

Delfim Fernando Marado Torres

Programação Matemática

UA Editora
2021

Título

Programação Matemática

Autor

Delfim Fernando Marado Torres

Design e serviços de pré-impressão

Mafalda Frade

Impressão

ARTIPOL – Artes Tipográficas, Lda

Editora

UA Editora

Universidade de Aveiro

Serviços de Biblioteca, Informação Documental e Museologia

1.^a edição – Março 2021

Tiragem

150 exemplares

ISBN

978-972-789-674-5

Depósito legal

480590/21

Prefácio

Em matemática, o termo *programação matemática* é sinónimo de *otimização*. Esta área da matemática dedica-se ao estudo de problemas de minimização ou maximização de uma função de várias variáveis, dentro de um dado conjunto admissível. A programação matemática encontra aplicações em problemas de engenharia, de administração, de logística, de transporte, de economia e de biologia, entre outras ciências.

A unidade curricular (u.c.) “Programação Matemática (47756)” do Departamento de Matemática (DMat) da Universidade de Aveiro (UA), da área científica “Matemática (M)”, é obrigatória no curso do segundo ciclo “Mestrado em Matemática e Aplicações (9245)” e opcional no curso do terceiro ciclo “Programa Doutoral em Engenharia Mecânica (9207)”. Tem duração semestral, com 6 ECTS, e pressupõe 162 horas de trabalho pelo aluno, funcionando com 3 horas semanais de contacto docente-discente, em ensino teórico-prático presencial.

Com esta u.c. pretende-se fornecer uma formação sólida em otimização não linear e, em simultâneo, estimular a utilização de tais modelos e resultados na modelação e resolução de problemas práticos. Nos conteúdos programáticos estão incluídos os conceitos essenciais de programação matemática, que qualquer aluno que deseje prosseguir estudos nesta área deve conhecer e dominar.

Este livro, com os conteúdos programáticos da u.c. “Programação Matemática (47756)”, é acompanhado, sempre que possível, da descrição de exemplos de aplicação dos conceitos a adquirir. Com a apresentação dos exemplos pretende-se desenvolver o raciocínio e a capacidade de aplicação dos conceitos matemáticos envolvidos. As demonstrações dos resultados apresentados são dadas com todo o rigor, procurando-se estimular os alunos a desenvolverem o seu raciocínio, que será essencial numa qualquer futura atividade profissional.

Pressupõem-se competências de Análise/Cálculo I, II e III e de Álgebra Linear e Geometria Analítica, anteriormente adquiridas numa licenciatura.

Agradeço o apoio do DMat e do CIDMA (UIDB/04106/2020).

Delfim F. M. Torres <delfim@ua.pt>
Universidade de Aveiro, janeiro de 2021

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Tipos de problemas de otimização	1
1.2	Minimizantes locais, globais e estritos	2
1.3	Gradiente e Hessiana	3
1.4	Matrizes definidas positivas, semidefinidas positivas e indefinidas	4
1.5	Existência de minimizantes	5
I	Problemas de otimização sem restrições	7
2	Condições de otimalidade	9
2.1	Direção descendente	10
2.2	Condição necessária de primeira ordem	10
2.3	Condição necessária de segunda ordem	11
2.4	Condições suficientes	12
2.5	Problemas quadráticos	15
2.6	Convexidade e minimização	18
2.7	Exercícios	23
3	Métodos aproximativos	27
3.1	O método de descida mais rápida	27
3.2	O método de Newton	35
3.3	Convergência dos métodos	41
3.4	Otimização sem restrições em Octave/Matlab	46
3.5	Exercícios	47

II	Problemas de otimização com restrições	51
4	Condições de otimalidade	53
4.1	Problema, hipóteses e notações	53
4.2	Condição necessária geométrica	54
4.3	Separação de conjuntos convexos	57
4.4	Condições necessárias algébricas	62
4.5	Generalizações do conceito de convexidade	73
4.6	Condições suficientes de otimalidade	76
4.7	Restrições de qualificação	77
4.8	Exercícios	80
5	Métodos aproximativos	83
5.1	Métodos de penalização	83
5.2	Métodos de barreira	89
5.3	Exercícios	94
6	Dualidade	95
	Bibliografia	99
	Índice	101

Capítulo 1

Introdução

Neste curso lidamos, sem perda de generalidade, apenas com problemas de minimização. Isto porque os problemas de maximização são facilmente convertidos em problemas equivalentes de minimização usando a relação

$$\max f(x) = -\min [-f(x)].$$

1.1 Tipos de problemas de otimização

Os problemas de otimização podem ser classificados em dois grandes grupos: problemas com e sem restrições.

Problema (de otimização sem restrições). *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $X \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto. Pretende-se:*

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \\ \text{s.a. } x \in X & (P_{SR}) \end{array}$$

(s.a. lê-se “sujeito a”), onde $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$.

Observação 1.1. *De acordo com a nossa definição, um problema de otimização sem restrições pode ter restrições! (desde que elas definam um conjunto X aberto; um caso particular será $X = \mathbb{R}^n$).*

Definição 1.2. *Dizemos que x é admissível para (P_{SR}) se $x \in X$.*

Problema (de otimização com restrições). *Sejam $f, g_1, \dots, g_m, h_1, \dots, h_l : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Pretende-se:*

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \\ \text{s.a. } g_i(x) \leq 0, & i = 1, \dots, m, \\ h_i(x) = 0, & i = 1, \dots, l, \\ x \in X, & (P_{CR}) \end{array}$$

onde $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$.

Observação 1.3. Seja $g(x) = (g_1(x), \dots, g_m(x))$ e $h(x) = (h_1(x), \dots, h_l(x))$. Então $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ e podemos escrever o problema (P_{CR}) na seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ \text{s.a. } & g(x) \leq 0, \\ & h(x) = 0, \\ & x \in X. \end{aligned} \tag{P_{CR}}$$

Definição 1.4. Dizemos que x é admissível para (P_{CR}) se $x \in X$, $g(x) \leq 0$ e $h(x) = 0$.

Notação 1.5. Normalmente denotamos o problema em mãos (que pode ser com ou sem restrições) por problema (P) . O conjunto de todos os $x \in \mathbb{R}^n$ admissíveis para (P) será denotado por $\mathcal{A}$.

1.2 Minimizantes locais, globais e estritos

Como habitual, denotamos por $B(\bar{x}, \varepsilon)$ a bola centrada em $\bar{x}$ e de raio ε :

$$B(\bar{x}, \varepsilon) := \{x \in \mathbb{R}^n : \|x - \bar{x}\| \leq \varepsilon\}.$$

Definição 1.6. Dizemos que $x \in \mathcal{A}$ é um minimizante local de (P) se existir $\varepsilon > 0$ tal que $f(x) \leq f(y)$ para todo o $y \in B(x, \varepsilon) \cap \mathcal{A}$.

Definição 1.7. Dizemos que $x \in \mathcal{A}$ é um minimizante global de (P) se $f(x) \leq f(y)$ para todo o $y \in \mathcal{A}$.

Definição 1.8. Dizemos que $x \in \mathcal{A}$ é um minimizante local estrito de (P) se existir $\varepsilon > 0$ tal que $f(x) < f(y)$ para todo o $y \in B(x, \varepsilon) \cap \mathcal{A}$, $y \neq x$.

Definição 1.9. Dizemos que $x \in \mathcal{A}$ é um minimizante global estrito de (P) se $f(x) < f(y)$ para todo o $y \in \mathcal{A}$, $y \neq x$.

Observação 1.10. Não se deve confundir minimizante com mínimo. Se x for um minimizante, então o valor da função f em x será o respetivo mínimo: o minimizante é um vetor em $\mathbb{R}^n$ que minimiza a função f ; o mínimo será $f(x)$ (um valor real).

1.3 Gradiente e Hessiana

Relembramos os conceitos de (vetor) gradiente e (matriz) Hessiana.

Definição 1.11. *Seja $f : X \rightarrow \mathbb{R}$, onde $X \subseteq \mathbb{R}^n$ é um aberto. Dizemos que f é diferenciável em $\bar{x} \in X$ se existir um vetor $\nabla f(\bar{x})$ (o gradiente de f em $\bar{x}$) tal que para cada $x \in X$*

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x - \bar{x}) + \|x - \bar{x}\| \alpha(\bar{x}, x - \bar{x})$$

com $\lim_{\|y\| \rightarrow 0} \alpha(\bar{x}, y) = 0$. A função f é diferenciável em X se f for diferenciável para todo o $\bar{x} \in X$.

O vetor gradiente é o vetor das derivadas parciais:

$$\nabla f(\bar{x}) = \left(\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x_n} \right).$$

Observação 1.12. *Um vetor coluna $v \in \mathbb{R}^n$ é denotado por*

$$v = (v_1, \dots, v_n) = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}.$$

Notar que definimos o vetor gradiente como um vetor coluna.

Definição 1.13. *A derivada direcional de f em $\bar{x}$ na direção d é dada por*

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

Definição 1.14. *Uma função f diz-se duas vezes diferenciável em $\bar{x} \in X$ se existir um vetor $\nabla f(\bar{x})$ e uma matriz simétrica $H(\bar{x})$ $n \times n$ (a Hessiana de f em $\bar{x}$) tal que para cada $x \in X$*

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x})^T H(\bar{x})(x - \bar{x}) + \|x - \bar{x}\|^2 \alpha(\bar{x}, x - \bar{x})$$

com $\lim_{\|y\| \rightarrow 0} \alpha(\bar{x}, y) = 0$. A função f é duas vezes diferenciável em X se f for duas vezes diferenciável para todo o $\bar{x} \in X$.

A matriz Hessiana é a matriz das derivadas parciais de segunda ordem:

$$H(\bar{x})_{ij} = \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_i \partial x_j}, \quad i, j \in \{1, \dots, n\}.$$

Sabemos da análise matemática (Teorema de Schwarz) que se $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tem segundas derivadas parciais contínuas em $\bar{x}$, então

$$\frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_i}$$

para todo o $i, j \in \{1, \dots, n\}$, isto é, a matriz Hessiana $H(\bar{x})$ é simétrica.

1.4 Matrizes definidas positivas, semidefinidas positivas e indefinidas

Relembramos agora alguns conceitos de Álgebra Linear.

Definição 1.15. Uma matriz M $n \times n$ diz-se:

- definida positiva se $x^T M x > 0$ para todo o $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$;
- semidefinida positiva se $x^T M x \geq 0$ para todo o $x \in \mathbb{R}^n$;
- indefinida se existirem $x, y \in \mathbb{R}^n$ para os quais $x^T M x > 0$ e $y^T M y < 0$.

Notação 1.16. Dizemos que M é SDP se M for simétrica e definida positiva; que M é SSDP se M for simétrica e semidefinida positiva.

O facto de uma matriz ser SDP não significa que as suas componentes sejam positivas. No Exemplo 1.17 vemos que uma matriz SDP pode ter componentes negativas.

Exemplo 1.17. Seja $M = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$. Reparar que $M = M^T$, i.e., M é simétrica. Para qualquer $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$,

$$x^T M x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 2x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 = x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 \geq 0.$$

Por conseguinte, M é SSDP. Na verdade, uma vez que $x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 = 0$ se, e somente se, $x_1 = x_2 = 0$, a matriz M é SDP.

O próximo exemplo mostra que o facto de uma matriz simétrica ter entradas todas positivas não significa que ela seja SDP.

Exemplo 1.18. Seja $M = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$. Esta matriz simétrica, cujas componentes são todas positivas, não é SDP. Por exemplo, para $x = (1, -1)$, temos

$$x^T M x = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = -2.$$

Os valores próprios de uma matriz simétrica são reais. Se uma matriz M for SDP, então todos os seus valores próprios λ_i são positivos; se M for SSDP, então todos os seus valores próprios λ_i são não negativos.

O *Crítério de Sylvester* dá-nos uma condição necessária e suficiente para determinar quando uma matriz simétrica é definida positiva ou uma matriz simétrica é semidefinida positiva.

Critério de Sylvester. *Seja M uma matriz simétrica. Então:*

- *M é SDP se, e somente se, todos os menores principais forem positivos;*
- *M é SSDP se, e somente se, todos os menores principais forem não negativos.*

1.5 Existência de minimizantes

As principais questões associadas a um problema de otimização são:

- existência de solução;
- caracterização dos minimizantes;
- algoritmos para a determinação dos minimizantes.

Ao longo do nosso curso abordaremos com detalhe os dois últimos pontos. Vejamos aqui alguns exemplos simples de problemas de minimização que permitem ilustrar as questões que surgem no primeiro tópico.

O Exemplo 1.19 mostra que um dos ingredientes importantes para assegurarmos existência de minimizante é a região admissível ser limitada.

Exemplo 1.19. Considere-se o seguinte problema (P) :

$$\begin{array}{ll} \min & \frac{1}{x} \\ \text{s.a.} & x \geq 1. \end{array}$$

Este problema não admite minimizante e mínimo porque f é uma função decrescente e a região admissível não é limitada superiormente ($\inf f(x) = 0$).

O Exemplo 1.20 mostra que se a região admissível for limitada mas não for fechada, em geral não existe mínimo.

Exemplo 1.20. Considere-se o seguinte problema (P) :

$$\begin{array}{ll} \min & \frac{1}{x} \\ \text{s.a.} & 1 \leq x < 2. \end{array}$$

Este problema não admite minimizante e mínimo porque f é uma função decrescente e o ponto 2 não é admissível ($\inf f(x) = \frac{1}{2}$).

O nosso terceiro exemplo mostra que mesmo que a região admissível seja limitada e fechada, um problema de otimização pode não admitir solução caso f não seja suficientemente suave.

Exemplo 1.21. Considere-se agora o seguinte problema (P) :

$$\begin{array}{ll} \min f(x) \\ \text{s.a.} & 1 \leq x \leq 2, \end{array}$$

onde

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{x} & \text{se } x < 2, \\ 1 & \text{se } x = 2. \end{cases}$$

Este problema não admite minimizante devido à descontinuidade de f em $x = 2$.

Terminamos o Capítulo 1 de preliminares/revisões, lembrando duas formas do teorema de Weierstrass (uma para sucessões, a outra para funções). O Teorema de Weierstrass (Teorema 1.23) reúne os ingredientes identificados nos nossos exemplos como sendo importantes para se garantir a existência de minimizante.

Teorema 1.22 (Teorema de Weierstrass para sucessões). *Seja $\{x_k\}$, $k \rightarrow \infty$, uma sucessão de pontos num compacto (i.e., num conjunto fechado e limitado) A . Então existe uma subsucessão $\{x_{k_j}\}$ de $\{x_k\}$ que converge para um ponto em A .*

Teorema 1.23 (Teorema de Weierstrass para funções). *Seja f uma função contínua de valor real, definida num conjunto compacto $A \subset \mathbb{R}^n$ não vazio. Então A contém um minimizante (global) de f no conjunto A .*

Observação 1.24. *As hipóteses do Teorema de Weierstrass (Teorema 1.23) podem ser algo relaxadas. Por exemplo, podemos assumir:*

- *que o conjunto $\{x \in A : f(x) \leq f(x')\}$ é compacto para algum $x' \in A$ (em vez de assumirmos que A é compacto);*
- *que f é semi-contínua inferior, i.e., para toda a constante c , o conjunto $\{x \in A : f(x) \leq c\}$ é fechado (em vez de assumirmos que f é contínua).*

Parte I

Problemas de otimização sem restrições

Capítulo 2

Condições de otimalidade

O nosso problema neste capítulo é então:

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \\ \text{s.a. } x \in X, & (P) \end{array}$$

onde $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $X \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto.

Uma afirmação do tipo

“Se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) , então $\bar{x}$ satisfaz ...”

é uma *condição necessária* de otimalidade local. Tal condição ajuda-nos a identificar todos os candidatos a minimizante local. Se a condição necessária envolver derivadas até à ordem n , dizemos que é uma condição necessária de ordem n .

Já uma *condição suficiente* é uma afirmação da seguinte forma:

“Se $\bar{x}$ satisfaz ..., então $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) .”

Tal condição permite-nos automaticamente concluir que $\bar{x}$ é de facto um minimizante local.

Neste capítulo estudamos condições necessárias e suficientes de otimalidade para (P) .

2.1 Direção descendente

Um conceito importante no nosso curso é o de *direção descendente*.

Definição 2.1. A direção $\bar{d}$ diz-se uma direção descendente de f em $\bar{x}$ se

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

para todo o $\varepsilon > 0$ suficientemente pequeno.

O próximo resultado permite identificar uma direção descendente de f em $\bar{x}$ à custa do gradiente de f em $\bar{x}$.

Teorema 2.2. Suponhamos que f é diferenciável em $\bar{x}$. Se existe um vetor d tal que $\nabla f(\bar{x})^T d < 0$, então $f(\bar{x} + \lambda d) < f(\bar{x})$ para todo o $\lambda > 0$ suficientemente pequeno, i.e., d é uma direção descendente de f em $\bar{x}$.

Demonstração. Temos que

$$f(\bar{x} + \lambda d) = f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\bar{x})^T d + \lambda \|d\| \alpha(\bar{x}, \lambda d), \quad (2.1)$$

onde $\alpha(\bar{x}, \lambda d) \rightarrow 0$ quando $\lambda \rightarrow 0$. A igualdade (2.1) pode ser escrita na seguinte forma:

$$\frac{f(\bar{x} + \lambda d) - f(\bar{x})}{\lambda} = \nabla f(\bar{x})^T d + \|d\| \alpha(\bar{x}, \lambda d).$$

Como $\nabla f(\bar{x})^T d < 0$ e $\alpha(\bar{x}, \lambda d) \rightarrow 0$ à medida que $\lambda \rightarrow 0$, concluímos que $f(\bar{x} + \lambda d) - f(\bar{x}) < 0$ para todo o $\lambda > 0$ suficientemente pequeno. $\square$

2.2 Condição necessária de primeira ordem

Como corolário do Teorema 2.2, demonstramos de seguida uma condição necessária de primeira ordem, conhecida na literatura como *Teorema de Fermat*. A demonstração, tal como outras ao longo do nosso curso, é feita por contra-positição. Relembremos este resultado da Lógica (*modus tollens*, do Latim “modo que nega”):

“Demonstrar que p implica q é equivalente a demonstrar a sua contrapositiva, i.e., que não q implica não p .”

Teorema 2.3. Suponhamos que f é diferenciável em $\bar{x}$. Se $\bar{x}$ é um minimizante local, então $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

Demonstração. Se $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$, então resulta do Teorema 2.2 que $d = -\nabla f(\bar{x})$ é uma direção descendente. Logo, por definição de direção descendente, $\bar{x}$ não é minimizante local. $\square$

Definição 2.4. *Seja $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida num conjunto $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$. Suponhamos que $\bar{x} \in \text{int}(\mathcal{D})$ e que f é diferenciável numa vizinhança de $\bar{x}$. Então $\bar{x}$ é chamado ponto crítico de f se $\nabla f(\bar{x}) = 0$.*

O Teorema de Fermat (Teorema 2.3) afirma que os minimizantes locais de (P) são necessariamente pontos críticos.

Exemplo 2.5. Consideremos o problema de minimização (P) com $X = \mathbb{R}^2$ e

$$f(x) = f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 - 4x_2 - x_2^3.$$

Neste caso

$$\nabla f(x) = (x_1 + x_2 - 4, x_1 + 4x_2 - 4 - 3x_2^2).$$

Usando o Teorema 2.3, resolvemos o sistema $\nabla f(x) = 0$ de duas equações a duas incógnitas, obtendo dois candidatos a solução do problema: $\bar{x} = (4, 0)$ e $\tilde{x} = (3, 1)$ são pontos críticos.

2.3 Condição necessária de segunda ordem

O teorema que se segue, estabelece uma condição necessária de otimalidade de segunda ordem.

Teorema 2.6. *Suponhamos que f é duas vezes diferenciável em $\bar{x} \in X$. Se $\bar{x}$ é um minimizante local, então $\nabla f(\bar{x}) = 0$ e $H(\bar{x})$ é semidefinida positiva.*

Demonstração. Da condição necessária de primeira ordem, sabemos que $\bar{x}$ ser minimizante local implica $\nabla f(\bar{x}) = 0$. Falta demonstrar que se $\bar{x}$ for minimizante local, então $H(\bar{x}) \geq 0$ (i.e., $H(\bar{x})$ é semidefinida positiva). Fazemos a demonstração por contraposição: vamos mostrar que se $H(\bar{x})$ não for semidefinida positiva, então $\bar{x}$ não pode ser minimizante local. Com efeito, se $H(\bar{x})$ não é semidefinida positiva, então existe um vetor d tal que $d^T H(\bar{x})d < 0$. Logo,

$$\begin{aligned} f(\bar{x} + \lambda d) &= f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\bar{x})^T d + \frac{1}{2} \lambda^2 d^T H(\bar{x})d + \lambda^2 \|d\|^2 \alpha(\bar{x}, \lambda d) \\ &= f(\bar{x}) + \frac{1}{2} \lambda^2 d^T H(\bar{x})d + \lambda^2 \|d\|^2 \alpha(\bar{x}, \lambda d), \end{aligned}$$

onde $\alpha(\bar{x}, \lambda d) \rightarrow 0$ à medida que $\lambda \rightarrow 0$. De modo equivalente,

$$\frac{f(\bar{x} + \lambda d) - f(\bar{x})}{\lambda^2} = \frac{1}{2} d^T H(\bar{x})d + \|d\|^2 \alpha(\bar{x}, \lambda d).$$

Uma vez que $d^T H(\bar{x})d < 0$ e $\alpha(\bar{x}, \lambda d) \rightarrow 0$ quando $\lambda \rightarrow 0$, concluímos que $f(\bar{x} + \lambda d) - f(\bar{x}) < 0$ para todo $\lambda > 0$ suficientemente pequeno, i.e., $\bar{x}$ não é minimizante local. $\square$

Exemplo 2.7. Continuemos a análise do problema do Exemplo 2.5 à luz do Teorema 2.6. A matriz Hessiana é dada por

$$H(x) = H(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 - 6x_2 \end{bmatrix},$$

pelo que nos candidatos a minimizante $\bar{x} = (4, 0)$ e $\tilde{x} = (3, 1)$ obtemos:

$$H(\bar{x}) = H(4, 0) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}, \quad H(\tilde{x}) = H(3, 1) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

Reparar que a matriz Hessiana $H(x)$ é simétrica para qualquer $x \in \mathbb{R}^2$ (é sempre assim para funções $f \in C^2$, de acordo com o Teorema de Schwarz). Os menores principais da matriz $H(\bar{x})$ são 1 e 3, ambos valores não negativos, pelo que a matriz Hessiana em $\bar{x}$ é, de acordo com o Critério de Sylvester, uma matriz SSDP. Já os menores principais da matriz Hessiana $H(\tilde{x})$ são 1 e -3, pelo que a matriz é indefinida. Concluimos da condição necessária de otimalidade de segunda ordem (Teorema 2.6) que apenas $\bar{x} = (4, 0)$ é candidato a minimizante local do problema.

2.4 Condições suficientes

Se $\nabla f(\bar{x}) = 0$ e $H(\bar{x})$ é semidefinida positiva, não podemos ter a certeza se $\bar{x}$ é minimizante local: o Teorema 2.6, sendo apenas uma condição necessária de otimalidade, não permite concluir que os candidatos encontrados são de facto minimizantes. Reparar que o conjunto admissível para o problema considerado nos Exemplos 2.5 e 2.7 não é limitado: $\mathcal{A} = \mathbb{R}^2$. Por este motivo, a existência de solução não é assegurada pelo Teorema de Weierstrass (Teorema 1.23) e, mesmo havendo, após a análise feita no Exemplo 2.7, um único candidato a minimizante, não podemos concluir, com a teoria dada até ao momento, que $\bar{x}$ é minimizante. Para tal conclusão podemos tentar recorrer a uma condição suficiente de otimalidade, como a do nosso próximo resultado.

Teorema 2.8. *Suponhamos que f é duas vezes diferenciável em $\bar{x} \in X$. Se $\nabla f(\bar{x}) = 0$ e $H(\bar{x})$ é definida positiva, então $\bar{x}$ é um minimizante local estrito.*

Demonstração. Como $\nabla f(\bar{x}) = 0$, vem que

$$f(x) = f(\bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x})^T H(\bar{x})(x - \bar{x}) + \|x - \bar{x}\|^2 \alpha(\bar{x}, x - \bar{x}). \quad (2.2)$$

A partir desta igualdade, queremos demonstrar que se $H(\bar{x}) > 0$ (i.e., $H(\bar{x})$ é definida positiva), então $\bar{x}$ é um minimizante local estrito. Demonstramos este facto por contraposição: vamos mostrar que se $\bar{x}$ não é minimizante local estrito, então $H(\bar{x})$ não é definida positiva. Se $\bar{x}$ não é minimizante local estrito, então

existe uma sucessão $\{x_k\}$ tal que $x_k \rightarrow \bar{x}$, $x_k \neq \bar{x}$, e $f(x_k) \leq f(\bar{x})$ para todo o k . Seja $d_k = \frac{x_k - \bar{x}}{\|x_k - \bar{x}\|}$. Então, segue-se de (2.2), que

$$f(x_k) = f(\bar{x}) + \|x_k - \bar{x}\|^2 \left(\frac{1}{2} d_k^T H(\bar{x}) d_k + \alpha(\bar{x}, x_k - \bar{x}) \right)$$

e, por conseguinte,

$$\frac{1}{2} d_k^T H(\bar{x}) d_k + \alpha(\bar{x}, x_k - \bar{x}) = \frac{f(x_k) - f(\bar{x})}{\|x_k - \bar{x}\|^2} \leq 0.$$

Uma vez que $\|d_k\| = 1$ para todo o k , existe uma subsucessão de $\{d_k\}$ convergente para algum d tal que $\|d\| = 1$. Sem perda de generalidade, assumamos que $d_k \rightarrow d$. Então

$$0 \geq \lim_{k \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{2} d_k^T H(\bar{x}) d_k + \alpha(\bar{x}, x_k - \bar{x}) \right] = \frac{1}{2} d^T H(\bar{x}) d,$$

ou seja, $H(\bar{x})$ não é definida positiva. $\square$

Estamos agora em condições de terminar a análise do problema considerado nos Exemplos 2.5 e 2.7.

Exemplo 2.9. Da análise já feita no Exemplo 2.7, sabemos que

$$H(\bar{x}) = H(4, 0) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$$

é SDP. Concluimos que $\bar{x}$ satisfaz a condição suficiente de otimalidade (satisfaz o Teorema 2.8) pelo que $\bar{x} = (4, 0)$ é minimizante local estrito do problema

$$\min \left[\frac{1}{2} x_1^2 + x_1 x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 - 4x_2 - x_2^3 \right], \quad (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2. \quad (2.3)$$

Notar que condição suficiente (Teorema 2.8) implica a propriedade mais forte de minimizante local estrito. Contudo, o facto da matriz Hessiana ser definida positiva não é uma condição necessária para minimizante local estrito. Por exemplo, a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x^4$ tem um minimizante local estrito em $x = 0$ mas $f''(0)$ não é positivo. Outro conceito importante é o de *ponto de sela*.

Definição 2.10. Suponhamos que $f \in C^1(X; \mathbb{R})$. Um ponto crítico $\bar{x}$ é chamado de ponto de sela de f em X se não é nem minimizante local nem maximizante local de f em X .

O próximo resultado dá-nos uma condição suficiente, em termos das propriedades da Hessiana, para um ponto crítico ser ponto de sela.

Teorema 2.11. *Suponhamos que $f \in C^2(X; \mathbb{R})$ e seja $\bar{x}$ um ponto crítico. Se $H(\bar{x})$ é indefinida, então $\bar{x}$ é ponto de sela de f em X .*

Demonstração. Uma vez que $H(\bar{x})$ é indefinida, existe pelo menos um vetor v e um vetor w tais que $v^T H(\bar{x})v > 0$ e $w^T H(\bar{x})w < 0$. Relembrando que $\nabla f(\bar{x}) = 0$, podemos então escrever

$$f(\bar{x} + \lambda d) = f(\bar{x}) + \frac{\lambda^2}{2} d^T H(\bar{x})d + \lambda^2 \|d\|^2 \alpha(\bar{x}, \lambda d).$$

Escolhamos $d = v$. Para λ suficientemente pequeno, $f(\bar{x} + \lambda v) - f(\bar{x}) > 0$, o que mostra que $\bar{x}$ não é maximizante local. De modo semelhante, escolhendo $d = w$, concluímos que para λ suficientemente pequeno $f(\bar{x} + \lambda w) - f(\bar{x}) < 0$, pelo que $\bar{x}$ também não é minimizante local. $\square$

Exemplo 2.12. No Exemplo 2.7,

$$H(3, 1) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}$$

é uma matriz indefinida. Concluímos do Teorema 2.11 que $(3, 1)$ é um ponto de sela (não é nem minimizante nem maximizante do problema).

Terminamos esta secção com mais dois exemplos ilustrativos dos resultados já demonstrados.

Exemplo 2.13. Considere-se o seguinte problema:

$$\min [x_1^3 + x_2^2], \quad (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2. \quad (2.4)$$

Para este problema temos:

$$f(x) = x_1^3 + x_2^2, \quad \nabla f(x) = (3x_1^2, 2x_2), \quad H(x) = \begin{bmatrix} 6x_1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

O sistema $\nabla f(x) = 0$ dá-nos um único candidato a minimizante: $\bar{x} = (0, 0)$. Para $\bar{x} = (0, 0)$ temos a matriz Hessiana

$$H(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

que é SSDP, satisfazendo por isso a condição necessária de otimalidade de segunda ordem (satisfaz o Teorema 2.6). No entanto $H(\bar{x})$ não é SDP e nada podemos concluir da condição suficiente de otimalidade (o Teorema 2.8 nada nos permite concluir aqui). Uma análise simples permite-nos no entanto concluir que $\bar{x} = (0, 0)$ não é minimizante local: uma vez que $f(-\varepsilon, 0) = -\varepsilon^3 < 0 = f(0, 0) = f(\bar{x})$ para $\varepsilon > 0$, $\bar{x} = (0, 0)$ não é minimizante local. Desta análise podemos também concluir que o problema (2.4) não admite minimizante (se existisse teria de ser o $\bar{x} = (0, 0)$). De facto, $\inf_{x \in \mathbb{R}^2} f(x) = -\infty$: $\lim_{\eta \rightarrow +\infty} f(-\eta, 0) = -\infty$.

