme observado na seção anterior, quando o método de Newton é utilizado para a solução de problemas de mínimos quadrados, ele é comumente referenciado na literatura como método de Gauss-Newton. Definindo então a função resíduo:

$$R_j(\mathbf{a}) = y_{\text{exp},j} - y_{\text{mod}}(\mathbf{x}_j, \mathbf{a})$$

A função objetivo pode ser escrita como:

$$S(\mathbf{a}) = \mathbf{R}^T(\mathbf{a}) \mathbf{R}(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} R_j^2(\mathbf{a})$$

neste caso $\nabla S(\mathbf{a}^{(k)}) = -2 \mathbf{A}_k^T \mathbf{R}(\mathbf{a}^{(k)})$ e $\mathbf{H}(\mathbf{a}^{(k)}) = 2 \mathbf{A}_k^T \mathbf{A}_k - 2 \mathbf{Q}(\mathbf{a}^{(k)})$, onde $\mathbf{Q}(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} R_j(\mathbf{a}) \mathbf{H}_j(\mathbf{a})$ e $\mathbf{H}_j(\mathbf{a})$ é a matriz Hessiana da função $R_j(\mathbf{a})$. Quando $R_j(\mathbf{a}^{(k)}) \rightarrow 0$, então $\mathbf{Q}(\mathbf{a}^{(k)})$ tende a zero, e as direções de busca do método de Gauss-Newton para o problema de mínimos quadrados:

$$\min_{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n} \left\| \mathbf{R}(\mathbf{a}^{(k)}) - \mathbf{A}_k \mathbf{d} \right\|^2$$

são equivalentes as direções do método de Newton, ou seja:

$$\mathbf{d}^k = \left(\mathbf{A}_k^T \mathbf{A}_k \right)^{-1} \mathbf{A}_k^T \mathbf{R}(\mathbf{a}^{(k)}) \approx -[\mathbf{H}(\mathbf{a}^{(k)})]^{-1} \nabla S(\mathbf{a}^{(k)})$$

Casos Particulares de Modelos Não Lineares nos Parâmetros

1) **Modelos Exponenciais:** $y_{\text{mod}}(x, \mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot \exp(b_i \cdot x)$

Neste caso, se os pontos experimentais são igualmente espaçados, isto é:

$$x_j = x_1 + (j-1) \cdot h \text{ para } j=1, \dots, N_{\text{exp}}, \text{ tem-se:}$$

$$y_{\text{mod}}(x_j, \mathbf{c}, \mathbf{p}) = \sum_{i=0}^n c_i \cdot p_i^{j-1}, \text{ sendo: } c_i = a_i \cdot \exp(b_i \cdot x_1) \text{ e } p_i = \exp(b_i \cdot h)$$

Desse modo, em cada ponto experimental se tem:

$$R_j = y_{\text{exp},j} - \sum_{i=0}^n c_i \cdot p_i^{j-1}$$

Valores preliminares dos parâmetros c_i e p_i podem ser obtidos considerando que:

$R_j = y_{\text{exp},j} - \sum_{i=0}^n c_i \cdot p_i^{j-1} \cong 0 \Rightarrow y_{\text{exp},j} \cong \sum_{i=0}^n c_i \cdot p_i^{j-1}$, considerando que p_0, p_1, \dots, p_n são os valores característicos de uma equação de diferenças de ordem $n+1$, linear, de coeficientes constantes

e homogênea da forma: $Y_{j+n+1} + \sum_{k=0}^n \alpha_k \cdot Y_{j+k} = 0$ Porém nos pontos experimentais tal equação não é satisfeita totalmente, assim define-se o resíduo:

$$\mathfrak{R}_j(\boldsymbol{\alpha}) = y_{\text{exp},j+n+1} + \sum_{k=0}^n \alpha_k \cdot y_{\text{exp},j+k} \quad \text{para } 1 \leq j \leq J_{\text{max}} = N_{\text{exp}} - (n+1)$$

