Capítulo 9

Programação Não Linear sem Restrições

Quando o problema de otimização possui função objetivo e/ou funções de restrições não lineares, o problema é dito de **Programação Não Linear.**

Existem três tipos de métodos numéricos para solução de problemas de Programação Não Linear:

- baseados em gradientes;
- busca direta;
- métodos inspirados na natureza.

9.1 Otimização unidimensional: o segmento áureo

Nesta seção se discute a solução numérica do problema de encontrar máximos ou mínimos de uma função escalar de uma só variável, sem restrições. De partida, essa função será considerada não linear, já que o caso linear em uma dimensão não tem máximos ou mínimos finitos.

Um dos métodos numéricos mais utilizados para esse fim é o da busca utilizando o segmento áureo. A razão áurea foi primeiro definida por Euclides (cerca de 300 AC), na construção do pentagrama, e enunciada como: “uma linha reta é dita dividida em extrema e média razão quando a linha toda está para o maior segmento como esse último está para o menor”. Sejam L_1 e L_2 o maior e o menor segmento, respectivamente. Fazendo

$$\phi = \frac{L_1}{L_2} \tag{9.1}$$

tem-se, pelo enunciado de Euclides,

$$\phi = \frac{L_1 + L_2}{L_1} \tag{9.2}$$

resultando a equação de segundo grau

$$\phi^2 - \phi - 1 = 0 \tag{9.3}$$

cuja raiz positiva é a chamada “razão áurea”

$$\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1{,}618034... \tag{9.4}$$

Esse valor, as vezes conhecido como *divino*, aparece em um grande número de relações encontradas na natureza, nas ciências e nas artes. O leitor é convidado a fazer sua própria pesquisa sobre essa interessante recorrência.

O que se quer é determinar o mínimo de uma função unidimensional por um processo em etapas. Inicia-se definindo um intervalo x_L e x_U dentro do qual o mínimo é procurado. São necessários 2 pontos dentro desse intervalo para detectar a ocorrência de um mínimo, e eles serão escolhidos de acordo com a razão áurea,

$$x_1 = x_L + d \quad \text{e} \quad x_2 = x_U - d, \qquad d = (\phi - 1)(x_U - x_L) \tag{9.5}$$

Calcula-se o valor da função nesses 2 pontos interiores. Dois resultados podem ocorrer.

1. Se $f(x_1) < f(x_2)$, então $f(x_1)$ é o mínimo desse intervalo, e o domínio à esquerda de x_2, de x_L a x_2, pode ser eliminado da busca porque não contém o mínimo. Neste caso, x_2 transforma-se no novo x_L para a próxima etapa.

2. Se $f(x_2) < f(x_1)$, então $f(x_2)$ é o mínimo desse intervalo, e o domínio à direita de x_1, de x_1 a x_U, pode ser eliminado da busca porque não contém o mínimo. Neste caso, x_1 transforma-se no novo x_U para a próxima etapa.

Como os valores de x_1 e x_2 foram escolhidos usando a razão áurea, não é necessário calcular todos os valores da função na próxima iteração. Por exemplo, se ocorrer a hipótese 1 acima, o antigo x_1 passa a ser o novo x_2, e, assim, o novo $f(x_2)$ não precisa ser calculado, pois é o mesmo que o antigo $f(x_1)$. Para completar o algoritmo, determina-se o novo x_1, aplicando a Eq. (6.8), baseando-se nos novos valores de x_L e x_U. No caso 2, o procedimento é análogo. Demonstra-se que, em cada iteração, o intervalo é reduzido por um percentual de cerca de 61,8%. Assim, por exemplo, depois de 10 iterações, o intervalo diminuiu de cerca de $0{,}618^{10}$, 0,8% de seu comprimento original.

Se for desejado encontrar o máximo de uma função $f(x)$, em vez do mínimo, basta determinar o mínimo dessa função com sinal trocado, $F(x) = -f(x)$.

Exemplo

Determinar o mínimo da função

$$f(x) = \frac{x^2}{10} - 2\,\mathrm{sen}\, x$$

no intervalo $x_L = 0$ a $x_U = 4$.

1ª iteração

$$d = 0{,}61803(4 - 0) = 2{,}4721$$
$$x_1 = 0 + 2{,}4721 = 2{,}4721 \qquad x_2 = 4 - 2{,}4721 = 1{,}5279$$
$$f(x_2) = -1{,}7647 \qquad f(x_1) = -0{,}63, \quad \therefore \quad f(x_2) < f(x_1)$$

O mínimo atual é $f(x_2) = -1{,}7647$.