Exemplo 2.14. Considere-se agora o seguinte problema:

$$\min [x_1^4 + x_2^2], \quad (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2. \quad (2.5)$$

Para o problema (2.5), temos:

$$f(x) = x_1^4 + x_2^2, \quad \nabla f(x) = (4x_1^3, 2x_2), \quad H(x) = \begin{bmatrix} 12x_1^2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

O sistema $\nabla f(x) = 0$ dá-nos um único candidato a minimizante: $\bar{x} = (0, 0)$. Para $\bar{x} = (0, 0)$ temos, de modo semelhante ao Exemplo 2.13, a matriz Hessiana

$$H(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

que é SSDP e satisfaz por isso a condição necessária de otimalidade de segunda ordem. Como sabemos, $H(\bar{x})$ não é SDP e nada podemos concluir da condição suficiente de otimalidade. No entanto, em contraste com o Exemplo 2.13, o candidato $\bar{x} = (0, 0)$ é de facto minimizante (local e global) do problema (2.5), uma vez que $f(x) \geq 0 = f(0, 0) = f(\bar{x})$.

2.5 Problemas quadráticos

Um problema de otimização quadrático é um problema da seguinte forma:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left[\frac{1}{2} x^T Q x + c^T x \right]. \quad (PQ)$$

Problemas da forma (PQ) aparecem numa grande variedade de contextos. Vejamos dois exemplos.

Exemplo 2.15. Consideremos o problema de determinar uma solução aproximada de um sistema linear $Ax = b$ sobredeterminado, i.e., um sistema em que A é uma matriz $m \times n$ com $m > n$. Notar que se assumirmos que a característica de A é n , então o sistema $Ax = b$ é em geral inconsistente (i.e., não tem solução) e o problema que se coloca é encontrar o vetor $r = Ax - b$, chamado *vetor resíduo*, solução do problema de minimização

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|^2, \quad (2.6)$$

onde $\|v\|$ denota a norma Euclidiana do vetor v , i.e., $\|v\| := \sqrt{v^T v}$. Um cálculo simples mostra que

$$\|Ax - b\|^2 = x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b,$$

pelo que (2.6) é equivalente a $\min_{x \in \mathbb{R}^n} [x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b]$. Uma vez que $b^T b$ é uma constante e adicionar uma constante a um problema de minimização

não muda em nada o seu minimizante (muda, obviamente, o mínimo), obtemos o problema de otimização quadrático

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} [x^T A^T A x - 2b^T A x], \quad (2.7)$$

ou seja, um problema (PQ) com $Q = 2A^T A$ e $c = -2A^T b$. Ao vetor solução deste problema chamamos a solução dos *mínimos quadrados* do sistema $Ax = b$. Para um exemplo concreto, veja-se o Exemplo 2.19.

Exemplo 2.16. Consideremos o problema genérico de otimização

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), \quad (\text{PG})$$

onde f é uma função complicada mas analítica (i.e., uma função que pode ser localmente expandida em série de Taylor). Em muitas aplicações, em vez de se minimizar a função f , que é suficientemente complicada, opta-se por construir um modelo quadrático local para f num determinado ponto $x = \bar{x}$. A ideia é simples: aproximamos a função f pela expansão de Taylor de $f(x)$ em $x = \bar{x}$ de ordem dois e, em vez de resolvermos (PG), consideramos o problema aproximado

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \tilde{f}(x) := f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) + \frac{1}{2} (x - \bar{x})^T H(\bar{x}) (x - \bar{x}). \quad (2.8)$$

Atendendo a que $f(\bar{x})$ é uma constante, o problema (2.8) reduz-se a um problema quadrático (PQ) com $Q = H(\bar{x})$ e $c = \nabla f(\bar{x})$:

$$\min_{y \in \mathbb{R}^n} \left[\nabla f(\bar{x})^T y + \frac{1}{2} y^T H(\bar{x}) y \right].$$

Observação 2.17. Nos dois exemplos anteriores, a matriz Q é simétrica. De facto, sem perda de generalidade, podemos sempre assumir que num problema quadrático (PQ) a matriz Q é simétrica. Com efeito, uma vez que

$$x^T Q x = \frac{1}{2} x^T (Q + Q^T) x,$$

podemos sempre substituir Q pela matriz simétrica $\bar{Q} = \frac{1}{2} (Q + Q^T)$:

$$x^T Q x = x^T \bar{Q} x.$$

Teorema 2.18. Considere-se o problema de otimização quadrático (PQ) com Q uma matriz SSDP. O vetor x^* é minimizante global do problema se, e somente se, x^* for solução do sistema $Qx + c = 0$.

Demonstração. Seja

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + c^T x. \quad (2.9)$$

É fácil de ver que

$$\nabla f(x) = Qx + c, \quad H(x) = Q.$$

($\Rightarrow$) Se x^* é minimizante global do problema, então pelo Teorema 2.3 (válido para todos os minimizantes locais e, em particular, também para o global) $\nabla f(x^*) = 0$, ou seja, $Qx^* + c = 0$.

($\Leftarrow$) Admitamos agora que

$$Qx^* + c = 0. \quad (2.10)$$

Uma vez que

$$f(x) = f(x^* + (x - x^*))$$

para todo o $x \in \mathbb{R}^n$, podemos escrever, por definição (2.9) de f , que

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2} (x^* + (x - x^*))^T Q (x^* + (x - x^*)) + c^T (x^* + (x - x^*)) \\ &= \left[\frac{1}{2} (x^*)^T + \frac{1}{2} (x - x^*)^T \right] [Qx^* + Q(x - x^*)] + c^T x^* + c^T (x - x^*). \end{aligned}$$

Usando o facto de Q ser simétrica, i.e., $Q = Q^T$, obtemos a igualdade

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2} (x^*)^T Qx^* + (x - x^*)^T Qx^* + \frac{1}{2} (x - x^*)^T Q(x - x^*) + c^T x^* + c^T (x - x^*) \\ &= \frac{1}{2} (x^*)^T Qx^* + (x - x^*)^T (Qx^* + c) + \frac{1}{2} (x - x^*)^T Q(x - x^*) + c^T x^*. \end{aligned}$$

Usando a hipótese (2.10), concluímos que

$$f(x) = \frac{1}{2} (x^*)^T Qx^* + c^T x^* + \frac{1}{2} (x - x^*)^T Q(x - x^*)$$

o que, pela definição (2.9) de f , nos permite escrever

$$f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2} (x - x^*)^T Q(x - x^*). \quad (2.11)$$

Uma vez que Q é semidefinida positiva, resulta de (2.11) que

$$f(x) \geq f(x^*),$$

ou seja, x^* é minimizante global de f em $\mathbb{R}^n$. $\square$

Exemplo 2.19. Considere-se o seguinte sistema linear $Ax = b$ inconsistente ($m = 3$ equações, $n = 2$ incógnitas e característica de A é igual a 2):

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 = 0 \\ 2x_1 + x_2 = 1 \\ 3x_1 + 2x_2 = 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

O problema dos mínimos quadrados é então

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|^2 \Leftrightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^2} [(Ax - b)^T (Ax - b)] \Leftrightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^2} [x^T A^T Ax - 2b^T Ax].$$

Neste caso,

$$Q = 2A^T A = \begin{bmatrix} 28 & 20 \\ 20 & 18 \end{bmatrix}, \quad c = -2A^T b = \begin{bmatrix} -10 \\ -6 \end{bmatrix}.$$

Como Q é uma matriz SSDP, o Teorema 2.18 afirma que a solução do sistema $Qx + c = 0$, isto é,

$$(x_1, x_2) = \left(\frac{15}{26}, -\frac{4}{13} \right), \quad (2.12)$$

é minimizante global do problema. Em Matlab/Octave [13, 14], é muito fácil encontrar a solução dos mínimos quadrados: encontramos o minimizante global (2.12) para o nosso problema usando o *script*

```

% -----
% GNU Octave
% -----
clear, clc;
A = [1 2; 2 1; 3 2];
b = [0; 1; 1];
format rat; % formato "numeros racionais"
x = A \ b

```

que nos dá

```

x =
    15/26
   -4/13

```

O Teorema 2.18 afirma que para problemas quadráticos com Q uma matriz SSDP, a condição necessária de primeira ordem $\nabla f(x) = 0$ (Teorema 2.3) é, na verdade, uma condição necessária e suficiente de otimalidade global! Este resultado é de grande relevância prática e leva-nos à questão de saber se tal propriedade pode ser alargada a uma classe mais vasta de problemas. A resposta é positiva: como mostramos na próxima secção, ela é válida para todos os *problemas convexos* (Teorema 2.36). O problema quadrático (PQ) com Q uma matriz SSDP é apenas um caso particular de um problema convexo (Corolário 2.35).

2.6 Convexidade e minimização

O conceito de convexidade desempenha um papel muito importante em matemática e, em particular, em otimização.

Definição 2.20. *Sejam $x, y \in \mathbb{R}^n$. Os pontos da forma $\lambda x + (1 - \lambda)y$ para $\lambda \in [0, 1]$ são chamados combinações convexas de x e y .*

Definição 2.21. *Um conjunto $S \subseteq \mathbb{R}^n$ diz-se um conjunto convexo se para todo o $x, y \in S$ e para todo o $\lambda \in [0, 1]$ se tem que $\lambda x + (1 - \lambda)y \in S$.*

Exemplo 2.22. Seja $X = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_2 > 0\}$ e $x, y \in X$, i.e., $x = (x_1, x_2)$ e $y = (y_1, y_2)$ com $x_2 > 0$ e $y_2 > 0$. Para $\lambda \in [0, 1]$, a combinação convexa

$$\lambda x + (1 - \lambda)y = (\lambda x_1 + (1 - \lambda)y_1, \lambda x_2 + (1 - \lambda)y_2)$$

pertence a X pois $\lambda x_2 + (1 - \lambda)y_2 > 0$. Concluimos que X é um conjunto convexo.

Definição 2.23. *Seja S um conjunto convexo não vazio. Uma função $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ diz-se uma função convexa se*

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \quad (2.13)$$

para todo $x, y \in S$ e para todo $\lambda \in [0, 1]$.

Exemplo 2.24 (Convexidade das funções afins). Seja $f(x) = a^T x + b$, onde $a \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$. Sejam $x, y \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in [0, 1]$ arbitrários. Então,

$$\begin{aligned} f(\lambda x + (1 - \lambda)y) &= a^T (\lambda x + (1 - \lambda)y) + b \\ &= \lambda(a^T x + b) + (1 - \lambda)(a^T y + b) \\ &= \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y). \end{aligned}$$

Por conseguinte, $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$ e concluimos que f é uma função convexa.

Observação 2.25. *Se f é uma função afim, então $-f$ é também afim. O Exemplo 2.24 mostra que as funções afins são simultaneamente convexas e côncavas.*

Exemplo 2.26 (Convexidade das normas). Seja $\|\cdot\|$ uma norma em $\mathbb{R}^n$. Vamos mostrar que $f(x) = \|x\|$ é uma função convexa. Com efeito, sejam $x, y \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in [0, 1]$. Então, pela desigualdade triangular,

$$\begin{aligned} f(\lambda x + (1 - \lambda)y) &= \|\lambda x + (1 - \lambda)y\| \\ &\leq \|\lambda x\| + \|(1 - \lambda)y\| \\ &= \lambda \|x\| + (1 - \lambda) \|y\| \\ &= \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y), \end{aligned}$$

o que mostra que f é convexa.

Definição 2.27. *Uma função como na Definição 2.23 diz-se uma função estritamente convexa se a desigualdade em (2.13) for satisfeita de modo estrito para todo $x \neq y$ e $\lambda \in]0, 1[$.*

Estamos agora em condições de definir problema convexo.

Definição 2.28. *Um problema de otimização*

$$\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s.a.} & x \in X \end{aligned} \quad (PC)$$

diz-se um problema convexo se $X \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo e $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função convexa.

Teorema 2.29. *Se $\bar{x}$ é um minimizante local do problema convexo (PC), então $\bar{x}$ é um minimizante global de (PC).*

Demonstração. Demonstramos este facto por contraposição. Suponhamos que $\bar{x}$ não é um minimizante global, i.e., existe um $y \in X$ para o qual $f(y) < f(\bar{x})$. Seja $y(\lambda) := \lambda\bar{x} + (1-\lambda)y$, que é uma combinação convexa de $\bar{x}$ e y para $\lambda \in [0, 1]$ (e, por conseguinte, $y(\lambda)$ é admissível para $\lambda \in [0, 1]$, i.e., $y(\lambda) \in X$). Note-se que $y(\lambda) \rightarrow \bar{x}$ à medida que $\lambda \rightarrow 1$. Da convexidade de f , resulta que

$$f(y(\lambda)) = f(\lambda\bar{x} + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda)f(y) < \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda)f(\bar{x}) = f(\bar{x})$$

para todo o $\lambda \in]0, 1[$. Uma vez que $f(y(\lambda)) < f(\bar{x})$ para todo o $\lambda \in]0, 1[$, $\bar{x}$ não é um minimizante local. $\square$

Teorema 2.30 (Desigualdade do gradiente). *Seja X um conjunto convexo aberto não vazio e $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Então f é uma função convexa se, e somente se, f satisfaz a seguinte desigualdade do gradiente:*

$$f(x) - f(y) \leq \nabla f(x)^T(x - y) \quad (2.14)$$

para todo o $x, y \in X$.

Demonstração. ($\Rightarrow$) Suponhamos que f é convexa. Para todo o $\lambda \in]0, 1]$ podemos então escrever que

$$\begin{aligned} f(\lambda y + (1-\lambda)x) &\leq \lambda f(y) + (1-\lambda)f(x) \\ \Leftrightarrow \frac{f(\lambda y + (1-\lambda)x) - f(x)}{\lambda} &\leq f(y) - f(x), \end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{f(x + \lambda(y - x)) - f(x)}{\lambda} \leq f(y) - f(x).$$

Tomando o limite quando $\lambda \rightarrow 0$, obtemos que a derivada direcional de f em x na direção $(y - x)$ (ver Definição 1.13) é menor ou igual a $f(y) - f(x)$:

$$\nabla f(x)^T(y - x) \leq f(y) - f(x).$$

($\Leftarrow$) Admitamos agora que se verifica a desigualdade do gradiente (2.14) para todo o $x, y \in X$. Sejam w e z dois quaisquer pontos em X e $\lambda \in [0, 1]$. Fazemos $x = \lambda w + (1-\lambda)z$. Então

$$f(x) - f(w) \leq \nabla f(x)^T(x - w), \quad f(x) - f(z) \leq \nabla f(x)^T(x - z)$$

ou, de modo equivalente,

$$f(w) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(w - x), \quad f(z) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(z - x). \quad (2.15)$$

Fazendo uma combinação convexa das desigualdades (2.15), obtemos que

$$\begin{aligned}\lambda f(w) + (1 - \lambda)f(z) &\geq f(x) + \nabla f(x)^T [\lambda(w - x) + (1 - \lambda)(z - x)] \\ &= f(x) + \nabla f(x)^T 0 \\ &= f(\lambda w + (1 - \lambda)z),\end{aligned}$$

o que demonstra que f é convexa. $\square$

Exemplo 2.31. Vamos mostrar que $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ é uma função convexa. Para isso, recorreremos à desigualdade do gradiente (Teorema 2.30):

$$f \text{ convexa} \Leftrightarrow f(x) - f(y) \leq \nabla f(x)^T (x - y),$$

o que neste caso toma a forma

$$\begin{aligned}x_1^2 + x_2^2 - y_1^2 - y_2^2 &\leq \begin{bmatrix} 2x_1 & 2x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - y_1 \\ x_2 - y_2 \end{bmatrix} \\ &= 2x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1y_1 - 2x_2y_2\end{aligned}$$

ou, de modo equivalente,

$$x_1^2 + x_2^2 + y_1^2 + y_2^2 - 2x_1y_1 - 2x_2y_2 \geq 0 \Leftrightarrow (x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 \geq 0. \quad (2.16)$$

Como (2.16) é verdadeira para todo o $x = (x_1, x_2)$ e $y = (y_1, y_2)$ em $\mathbb{R}^2$, concluímos que f é convexa.

Exemplo 2.32. Mostramos agora que $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$ não é uma função convexa. Com efeito, se f fosse convexa, então pela desigualdade do gradiente (2.14) teríamos

$$f(x_1, x_2) - f(y_1, y_2) \leq \begin{bmatrix} 2x_1 & -2x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - y_1 \\ x_2 - y_2 \end{bmatrix},$$

ou seja,

$$\begin{aligned}x_1^2 - x_2^2 - (y_1^2 - y_2^2) &\leq 2x_1^2 - 2x_1y_1 - 2x_2^2 + 2x_2y_2 \\ &\Leftrightarrow (x_1 - y_1)^2 - (x_2 - y_2)^2 \geq 0. \quad (2.17)\end{aligned}$$

A desigualdade (2.17) não é, obviamente, válida (por exemplo, ela é falsa para $x_1 = y_1 = 0$, $x_2 = 2$ e $y_2 = 1$). Concluímos pelo Teorema 2.30 que f não é convexa.

Teorema 2.33. *Seja X um conjunto convexo aberto não vazio e $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável. Então f é uma função convexa se, e somente se, a matriz Hessiana $H(x)$ de f é semidefinida positiva para todo o $x \in X$.*

Demonstração. ($\Rightarrow$) Suponhamos que f é convexa. Seja $\bar{x} \in X$ e d uma qualquer direção. Então para $\lambda > 0$ suficientemente pequeno, $\bar{x} + \lambda d \in X$. Temos que

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

onde $\alpha(\bar{x}, y) \rightarrow 0$ à medida que $y \rightarrow 0$. Usando a desigualdade do gradiente

$$f(\bar{x}) - f(\bar{x} + \lambda d) \leq \nabla f(\bar{x})^T(-\lambda d) \Leftrightarrow f(\bar{x} + \lambda d) - f(\bar{x}) - \nabla f(\bar{x})^T(\lambda d) \geq 0$$

obtemos que

$$\lambda^2 \left[\frac{1}{2} d^T H(\bar{x}) d + \|d\|^2 \alpha(\bar{x}, \lambda d) \right] \geq 0.$$

Dividindo por $\lambda^2 > 0$ e tomando depois o limite quando $\lambda \rightarrow 0$, concluímos que $d^T H(\bar{x}) d \geq 0$ para qualquer $d \in \mathbb{R}^n$.

($\Leftarrow$) Admitamos agora que $H(x)$ é uma matriz semidefinida positiva para todo o $x \in X$. Sejam $x, y \in X$ arbitrários. O teorema de Taylor diz-nos que

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T H(z)(y - x)$$

para algum z que é uma combinação convexa de x e y (e portanto $z \in X$). Uma vez que $H(z)$ é semidefinida positiva, isto significa que

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

Por conseguinte, a desigualdade do gradiente $f(x) - f(y) \leq \nabla f(x)^T(x - y)$ é satisfeita, resultando do Teorema 2.30 que f é convexa. $\square$

Exemplo 2.34. Seja $f : X \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f(x_1, x_2) = \frac{x_1^2}{x_2}, \quad X = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_2 > 0\}.$$

Sabemos que X é um conjunto convexo (ver Exemplo 2.22). Por outro lado,

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{2x_1}{x_2} \\ -\frac{x_1^2}{x_2^2} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad H(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{2}{x_2} & -\frac{2x_1}{x_2^2} \\ -\frac{2x_1}{x_2^2} & \frac{2x_1^2}{x_2^3} \end{bmatrix}.$$

Os menores principais da matriz Hessiana $H(x_1, x_2)$ são $\frac{2}{x_2}$ e 0 e o Critério de Sylvester diz-nos que $H(x_1, x_2)$ é SSDP em X . Resulta do Teorema 2.33 que $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa.

Como corolário do Teorema 2.33, conclui-se que o problema quadrático (PQ) com Q SSDP é um problema convexo.

Corolário 2.35. *A função $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x$ é uma função convexa se, e somente se, Q é SSDP.*

Demonstração. É uma consequência imediata do Teorema 2.33 tendo em mente que $X = \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo aberto não vazio e $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x$ é uma função duas vezes diferenciável com matriz Hessiana $H(x) = Q$. $\square$

Teorema 2.36. *Consideremos o problema convexo (PC) com f diferenciável. Então $\bar{x} \in X$ é um minimizante global do problema se, e somente se, $\nabla f(\bar{x}) = 0$.*

Demonstração. $(\Rightarrow)$ Se $\bar{x} \in X$ é minimizante global é igualmente um minimizante local e $\nabla f(\bar{x}) = 0$ pela condição necessária de primeira ordem (Teorema 2.3).

$(\Leftarrow)$ Suponhamos que $\nabla f(\bar{x}) = 0$. Então pela desigualdade do gradiente (2.14) temos que

$$f(y) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (y - \bar{x}) = f(\bar{x})$$

para todo o $y \in X$, pelo que $\bar{x}$ é minimizante global. $\square$

Exemplo 2.37. Consideremos o problema

$$\min_{(x_1, x_2) \in X} \left[\frac{1}{2}x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 - 4x_2 - x_2^3 \right] \quad (2.18)$$

com $X = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_2 < \frac{1}{2}\}$.

- a) O conjunto X é convexo (mostre!)
- b) A função é (estritamente) convexa em X (mostre!)
- c) Conclua que $(4, 0)$ é minimizante global (estrito) de (2.18) (justifique!)

2.7 Exercícios

1. Encontre os pontos que satisfazem as condições necessárias de otimalidade para a função

$$f(x) = \frac{x_1 + x_2}{3 + x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2}.$$

Tente estabelecer a natureza dos pontos encontrados por aplicação das condições suficientes de otimalidade.

2. Encontre os minimizantes e os respectivos mínimos da função

$$f(x) = (x_2^2 - x_1)^2$$

de entre todos os pontos que satisfazem as condições necessárias de otimalidade.

3. Considere o problema de minimizar $\|Ax - b\|^2$, onde A é uma matriz $m \times n$ e b é um vetor $m \times 1$.

- (a) Escreva uma condição necessária de otimalidade. A condição que obteve será também uma condição suficiente?
- (b) A solução ótima é única? Justifique.
- (c) Resolva o problema para

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

4. Para cada valor do escalar β , encontre o conjunto de todos os pontos críticos de

$$f(x, y) = x^2 + y^2 + \beta xy + x + 2y.$$

Quais dos pontos críticos são minimizantes globais? (Nota: x^* é um ponto crítico de f se $\nabla f(x^*) = 0$.)

5. Para cada um dos seguintes problemas, justifique sempre a sua resposta por intermédio das condições de otimalidade estudadas.

- (a) Mostre que a função $f(x, y) = (x^2 - 4)^2 + y^2$ tem dois minimizantes globais e um ponto crítico que não é nem minimizante local nem maximizante local (é ponto de sela).
- (b) Encontre todos os minimizantes locais da função

$$f(x, y) = \frac{1}{2}x^2 + x \cos y.$$

- (c) Encontre todos os minimizantes locais e todos os maximizantes locais da função $f(x, y) = \sin x + \sin y + \sin(x + y)$ no conjunto

$$\{(x, y) : 0 < x < 2\pi, 0 < y < 2\pi\}.$$

- (d) Mostre que a função $f(x, y) = (y - x^2)^2 - x^2$ tem apenas um ponto crítico, que não é nem minimizante local nem maximizante local (é ponto de sela).

6. Considere o problema de otimização quadrático (PQ) com Q uma matriz SDP. Mostre que o vetor x^* é minimizante global estrito do problema se, e somente se, x^* for solução do sistema $Qx + c = 0$.

7. Seja $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x$. Mostre que f é uma função estritamente convexa se, e somente se, Q é SDP.
8. Seja X um conjunto convexo e $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função estritamente convexa. Mostre que se $\bar{x}$ é um minimizante local de f em X , então $\bar{x}$ é o único minimizante global de f em X .
9. A função $f(x) = |x|$ é convexa? É estritamente convexa?
10. Mostre que a função de utilidade de Cobb–Douglas dada por

$$u : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(x, y) \mapsto u(x, y) = -x^a y^b,$$

onde $x > 0$, $y > 0$ e $a, b > 0$ com $a + b = 1$, é uma função convexa.

11. Determine o único minimizante global do problema

$$\min_{x \in X} f(x),$$

onde $f(x) = -\ln(1 - x_1 - x_2) - \ln x_1 - \ln x_2$ e $X = \text{Dom}(f)$.

(Solução: $\bar{x} = (\frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ é o único minimizante global do problema).

12. O custo de produção de x unidades do produto X e y unidades do produto Y é igual a $4x^2 + xy + 2y^2$. Assumindo que uma unidade do produto X e uma unidade do produto Y podem ser vendidas, respectivamente, por $p_X = 150 - 5x + y$ e $p_Y = 30 + 2x - 2y$, quantas unidades do produto X e produto Y têm de ser produzidas de modo a maximizar o lucro? (Observação: lucro = dinheiro das vendas – custo de produção).

Capítulo 3

Métodos aproximativos

A resolução explícita de problemas de otimização é normalmente uma tarefa difícil. É por isso importante mostrar como as soluções dos problemas de otimização podem ser aproximadas de modo eficiente.

Muitos dos métodos numéricos para problemas não lineares de programação matemática têm uma natureza iterativa. Tais algoritmos especificam como construir uma nova iteração a partir de uma (ou várias) já conhecidas. Desde modo, constrói-se uma sucessão $\{x^k\}$ de aproximações da solução x do problema.

Vamos estudar dois métodos iterativos,

- o Método de Descida Mais Rápida (MDMR)
- e o Método de Newton (MN),

na resolução do problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$

onde f é suficientemente suave. Estes dois métodos pertencem a uma mesma classe de algoritmos, chamados de *métodos do tipo gradiente*. São métodos de otimização bastante familiares na engenharia, que recorrem às derivadas da função f . Estes métodos são determinísticos, ou seja, chegam sempre à mesma resposta se partirem de uma mesma aproximação inicial x^0 . Eles variam na maneira diferente como escolhem a direção descendente (Definição 2.1).

3.1 O método de descida mais rápida

Este método foi proposto por Cauchy em 1847. Trata-se de um algoritmo para encontrar, a partir de um dado ponto $x^0 \in \mathbb{R}^n$ (aproximação inicial), o minimizante local de $f(x)$ mais próximo de x^0 (no caso geral e em rigor, como

veremos, temos apenas a garantia de encontrar uma aproximação x^k de um ponto crítico, isto é, $\|\nabla f(x^k)\| \approx 0$).

Como o gradiente num ponto aponta na direção de maior crescimento da função nesse ponto, o método de descida mais rápida (MDMR) procura em cada ponto caminhar na direção oposta ao gradiente nesse ponto. Portanto, em cada iteração k , a direção de procura do MDMR é a direção

$$d^k = -\nabla f(x^k) \quad (3.1)$$

de “descida mais rápida”.

O conceito de direção descendente foi introduzido na Definição 2.1. Reparar que, de acordo com o Teorema 2.2, (3.1) é uma direção descendente:

$$\nabla f(x^k)^T d^k = -\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k) = -\|\nabla f(x^k)\|^2 < 0$$

sempre que $\nabla f(x^k) \neq 0$ (se $\nabla f(x^k) = 0$, então x^k é ponto crítico e não precisamos de aplicar o MDMR).

O MDMR é definido pelo seguinte algoritmo iterativo.

Algoritmo 1: método de descida mais rápida (MDMR).

Entrada: Função f , aproximação inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$ e tolerância $\varepsilon > 0$.

Saída: Aproximação x^k com $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$.

1. Inicialização: $k := 0$.
2. Direção de procura: $d^k := -\nabla f(x^k)$.
3. Critério de paragem: se $\|d^k\| \leq \varepsilon$, então stop; senão, continuar.
4. Procura unidimensional do tamanho do passo: resolver o problema

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}} \psi_k(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k).$$

Seja α_k uma aproximação do minimizante de tal problema.

5. Nova aproximação: fazer

$$x^{k+1} := x^k + \alpha_k d^k$$

$$k := k + 1$$

e voltar a 2.

O MDMR é um método bastante simples em termos computacionais e, devido à sua simplicidade, é bastante utilizado. Necessita de pouca informação, exigindo apenas as derivadas de primeira ordem para o cálculo do gradiente. A sua principal desvantagem é que apresenta uma convergência lenta (a questão da convergência será discutida de seguida). Em termos práticos, juntamos ao critério de paragem uma condição sobre o número máximo de iterações.