Os valores de $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$ são determinados de modo a minimizar a função:

$$F(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{j=1}^{J_{\text{max}}} \mathfrak{R}_j^2 = \sum_{j=1}^{J_{\text{max}}} \left[y_{\text{exp},j+n+1} + \sum_{k=0}^n \alpha_k \cdot y_{\text{exp},j+k} \right]^2 \quad \text{sendo } J_{\text{max}} = N_{\text{exp}} - (n+1) \geq 1$$

$$\text{Assim: } \frac{\partial F(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_m} = 2 \cdot \sum_{j=1}^{J_{\text{max}}} y_{\text{exp},j+m} \left[y_{\text{exp},j+n+1} + \sum_{k=0}^n \alpha_k \cdot y_{\text{exp},j+k} \right] = 0 \quad \text{ou seja:}$$

$$\sum_{j=1}^{J_{\text{max}}} y_{\text{exp},j+m} \left[y_{\text{exp},j+n+1} + \sum_{k=0}^n \alpha_k \cdot y_{\text{exp},j+k} \right] = 0 \quad \text{para } m = 0, \dots, n.$$

$$\text{Definindo: } \mathbf{M} = \begin{pmatrix} y_{\text{exp},1} & y_{\text{exp},2} & y_{\text{exp},3} & \cdots & y_{\text{exp},n+1} \\ y_{\text{exp},2} & y_{\text{exp},3} & y_{\text{exp},4} & \cdots & y_{\text{exp},n+2} \\ y_{\text{exp},3} & y_{\text{exp},4} & y_{\text{exp},5} & \cdots & y_{\text{exp},n+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{\text{exp},J_{\text{max}}} & y_{\text{exp},J_{\text{max}}+1} & y_{\text{exp},J_{\text{max}}+2} & \cdots & y_{\text{exp},N_{\text{exp}}-1} \end{pmatrix} \quad \text{e } \mathbf{v} = \begin{pmatrix} y_{\text{exp},n+2} \\ y_{\text{exp},n+3} \\ y_{\text{exp},n+4} \\ \vdots \\ y_{\text{exp},N_{\text{exp}}} \end{pmatrix}, \quad \text{tem-se:}$$

$$\left(\mathbf{M}^T \cdot \mathbf{M} \right) \cdot \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = -\mathbf{M}^T \cdot \mathbf{v}, \quad \text{com os valores dos coeficientes } \alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n \text{ determinam-se as}$$

$n+1$ raízes do polinômio: $P_{n+1}(r) = r^{n+1} + \sum_{k=0}^n \alpha_k \cdot r^k$, sejam estas raízes: p_0, p_1, \dots, p_n . Mas em

vista de $p_i = \exp(b_i \cdot h) \Rightarrow b_i = \frac{1}{h} \cdot \ln(p_i)$ para $i = 0, 1, \dots, n$. Assim $y_{\text{mod}}(x, \mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot \exp(b_i \cdot x)$

e como agora a equação do modelo é linear nos coeficientes a_0, a_1, \dots, a_n estes são determinados após a definição de:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \exp(b_0 \cdot x_1) & \exp(b_1 \cdot x_1) & \cdots & \exp(b_n \cdot x_1) \\ \exp(b_0 \cdot x_2) & \exp(b_1 \cdot x_2) & \cdots & \exp(b_n \cdot x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \exp(b_0 \cdot x_{N_{\text{exp}}}) & \exp(b_1 \cdot x_{N_{\text{exp}}}) & \cdots & \exp(b_n \cdot x_{N_{\text{exp}}}) \end{pmatrix}$$

permitindo determinar: $[\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}] \cdot \mathbf{a} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{y}_{\text{exp}} \Rightarrow \mathbf{a} = [\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}]^{-1} \cdot (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{y}_{\text{exp}})$

Como exemplo do procedimento, considera-se $n=0$, isto é:

$$y_{\text{mod}}(x, a, b) = a \cdot \exp(b \cdot x).$$

$$\text{Resultando em: } \mathbf{M} = \begin{pmatrix} y_{\text{exp},1} \\ y_{\text{exp},2} \\ y_{\text{exp},3} \\ \vdots \\ y_{\text{exp},N_{\text{exp}}-1} \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{M}^T \cdot \mathbf{M} = \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}-1} y_{\text{exp},i}^2 \quad \mathbf{e}$$

