



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica

JULIANO CAVALCANTE BORTOLETE

EMPACOTAMENTO DE CÍRCULOS USANDO OTIMIZAÇÃO NÃO
LINEAR

CAMPINAS
2016

JULIANO CAVALCANTE BORTOLETE

**EMPACOTAMENTO DE CÍRCULOS USANDO OTIMIZAÇÃO NÃO
LINEAR**

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Orientador: Luis Felipe Cesar da Rocha Bueno

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO JULIANO CAVALCANTE BORTOLETE, E ORIENTADA PELO PROF. DR. LUIS FELIPE CESAR DA ROCHA BUENO.

**CAMPINAS
2016**

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): Não se aplica.

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Maria Fabiana Bezerra Muller - CRB 8/6162

B648e Bortolete, Juliano Cavalcante, 1982-
Empacotamento de círculos usando otimização não linear / Juliano Cavalcante Bortolete. – Campinas, SP : [s.n.], 2016.

Orientador: Luís Felipe Cesar da Rocha Bueno.
Dissertação (mestrado profissional) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Otimização não-linear. 2. Problema de empacotamento. 3. Otimização matemática. I. Bueno, Luís Felipe Cesar da Rocha, 1983-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Circle packing using nonlinear optimization

Palavras-chave em inglês:

Nonlinear optimization

Packing problem

Mathematical optimization

Área de concentração: Matemática Aplicada e Computacional

Titulação: Mestre em Matemática Aplicada e Computacional

Banca examinadora:

Luís Felipe Cesar da Rocha Bueno [Orientador]

Cristiano Torezzan

Luiz Leduino de Salles Neto

Data de defesa: 14-06-2016

Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada e Computacional

**Dissertação de Mestrado Profissional defendida em 14 de junho de 2016 e
aprovada pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.**

Prof(a). Dr(a). LUÍS FELIPE CESAR DA ROCHA BUENO

Prof(a). Dr(a). CRISTIANO TOREZZAN

Prof(a). Dr(a). LUIZ LEDUINO DE SALLES NETO

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros
encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.

Agradecimentos

Ao Professor Luis Felipe que me orientou, acreditou e acompanhou de perto o desenvolvimento deste trabalho. A ele minha gratidão.

À Cláudia, amiga e companheira, que desde o início me incentivou e não me deixou desistir.

Aos meus pais, Gilma e Agostinho, à minha irmã Marcelly e meu filho Leonardo, um agradecimento especial, pela dedicação, pelas constantes orações, por torcerem avidamente para o meu sucesso.

Aos professores Cristiano Torezzan e Luiz Leduíno de Salles Neto, por participarem da banca e contribuírem com observações que aprimoraram este trabalho.

Aos amigos Rian e Guaranha, pelas horas de estudo e por suas inestimáveis colaborações.

Por fim, a todos aqueles que estiveram ao meu lado durante esta jornada.

Resumo

Este trabalho procura discutir, através de uma abordagem didática, conceitos relacionados à otimização não linear. Primeiramente, consideramos problemas de otimização irrestrita e ressaltamos a relação entre encontrar raízes de sistemas e pontos estacionários. Em um segundo momento, apresentamos parte da teoria que pertence ao escopo da otimização restrita. Neste caso, estudamos problemas em que o conjunto viável é determinado por restrições lineares de igualdade para, a partir disto, estudar alguns problemas com restrições não lineares. Concluindo esta etapa, o Método do Lagrangiano Aumentado é apresentado como uma evolução do Método de Penalidades. Para ilustrar uma das possíveis aplicações da teoria estudada, recorreremos aos problemas de empacotamento. Especificamente estudamos alguns problemas de empacotamento em contêineres simples, para então estudar empacotamentos em regiões delimitadas por quádricas. Por fim, empreendemos uma análise com o intuito de verificar a possibilidade de aplicar a técnica usada no caso do empacotamento em quádricas à regiões delimitadas por quárticas. Neste caso, foi possível constatar que esta adaptação não é simples.

Palavras-chave: Otimização não Linear. Problemas de Empacotamento. Otimização Matemática.

Abstract

This dissertation intends to discuss some non-linear optimization concepts by means of a didactic approach. First, we consider unconstrained optimization problems and we emphasize the relationship between finding roots of systems and how to obtain stationary points. In a second step, we present part of the theory that belongs to the scope of constrained optimization. In this case, we study problems where the feasible set is determined by linear equality constraints and later we deal with non-linear constraints. Completing this step, the Augmented Lagrangian Method is presented as an evolution of the Penalty Method. To illustrate one of the possible applications of the studied theory, we resorted to packing problems. Specifically we studied some packing problems in simple containers, for then study packings in regions bounded by quadric surfaces. Finally, we undertook an analysis in order to verify the possibility of applying the same technique used in the quadric case also in the case of packaging in regions defined by quartics. We found that such adjustment is not simple.

Keywords: Nonlinear Optimization. Packing Problems. Mathematical Optimization.

Sumário

1	OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA	13
1.1	Conceitos fundamentais	13
1.1.1	Condições de otimalidade sem restrições	15
1.1.2	Método de Newton para zeros de funções	20
1.1.3	O método de Newton para minimização unidimensional	29
1.2	Métodos de descida	30
1.2.1	Direções de descida	31
1.2.2	Método do Gradiente	34
1.2.3	Regra da minimização unidimensional	36
1.2.4	Método de Newton para minimizar funções de múltiplas variáveis	39
2	OTIMIZAÇÃO NÃO LINEAR COM RESTRIÇÕES	43
2.1	Problemas com restrições lineares de igualdade	44
2.1.1	Condições necessárias de primeira ordem	50
2.1.2	Condições de otimalidade de segunda ordem	52
2.2	Problemas com restrições não-lineares de igualdade	55
2.2.1	Condições necessárias de primeira ordem	59
2.2.2	Condições necessárias de segunda ordem	60
3	MÉTODOS DE PENALIDADE E DO LAGRANGIANO AUMENTADO	63
3.1	Método de penalidade	63
3.2	Método do Lagrangiano Aumentado	75
4	PROBLEMAS DE EMPACOTAMENTO EM CONTÊINERES SIMPLES	83
4.1	Empacotamento de itens circulares em contêineres circulares	85
4.1.1	Número máximo de itens circulares idênticos em um contêiner circular	87
4.1.2	Contêiner circular de tamanho mínimo	89
4.2	Empacotamento de itens circulares em um polígono	92
4.2.1	Empacotamento de itens circulares em um contêiner quadrado	93
4.2.2	Contêiner quadrado de tamanho mínimo	95
4.2.3	Círculos em um triângulo equilátero de menor área	106
5	EMPACOTAMENTO EM CONTÊINERES EM QUE O r-NÚCLEO NÃO É SIMPLES	109
5.1	Empacotamento de círculos em elipses	109
5.2	Empacotamento de círculos em uma região delimitada por uma parábola e pela reta $y = c$	121

5.3	Empacotamento de círculos em uma região delimitada inferiormente pela curva $y = x^4$ e superiormente pela reta $y = c$	131
-----	---	-----

6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	145
----------	-----------------------------	------------

	Referências	148
--	--------------------	------------

INTRODUÇÃO

Problemas de empacotamento são aqueles em que dado um contêiner, chamado objeto, deseja-se alocar nele k itens de modo que eles estejam inteiramente contidos no objeto e que não se sobreponham. Há diversas variantes para esse tipo de problema e este trabalho se propõe a abordar, de forma tão didática quanto possível, duas dessas variantes. A primeira delas trata do problema de dado um objeto com determinadas dimensões, encontrar a quantidade máxima de itens que ele pode conter. A segunda, que daremos maior ênfase, consiste em determinar a menor dimensão de um objeto, que possa conter k itens, dados a priori. Essas abordagens envolvem problemas de otimização.

Para resolver problemas de otimização geralmente são usadas técnicas que incorporam processos algorítmicos iterativos, aqueles em que, a partir de um ponto inicial dado, caminha-se em direção a um ponto de mínimo da função, que pode ser local ou global. Como muitos desses problemas são modelados por funções não convexas, dado o ponto inicial do processo iterativo, há a possibilidade de o algoritmo encontrar um ponto de mínimo local e não global. Caso isso ocorra, para se chegar a um ponto de mínimo global, deve-se repetir o processo a partir de um ponto inicial mais adequado.

O objetivo geral deste trabalho é possibilitar ao aluno de graduação, que domine os conceitos de Cálculo e Álgebra Linear, um primeiro contato com técnicas de resolução de problemas de empacotamento embasadas em algumas teorias de otimização matemática. Mais especificamente, este trabalho se propõe a realizar uma Transposição Didática, no sentido proposto por (CHEVALLARD, 1999, p.1 apud ALMOULOUD, 2007, p.111), que pode ser lido em [4]. Chevallard teorizou três diferentes conceitos relativos ao saber: o saber sábio, o saber a ensinar e o saber ensinado.

O saber científico, também conhecido como saber sábio, está vinculado à vida acadêmica desenvolvida nas universidades e espaços correlatos, como as instituições de pesquisa. Este tipo de saber, segundo Oliveira, cuja referência está em [14], é geralmente veiculado em relatórios de pesquisa, dissertações/teses, artigos em periódicos especializados, conferências, além de outros meios semelhantes.

Por apresentar uma linguagem hermeticamente voltada para os elementos teóricos envolvidos, para a análise metodológica sustentada de eventuais dados empíricos e considerações sobre sua validade em um contexto de pesquisa específico, Oliveira ([14]) destaca que o saber sábio não é adequado, em sua forma original, ao processo de ensino-aprendizagem desenvolvido na escola, sendo necessário transformá-lo no saber a ensinar. Portanto, para viabilizar a passagem do saber científico para o saber escolar, torna-se necessário um trabalho didático efetivo a fim

de proceder a uma reformulação, visando a prática educativa.

Em última instância, mas não menos importante que os outros, reside o saber ensinado, definido por Oliveira, como sendo aquele que:

Tem lugar na sala de aula e demais ambientes de ensino-aprendizagem, resultado da atuação do professor em relação aos grupos de alunos com os quais trabalha em suas aulas, no âmbito de um determinado sistema didático. Em termos ideais, este tipo de saber tem por base imediata o saber a ensinar, contido nos programas curriculares, e como referência o saber sábio, mas é permeado pela prática docente e suas especificidades (OLIVEIRA, 2009, p.3).

Nesta perspectiva é preciso destacar que, embora contenham aspectos que os tornam qualitativamente distintos, os saberes sábio, a ensinar e ensinado, coexistem não de forma conflituosa, mas de forma complementar.

Motivados por esta perspectiva educacional e, tendo identificado que a maioria dos textos que tratam de empacotamentos destinam-se ao meio acadêmico, é que nos propomos a fazer esta transposição didática, cuja finalidade é produzir um texto de fácil compreensão, sobre o tema proposto, para alunos de graduação. Dessa forma, esta dissertação de mestrado profissional, busca aliar aspectos relacionados à pesquisa científica com elementos ligados às teorias educacionais. Para tanto, elencamos os seguintes objetivos específicos a serem desenvolvidos: 1) apresentar a base da teoria matemática para otimização irrestrita; 2) apresentar alguns dos principais aspectos da teoria matemática para otimização restrita; 3) apresentar o método de penalidades e uma evolução deste, o método do Lagrangiano Aumentado, que é utilizado no pacote computacional ALGENCAN; 4) Resolver problemas de empacotamento para contêineres simples com o auxílio do ALGENCAN; 5) Resolver problemas de empacotamento para contêineres em que o r -Núcleo não é simples.