Exemplo 3.1. Considere-se o seguinte problema:

$$\min_{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2} (x_1 - 1)^2 + (x_1 - 1 - x_2)^2.$$

Em **Matlab**, podemos implementar o MDMR para este problema, partindo da aproximação inicial $(0, 0)$, como se segue:

```
clear, clc
f = @(x1,x2) (x1-1).^2 + (x1-1-x2).^2;
syms x1 x2 alpha;
gf = [diff(f(x1,x2),x1) ; diff(f(x1,x2),x2)];
k = 0;
xk = [0 ; 0];
epsilon = 0.00001;
NumeroMaximoIteracoes = 100;
while k ≤ NumeroMaximoIteracoes
    dk = -subs(subs(gf,x1,xk(1)),x2,xk(2));
    norma = norm(dk,2);
    if norma ≤ epsilon
        [k, xk', dk', norma, NaN, f(xk(1),xk(2))] % mostra valores
        break;
    end;
    tmp = xk + alpha.*dk;
    psi = subs(subs(f,x1,tmp(1)),x2,tmp(2));
    pc = solve(diff(psi,alpha));
    tmp = eval(subs(psi,alpha,pc));
    [C I] = min(tmp);
    alphak = eval(pc(I));
    [k, xk', dk', norma, alphak, f(xk(1),xk(2))] % mostra valores
    xk = xk + alphak .* dk;
    k = k+1;
end;
```

O código acima produz os seguintes resultados:

k	x_1^k	x_2^k	d^k	$\ d^k\ _2$	α_k	$f(x_1^k, x_2^k)$
0	0	0	(4.0000, -2.0000)	4.4721	0.1923	2.0000
1	0.7692	-0.3846	(0.1538, 0.3077)	0.3440	1.2500	0.0769
2	0.9615	0	(0.1538, -0.0769)	0.1720	0.1923	0.0030
3	0.9911	-0.0148	(0.0059, 0.0118)	0.0132	1.2500	0.0001
4	0.9985	0.0000	(0.0059, -0.0030)	0.0066	0.1923	0.0000
5	0.9997	-0.0006	(0.0002, 0.0005)	0.0005	1.2500	0.0000
6	0.9999	-0.0000	(0.0002, -0.0001)	0.0003	0.1923	0.0000
7	1.0000	-0.0000	(0.0000, 0.0000)	0.0000	1.2500	0.0000
8	1.0000	0.0000	(0.0000, -0.0000)	0.0000	NaN	0.0000

Reparar que neste caso temos $f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_1 - 1 - x_2)^2 \geq 0$ para todo o $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ e, como $f(1, 0) = 0$, resulta que $(1, 0)$ é minimizante global do problema.

Teorema 3.2. *Seja $\{x^k\}$ uma sucessão de iteradas, obtidas por aplicação do método de descida mais rápida (MDMR) à minimização da função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Se $d^k = -\nabla f(x^k) \neq 0$, $k \in \mathbb{N}_0$, então $f(x^{k+1}) < f(x^k)$.*

Demonstração. Dado que $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)$, onde α_k é o minimizante da função $\psi_k(\alpha) = f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$, $\alpha \in \mathbb{R}$, conclui-se que

$$f(x^{k+1}) = f(x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)) = \psi_k(\alpha_k) \leq \psi_k(\alpha) \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}. \quad (3.2)$$

Por outro lado, tendo em conta que

$$\psi'_k(\alpha) = -\nabla f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))^T \nabla f(x^k),$$

vem que

$$\psi'_k(0) = -\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k) = -\|\nabla f(x^k)\|^2 < 0$$

(dado que $\nabla f(x^k) \neq 0$). Consequentemente, existe uma vizinhança $\mathcal{V}_\delta(0)$ de zero de raio $\delta > 0$ tal que para todo o $\alpha \in \mathcal{V}_\delta(0)$ $\psi_k(\alpha) < \psi_k(0) = f(x^k)$. Logo, resulta de (3.2) que $f(x^{k+1}) \leq \psi_k(\alpha) < f(x^k)$. $\square$

Uma propriedade que garante a existência de mínimos globais de funções reais definidas em $\mathbb{R}^n$ é a *coercividade*.

Definição 3.3. *Uma função contínua $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ diz-se coerciva se*

$$\lim_{\|x\| \rightarrow +\infty} f(x) = +\infty. \quad (3.3)$$

Teorema 3.4. *Se $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função coerciva, então f tem pelo menos um minimizante global em $\mathbb{R}^n$. Adicionalmente, se f tem derivadas parciais de primeira ordem, então tal minimizante é um dos pontos críticos de f .*

Demonstração. Tendo em conta a condição de coercividade (3.3), podemos concluir que $\exists r > 0$ tal que para todo o $x \in \mathbb{R}^n$ com $\|x\| > r$ se tem $f(x) > f(0)$. Seja $\mathcal{V}_0 := \{y \in \mathbb{R}^n : \|y - 0\| \leq r\}$. Pela continuidade de f , sabemos do Teorema de Weierstrass (Teorema 1.23) que

$$\exists \bar{x} \in \mathcal{V}_0 \quad \text{tal que} \quad f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{V}_0.$$

Em particular, $f(\bar{x}) \leq f(0)$. Consequentemente, concluimos que

$$f(\bar{x}) \leq \begin{cases} f(x) & \text{se } x \in \mathcal{V}_0, \\ f(0) < f(x) & \text{se } x \in \{y \in \mathbb{R}^n : \|y\| > r\}, \end{cases}$$

ou seja, $f(\bar{x}) \leq f(x)$ para todo o $x \in \mathbb{R}^n$ ($\bar{x}$ é minimizante global). $\square$

O próximo teorema garante-nos a convergência do método de descida mais rápida quando aplicado à minimização de funções coercivas.

Teorema 3.5. *Suponha-se que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é coerciva com derivadas parciais de primeira ordem contínuas. Seja x^0 um ponto arbitrário de $\mathbb{R}^n$. Se $\{x^k\}$ é a sucessão de iteradas obtida pelo método de descida mais rápida a partir de x^0 , então existe uma subsucessão convergente para um ponto crítico de f .*

A demonstração deste resultado faz uso do *Teorema de Bolzano–Weierstrass* que afirma que um conjunto de $\mathbb{R}^n$ é sequencialmente compacto se, e somente se, é fechado e limitado. Por *sequencialmente compacto* entende-se que toda a sucessão extraída do conjunto possui uma subsucessão convergente.

Demonstração. Como f é coerciva, pelo Teorema 3.4 existe um minimizante global $\bar{x}$ em $\mathbb{R}^n$. Por outro lado, pelo Teorema 3.2, sabe-se que sendo $\{x^k\}$ a sucessão de iteradas obtida pela aplicação do MDMR à minimização de f a partir de x^0 , então $\{f(x^k)\}$ é uma sucessão decrescente, logo limitada uma vez que

$$f(\bar{x}) \leq f(x^k) \leq f(x^0) \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Nestas condições, podemos concluir que $\{x^k\}$ é uma sucessão limitada (caso contrário, pela coercividade de f , $\{f(x^k)\}$ não seria limitada). Consequentemente, pelo teorema de Bolzano–Weierstrass, existe uma subsucessão $\{x^{k_p}\}$ convergente para um certo $\tilde{x}$. Queremos mostrar que $\nabla f(\tilde{x}) = 0$ (i.e., $\tilde{x}$ é ponto crítico de f). Fazemos a demonstração por contradição. Suponhamos que $\nabla f(\tilde{x}) \neq 0$ e consideremos o MDMR. Seja $\psi(\alpha) = f(\tilde{x} - \alpha \nabla f(\tilde{x}))$. Vem que

$$\psi'(0) = -\nabla f(\tilde{x})^T \nabla f(\tilde{x}) = -\|\nabla f(\tilde{x})\|^2 < 0.$$

Logo, se $\bar{\alpha}$ é minimizante global de $\psi(\alpha)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, então

$$f(\tilde{x} - \bar{\alpha} \nabla f(\tilde{x})) = \psi(\bar{\alpha}) < \psi(0) = f(\tilde{x}) \quad (3.4)$$

e, da continuidade de f e das suas derivadas parciais de primeira ordem, decorre que

$$\lim_{p \rightarrow \infty} f(x^{k_p} - \bar{\alpha} \nabla f(x^{k_p})) = f(\tilde{x} - \bar{\alpha} \nabla f(\tilde{x})) \stackrel{(3.4)}{<} f(\tilde{x})$$

pelo que, para $p = \bar{p}$ suficientemente grande, se obtém

$$f(x^{k_{\bar{p}}} - \bar{\alpha} \nabla f(x^{k_{\bar{p}}})) < f(\tilde{x}). \quad (3.5)$$

Por outro lado, da continuidade de f , decorre que $\lim_{p \rightarrow \infty} f(x^{k_p}) = f(\tilde{x})$, de onde se obtém

$$f(\tilde{x}) \leq f(x^{k_{\bar{p}}+1}) = f(x^{k_{\bar{p}}} - \alpha_{k_{\bar{p}}} \nabla f(x^{k_{\bar{p}}})) \leq f(x^{k_{\bar{p}}} - \bar{\alpha} \nabla f(x^{k_{\bar{p}}})) \stackrel{(3.5)}{<} f(\tilde{x}),$$

o que é absurdo. $\square$

Como corolário imediato do Teorema 3.5, obtém-se o seguinte resultado.

Corolário 3.6. *Se $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função convexa, coerciva e com derivadas parciais de primeira ordem contínuas, então a sucessão de iteradas obtida pelo MDMR aplicado à minimização de f em $\mathbb{R}^n$ a partir de um ponto inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$ arbitrário, converge para um minimizante global do problema.*

Demonstração. Pelo Teorema 3.5, a sucessão de iteradas $\{x^k\}$ obtida pelo MDMR converge para um ponto crítico $\tilde{x}$ de f , i.e., $\nabla f(\tilde{x}) = 0$. Como f é convexa e diferenciável, concluímos do Teorema 2.36 que $\tilde{x}$ é minimizante global. $\square$

O resultado seguinte mostra que o Corolário 3.6 é de grande utilidade prática na resolução de problemas diferenciáveis convexos.

Proposição 3.7. *Se $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função convexa de classe C^1 , então $g(x) = f(x) + \varepsilon \|x\|^2$, $\varepsilon > 0$, é uma função coerciva.*

Demonstração. Como f é diferenciável e convexa, da desigualdade do gradiente (Teorema 2.30, onde usamos (2.14) com $y = x$ e $x = 0$) vem que

$$f(x) \geq f(0) + \nabla f(0)^T x \Leftrightarrow g(x) \geq f(0) + \nabla f(0)^T x + \varepsilon \|x\|^2.$$

Como

$$-\nabla f(0)^T x \leq \|\nabla f(0)^T x\| = \|\nabla f(0)\| \|x\|,$$

i.e., $\nabla f(0)^T x \geq -\|\nabla f(0)\| \|x\|$, resulta que

$$g(x) \geq f(0) + \|x\| (\varepsilon \|x\| - \|\nabla f(0)\|).$$

Concluimos que g é coerciva tomando o limite quando $\|x\| \rightarrow +\infty$. $\square$

Se pretendermos resolver um problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{3.6}$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função diferenciável e convexa, podemos sempre garantir a convergência do método de descida mais rápida considerando para isso uma pequena perturbação do problema original (3.6), i.e., resolvendo

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} [f(x) + \varepsilon \|x\|^2] \tag{3.7}$$

com $\varepsilon > 0$ pequeno de tal modo que o minimizante global encontrado pela aplicação do MDMR ao problema (3.7) é uma boa aproximação da solução do problema (3.6).

Como os problemas quadráticos são simultaneamente convexos e coercivos, para esta família de problemas temos sempre a garantia de convergência do MDMR a partir de um qualquer $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Além disso, para funções quadráticas, o tamanho ótimo $\bar{\alpha}$ do passo α (ver Algoritmo 1) é facilmente calculado.

Proposição 3.8 (Procura unidimensional do tamanho do passo para funções quadráticas). *Seja $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x + b$, onde a matriz Q é SDP, $c \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$. Seja $x \in \mathbb{R}^n$ e $d = -\nabla f(x)$ a direção de procura do MDMR. A expressão exata do tamanho ótimo do passo, isto é, a solução $\bar{\alpha}$ do problema de minimização $\psi(\alpha) = f(x + \alpha d) \rightarrow \min$ é dada por*

$$\bar{\alpha} = -\frac{d^T \nabla f(x)}{d^T Q d} = \frac{\nabla f(x)^T \nabla f(x)}{\nabla f(x)^T Q \nabla f(x)} = \frac{\|\nabla f(x)\|^2}{\nabla f(x)^T Q \nabla f(x)}.$$

Demonstração. Temos

$$\begin{aligned} \psi(\alpha) &= f(x + \alpha d) = \frac{1}{2}(x + \alpha d)^T Q(x + \alpha d) + c^T(x + \alpha d) + b \\ &= \frac{1}{2}(d^T Q d)\alpha^2 + (d^T Q x + d^T c)\alpha + \frac{1}{2}x^T Q x + c^T x + b \\ &= \frac{1}{2}(d^T Q d)\alpha^2 + (d^T Q x + d^T c)\alpha + f(x). \end{aligned}$$

Uma vez que $\psi'(\alpha) = (d^T Q d)\alpha + d^T(Qx + c)$ e $\nabla f(x) = Qx + c$, resulta que

$$\psi'(\alpha) = 0 \Leftrightarrow d^T Q d \alpha + d^T \nabla f(x) = 0 \Leftrightarrow \alpha = -\frac{d^T \nabla f(x)}{d^T Q d}.$$

Este ponto crítico de ψ é minimizante pois $\psi''(\alpha) = d^T Q d > 0$. □

Definimos de seguida, em Matlab/Octave, a função `MDMR_quadratico` que encontra a solução aproximada (com a desejada tolerância ε) de um problema quadrático da forma

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left[\frac{1}{2}x^T Qx + c^T x + b \right], \quad (3.8)$$

onde $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é SDP, $c \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$. A nossa implementação foi feita usando o Algoritmo 1 e a Proposição 3.8.

```
% -----
% Algoritmo 1: Metodo de Descida Mais Rapida (MDMR) em GNU Octave
% Minimizacao de funcoes quadraticas f(x) = 1/2 x^T Q x + c^T x + b
% -----
function [x, val_func] = MDMR_quadratico(Q, c, b, x0, epsilon)
    x = x0;
    k = 0;
    grad = Q * x + c;
    while ( norm(grad) > epsilon )
        k = k + 1;
        alpha = norm(grad)^2 / (grad' * Q * grad);
        x = x - alpha * grad;
        grad = Q * x + c;
        val_func = 1/2 * x' * Q * x + c' * x + b;
        fprintf('iter %3d,normGrad=%2.6f,valFunc=%2.6f\n', ...
            k, norm(grad), val_func);
    end
```

Vejamos dois exemplos de utilização da nossa função `MDMR_quadratico`.

Exemplo 3.9. Considere-se o problema

$$\min_{(x,y) \in \mathbb{R}^2} [x^2 + 2y^2]$$

cuja solução é óbvia: $f(x, y) = x^2 + 2y^2 \geq 0$ para qualquer $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, pelo que $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0)$ é minimizante global ($f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$). Começemos por notar que para $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x + b$ temos sempre:

$$b = f(0), \quad c = \nabla f(0), \quad Q = H(x). \quad (3.9)$$

No nosso exemplo concreto temos

$$f(x, y) = x^2 + 2y^2, \quad \nabla f(x, y) = \begin{bmatrix} 2x \\ 4y \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad H(x, y) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} = Q,$$

com $b = f(0, 0) = 0$ e $c = \nabla f(0, 0) = (0, 0)$. Notar que Q é SDP. Para resolver o problema usando o MDMR com tolerância $\varepsilon = 10^{-5}$ e vetor inicial $x^0 = (2, 1)$, fazemos:

```
clear, clc % limpa memoria e ecran
[x vf] = MDMR_quadratico([2 0;0 4], [0 0]', 0, [2 1]', 1e-5)
```

O método converge após 13 iterações, com um aproximação muito próxima da solução exata:

```
iter 1,normGrad=1.885618,valFunc=0.666667
iter 2,normGrad=0.628539,valFunc=0.074074
iter 3,normGrad=0.209513,valFunc=0.008230
iter 4,normGrad=0.069838,valFunc=0.000914
iter 5,normGrad=0.023279,valFunc=0.000102
iter 6,normGrad=0.007760,valFunc=0.000011
iter 7,normGrad=0.002587,valFunc=0.000001
iter 8,normGrad=0.000862,valFunc=0.000000
iter 9,normGrad=0.000287,valFunc=0.000000
iter 10,normGrad=0.000096,valFunc=0.000000
iter 11,normGrad=0.000032,valFunc=0.000000
iter 12,normGrad=0.000011,valFunc=0.000000
iter 13,normGrad=0.000004,valFunc=0.000000
x =
    1.2545e-06
   -6.2723e-07
vf = 2.3605e-12
```

Exemplo 3.10. Revisitemos o problema do Exemplo 3.1, resolvendo-o agora com recurso à nossa função `Matlab/Octave MDMR_quadratico`. Para isso, começamos por determinar $Q = H(x_1, x_2)$, $b = f(0, 0)$ e $c = \nabla f(0, 0)$:

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (x_1 - 1)^2 + (x_1 - 1 - x_2)^2 \implies b = 2, \\ \nabla f(x_1, x_2) &= \begin{bmatrix} 4x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 2x_2 + 2 \end{bmatrix} \implies c = \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix}, \\ H(x_1, x_2) &= \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix} = Q, \end{aligned}$$

onde Q é simétrica e SDP. Tal como no Exemplo 3.1, partimos da aproximação inicial $(0, 0)$ e escolhemos como tolerância $\varepsilon = 0.00001$:

```
clear, clc;
[x vf] = MDMR_quadratico([4 -2;-2 2], [-4 2]', 2, [0 0]', 0.00001)
```

Como esperado, o método converge após 8 iterações:

```
iter    1,normGrad=0.344010,valFunc=0.076923
iter    2,normGrad=0.172005,valFunc=0.002959
iter    3,normGrad=0.013231,valFunc=0.000114
iter    4,normGrad=0.006616,valFunc=0.000004
iter    5,normGrad=0.000509,valFunc=0.000000
iter    6,normGrad=0.000254,valFunc=0.000000
iter    7,normGrad=0.000020,valFunc=0.000000
iter    8,normGrad=0.000010,valFunc=0.000000
x =
    1.0000e+00
    2.6331e-16
vf = 9.5772e-12
```

3.2 O método de Newton

Suponhamos que queremos resolver o problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \quad (P)$$

Para x numa vizinhança de $\bar{x}$, o valor $f(x)$ pode ser aproximado através da expansão quadrática de Taylor:

$$f(x) \approx h(x) := f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) + \frac{1}{2} (x - \bar{x})^T H(\bar{x}) (x - \bar{x}).$$

Notar que h é uma função quadrática, cujo minimizante global é encontrado resolvendo o sistema $\nabla h(x) = 0$ (cf. Teorema 2.18 e comentário após a sua demonstração). Uma vez que o gradiente de h é dado por

$$\nabla h(x) = \nabla f(\bar{x}) + H(\bar{x})(x - \bar{x}),$$

somos motivados a resolver o sistema

$$\nabla f(\bar{x}) + H(\bar{x})(x - \bar{x}) = 0. \quad (3.10)$$

Assumindo que $H(\bar{x})$ é não singular, obtemos de (3.10) que

$$x - \bar{x} = -H(\bar{x})^{-1} \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow x = \bar{x} - H(\bar{x})^{-1} \nabla f(\bar{x}).$$

Isto conduz-nos ao seguinte algoritmo iterativo para determinar uma aproximação da solução de (P) .

Algoritmo 2: método (básico) de Newton (MN).

Entrada: Função f , aproximação inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$ e tolerância $\varepsilon > 0$.

Saída: Aproximação x^k com $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$.

1. Inicialização: $k := 0$.
 2. Critério de paragem: se $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$, então stop; senão, continuar.
 3. Direção de procura: $d^k := -H(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)$.
 4. Tamanho do passo: $\alpha_k := 1$.
 5. Nova aproximação: fazer

$$x^{k+1} := x^k + \alpha_k d^k$$

$$k := k + 1$$
 e voltar a 2.
-

A direção $d^k = -H(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)$ é chamada de *direção de Newton* em x^k .
Notar que:

- o MN assume que a matriz Hessiana $H(x^k)$ é não singular para cada k ;
- não existe garantia que $f(x^{k+1}) \leq f(x^k)$;
- o quarto passo do algoritmo acima do MN pode ser melhorado encontrando o valor ótimo do tamanho do passo α_k , i.e., fazendo uma procura unidimensional do tamanho do passo α_k que minimiza $\psi_k(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k)$.

Vamos resolver o mesmo problema do Exemplo 3.1 mas agora por intermédio do algoritmo de Newton.

Exemplo 3.11. A função f a minimizar no problema do Exemplo 3.1 é

$$f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_1 - 1 - x_2)^2. \quad (3.11)$$

Neste caso o gradiente de f é dado por

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 2(x_1 - 1) + 2(x_1 - 1 - x_2) \\ -2(x_1 - 1 - x_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 2x_2 + 2 \end{bmatrix}$$

e a matriz Hessiana de f ,

$$H(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}, \quad (3.12)$$

não depende de x_1 nem de x_2 , pelo que a denotamos simplesmente por H . A matriz H é não singular, com inversa dada por

$$H^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix},$$

pelo que partindo da aproximação inicial $x^0 = (0, 0)$, tal como fizemos no Exemplo 3.1 para o MDMR, obtemos pelo método de Newton

$$x^1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

com $\nabla f(x^1) = \nabla f(1, 0) = (0, 0)$ (pelo que o Algoritmo de Newton termina).

O facto do MN ter convergido numa única iteração para o problema (P) com f dado por (3.11) não é fruto do acaso. O próximo resultado afirma que o MN converge sempre numa só iteração quando aplicado a uma função quadrática estritamente convexa, independentemente da aproximação inicial x^0 . Reparar que para a função f do Exemplo 3.11, a matriz Hessiana (3.12) é uma matriz simétrica e definida positiva (os dois menores principais são ambos positivos e iguais a 4). Como sabemos (cf. Exercício 7 da Secção 2.7), isso significa que a função f do Exemplo 3.11 é uma função estritamente convexa.

Teorema 3.12. *Seja $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x + d$ com $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ SDP (simétrica e definida positiva), $c \in \mathbb{R}^n$ e $d \in \mathbb{R}$. Então a sucessão de iteradas obtida pelo método de Newton aplicado à minimização de f a partir de um qualquer ponto inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$, atinge o minimizante global de f num único passo.*

Demonstração. Temos $\nabla f(x) = Qx + c$ e $H(x) = Q$. O facto de Q ser SDP garante a convexidade estrita de f e, consequentemente, que a única solução do sistema de equações $Qx = -c$ seja precisamente o minimizante global $\bar{x}$ de f . Por outro lado, por aplicação do MN, obtemos:

$$\begin{aligned} x^1 &= x^0 - H(x^0)^{-1} \nabla f(x^0) \\ &= x^0 - Q^{-1}(Qx^0 + c) \\ &= x^0 - Q^{-1}(Qx^0 - Q\bar{x}) \\ &= \bar{x}. \end{aligned}$$

Concluimos que o MN converge numa única iteração. $\square$

No caso mais geral em que $H(x)$ é SDP (função f não necessariamente quadrática) temos o seguinte resultado.

Teorema 3.13. *Se $H(x)$ é SDP e a direção d de Newton em x não for nula, i.e., $d = -H(x)^{-1}\nabla f(x) \neq 0$, então d é uma direção descendente, i.e., $f(x + \alpha d) < f(x)$ para todos os valores de α suficientemente pequenos.*

Demonstração. Pelo Teorema 2.2, basta mostrar que

$$\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T H(x)^{-1} \nabla f(x) < 0.$$

Notar que esta desigualdade é claramente verdadeira se $H(x)^{-1}$ for definida positiva. Uma vez que $H(x)$ é SDP, temos

$$0 < (H(x)^{-1}v)^T H(x) (H(x)^{-1}v) = v^T H(x)^{-1}v$$

para todo o $v \in \mathbb{R}^n$, $v \neq 0$, i.e., $H(x)^{-1}$ é definida positiva. $\square$

Em Matlab/Octave, calculamos a direção de Newton de modo eficiente usando o operador “\” de divisão à esquerda: o comando Matlab/Octave $A \setminus b$ fornece-nos $A^{-1}b$ (se A^{-1} existir, caso contrário, devolve-nos a solução de $Ax = b$ no sentido dos mínimos quadrados – veja-se o Exemplo 2.19) de um modo computacionalmente muito eficiente. Assim, calculamos a direção de Newton $d^k = -H(x^k)^{-1}\nabla f(x^k)$ fazendo $d^k = -H(x^k) \setminus \nabla f(x^k)$. Segue-se uma implementação muito simples do Método de Newton (MN) em Matlab/Octave.

```

% -----
% Algoritmo 2: Metodo (basico) de Newton (MN)
% GNU Octave
% -----

function [x, val_func] = MN(f,grad,Hess,x0,epsilon)
    x = x0;
    valG = grad(x);
    valH = Hess(x);
    k = 0;
    while ( norm(valG) > epsilon) && (k < 10000) )
        k = k + 1;
        x = x - valH \ valG;
        val_func = f(x);
        fprintf('k = %2d, f(x) = %10.10f\n', k, val_func)
        valG = grad(x);
        valH = Hess(x);
    end
    if (k == 10000)
        fprintf('O metodo nao convergiu\n')
    end
end

```

Vejamos dois exemplos de aplicação do Método de Newton por recurso à nossa função Octave MN.

Exemplo 3.14. Consideremos o problema

$$\min_{x,y} [100x^4 + 0.01y^4]$$

cujo minimizante global é, obviamente, $(x, y) = (0, 0)$ (o mínimo global é, por isso, 0). Vamos escolher a aproximação inicial $x^0 = (1, 1)$ e $\varepsilon = 10^{-6}$. Usando o Octave e a nossa função MN, que implementa o Algoritmo 2, i.e., o método (básico) de Newton, fazemos:

```
% Exemplo do MN em Octave

clear, clc

f = @(x) 100.*x(1).^4 + 0.01.*x(2).^4;
g = @(x) [400.*x(1).^3; 0.04.*x(2).^3];
h = @(x) [1200.*x(1).^2, 0; 0, 0.12.*x(2).^2];

x0 = [1;1];
eps = 1e-6;

[x vf] = MN(f,g,h,x0,eps)
```

Obtemos convergência após 17 iterações:

```
k = 1, f(x) = 19.7550617284
k = 2, f(x) = 3.9022344155
k = 3, f(x) = 0.7708117364
k = 4, f(x) = 0.1522591084
k = 5, f(x) = 0.0300758733
k = 6, f(x) = 0.0059409132
k = 7, f(x) = 0.0011735137
k = 8, f(x) = 0.0002318052
k = 9, f(x) = 0.0000457887
k = 10, f(x) = 0.0000090447
k = 11, f(x) = 0.0000017866
k = 12, f(x) = 0.0000003529
k = 13, f(x) = 0.0000000697
k = 14, f(x) = 0.0000000138
k = 15, f(x) = 0.0000000027
k = 16, f(x) = 0.0000000005
k = 17, f(x) = 0.0000000001
x =
    0.0010150
    0.0010150
vf = 1.0613e-10
```

Com o próximo exemplo ilustramos uma característica típica do método de Newton: ele converge rapidamente para certos valores da aproximação inicial x^0 ; não convergindo para outros valores de x^0 .

Exemplo 3.15. Considere-se o problema

$$\min_{x_1, x_2} \left[\sqrt{x_1^2 + 1} + \sqrt{x_2^2 + 1} \right]$$

cuja solução é, claramente, dada por $(x_1, x_2) = (0, 0)$ com mínimo global 2. Para este problema, a função objetivo a minimizar é dada por

$$f(x_1, x_2) = \sqrt{x_1^2 + 1} + \sqrt{x_2^2 + 1}$$

com gradiente e Hessiana dados por

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{x_1}{\sqrt{1+x_1^2}} \\ \frac{x_2}{\sqrt{1+x_2^2}} \end{bmatrix}, \quad H(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{(1+x_1^2)^3}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{(1+x_2^2)^3}} \end{bmatrix}.$$

Escolhamos como tolerância $\varepsilon = 10^{-8}$. O algoritmo de Newton não converge para $x^0 = (1, 1)$:

```
clear, clc

f = @(x) sqrt(x(1).^2 + 1) + sqrt(x(2).^2 + 1);
g = @(x) [x(1)./sqrt(x(1).^2 + 1); x(2)./sqrt(x(2).^2 + 1)];
h = @(x) [1./(x(1).^2+1)^(3/2), 0; 0, 1./(x(2).^2+1)^(3/2)];

eps = 1e-8;

x0 = [1;1];

[x vf] = MN(f,g,h,x0,eps)

k = 1, f(x) = 2.8284271247
k = 2, f(x) = 2.8284271247
k = 3, f(x) = 2.8284271247
k = 4, f(x) = 2.8284271247
. . .
k = 5075, f(x) = 2.8284271247
k = 5076, f(x) = 2.8284271247
k = 5077, f(x) = 2.8284271247
. . .
k = 9594, f(x) = 2.8284271247
k = 9595, f(x) = 2.8284271247
k = 9596, f(x) = 2.8284271247
k = 9597, f(x) = 2.8284271247
. . .
k = 9997, f(x) = 2.8284271247
k = 9998, f(x) = 2.8284271247
k = 9999, f(x) = 2.8284271247
```

```

k = 10000, f(x) = 2.8284271247
0 metodo nao convergiu
x =
  1
  1
vf = 2.8284

```

É fácil de compreender o que se passa fazendo duas iterações do Algoritmo 2 do MN à mão: concluímos que

$$d^{2i} = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix}, \quad x^{2i+1} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad d^{2i+1} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad x^{2i+2} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \forall i \in \mathbb{N}_0.$$

Para $x^0 = (0.5, 0.5)$, o método básico de Newton converge ao fim de quatro iterações:

```

x0 = [0.5;0.5];

[x vf] = MN(f,g,h,x0,eps)

k = 1, f(x) = 2.0155644371
k = 2, f(x) = 2.0000038147
k = 3, f(x) = 2.0000000000
k = 4, f(x) = 2.0000000000
x =
  0
  0
vf = 2

```

3.3 Convergência dos métodos

Estudamos agora a velocidade com que uma sucessão convergente se aproxima do seu limite.