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} y_{\text{exp},2} \\ y_{\text{exp},3} \\ y_{\text{exp},4} \\ \vdots \\ y_{\text{exp},N_{\text{exp}}} \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{M}^T \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=2}^{N_{\text{exp}}} (y_{\text{exp},i} \cdot y_{\text{exp},i-1}).$$

Desse modo:

$$\alpha_0 = -\frac{\sum_{i=2}^{N_{\text{exp}}} (y_{\text{exp},i} \cdot y_{\text{exp},i-1})}{\sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}-1} y_{\text{exp},i}^2} \Rightarrow p_0 = \exp(b \cdot h) = -\alpha_0 \Rightarrow b = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\sum_{i=2}^{N_{\text{exp}}} (y_{\text{exp},i} \cdot y_{\text{exp},i-1})}{\sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}-1} y_{\text{exp},i}^2} \right)$$

$$\text{E } a = \frac{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} e^{b_0 \cdot x_j} \cdot y_{\text{exp},j}}{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} e^{2 \cdot b_0 \cdot x_j}}$$

Para refinar os valores de a_0 e b_0 assim procede-se:

Minimiza-se a função: $S(a, b) = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} [y_{\text{exp},j} - a \cdot e^{b \cdot x_j}]^2$ sendo:

$$\text{Com: } \frac{\partial S(a, b)}{\partial a} = -2 \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} e^{b \cdot x_j} [y_{\text{exp},j} - a \cdot e^{b \cdot x_j}] = 0 \Rightarrow a(b) = \frac{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} e^{b \cdot x_j} \cdot y_{\text{exp},j}}{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} e^{2 \cdot b \cdot x_j}}$$

$$\text{e } \frac{\partial S(a, b)}{\partial b} = -2 \cdot a \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} x_j e^{b \cdot x_j} [y_{\text{exp},j} - a \cdot e^{b \cdot x_j}] = 0 \Rightarrow \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} x_j e^{b \cdot x_j} [y_{\text{exp},j} - a \cdot e^{b \cdot x_j}] = 0$$

Essa última expressão, após a substituição de a em função de b , é uma função não-linear apenas de b que é resolvida numericamente por um método adequado.

Muitos trabalhos na literatura utilizam a função $y_{\text{mod}}(x, a, b) = a \cdot \exp(b \cdot x)$ em sua forma logarítmica, assim:

$$\ln[y_{\text{mod}}(x, a, b)] = Y_{\text{mod}}(x, \alpha, b) = \ln(a) + b \cdot x = \alpha + b \cdot x, \text{ sendo } \alpha = \ln(a) \Rightarrow a = e^\alpha.$$

Essa nova função é considerada como a equação do modelo e os valores de α e b são calculados da mesma forma que no ajuste linear, assim:

$$\begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle Y_{\text{exp}} \rangle \\ \langle x \cdot Y_{\text{exp}} \rangle \end{pmatrix}, \text{ sendo } \mathbf{Y}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} \ln(y_{\text{exp},1}) \\ \ln(y_{\text{exp},2}) \\ \vdots \\ \ln(y_{\text{exp},N_{\text{exp}}}) \end{pmatrix}$$

Esse procedimento é denominado erroneamente de *linearização* e seu emprego não é recomendável quando se deseja um bom ajuste dos dados. Porém os valores de a e b assim estimados podem ser utilizados como valores iniciais para o procedimento mais rigoroso.