Para dar conta do objetivo geral, esta dissertação divide-se em cinco capítulos, além desta introdução e das considerações finais, cada um deles dá conta de um objetivo específico. No capítulo 1, será apresentada a fundamentação teórica para problemas de otimização irrestrita, aquela em que o espaço de busca das soluções é todo o espaço no qual a função objetivo está definida. Tratam-se de conceitos que delimitam o instrumental teórico pertinente às técnicas de otimização e, além disso, embasam também a parte da teoria que trata de problemas de otimização restrita.

No capítulo 2, trataremos mais especificamente dos problemas de otimização restrita, categoria em que se enquadram os de empacotamento. Esses problemas são aqueles em que o espaço de busca das soluções é um subconjunto do espaço em que a função objetiva está definida.

No capítulo 3, continuaremos apresentando conceitos relacionados à otimização restrita, mas agora o foco será em métodos computacionais para encontrar a solução destes problemas. Mais

especificamente, serão abordados os métodos de penalidades e do Lagrangiano Aumentado, este último sendo apresentado como uma evolução do primeiro. A opção por esta abordagem, deve-se ao fato de que ele é o método implementado no ALGENCAN, pacote computacional desenvolvido pelos integrantes do projeto TANGO. Este pacote será utilizado para resolver os problemas de otimização, do qual faremos uso nesta dissertação.

No capítulo 4, resolveremos problemas de empacotamento para alguns contêineres específicos: circular, quadrangular e triangular. Estas formas foram escolhidas por sua simplicidade e por que a resolução de problemas com elas oferece uma base sólida para a resolução de outros mais complexos.

Finalmente, no capítulo 5 estudaremos o problema de empacotamento de círculos em regiões onde o r -Núcleo não é simples, tais como elipses e parábolas e, posteriormente, analisaremos a possibilidade de estender estes resultados para contêineres descritos por equações quárticas. Neste ponto, cumprimos a última etapa do nosso objetivo.

Vale esclarecer que a maior parte dos gráficos e desenhos apresentados neste trabalho foi produzida a partir do software gratuito GeoGebra. Este programa foi desenvolvido por Markus Hohenwarter da Universidade de Salzburg na Áustria e reúne recursos de geometria, álgebra, tabelas, gráficos, probabilidade, estatística e cálculos simbólicos em um único ambiente. O programa Wolfram Mathematica, pertencente a empresa Wolfram Research também foi utilizado.

Capítulo 1

OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

Neste capítulo abordaremos alguns conceitos básicos sobre os problemas de otimização que serão necessários ao desenvolvimento dos demais capítulos deste trabalho. Na seção 1.1, apresentaremos a definição de minimizadores local e global. A seguir, na subseção 1.1.1, enunciaremos as condições necessárias e suficientes para problemas irrestritos. Apresentaremos, também, o Método de Newton para encontrar uma raiz de uma função de uma única variável. Posteriormente, aplicaremos este método para minimizar funções a uma variável real, usando-o em uma função auxiliar, a derivada da função objetivo. Estes tópicos serão descritos nas subseções 1.1.2 e 1.1.3, respectivamente. Na seção 1.2, serão tratados métodos de descida que apresentam ideias importantes em otimização, inclusive para problemas com restrições. Especificamente na subseção 1.2.1, definiremos o que é uma direção de descida. O Método do Gradiente será abordado na subseção 1.2.2. Este é um dos métodos mais antigos e conhecidos para a minimização de funções de n variáveis. Uma possibilidade de escolha do passo usado no Método do Gradiente é obtê-lo de acordo com a regra da minimização unidimensional, conceito tratado na subseção 1.2.3. Por fim, na subseção 1.2.4, será abordado o Método de Newton em sua versão multidimensional.

1.1 Conceitos fundamentais

A teoria da otimização consiste em um conjunto de técnicas com múltiplas aplicações no mundo real. Basicamente, um problema de otimização consiste em maximizar ou minimizar uma função de uma ou várias variáveis, que podem estar sujeitas a restrições na forma de equações ou desigualdades.

Neste texto, abordaremos problemas da forma

$$\text{Minimizar } f(x) \text{ sujeito a } x \in D. \quad (1.1.1)$$

A função $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada de função objetivo. O conjunto D é chamado de

conjunto viável e os pontos a ele pertencentes são chamados de viáveis.

Definição 1.1.1. Dizemos que um ponto $x^* \in D$ é:

(a) minimizador global de (1.1.1), se

$$f(x^*) \leq f(x), \forall x \in D;$$

(b) minimizador local de (1.1.1), se existir um $\varepsilon > 0$ tal que

$$f(x) \geq f(x^*), \forall x \in D \quad \text{e} \quad \|x - x^*\| < \varepsilon.$$

O conjunto $\{x \in D, \|x - x^*\| < \varepsilon\}$ é chamado de uma vizinhança de raio ε de x^* . Se para todo $x \neq x^*$ a desigualdade em (a) ou em (b) for estrita, então x^* é um minimizador estrito (global ou local). O valor $f(x^*)$ é chamado de *valor ótimo*.

Exemplo 1.1.2. Na Figura 1.1, temos o gráfico de uma função f de uma única variável definida no conjunto viável $D = \{x \in \mathbb{R}; -1 \leq x \leq 4\}$. No ponto A temos um minimizador local de f em D e em B um minimizador global.

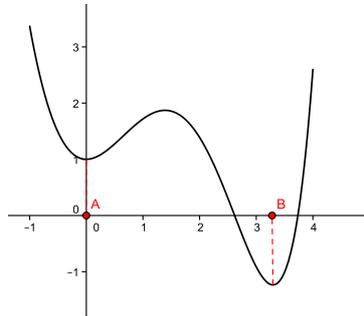


Figura 1.1: Mínimo local e mínimo global.

O fato de f possuir ou não extremos (sejam eles locais ou globais) depende da expressão de f , mas depende também do conjunto viável D . Por exemplo, a função

$$f(x, y) = 2x^2 + y^2$$

possui um único ponto de mínimo global em \mathbb{R}^2 , o ponto $(0, 0)$ e não possui nenhum máximo global em \mathbb{R}^2 . Por outro lado, esta mesma função possui pontos de máximo e mínimo global no conjunto viável

$$D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; x^2 + 2y^2 \leq 4\}.$$

O ponto $(0,0)$ é o minimizador global de f em D e os pontos $p = (2,0)$ e $q = (-2,0)$ são os maximizadores globais de f em D , conforme Figura 1.2. Por fim, no conjunto viável

$$D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; x^2 + 2y^2 = 4\},$$

f possui dois pontos de mínimo global $r = (0, \sqrt{2})$ e $s = (0, -\sqrt{2})$; e dois pontos de máximo global $p = (2,0)$ e $q = (-2,0)$, conforme a Figura 1.3.

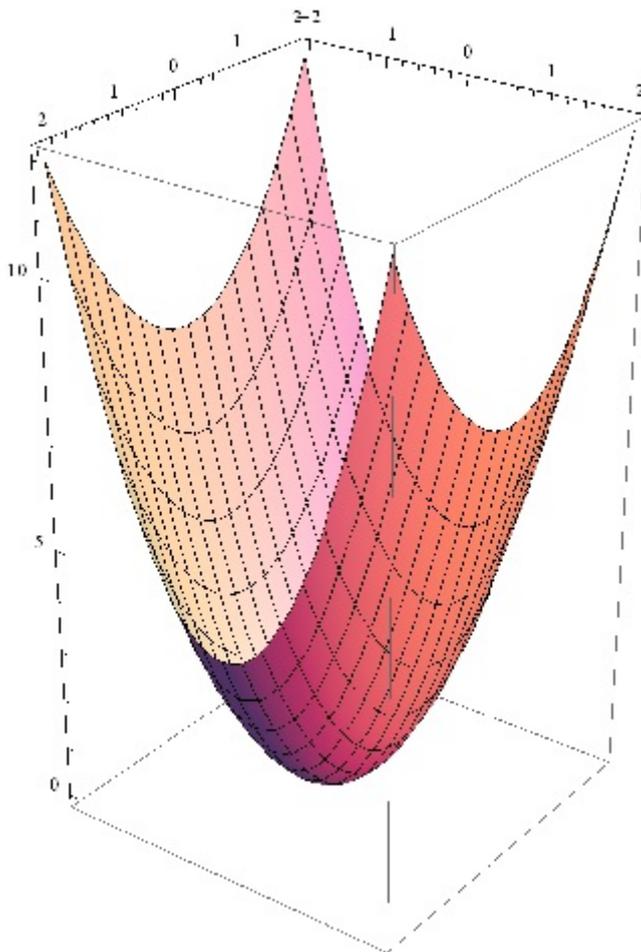


Figura 1.2: Gráfico de $f(x, y) = 2x^2 + y^2$ no conjunto viável $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; x^2 + y^2 \leq 4\}$.

Finalmente, consideremos que uma função pode admitir vários minimizadores globais, porém o valor do mínimo global é sempre o mesmo. Veja, por exemplo, a função $f(x) = \cos(x)$ que possui infinitos minimizadores globais, mas em todos eles o valor mínimo é -1 . Vale, ainda, destacar que maximizar f é equivalente a minimizar $-f$, pois $f(x^*) \geq f(x)$ implica que $-f(x^*) \leq -f(x)$. Compreende-se, portanto, o porquê de podermos trabalhar sempre com problemas da forma (1.1.1).

A fim de construirmos um referencial teórico para o estudo de problemas de otimização com restrições, assunto abordado no capítulo 2, passaremos agora a estudar os problemas de

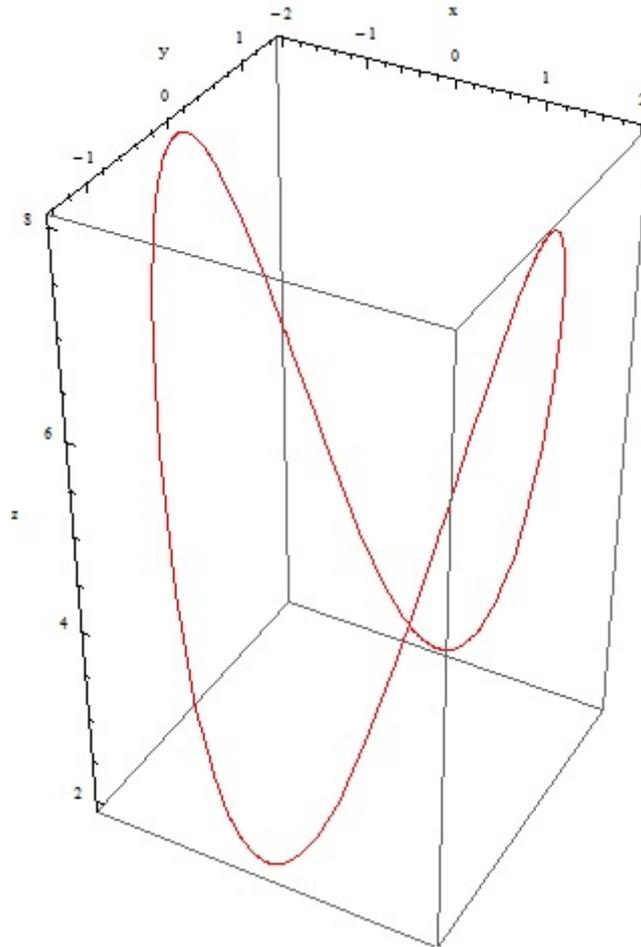


Figura 1.3: Gráfico de $f(x, y) = 2x^2 + y^2$ no conjunto viável $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; x^2 + y^2 = 4\}$.

otimização sem restrições.