Definição 3.16. *Considere-se uma sucessão $\{x^k\}$ convergente para $\bar{x}$, i.e.,*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = \bar{x}.$$

Dizemos que a sucessão converge linearmente para $\bar{x}$ se existir um número $\delta \in]0, 1[$ tal que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|} = \delta. \quad (3.13)$$

Se a sucessão $\{x^k\}$ converge para $\bar{x}$ e

- $\delta = 0$ em (3.13), então a sucessão possui convergência super-linear;
- $\delta = 1$ em (3.13), então a sucessão possui convergência sub-linear.

O número δ é chamado de taxa de convergência.

Exemplo 3.17. Seja $x^k = 10^{-k}$. A sucessão $\{x^k\}$ (0.1, 0.01, 0.001, ...) converge para $\bar{x} = 0$. Esta convergência é linear pois

$$\frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|} = 0.1 \in]0, 1[.$$

Exemplo 3.18. Seja $x^k = \frac{1}{k!}$. A sucessão $\{x^k\}$ (1, 1/2, 1/6, 1/24, 1/120, ...) converge para $\bar{x} = 0$. Esta convergência é super-linear pois

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

quando $k \rightarrow \infty$.

Exemplo 3.19. Seja $x^k = \frac{1}{k}$. A sucessão $\{x^k\}$ (1, 1/2, 1/3, 1/4, 1/5, ...) converge para $\bar{x} = 0$. Esta convergência é sub-linear pois

$$\frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|} = \frac{k}{k+1} \rightarrow 1$$

quando $k \rightarrow \infty$.

A próxima definição distingue taxas de convergência supra-lineares.

Definição 3.20. Considere-se uma sucessão $\{x^k\}$ convergente para $\bar{x}$, i.e.,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = \bar{x}.$$

Dizemos que a sucessão converge com ordem q para $\bar{x}$, $q > 1$, se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|^q} = \delta < \infty.$$

Em particular, a convergência de ordem

- $q = 2$ é chamada de convergência quadrática;
- $q = 3$ é chamada de convergência cúbica.

Nota: a ordem $q > 1$ de convergência pode ser um número não inteiro.

Exemplo 3.21. Seja $x^k = 10^{-2^k}$. A sucessão $\{x^k\}$ ($10^{-2}, 10^{-4}, 10^{-8}, 10^{-16}, 10^{-32}, \dots$) converge para $\bar{x} = 0$. Esta convergência é de ordem 2 (convergência quadrática) pois

$$\frac{\|x^{k+1} - \bar{x}\|}{\|x^k - \bar{x}\|^2} = \frac{10^{-2^{k+1}}}{(10^{-2^k})^2} = 1.$$

É fácil de perceber que a velocidade de convergência de uma sucessão é tanto maior quanto maior for a ordem de convergência q e, para uma mesma ordem de convergência q , tanto maior quanto menor for a taxa de convergência δ .

O próximo resultado mostra a convergência linear ($q = 1$) da sucessão $\{f(x^k)\}$ obtida por aplicação do MDMR a uma função quadrática f . A taxa de convergência depende neste caso grandemente da razão A/a entre o maior e o menor valor próprio da matriz Hessiana $H(\bar{x})$ de f , onde $\bar{x}$ é o minimizante de f . Tal razão entre o maior e o menor valor próprio de uma matriz é conhecida na literatura como o *número de condição* de uma matriz. Convém salientar que o número de condição tem um papel muito importante na teoria e computação de várias quantidades que envolvem uma matriz e não apenas no presente contexto. Aqui, recorreremos à chamada desigualdade de Kantorovich, que afirma que se o número de condição de uma matriz Q for dado por A/a , então

$$\frac{(d^T Q d)(d^T Q^{-1} d)}{(d^T d)^2} \leq \frac{(A + a)^2}{4Aa}. \quad (3.14)$$

A demonstração da desigualdade de Kantorovich (3.14) pode ser encontrada, por exemplo, em [21] (em concreto, ver a demonstração do Teorema 3.1.10 neste livro, na página 129). Kantorovich (1912–1986) ganhou o prémio Nobel da Economia em 1975 pelos seus contributos na teoria da alocação ótima de recursos.

Teorema 3.22. *Seja $f(x) = \frac{1}{2}x^T Q x + c^T x$, onde Q é SSDP. Seja $\{x^k\}$ a sucessão de iteradas obtida pelo MDMR, convergente para o minimizante global $\bar{x}$ de f . Então a sucessão $\{f(x^k)\}$ converge linearmente para $f(\bar{x})$ com uma taxa de convergência*

$$\delta = \left(\frac{A/a - 1}{A/a + 1} \right)^2,$$

onde A e a são, respetivamente, o maior e menor valor próprio da matriz Q .

Demonstração. De acordo com o Teorema 2.18, o minimizante de f em $\mathbb{R}^n$ é dado por $\bar{x} = -Q^{-1}c$ e, substituindo em f , obtemos que

$$f(\bar{x}) = -\frac{1}{2}c^T Q^{-1}c.$$

Seja $x = x^k$ a aproximação corrente do MDMR, para a qual

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Q x + c^T x,$$

e denotemos por $d = d^k$ a direção de procura do MDMR, i.e.,

$$d = -\nabla f(x) = -Qx - c.$$

Agora calculemos a próxima iteração do MDMR. Para um α arbitrário,

$$\begin{aligned} f(x + \alpha d) &= \frac{1}{2}(x + \alpha d)^T Q(x + \alpha d) + c^T(x + \alpha d) \\ &= \frac{1}{2}x^T Qx + \alpha d^T Qx + \frac{1}{2}\alpha^2 d^T Qd + c^T x + \alpha c^T d \\ &= f(x) - \alpha d^T d + \frac{1}{2}\alpha^2 d^T Qd. \end{aligned}$$

Escolhendo o valor do passo α otimal, esta última expressão conduz-nos a

$$\alpha = \frac{d^T d}{d^T Qd}$$

(confira a Proposição 3.8, tendo em mente que $d = -\nabla f(x)$) e a próxima iteração $x' = x^{k+1}$ do algoritmo do MDMR será

$$x' = x + \alpha d = x + \frac{d^T d}{d^T Qd} d$$

com

$$f(x') = f(x + \alpha d) = f(x) - \alpha d^T d + \frac{1}{2}\alpha^2 d^T Qd = f(x) - \frac{1}{2} \frac{(d^T d)^2}{d^T Qd}.$$

Por conseguinte,

$$\begin{aligned} \frac{|f(x^{k+1}) - f(\bar{x})|}{|f(x^k) - f(\bar{x})|} &= \frac{f(x') - f(\bar{x})}{f(x) - f(\bar{x})} = \frac{f(x) - \frac{1}{2} \frac{(d^T d)^2}{d^T Qd} - f(\bar{x})}{f(x) - f(\bar{x})} \\ &= 1 - \frac{\frac{1}{2} \frac{(d^T d)^2}{d^T Qd}}{\frac{1}{2}x^T Qx + c^T x + \frac{1}{2}c^T Q^{-1}c} \\ &= 1 - \frac{\frac{1}{2} \frac{(d^T d)^2}{d^T Qd}}{\frac{1}{2}(Qx + c)^T Q^{-1}(Qx + c)} \\ &= 1 - \frac{(d^T d)^2}{(d^T Qd)(d^T Q^{-1}d)} \\ &= 1 - \frac{1}{\beta} \end{aligned}$$

com

$$\beta := \frac{(d^T Qd)(d^T Q^{-1}d)}{(d^T d)^2}.$$

Usando a desigualdade de Kantorovich (3.14), i.e.,

$$\beta \leq \frac{(A + a)^2}{4Aa},$$

obtemos a conclusão pretendida:

$$\frac{|f(x^{k+1}) - f(\bar{x})|}{|f(x^k) - f(\bar{x})|} = 1 - \frac{1}{\beta} \leq 1 - \frac{4Aa}{(A+a)^2} = \frac{(A-a)^2}{(A+a)^2} = \left(\frac{A/a-1}{A/a+1}\right)^2 =: \delta.$$

□

Notar que, por definição de A e a , A/a é pelo menos 1. Se A/a for pequeno, i.e., não muito maior que 1, então a taxa de convergência $\delta = \left(\frac{A/a-1}{A/a+1}\right)^2$ será muito menor que 1. Contudo, se A/a for grande, então a taxa de convergência δ será apenas ligeiramente menor que 1 e a velocidade de convergência será menor (i.e., será necessário um maior número de iterações até o algoritmo do MDMR atingir a tolerância pretendida).

Mostramos agora que, sob certas condições de regularidade, a sucessão de iteradas obtida por aplicação do MN, a partir de um ponto suficientemente próximo do minimizante $\bar{x}$ de f , converge quadraticamente para $\bar{x}$.

Teorema 3.23. *Se $\bar{x}$ for minimizante do problema de minimizar f em $\mathbb{R}^n$, $f \in C^3$, x^k estiver suficientemente próximo de $\bar{x}$ e, além disso, existir uma constante h tal que $\|H(x^k)^{-1}\| \leq h$, então a próxima iterada x^{k+1} obtida pelo método de Newton satisfaz a desigualdade $\|x^{k+1} - \bar{x}\| \leq c \|x^k - \bar{x}\|^2$ para uma certa constante c , i.e., a sucessão de iteradas de Newton tem convergência quadrática.*

Demonstração. Por aplicação do MN, $x^{k+1} = x^k - H(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)$. Então,

$$\begin{aligned} x^{k+1} - \bar{x} &= x^k - \bar{x} - H(x^k)^{-1} \nabla f(x^k) \\ &= H(x^k)^{-1} [H(x^k)(x^k - \bar{x}) - \nabla f(x^k)] \end{aligned}$$

e, atendendo a que $\nabla f(\bar{x}) = 0$, podemos escrever que

$$x^{k+1} - \bar{x} = H(x^k)^{-1} [H(x^k)(x^k - \bar{x}) + \nabla f(\bar{x}) - \nabla f(x^k)]. \quad (3.15)$$

Uma vez que $f \in C^3$, a função f e as suas derivadas até à terceira ordem são contínuas na vizinhança de x^k e, por conseguinte, limitadas numa vizinhança de x^k . O Teorema de Taylor permite-nos então escrever que

$$\nabla f(\bar{x}) - \nabla f(x^k) = H(x^k)(\bar{x} - x^k) + \epsilon(\bar{x}, x^k),$$

onde $\|\epsilon(\bar{x}, x^k)\| \leq c_1 \|\bar{x} - x^k\|^2$. Por conseguinte,

$$\|H(x^k)(x^k - \bar{x}) + \nabla f(\bar{x}) - \nabla f(x^k)\| = \|\epsilon(\bar{x}, x^k)\| \leq c_1 \|x^k - \bar{x}\|^2$$

e resulta de (3.15) que

$$\|x^{k+1} - \bar{x}\| \leq c_1 \|H(x^k)^{-1}\| \|x^k - \bar{x}\|^2.$$

Como por hipótese $\|H(x^k)^{-1}\| \leq h$, concluímos que

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

para $c = c_1 h$.

□

3.4 Otimização sem restrições em Octave/Matlab

Quer o Matlab quer o Octave (este último disponível gratuitamente em <http://www.octave.org>) disponibilizam *toolboxes* de otimização que implementam vários métodos/algoritmos aproximativos. Mencionamos aqui dois dos comandos disponibilizados em ambos os ambientes Matlab/Octave, que podem ser facilmente usados para resolver problemas sem restrições, como aqueles estudados até ao momento.

Um dos comandos úteis é o `fminunc` (o nome do comando significa “minimizar uma função *f* *unconstrained*”, isto é, minimizar uma função *f* sem restrições). Quer no Matlab, quer no Octave, podemos recorrer ao `help` para obtermos toda a informação sobre a sintaxe de utilização, algoritmos implementados, exemplos ilustrativos, etc. Uma utilização simples deste comando consiste em passarmos no seu primeiro argumento a função que pretendemos minimizar e no segundo argumento a aproximação inicial x^0 . O `fminunc` devolver-nos-á o minimizante e o mínimo encontrados (em rigor, e partindo do princípio que os algoritmos implementados estão a convergir, o que obtemos é uma aproximação desses valores):

```
[x, fval] = fminunc(f, x0)
```

Vejamos um exemplo muito simples, ilustrativo da utilização deste comando. Imaginemos que pretendemos minimizar a função

$$f(x_1, x_2) = 100 (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

em $\mathbb{R}^2$. É fácil de perceber que o minimizante global do problema é $\bar{x} = (1, 1)$ e o mínimo global é zero: $f(\bar{x}) = 0$. Partindo da aproximação inicial $x^0 = (1.2, -1)$, fazemos:

```
f = @(x) 100 * (x(2) - x(1)^2)^2 + (1 - x(1))^2;
x0 = [1.2 ; -1];
[x, fval] = fminunc(f, x0)
```

obtendo, como resultado,

```
x =
    1.00000
    1.00000
```

```
fval = 1.6888e-16
```

o que está de acordo com o esperado.

Outros comandos existem em Octave/Matlab, com sintaxes semelhantes ao `fminunc` e que, tal como este, possuem vários parâmetros opcionais que permitem controlar a precisão ε das aproximações, número máximo de iterações,

critérios de paragem, etc. A diferença entre os comandos disponibilizados reside, basicamente, nos algoritmos que lhes estão associados. A este respeito, convém mencionar que comandos com o mesmo nome no **Octave** e no **Matlab**, como sejam o **fminunc** e o **fminsearch**, não implementam necessariamente os mesmos métodos aproximativos. Além disso, pode haver diferenças dependendo da versão do **Octave** ou do **Matlab** que se disponha.

Terminamos esta breve secção resolvendo o mesmo problema acima, mas recorrendo desta vez ao comando **fminsearch**:

```
f = @(x) 100 * (x(2) - x(1)^2)^2 + (1 - x(1))^2;
x0 = [1.2 ; -1];
[x, fval] = fminsearch(f, x0)
```

obtendo, como resultado,

```
x =
1.0000
1.0000

fval = 8.6525e-10
```

Como o método aproximativo usado pelo **fminunc** e pelo **fminsearch** são diferentes, notamos uma ligeira diferença nas aproximações obtidas.

3.5 Exercícios

1. Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função estritamente convexa, coerciva e com derivadas parciais de primeira ordem contínuas. Mostre que a sucessão de iteradas obtida pelo MDMR aplicado à minimização de f em $\mathbb{R}^n$ a partir de um qualquer ponto inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$, converge para o único minimizante global do problema.
2. O objetivo deste exercício é mostrar que o MN não é afetado por uma mudança linear das variáveis. Considere a transformação linear e invertível $x = Sy$. Escreva o MN no espaço das variáveis y e mostre que ele gera a sucessão $y^k = S^{-1}x^k$, onde $\{x^k\}$ é a sucessão de iteradas obtida pelo MN no espaço das variáveis x .
3. Determine o mínimo da função $f(x, y) = x^4 - 3xy + (y + 2)^2$, por aplicação do MDMR a partir do ponto $(0, 0)$.
4. Aplique, a partir do ponto $(0, 0)$, o MN para a determinação do mínimo da função $f(x, y) = 2x^4 + x^2 - 4xy + 5y$.

5. Considere a função $f(x, y) = x^3 + y^2 + y - 3x$.
 - (a) Verifique se a função é convexa e analise a natureza dos pontos críticos.
 - (b) Aplique o MN a partir do ponto $(\frac{1}{2}, 0)$.
6. Considere a função $g(x, y) = 2x^2 + y^2 - y + x$.
 - (a) Verifique se $g(x, y)$ é uma função coerciva.
 - (b) Aplique o MDMR a partir do ponto $(0, 0)$.
7. Considere a função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x, y) = 3x^2 + y^2 - 4x + 2 + 2xy$ e, a partir da origem, determine as primeiras duas iterações do MDMR aplicado à minimização de $f(x, y)$.
8. Considere a função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x, y) = 2x^4 + y^2 + 5y + x$.
 - (a) Verifique que f é uma função convexa mas não estritamente convexa.
 - (b) Verifique se o ponto $(-\frac{1}{2}, -\frac{5}{2})$ é um minimizante.
 - (c) Aplique, a partir do ponto $(-1, -2)$, o MN à determinação de um minimizante de $f(x, y)$.
9. Considere o problema de minimizar

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx + c^T x + 13$$

onde

$$H = \begin{bmatrix} 10 & -9 \\ -9 & 10 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad c = \begin{bmatrix} 4 \\ -15 \end{bmatrix}.$$

- (a) Usando o computador (ou a calculadora), implemente o MDMR para este problema partindo dos seguintes pontos:
 - i. $x^0 = (0, 0)$.
 - ii. $x^0 = (-0.4, 0)$.
 - iii. $x^0 = (10, 0)$.
 - iv. $x^0 = (11, 0)$.
- (b) Repita a alínea anterior, desta vez implementando o MN.

Nota: o minimizante deste problema é $\bar{x} = (5, 6)$ com $f(\bar{x}) = -22$.

10. Considere o problema de minimizar

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx + c^T x$$

onde

$$H = \begin{bmatrix} 10 & -18 & 2 \\ -18 & 40 & -1 \\ 2 & -1 & 3 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad c = \begin{bmatrix} 12 \\ -47 \\ -8 \end{bmatrix}.$$

- (a) Usando o computador (ou a calculadora), implemente o MDMR para este problema partindo dos seguintes pontos:
- i. $x^0 = (0, 0, 0)$.
 - ii. $x^0 = (15.09, 7.66, -6.56)$.
 - iii. $x^0 = (11.77, 6.42, -4.28)$.
 - iv. $x^0 = (4.46, 2.25, 1.85)$.
- (b) Repita a alínea anterior, desta vez implementando o MN.

Nota: o minimizante deste problema é $\bar{x} = (4, 3, 1)$ com $f(\bar{x}) = -50.5$.

11. Considere a função $f(x, y) = 5x^2 + y^2 + 4xy - 14x - 6y + 20$ e o seguinte problema de programação matemática sem restrições:

$$\min_{(x,y) \in \mathbb{R}^2} f(x, y).$$

- (a) Determine analiticamente, justificando convenientemente, o minimizante e o mínimo global do problema.
- (b) Use o método de descida mais rápida (MDMR) para aproximar o minimizante global do problema. Para isso, considere a aproximação inicial $(0, 10)$ e a tolerância $\varepsilon = 10^{-6}$. Reúna os seus resultados numa tabela apropriada (ver Exemplo 3.1).

12. Considere a função

$$h(x) = x_1 - 0.6x_2 + 4x_3 + 0.25x_4 - \sum_{i=1}^4 \ln(x_i) - \ln\left(5 - \sum_{i=1}^4 x_i\right).$$

Usando um método aproximativo à sua escolha, determine uma aproximação da solução do problema de minimizar $h(x)$ no seu domínio. Use a aproximação inicial $x^0 = (1, 1, 1, 1)$ e a tolerância $\varepsilon = 10^{-6}$.

13. Considere a função $g(x, y) = 10x^2 + \alpha y^2 + 5xy - 14x - 6y + 10$, com α uma dada constante, e o seguinte problema de programação matemática sem restrições:

$$\min_{(x,y) \in \mathbb{R}^2} g(x, y).$$

- (a) Seja $\{(x^k, y^k)\}$ a sucessão de aproximações gerada pelo MDMR a partir da aproximação inicial $(40, -100)$. Justifique o facto da correspondente sucessão $\{g(x^k, y^k)\}$ apresentar convergência linear.
- (b) Recorrendo ao conceito de taxa de convergência, justifique se a sucessão $\{g(x^k, y^k)\}$ mencionada na alínea anterior converge mais rapidamente para $\alpha = 1$ ou $\alpha = 8$.
- (c) Use o MDMR para aproximar a solução do problema com $\alpha = 1$ e $\alpha = 8$, considerando a aproximação inicial $(40, -100)$ e a tolerância $\varepsilon = 10^{-6}$. Reúna os seus resultados em tabelas apropriadas.

Parte II

Problemas de otimização com restrições

Capítulo 4

Condições de otimalidade

Vamos agora estudar o problema geral de programação matemática, que denotamos por (P_M) .

4.1 Problema, hipóteses e notações

Um problema de programação matemática é um problema que pode ser colocado na forma

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ & \text{sujeito a } \quad g(x) \leq 0, \\ & \quad \quad \quad h(x) = 0, \\ & \quad \quad \quad x \in X, \end{aligned} \tag{P_M}$$

onde $X \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, i.e., $g(x) = (g_1(x), \dots, g_m(x))$, $m \in \mathbb{N}_0$ ($m = 0$ significa que não há restrições de desigualdade) e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$, i.e., $h(x) = (h_1(x), \dots, h_l(x))$, $l \in \mathbb{N}_0$ (se $l = 0$, então o problema não tem restrições de igualdade).

Se $\mathcal{A}$ for o conjunto admissível de (P_M) , i.e.,

$$\mathcal{A} = \{x \in X : g(x) \leq 0 \text{ e } h(x) = 0\},$$

então o problema (P_M) pode ser escrito na forma

$$\min_{x \in \mathcal{A}} f(x).$$

Supomos que $\mathcal{A}$ é não vazio e que o problema (P_M) tem um minimizante local, que denotamos por $\bar{x}$.

Observação 4.1. *De um modo geral só faz sentido considerar (P_M) com $m + l \leq n$. Com efeito, se tivermos mais restrições do que graus de liberdade, então em geral a região admissível é vazia e o problema não tem solução.*

Usamos as notações

$$\nabla g(x) = \begin{bmatrix} \nabla g_1(x)^T \\ \vdots \\ \nabla g_m(x)^T \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \nabla h(x) = \begin{bmatrix} \nabla h_1(x)^T \\ \vdots \\ \nabla h_l(x)^T \end{bmatrix},$$

i.e., $\nabla g(x) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $\nabla h(x) \in \mathbb{R}^{l \times n}$ são as matrizes Jacobianas.

Terminamos esta secção introdutória relembrando o Teorema da Função Implícita.

Teorema 4.2 (Teorema da Função Implícita). *Sejam $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ e $\bar{x} = (\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_l, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_{n-l}) = (\bar{y}, \bar{z})$. Se*

1. $h(\bar{x}) = 0$;
2. h é diferenciável com continuidade numa vizinhança de $\bar{x}$;
3. a matriz Jacobiana $l \times l$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h_1(\bar{x})}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial h_1(\bar{x})}{\partial y_l} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_l(\bar{x})}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial h_l(\bar{x})}{\partial y_l} \end{bmatrix}$$

é não singular;

então existem funções $s(z) = (s_1(z), \dots, s_l(z))$ diferenciáveis com continuidade e $\varepsilon > 0$ tais que $h(s(z), z) = 0$ para todo o $z \in B(\bar{z}, \varepsilon)$. Além disso,

$$\sum_{k=1}^l \left[\frac{\partial h_i(s(z), z)}{\partial y_k} \cdot \frac{\partial s_k(z)}{\partial z_j} \right] + \frac{\partial h_i(s(z), z)}{\partial z_j} = 0$$

para todo o $i = 1, \dots, l$ e todo o $j = 1, \dots, n-l$.

4.2 Condição necessária geométrica

Dado um problema (P_M) , seja $\bar{x} \in \mathcal{A}$. Introduzimos os seguintes conjuntos:

- $F_0 := \{d \in \mathbb{R}^n : \nabla f(\bar{x})^T d < 0\}$ (conjunto das direções descendentes de f em $\bar{x}$);
- $I := \{i \in \{1, \dots, m\} : g_i(\bar{x}) = 0\}$ (conjunto dos índices das restrições de desigualdade ativas em $\bar{x}$);
- $G_0 := \{d \in \mathbb{R}^n : \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0 \text{ para todo o } i \in I\}$ (conjunto das direções admissíveis para g em $\bar{x}$);

- $H_0 := \{d \in \mathbb{R}^n : \nabla h_i(\bar{x})^T d = 0 \text{ para todo } i = 1, \dots, l\}$ (conjunto das direções tangentes às restrições de igualdade em $\bar{x}$).

É fácil de constatar que os conjuntos F_0 , G_0 e H_0 são cones convexos.

Definição 4.3. Um conjunto $C \subseteq \mathbb{R}^n$ diz-se um cone se para todo o $x \in C$ tivermos $\alpha x \in C$ para todo o $\alpha > 0$.

Exercício 4.4. Mostre que F_0 é um cone convexo, i.e., F_0 é um cone e F_0 é um conjunto convexo.

Grosso modo, o próximo teorema afirma que se um ponto $\bar{x}$ é minimizante local do problema (P_M) , então não existe nenhuma direção d que seja descendente (i.e., tal que $f(\bar{x} + \varepsilon d) < f(\bar{x})$ para $\varepsilon > 0$ pequeno) e, simultaneamente, seja uma direção admissível (i.e., tal que $g_i(\bar{x} + \varepsilon d) \leq g_i(\bar{x}) = 0$ para todo o $i \in I$ e $h(\bar{x} + \varepsilon d) = 0$), o que, intuitivamente, faz todo o sentido. Observar, no entanto, que a condição do Teorema 4.5 é algo mais fraca do que esta explicação intuitiva: com efeito, é possível haver direções descendentes d para as quais $\nabla f(\bar{x})^T d = 0$ e/ou $\nabla g(\bar{x})^T d = 0$.

Teorema 4.5. Seja $\bar{x}$ um minimizante local de (P_M) . Se os vetores gradientes $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, são linearmente independentes, então $F_0 \cap G_0 \cap H_0 = \emptyset$.

Demonstração. Seja $A = \nabla h(\bar{x}) \in \mathbb{R}^{l \times n}$. Por hipótese, A tem característica de linha completa e, por conseguinte, as suas colunas podem ser permutadas (assim como as respetivas componentes de $\bar{x}$) de tal modo que $A = [B|N]$ e $\bar{x} = (\bar{y}; \bar{z})$, com B não singular. Tomemos z numa vizinhança suficientemente próxima de $\bar{z}$. Então, pelo teorema da função implícita (Teorema 4.2), existe $s(z)$ tal que $h(s(z), z) = 0$. Suponhamos que $d \in F_0 \cap G_0 \cap H_0$ com $d = (q; p)$. Então $0 = Ad = Bq + Np$, pelo que $q = -B^{-1}Np$. Seja $z(\theta) = \bar{z} + \theta p$, $y(\theta) = s(z(\theta)) = s(\bar{z} + \theta p)$ e $x(\theta) = (y(\theta), z(\theta))$. Vamos obter uma contradição mostrando que d é uma direção admissível descendente, i.e., para $\theta > 0$ suficientemente pequeno, $x(\theta)$ é admissível e $f(x(\theta)) < f(\bar{x})$. Para mostrar a admissibilidade de $x(\theta)$, notamos que para $\theta > 0$ suficientemente pequeno, resulta do teorema da função implícita que $h(x(\theta)) = h(s(z(\theta)), z(\theta)) = 0$. Além disso, temos que

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial h_i(x(\theta))}{\partial \theta} \\ &= \sum_{k=1}^l \left[\frac{\partial h_i(s(z(\theta)), z(\theta))}{\partial y_k} \cdot \frac{\partial s_k(z(\theta))}{\partial \theta} \right] + \sum_{k=1}^{n-l} \left[\frac{\partial h_i(s(z(\theta)), z(\theta))}{\partial z_k} \cdot \frac{\partial z_k(\theta)}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (4.1)$$

para todo o $i = 1, \dots, l$. Seja $r_k := \frac{\partial s_k(z(\theta))}{\partial \theta}$ e relembremos que $\frac{\partial z_k(\theta)}{\partial \theta} = p_k$. O sistema de l equações (4.1) pode então ser reescrito como $0 = Br + Np$, ou seja,

$r = -B^{-1}Np = q$. Por conseguinte, $\frac{dx_k(\theta)}{d\theta} = d_k$ para $k = 1, \dots, n$. Para $i \in I$,

$$\begin{aligned} g_i(x(\theta)) &= g_i(\bar{x}) + \theta \left. \frac{dg_i(x(\theta))}{d\theta} \right|_{\theta=0} + |\theta|\alpha_i(\theta) \\ &= \theta \sum_{k=1}^n \frac{\partial g_i(x(\theta))}{\partial x_k} \cdot \left. \frac{dx_k(\theta)}{d\theta} \right|_{\theta=0} + |\theta|\alpha_i(\theta) \\ &= \theta \nabla g_i(\bar{x})^T d + |\theta|\alpha_i(\theta), \end{aligned}$$

onde $\alpha_i(\theta) \rightarrow 0$ à medida que $\theta \rightarrow 0$. Concluimos que $g_i(x(\theta)) < 0$, $i = 1, \dots, m$, para $\theta > 0$ suficientemente pequeno e, por conseguinte, $x(\theta)$ é admissível para todo o $\theta > 0$ suficientemente pequeno. Por outro lado,

$$f(x(\theta)) = f(\bar{x}) + \theta \nabla f(\bar{x})^T d + |\theta|\alpha(\theta) < f(\bar{x})$$

para $\theta > 0$ suficientemente pequeno, o que contradiz o facto de $\bar{x}$ ser minimizante local. A contradição vem de termos assumido a existência de um $d \in F_0 \cap G_0 \cap H_0$, pelo que o teorema está demonstrado. $\square$

No caso particular em que h é uma função linear, obtemos do Teorema 4.5 o seguinte resultado.

Corolário 4.6. *Seja h uma função linear, i.e., $h(x) = Ax - b$ com $A \in \mathbb{R}^{l \times n}$ e $b \in \mathbb{R}^l$, e $\bar{x}$ um minimizante local de (P_M) . Se A tem característica de linha completa, então $F_0 \cap G_0 \cap H_0 = \emptyset$.*

O Corolário 4.6 é uma conclusão imediata e trivial do Teorema 4.5. No entanto, como vimos, a demonstração do Teorema 4.5 com h não linear está longe de ser simples, envolvendo em particular o teorema da função implícita. Contudo, a demonstração do Teorema 4.5 para o caso em que h é linear é muito simples, não necessitando de se recorrer ao teorema da função implícita.