2) **Modelo Hiperbólico:** $y_{\text{mod}}(x, a, b) = \frac{a}{1 + b \cdot x}$

De forma semelhante da feita com o modelo exponencial acima, este modelo pode também

ser expresso na forma: $Y_{\text{mod}}(x, \alpha, \beta) = \frac{1}{y_{\text{mod}}(x, a, b)} = \alpha + \beta \cdot x$ sendo:

$\alpha = \frac{1}{a} \Rightarrow a = \frac{1}{\alpha}$ e $\beta = \frac{b}{a} \Rightarrow b = \frac{\beta}{\alpha}$. Os valores de α e β são calculados da mesma forma que no ajuste linear, assim:

$$\begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle Y_{\text{exp}} \rangle \\ \langle x \cdot Y_{\text{exp}} \rangle \end{pmatrix}, \text{ sendo } \mathbf{Y}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{y_{\text{exp},1}} \\ \frac{1}{y_{\text{exp},2}} \\ \vdots \\ \frac{1}{y_{\text{exp},N_{\text{exp}}}} \end{pmatrix}. \text{ Neste caso também vale as duas}$$

observações feitas acima.

Para um ajuste que minimize de fato a soma dos quadrados dos erros deve-se ter:

Minimiza-se a função: $S(a, b) = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} \left[y_{\text{exp},j} - \frac{a}{1 + b \cdot x_j} \right]^2$ sendo:

$$\text{Com } \frac{\partial S(a, b)}{\partial a} = -2 \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} \frac{1}{1 + b \cdot x_j} \left[y_{\text{exp},j} - \frac{a}{1 + b \cdot x_j} \right] = 0 \Rightarrow a(b) = \frac{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} \frac{y_{\text{exp},j}}{1 + b \cdot x_j}}{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} \left(\frac{1}{1 + b \cdot x_j} \right)^2}$$

$$\text{e } \frac{\partial S(a, b)}{\partial b} = +2 \cdot a \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} \frac{x_j}{(1 + b \cdot x_j)^2} \left[y_{\text{exp},j} - \frac{a}{1 + b \cdot x_j} \right] = 0 \Rightarrow \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} \frac{x_j}{(1 + b \cdot x_j)^2} \left[y_{\text{exp},j} - \frac{a}{1 + b \cdot x_j} \right] = 0$$

Essa última expressão, após a substituição de a em função de b , é uma função não-linear apenas de b que é resolvida numericamente por um método adequado.

Procedimento semelhante pode também ser aplicado à função:

$$y_{\text{mod}}(x, a, b) = \frac{a \cdot x}{1 + b \cdot x} \Rightarrow \frac{1}{y_{\text{mod}}(x, a, b)} = Y_{\text{mod}}(X, \alpha, \beta) = \alpha + \beta \cdot X, \text{ sendo: } X = \frac{1}{x},$$

$$\alpha = \frac{b}{a} \text{ e } \beta = \frac{1}{a}$$

3) Modelo Geométrico: Erro! Não é possível criar objetos a partir de códigos de campo de edição.

De forma semelhante da feita com o modelo exponencial acima, este modelo pode também ser expresso na forma: $Y_{\text{mod}}(X, \alpha, b) = \ln(y_{\text{mod}}(x, a, b)) = \alpha + b \cdot X$, sendo $X = \ln(x)$ e $\alpha = \ln(a) \Rightarrow a = e^\alpha$.

Os valores de α e b são calculados da mesma forma que no ajuste linear, assim:

$$\begin{pmatrix} 1 & \langle X \rangle \\ \langle X \rangle & \langle X^2 \rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle Y_{\text{exp}} \rangle \\ \langle x \cdot Y_{\text{exp}} \rangle \end{pmatrix}, \text{ sendo } Y_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} \ln(y_{\text{exp},1}) \\ \ln(y_{\text{exp},2}) \\ \vdots \\ \ln(y_{\text{exp},N_{\text{exp}}}) \end{pmatrix}.$$

Neste caso também vale as duas observações anteriores.

Para um ajuste que minimize de fato a soma dos quadrados dos erros deve-se ter:

$$\text{Minimiza-se a função: sendo: } S(a, b) = \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} [y_{\text{exp},j} - a \cdot x_j^b]^2$$

$$\text{Com: } \frac{\partial S(a, b)}{\partial a} = -2 \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} x_j^b [y_{\text{exp},j} - a \cdot x_j^b] = 0 \Rightarrow a(b) = \frac{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} x_j^b \cdot y_{\text{exp},j}}{\sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} x_j^{2 \cdot b}}$$

$$\text{e } \frac{\partial S(a, b)}{\partial b} = -2 \cdot a \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} x_j^b \cdot \ln(x_j) [y_{\text{exp},j} - a \cdot x_j^b] = 0 \Rightarrow \sum_{j=1}^{N_{\text{exp}}} x_j^b \cdot \ln(x_j) [y_{\text{exp},j} - a \cdot x_j^b] = 0$$

Essa última expressão, após a substituição de a em função de b , é uma função não-linear apenas de b que é resolvida numericamente por um método adequado.