1.1.1 Condições de otimalidade sem restrições

Consideremos o problema de minimização irrestrita

$$\text{Minimizar } f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (1.1.2)$$

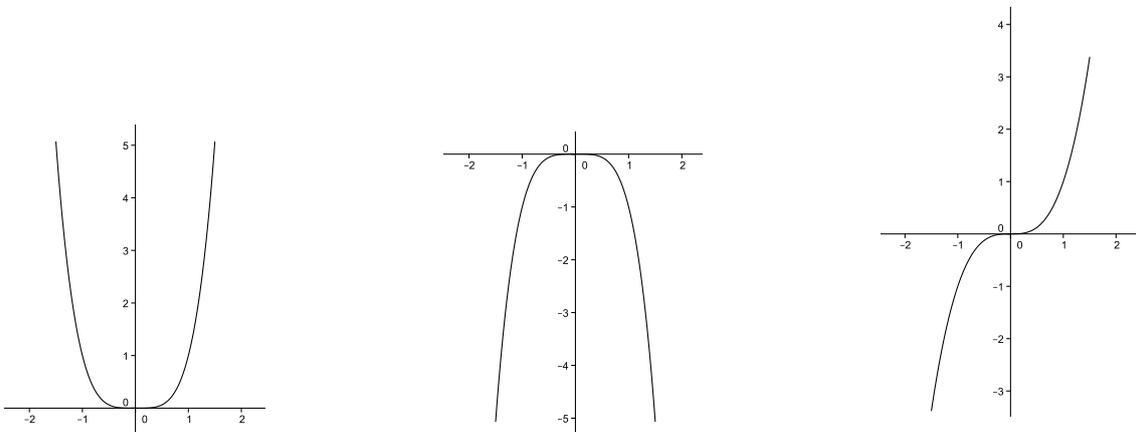
onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função suave, ou seja, possui derivadas de todas as ordens. Esta é uma propriedade importante, pois a suavidade de uma função garante que ela tenha uma certa previsibilidade, uma vez que seus gráficos não possuem "bicos" ou "saltos". Esta propriedade possibilita aos algoritmos realizarem boas escolhas para as direções de busca.

Note que o conjunto viável em (1.1.2) é todo o \mathbb{R}^n . Neste caso, dizemos que o problema (1.1.2) é irrestrito. A seguir, estudaremos as condições nomeadas de *condições necessárias de otimalidade* para que um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ seja um minimizador local do problema (1.1.2). Também estudaremos as condições chamadas de *condições suficientes de otimalidade*, que garantem

que $x^* \in \mathbb{R}^n$ seja minimizador local do mesmo problema.

Para começar, vamos retomar alguns resultados para funções de uma variável. Neste caso, para determinar os pontos candidatos a máximo e mínimo, basta fazer a derivada de f , denotada por $f'(x)$, se anular. Esta é a condição de otimalidade de primeira ordem, pois depende apenas da primeira derivada de f . Seja x^* um ponto em que $f'(x^*) = 0$, as condições de otimalidade de segunda ordem dependem da derivada segunda de f neste ponto, ou seja, dependem de $f''(x^*)$, tal como a seguir

- para $f''(x^*) > 0$ tem-se que x^* é um ponto de mínimo local;
- para $f''(x^*) = 0$ tem-se uma situação inconclusiva. Para entendermos esta afirmação, vamos analisar as funções $f(x) = x^4$, $f(x) = -x^4$ e $f(x) = x^3$, cujos gráficos estão representados na Figura 1.4. No primeiro caso, temos que $x = 0$ é minimizador global de $f(x) = x^4$ e $f''(0) = 0$. No segundo caso, temos que $x = 0$ é maximizador global de $f(x) = -x^4$ e $f''(0) = 0$. Por fim, para a função $f(x) = x^3$, $x = 0$ é ponto de inflexão, não sendo nem maximizador, nem minimizador e $f''(0) = 0$;
- para $f''(x^*) < 0$ tem-se que x^* é um ponto de máximo local.



(a) gráfico de $f(x) = x^4$, $x = 0$ é mínimo global de f e $f''(0) = 0$.

(b) gráfico de $f(x) = -x^4$, $x = 0$ é máximo global de f e $f''(0) = 0$.

(c) gráfico de $f(x) = x^3$, $x = 0$ é ponto de inflexão de f e $f''(0) = 0$.

Figura 1.4: Conclusões a respeito da derivada segunda.

Exemplo 1.1.3. Considere a função $f(x) = x^3 - x^2 - x + 3$, cuja derivada primeira é: $f'(x) = 3x^2 - 2x - 1$. Uma vez que $f'(x)$ existe para todo x , os números críticos de f ocorrem quando

$f'(x) = 0$, isto é, $x = 1$ ou $x = -\frac{1}{3}$. A derivada segunda desta função é dada por $f''(x) = 6x - 2$. Para os pontos críticos, tem-se $f''(1) = 4 > 0$ e $f''(-\frac{1}{3}) = -4 < 0$. Portanto, em conformidade com o parágrafo anterior, $x = 1$ é um minimizador local de f e $x = -\frac{1}{3}$ é um maximizador local. O gráfico exibido na Figura 1.5 ilustra estes pontos.

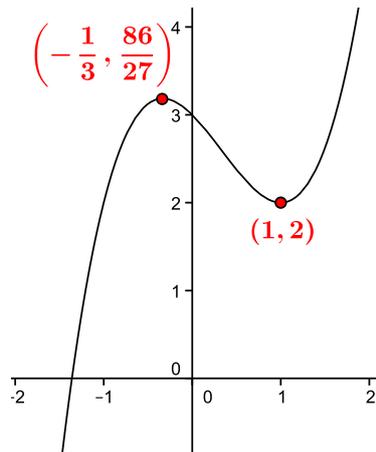


Figura 1.5: Esta função tem valor mínimo local $f(1) = 2$ e máximo local $f(-1/3) = 86/27$.

As condições de otimalidade em um espaço n-dimensional são análogas a estas e estão definidas nos teoremas a seguir.

Teorema 1.1.4. Condição necessária de primeira ordem.

Suponhamos que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja diferenciável no ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$. Se x^* é um minimizador local do problema (1.1.2), então

$$\nabla f(x^*) = 0. \quad (1.1.3)$$

Demonstração. Ver Izmailov e Solodov [9]. □

Definição 1.1.5. Dizemos que um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é estacionário (ou crítico) se $\nabla f(x^*) = 0$.

Note que a condição de primeira ordem faz uso apenas da primeira derivada, enquanto que as condições de segunda ordem, que serão estabelecidas no Teorema 1.1.7, precisam também das segundas derivadas. Neste caso, além do gradiente de f que é dado por

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix},$$

precisamos também da matriz Hessiana,

$$\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Como estamos assumindo f suave, o Teorema de Schwartz (vide [11]) garante que $\nabla^2 f(x)$ é simétrica.

Para o caso unidimensional foi dito que se x^* é um ponto de mínimo local de uma função f , então $f''(x^*) \geq 0$. Caso $f'(x^*) = 0$ e $f''(x^*) > 0$ então x^* é certamente um minimizador local. As condições para funções no \mathbb{R}^n , que serão enunciadas nos próximos parágrafos, também podem ser divididas em duas partes. A primeira é que se $x^* \in \mathbb{R}^n$ é um minimizador de f então a matriz Hessiana, $\nabla^2 f(x^*)$, deve ser semidefinida positiva, esta é a condição necessária. A condição suficiente de segunda ordem, portanto, mais forte do que a condição necessária, pede que $\nabla^2 f(x^*)$ seja definida positiva. Esses conceitos generalizam a ideia de números não negativos e positivos. A próxima definição tem a finalidade de esclarecer o conceito de matriz semidefinida e definida positiva.

Definição 1.1.6.

a) Uma matriz simétrica $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é denominada semidefinida positiva se

$$x^T Q x \geq 0$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$;

b) Q é denominada definida positiva se

$$x^T Q x > 0$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$.

O Teorema 1.1.7 estabelece as condições de segunda ordem.

Teorema 1.1.7. Condições necessárias de segunda ordem.

Suponhamos que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja duas vezes diferenciável em $x^* \in \mathbb{R}^n$. Se x^* é um minimizador local de (1.1.2), então vale a condição de primeira ordem (1.1.3) e a matriz Hessiana de f no ponto x^* é semidefinida positiva.

Demonstração. Ver Izmailov e Solodov [9]. □

Observe que um ponto que satisfaz a tese do Teorema 1.1.7 não é necessariamente um ponto de mínimo local, isto é, estas condições não são suficientes. Veja o exemplo a seguir.

Exemplo 1.1.8. Considere a função $f(x_1, x_2) = x_1^3 \cdot x_2$. Vamos mostrar que as condições dos Teoremas 1.1.4 e 1.1.7 são satisfeitas no ponto $x^* = (0, 0)^T$, mas que x^* não é um ponto de mínimo local.

Calculando o gradiente de f temos que

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 3x_1^2 x_2 \\ x_1^3 \end{pmatrix} \Rightarrow \nabla f(x^*) = 0.$$

Veja que a condição necessária estabelecida pelo Teorema 1.1.4 foi satisfeita. A matriz Hessiana de f é dada por

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 6x_1 x_2 & 3x_1^2 \\ 3x_1^2 & 0 \end{bmatrix}, \text{ logo } \nabla^2 f(x^*) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \geq 0.$$

Dessa forma, a condição necessária de segunda ordem (Teorema 1.1.7) também foi satisfeita, ou seja, a matriz Hessiana é semidefinida positiva (Definição 1.1.6). Consideremos agora uma vizinhança ε (Definição 1.1.1) de x^* estabelecida por

$$V = \{(x_1, x_2)^T \in \mathbb{R}^2 \mid x_1^2 + x_2^2 \leq \varepsilon, 0 < \varepsilon < 1\}.$$

Existe um ponto $\bar{x} \in V$ com $f(\bar{x}) < f(x^*)$. Por exemplo, para $\bar{x} = \left(-\frac{\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2}\right)^T$ temos

$$f(\bar{x}) = \left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)^3 \frac{\varepsilon}{2} = -\frac{\varepsilon^4}{16} < 0 = f(x^*).$$

Assim, x^* não é um minimizador de f .

Neste exemplo, temos um caso em que um ponto estacionário \bar{x} do problema (1.1.2) não é um ponto de mínimo e nem de máximo, pois $f\left(\frac{\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2}\right) = \frac{\varepsilon^4}{16} > 0$. Pontos como estes são chamados de *pontos de sela*, que caracterizam-se por ser mínimo em uma direção e máximo em outra.