Exercício 4.7. Demonstre o Corolário 4.6 diretamente. Sugestão: para $h(x) = Ax - b$ tem-se $\nabla h_i(\bar{x}) = A_i$, i.e., $H_0 = \{d : Ad = 0\}$; suponha que $d \in F_0 \cap G_0 \cap H_0$ e mostre para todo o $\lambda > 0$ suficientemente pequeno se tem $\bar{x} + \lambda d \in \mathcal{A}$ com $f(\bar{x} + \lambda d) < f(\bar{x})$, contradizendo o facto de $\bar{x}$ ser minimizante local de (P_M) .

O nosso objetivo consiste em reformular a condição necessária geométrica acabada de demonstrar ($F_0 \cap G_0 \cap H_0 = \emptyset$) em condições necessárias algébricas, isto é, “algorítmicas”, em termos dos gradientes da função objetivo e das funções que definem as restrições do problema (ver Secção 4.4). O veículo que tornará tal possível envolve a teoria de separação de conjuntos convexos.

4.3 Separação de conjuntos convexos

Começamos por relembrar o conceito em geometria de hiperplano e dos seus semi-espacos associados.

Definição 4.8. *Dados um vetor p de $\mathbb{R}^n$ não-nulo e $\alpha \in \mathbb{R}$, definimos o hiperplano $H := \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x = \alpha\}$. O hiperplano H divide o espaço em dois semi-espacos: $H^+ := \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x \geq \alpha\}$ e $H^- := \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x \leq \alpha\}$.*

Vários conceitos de separação de conjuntos são possíveis.

Definição 4.9 (separação e separação própria). *Sejam S e T dois conjuntos não vazios de $\mathbb{R}^n$. Diz-se que o hiperplano $H = \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x = \alpha\}$ separa S e T se $p^T x \geq \alpha$ para todo o $x \in S$ e $p^T x \leq \alpha$ para todo o $x \in T$, i.e., $S \subseteq H^+$ e $T \subseteq H^-$. Se, além disso, $S \cup T \not\subseteq H$, então dizemos que H separa S e T no sentido próprio (separação própria).*

Definição 4.10 (separação estrita). *Sejam S e T dois conjuntos não vazios de $\mathbb{R}^n$. Diz-se que o hiperplano $H = \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x = \alpha\}$ separa estritamente S e T se $p^T x > \alpha$ para todo o $x \in S$ e $p^T x < \alpha$ para todo o $x \in T$.*

Definição 4.11 (separação forte). *Sejam S e T dois conjuntos não vazios de $\mathbb{R}^n$. Diz-se que o hiperplano $H = \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x = \alpha\}$ separa fortemente S e T se, para algum $\varepsilon > 0$, $p^T x \geq \alpha + \varepsilon > \alpha$ para todo o $x \in S$ e $p^T x \leq \alpha - \varepsilon < \alpha$ para todo o $x \in T$.*

Observação 4.12. *Resulta de imediato das definições dadas que separação forte implica separação estrita e separação estrita implica separação.*

O nosso primeiro resultado, desta secção de separação de conjuntos convexos, afirma que se S for um conjunto não vazio, fechado e convexo de $\mathbb{R}^n$ e y for um ponto não pertencente a S , então existe um único ponto em S à distância mínima de y . Além disso, obtemos uma caracterização desse ponto. A demonstração deste nosso resultado (Teorema 4.14) faz uso da desigualdade triangular em $\mathbb{R}^n$, que relembramos aqui.

Proposição 4.13 (desigualdade triangular). *Em $\mathbb{R}^n$, tem-se*

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

qualquer que sejam $x, y \in \mathbb{R}^n$, havendo igualdade se, e somente se, x e y forem linearmente dependentes.

Teorema 4.14. *Seja S um conjunto não vazio, fechado e convexo de $\mathbb{R}^n$ e $y \notin S$. Então, existe um único ponto $\bar{x} \in S$ à distância mínima de y . Além disso, $\bar{x} \in S$ é o ponto à distância mínima de y se, e somente se, $(y - \bar{x})^T(x - \bar{x}) \leq 0$ para todo o $x \in S$.*

Demonstração. Seja $\hat{x}$ um ponto arbitrário de S e definamos

$$\bar{S} := S \cap \{x \in \mathbb{R}^n : \|x - y\| \leq \|\hat{x} - y\|\}.$$

Por definição, $\bar{S}$ é um conjunto compacto de $\mathbb{R}^n$. Seja $f(x) = \|x - y\|$. Então, pelo teorema de Weierstrass (Teorema 1.23), f atinge o seu mínimo sobre o conjunto $\bar{S}$ num determinado ponto $\bar{x} \in \bar{S}$. Note-se que $\bar{x} \neq y$. Para mostrarmos a unicidade de tal ponto $\bar{x}$, suponhamos que existe $x' \in S$ para o qual

$$f(\bar{x}) = \|y - \bar{x}\| = \|y - x'\| = f(x') =: d.$$

Usando o facto de S ser um conjunto convexo, sabemos que $\frac{1}{2}(\bar{x} + x') \in S$. Resulta da desigualdade triangular (Proposição 4.13) que

$$\begin{aligned} \left\| y - \frac{1}{2}(\bar{x} + x') \right\| &= \left\| \frac{1}{2}y - \frac{1}{2}\bar{x} + \frac{1}{2}y - \frac{1}{2}x' \right\| = \left\| \frac{1}{2}(y - \bar{x}) + \frac{1}{2}(y - x') \right\| \\ &\leq \frac{1}{2} \|y - \bar{x}\| + \frac{1}{2} \|y - x'\| = d. \end{aligned}$$

Notar que se a desigualdade $\left\| y - \frac{1}{2}(\bar{x} + x') \right\| \leq d$ anterior se verificar de modo estrito, então temos uma contradição. Isto significa que temos obrigatoriamente de ter igualdade e, pela Proposição 4.13, concluímos que os vetores $y - \bar{x}$ e $y - x'$ são linearmente dependentes, i.e., existe λ para o qual $y - \bar{x} = \lambda(y - x')$. Uma vez que $\|y - \bar{x}\| = \|y - x'\| = d$, resulta que $|\lambda| = 1 \Leftrightarrow \lambda = \pm 1$. Se $\lambda = -1$, então $y = \frac{1}{2}(\bar{x} + x') \in S$, contradizendo o facto de $y \notin S$. Por conseguinte, $\lambda = 1$, ou seja, $x' = \bar{x}$, o que demonstra a unicidade de $\bar{x}$. Resta-nos agora demonstrar que $\bar{x}$ é o minimizante de $f(x) = \|x - y\|$ se, e somente se, $(y - \bar{x})^T(x - \bar{x}) \leq 0$ para todo o $x \in S$.

($\Leftarrow$) Se $(y - \bar{x})^T(x - \bar{x}) \leq 0$ para todo o $x \in S$, então

$$\begin{aligned} \|x - y\|^2 &= \|(x - \bar{x}) - (y - \bar{x})\|^2 = \|x - \bar{x}\|^2 + \|y - \bar{x}\|^2 - 2(x - \bar{x})^T(y - \bar{x}) \\ &= \|\bar{x} - x\|^2 + \|\bar{x} - y\|^2 - 2(y - \bar{x})^T(x - \bar{x}) \geq \|\bar{x} - y\|^2, \quad \forall x \in S, \end{aligned}$$

ou seja, $\bar{x}$ é o minimizante de $f(x) = \|x - y\|$ em S .

($\Rightarrow$) Seja $\bar{x}$ o minimizante de $f(x) = \|x - y\|$ em S . Para todo o $x \in S$, $\lambda x + (1 - \lambda)\bar{x} \in S$ para todo o $\lambda \in [0, 1]$ (S é convexo). Além disso, sabemos que $f(\lambda x + (1 - \lambda)\bar{x}) = \|\lambda x + (1 - \lambda)\bar{x} - y\| \geq \|\bar{x} - y\| = f(\bar{x})$ ($\bar{x}$ é minimizante de f). Como consequência,

$$\begin{aligned} \|\bar{x} - y\|^2 &\leq \|\lambda x + (1 - \lambda)\bar{x} - y\|^2 = \|\lambda(x - \bar{x}) + (\bar{x} - y)\|^2 \\ &= \lambda^2 \|x - \bar{x}\|^2 + 2\lambda(x - \bar{x})^T(\bar{x} - y) + \|\bar{x} - y\|^2 \end{aligned}$$

ou, o que é equivalente,

$$\lambda^2 \|x - \bar{x}\|^2 \geq 2\lambda(y - \bar{x})^T(x - \bar{x}). \quad (4.2)$$

A desigualdade (4.2) implica que $(y - \bar{x})^T(x - \bar{x}) \leq 0$ para todo o $x \in S$ uma vez que se isto não fosse verdade, então a expressão (4.2) seria invalidada escolhendo $\lambda > 0$ suficientemente pequeno. $\square$

Com a ajuda do Teorema 4.14, obtemos o seguinte resultado.

Teorema 4.15. *Seja S um conjunto não vazio, fechado e convexo de $\mathbb{R}^n$ e y um ponto não pertencente a S ($y \notin S$). Então, existem $p \neq 0$ e α , que definem o hiperplano $H = \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x = \alpha\}$ que separa S de $\{y\}$ no sentido forte.*

Demonstração. Seja $\bar{x} \in S$ o ponto que minimiza a distância de y ao conjunto S , ponto este que sabemos, pelo Teorema 4.14, existir de maneira única. Definamos

$$p := y - \bar{x}, \quad \alpha := \frac{1}{2}(y - \bar{x})^T(y + \bar{x}), \quad \varepsilon := \frac{1}{2}\|y - \bar{x}\|^2 = \frac{1}{2}(y - \bar{x})^T(y - \bar{x}).$$

Obviamente, $\bar{x} \neq y$, pelo que $p \neq 0$. Para todo o $x \in S$, sabemos do Teorema 4.14 que

$$(x - \bar{x})^T(y - \bar{x}) \leq 0 \Leftrightarrow x^T(y - \bar{x}) \leq \bar{x}^T(y - \bar{x}) \Leftrightarrow x^T p \leq \bar{x}^T(y - \bar{x}) + \varepsilon - \varepsilon. \quad (4.3)$$

Usando a definição de ε , podemos escrever (4.3) na forma

$$\begin{aligned} x^T p &\leq \bar{x}^T y - \bar{x}^T \bar{x} + \frac{1}{2}(y - \bar{x})^T(y - \bar{x}) - \varepsilon \\ &= \bar{x}^T y - \bar{x}^T \bar{x} + \frac{1}{2}[y^T(y - \bar{x}) - \bar{x}^T(y - \bar{x})] - \varepsilon \\ &= \bar{x}^T y - \bar{x}^T \bar{x} + \frac{1}{2}y^T y - \frac{1}{2}y^T \bar{x} - \frac{1}{2}\bar{x}^T y + \frac{1}{2}\bar{x}^T \bar{x} - \varepsilon \\ &= -\frac{1}{2}\bar{x}^T \bar{x} + \frac{1}{2}y^T y - \varepsilon. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Atendendo a que

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2}(y - \bar{x})^T(y + \bar{x}) = \frac{1}{2}[y^T(y + \bar{x}) - \bar{x}^T(y + \bar{x})] \\ &= \frac{1}{2}(y^T y + y^T \bar{x} - \bar{x}^T y - \bar{x}^T \bar{x}) = \frac{1}{2}y^T y - \frac{1}{2}\bar{x}^T \bar{x}, \end{aligned}$$

resulta de (4.4) que $p^T x \leq \alpha - \varepsilon$ para todo o $x \in S$. Por outro lado,

$$\alpha + \varepsilon = \frac{1}{2}(y - \bar{x})^T(y + \bar{x}) + \frac{1}{2}(y - \bar{x})^T(y - \bar{x}) = \frac{1}{2}(y - \bar{x})^T(y + \bar{x} + y - \bar{x}) = (y - \bar{x})^T y,$$

pelo que $p^T y = (y - \bar{x})^T y = \alpha + \varepsilon$, estabelecendo-se o resultado pretendido. $\square$

Resultam de imediato os seguintes corolários.

Corolário 4.16. *Se S é um conjunto fechado e convexo de $\mathbb{R}^n$, então S é a intersecção de todos os semi-espacos que o contêm.*

Corolário 4.17. *Seja $S \subset \mathbb{R}^n$ e C a intersecção de todos os semi-espacos que contêm S . Então C é o menor conjunto fechado e convexo que contém S .*

O próximo resultado de separação de dois conjuntos é demonstrado recorrendo ao Teorema 4.15.

Teorema 4.18. *Sejam S_1 e S_2 dois conjuntos de $\mathbb{R}^n$ não vazios, disjuntos, fechados e convexos, com S_1 limitado. Então, S_1 e S_2 podem ser separados, no sentido forte, por um hiperplano.*

Demonstração. Seja $T := \{x \in \mathbb{R}^n : x = y - z, \text{ onde } y \in S_1, z \in S_2\}$. Podemos facilmente demonstrar que T é um conjunto convexo. Para isso, consideremos $x_1, x_2 \in T$ arbitrários. Então, $x_1 = y_1 - z_1$ e $x_2 = y_2 - z_2$ com $y_1, y_2 \in S_1$ e $z_1, z_2 \in S_2$. Mostrar que T é convexo consiste, por definição, mostrar que

$$\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 = \lambda(y_1 - z_1) + (1 - \lambda)(y_2 - z_2) = \lambda y_1 + (1 - \lambda)y_2 - [\lambda z_1 + (1 - \lambda)z_2]$$

pertence a T qualquer que seja o $\lambda \in [0, 1]$. Tal é verdade, por definição de T , pois $\lambda y_1 + (1 - \lambda)y_2 \in S_1$ (S_1 é convexo) e $\lambda z_1 + (1 - \lambda)z_2 \in S_2$ (S_2 é convexo). Além de convexo, T é também um conjunto fechado. Para demonstrarmos este facto, seja $\{x_i\}_{i=1}^{+\infty}$ uma sucessão de elementos de T e suponhamos que $\bar{x} = \lim_{i \rightarrow +\infty} x_i$. Então, para todo o $i \in \mathbb{N}$, $x_i = y_i - z_i$ com $y_i \in S_1$ e $z_i \in S_2$. Pelo Teorema de Weierstrass para sucessões (Teorema 1.22), existe uma subsucessão de $\{y_i\}_{i=1}^{+\infty}$ que converge para um ponto $\bar{y} \in S_1$ (S_1 é um conjunto fechado e limitado). Então, para essa subsucessão, $z_i = y_i - x_i \rightarrow \bar{y} - \bar{x}$, de modo que $\bar{z} = \bar{y} - \bar{x}$ é o ponto limite (ponto de acumulação) da sucessão $\{z_i\}_{i=1}^{+\infty}$. Uma vez que S_2 é também um conjunto fechado, $\bar{z} \in S_2$ e, por conseguinte, $\bar{x} = \bar{y} - \bar{z} \in T$, demonstrando-se assim que T é um conjunto fechado. Vamos agora aplicar o Teorema 4.15 ao nosso conjunto T que, como sabemos, é um conjunto não vazio, fechado e convexo de $\mathbb{R}^n$. Por hipótese, $S_1 \cap S_2 = \emptyset$ (S_1 e S_2 são disjuntos), pelo que $0 \notin T$. Segue-se do Teorema 4.15 que existe um hiperplano $H = \{x \in \mathbb{R}^n : p^T x = \bar{\alpha}\}$ tal que $p^T x > \bar{\alpha}$ para todo o $x \in T$ e $p^T 0 < \bar{\alpha} \Leftrightarrow \bar{\alpha} > 0$. Por conseguinte, $p^T x > 0$. Seja $y \in S_1$ e $z \in S_2$. Então, $x = y - z \in T$ e portanto $p^T(y - z) > \bar{\alpha} > 0$ para todo o $y \in S_1$ e $z \in S_2$. Seja $\alpha_1 := \inf \{p^T y : y \in S_1\}$ e $\alpha_2 := \sup \{p^T z : z \in S_2\}$. Notar que $0 < \bar{\alpha} \leq \alpha_1 - \alpha_2$. Definimos agora $\alpha := \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2)$ e $\varepsilon := \frac{1}{2}\bar{\alpha} > 0$. Então,

$$p^T y \geq \alpha_1 = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2) + \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2) \geq \alpha + \frac{1}{2}\bar{\alpha} = \alpha + \varepsilon$$

e

$$p^T z \leq \alpha_2 = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2) - \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2) \leq \alpha - \frac{1}{2}\bar{\alpha} = \alpha - \varepsilon$$

para todo o $y \in S_1$ e $z \in S_2$, ou seja, S_1 e S_2 são separáveis no sentido forte da Definição 4.11. $\square$

Vamos agora formular e demonstrar o chamado lema de Farkas, originalmente demonstrado pelo matemático húngaro Gyula Farkas (1847–1930). O lema de Farkas é o resultado principal de dualidade da programação linear e tem um papel central no desenvolvimento da otimização/programação matemática: como veremos, é usado na demonstração do teorema de Fritz John, um dos resultados principais da programação não linear e do nosso curso.

Teorema 4.19 (Lema de Farkas). *Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e um vetor $c \in \mathbb{R}^n$, exatamente um dos seguintes dois sistemas tem uma solução:*

$$(i) \quad Ax \leq 0, \quad c^T x > 0;$$

$$(ii) \quad A^T y = c, \quad y \geq 0.$$

Demonstração. Começamos por notar que não é possível ambos os sistemas terem simultaneamente uma solução, uma vez que isso implicaria ter

$$0 < c^T x = y^T Ax \leq 0,$$

o que seria uma contradição. Logo, ou (i) ou (ii) tem solução, mas não ambos. Notamos agora que para o resultado ficar demonstrado basta mostrar que se (ii) não tem solução, então (i) tem solução, pois isso equivale, pelo *modus tollens* da lógica matemática, a afirmar que se (i) não tem solução, então (ii) tem. Suponhamos então que o sistema (ii) não tem solução. Seja $S := \{x \in \mathbb{R}^n : x = A^T y \text{ para algum } y \geq 0\}$. Então, $c \notin S$. É fácil de ver que S é um conjunto convexo: se $x_1 \in S$ e $x_2 \in S$, então $x_1 = A^T y_1$ e $x_2 = A^T y_2$ com $y_1, y_2 \geq 0$, pelo que

$$\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 = \lambda (A^T y_1) + (1 - \lambda) (A^T y_2) = A^T [\lambda y_1 + (1 - \lambda)y_2]$$

pertence a S para todo o $\lambda \in [0, 1]$, pois $y = \lambda y_1 + (1 - \lambda)y_2 \geq 0$. Além de convexo, S é também um conjunto fechado. Por conseguinte, existem p e α que definem um hiperplano que separa S e $\{c\}$ no sentido forte (Teorema 4.18), pelo que podemos afirmar que $p^T c > \alpha$ e $p^T (A^T y) = (Ap)^T y \leq \alpha$ para todo o $y \geq 0$. Se $(Ap)_i > 0$ para algum i , então poderemos escolher y_i suficientemente grande de tal modo que $(Ap)^T y > \alpha$, o que é uma contradição. Concluimos que $Ap \leq 0$. Tomando $y = 0$, temos que $\alpha \geq 0$ e, por isso, $c^T p > 0$ e p é uma solução de (i). $\square$

O resultado chave para demonstrarmos o tão almejado teorema de Fritz John é o seguinte corolário do Lema de Farkas.

Corolário 4.20 (Corolário do Lema de Farkas). *Sejam A , B e H matrizes de dimensões apropriadas. Se o sistema*

$$Ax < 0, \quad Bx \leq 0 \quad e \quad Hx = 0 \tag{i}$$

não tem solução, então o sistema

$$A^T u + B^T w + H^T v = 0, \quad u \geq 0, \quad w \geq 0, \quad e^T u = 1 \tag{ii}$$

tem solução, onde $e = (1, \dots, 1)$.

Demonstração. Suponhamos que (i) não tem solução. Então, o sistema

$$\begin{aligned} Ax + e\theta &\leq 0, \quad \theta > 0 \\ Bx &\leq 0 \\ Hx &\leq 0 \\ -Hx &\leq 0 \end{aligned}$$

não tem solução. Este último sistema pode ser reescrito na forma

$$\begin{bmatrix} A & e \\ B & 0 \\ H & 0 \\ -H & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ \theta \end{pmatrix} \leq 0, \quad (0, \dots, 0, 1) \cdot \begin{pmatrix} x \\ \theta \end{pmatrix} > 0.$$

Do Lema de Farkas (Teorema 4.19), sabemos que existe $y = (u, w, v^1, v^2) \geq 0$ tal que

$$\begin{bmatrix} A & e \\ B & 0 \\ H & 0 \\ -H & 0 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} u \\ w \\ v^1 \\ v^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} A^T & B^T & H^T & -H^T \\ e^T & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ w \\ v^1 \\ v^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

O sistema (4.5) pode ser reescrito como

$$A^T u + B^T w + H^T(v^1 - v^2) = 0, \quad e^T u = 1.$$

A demonstração fica completa fazendo $v = v^1 - v^2$. □

4.4 Condições necessárias algébricas

As condições de Fritz John (ou, abreviadamente, condições FJ) são as condições necessárias de otimalidade fundamentais para a solução de um problema de programação não linear, sendo demonstradas por intermédio do Corolário do Lema de Farkas (do Corolário 4.20). As condições de Fritz John foram demonstradas em 1948 pelo matemático alemão Fritz John (1910–1994). Elas são também usadas, como veremos, na demonstração das condições necessárias de Karush–Kuhn–Tucker.

Teorema 4.21 (condições necessárias de Fritz John). *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ funções diferenciáveis e $\bar{x}$ admissível para o problema de programação matemática*

$$\begin{aligned} &\min f(x) \\ \text{sujeito a } &g(x) \leq 0, \\ &h(x) = 0, \\ &x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \text{ aberto,} \end{aligned} \quad (P)$$

isto é, $g(\bar{x}) \leq 0$, $h(\bar{x}) = 0$ e $\bar{x} \in X$. Se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) , então existem multiplicadores $(u_0, u, v) \in \mathbb{R}^{1+m+l}$ tais que:

$$u_0 \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\bar{x}) = 0, \quad (4.6)$$

$$u_0, u \geq 0, \quad (4.7)$$

$$(u_0, u, v) \neq 0, \quad (4.8)$$

$$u_i g_i(\bar{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (4.9)$$

Demonstração. Se os vetores $\nabla h_i(\bar{x})$ forem linearmente dependentes, então existe $v \neq 0$ tal que $v^T \nabla h(\bar{x}) = 0$. O resultado fica demonstrado com $(u_0, u) = 0$: todas as condições (4.6)–(4.9) são satisfeitas. Suponhamos agora que os vetores $\nabla h_i(\bar{x})$ são linearmente independentes. Então, podemos aplicar a condição necessária geométrica (Teorema 4.5): se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) e os vetores gradientes $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, são linearmente independentes, então $F_0 \cap G_0 \cap H_0 = \emptyset$. Vamos assumir, sem perda de generalidade, que $I = \{1, \dots, p\}$. Seja

$$A = \begin{bmatrix} \nabla f(\bar{x})^T \\ \nabla g_1(\bar{x})^T \\ \vdots \\ \nabla g_p(\bar{x})^T \end{bmatrix}, \quad H = \begin{bmatrix} \nabla h_1(\bar{x})^T \\ \vdots \\ \nabla h_l(\bar{x})^T \end{bmatrix}.$$

Então, não existe nenhuma d solução de $Ad < 0$ e $Hd = 0$. Resulta do Corolário 4.20 do Lema de Farkas, com $B = 0$, que existem $(u_0, u_1, \dots, u_p)$ e $(v_1, \dots, v_l)$ tais que

$$u_0 \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^p u_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\bar{x}) = 0 \quad (4.10)$$

com $(u_0, u_1, \dots, u_p) \geq 0$ e $u_0 + u_1 + \dots + u_p = 1$. Definamos

$$u_{p+1} = \dots = u_m = 0. \quad (4.11)$$

Então, $(u_0, u) \geq 0$, $(u_0, u) \neq 0$ e, para cada i , ou $g_i(\bar{x}) = 0$ (quando $i \in I$) ou $u_i = 0$ (quando $i \notin I$). Finalmente, vem de (4.10) e (4.11) que

$$u_0 \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\bar{x}) = 0,$$

o que demonstra o resultado pretendido. $\square$

Observação 4.22. As condições necessárias dadas pelo Teorema 4.21 de Fritz John têm nomes na literatura: (4.6) é conhecida como condição de estacionariedade; (4.7) como as condições de não negatividade; (4.8) é a condição de não

trivialidade; e (4.9) as chamadas condições de complementaridade. A condição de estacionariedade (4.6) pode ser reescrita na forma equivalente

$$u_0 \nabla f(\bar{x}) + \nabla g(\bar{x})^T u + \nabla h(\bar{x})^T v = 0$$

ou, se introduzirmos a função de Lagrange $\mathcal{L}(x) := u_0 f(x) + u^T g(x) + v^T h(x)$, como $\nabla \mathcal{L}(\bar{x}) = 0$.

As condições de Karush–Kuhn–Tucker, também conhecidas como condições KKT, são, tal como as condições de Fritz John, condições de otimalidade de primeira ordem. Ao contrário das condições de Fritz John, as condições KKT são apenas válidas sob certas hipóteses, chamadas na literatura de *restrições de qualificação* (um assunto a ser discutido com mais detalhe na Secção 4.7). As condições KKT generalizam o método dos multiplicadores de Lagrange que permite, como sabemos, apenas lidar com problemas de otimização sujeitos a restrições de igualdade. As condições KKT foram originalmente publicadas em 1951, estando associadas aos matemáticos norte-americanos William Karush (1917–1997) e Harold W. Kuhn (1925–2014) e ao matemático canadiano Albert W. Tucker (1905–1995).

Teorema 4.23 (condições necessárias de Karush–Kuhn–Tucker). *Considere-mos o problema de programação matemática*

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ & \text{sujeito a} \quad g(x) \leq 0, \\ & \quad h(x) = 0, \\ & \quad x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \text{ aberto,} \end{aligned} \tag{P}$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ são funções diferenciáveis. Seja $\bar{x}$ admissível para (P), i.e., $g(\bar{x}) \leq 0$, $h(\bar{x}) = 0$ e $\bar{x} \in X$, e seja $I = \{i : g_i(\bar{x}) = 0\}$. Suponhamos que o conjunto dos vetores $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, e $\nabla g_i(\bar{x})$, $i \in I$, é um conjunto linearmente independente. Se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P), então existem multiplicadores $(u, v) \in \mathbb{R}^{m+l}$ tais que:

$$\nabla f(\bar{x}) + \nabla g(\bar{x})^T u + \nabla h(\bar{x})^T v = 0, \tag{4.12}$$

$$u \geq 0, \tag{4.13}$$

$$u_i g_i(\bar{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \tag{4.14}$$

Demonstração. Seja $\bar{x}$ minimizante local de (P). Então, $\bar{x}$ tem de satisfazer, obrigatoriamente, as condições necessárias de Fritz John. Se $u_0 > 0$, podemos

dividir as condições (4.6)–(4.9) por u_0 , obtendo que

$$\begin{aligned} \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \frac{u_i}{u_0} \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{i=1}^l \frac{v_i}{u_0} \nabla h_i(\bar{x}) &= 0, \\ 1 &\geq 0, \quad \frac{u}{u_0} \geq 0, \\ \left(1, \frac{u}{u_0}, \frac{v}{u_0}\right) &\neq 0, \\ \frac{u_i}{u_0} g_i(\bar{x}) &= 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

O resultado pretendido segue-se redefinindo

$$u := \frac{u}{u_0} \quad \text{e} \quad v := \frac{v}{u_0}.$$

Caso contrário, isto é, se $u_0 = 0$, então

$$\sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\bar{x}) = 0$$

e, por conseguinte, os gradientes acima são linearmente dependentes. Isto contradiz a hipótese do teorema, pelo que $u_0 \neq 0$. $\square$

Observação 4.24. De modo semelhante às designações dadas às condições do Teorema de Fritz John, chamamos (4.12) de condição de estacionaridade; (4.13) de condição de não negatividade; e (4.14) de condições de complementaridade do Teorema de Karush–Kuhn–Tucker.

Observação 4.25. As condições de otimalidade do Teorema 4.23 são um caso particular das do Teorema 4.21 onde $u_0 = 1$. A hipótese do Teorema 4.23 de que o conjunto dos vetores $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, e $\nabla g_i(\bar{x})$, $i \in I$, é um conjunto linearmente independente, elimina a possibilidade de $u_0 = 0$. Reparar, no entanto, que esta hipótese apenas pode ser verificada se conhecermos $\bar{x}$.

Definição 4.26 (minimizantes anormais e normais). Um minimizante $\bar{x}$ do problema de programação matemática (P) que satisfaz as condições necessárias de Fritz John (que satisfaz o Teorema 4.21) com $u_0 = 0$ diz-se um minimizante anormal; caso contrário (i.e., se $u_0 \neq 0$), dizemos que $\bar{x}$ é um minimizante normal.

Resulta da Definição 4.26 que enquanto o Teorema de FJ cobre todos os possíveis minimizantes de um problema de programação matemática, quer sejam anormais ou normais, o Teorema de KKT apenas cobre o chamado caso normal: a hipótese adicional de que o conjunto dos vetores $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, e $\nabla g_i(\bar{x})$, $i \in I$, é um conjunto linearmente independente, elimina a possibilidade de $\bar{x}$ ser minimizante anormal. Significa isto que se um dado problema tiver uma solução

anormal ela apenas poderá ser identificada por intermédio do Teorema de Fritz John. Dada a importância dos Teoremas de FJ e KKT, que são, sem sombra de dúvida, os resultados centrais da Programação Matemática, seguem-se vários exemplos resolvidos de aplicação destes dois teoremas.