Lista de exercícios

1) Determine (a partir da definição de concavidade e convexidade) a concavidade ou convexidade das funções:

$$(a) f(x_1, x_2) = (x_1 - 2)^2 + 3 \cdot (x_2 + 1)^2 \text{ no domínio: } x_1, x_2 \geq 0;$$

$$(b) f(x_1, x_2, x_3) = 2 \cdot x_1^2 + x_2^2 - 3 \cdot x_3^2 \text{ no domínio: } x_1, x_2, x_3 \geq 0.$$

2) Determine a localização e a natureza dos pontos estacionários das funções abaixo, determine também (em cada caso) o máximo e o mínimo globais:

$$(a) f(x) = \frac{2 \cdot x}{1+x^2} \text{ para } x \geq 0;$$

$$(b) f(x) = \frac{\text{sen}(x)}{x} \text{ para } -\pi \leq x \leq \pi;$$

$$(c) f(x) = e^{-x^2} \cdot \text{sen}(x) \text{ para } 0 \leq x \leq \pi;$$

$$(d) f(x_1, x_2) = x_1^3 - 3 \cdot x_1 \cdot x_2 + 3 \cdot x_2^2;$$

$$(e) f(x_1, x_2) = -x_1^2 - \frac{1}{2} \cdot x_2^2 + x_1 \cdot x_2 + x_1 \text{ para } x_1, x_2 \geq 0.$$

3) Resolva, utilizando multiplicadores de Lagrange, cada um dos problemas abaixo:

$$(a) \text{ Maximize: } f(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2 \text{ tal que: } x_1 + 2 \cdot x_2 = 4;$$

$$(b) \text{ Minimize: } f(x_1, x_2) = (x_1 - 2)^2 + 2 \cdot (x_2 - 1)^2 + (x_3 - 3)^2 \text{ tal que:}$$

$$2 \cdot x_1 + x_2 + 2 \cdot x_3 \geq 4 \text{ e } x_1^2 + 2 \cdot x_2^2 + 3 \cdot x_3^2 \geq 48;$$

$$(c) \text{ Minimize: } f(x_1, x_2) = (x_1 - 2)^2 + 2 \cdot (x_2 - 1)^2 + (x_3 - 3)^2 \text{ tal que:}$$

$$2 \cdot x_1 + x_2 + 2 \cdot x_3 \leq 4 \text{ e } x_1^2 + 2 \cdot x_2^2 + 3 \cdot x_3^2 \leq 48;$$

$$(d) \text{ Minimize: } f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 \text{ tal que: } (x_1 - 1)^3 - x_2^2 = 0.$$

4) Se as coordenadas x_1 e x_2 estão relacionadas por: $2 \cdot x_1 + x_2 = 1$, ache os pontos sobre a elipsóide: $2 \cdot x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ que se encontram, respectivamente, mais próximo e mais afastado da origem.

5) Determine as dimensões do paralelepípedo, cuja diagonal tem um comprimento d , que apresenta o maior volume.

6) Teste as condições necessárias e suficientes do problema abaixo.

$$\min S(x) = x_1 x_2$$

$$\text{sujeito a: } g_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 25 \leq 0$$

7) Em um reator químico é conduzida uma reação química irreversível de segunda ordem, o processo é em batelada. O balanço de massa do reagente é descrito pela equação diferencial:

$$\frac{dc(t)}{dt} = -k \cdot [c(t)]^2 \text{ com } c(0) = c_0$$

A variação da concentração do reagente com o tempo é medida construindo-se a tabela:

t (min)	1	2	3	4	5	7	10	12	15	20	25
$c \times 100$ (mol/L)	4,049	3,086	2,604	2,222	1,912	1,524	1,142	0,980	0,741	0,649	0,521

Baseado nestes dados estime os valores de k e de c_0 .