2aª iteração

$$d = 0{,}61803(2{,}4721 - 0) = 1{,}5279$$
$$x_1 = 1{,}5279 \quad x_2 = 2{,}4721 - 1{,}5279 = 0{,}9443$$
$$f(x_2) = -1{,}5310, \quad \therefore \quad f(x_2) > f(x_1)$$

O mínimo atual ainda é $f(x_1) = -1{,}7647$

Após 8 iterações, a localização do mínimo é aproximada por x = 1,4427, e o valor mínimo estimado da função é -1,7755.

A busca do mínimo utilizando a razão áurea pode ser uma rotina que se repete dentro de um algoritmo maior, como será visto na seção 4.4 a seguir.

9.2 Otimização multidimensional

Num problema multidimensional, ou seja, com várias variáveis de projeto, sem restrições, formalmente:

Achar $\mathbf{x}^*$ para minimizar $f(\mathbf{x})$,

em cada passo do processo k, conhecido o valor do vetor $\mathbf{x}^{(k)}$projeta-se um novo valor $\mathbf{x}^{(k+1)}$ por

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x} \tag{9.6}$$

onde

$$\Delta\mathbf{x} = \alpha_k \mathbf{d}^{(k)} \tag{9.7}$$

em que $\mathbf{d}^{(k)}$ é a direção desejada e α_k é o tamanho do passo nessa direção. Para isso, utilizar o algoritmo que se segue.

Algoritmo

1. Estimar um projeto inicial razoável $\mathbf{x}^{(0)}$, k =0,
2. computar a direção $\mathbf{d}^{(k)}$ no ponto $\mathbf{x}^{(k)}$,
3. checar a convergência; se atingida parar, senão
4. calcular um tamanho de passo positivo $\alpha_k$na direção $\mathbf{d}^{(k)}$, e $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}$,
5. $k = k + 1$ e vá para o passo 2.

Para minimização da função objetivo, em cada passo seu valor deve diminuir

$$f\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right) < f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) \tag{9.8}$$

$$f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)} < f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) \tag{9.9}$$

Aproximando o lado esquerdo em série de Taylor em torno do ponto $\mathbf{x}^{(k)}$

$$f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + \alpha_k (\mathbf{c}^{(k)} \cdot \mathbf{d}^{(k)}) < f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) \tag{9.10}$$

onde $\mathbf{c}^{(k)}$ é o gradiente da função objetivo nesse ponto, e o produto escalar indicado pelo ponto entre os vetores entre parêntesis deve ser negativo,

$$(\mathbf{c}^{(k)} \cdot \mathbf{d}^{(k)}) < 0 \tag{9.11}$$

uma vez que α_k foi definido como sempre positivo. Isso implica em que o ângulo entre esses dois vetores, o gradiente e direção desejável, deve estar entre 90º e 270º .

Qualquer vetor $\mathbf{d}^{(k)}$satisfazendo essa desigualdade, a **condição de descida** da função objetivo, é uma **direção desejável**. Métodos deste tipo são métodos de descida "morro abaixo", em que se quer atingir o fundo do vale da função objetivo a partir de um ponto mais alto.

A determinação do comprimento do passo é uma busca unidimensional, ou em linha

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha\, \mathbf{d}^{(k)} \tag{9.12}$$

$$f\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right) = f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + \alpha\, \mathbf{d}^{(k)} = \bar{f}(\alpha) \tag{9.13}$$

$\bar{f}(\alpha)$ é uma função apenas de α. Quando $\alpha = 0 \rightarrow \bar{f}(0) = f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$. Logo, para que se diminua o valor da função objetivo, como desejado, $\bar{f}(\alpha)$ deve sempre decrescer. Trata-se de um problema de minimização unidimensional sem restrições. A condição necessária para um mínimo é

$$\frac{d\bar{f}}{d\alpha} = 0 \tag{9.14}$$

e a condição suficiente é

$$\frac{d^2\bar{f}}{d\alpha^2} > 0 \tag{9.15}$$

Simplificando a notação suprimindo a barra sobre a função, e aplicando a regra da cadeia,

$$\frac{df\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right)}{d\alpha} = \frac{\partial f^T\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right)}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right)}{d\alpha} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right) \cdot \mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{c}^{(k+1)} \cdot \mathbf{d}^{(k)} = 0 \tag{9.16}$$

Ou seja, que a direção desejada seja ortogonal ao vetor gradiente em cada passo.