Exemplo 4.27 ($n = 3, m = 0, l = 2$). Consideremos o problema

$$\begin{aligned} f(x) &\longrightarrow \min, \\ h_1(x) &= 0, \\ h_2(x) &= 0, \end{aligned}$$

com $x \in X = \mathbb{R}^3$,

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_1, x_2, x_3) = \frac{x_3^2}{2} - x_1x_2, \\ h_1(x) &= x_1^2 + x_2 - 1, \\ h_2(x) &= x_1 + x_3 - 1. \end{aligned}$$

Definindo a função de Lagrange $\mathcal{L}(x) := u_0f(x) + v_1h_1(x) + v_2h_2(x)$, as condições necessárias do teorema de Fritz John (Teorema 4.21) afirmam que

$$\begin{aligned} \nabla \mathcal{L}(x) &= 0, \\ u_0 &\geq 0, \\ (u_0, v_1, v_2) &\neq 0. \end{aligned}$$

Desenvolvendo a condição de estacionariedade $\nabla \mathcal{L}(x) = 0$, obtemos

$$\begin{cases} -u_0x_2 + 2v_1x_1 + v_2 = 0, \\ -u_0x_1 + v_1 + 0 = 0, \\ u_0x_3 + 0 + v_2 = 0. \end{cases} \quad (4.15)$$

Começamos por analisar a possibilidade de ocorrência do caso anormal, fazendo $u_0 = 0$: nesse caso (4.15) reduz-se a

$$\begin{cases} 2v_1x_1 + v_2 = 0, \\ v_1 = 0, \\ v_2 = 0, \end{cases}$$

o que é impossível devido à condição de não trivialidade $(u_0, v_1, v_2) \neq 0$. Concluímos que o problema não tem minimizantes anormais e podemos, por isso, fixar $u_0 = 1$. Os candidatos a minimizantes (os pontos críticos, solução das condições necessárias de otimalidade de primeira ordem) são então obtidos resolvendo o seguinte sistema de cinco equações nas cinco incógnitas x_1, x_2, x_3, v_1, v_2 :

$$\begin{cases} -x_2 + 2v_1x_1 + v_2 = 0, \\ -x_1 + v_1 = 0, \\ x_3 + v_2 = 0, \\ x_1^2 + x_2 - 1 = 0, \\ x_1 + x_3 - 1 = 0. \end{cases} \quad (4.16)$$

Notar que as primeiras três equações correspondem às condições de estacionariedade e as duas últimas são as restrições $h_1(x) = 0$ e $h_2(x) = 0$ do problema. O sistema (4.16) pode ser facilmente resolvido à mão ou através de um qualquer sistema de computação algébrica. Vamos aqui resolvê-lo usando o Maple:

```
eq1 := -x_2 + 2 * v_1 * x_1 + v_2 = 0:
eq2 := -x_1 + v_1 = 0:
eq3 := x_3 + v_2 = 0:
eq4 := x_1^2 + x_2 - 1 = 0:
eq5 := x_1 + x_3 - 1 = 0:
solve({eq1, eq2, eq3, eq4, eq5}, {x_1, x_2, x_3, v_1, v_2});
```

$$\{x_1 = -1, x_2 = 0, x_3 = 2, v_1 = -1, v_2 = -2\},$$

$$\left\{x_1 = \frac{2}{3}, x_2 = \frac{5}{9}, x_3 = \frac{1}{3}, v_1 = \frac{2}{3}, v_2 = -\frac{1}{3}\right\}.$$

Temos então dois pontos críticos, sendo que claramente o primeiro é candidato a maximizante e o segundo a minimizante:

$$f(-1, 0, 2) = 2, \quad f\left(\frac{2}{3}, \frac{5}{9}, \frac{1}{3}\right) = -\frac{17}{54}.$$

A mesma conclusão se obtém se, em vez de recorrermos ao teorema de Fritz John, recorrermos ao teorema de Karush–Kuhn–Tucker (Teorema 4.23). Com efeito, reparamos que a hipótese do Teorema 4.23, de que o conjunto formado pelos vetores $\nabla h_1(\bar{x})$ e $\nabla h_2(\bar{x})$ é um conjunto linearmente independente, é satisfeita para ambos os pontos críticos $\bar{x} = (-1, 0, 2)$ e $\bar{x} = (\frac{2}{3}, \frac{5}{9}, \frac{1}{3})$, já que os vetores

$$\nabla h_1(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 2\bar{x}_1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \nabla h_2(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

são linearmente independentes.

Ao contrário do exemplo anterior, vamos ver agora alguns problemas anormais que, como tal, não são cobertos pelo teorema de Karush–Kuhn–Tucker. Tais exemplos mostram claramente que o teorema de Fritz John é mais geral do que o de Karush–Kuhn–Tucker.

Exemplo 4.28 ($n = 2, m = 0, l = 1$). Consideramos agora em $\mathbb{R}^2$ o problema

$$x^2 + y^2 \longrightarrow \min,$$

$$x^2 - y^2 = 0.$$

Neste caso temos $f(x, y) = x^2 + y^2$ e $h(x, y) = x^2 - y^2$, pelo que a função de Lagrange é dada por $\mathcal{L}(x, y) = u_0(x^2 + y^2) + v(x^2 - y^2)$. A condição de

estacionaridade do Teorema de Fritz John afirma que

$$\nabla \mathcal{L}(x, y) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} 2u_0x + 2vx = 0, \\ 2u_0y - 2vy = 0. \end{cases}$$

Começamos por estudar o caso anormal fazendo $u_0 = 0$: a condição de estacionaridade reduz-se então a

$$\begin{cases} 2vx = 0, \\ -2vy = 0, \end{cases}$$

o que implica, já que pela condição de não trivialidade $v \neq 0$, que $x = 0$ e $y = 0$. Como $(0, 0)$ satisfaz a restrição do problema $h(x, y) = 0$, concluímos que $(0, 0)$ é um ponto crítico anormal do problema. Na verdade, ele é minimizante global (anormal) uma vez que $f(x, y) \geq 0$ para todo o $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ e $f(0, 0) = 0$.

Vamos averiguar se existem mais pontos críticos, estudando agora o caso normal, isto é, fixando $u_0 = 1$. Para isso temos de resolver o seguinte sistema de três equações a três incógnitas:

$$\begin{cases} 2x + 2vx = 0, \\ 2y - 2vy = 0, \\ x^2 - y^2 = 0, \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x(1 + v) = 0, \\ y(1 - v) = 0, \\ x^2 = y^2. \end{cases}$$

As duas primeiras equações afirmam, respetivamente, que $x = 0$ ou $v = -1$ e que $y = 0$ ou $v = 1$. Existem assim quatro situações a estudar: (i) se $x = 0$, então vem da terceira equação que $y = 0$; (ii) se $v = -1$, então da segunda equação $y = 0$ e, da terceira, $x = 0$; (iii) se $y = 0$, então vem da terceira equação que $x = 0$; (iv) se $v = 1$, então da primeira equação $x = 0$ e, da terceira, $y = 0$. Após este estudo de todas as possibilidades, concluímos que não existem mais pontos críticos além do $(0, 0)$. Reparar que o minimizante do nosso problema, isto é, $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0)$, que sabemos ser anormal, não satisfaz a hipótese do teorema de Karush–Kuhn–Tucker, uma vez que neste exemplo o conjunto dos vetores $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, e $\nabla g_i(\bar{x})$, $i \in I$, que aparece na hipótese do Teorema 4.23 de KKT, é um conjunto formado apenas pelo vetor nulo $\nabla h(\bar{x}, \bar{y}) = (2\bar{x}, -2\bar{y}) = (0, 0)$ que, por definição, não é um conjunto linearmente independente (relembremos que um conjunto unitário é linearmente independente apenas se o seu único elemento não for o vetor nulo).

Exemplo 4.29 ($n = 2$, $m = 0$, $l = 1$). Consideremos o problema de otimização

$$\begin{aligned} x^2 + y^2 &\longrightarrow \min, \\ (y - 1)^3 - x^2 &= 0. \end{aligned}$$

A função de Lagrange é dada por $\mathcal{L}(x, y) = u_0(x^2 + y^2) + v[(y - 1)^3 - x^2]$, pelo que a condição de estacionaridade de FJ afirma que

$$\nabla \mathcal{L}(x, y) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} 2u_0x - 2vx = 0, \\ 2u_0y + 3v(y - 1)^2 = 0. \end{cases} \quad (4.17)$$

Começemos por estudar o caso anormal, i.e., fixemos $u_0 = 0$: a condição de não trivialidade afirma que $v \neq 0$, pelo que concluímos de (4.17) que $x = 0$ e $y = 1$. Existe então um ponto crítico anormal: $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 1)$. Continuemos a análise do problema à luz das condições necessárias de FJ, estudando agora o caso normal $u_0 = 1$ e averiguando se existem, ou não, mais pontos críticos. Para $u_0 = 1$, obtemos de (4.17) e da restrição do problema que

$$\begin{cases} 2x - 2vx = 0, \\ 2y + 3v(y - 1)^2 = 0, \\ (y - 1)^3 - x^2 = 0, \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x(1 - v) = 0, \\ 2y + 3v(y - 1)^2 = 0, \\ x^2 = (y - 1)^3. \end{cases} \quad (4.18)$$

Da primeira equação, temos duas situações a estudar: $x = 0$ ou $v = 1$.

(i) Se $x = 0$, então obtemos o sistema

$$\begin{cases} 2y + 3v(y - 1)^2 = 0, \\ (y - 1)^3 = 0, \end{cases}$$

que é um sistema impossível.

(ii) Se $v = 1$, então obtemos de (4.18) o sistema

$$\begin{cases} 2y + 3(y - 1)^2 = 0, \\ x^2 = (y - 1)^3, \end{cases}$$

que é também um sistema impossível em $\mathbb{R}^2$, já que a equação de segundo grau $2y + 3(y - 1)^2 = 0 \Leftrightarrow 3y^2 - 4y + 3 = 0$ não tem raízes reais. Concluimos que não há pontos críticos normais e o minimizante, a existir, será anormal e igual a $(0, 1)$. De modo semelhante ao Exemplo 4.28, também para este problema não podemos aplicar o Teorema 4.23 de KKT uma vez que $\nabla h(x, y) = (-2x, 3(y - 1)^2)$, o que em $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 1)$ nos dá o vetor nulo: $\nabla h(0, 1) = (0, 0)$.

Vamos agora analisar um problema muito simples de otimização em que existem infinitos pontos críticos, todos eles anormais, todos eles não possíveis de identificar via condições de KKT (a hipótese do Teorema 4.23 não é satisfeita).

Exemplo 4.30 ($n = 2$, $m = 0$, $l = 1$). Considere-se o problema

$$\begin{aligned} x &\longrightarrow \min, \\ x^2 + \sin^2 y &= 0 \end{aligned}$$

para $(x, y) \in \mathbb{R}^2$. A condição de estacionaridade $\nabla \mathcal{L}(x, y) = 0$, com

$$\mathcal{L}(x, y) = u_0 x + v(x^2 + \sin^2 y),$$

afirma que

$$\begin{cases} u_0 + 2vx = 0, \\ 2v \sin y \cos y = 0. \end{cases} \quad (4.19)$$

É fácil de ver que não há minimizantes normais: para $u_0 = 1$ (o caso considerado por Karush–Kuhn–Tucker), obtemos de (4.19), e da restrição $x^2 + \sin^2 y = 0$ do problema, o sistema

$$\begin{cases} 1 + 2vx = 0, \\ 2v \sin y \cos y = 0, \\ x^2 + \sin^2 y = 0, \end{cases}$$

que é claramente impossível pois $x^2 + \sin^2 y = 0 \Leftrightarrow x = 0 \wedge \sin y = 0$, o que reduz a primeira equação do sistema a $1 = 0$. Não há, por conseguinte, pontos críticos normais. Estudemos agora o caso anormal em que $u_0 = 0$. O sistema de otimalidade a resolver é

$$\begin{cases} 2vx = 0, \\ 2v \sin y \cos y = 0, \\ x^2 + \sin^2 y = 0, \end{cases}$$

que é um sistema possível, com soluções da forma $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, k\pi)$, $k \in \mathbb{Z}$. Note-se que os pontos críticos $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, k\pi)$, $k \in \mathbb{Z}$, não satisfazem a hipótese do teorema de KKT uma vez que $\nabla h(0, k\pi) = (0, 0)$.

Vejamos agora também alguns problemas com restrições de desigualdade.

Exemplo 4.31 ($n = 2$, $m = 2$, $l = 0$). Determine a solução do seguinte problema de programação matemática:

$$\begin{aligned} -x_1 &\longrightarrow \min, \\ (x_1 - 1)^3 + x_2 &\leq 0, \\ -x_2 &\leq 0. \end{aligned}$$

A função de Lagrange de FJ é dada por

$$\mathcal{L}(x_1, x_2) = -u_0 x_1 + u_1 [(x_1 - 1)^3 + x_2] - u_2 x_2$$

e as condições a analisar são:

$$\begin{aligned} -u_0 + 3u_1(x_1 - 1)^2 &= 0, \\ u_1 - u_2 &= 0, \\ u_0 \geq 0, \quad u_1 \geq 0, \quad u_2 \geq 0, \\ (u_0, u_1, u_2) &\neq 0, \\ u_1 [(x_1 - 1)^3 + x_2] &= 0, \\ -u_2 x_2 &= 0, \\ (x_1 - 1)^3 + x_2 &\leq 0, \\ -x_2 &\leq 0. \end{aligned} \tag{4.20}$$

As condições de complementaridade $u_1 [(x_1 - 1)^3 + x_2] = 0$ e $u_2 x_2 = 0$ geram, à priori, quatro casos a estudar: $u_1 = 0$ ou $(x_1 - 1)^3 + x_2 = 0$; $u_2 = 0$ ou $x_2 = 0$;

o que conjugado com os casos anormal/normal nos conduz a um total de oito situações a analisar, que estudaremos sistematicamente.

(i) $u_0 = 0, u_1 = 0, u_2 = 0$: este caso viola a condição de não trivialidade $(u_0, u_1, u_2) \neq 0$, pelo que não ocorre.

(ii) $u_0 = 0, u_1 = 0, x_2 = 0$: da condição necessária $u_1 - u_2 = 0$ vem que $u_2 = 0$, o que não é possível pela condição de não trivialidade.

(iii) $u_0 = 0, (x_1 - 1)^3 + x_2 = 0, u_2 = 0$: a condição $u_1 - u_2 = 0$ diz-nos que $u_1 = 0$, o que viola a condição de não trivialidade. Esta situação não é possível.

(iv) $u_0 = 0, (x_1 - 1)^3 + x_2 = 0, x_2 = 0$: as condições (4.20) reduzem-se a

$$3u_1(x_1 - 1)^2 = 0, \quad u_1 = u_2 > 0,$$

pelo que $x_1 = 1$. Concluimos que $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = (1, 0)$ é um ponto crítico anormal.

(v) $u_0 = 1, u_1 = 0, u_2 = 0$: a condição $-u_0 + 3u_1(x_1 - 1)^2 = 0$ reduz-se a $-1 = 0$, uma impossibilidade.

(vi) $u_0 = 1, u_1 = 0, x_2 = 0$: tal como vimos em (v), não é possível termos em simultâneo $u_0 = 1$ e $u_1 = 0$, pois isso viola a condição $-u_0 + 3u_1(x_1 - 1)^2 = 0$.

(vii) $u_0 = 1, (x_1 - 1)^3 + x_2 = 0, u_2 = 0$: a condição necessária $u_1 - u_2 = 0$ implica que $u_1 = 0$, violando-se assim a condição necessária $-u_0 + 3u_1(x_1 - 1)^2 = 0$. Esta situação não é possível.

(viii) $u_0 = 1, (x_1 - 1)^3 + x_2 = 0, x_2 = 0$: este caso é equivalente a $u_0 = 1, x_2 = 0$ e $x_1 = 1$, o que viola a condição necessária $-u_0 + 3u_1(x_1 - 1)^2 = 0$.

Da análise feita concluimos que não existem pontos críticos normais e que se o problema tiver solução, então o minimizante é anormal e igual a $(1, 0)$.

Vejamos agora um problema com m e l ambos diferentes de zero (problema com restrições quer de desigualdade quer de igualdade).

Exemplo 4.32 ($n = 2, m = 2, l = 1$). Considere-se o seguinte problema de otimização:

$$\min (x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_1x_2)$$

sujeito a

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 1, \\ x_1 &\geq 0, \quad x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

Neste exemplo temos

$$\begin{aligned} f &= x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_1x_2, \\ g_1 &= -x_1, \\ g_2 &= -x_2, \\ h &= x_1 + x_2 - 1, \end{aligned}$$

pelo que a função de Lagrange é dada por

$$\mathcal{L} = u_0 (x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_1x_2) - u_1x_1 - u_2x_2 + v(x_1 + x_2 - 1).$$

Para determinarmos os pontos críticos, temos de analisar as seguintes condições, em conformidade com o Teorema 4.21 de Fritz John:

$$\begin{aligned} 2u_0(x_1 + 2x_2) - u_1 + v &= 0, \\ 4u_0(x_1 + x_2) - u_2 + v &= 0, \\ u_0 &\geq 0, \quad u_1 \geq 0, \quad u_2 \geq 0, \\ (u_0, u_1, u_2, v) &\neq 0, \\ -u_1x_1 &= 0, \\ -u_2x_2 &= 0, \\ x_1 + x_2 &= 1, \\ x_1 &\geq 0, \\ x_2 &\geq 0. \end{aligned} \tag{4.21}$$

As condições de complementaridade dizem-nos que $u_1 = 0$ ou $x_1 = 0$ e que $u_2 = 0$ ou $x_2 = 0$. Das quatro possibilidades que daqui decorrem, isto é, $u_1 = 0$ e $u_2 = 0$; $u_1 = 0$ e $x_2 = 0$; $x_1 = 0$ e $u_2 = 0$; e, por último, $x_1 = 0$ e $x_2 = 0$; atendendo a que $x_1 + x_2 = 1$, podemos reduzir tais quatro possibilidades a apenas três, à priori possíveis: (i) $u_1 = 0$, $u_2 = 0$ e $x_1 + x_2 = 1$; (ii) $u_1 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 0$; (iii) $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ e $u_2 = 0$. Temos de estudar estes três casos quer nas situações anormal ($u_0 = 0$), quer na situação normal ($u_0 = 1$). Começamos com o caso anormal.

(a) $u_0 = 0$, $u_1 = 0$, $u_2 = 0$ e $x_1 + x_2 = 1$: da condição de não trivialidade $(u_0, u_1, u_2, v) \neq 0$ concluímos que $v \neq 0$, o que contradiz as condições de estacionaridade $2u_0(x_1 + 2x_2) - u_1 + v = 0$ e $4u_0(x_1 + x_2) - u_2 + v = 0$. Esta situação não é possível.

(b) $u_0 = 0$, $u_1 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 0$: a condição $2u_0(x_1 + 2x_2) - u_1 + v = 0$ implica $v = 0$; usando agora a condição $4u_0(x_1 + x_2) - u_2 + v = 0$ obtemos $u_2 = 0$ e, mais uma vez, violamos a condição de não trivialidade $(u_0, u_1, u_2, v) \neq 0$. Esta situação também não é possível.

(c) $u_0 = 0$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ e $u_2 = 0$: as condições (4.21) reduzem-se a

$$v = u_1 = u_2 \geq 0, \quad (u_1, u_2, v) \neq 0,$$

isto é, $(x_1, x_2) = (0, 1)$ é um ponto crítico anormal com $v = u_1 = u_2 > 0$.

Restam-nos averiguar as três situações (i), (ii) e (iii) no caso normal.

(d) $u_0 = 1$, $u_1 = 0$, $u_2 = 0$ e $x_1 + x_2 = 1$: obtemos da condição de estacionaridade $4u_0(x_1 + x_2) - u_2 + v = 0$ que $v = -4$; usando depois a outra condição de estacionaridade $2u_0(x_1 + 2x_2) - u_1 + v = 0$, conjugada com $x_2 = 1 - x_1$, obtemos $x_1 = 0$, de onde resulta o ponto crítico $(x_1, x_2) = (0, 1)$, que já conhecíamos.

(e) $u_0 = 1$, $u_1 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 0$: todas as condições necessárias (4.21) são satisfeitas com $v = -2$ e $u_2 = 2$, pelo que $(x_1, x_2) = (1, 0)$ é também ponto crítico.

(f) $u_0 = 1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ e $u_2 = 0$: as condições necessárias (4.21) são satisfeitas com $u_1 = 0$ e $v = -4$, pelo que $(x_1, x_2) = (0, 1)$ é ponto crítico (já sabíamos).

Resumindo, temos dois pontos críticos: $(0, 1)$ e $(1, 0)$. Atendendo a que

$$f(0, 1) = 2, \quad f(1, 0) = 1,$$

concluimos que $(0, 1)$ é candidato a maximizante e $(1, 0)$ candidato a minimizante. Como o nosso problema é de minimização, a resposta ao pedido é $(1, 0)$: se o problema tiver solução, ela é com certeza $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = (1, 0)$.

Antes de prosseguirmos o nosso estudo, aconselho vivamente a resolução dos seguintes dois exercícios.

Exercício 4.33. Determine o candidato a minimizante do seguinte problema de otimização: minimizar a função $\frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$ sujeita a $x_1 + x_2 + x_3 = 3$. Solução: $(1, 1, 1)$.

Exercício 4.34. Determine o candidato a minimizante do seguinte problema de programação matemática:

$$\begin{aligned} -40\sqrt{x_1} - x_2 &\longrightarrow \min, \\ 4x_1 + x_2 &\leq 50, \\ x_1 &\geq 0, \quad x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

Solução: $\left(\frac{25}{2}, 0\right)$.

4.5 Generalizações do conceito de convexidade

A convexidade (concavidade) tem também um papel muito importante na otimização com restrições. Vamos considerar várias generalizações do conceito de convexidade já estudado.

Definição 4.35. Seja $X \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo. Dizemos que a função $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ é quase-convexa se

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \max\{f(x), f(y)\} \quad \forall x, y \in X \text{ e } \forall \lambda \in [0, 1];$$

quase-côncava se

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geq \min\{f(x), f(y)\} \quad \forall x, y \in X \text{ e } \forall \lambda \in [0, 1].$$

É fácil de demonstrar que o conceito de quase-convexidade generaliza o de convexidade: a classe das funções quase-convexas inclui a das convexas.

Proposição 4.36. *Se f é uma função convexa, então f é quase-convexa.*

Demonstração. Seja f uma função convexa. Para cada x e y no domínio de f , duas situações são possíveis: (i) $f(x) \leq f(y)$ ou (ii) $f(y) \leq f(x)$ (ou ambas, caso $f(x) = f(y)$). Da convexidade de f , $\forall \lambda \in [0, 1]$ temos: na situação (i),

$$\begin{aligned} f(\lambda x + (1 - \lambda)y) &\leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \\ &\leq \lambda f(y) + (1 - \lambda)f(y) \\ &= f(y) = \max\{f(x), f(y)\}; \end{aligned}$$

na situação (ii),

$$\begin{aligned} f(\lambda x + (1 - \lambda)y) &\leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \\ &\leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(x) \\ &= f(x) = \max\{f(x), f(y)\}. \end{aligned}$$

É pois sempre verdade que $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \max\{f(x), f(y)\}$. □

Igualmente importante na programação matemática é o conceito de *conjuntos de nível*.

Definição 4.37. *Seja $f : X \rightarrow \mathbb{R}$. Os conjuntos de nível de f são os conjuntos*

$$N_\alpha := \{x \in X : f(x) \leq \alpha\}$$

para cada $\alpha \in \mathbb{R}$.

Existe uma relação entre a quase-convexidade de uma função e a convexidade dos seus conjuntos de nível.

Teorema 4.38. *Uma função f é quase-convexa em X se, e somente se, N_α é um conjunto convexo para todo o $\alpha \in \mathbb{R}$.*

Demonstração. ($\Rightarrow$) Suponhamos que f é quase-convexa. Para cada α , sejam $x, y \in N_\alpha$. Façamos $z = \lambda x + (1 - \lambda)y$, onde $\lambda \in [0, 1]$. Então, usando a definição de quase-convexidade e o facto de $x, y \in N_\alpha$, temos

$$f(z) \leq \max\{f(x), f(y)\} \leq \alpha,$$

pelo que $z \in N_\alpha$. Isto mostra que N_α é um conjunto convexo.

($\Leftarrow$) Suponhamos que N_α é um conjunto convexo para cada α . Dados x e y , seja $\alpha := \max\{f(x), f(y)\}$. Temos, obviamente, que $x, y \in N_\alpha$ e, como N_α é convexo, $\lambda x + (1 - \lambda)y \in N_\alpha$ qualquer que seja o $\lambda \in [0, 1]$. Então,

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \alpha = \max\{f(x), f(y)\}$$

e, por conseguinte, f é quase-convexa. □

Corolário 4.39. *Se f é uma função convexa, então os seus conjuntos de nível são conjuntos convexos.*

Demonstração. Se f é convexa, então pela Proposição 4.36 ela é quase-convexa e, pelo Teorema 4.38, N_α é um conjunto convexo $\forall \alpha \in \mathbb{R}$. $\square$

Uma função pseudoconvexa é, como veremos, uma função que se comporta como uma função convexa em relação ao problema de encontrar os seus mínimos locais, mas na verdade não precisa ser convexa (daí usar-se o prefixo “pseudo”).

Definição 4.40. *Seja $X \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo. A função diferenciável $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ diz-se pseudoconvexa se*

$$\forall x, y \in X, \quad \nabla f(x)^T(y - x) \geq 0 \implies f(y) \geq f(x);$$

pseudocôncava se

$$\forall x, y \in X, \quad \nabla f(x)^T(y - x) \leq 0 \implies f(y) \leq f(x).$$

Dentro das funções diferenciáveis, o conceito de pseudoconvexidade também generaliza o de convexidade: o conjunto das funções pseudoconvexas inclui a das convexas diferenciáveis.

Proposição 4.41. *Se f é uma função convexa diferenciável, então f é pseudoconvexa.*

Demonstração. Se f é convexa e diferenciável, então sabemos que f satisfaz a desigualdade do gradiente (Teorema 2.30):

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

Como consequência, se $\nabla f(x)^T(y - x) \geq 0$, então $f(y) \geq f(x)$. Acabámos de demonstrar que f é pseudoconvexa. $\square$

O nosso próximo resultado estabelece a relação entre pseudoconvexidade e quase-convexidade.

Teorema 4.42. *Uma função pseudoconvexa é quase-convexa.*

Demonstração. Suponhamos que $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função pseudoconvexa. Dados $x, y \in X$ e $\lambda \in [0, 1]$, seja $z := \lambda x + (1 - \lambda)y$. Se $\lambda = 0$ ou $\lambda = 1$, então obviamente $f(z) \leq \max\{f(x), f(y)\}$. Consideremos $0 < \lambda < 1$ e seja $d = y - x$. Se $\nabla f(z)^T d \geq 0$, notando que

$$z = \lambda x + (1 - \lambda)y \Leftrightarrow y - z = \lambda(y - x) = \lambda d,$$

concluimos que $\nabla f(z)^T(y - z) = \lambda \nabla f(z)^T d \geq 0$ e, uma vez que f é pseudoconvexa, temos por definição (Definição 4.40) que $f(y) \geq f(z)$. Por conseguinte, $f(z) \leq f(y) \leq \max\{f(x), f(y)\}$, isto é, $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \max\{f(x), f(y)\}$. Está assim demonstrado que f é quase-convexa. $\square$

4.6 Condições suficientes de otimalidade

De modo semelhante à otimização sem restrições (relembre o Teorema 2.36), vamos ver que para problemas convexos as condições necessárias de otimalidade tornam-se suficientes.

Teorema 4.43 (condições suficientes de Karush–Kuhn–Tucker). *Consideremos o problema de programação matemática*

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ \text{sujeito a } & g(x) \leq 0, \\ & h(x) = 0, \\ & x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \text{ aberto,} \end{aligned} \tag{P}$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ são funções diferenciáveis. Seja $\bar{x}$ admissível para (P), i.e., $g(\bar{x}) \leq 0$, $h(\bar{x}) = 0$ e $\bar{x} \in X$, e suponhamos que $\bar{x}$ conjuntamente com os multiplicadores $(u, v) \in \mathbb{R}^{m+l}$ satisfazem as condições necessárias de KKT (Teorema 4.23):

$$\begin{aligned} \nabla f(\bar{x}) + \nabla g(\bar{x})^T u + \nabla h(\bar{x})^T v &= 0, \\ u &\geq 0, \\ u_i g_i(\bar{x}) &= 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \tag{4.22}$$

Se f é uma função pseudoconvexa, g_i , $i = 1, \dots, m$, são funções quase-convexas e h_i , $i = 1, \dots, l$, são funções lineares, então $\bar{x}$ é minimizante global de (P).