Dica: A solução da EDO é: $c(t) = \frac{c_0}{1 + k \cdot c_0 \cdot t}$ considere: $a = c_0$ e $b = k \cdot c_0$ e determine os parâmetros a e b como indicado em na seção 7.4 para modelo hiperbólico.

8) A intensidade de radiação de uma fonte radioativa é expressa por: $I(t) = I_0 \cdot e^{-\alpha t}$. Determine os valores de I_0 e de α que melhor ajustem os dados experimentais abaixo:

t	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
$I(t)$	3,16	2,38	1,75	1,34	1,00	0,74	0,56

Dica: note que os pontos estão igualmente espaçados, considere então que: $I_{\text{mod}}(t_{i+1}) = p \cdot I_{\text{mod}}(t_i)$ sendo $t_i = 0,2 + 0,1 \cdot i$ para $i = 0, 1, \dots, 7$.

9) y é uma função de x dada pela tabela abaixo, sabe-se que esta dependência é expressa por: $y(x) = A \cdot e^{-\alpha x} + B \cdot e^{-\beta x}$. Determine os valores de A , B , α e β .

x	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1
$y(x)$	2,31604	2,02877	1,78030	1,56513	1,37854	1,21651	1,07561	0,95289

Dica: note que os pontos estão igualmente espaçados, considere então que: $y_{\text{mod}}(t_{i+2}) + b \cdot y_{\text{mod}}(t_{i+1}) + c \cdot y_{\text{mod}}(t_i) = 0$ sendo $t_i = 0,4 + 0,1 \cdot i$ para $i = 0, 1, \dots, 7$. Os valores de b e c são determinados de modo a minimizar a função:

$$\sum_{i=0}^5 [y_{\text{mod}}(t_{i+2}) + b \cdot y_{\text{mod}}(t_{i+1}) + c \cdot y_{\text{mod}}(t_i)]^2 = 0$$
 com os valores de b e c determinam-se as raízes r_1 e r_2 de $p^2 + b \cdot p + c = 0$, sendo $r_1 = e^{-0,1\alpha} \Rightarrow \alpha = -10 \cdot \ln(r_1)$ e $r_2 = e^{-0,1\beta} \Rightarrow \beta = -10 \cdot \ln(r_2)$

10) y é uma função de x dada pela tabela abaixo, sabe-se que esta dependência é expressa por: $y(x) = C \cdot e^{-a x} \cdot \text{sen}(b \cdot x)$. Determine os valores de C , a e b

x	0,0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	1,4	1,6
$y(x)$	0,00000	0,15398	0,18417	0,16156	0,12301	0,08551	0,05537	0,03362	0,01909

Dica: note que os pontos estão igualmente espaçados, considere então que: $y_{\text{mod}}(t_{i+2}) + b \cdot y_{\text{mod}}(t_{i+1}) + c \cdot y_{\text{mod}}(t_i) = 0$ sendo $t_i = 0,2 \cdot i$ para $i = 0, 1, \dots, 8$. Tendo em vista

que $\text{sen}(b \cdot x) = \frac{e^{b \cdot x \cdot i} - e^{-b \cdot x \cdot i}}{2 \cdot i} \Rightarrow e^{-a x} \cdot \text{sen}(b \cdot x) = \frac{e^{(-a+b \cdot x) i} - e^{(-a-b \cdot x) i}}{2 \cdot i}$, pode-se assim interpretar

como se o polinômio característico associado apresenta um par de raiz complexa conjugada. Após as raízes serem determinadas o valores iniciais dos parâmetros seriam:

$$a = \frac{1}{h} \cdot \ln|\Re(r_0)| = 5 \cdot \ln|\Re(r_0)| \quad e \quad b = \frac{1}{h} \cdot |\arg(r_0)| = 5 \cdot |\arg(r_0)|$$