9.3 Método do Gradiente: da maior declividade

Algoritmo

1. Estimar um projeto inicial $\mathbf{x}^{(0)}$, fazer $k = 0$, adotar um parâmetro de convergência pequeno $\varepsilon > 0$,
2. calcular o gradiente da função objetivo no ponto atual $\mathbf{x}^{(k)}$, $\mathbf{c}^{(k)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$,
3. calcular o comprimento do vetor gradiente, $\left\|\mathbf{c}^{(k)}\right\|$; se $\left\|\mathbf{c}^{(k)}\right\| < \varepsilon$, pare, pois $\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*$, senão, continue,
4. fazer a direção de busca neste passo $\mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{c}^{(k)}$,
5. calcular o tamanho do passo neste ponto, minimizando $f(\alpha) = f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + \alpha\, \mathbf{d}^{(k)}$, pelo segmento áureo, por exemplo,
6. atualizar o projeto $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha\, \mathbf{d}^{(k)}$, fazer $k = k + 1$ e voltar ao passo 2.

Exemplo 1

Minimizar

$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2$$

projeto inicial dado $\mathbf{x}^{(0)} = [1 \quad 0]^T$, $k = 0$ e $\varepsilon = 10^{-4}$,

$\mathbf{c}^{(0)} = [2x_1 - 2x_2 \quad 2x_2 - 2x_1]^T = [2 \quad -2]^T$

$\|\mathbf{c}^{(0)}\| = 2\sqrt{2} > \varepsilon$, continue,

$\mathbf{d}^{(0)} = -\mathbf{c}^{(0)} = [-2 \quad 2]^T$

minimizar $f(\alpha) = f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right) + \alpha\,\mathbf{d}^{(0)}$, onde $\mathbf{x}^{(0)} + \alpha\,\mathbf{d}^{(0)} = [1 - 2\alpha \quad 2\alpha]^T$

$$f(\alpha) = f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right) + \alpha\,\mathbf{d}^{(0)} = (1 - 2\alpha)^2 + (2\alpha)^2 - 2(1 - 2\alpha)(2\alpha)$$

$$f(\alpha) = 16\alpha^2 - 8\alpha + 1$$

$$\frac{df}{d\alpha} = 0 \;\therefore\; \alpha_0 = 1/4$$

$$\frac{d^2f}{d\alpha^2} = 32 > 0$$

$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \alpha_0\,\mathbf{d}^{(0)} = [0.5 \quad 0.5]^T$

$\mathbf{c}^{(1)} = [0 \quad 0]^T$, $\|\mathbf{c}^{(1)}\| < \varepsilon$, pare.

Resposta: $\mathbf{x}^* = [0.5 \quad 0.5]^T$, e o valor mínimo da função objetivo é zero nesse ponto.

Exemplo 2

Minimizar

$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

projeto inicial dado $\mathbf{x}^{(0)} = [1 \quad 1 \quad 2]^T$, $k = 0$ e $\varepsilon = 10^{-4}$,

$\mathbf{c}^{(0)} = [2x_1 \quad 2x_2 \quad 2x_3]^T = [2 \quad 2 \quad 4]^T$

$\|\mathbf{c}^{(0)}\| > \varepsilon$, continue,

$\mathbf{d}^{(0)} = -\mathbf{c}^{(0)} = [-2 \quad -2 \quad -4]^T$

minimizar

$f(\alpha) = f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right) + \alpha\,\mathbf{d}^{(0)}$, onde $\mathbf{x}^{(0)} + \alpha\,\mathbf{d}^{(0)} = [1 - 2\alpha \quad 1 - 2\alpha \quad 2 - 4\alpha]^T$

$$f(\alpha) = f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right) + \alpha\,\mathbf{d}^{(0)} = (1 - 2\alpha)^2 + (1 - 2\alpha)^2 + (2 - 4\alpha)^2$$

$$f(\alpha) = 24\alpha^2 - 24\alpha + 6$$

$$\frac{df}{d\alpha} = 0 \ \therefore \ \alpha_0 = 1/2$$

$$\frac{d^2 f}{d\alpha^2} > 0$$

$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \alpha_0 \, \mathbf{d}^{(0)} = [0 \quad 0 \quad 0]^T$

$\mathbf{c}^{(1)} = [0 \quad 0 \quad 0]^T$, $\left\|\mathbf{c}^{(1)}\right\| < \varepsilon$, pare.

Resposta: $\mathbf{x}^* = [0 \quad 0 \quad 0]^T$, e o valor mínimo da função objetivo é zero nesse ponto.

Nota: Nesses dois exemplos foi possível determinar o mínimo da função $f(\alpha)$ pelas condições necessária e suficiente. Em casos mais complexos, pode ser necessário o uso de um método numérico como o segmento áureo.