Demonstração. Uma vez que cada g_i é uma função quase-convexa, os conjuntos de nível $C_i := \{x \in X : g_i(x) \leq 0\}$, $i = 1, \dots, m$, são conjuntos convexos (Teorema 4.38). Por outro lado, dada a linearidade das funções h_i , os conjuntos $D_i := \{x \in X : h_i(x) = 0\}$, $i = 1, \dots, l$, são também convexos:

$$x, y \in D_i \Rightarrow h_i(x) = 0 = h_i(y) \Rightarrow h_i(\lambda x + (1 - \lambda)y) = \lambda h_i(x) + (1 - \lambda)h_i(y) = 0,$$

isto é, $\lambda x + (1 - \lambda)y \in D_i$. Assim, uma vez que a interseção de conjuntos convexos é também um conjunto convexo, a região admissível

$$\mathcal{A} = \{x \in X : g(x) \leq 0, h(x) = 0\} = \bigcap_{i=1}^m C_i \bigcap_{i=1}^l D_i$$

é um conjunto convexo. Seja $I := \{i : g_i(\bar{x}) = 0\}$ o conjunto dos índices das restrições ativas em $\bar{x}$. Seja $x \in \mathcal{A}$ um qualquer ponto admissível diferente de $\bar{x}$ (se tal x não existir e $\bar{x}$ for o único ponto admissível, então a solução do problema (P) é trivial e claramente $\bar{x}$ é minimizante global). Então, $\lambda x + (1 - \lambda)\bar{x}$ é admissível qualquer que seja o $\lambda \in [0, 1]$. Por conseguinte, para $i \in I$ temos

$$g_i(\lambda x + (1 - \lambda)\bar{x}) = g_i(\bar{x} + \lambda(x - \bar{x})) \leq 0 = g_i(\bar{x}) \quad \forall \lambda \in [0, 1].$$

Uma vez que o valor de g_i em $\bar{x}$ não aumenta ao deslocarmos na direção $x - \bar{x}$, temos que $\nabla g_i(\bar{x})^T(x - \bar{x}) \leq 0$ para todo o $i \in I$. De modo semelhante, da admissibilidade de $\lambda x + (1 - \lambda)\bar{x} = \bar{x} + \lambda(x - \bar{x})$ sabemos que $h_i(\bar{x} + \lambda(x - \bar{x})) = 0$ e, portanto, $\nabla h_i(\bar{x})^T(x - \bar{x}) = 0$ para todo o $i = 1, \dots, l$. Deste modo, da condição de estacionaridade

$$\nabla f(\bar{x}) = -\nabla g(\bar{x})^T u - \nabla h(\bar{x})^T v$$

e da condição de não negatividade $u \geq 0$, resulta que

$$\nabla f(\bar{x})^T(x - \bar{x}) = -(\nabla g(\bar{x})^T u + \nabla h(\bar{x})^T v)^T(x - \bar{x}) \geq 0$$

o que, pela pseudoconvexidade de f , implica que $f(x) \geq f(\bar{x})$ (para todo o x admissível). $\square$

Como corolário, obtemos que as condições necessárias de otimalidade são suficientes para problemas convexos.

Definição 4.44. *O problema de programação matemática (P) diz-se um problema convexo se X for um conjunto aberto convexo, $f, g_i, i = 1, \dots, m$, forem funções convexas e $h_i, i = 1, \dots, l$, são funções lineares.*

Corolário 4.45. *Se (P) é um problema convexo e $\bar{x}$ é admissível e satisfaz, conjuntamente com os multiplicadores $(u, v) \in \mathbb{R}^{m+l}$, as condições necessárias de KKT (4.22), então $\bar{x}$ é minimizante global.*

Demonstração. Como f é uma função convexa diferenciável, pela Proposição 4.41 f é pseudoconvexa; como g_i são funções convexas, pela Proposição 4.36 elas são quase-convexas. O resultado é uma conclusão imediata do Teorema 4.43. $\square$

Usando as condições suficientes que agora demonstrámos, revise os exemplos resolvidos na Secção 4.4, tentando mostrar que os candidatos que obtivemos são, na verdade, minimizantes globais.

4.7 Restrições de qualificação

Existem várias formulações possíveis do resultado de KKT. Nós formulámos o demonstrámos o Teorema 4.23, mas outras formulações (e demonstrações) são possíveis. Independentemente do teorema concreto de KKT que se possa formular e demonstrar, todos eles têm a seguinte forma:

Se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) e “certas hipóteses sobre as restrições são satisfeitas”, então as “condições de KKT” são condições necessárias para caracterizar a solução ótima $\bar{x}$.

Por “condições de KKT” entendemos a condição de estacionaridade (4.12), a condição de não negatividade (4.13) e a condição de complementaridade (4.14). As “hipóteses sobre as restrições” mencionadas acima, e que tornam válidas as condições de KKT (i.e., tornam possível a sua demonstração), são chamadas na literatura de *restrições de qualificação*, que denotaremos abreviadamente por RQ. No caso do nosso Teorema 4.23, a restrição de qualificação que usámos foi a da *independência linear*.

Definição 4.46 (RQ da independência linear). *À hipótese de que o conjunto dos vetores $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, e $\nabla g_i(\bar{x})$, $i \in I$, é um conjunto linearmente independente, chamamos restrição de qualificação da independência linear.*

Observação 4.47. *A RQ da independência linear não depende da função objetivo f , envolvendo apenas as restrições do problema. Tal característica é comum a todas as restrições de qualificação.*

Com a Definição 4.46 e as convenções/notações acima, podemos reescrever o Teorema 4.23 na seguinte forma equivalente:

Teorema 4.48 (condições necessárias de KKT sob a RQ da independência linear). *Se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) e a RQ da independência linear é satisfeita, então existem multiplicadores $(u, v) \in \mathbb{R}^{m+l}$ tais que as condições de KKT (4.12)–(4.14) são necessárias para caracterizar a solução ótima $\bar{x}$.*

Vamos aqui estabelecer duas outras restrições de qualificação: a chamada *restrição de qualificação de Slater*, em honra do matemático Morton L. Slater, e a das restrições lineares.

Definição 4.49. *Um ponto x é chamado de ponto de Slater se x satisfizer $g(x) < 0$ e $h(x) = 0$, isto é, x é admissível e satisfaz todas as desigualdades do problema de maneira estrita.*

Definição 4.50 (restrição de qualificação de Slater). *Às hipóteses de que g_i , $i = 1, \dots, m$, são funções pseudoconvexas; h_i , $i = 1, \dots, l$, são funções lineares; $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, são linearmente independentes; e o problema tem um ponto de Slater; chamamos restrição de qualificação de Slater.*

Teorema 4.51 (condições necessárias de KKT sob a RQ de Slater). *Se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) e a RQ de Slater é satisfeita, então existem multiplicadores $(u, v) \in \mathbb{R}^{m+l}$ tais que as condições de KKT (4.12)–(4.14) são condições necessárias para caracterizar a solução ótima $\bar{x}$.*

Demonstração. Seja $\bar{x}$ um minimizante local de (P) . As condições de Fritz John (Teorema 4.21) têm de ser satisfeitas (são condições necessárias de otimalidade), pelo que existem multiplicadores $(u_0, u, v) \in \mathbb{R}^{1+m+l}$ tais que $u_0 \nabla f(\bar{x}) + \nabla g(\bar{x})^T u + \nabla h(\bar{x})^T v = 0$, $(u_0, u) \geq 0$, $(u_0, u, v) \neq 0$ e $u_i g_i(\bar{x}) = 0$, $i = 1, \dots, m$. Se $u_0 > 0$ ($u_0 \neq 0$), dividindo por u_0 obtemos a validade das condições de KKT. Suponhamos agora que $u_0 = 0$ (caso anormal). Seja x^0 um ponto de

Slater (que, por hipótese, existe) e definamos $d := x^0 - \bar{x}$. Para cada $i \in I$ temos que $0 = g_i(\bar{x}) > g_i(x^0)$ e, da pseudoconvexidade de g_i , sabemos que

$$\nabla g_i(\bar{x})^T (x^0 - \bar{x}) \geq 0 \implies g_i(x^0) \geq g_i(\bar{x})$$

ou, de modo equivalente (*modus tollens*),

$$g_i(x^0) < g_i(\bar{x}) \implies \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0.$$

Concluimos então que

$$\nabla g_i(\bar{x})^T d < 0, \quad i \in I. \quad (4.23)$$

Por outro lado, da linearidade de h_i , $i = 1, \dots, l$, temos que $\nabla h(\bar{x})d = 0$. Com efeito, h linear significa que h tem a forma $h(x) = Mx - \xi$, com M uma matriz $l \times n$ e $\xi \in \mathbb{R}^l$, pelo que $\nabla h(x) = M$ e

$$\nabla h(\bar{x})d = M(x^0 - \bar{x}) = Mx^0 - M\bar{x} = \xi - \xi = 0. \quad (4.24)$$

Por conseguinte, usando a condição de estacionariedade de FJ no caso anormal,

$$\nabla g(\bar{x})^T u + \nabla h(\bar{x})^T v = 0,$$

e as relações (4.23) e (4.24) (relembrar que na demonstração do Teorema 4.21 das condições necessárias de FJ fazemos $u_i = 0$ quando $i \notin I$) podemos escrever

$$0 = 0^T d = (\nabla g(\bar{x})^T u + \nabla h(\bar{x})^T v)^T d < 0, \quad (4.25)$$

o que é uma contradição! Notar que a única maneira de tentarmos evitar esta contradição, e o sinal “ < 0 ” que vem de (4.23), seria fazer $u_i = 0$ para todo o $i \in I$. Mas isso implicaria $(u_0, u) = 0$ o que, da condição de não trivialidade, significaria $v \neq 0$ o que, conjuntamente com a condição $\nabla h(\bar{x})^T v = 0$, viola a hipótese da restrição de qualificação de Slater que afirma que os vetores $\nabla h_i(\bar{x})$, $i = 1, \dots, l$, são linearmente independentes. A contradição (4.25) significa que não existe caso anormal. Logo, $u_0 > 0$: situação em que já demonstrámos a validade das condições de KKT. $\square$

Terminamos com uma terceira versão do teorema de KKT, usando desta vez a restrição de qualificação das restrições lineares.

Teorema 4.52 (condições necessárias de KKT sob a RQ das restrições lineares). *Se $\bar{x}$ é um minimizante local de (P) e todas as restrições do problema são lineares, então existem multiplicadores $(u, v) \in \mathbb{R}^{m+l}$ tais que as condições de KKT (4.12)–(4.14) são necessárias para caracterizar a solução ótima $\bar{x}$.*

Demonstração. Sob as condições do teorema, o problema (P) reduz-se à forma

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ \text{sujeito a } & Ax \leq b, \\ & Mx = \xi, \\ & x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \text{ aberto,} \end{aligned} \quad (4.26)$$

ou seja, $g(x) = Ax - b$ e $h(x) = Mx - \xi$. Seja $\bar{x}$ minimizante local do problema (4.26). Podemos particionar as restrições $Ax \leq b$ em dois grupos: o grupo das restrições que estão ativas em $\bar{x}$, $A_I \bar{x} = b_I$, e o grupo das restrições não ativas em $\bar{x}$, $A_I \bar{x} < b_I$. Deste modo, o conjunto das direções admissíveis em $\bar{x}$ é dado por $\{d : A_I d \leq 0, Md = 0\}$. Para toda a direção d admissível em $\bar{x}$, temos com certeza que $\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0$: caso contrário, d seria uma direção descendente em $\bar{x}$, violando o facto de $\bar{x}$ ser minimizante local. Por conseguinte, o sistema linear

$$\nabla f(\bar{x})^T d < 0, \quad A_I d \leq 0, \quad Md = 0$$

não tem solução. Do Corolário 4.20 do Lema de Farkas, existem (u, v, w) satisfazendo $u = 1$, $w \geq 0$ e

$$\nabla f(\bar{x})^T u + A_I^T w + M^T v = 0,$$

que são precisamente as condições de KKT. □

4.8 Exercícios

1. Encontre todos os extremantes (minimizantes e maximizantes) locais da função $f(x_1, x_2, x_3) = x_1^3 + x_2^3 + x_3^3$ sujeita à restrição $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 4$.
2. Determine os pontos críticos para cada um dos seguintes problemas. Os pontos críticos que encontrou são ótimos? Porquê? Porque não?
 - (a) Minimize a função $f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 6x_1$ sujeita às restrições $x_1 + 2x_2 - 2 \leq 0$, $x_2^2 - x_1 - 1 \leq 0$, $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$.
 - (b) $(x_1 - 4)^2 + (x_2 - 6)^2 \rightarrow \min$ sujeita a $x_1^2 - x_2 \leq 0$ e $x_2 \leq 4$.
3. Resolva os seguintes problemas:
 - (a) $x_3 + \frac{1}{2} \left(x_1^2 + x_2^2 + \frac{x_3^2}{10} \right) \rightarrow \min$, $x_1 + x_2 + x_3 = \beta$, $x_i \geq 0$, $i = 1, 2, 3$.
 - (b) $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \rightarrow \min$, sujeita a $x_1 + x_2 + x_3 = 3$ e $2x_1 - x_2 + x_3 \leq 5$.
4. Resolva os seguintes problemas:
 - (a) minimizar $f(x, y) = (x-4)^2 + (y-4)^2$ sujeita a $x+y \leq 4$ e $x+3y \leq 9$;
 - (b) minimizar $2x^2 + y^2 - 14x - y + 48$ sujeita a $2x + y = 12$.
5. O custo de produção de x unidades do produto X e y unidades do produto Y é igual a $C(x, y) = 4x + y + 10$. O processo de produção é descrito pela função $P(x, y) = 2x^{\frac{1}{2}}y^{\frac{1}{2}}$ e a taxa de produção é igual a 120 (i.e., a produção total da empresa é igual a 120). Determine a produção x e y sabendo que a empresa pretende obter o menor custo possível.

6. Resolva os seguintes problemas de programação matemática:

(a) $6(x_1 - 10)^2 + 4(x_2 - 12.5)^2 \rightarrow \min$, sujeito a $x_1^2 + (x_2 - 5)^2 \leq 50$,
 $x_1^2 + 3x_2^2 \leq 200$ e $(x_1 - 6)^2 + x_2^2 \leq 37$.

(b) $(x_1 - 12)^2 + (x_2 + 6)^2 \rightarrow \min$, sujeito a $x_1^2 + 3x_1 + x_2^2 - 4.5x_2 \leq 6.5$,
 $(x_1 - 9)^2 + x_2^2 \leq 64$ e $8x_1 + 4x_2 = 20$.

Capítulo 5

Métodos aproximativos

Vamos estudar dois tipos de métodos aproximativos (algoritmos iterativos) para resolver problemas de otimização com restrições: métodos de ponto interior, também conhecidos como métodos de barreira (Secção 5.2), em que partimos de uma aproximação inicial dentro da região admissível e aí permanecemos; e métodos de penalização (Secção 5.1), que são métodos de ponto exterior, isto é, partimos de uma aproximação inicial fora da região admissível.

5.1 Métodos de penalização

Num método de penalização, a região admissível do problema (P_{PM}) de programação matemática é expandida de

$$\mathcal{A} := \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) \leq 0, \ i = 1, \dots, m, \ h_i(x) = 0, \ i = 1, \dots, l\}$$

para todo o espaço euclidiano $\mathbb{R}^n$, isto é, a ideia é substituir a resolução de um problema com restrições na resolução de problemas mais fáceis, sem restrições. Para isso, adicionamos um custo muito grande (uma *penalização*) à função objetivo f , que pretendemos minimizar, para aqueles pontos $x \in \mathbb{R}^n$ que estão fora da região admissível original $\mathcal{A}$. Antes de formalizarmos matematicamente o conceito de *penalização*, notamos que, sem qualquer perda de generalidade, podemos restringir a problemas apenas com restrições de desigualdade: todo e qualquer problema com restrições de igualdade pode ser convertido num problema equivalente apenas com restrições de desigualdade.

Observação 5.1. *Convertendo as restrições $h_i(x) = 0$ em*

$$\begin{cases} h_i(x) \leq 0, \\ -h_i(x) \leq 0, \end{cases}$$

vamos assumir que o problema de programação matemática apenas possui restrições de desigualdade:

$$\begin{aligned} & \min f(x), \\ & \text{sujeito a } g(x) \leq 0, \\ & x \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \tag{P}$$

onde $g(x) = (g_1(x), \dots, g_m(x))$.

Definição 5.2 (função de penalização). Uma função $p : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada de função de penalização para (P) se ela satisfaz, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, as seguintes duas condições:

- $p(x) = 0$ se $g(x) \leq 0$ (não há penalização para os x admissíveis);
- $p(x) > 0$ se $g(x) \not\leq 0 \Leftrightarrow \exists i : g_i(x) > 0$ (há penalização sempre que x não é admissível).

Vejamos alguns exemplos de funções de penalização.

Exemplo 5.3. A função

$$p(x) = \sum_{i=1}^m (\max\{0, g_i(x)\})^q \tag{5.1}$$

é uma função de penalização para (P) qualquer que seja o $q \geq 1$. Quando $q = 1$, a função (5.1) é conhecida na literatura como a *função de penalização linear*; quando $q = 2$, a função (5.1) é chamada de *função de penalização quadrática*.

A ideia dos métodos de penalização consiste em substituir a resolução do problema com restrições (P) na resolução de uma sucessão de problemas sem restrições da forma

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} (f(x) + cp(x)), \tag{P_c}$$

para uma sucessão crescente das constantes c , $c \rightarrow +\infty$. A quantidade escalar c que aparece no problema sem restrições (P_c) é chamada de *parâmetro de penalização*.

Seja $c_k \geq 0$, $k = 0, \dots, +\infty$, uma sucessão de parâmetros de penalização que satisfazem $c_{k+1} > c_k$ para todo o k e $\lim_{k \rightarrow +\infty} c_k = +\infty$. No que se segue, usamos as seguintes notações.

Notação 5.4. A função objetivo do problema (P_c) será denotada por $q(c, x)$:

$$q(c, x) := f(x) + cp(x).$$

Denotamos por x^k a solução exata do problema (P_{c_k}); por x^* a solução exata do problema original (P).

O próximo lema dá-nos um conjunto importante de propriedades.

Lema 5.5 (lema da penalização). *As seguintes desigualdades são satisfeitas para qualquer $k \in \mathbb{N}_0$:*

1. $q(c_k, x^k) \leq q(c_{k+1}, x^{k+1})$;
2. $p(x^k) \geq p(x^{k+1})$;
3. $f(x^k) \leq f(x^{k+1})$;
4. $f(x^*) \geq q(c_k, x^k) \geq f(x^k)$.

Demonstração. 1. Temos $q(c_{k+1}, x^{k+1}) = f(x^{k+1}) + c_{k+1}p(x^{k+1})$. Dado que $c_{k+1} > c_k$, obviamente que $q(c_{k+1}, x^{k+1}) \geq f(x^{k+1}) + c_k p(x^{k+1})$. Por outro lado, sendo x^k o minimizante de $q(c_k, x)$, resulta que

$$q(c_{k+1}, x^{k+1}) \geq f(x^{k+1}) + c_k p(x^{k+1}) \geq f(x^k) + c_k p(x^k) = q(c_k, x^k).$$

2. Como x^k é minimizante de $q(c_k, x)$ e x^{k+1} é o minimizante de $q(c_{k+1}, x)$,

$$\begin{aligned} f(x^k) + c_k p(x^k) &\leq f(x^{k+1}) + c_k p(x^{k+1}), \\ f(x^{k+1}) + c_{k+1} p(x^{k+1}) &\leq f(x^k) + c_{k+1} p(x^k). \end{aligned}$$

Somando estas duas desigualdades, obtemos

$$(c_{k+1} - c_k) p(x^k) \geq (c_{k+1} - c_k) p(x^{k+1}).$$

Lembrando que $c_{k+1} > c_k$, resulta a desigualdade pretendida: $p(x^k) \geq p(x^{k+1})$.

3. Começamos por notar que $f(x^{k+1}) + c_k p(x^{k+1}) \geq f(x^k) + c_k p(x^k)$, uma vez que x^k é minimizante de $q(c_k, x)$. Demonstramos que $p(x^k) \geq p(x^{k+1})$ (ponto 2), de onde resulta que $f(x^{k+1}) + c_k p(x^{k+1}) \geq f(x^k) + c_k p(x^k) \geq f(x^k) + c_k p(x^{k+1})$. A desigualdade $f(x^{k+1}) + c_k p(x^{k+1}) \geq f(x^k) + c_k p(x^{k+1})$ é equivalente a

$$f(x^{k+1}) \geq f(x^k).$$

4. Como $c_k \geq 0$ e $p(x) \geq 0$ para todo o x , obviamente

$$f(x^k) \leq f(x^k) + c_k p(x^k) = q(c_k, x^k).$$

Por outro lado, como x^k é minimizante de $q(c_k, x)$, x^* é minimizante de (P) e, por conseguinte, $p(x^*) = 0$, vem que

$$q(c_k, x^k) = f(x^k) + c_k p(x^k) \leq f(x^*) + c_k p(x^*) = f(x^*).$$

O resultado está demonstrado. $\square$

Com a ajuda do Lema 5.5, demonstramos a convergência do método de penalização.

Teorema 5.6 (teorema de convergência do método de penalização). *Suponhamos que f , g e p são funções contínuas. Seja $c_k \geq 0$, $k = 0, 1, \dots, +\infty$, uma sucessão de parâmetros de penalização, que satisfazem $c_{k+1} > c_k$ para todo o k e $\lim_{k \rightarrow +\infty} c_k = +\infty$, e $\{x^k\}$, $k = 0, 1, \dots, +\infty$, a sucessão de soluções dos respectivos problemas sem restrições (P_{c_k}) . Se $\lim_{k \rightarrow +\infty} x^k = \bar{x}$, então $\bar{x}$ é solução do problema com restrições (P) .*

Demonstração. Seja $\bar{x}$ o ponto limite da sucessão $\{x^k\}$. Da continuidade das funções envolvidas e do item 4 do lema da penalização, podemos afirmar que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} f(x^k) = f(\bar{x}) \quad \text{e} \quad q^* := \lim_{k \rightarrow +\infty} q(c_k, x^k) \leq f(x^*).$$

Assim,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} c_k p(x^k) = \lim_{k \rightarrow +\infty} [q(c_k, x^k) - f(x^k)] = q^* - f(\bar{x}) \in \mathbb{R}. \quad (5.2)$$

Como $c_k \rightarrow +\infty$, concluímos de (5.2) que $\lim_{k \rightarrow +\infty} p(x^k) = 0$. Da continuidade de p , $p(\bar{x}) = 0$ e, por conseguinte, $\bar{x}$ é admissível, isto é, $g(\bar{x}) \leq 0$. Finalmente, do item 4 do lema da penalização, $f(x^k) \leq f(x^*)$ para todo o k e, portanto, $f(\bar{x}) \leq f(x^*)$, o que implica que $f(\bar{x}) = f(x^*)$: $\bar{x}$ é minimizante de (P) . $\square$

Na prática não se considera, obviamente, uma sucessão de problemas até ao infinito, parando-se após a resolução de um número finito de problemas sem restrições (P_{c_k}) . Temos então o seguinte algoritmo aproximativo de penalização.

Algoritmo 3: Algoritmo da Penalização.

Entrada: Função f e restrições g que definem o problema (P) que pretendemos resolver, função de penalização p , parâmetro de penalização inicial $c_0 > 0$, parâmetro $\eta > 1$ de crescimento das constantes c_k , tolerância $\varepsilon > 0$ para critério de paragem, aproximação inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$ que viola pelo menos uma restrição (método de ponto exterior).

Saída: Aproximação x^k para a solução do problema (P) com $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon$ ou $|f(x^k) - f(x^{k-1})| < \varepsilon$.

1. Inicialização: formular a função objetivo aumentada $q(c_0, x)$ baseada nas restrições g_i violadas em x_0 . Fazer $k := 1$.
 2. Partindo de x^{k-1} , usar um dos métodos aproximativos estudados no Capítulo 3 para resolver o problema sem restrições $\min_{x \in \mathbb{R}^n} q(c_{k-1}, x)$. Seja x^k a aproximação encontrada.
 3. Se $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon$ ou $|f(x^k) - f(x^{k-1})| < \varepsilon$, então stop, com x^k a aproximação da solução do problema com restrições (P) ; caso contrário, prosseguir.
 4. Fazer $c_k := \eta c_{k-1}$ e formular $q(c_k, x)$ baseada nas restrições g_i que são violadas em x^k .
 5. Fazer $k := k + 1$ e voltar ao Passo 2.
-

Terminamos esta secção sobre os métodos aproximativos de penalização com um exemplo de aplicação do Algoritmo 3.

Exemplo 5.7 ($n = 2$, $m = 4$). Pretendemos minimizar a função

$$f(x) = f(x_1, x_2) = (x_1 - 6)^2 + (x_2 - 7)^2$$

em $\mathbb{R}^2$ sujeita às restrições $g_i(x) \leq 0$, $i = 1, 2, 3, 4$, onde

$$\begin{aligned} g_1(x) &= -3x_1 - 2x_2 + 6, \\ g_2(x) &= -x_1 + x_2 - 3, \\ g_3(x) &= x_1 + x_2 - 7, \\ g_4(x) &= \frac{2}{3}x_1 - x_2 - \frac{4}{3}. \end{aligned}$$

Se não houvesse restrições, o problema seria trivial: o minimizante seria $(6, 7)$ e o mínimo 0. O problema com restrições que temos em mãos é, no entanto, mais difícil, não sendo trivial a sua solução: $(6, 7)$ não é admissível. Vamos usar o Algoritmo da Penalização para resolver o problema. Para isso vamos escolher, por exemplo, a função de penalização quadrática, $c_0 = \frac{1}{2}$, $\eta = 2$, ε um valor tão pequeno quanto queiramos e a aproximação inicial $x^0 = (6, 7)$.

Passo 1. Temos $g_1(x^0) = -26$, $g_2(x^0) = -2$, $g_3(x^0) = 6$ e $g_4(x^0) = -\frac{13}{3}$. Significa isto que apenas a restrição g_3 é violada em x^0 , pelo que

$$q(c_0, x) = f(x) + c_0(g_3(x))^2 = (x_1 - 6)^2 + (x_2 - 7)^2 + c_0(x_1 + x_2 - 7)^2.$$

Fazemos $k := 1$.

Passo 2. Temos de resolver o seguinte problema sem restrições em $\mathbb{R}^2$:

$$q(c_{k-1}, x_1, x_2) = (x_1 - 6)^2 + (x_2 - 7)^2 + c_{k-1}(x_1 + x_2 - 7)^2 \longrightarrow \min.$$

Este problema é simples, sendo fácil determinar a sua solução analítica: resolvendo o sistema $\nabla_x q(c_{k-1}, x) = 0$ obtemos

$$x^k = \left(\frac{6(c_{k-1} + 1)}{2c_{k-1} + 1}, \frac{8c_{k-1} + 7}{2c_{k-1} + 1} \right) = \left(\frac{9}{2}, \frac{11}{2} \right)$$

(ponto crítico, que sabemos ser o minimizante global para funções convexas).

Passo 3. Usando a norma 2, temos

$$\|x^k - x^{k-1}\|_2 = \sqrt{\left(\frac{9}{2} - 6\right)^2 + \left(\frac{11}{2} - 7\right)^2} = \frac{3}{2}\sqrt{2} \approx 2.12 > \varepsilon$$

e $|f(x^k) - f(x^{k-1})| = \frac{9}{2} > \varepsilon$, pelo que temos de prosseguir com o algoritmo iterativo.

Passo 4. Fazemos $c_k := \eta c_{k-1} = 1$ e, como

$$\begin{aligned} g_1(x^k) &= -\frac{2(11c_{k-1} + 13)}{2c_{k-1} + 1} = -\frac{37}{2}, \\ g_2(x^k) &= -2, \\ g_3(x^k) &= \frac{6}{2c_{k-1} + 1} = 3, \\ g_4(x^k) &= -\frac{20c_{k-1} + 13}{6c_{k-1} + 3} = -\frac{23}{6}, \end{aligned}$$

isto é, apenas a restrição g_3 é violada em x^k , definimos

$$q(c_k, x_1, x_2) = (x_1 - 6)^2 + (x_2 - 7)^2 + c_k(x_1 + x_2 - 7)^2.$$

Passo 5. Fazemos $k := k + 1 = 2$ e voltamos ao Passo 2.

Como nós não somos computadores e somos críticos, em vez de continuarmos a fazer as mesmas contas repetidamente e a obter números, paremos um pouco para observar o que se passa! A expressão que obtivemos para q no Passo 4 é exatamente a mesma que obtivemos para q no Passo 2:

$$q(c, x_1, x_2) = (x_1 - 6)^2 + (x_2 - 7)^2 + c(x_1 + x_2 - 7)^2.$$

À medida que iteramos, os valores das constantes vão-se modificando (duplicam em cada iteração, $1/2, 1, 2, 4, 8, 16, \dots$), mas nós conhecemos as expressões analíticas: para uma constante arbitrária c , o minimizante do problema $q(c, x_1, x_2) \rightarrow \min$ é sempre

$$\left(\frac{6(c+1)}{2c+1}, \frac{8c+7}{2c+1} \right) \quad (5.3)$$

e as restrições ao longo deste par de valores dão sempre

$$\begin{aligned} g_1\left(\frac{6(c+1)}{2c+1}, \frac{8c+7}{2c+1}\right) &= -\frac{2(11c+13)}{2c+1}, \\ g_2\left(\frac{6(c+1)}{2c+1}, \frac{8c+7}{2c+1}\right) &= -2, \\ g_3\left(\frac{6(c+1)}{2c+1}, \frac{8c+7}{2c+1}\right) &= \frac{6}{2c+1} \\ g_4\left(\frac{6(c+1)}{2c+1}, \frac{8c+7}{2c+1}\right) &= -\frac{20c+13}{6c+3}. \end{aligned}$$

Neste exemplo, em cada iteração é sempre a restrição g_3 a única a ser violada e, vemos de imediato, que apenas no limite, quando $c \rightarrow +\infty$, é que o par (5.3) será admissível para o problema com restrições:

$$\lim_{c \rightarrow +\infty} g_3\left(\frac{6(c+1)}{2c+1}, \frac{8c+7}{2c+1}\right) = \lim_{c \rightarrow +\infty} \frac{6}{2c+1} = 0.$$

Como conhecemos as expressões analíticas, não precisamos do computador para fazer os cálculos em cada iteração: podemos logo calcular o limite em (5.3) e ver para onde o algoritmo está a convergir,

$$\lim_{c \rightarrow +\infty} \left(\frac{6(c+1)}{2c+1}, \frac{8c+7}{2c+1} \right) = (3, 4).$$

É fácil de confirmar que $(3, 4)$ é o minimizante global do problema de minimizar a função $f(x)$ sujeita a $g_i(x) \leq 0$, $i = 1, 2, 3, 4$.