O Teorema 1.1.9 apresenta uma condição mais forte do que a estabelecida pelo Teorema 1.1.7. A condição suficiente afirma que se a matriz Hessiana de f é definida positiva em um ponto x^* , então pode-se concluir que este ponto é um minimizador local estrito.

Teorema 1.1.9. Condição suficiente de segunda ordem.

Suponhamos que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja duas vezes diferenciável em $x^* \in \mathbb{R}^n$. Se x^* é um ponto estacionário (isto é, se vale (1.1.3)) e se a matriz Hessiana de f neste ponto é definida positiva, então x^* é um minimizador local estrito de f em \mathbb{R}^n .

Demonstração. Ver Izmailov e Solodov [9]. □

Exemplo 1.1.10. Considere a função $f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_1 x_2 + x_2^2$.

Procuremos os pontos críticos aplicando o Teorema 1.1.4. Calculando $\nabla f(x_1, x_2)$ temos

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 3x_1^2 + x_2 \\ x_1 + 2x_2 \end{pmatrix}. \text{ Portanto, } \nabla f(x_1, x_2) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} x^1 = (0, 0)^T \\ x^2 = \left(\frac{1}{6}, -\frac{1}{12}\right)^T \end{cases} .$$

Para o ponto $x^2 = \left(\frac{1}{6}, -\frac{1}{12}\right)^T$ temos

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 6x_1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \nabla^2 f\left(\frac{1}{6}, -\frac{1}{12}\right) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} .$$

É possível provar que a condição (b) da Definição 1.1.6 é equivalente a dizer que os autovalores de Q são positivos. Para $n = 2$ isso significa que a diagonal principal da matriz Q e seu determinante são maiores que zero. Neste exemplo, temos que $\det(\nabla^2 f(x^2)) = 1 > 0$, portanto, a matriz Hessiana no ponto $\left(\frac{1}{6}, -\frac{1}{12}\right)$ é definida positiva. Deste modo, de acordo com o Teorema 1.1.9, este é um ponto de mínimo local de f .

Vimos, acima, que $\nabla f(x^*) = 0$ é condição necessária para que x^* seja um minimizador. Neste ponto, existe uma questão a ser respondida: é sempre possível, analiticamente, encontrar x^* , tal que $\nabla f(x^*) = 0$? Em outras palavras, é sempre possível encontrar as raízes de uma função analiticamente? A resposta a esta pergunta é não. Veja, por exemplo, a função

$$f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad f(x) = x + \ln(x).$$

Encontrar a raiz desta função não é fácil, mesmo para funções polinomiais, sabemos que não existe fórmula para encontrar raízes quando o grau desta função for maior ou igual a 5. Para casos como este, precisamos de métodos numéricos que nos permitam encontrar uma aproximação para a raiz da função estudada. Alguns métodos existentes na literatura calculam a raiz aproximada de uma função por meio de um processo iterativo, cuja repetição se dá até que a precisão desejada seja obtida.

Veremos, a seguir, um método iterativo para encontrar raízes de funções. Mostraremos, também, com alguns exemplos, como este método pode ser usado para minimizar uma função de uma variável.

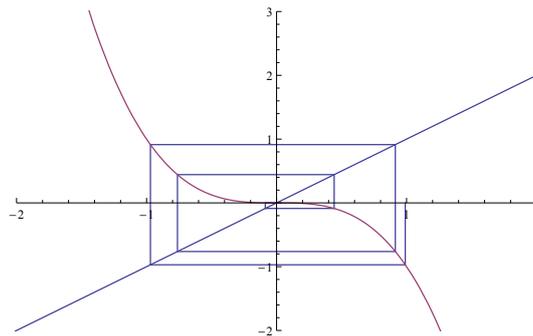
1.1.2 Método de Newton para zeros de funções

Nesta seção estudaremos o Método de Newton para determinar uma raiz x^* de uma função continuamente diferenciável $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Método de Newton

O Método de Newton consiste em um processo iterativo que, a partir de uma aproximação x_0 , constrói uma sequência x_0, x_1, x_2, \dots , de pontos que esperamos que convirja a um número

real x^* que satisfaz $f(x^*) = 0$. Esta sequência de pontos é gerada com o uso de uma função iteradora, $g(x)$. Faremos aqui um breve resumo sobre este processo. Se temos uma função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, inicialmente nos preocupamos apenas em, ao tomar um ponto x_0 do domínio, conhecer sua imagem $g(x_0)$. Porém, $g(x_0)$ também pode ser considerado como um ponto do domínio de g , daí podemos saber quem é a sua imagem $g(g(x_0))$. Continuando este processo saberemos quem são os pontos $x_0, g(x_0), g(g(x_0)), g(g(g(x_0))) \dots$. Este conjunto de pontos é chamado de órbita do ponto x_0 . A Figura 1.6 ilustra a órbita obtida com as iterações partindo de $x_0 = 0.99$, para a função iteradora $g(x) = -x^3$.



(a) gráfico da função iteradora g com iterações a partir de $x_0 = 0.99$.

Figura 1.6: Órbita do ponto $x_0 = 0.99$ para a função iteradora $g(x) = -x^3$.

Em síntese, o processo iterativo consiste em encontrar a imagem de um ponto não apenas uma vez, mas repeti-lo, quantas vezes forem necessárias, usando sempre o último resultado obtido como ponto inicial para o próximo cálculo. Vale dizer que um processo assim definido pode ou não convergir para uma raiz x^* e, que em geral, a convergência depende do ponto x_0 adotado inicialmente. Isto posto, define-se um algoritmo iterativo como sendo *globalmente convergente* se, para um ponto inicial qualquer, a sequência de pontos gerada pelo algoritmo converge para a solução ótima x^* . Se esta relação vale apenas para pontos iniciais escolhidos em uma vizinhança de x^* , então o algoritmo é *localmente convergente*. Veremos, no decorrer desta seção, que o Método de Newton clássico pertence a esta segunda classe de algoritmos. No próximo parágrafo, iniciaremos o desenvolvimento/dedução do método.

Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Vamos supor que $x^* \in \mathbb{R}$ seja uma raiz de f em um determinado intervalo, ou seja, $f(x^*) = 0$. Suponhamos, ainda, que $f'(x)$ seja contínua e não nula no intervalo dado. O Método de Newton estabelece que dada a aproximação x_k para x^* , a nova aproximação x_{k+1} será a raiz da reta tangente à curva no ponto $(x_k, f(x_k))$.

Adotaremos x_0 como sendo nossa aproximação inicial, conforme o gráfico exibido na Figura 1.7.

A equação da reta tangente à curva no ponto $(x_0, f(x_0))$, cuja inclinação é $m = f'(x_0)$, é

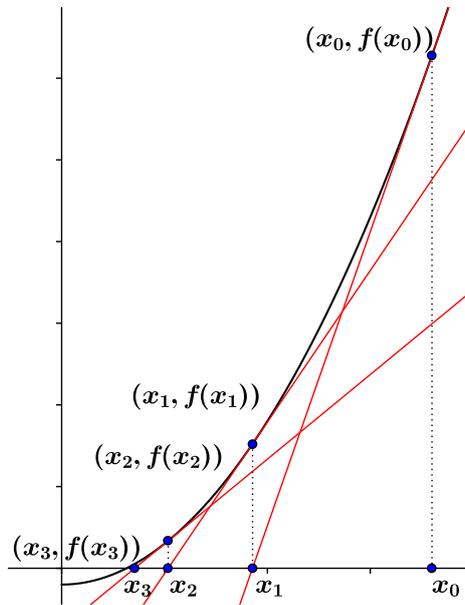


Figura 1.7: As três primeiras iterações do Método de Newton.

dada por

$$r_t(x) = f'(x_0)x + b. \quad (1.1.4)$$

No ponto x_0 temos $f(x_0) = r_t(x_0)$. Logo,

$$f(x_0) = r_t(x_0) = f'(x_0)x_0 + b \Rightarrow b = f(x_0) - f'(x_0)x_0.$$

Substituindo b em (1.1.4) temos

$$r_t(x) = f'(x_0)x + f(x_0) - f'(x_0)x_0 = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0),$$

cuja raiz é dada por

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Repetindo o processo iterativamente, tem-se

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)},$$

\vdots

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (1.1.5)$$

O processo termina quando $|f(x_k)|$ é suficientemente pequeno. Neste ponto, pode surgir a questão: dado $x_0 \in \mathbb{R}$ e $f'(x_0) \neq 0$, a sequência x_k será sempre convergente?

O exemplo a seguir traz a resposta.

Exemplo 1.1.11. Considere a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, definida por $f(x) = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}$, cuja derivada é $f'(x) = \frac{1}{(1+x^2)^{\frac{3}{2}}}$. Temos que se $x^* = 0$ então $f(x^*) = 0$ e $f'(x^*) = 1$. A função iteradora definida em (1.1.5), para este problema será dada por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k}{(1+x_k^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot (1+x_k^2)^{\frac{3}{2}} = -x_k^3.$$

Seja $x_0 = 1$ o ponto inicial. Neste caso,

$$x_1 = -1, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = -1, \quad x_4 = 1, \dots,$$

ou seja,

$$x_k = 1 \quad \text{se } k \text{ for par ou } x_k = -1 \text{ se } k \text{ for impar.}$$

Pode-se, portanto, concluir que, a depender do valor de x_0 adotado, a sequência x_k não é necessariamente convergente. Vamos analisar com um pouco mais de detalhes o que ocorreu no Exemplo 1.1.11, ou seja, vamos tentar entender o porquê das iterações oscilarem entre 1 e -1. Além disso, vamos mostrar que o método é convergente para um ponto x_0 conveniente. Esta observação ratifica o que foi exposto no início desta seção: o Método de Newton é *localmente convergente*. A análise aqui empreendida partirá do conceito de *ponto fixo*.

Muitos problemas em matemática são resolvidos transformando-o em uma equação. Este é, por exemplo, o caso do problema anterior, onde queríamos resolver a equação $f(x) = 0$. Consideremos uma função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. O problema do ponto fixo se traduz na solução da equação $g(x) = x$, para um ponto $x \in \mathbb{R}$.

O Método de Newton é útil para encontrar a raiz de uma função f , ou seja, para resolver a equação $f(x) = 0$. Suponhamos que x , solução da equação proposta, seja o ponto fixo de uma função $g(x)$, ou seja, $x = g(x)$. Neste caso, temos que $x - g(x) = 0$. Destas considerações, podemos intuir que resolver a equação $f(x) = 0$ é o mesmo que resolver a equação $f(x) = x - g(x)$.

Inspirados por (1.1.5) vemos que se $f'(x) \neq 0$, então

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow x = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Definindo a função iteradora $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$, podemos concluir que os pontos fixos de g

serão os zeros de f . O Método de Newton é, portanto, um método do ponto fixo. Vamos agora apresentar algumas definições e teoremas que servirão de apoio à questão aqui proposta: entender o que ocorreu no Exemplo 1.1.11. Começaremos pelo seguinte teorema:

Teorema 1.1.12. Toda função contínua $g : [a, b] \rightarrow [a, b]$ tem um ponto fixo.