11) y é uma função de x dada pela tabela abaixo, sabe-se que esta dependência é expressa por: $y(x) = A \cdot e^{-\alpha x} + B$. Determine os valores de A , B e α

x	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0	2,2	2,4	2,6	2,8	3,0
y(x)	3,00767	2,79720	2,61553	2,45874	2,32340	2,20659	2,10576	2,01874	1,94363	1,87880	1,82284

Dica: note que os pontos estão igualmente espaçados, considere então que: $y_{\text{mod}}(t_{i+2}) - (1+b) \cdot y_{\text{mod}}(t_{i+1}) + b \cdot y_{\text{mod}}(t_i) = 0$ sendo $t_i = 1 + 0,2 \cdot i$ para $i = 0, 1, \dots, 10$. Com o valor de b determinam-se as raízes de $p^2 - (1+b) \cdot p + b = (p-1) \cdot (p-b) = 0$ estas raízes são: $r_1 = 1$ e $r_2 = b = e^{-0,2\alpha} \Rightarrow \alpha = -5 \cdot \ln(b)$. Calculam-se então A e B por regressão linear.

12) Através de fotografias estroboscópicas de pequenas bolhas de ar é possível medir o perfil de velocidade próxima à parede de um tubo no qual escoa um fluido. Com um número de Reynolds de 1200 e com um tubo de 1 polegada de diâmetro interno os seguintes pontos experimentais são obtidos:

y (distância à parede) cm	u (velocidade) cm/s	y (distância à parede) cm	u (velocidade) cm/s
0,003	0,03	0,056	0,85
0,021	0,32	0,061	0,92
0,025	0,30	0,070	1,05
0,025	0,33	0,078	1,117
0,037	0,57	0,085	1,32
0,043	0,66	0,092	1,38
0,049	0,74	0,106	1,57
0,053	0,80	0,113	1,65
0,055	0,84		

A função que melhor ajusta o perfil de velocidade é: $u(y) = p \cdot y + q \cdot y^2$, baseado nos dados acima determine os valores de p e q .

13) Os coeficientes de transferência de calor em trocadores de calor são adequadamente modelados por expressão do tipo: $Nu = \alpha \cdot Re^\beta \cdot Pr^\gamma \cdot r^\delta$
Onde Nu , Re e Pr são, respectivamente, os números de Nusselt, Reynolds e Prandt e r é a razão entre a viscosidade à temperatura média do fluido e à temperatura da parede; α , β , γ e δ são constantes. Os seguintes dados experimentais estão disponíveis:

Nu	Re	Pr	r
277	49000	2,30	0,947
348	68600	2,28	0,954
421	84800	2,27	0,959
223	34200	2,32	0,943
177	22900	2,36	0,936
114,8	1321	246	0,592
95,9	931	247	0,583
68,3	518	251	0,579
49,1	346	273	0,290
56,0	122,9	1518	0,294
39,9	54,0	1590	0,279
47,0	84,6	1521	0,267
94,2	1249	107,4	0,724
99,9	1021	186	0,612
83,1	465	414	0,512
35,9	54,8	1302	0,273

Estimar os valores de α , β , γ e δ que melhor ajustam os pontos acima.

14) Encontre o mínimo das seguintes funções objetivo usando os métodos diretos e indiretos descritos nas seções 7.2 e 7.3 e compare os resultados em termos do número de funções objetivo avaliadas por cada método:

a) $S(x) = 100 (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$

b) $S(x) = [1,5 - x_1 (1 - x_2)]^2 + [2,25 - x_1 (1 - x_2^2)]^2 + [2,625 - x_1 (1 - x_2^3)]^2$

c) $S(x) = 4 x_1^2 - 2 x_1 x_2 + x_2^2$

d) $S(x) = \exp(x_1) (4 x_1^2 + 2 x_2^2 + 4 x_1 x_2 + 2 x_2 + 1)$

e) $S(x) = 4 (x_1 - 5)^2 + (x_2 - 6)^2$

f) $S(x) = x_1^2 - 5 x_1 + 3 x_2^2 + 3$

g) $S(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$