Exercício 5.8. Usando as condições suficientes de otimalidade estudadas na Secção 4.6, mostre que o candidato $(3, 4)$ encontrado no Exemplo 5.7 pelo método da penalização é o minimizante global do problema.

5.2 Métodos de barreira

Num método de barreira, assumimos que nos é dada uma aproximação inicial x^0 da solução do problema

$$\begin{aligned} & \min f(x), \\ & \text{sujeito a } g(x) \leq 0, \\ & x \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \tag{P}$$

que pretendemos resolver, pertencente ao interior da região admissível $\mathcal{A}$. Impomos um custo muito grande às aproximações admissíveis geradas pelo método que estão perto da fronteira de $\mathcal{A}$, deste modo criando uma “barreira” que evita que as aproximações saiam da região admissível. Assim, temos aqui uma filosofia dual à dos métodos da Secção 5.1: nos métodos de penalização partimos de uma aproximação fora da região admissível $\mathcal{A}$ e vamo-nos aproximando da solução de (P) a partir do exterior de $\mathcal{A}$, com valores da função objetivo cada vez maiores ($f(x^{k+1}) \geq f(x^k)$) e penalizando em cada iteração cada vez menos ($p(x^{k+1}) \leq p(x^k)$), conforme afirma o Lema 5.5 da penalização; aqui partiremos de uma aproximação dentro da região admissível, aproximando-nos da solução de (P) a partir do interior da região admissível, com valores da função objetivo cada vez menores ($f(x^{k+1}) \leq f(x^k)$) e com valores da chamada função de barreira b cada vez maiores em cada iteração ($b(x^{k+1}) \geq b(x^k)$), conforme iremos demonstrar (cf. o Lema 5.13 da barreira).

Definição 5.9 (função de barreira). *Dizemos que $b : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função de barreira para (P) se ela satisfaz, para todo o $x \in \mathbb{R}^n$, as seguintes duas condições:*

- $b(x) \geq 0$ se $g(x) < 0$;
- $b(x) \rightarrow +\infty$ se $\max_{i=1, \dots, m} \{g_i(x)\} \rightarrow 0$.

Exemplo 5.10. A função

$$b(x) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{-g_i(x)}$$

é uma função de barreira para (P) . Por exemplo, para um problema com $n = 1$ e $m = 2$ em que $g(x) = (g_1(x), g_2(x)) = (x - 4, 1 - x)$, podemos escolher

$$b(x) = \frac{1}{4 - x} + \frac{1}{x - 1}.$$

Exemplo 5.11. Uma classe típica de funções de barreira são as funções

$$b(x) = \sum_{i=1}^m (-g_i(x))^{-q}, \quad q > 0.$$

Para o caso particular em que $q = 1$, obtemos a função de barreira do Exemplo 5.10.

Exemplo 5.12. A função

$$b(x) = - \sum_{i=1}^m \ln(-g_i(x))$$

é conhecida na literatura como a *função de barreira logarítmica*.

A ideia do método da barreira é substituir a resolução de um problema com restrições na resolução de uma sequência de problemas de otimização sem restrições, no sentido estudado na Parte I do nosso curso, da forma

$$\min_{x \in X} \left(f(x) + \frac{1}{c} b(x) \right), \quad (B_c)$$

onde X é o conjunto aberto $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) < 0\}$. Mais precisamente, queremos mostrar que se tivermos uma sucessão de constantes c_k tal que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} c_k = +\infty,$$

então as soluções dos problemas (B_{c_k}) vão-se aproximando da solução do problema original com restrições (P) . A demonstração de um tal resultado baseia-se no conjunto de propriedades reunidas no chamado lema da barreira.

Lema 5.13 (lema da barreira). *Seja $r(c, x) := f(x) + \frac{1}{c} b(x)$; $\{c_k\}_{k \in \mathbb{N}_0}$ uma sucessão de constantes $c_k > 0$ satisfazendo $c_{k+1} > c_k$ e $c_k \rightarrow +\infty$ à medida que $k \rightarrow +\infty$; e x^k a solução exata do problema sem restrições (B_{c_k}). Então, as seguintes desigualdades são satisfeitas para qualquer $k \in \mathbb{N}_0$:*

1. $r(c_k, x^k) \geq r(c_{k+1}, x^{k+1})$;
2. $b(x^k) \leq b(x^{k+1})$;
3. $f(x^k) \geq f(x^{k+1})$;
4. $f(x^*) \leq f(x^k) \leq r(c_k, x^k)$.

Demonstração. 1. Temos $r(c_k, x^k) = f(x^k) + \frac{1}{c_k} b(x^k)$. Dado que $c_{k+1} > c_k$, obviamente que $r(c_k, x^k) \geq f(x^k) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k)$. Por outro lado, sendo x^{k+1} o minimizante de $r(c_{k+1}, x)$, resulta que

$$r(c_k, x^k) \geq f(x^k) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k) \geq f(x^{k+1}) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^{k+1}) = r(c_{k+1}, x^{k+1}).$$

2. Como x^k é minimizante de $r(c_k, x)$ e x^{k+1} é o minimizante de $r(c_{k+1}, x)$,

$$\begin{aligned} f(x^k) + \frac{1}{c_k} b(x^k) &\leq f(x^{k+1}) + \frac{1}{c_k} b(x^{k+1}), \\ f(x^{k+1}) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^{k+1}) &\leq f(x^k) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k). \end{aligned}$$

Somando estas duas desigualdades, obtemos

$$\left(\frac{1}{c_k} - \frac{1}{c_{k+1}} \right) b(x^k) \leq \left(\frac{1}{c_k} - \frac{1}{c_{k+1}} \right) b(x^{k+1}).$$

Lembrando que $c_k < c_{k+1} \Leftrightarrow \frac{1}{c_k} > \frac{1}{c_{k+1}}$, resulta a desigualdade pretendida: $b(x^{k+1}) \geq b(x^k)$.

3. Começamos por notar que $f(x^k) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k) \geq f(x^{k+1}) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^{k+1})$, uma vez que x^{k+1} é minimizante de $r(c_{k+1}, x)$. Demonstrámos que $b(x^k) \leq b(x^{k+1})$ (ponto 2), de onde resulta que $f(x^k) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k) \geq f(x^{k+1}) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^{k+1}) \geq f(x^{k+1}) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k)$. A desigualdade $f(x^k) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k) \geq f(x^{k+1}) + \frac{1}{c_{k+1}} b(x^k)$ é equivalente a

$$f(x^k) \geq f(x^{k+1}).$$

4. Temos que $f(x^*) \leq f(x^k)$ e, como $c_k > 0$ e $b(x) \geq 0$ para todo o x , obviamente

$$f(x^k) \leq f(x^k) + \frac{1}{c_k} b(x^k) = r(c_k, x^k).$$

O resultado está demonstrado. $\square$

Denotemos por $\mathcal{V}(\varepsilon, x)$ uma bola de raio ε centrada em x . Com as propriedades do Lema 5.13, vamos agora demonstrar a convergência do método de barreira.

Teorema 5.14 (teorema de convergência do método de barreira). *Suponhamos que f , g e b são funções contínuas. Seja $\{x^k\}$, $k = 0, \dots, +\infty$, uma sucessão de soluções de (B_{c_k}) . Se existe uma solução x^* de (P) para a qual*

$$\mathcal{V}(\varepsilon, x) \cap X = \mathcal{V}(\varepsilon, x) \cap \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) < 0\} \neq \emptyset$$

para todo $\varepsilon > 0$, então o ponto limite $\bar{x}$ da sucessão $\{x^k\}$ é solução de (P) .

Demonstração. Seja $\bar{x}$ o ponto limite da sucessão $\{x^k\}$. Da continuidade das funções f e g ,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} f(x^k) = f(\bar{x}) \quad \text{e} \quad \lim_{k \rightarrow +\infty} g(x^k) = g(\bar{x}) \leq 0.$$

Deste modo, $\bar{x}$ é admissível para (P) . Para cada $\varepsilon > 0$, existe $\tilde{x}$ tal que $g(\tilde{x}) < 0$ e $f(\tilde{x}) \leq f(x^*) + \varepsilon$. Somando a ambos os lados desta última desigualdade a quantidade positiva $\frac{1}{c_k}b(\tilde{x})$, obtemos para cada k que

$$f(x^*) + \varepsilon + \frac{1}{c_k}b(\tilde{x}) \geq f(\tilde{x}) + \frac{1}{c_k}b(\tilde{x}) \geq r(c_k, x^k).$$

Por conseguinte, para k suficientemente grande,

$$f(x^*) + 2\varepsilon \geq r(c_k, x^k)$$

e, como pelo item 4 do Lema 5.13 da barreira $r(c_k, x^k) \geq f(x^*)$, então

$$f(x^*) + 2\varepsilon \geq \lim_{k \rightarrow +\infty} r(c_k, x^k) \geq f(x^*).$$

Isto implica que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} r(c_k, x^k) = f(x^*).$$

Também temos do item 4 do Lema 5.13 da barreira que

$$f(x^*) \leq f(x^k) \leq r(c_k, x^k) = f(x^k) + \frac{1}{c_k}b(x^k).$$

Tomando limites, obtemos $f(x^*) \leq f(\bar{x}) \leq f(x^*)$, de onde concluímos que $f(\bar{x}) = f(x^*)$ e $\bar{x}$ é minimizante de (P) . $\square$

Na prática, como sabemos, consideramos uma sequência finita de problemas sem restrições (B_{c_k}) , conforme sistematizado no seguinte algoritmo aproximativo de barreira.

Algoritmo 4: Algoritmo da Barreira.

Entrada: Função f e restrições g que definem o problema (P) que pretendemos resolver, função de barreira b , parâmetro inicial $c_0 > 0$ para definição do problema auxiliar (B_{c_0}) , parâmetro $\eta > 1$ de crescimento das constantes c_k , tolerância $\varepsilon > 0$ para critério de paragem, aproximação inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$ no interior da região admissível de (P) (método de ponto interior).

Saída: Aproximação x^k para a solução do problema (P) com $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon$ ou $|f(x^k) - f(x^{k-1})| < \varepsilon$.

1. Inicialização: formular a função objetivo aumentada $r(c_0, x)$. Fazer $k := 1$.
2. Partindo de x^{k-1} , usar um dos métodos aproximativos estudados no Capítulo 3 para resolver o problema sem restrições $\min_{x \in X} r(c_{k-1}, x)$. Seja x^k a aproximação encontrada.
3. Se $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon$ ou $|f(x^k) - f(x^{k-1})| < \varepsilon$, então stop, com x^k a aproximação da solução do problema com restrições (P) ; caso contrário, prosseguir.
4. Fazer $c_k := \eta c_{k-1}$ e formular $r(c_k, x)$.
5. Fazer $k := k + 1$ e voltar ao Passo 2.

Vejamos um exemplo de aplicação do Algoritmo 4.

Exemplo 5.15 ($n = 2$, $m = 1$). Consideremos o problema de minimizar a função $f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 9x_2$ sujeita à restrição $x_1 + x_2 \geq 4$. Neste caso $g(x_1, x_2) = -x_1 - x_2 + 4$ e escolhendo como função de barreira a função b do Exemplo 5.10 temos

$$b(x_1, x_2) = \frac{1}{x_1 + x_2 - 4}.$$

Os problemas sem restrições auxiliares do método da barreira são então os problemas (B_c) da forma $r(c, x_1, x_2) = f(x_1, x_2) + \frac{1}{c}b(x_1, x_2) \rightarrow \min$ em $X = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : g(x_1, x_2) < 0\}$, ou seja,

$$\begin{aligned} 2x_1^2 + 9x_2 + \frac{1}{c} \frac{1}{x_1 + x_2 - 4} &\rightarrow \min, \\ -x_1 - x_2 + 4 &< 0. \end{aligned} \tag{B_c}$$

Para qualquer valor de c , temos

$$\begin{cases} \frac{\partial r(c, x_1, x_2)}{\partial x_1} = 0 \\ \frac{\partial r(c, x_1, x_2)}{\partial x_2} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 4x_1 - \frac{1}{c}(x_1 + x_2 - 4)^{-2} = 0 \\ 9 - \frac{1}{c}(x_1 + x_2 - 4)^{-2} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow (x_1, x_2) = \left(\frac{9}{4}, \frac{21\sqrt{c} \pm 4}{12\sqrt{c}}\right).$$

Vemos então que as aproximações x^k geradas pelo Algoritmo 4 vão convergindo para $(\frac{9}{4}, \frac{7}{4})$:

$$\lim_{c \rightarrow +\infty} \left(\frac{9}{4}, \frac{21\sqrt{c} \pm 4}{12\sqrt{c}}\right) = \left(\frac{9}{4}, \frac{7}{4}\right).$$

É fácil de confirmar que $(\frac{9}{4}, \frac{7}{4})$ é o minimizante global do problema de minimizar a função $f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 9x_2$ sujeita à restrição $x_1 + x_2 \geq 4$.

Exercício 5.16. Usando as condições suficientes de otimalidade estudadas na Secção 4.6, mostre que o candidato $(\frac{9}{4}, \frac{7}{4})$ encontrado no Exemplo 5.15 pelo método da barreira é o minimizante global do problema.

Terminamos esta secção mostrando que existe uma ligação entre os métodos de barreira e os teoremas baseados nos multiplicadores de Karush–Kuhn–Tucker. Seja $b(x) = \gamma(g(x))$, onde

$$\begin{aligned}\gamma : \mathbb{R}^m &\rightarrow \mathbb{R} \\ y &\mapsto \gamma(y)\end{aligned}$$

é continuamente diferenciável. Então,

$$\nabla b(x) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial \gamma}{\partial y_i}(g(x)) \nabla g_i(x).$$

Se x^k é solução de (B_{c_k}) , então

$$\nabla f(x^k) + \frac{1}{c_k} \nabla b(x^k) = 0,$$

isto é,

$$\nabla f(x^k) + \frac{1}{c_k} \sum_{i=1}^m \frac{\partial \gamma}{\partial y_i}(g(x^k)) \nabla g_i(x^k) = 0. \quad (5.4)$$

Definindo

$$u_i^k := \frac{1}{c_k} \frac{\partial \gamma}{\partial y_i}(g(x^k)),$$

podemos reescrever (5.4) na forma

$$\nabla f(x^k) + \sum_{i=1}^m u_i^k \nabla g_i(x^k) = 0.$$

Por conseguinte, podemos interpretar os u_i^k como os multiplicadores de KKT.

5.3 Exercícios

1. Usando um método de penalização, minimize $f(x, y) = (x - 3)^2 + (y - 5)^2$ sujeita às restrições de desigualdade $x + y \leq 7$, $x \geq 0$ e $y \geq 0$.
2. Usando o método da barreira e a função de barreira logarítmica, minimize a função objetivo $f(x, y) = x^2 + y^2$ sujeita à restrição de desigualdade $1 - x - y \leq 0$.

Capítulo 6

Dualidade

Podemos associar a cada problema de programação não linear um outro problema, também de programação não linear, chamado de dual.

Definição 6.1 (problemas primal e dual). *Dado um problema de programação não linear*

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ \text{s. a } & g(x) \leq 0, \\ & h(x) = 0, \end{aligned} \tag{P}$$

chamado de problema primal, definimos o seu dual por

$$\begin{aligned} & \max_{(u,v) \in \mathbb{R}^{m+l}} \theta(u,v) \\ \text{s. a } & u \geq 0, \end{aligned} \tag{D}$$

onde a função dual θ é definida por

$$\theta(u,v) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} [f(x) + u \cdot g(x) + v \cdot h(x)], \tag{6.1}$$

à custa do par de multiplicadores (u,v) .

A razão de se definir problema dual como na Definição 6.1 torna-se clara à medida que estabelecermos a ligação entre os problemas primal e dual e os ligarmos às condições de KKT.

Lema 6.2. *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ funções diferenciáveis para as quais o mínimo em (6.1), que define a função dual $\theta(u,v)$, existe para todo o par (u,v) com $u \geq 0$. Seja $X = X(u,v) \in \mathbb{R}^n$ um ponto onde o mínimo de (6.1) é atingido, isto é,*

$$\theta(u,v) = f(X) + u \cdot g(X) + v \cdot h(X). \tag{6.2}$$

Se a função $X(u, v)$ é diferenciável, então também o é a função $\theta(u, v)$ e

$$\nabla_u \theta(u, v) = g(X), \quad \nabla_v \theta(u, v) = h(X).$$

Demonstração. De (6.2), resulta da regra da cadeia que

$$\nabla_u \theta = (\nabla f(X) + u \nabla g(X) + v \nabla h(X)) \nabla_u X + g(X)$$

e

$$\nabla_v \theta = (\nabla f(X) + u \nabla g(X) + v \nabla h(X)) \nabla_v X + h(X).$$

Por outro lado, se X é minimizante do segundo membro de (6.1), então o teorema de Fermat (Teorema 2.3) diz-nos que $\nabla f(X) + u \cdot \nabla g(X) + v \cdot \nabla h(X) = 0$, de onde concluímos que $\nabla_u \theta = g(X)$ e $\nabla_v \theta = h(X)$. $\square$

O próximo resultado é conhecido como dualidade fraca.

Proposição 6.3 (dualidade fraca). *Sejam f , g e h funções diferenciáveis e denotemos os conjuntos admissíveis dos problemas primal e dual por*

$$\mathcal{A}_{\mathcal{P}} := \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \leq 0, h(x) = 0\}$$

e

$$\mathcal{A}_{\mathcal{D}} := \{(u, v) \in \mathbb{R}^{m+l} : u \geq 0\},$$

respetivamente. Então verifica-se a seguinte desigualdade:

$$\max_{(u,v) \in \mathcal{A}_{\mathcal{D}}} \theta(u, v) \leq \min_{x \in \mathcal{A}_{\mathcal{P}}} f(x). \quad (6.3)$$

Demonstração. Da definição (6.1) de função dual, resulta que

$$\theta(u, v) \leq f(x) + ug(x) + vh(x) \quad (6.4)$$

qualquer que seja o $x \in \mathbb{R}^n$. Para todo o $u \geq 0$, $g(x) \leq 0$ e $h(x) = 0$, concluímos de imediato de (6.4) que $\theta(u, v) \leq f(x) + ug(x) + vh(x) \leq f(x)$. Por fim, da desigualdade $\theta(u, v) \leq f(x)$, que é válida para todo o $(u, v) \in \mathcal{A}_{\mathcal{D}}$ e para todo o $x \in \mathcal{A}_{\mathcal{P}}$, concluímos, como caso particular, que (6.3) é verdadeira. $\square$

Corolário 6.4. *Se (u, v) é admissível para o problema dual (i.e., $(u, v) \in \mathcal{A}_{\mathcal{D}}$), x é admissível para o problema primal (i.e., $x \in \mathcal{A}_{\mathcal{P}}$) e $\theta(u, v) = f(x)$, então (u, v) é solução do problema dual (i.e., (u, v) é maximizante de $(\mathcal{D})$) e x é solução do problema primal (i.e., x é minimizante de $(\mathcal{P})$).*

A diferença entre o mínimo do problema primal $(\mathcal{P})$ e o máximo do problema dual $(\mathcal{D})$ é conhecida na literatura como a *lacuna de dualidade*.

Definição 6.5 (lacuna de dualidade). *Ao valor*

$$\min_{x \in \mathcal{A}_{\mathcal{P}}} f(x) - \max_{(u,v) \in \mathcal{A}_{\mathcal{D}}} \theta(u, v) \quad (6.5)$$

chamamos *lacuna de dualidade*.

Observação 6.6. *Da desigualdade (6.3) sabemos que a lacuna de dualidade é sempre um valor não negativo.*

Quando não existe lacuna de dualidade, i.e., (6.5) tem valor nulo, ambos os problemas primal e dual são equivalentes: o mínimo do problema primal ($\mathcal{P}$) é igual ao máximo do problema dual ($\mathcal{D}$). O próximo resultado dá-nos uma condição suficiente para a não existência de lacuna de dualidade.

Teorema 6.7 (dualidade forte). *Sejam f e g funções convexas de classe C^1 e h uma função linear. Então não existe lacuna de dualidade: (i) se x é solução de ($\mathcal{P}$), então existe (u, v) solução de ($\mathcal{D}$) com $\theta(u, v) = f(x)$; (ii) se (u, v) é solução de ($\mathcal{D}$), então existe x solução de ($\mathcal{P}$) com $f(x) = \theta(u, v)$.*

Demonstração. (i) A convexidade de f e g e a linearidade de h são uma restrição de qualificação: se $x \in \mathcal{A}_{\mathcal{P}}$ é solução de ($\mathcal{P}$), então sabemos que existem multiplicadores (u, v) para os quais as condições de KKT são satisfeitas, isto é,

$$\begin{aligned} \nabla f(x) + u \nabla g(x) + v \nabla h(x) &= 0, \\ u &\geq 0, \\ u_i g_i(x) &= 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \tag{6.6}$$

A segunda condição em (6.6) diz-nos que $(u, v) \in \mathcal{A}_{\mathcal{D}}$. Sabemos também que sob as condições de convexidade de f e g e de linearidade de h , as condições de KKT são suficientes para minimizante global. Uma vez que $u \cdot g(x) = 0$ e $h(x) = 0$, temos $\theta(u, v) = f(x)$. A Proposição 6.3 implica que (u, v) é solução de ($\mathcal{D}$). (ii) Se (u, v) é solução do problema dual ($\mathcal{D}$), então as condições necessárias de KKT aplicadas a ($\mathcal{D}$) permitem-nos escrever que

$$\begin{aligned} -\nabla_u \theta(u, v) - y &= 0, \quad -\nabla_v \theta(u, v) = 0, \\ y &\geq 0, \\ -y_i u_i &= 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned} \tag{6.7}$$

onde y é o multiplicador associado à restrição $u \geq 0 \Leftrightarrow -u \leq 0$. Seja x tal que

$$\theta(u, v) = f(x) + u g(x) + v h(x). \tag{6.8}$$

Tendo em conta o Lema 6.2, temos

$$\nabla_u \theta(u, v) = g(x) \quad \text{e} \quad \nabla_v \theta(u, v) = h(x),$$

pelo que podemos reescrever as condições de otimalidade (6.7) como

$$\begin{aligned} -g(x) &= y, \quad h(x) = 0, \\ -g(x) &\geq 0, \\ g_i(x) u_i &= 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \tag{6.9}$$

Resulta de (6.9) que $x \in \mathcal{A}_{\mathcal{P}}$ e segue-se de (6.8) que $\theta(u, v) = f(x)$. A desigualdade (6.3) permite-nos concluir que x é solução do problema ($\mathcal{P}$). $\square$

Exercício 6.8. Considere-se o seguinte problema de programação não linear:

$$\min x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

sujeito a

$$\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 + 3x_3 + \frac{5}{2} \leq 0 \\ x_1 + x_2 + x_3 + 2 = 0. \end{cases}$$

Mostre que não existe lacuna de dualidade. Resolva os problemas primal e dual.
[Solução: o minimizante do problema primal é $(x_1, x_2, x_3) = (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1)$ com mínimo $\frac{3}{2}$; o maximizante do problema dual é $(u, v) = (\frac{1}{4}, \frac{5}{4})$ com máximo $\frac{3}{2}$.]

Bibliografia

- [1] F. J. Aragón, M. A. Goberna, M. A. López and M. M. L. Rodríguez, *Nonlinear optimization*, Springer Undergraduate Texts in Mathematics and Technology, Springer, Cham, 2019.
- [2] M. S. Bazaraa, H. D. Sherali and C. M. Shetty, *Nonlinear programming*, third edition, Wiley-Interscience, Hoboken, NJ, 2006.
- [3] A. Beck, *Introduction to nonlinear optimization*, MOS-SIAM Series on Optimization, 19, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2014.
- [4] D. P. Bertsekas, *Nonlinear programming*, third edition, Athena Scientific Optimization and Computation Series, Athena Scientific, Belmont, MA, 2016.
- [5] S. Boyd and L. Vandenberghe, *Convex optimization*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2004.
- [6] D. M. Cardoso, *Tópicos de optimização não linear*, Departamento de Matemática, Universidade de Aveiro, 1999. <http://arquivoescolar.org/handle/arquivo-e/119>
- [7] R. Freund, *15.084J Nonlinear programming*, Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCourseWare, 2004. <https://ocw.mit.edu>
- [8] A. Friedlander, *Elementos de programação não-linear*, Dep. de Matemática Aplicada, IMECC, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 2012. <http://arquivoescolar.org/handle/arquivo-e/194>
- [9] J. M. García Sánchez, *Modelling in mathematical programming*, International Series in Operations Research & Management Science, 298, Springer, Cham, 2021.
- [10] I. Griva, S. G. Nash and A. Sofer, *Linear and nonlinear optimization*, second edition, SIAM, Philadelphia, PA, 2009.
- [11] M. R. Hestenes, *Optimization theory*, Wiley-Interscience, New York, 1975.

- [12] A. F. Izmailov and M. V. Solodov, *Newton-type methods for optimization and variational problems*, Springer Series in Operations Research and Financial Engineering, Springer, Cham, 2014.
- [13] A. Quarteroni, F. Saleri and P. Gervasio, *Scientific computing with MATLAB and Octave*, fourth edition, Texts in Computational Science and Engineering, 2, Springer, Heidelberg, 2014.
- [14] S. Linge and H. P. Langtangen, *Programming for computations—MATLAB/Octave*, Texts in Computational Science and Engineering, 14, Springer, Cham, 2016.
- [15] D. G. Luenberger and Y. Ye, *Linear and nonlinear programming*, fourth edition, International Series in Operations Research & Management Science, 116, Springer, New York, 2016.
- [16] O. L. Mangasarian, *Nonlinear programming*, corrected reprint of the 1969 original, Classics in Applied Mathematics, 10, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1994.
- [17] R. E. Miller, *Optimization*, A Wiley-Interscience Publication, Wiley, New York, 2000.
- [18] S. A. MirHassani and F. Hooshmand, *Methods and models in mathematical programming*, Springer, Cham, 2019.
- [19] P. Pedregal, *Introduction to optimization*, Texts in Applied Mathematics, 46, Springer, New York, 2004.
- [20] R. T. Rockafellar, *Convex analysis*, reprint of the 1970 original, Princeton Landmarks in Mathematics, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1997.
- [21] W. Sun and Y.-X. Yuan, *Optimization theory and methods*, Springer Optimization and Its Applications, 1, Springer, New York, 2006.
- [22] D. F. M. Torres, *Introdução à optimização dinâmica*, Departamento de Matemática, Universidade de Aveiro, 2005. <http://arquivoscolar.org/handle/arquivo-e/81>

Índice

- $\mathcal{A}$, 2
- MDMR_{quadrático}, 33
- admissível, 1, 2
- Algoritmo da Barreira, 92
- Algoritmo da Penalização, 86
- Algoritmo de Newton, 36
- Algoritmo do MDMR, 28
- barreira, 89
- Cauchy, 27
- coercividade, 30
- combinações convexas, 18
- compacto, 6
- condição necessária, 9
- condição suficiente, 9
- condição de estacionariedade, 63
- condição de não trivialidade, 64
- condições de complementaridade, 64
- condições de KKT, 78, 79
- condições de não negatividade, 63
- conjunto convexo, 18
- conjuntos de nível, 74
- critério de paragem, 28
- CrITÉrio de Sylvester, 4
- definida positiva, 4
- derivada direcional, 3
- desigualdade do gradiente, 20
- desigualdade triangular, 19, 57
- direção de Newton, 36, 38
- direção descendente, 10
- direção de procura, 28
- distância mínima, 57
- divisão à esquerda, 38
- existência, 5
- função convexa, 19
- função de utilidade de Cobb–Douglas, 25
- função analítica, 16
- função coerciva, 30
- função de barreira, 89
- função de barreira logarítmica, 90
- função de penalização, 84
- função de penalização linear, 84
- função de penalização quadrática, 84
- função estritamente convexa, 19
- função objetivo, 40
- funções afins, 19
- gradiente, 3
- Hessiana, 3
- hiperplano, 57
- indefinida, 4
- independência linear, 78
- mínimo, 2
- método de descida mais rápida, 28
- métodos do tipo gradiente, 27
- Métodos iterativos, 27
- mínimos quadrados, 16
- método de ponto exterior, 86
- método de ponto interior, 93
- métodos determinísticos, 27
- maximização, 1
- MDMR, 27
- minimizante, 2
- minimizante anormal, 65
- minimizante global, 2
- minimizante global estrito, 2
- minimizante local, 2

- minimizante local estrito, 2
- minimizante normal, 65
- MN, 27
- modus tollens, 10
- otimização, i
- parâmetro de penalização, 84
- passo, 28
- penalização, 83, 84
- ponto crítico, 11
- ponto de sela, 13
- ponto de Slater, 78
- problema convexo, 19, 77
- problema quadrático, 15
- programação matemática, i
- pseudocôncava, 75
- pseudoconvexa, 75
- quase-côncava, 73
- quase-convexa, 73
- restrição de qualificação das restrições
 - lineares, 79
- restrição de qualificação de Slater, 78
- restrições de qualificação, 64, 78
- restrições lineares, 78
- RQ, 78
- SDP, 4
- semi-contínua inferior, 6
- semi-espço, 57
- semidefinida positiva, 4
- separação, 57
- separação estrita, 57
- separação forte, 57
- separação própria, 57
- sequencialmente compacto, 31
- SSDP, 4
- Taylor, 16, 22, 35
- Teorema de Bolzano–Weierstrass, 31
- Teorema de Fermat, 10
- Teorema de Schwarz, 3
- Teorema de Weierstrass para funções,
 - 6
- Teorema de Weierstrass para sucessões,
 - 6
- tolerância, 28
- vetor resíduo, 15