Demonstração. Consideremos a função $f(x) = g(x) - x$. temos que

$$f(a) = g(a) - a \geq 0 \text{ e } f(b) = g(b) - b \leq 0$$

e desta forma, pelo Teorema do Valor Intermediário (vide [12]), existe $\alpha \in [a, b]$ satisfazendo

$$f(\alpha) = 0 = g(\alpha) - \alpha.$$

Assim, $g(\alpha) = \alpha$. □

Um ponto fixo pode ser classificado como atrator, repulsor ou neutro. A definição a seguir é útil para o entendimento desta classificação.

Definição 1.1.13. Seja $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Um ponto fixo x^* é chamado hiperbólico quando $|g'(x^*)| \neq 1$. Além disso, dizemos que:

- x^* é atrator, se $|g'(x^*)| < 1$;
- x^* é repulsor, se $|g'(x^*)| > 1$;
- x^* é neutro se $|g'(x^*)| = 1$.

Teorema 1.1.14. Seja f uma função de classe C^1 e x^* um ponto fixo de f . Se $|f'(x^*)| < 1$, então existe uma vizinhança V_δ de x^* , tal que para todo $x \in V_\delta(x^*)$ a sequência de iteradas $f^k(x)$ converge a x^* .

Demonstração. Por hipótese $|f'(x^*)| < 1$. Como f' é contínua, existe $\lambda > 0$ e uma vizinhança $V_\delta(x^*)$, tal que $|f'(x)| < \lambda < 1$ para todo $x \in V_\delta$. Pelo Teorema do Valor Médio existe \tilde{x} entre x e x^* tal que

$$\frac{|f(x) - f(x^*)|}{|x - x^*|} = |f'(\tilde{x})|.$$

Considerando $x \in V_\delta(x^*)$ temos que \tilde{x} também estaria em $V_\delta(x^*)$, logo $|f'(\tilde{x})| < \lambda$. Dessa forma temos que

$$|f(x) - f(x^*)| = |f'(\tilde{x})||x - x^*| < \lambda|x - x^*|.$$

Por ser x^* um ponto fixo, a expressão anterior pode ser escrita como

$$|f(x) - x^*| = |f'(\tilde{x})||x - x^*| < \lambda|x - x^*|.$$

Deste modo, $f(x)$ está mais próximo de x^* do que x e, portanto, ainda em V_δ . Aplicando novamente o Teorema do Valor Médio, teremos

$$\frac{|f(f(x)) - x^*|}{|f(x) - x^*|} = |f'(\tilde{x})|.$$

Multiplicando ambos os lados da equação anterior por $|f(x) - x^*|$ obtém-se,

$$|f^2(x) - x^*| = |f'(\tilde{x})| |f(x) - x^*| < \lambda^2 |x - x^*|.$$

Por indução, concluímos que:

$$|f^k(x) - (x^*)| < \lambda^k |x - x^*|.$$

Como $\lambda < 1$, λ^k tende a zero. Desta forma, temos que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f^k(x) = x^*.$$

□

Observemos o seguinte fato que decorre do Teorema 1.1.14 e da Definição 1.1.13: se a inclinação do gráfico de g no ponto fixo x^* é menor do que 45° , caso em que $|g'(x^*)| < 1$, então as iterações, se iniciadas a partir de um x_0 adequado, convergem para o ponto fixo. Se a inclinação for maior que 45° , ou seja, $|g'(x^*)| > 1$, é possível provar que, localmente, as iterações se afastarão de x^* .

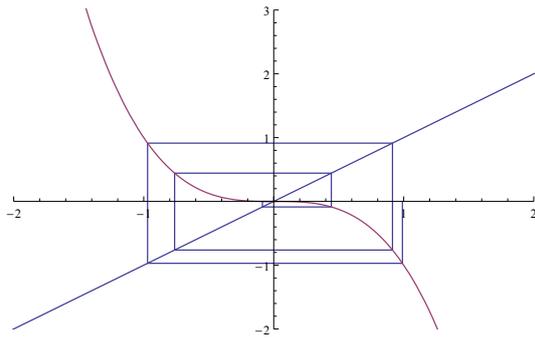
No caso do Exemplo 1.1.11, a função iteradora $g : [-1, 1] \rightarrow [-1, 1]$, definida por $g(x) = -x^3$, é contínua, portanto, em conformidade com o Teorema 1.1.12, g tem ao menos um ponto fixo no intervalo $[-1, 1]$. Vamos recordar que a solução para este problema é $x^* = 0$. Este valor é muito importante, pois $g'(x) = -3x^2$ e $|g'(0)| = 0 < 1$, ou seja, de acordo com a Definição (1.1.13), $x^* = 0$ é um ponto fixo atrator de $g(x)$. Se $x^* = 0$ é um ponto atrator, então existe uma vizinhança V de x^* , tal que para qualquer $x_0 \in V$ a sequência $\{x_k\}$ gerada a partir da função iteradora g convergirá a $x^* = 0$. O gráfico exibido na Figura 1.8(a) mostra que as iterações geradas a partir de $x_0 = 0.99$ convergirão.

Neste exemplo, a função iteradora é $g(x) = -x^3$. Notemos que se $|-x_0^3| > 1$, então a sequência de pontos x_k , irá, em módulo, para infinito. Assim, para que os pontos gerados a partir da função iteradora g convirja, x_0 deve pertencer ao intervalo $(-1, 1)$.

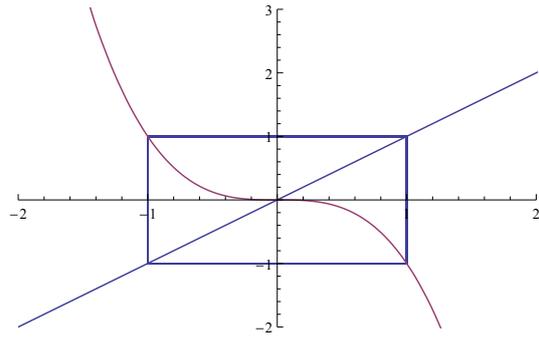
Em seguida, veremos mais um exemplo de aplicação do método.

Exemplo 1.1.15. Vamos encontrar o valor da $\sqrt{10}$ usando o Método de Newton.

Seja $\sqrt{10} = x$, então $x^2 - 10 = 0$, portanto, este problema é o mesmo que encontrar a raiz positiva da função $f(x) = x^2 - 10$. Note que $f'(x) = 2x$ e considere $x_0 = 3$ como ponto inicial.



(a) gráfico da função iteradora g com iterações a partir de $x_0 = 0.99$.



(b) gráfico da função iteradora g com iterações a partir de $x_0 = 1$.

Figura 1.8: O ponto $x^* = 0$ é atrator, portanto a sequência x_k converge quando x_0 é adequado.

Neste caso, temos $f(3) = -1$ e $f'(3) = 6$. A Tabela 1.1 ilustra algumas iterações do método para este exemplo.

Tabela 1.1: Iterações do Método de Newton

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$
0	3,0000000	-1,0000000	6,0000000	3,1666667
1	3,1666667	0,0277778	6,3333333	3,1622807
2	3,1622807	0,0000192	6,3245614	3,1622777
3	3,1622777	0,0000000	6,3245553	3,1622777
4	3,1622777	0,0000000	6,3245553	3,1622777

A iteração de ponto fixo para este problema é dada por

$$x_{k+1} = g(x_k) = x_k - \frac{x_k^2 - 10}{2x_k} = \frac{x_k^2 + 10}{2x_k}.$$

Esta função tem dois pontos fixos, são eles $x = \sqrt{10}$ e $x = -\sqrt{10}$. De acordo com a Definição 1.1.13 ambos são atratores, pois

$$g'(x) = \frac{x^2 - 10}{2x^2} \Rightarrow g'(\sqrt{10}) = g'(-\sqrt{10}) = 0.$$

O gráfico exibido na Figura 1.9 ilustra esta afirmação.

A importância do Método de Newton reside na rapidez com que as aproximações sucessivas convergem (quando convergem) para a raiz x^* da equação $f(x) = 0$. Veremos, a seguir, alguns critérios usados para a determinação da velocidade de convergência de um determinado algoritmo. Para isso, devemos considerar a sequência dos erros

$$r_k = |x_k - x^*|,$$

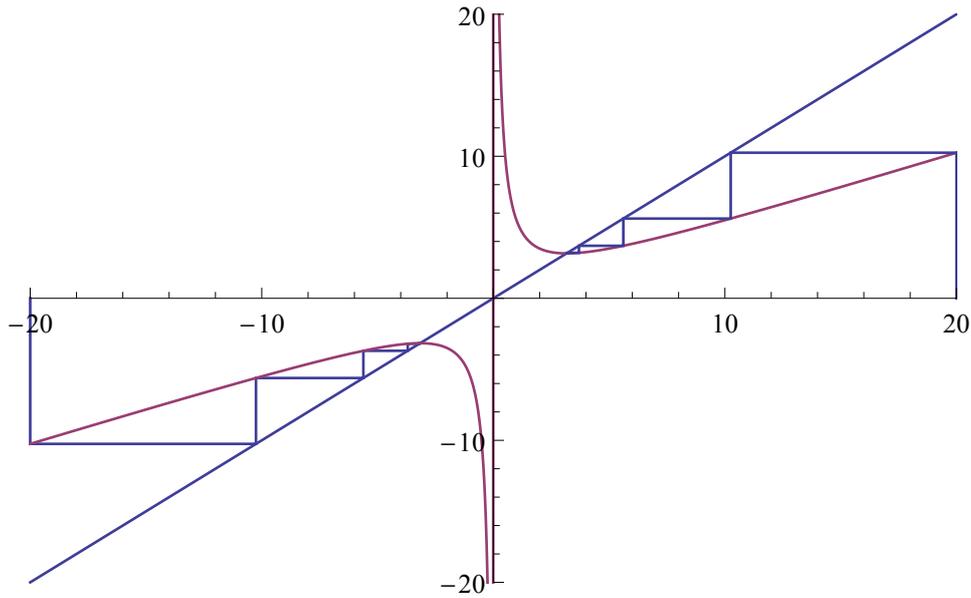


Figura 1.9: $x = \sqrt{10}$ e $x = -\sqrt{10}$ são pontos fixos atratores de $g(x)$.

produzida pelo algoritmo em questão.

Definição 1.1.16. Seja a sequência de erros r_k gerado pelas iterações de um algoritmo. Dizemos que a sequência é linearmente convergente com taxa não superior a β , ($0 < \beta < 1$), se

$$\frac{r_{k+1}}{r_k} \leq \beta$$

ocorrer para k suficientemente grande, isto é, para $k \geq k_0$ (k_0 apropriado). O procedimento denomina-se superlinearmente convergente, se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{r_{k+1}}{r_k} = 0.$$

Se

$$\frac{r_{k+1}}{(r_k)^p} \leq \gamma$$

para $\gamma > 0$, $p > 1$ e k suficientemente grande, dizemos que o procedimento converge com ordem não inferior a p . Em particular, se $p = 2$ ou $p = 3$, dizemos que a convergência é quadrática ou cúbica, respectivamente.

A velocidade de convergência (na iteração k) pode ser definida, entre outras formas, como sendo o número de iterações, q , necessárias para diminuir o erro r_k por, pelo menos, um fator $\frac{1}{10}$. Ou seja, a velocidade de convergência pode ser determinada pelo número q , de modo que

$$\frac{r_{k+q}}{r_k} \leq \frac{1}{10}.$$

Exemplo 1.1.17. Vamos determinar a velocidade de convergência (na iteração k) do erro abaixo referente à sequência r_k , tal que $r_k \leq \frac{8}{10}r_{k-1}$.

Para esta sequência, temos

$$r_{k+q} \leq \left(\frac{8}{10}\right)^q r_k.$$

Para determinar a velocidade de convergência, basta então procurar o menor inteiro q satisfazendo

$$r_{k+q} \leq \frac{1}{10}r_k,$$

isto é,

$$\left(\frac{8}{10}\right)^q \leq \frac{1}{10} \Leftrightarrow q \geq \frac{\ln(\frac{1}{10})}{\ln(\frac{8}{10})} \approx 10,32.$$

Obtemos $q = 11$, assim precisamos de, no máximo, 11 iterações para diminuir o erro r_k por, pelo menos, um fator $\frac{1}{10}$. Isto significa que, se em uma dada iteração k tivermos $r_k = 0,5$, precisaremos de, no máximo, 11 iterações para diminuir este erro para 0,05. Desse modo, $r_{k+11} \leq 0,05$.

Veja que $r_{k+1} \leq \frac{8}{10}r_k$, logo,

$$\frac{r_{k+1}}{r_k} \leq \frac{\frac{8}{10}r_k}{r_k} = \frac{8}{10}.$$

Portanto, o algoritmo que apresenta este erro é linearmente convergente (conforme a Definição 1.1.16).

Os conceitos sobre taxas de convergência de uma sequência são bem estabelecidos na literatura e podem ser encontrados, por exemplo, em [17].

O Teorema 1.1.18 permite estabelecer uma comparação entre os erros r_{k+1} e r_k gerados pelo Método de Newton.

Teorema 1.1.18. Teorema de convergência local.

Seja $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^2 , onde I é um intervalo. Suponhamos que $f'(x) \neq 0, \forall x \in I$ e que exista $x^* \in I$ tal que $f(x^*) = 0$. Então existem $\varepsilon > 0$ tal que $\forall x_0 \in [x^* - \varepsilon, x^* + \varepsilon] \subseteq I$ o método de Newton converge para x^* e a convergência é, pelo menos, quadrática.

Demonstração. A função iteradora no Método de Newton é dada por $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$. Portanto,

$$g'(x) = 1 - \frac{f(x)f''(x) + (f'(x))^2}{(f'(x))^2} = -\frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}.$$

Como $f(x^*) = 0$ e $f'(x^*) \neq 0$, temos que $|g'(x^*)| = 0 < 1$. Portanto, x^* é atrator, e conforme o Teorema 1.1.14 existe uma vizinhança de x^* , tal que para qualquer ponto inicial nesta vizinhança, a sequência convergirá para x^* . Passamos agora a demonstrar a convergência quadrática.

Considere que o método esteja bem definido em x_k . De acordo com o Teorema de Taylor, existe um número c_k entre x^* e x_k , tal que

$$0 = f(x^*) = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f''(c_k)}{2}(x^* - x_k)^2.$$

Então

$$f'(x_k)x_k - f(x_k) - f'(x_k)x^* = \frac{f''(c_k)}{2}(x^* - x_k)^2. \quad (1.1.6)$$

Dividindo os dois lados de (1.1.6) por $f'(x_k)$ obtemos

$$x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} - x^* = \frac{f''(c_k)}{2f'(x_k)}(x_k - x^*)^2,$$

isto é,

$$x_{k+1} - x^* = \frac{f''(c_k)}{2f'(x_k)}(x_k - x^*)^2. \quad (1.1.7)$$

Como f é contínua e $f'(x) \neq 0$, existe B e $\varepsilon > 0$ tal que se $|x - x^*| \leq \varepsilon$, então $|f'(x)| \geq B > 0$. Além disso, pela continuidade de f'' , existe A tal que $|f''(x)| \leq A$, para todo x tal que $|x - x^*| \leq \varepsilon$.

Com isso, temos de (1.1.7) que

$$|x_{k+1} - x^*| \leq \frac{A}{2B}|x_k - x^*|^2. \quad (1.1.8)$$

De (1.1.8) podemos concluir que $\frac{r_{k+1}}{(r_k)^2} \leq c$, isto é, a convergência do Método de Newton é quadrática. \square

Quando $|x_k - x^*| < 1$, $|x_k - x^*|^2$ é muito menor. Mais do que isso, se $|x_k - x^*| < 10^{-p}$, ou seja, se x^k tem p algarismos decimais exatos, então $|x_k - x^*|^2 < 10^{-2p}$, o que significa, que tem $2p$ algarismos corretos. Por esse motivo, intuitivamente, dizemos que no Método de Newton dobramos o número de casas decimais corretas a cada iteração, o que confirma a rapidez de convergência no método em questão.

1.1.3 O método de Newton para minimização unidimensional

Veremos, agora, como aplicar o Método de Newton para minimizar uma função de uma única variável.

Para que um ponto x^* seja minimizador de uma função diferenciável, f , ele deve satisfazer a condição necessária de primeira ordem, $f'(x^*) = 0$ (seção 1.1). Logo, um procedimento para minimizar uma função f é determinar uma raiz para a função f' . Consideremos que f' satisfaça as condições estabelecidas anteriormente, isto é, f é duas vezes continuamente diferenciável e $f''(x) \neq 0$. O procedimento para encontrar x^* , tal que $f'(x^*) = 0$, é análogo a (1.1.5) e é

definido iterativamente por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}. \quad (1.1.9)$$

Conforme explicado na seção anterior, este algoritmo necessita de um ponto de partida próximo da solução, caso contrário poderá divergir. Vejamos, a seguir, um exemplo que pode ser facilmente resolvido de modo direto (veja o Exemplo 1.1.3). Porém, serve aqui para ilustrar o funcionamento do procedimento descrito em (1.1.9).

Exemplo 1.1.19. Vamos resolver o problema apresentado no Exemplo 1.1.3 usando o Método de Newton. Os dados do problema são:

$$f(x) = x^3 - x^2 - x + 3$$

$$f'(x) = 3x^2 - 2x - 1$$

$$f''(x) = 6x - 2.$$

Com estes dados obtém-se

$$x_{k+1} = \frac{3x_k^2 + 1}{6x_k - 2}.$$

A Tabela 1.2 apresenta algumas iterações do método para este exemplo.

Tabela 1.2: Iterações do Método de Newton para Minimização Unidimensional

k	x_k	$f'(x_k)$	$f''(x_k)$	x_{k+1}
0	0,5000000	-1,2500000	1,0000000	1,7500000
1	1,7500000	4,6875000	8,5000000	1,1985294
2	1,1985294	0,9123594	5,1911765	1,0227775
3	1,0227775	0,0926663	4,1366647	1,0003763
4	1,0003763	0,0015054	4,0022575	1,0000001
5	1,0000001	0,0000004	4,0000006	1,0000000

Veja que a sequência x_k gerada pelo Método de Newton convergiu para $x^* = 1$. Neste ponto, temos $f'(1) = 0$ e $f''(1) = 4$, isto é, as condições necessárias e suficientes estabelecidas pelos Teoremas 1.1.4 e 1.1.9 foram atendidas, logo $x^* = 1$ é o minimizador da função.

A função iteradora deste exemplo,

$$g(x) = \frac{3x^2 + 1}{6x - 2},$$

tem dois pontos fixos, são eles: $x = 1$ e $x = -\frac{1}{3}$ (Figura 1.10). O ponto $x = 1$ é um mínimo local de f e $x = -\frac{1}{3}$ é um máximo local. Assim, caso tivéssemos adotado x_0 em uma certa vizinhança de $x = -\frac{1}{3}$, as iterações convergiriam para o máximo local.

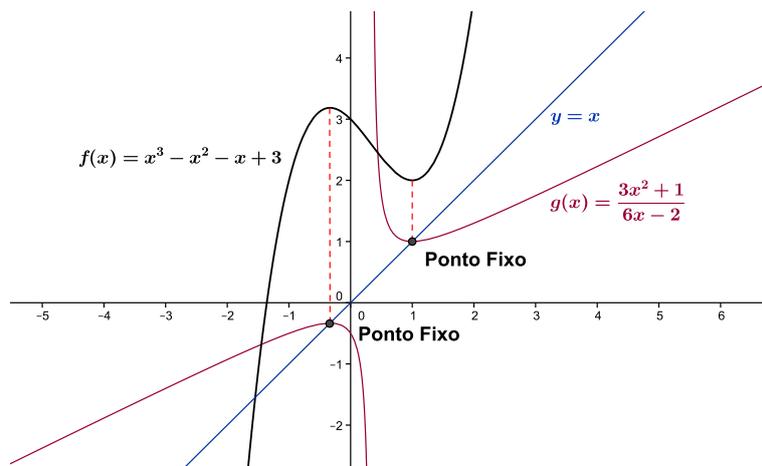


Figura 1.10: Pontos fixos da função iteradora $g(x)$, representada na cor rocha. A função f , a ser minimizada, está na cor preta.

Acabamos de tratar do Método de Newton para minimizar funções de uma única variável. Vimos que se não tomarmos cuidado, é possível (e provável, dependendo do ponto inicial) que o método convirja a um ponto de máximo. Uma maneira de evitar isso é modificar o Método de Newton, quando necessário, para garantir que o passo dado esteja para o lado que f decresce. Para funções de múltiplas variáveis, que são mais comuns nos problemas de otimização, é necessário considerar outros métodos como os de descida. Entre eles, veremos o Método do Gradiente e uma adaptação do Método de Newton para várias variáveis.

1.2 Métodos de descida

Nesta seção, definiremos o que é método de descida. Em seguida, apresentaremos uma estratégia para encontrar uma direção de descida e, posteriormente, abordaremos dois métodos de descida específicos, o do Gradiente e o de Newton. Nesta categoria de métodos, o do Gradiente foi um dos primeiros a ser formulado e, vem servindo como inspiração para o desenvolvimento de outros mais eficientes, como o de Newton.

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Uma estratégia usual para resolver o problema irrestrito

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

consiste em, a partir de uma aproximação $x_k \in \mathbb{R}^n$ para a solução do problema, encontrar uma nova aproximação $x_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ de tal modo que

$$f(x_{k+1}) < f(x_k).$$

Uma maneira de implementar esta estratégia é tomar uma direção d_k , chamada de *direção de descida*, de forma que f seja localmente decrescente a partir do ponto x_k . Andar na direção de descida não é um procedimento bem definido, por isso há ainda a exigência de se calcular o comprimento do passo, α_k , que se possa garantir que

$$f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k).$$

Deste modo, $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

Esse processo é repetido até a obtenção da aproximação desejada. Métodos com esta característica são chamados de *métodos de descida*. O ponto chave, portanto, deste tipo de método é encontrar uma direção de descida, tema sobre o qual discorreremos na subseção seguinte.

1.2.1 Direções de descida

Nesta subseção, iremos definir uma estratégia para encontrar uma direção de descida, ou seja, aquela em que, a partir de um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, é possível chegar a um ponto x_{k+1} , tal que

$$f(x_{k+1}) < f(x_k).$$

A definição formal de direção de descida está exposta a seguir.

Definição 1.2.1. Dizemos que $d \in \mathbb{R}^n$ é uma direção de descida da função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ se existe $\varepsilon > 0$ tal que

$$f(x + \alpha d) < f(x) \quad \forall \alpha \in (0, \varepsilon].$$

O conjunto de todas as direções de descida da função f no ponto x é denotado por $D_f(x)$. A Proposição 1.2.2 estabelecerá as condições necessárias e suficientes para que uma determinada direção d seja de descida.

Proposição 1.2.2. Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável no ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Então

- (a) para todo $d \in D_f(x)$, tem-se $\langle \nabla f(x), d \rangle \leq 0$;
- (b) se $d \in \mathbb{R}^n$ satisfaz $\langle \nabla f(x), d \rangle < 0$, tem-se que $d \in D_f(x)$.

Demonstração. Ver Izmailov e Solodov [10]. □

Esta proposição estabelece que dado $d \in \mathbb{R}^n$, se a derivada direcional, dada por $\nabla^T f(x) \cdot d$, for negativa, então certamente podemos encontrar nessa direção, pontos em que o valor da função seja estritamente menor que $f(x)$. Observemos que para qualquer inteiro $n \geq 2$, dados dois vetores $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, \mathbf{x} e \mathbf{y} não nulos, o cosseno do ângulo θ formado por estes vetores é dado por

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|}.$$

Note que se $\mathbf{x}^T \mathbf{y} < 0$, então $\theta > 90^\circ$, ou seja, pelo exposto na Proposição 1.2.2, temos que uma direção d é de descida se o ângulo entre d e $\nabla f(x)$ for maior que 90° . A Figura 1.11 ilustra a Proposição 1.2.2.

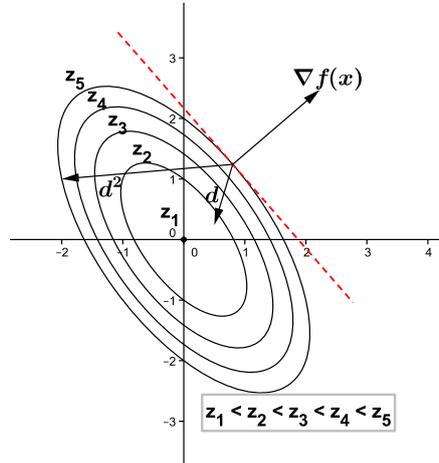


Figura 1.11: Ilustração da Proposição 1.2.2, onde direções (possivelmente pequenas) que fazem ângulo maior que 90° apontam para curvas de nível de f com valores menores. Observe que se a direção é grande, como d^2 , podemos ter que $f(x + d^2) > f(x)$. Entretanto, para valores pequenos de α , vale que $f(x + \alpha d^2) < f(x)$.

O próximo teorema estabelece que o vetor gradiente ∇f é ortogonal às curvas de nível de f . Nele, porém, falaremos sobre planos tangentes, que para as funções diferenciáveis de duas ou mais variáveis, representam uma generalização do que a reta tangente representa para as funções de uma única variável. Este plano é definido por todos os vetores tangentes às curvas diferenciáveis em um ponto p sobre S . Esta generalização é importante, pois a usaremos no capítulo 2.

Teorema 1.2.3. Suponhamos que a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ seja diferenciável e que $S = \{f(x_1, \dots, x_n) = k_1\}$ seja uma superfície de nível de f . Então

$$\nabla f(p) \text{ é ortogonal ao plano tangente de } S, \quad \forall p \in S.$$

Demonstração. Seja $p \in S$, vamos mostrar que $\nabla f(p)$ é ortogonal ao vetor tangente de qualquer curva diferenciável sobre S passando por p . Consideremos a curva $r(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ sobre S passando por p . Assim, $f(r(t)) = f(x_1(t), \dots, x_n(t)) = k_1$ e:

$$\frac{df}{dt}(r(t)) = \frac{\partial f}{\partial x_1}(r(t)) \cdot \frac{dx_1}{dt}(t) + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(r(t)) \cdot \frac{dx_n}{dt}(t) = \frac{d}{dt}(k_1).$$

Note que

$$\frac{df}{dt}(r(t)) = \left\langle \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(r(t)), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(r(t)) \right), \left(\frac{dx_1}{dt}(t), \dots, \frac{dx_n}{dt}(t) \right) \right\rangle = \frac{d}{dt}(k_1).$$

Calculando em $r(t_0) = p$ temos

$$\frac{df}{dt}(p) = \left\langle \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(p), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(p) \right), \left(\frac{dx_1}{dt}(t_0), \dots, \frac{dx_n}{dt}(t_0) \right) \right\rangle = 0.$$

$$\therefore \nabla f(p) \perp r'(t_0).$$

□

Na Figura 1.12, é exibido o gráfico de uma curva de nível e de um vetor $r'(t_0)$, que é tangente a essa curva de nível. Se o gradiente é perpendicular a $r'(t_0)$, então ele será perpendicular à curva de nível no ponto $p = r(t_0)$, conforme demonstrado no Teorema 1.2.3.

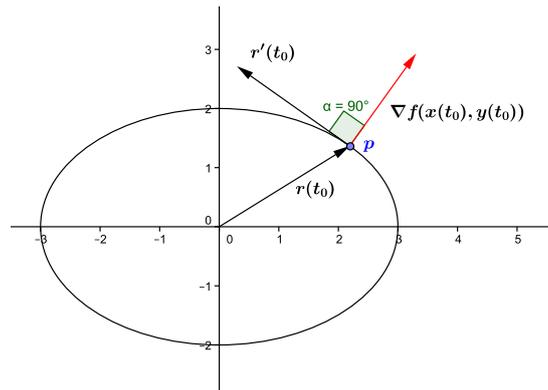


Figura 1.12: Ilustração do Teorema 1.2.3 para o caso particular em que $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ é um elipse.

Exemplo 1.2.4. Seja $f(x_1, x_2) = 4x_1 + 6x_2 - 2x_1^2 - 2x_1x_2 - 2x_2^2$.

Vamos encontrar uma direção de descida a partir do ponto $x_0 = (1, 1)^T$. Para tanto, consideremos o vetor gradiente de f dado por

$$\nabla f(x) = (4 - 4x_1 - 2x_2, 6 - 2x_1 - 4x_2)^T \Rightarrow \nabla f(x_0) = (-2, 0)^T.$$

Para $d = (1, 0)^T$ temos

$$\langle \nabla f(x_0), d \rangle = (-2, 0) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -2 < 0,$$

logo, de acordo com a Proposição 1.2.2, d é uma direção de descida.

Neste exemplo, vamos considerar $\alpha_0 = 0,5$. Assim,

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = (1, 1)^T + 0.5(1, 0)^T = (1.5, 1)^T.$$

Comparando os resultados, temos $f(x_0) = 4$ e $f(x_1) = 2.5$. Note que $f(x_1) < f(x_0)$, conforme previsto. Sempre que adotarmos α "pequeno" e tomarmos uma direção d a partir de um ponto x_k de tal forma que $\langle \nabla f(x_k), d \rangle < 0$, teremos $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.

A seguir, faremos a descrição de um dos métodos de descida conhecido como *Método do Gradiente*. A proposta deste método é reduzir o valor de f tomando como direção de descida o antigradiente de f .

1.2.2 Método do Gradiente

O Método do Gradiente é um método pertencente ao conjunto dos métodos de descida, é bastante conhecido e, devido a sua simplicidade, é frequentemente aplicado para a minimização de funções de n variáveis. A desvantagem do método está na sua velocidade de convergência, pois converge lentamente. No entanto, muitos dos métodos com melhores condições de convergência são resultantes de modificações no Método do Gradiente.

Este método é assim denominado, pois a direção de descida d_k é escolhida como sendo o antigradiente da função no ponto x_k , ou seja,

$$d_k = -\nabla f(x_k) \neq 0.$$

A razão pela escolha da direção de descida como oposta ao gradiente é intuitiva, basta imaginar que se o gradiente aponta para a direção de maior crescimento de f , então a direção de maior decréscimo é a oposta à do gradiente. Além disso, de acordo com a Proposição 1.2.2 tem-se que d é uma direção de descida se $\langle \nabla f(x), d \rangle < 0$. Consideremos então $d = -\nabla f(x)$. Neste caso temos que $\langle \nabla f(x), -\nabla f(x) \rangle = -\|\nabla f(x)\|^2 < 0$, se $\nabla f(x) \neq 0$. Com esta observação, conclui-se que $-\nabla f(x)$ é uma direção de descida, se x não é estacionário.

Se $\nabla f(x_k) = 0$, para algum k , então x_k é um ponto estacionário da função objetivo e o processo cessa.

A seguir, apresentaremos o algoritmo associado ao Método do Gradiente extraído de [8].

Algoritmo 1.1 Método do Gradiente

Se $x_k \in \mathbb{R}^n$ é tal que $\nabla f(x_k) \neq 0$, os passos para determinar x_{k+1} são:

1. Calcular $d_k = -\nabla f(x_k)$;
 2. Determinar o passo α_k , tal que $f(x_k + \alpha d_k) < f(x_k)$;
 3. Fazer $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.
-

Em seguida, um exemplo do funcionamento do Algoritmo 1.2.2.

Exemplo 1.2.5. Neste exemplo, resolveremos o problema de $\min f(x) = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - 6x_2 + 14$. Para tanto, consideremos os seguintes dados:

$$\nabla f(x) = (2x_1 - 2, 2x_2 - 6)^T, \quad x_0 = (-3, 6)^T \quad e \quad \alpha_k = 0,3.$$

O mínimo desta função ocorre no ponto $(1, 3)^T$ e $f(1, 3) = 4$, isto é, $(1, 3)^T$ é um minimizador desta função.

A Tabela 1.3 fornece algumas iterações obtidas com o Método do Gradiente. Observe que a cada iteração o valor de f , conforme o esperado, vai diminuindo e que a sequência x_k converge para $(1, 3)$. Este ponto satisfaz as condições necessárias e suficientes de otimalidade.

Tabela 1.3: Método do Gradiente com passo $\alpha = 0,3$

x^T	$-\nabla^T f(x)$	$f(x)$
(-3,00000000 ; 6,00000000)	(8,00000000 ; -6,00000000)	29,00000000
(-0,60000000 ; 4,20000000)	(3,20000000 ; -2,40000000)	8,00000000
(0,36000000 ; 3,48000000)	(1,28000000 ; -0,96000000)	4,64000000
(0,74400000 ; 3,19200000)	(0,51200000 ; -0,38400000)	4,10240000
(0,89760000 ; 3,07680000)	(0,20480000 ; -0,15360000)	4,01638400
(0,95904000 ; 3,03072000)	(0,08192000 ; -0,06144000)	4,00262144
(0,98361600 ; 3,01228800)	(0,03276800 ; -0,02457600)	4,00041943
(0,99344600 ; 3,00491500)	(0,01310720 ; -0,00983040)	4,000067109
(0,99737900 ; 3,00196600)	(0,00524288 ; -0,00393216)	4,000010737
(0,99895100 ; 3,00078600)	(0,002097152 ; -0,001572864)	4,000001718

A Figura 1.13 mostra as curvas de nível da função, bem como os pontos obtidos a partir de cada iteração na direção do vetor gradiente.

No Exemplo 1.2.5 adotamos $\alpha = 0,3$ em todas as iterações. No entanto, a sequência $\{x_k\}$ tem comportamento diferente caso adotemos outro valor para α . Como exemplo, para $\alpha = 0,5$ teremos $x_1 = (-3 + 0,5 \cdot 8, 6 + 0,5 \cdot (-6))^T = (1, 3)^T$ e, neste caso, o método converge em uma única iteração. Este é, portanto, o melhor passo a ser adotado. Na próxima subseção

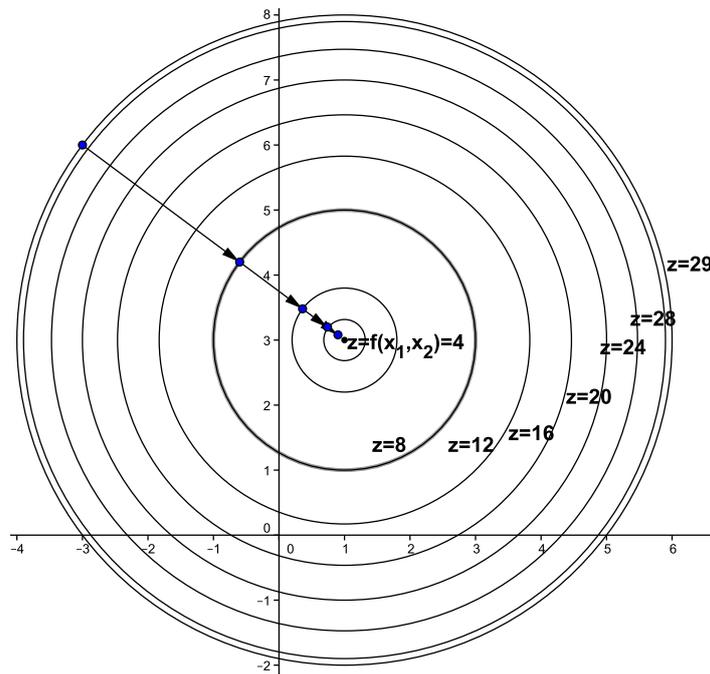


Figura 1.13: Curvas de nível da função f e as primeiras iterações referentes ao Método do Gradiente. Como o gradiente é ortogonal à curva de nível e as curvas deste exemplo são círculos, então os gradientes apontam para o centro. Os dados são referentes ao Exemplo 1.2.5.

explicaremos como calculá-lo. Uma situação interessante ocorre quando $\alpha = 1$. Neste caso, as iterações do método não diminuem o valor da função objetivo (Tabela 1.4).

Tabela 1.4: Método do Gradiente com passo $\alpha = 1$

x^T	$-\nabla^T f(x)$	$f(x)$
(-3 , 6)	(8 ,-6)	29
(5 , 0)	(-8 , 6)	29
(-3 , 6)	(8 ,-6)	29
(5 , 0)	(-8 , 6)	29
(-3 , 6)	(8 ,-6)	29
(5 , 0)	(-8 , 6)	29
(-3 , 6)	(8 ,-6)	29

Os pontos gerados pelas iterações (Tabela 1.4) estão sempre na mesma curva de nível: para cada ponto x_k desta sequência temos $f(x_k) = 29$. A função $f(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - 6x_2 + 14 = 4 + (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 3)^2$ tem como curvas de nível circunferências. Quando $f(x) = 29$, a curva de nível é uma circunferência de raio 5, ou seja, diâmetro 10. Note que $\|-\nabla f(x)\| = \sqrt{8^2 + 6^2} = 10$. Além disso, o vetor ∇f é perpendicular à circunferência neste ponto. Neste caso, se o passo

for 1, ou seja, se o módulo do deslocamento for igual ao comprimento do Gradiente, o novo ponto estará em cima da mesma curva de nível e, assim, a sequência não convergirá.

Embora não seja o objetivo deste texto uma descrição detalhada para as possíveis escolhas do passo α a ser dado nos métodos de descida, faremos uma abordagem preliminar do assunto. Esta abordagem terá o objetivo apenas de mostrar ao leitor que existem métodos para esta escolha. Além disso, a determinação do passo α , por si só, já constitui um tema de pesquisa.

1.2.3 Regra da minimização unidimensional

O comprimento do passo pode ser calculado observando o comportamento da função objetivo ao longo da semirreta a partir de x_k na direção d_k . Para isso, a estratégia é minimizar a função objetivo na semirreta $x_k + \alpha d_k$, $\alpha \geq 0$. Sendo assim, o comprimento do passo α_k é dado pela condição

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k), \quad \alpha \geq 0.$$

Isto equivale a determinar α_k que é a solução do problema

$$\min \varphi_k(\alpha), \quad \alpha \in \mathbb{R}_+,$$

onde

$$\varphi_k : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad \varphi_k(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k).$$

Como (α_k) é o mínimo de φ_k , então, pela condição de otimalidade (Teorema 1.1.4), temos que

$$0 = \varphi'_k(\alpha_k) = \langle \nabla f(x_k + \alpha_k d_k), d_k \rangle = \langle \nabla f(x_{k+1}), d_k \rangle. \quad (1.2.1)$$

Portanto, para encontrarmos α_k , podemos solucionar a igualdade $\langle \nabla f(x_{k+1}), d_k \rangle = 0$, ou minimizar φ usando algum procedimento conhecido.

O Algoritmo 1.2.3 descreve o funcionamento do Método do Gradiente com minimização unidimensional

Algoritmo 1.2 Método do Gradiente com Minimização Unidimensional

1. Escolha $x_0 \in \mathbb{R}^n$ e faça $k = 0$;
 2. Calcule $d_k = -\nabla f(x_k)$;
 3. Se $d_k = 0$ (ou $|d_k| \leq \varepsilon$), pare. Caso contrário, continue com o passo (4);
 4. Determine uma solução α_k do problema $\min f(x_k + \alpha d_k)$;
 5. Faça $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, $k = k + 1$ e continue com o passo 2.
-

Os dois exemplos a seguir ilustram este procedimento.

Exemplo 1.2.6. Vejamos como este método se aplica ao problema anterior. Para facilitar a compreensão repetiremos os dados do problema.

Sejam

$$f(x) = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - 6x_2 + 14,$$

$$\nabla f(x) = (2x_1 - 2, 2x_2 - 6)^T \text{ e } x_0 = (-3, 6)^T.$$

Vamos resolver esse problema usando a regra da minimização unidimensional para determinarmos os passos α_k .

Iteração 1

$$\nabla f(x_0) = (-8, 6)^T \Rightarrow -\nabla f(x_0) = (8, -6)^T.$$

Para calcular o passo α_0 devemos minimizar a função

$$\varphi_0(\alpha) = f(x_0 + \alpha d_0) = f(-3 + 8\alpha, 6 - 6\alpha) = 100\alpha^2 - 100\alpha + 29.$$

O minimizador de $\varphi_0(\alpha)$ é $\alpha_0 = \frac{1}{2}$. O próximo ponto x_1 é obtido considerando

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = (-3, 6)^T + 0,5(8, -6)^T = (-3 + 0,5 \cdot 8, 6 + 0,5 \cdot (-6))^T = (1, 3)^T.$$

Como $\nabla f(x_1) = (0, 0)^T$ temos que x_1 já é estacionário e, por isso, o método para. Portanto, para nosso exemplo, o ponto de mínimo é dado por $x_1 = (1, 3)^T$. Veja que quando comparamos este procedimento com o anterior, (quando adotamos $\alpha = 0,3$), percebemos que ele é muito mais eficiente, pois converge para a solução ótima mais rapidamente.

Para resolver o Exemplo 1.2.6, foi aplicado o Método do Gradiente com minimização unidimensional para a determinação do passo. O método assim formulado denomina-se *método de máxima descida*. Uma propriedade importante deste método é a igualdade

$$\langle \nabla f(x_{k+1}), \nabla f(x_k) \rangle = 0$$

que segue de (1.2.1). Isso significa que as direções utilizadas nas iterações subsequentes, $d_k = -\nabla f(x_k)$ e $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1})$, são ortogonais, por isso o método faz uma trajetória do tipo "zig-zag". O próximo exemplo ilustra o "zig-zag" característico deste método.

Exemplo 1.2.7. Vamos aplicar este método para minimizar a função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = 3x^2 + 2y^2 + 3xy - 4$.

O gradiente de f é dado por

$$\nabla f(x, y) = (6x + 3y, 4y + 3x)^T.$$

Iteração 1 Realizaremos a primeira iteração para resolver o problema a partir do ponto $x_0 = (5, -1)^T$. Como

$$\nabla f(x_0) = (27, 11)^T \Rightarrow d_0 = -\nabla f(x_0) = (-27, -11)^T.$$

Temos agora de minimizar a função unidimensional em α

$$\begin{aligned} \varphi_0(\alpha) &= f(x_0 + \alpha d_0) = f(5 - 27\alpha, -1 - 11\alpha) = \\ &= 3(5 - 27\alpha)^2 + 2(-1 - 11\alpha)^2 + 3(5 - 27\alpha)(-1 - 11\alpha) - 4 = 3320 \alpha^2 - 850 \alpha + 58. \end{aligned}$$

O valor mínimo de $\varphi_0(\alpha)$ é obtido com $\alpha_0 = \frac{85}{664}$. Então,

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = (5, -1)^T + \frac{85}{664}(-27, -11)^T = \left(5 - 27 \cdot \frac{85}{664}, -1 - 11 \cdot \frac{85}{664}\right)^T = \left(\frac{1025}{664}, -\frac{1599}{664}\right)^T.$$

Iteração 2

$$\nabla f(x_1) = \left(\frac{1353}{664}, -\frac{3321}{664}\right)^T \Rightarrow d_1 = -\nabla f(x_1) = \left(-\frac{1353}{664}, \frac{3321}{664}\right)^T.$$

Para calcular o passo α_1 devemos minimizar a função

$$\begin{aligned} \varphi_1(\alpha) &= f(x_1 + \alpha d_1) = f\left(\frac{1025}{664} - \frac{1353}{664}\alpha, -\frac{1599}{664} + \frac{3321}{664}\alpha\right) = \\ &= 3\left(\frac{1025}{664} - \frac{1353}{664}\alpha\right)^2 + 2\left(-\frac{1599}{664} + \frac{3321}{664}\alpha\right)^2 + 3\left(\frac{1025}{664} - \frac{1353}{664}\alpha\right)\left(-\frac{1599}{664} + \frac{3321}{664}\alpha\right) - 4 \\ &= \frac{7034985 \alpha^2 - 6429825 \alpha + 792484}{220448}. \end{aligned}$$

O minimizador é $\alpha_1 = \frac{85}{186}$. Então,

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1 = \left(\frac{1025}{664}, -\frac{1599}{664}\right)^T + \frac{85}{186} \left(-\frac{1353}{664}, \frac{3321}{664}\right)^T = \left(\frac{25215}{41168}, -\frac{5043}{41168}\right)^T.$$

A sequência dos pontos x_k é ilustrada na Figura 1.14, que mostra as curvas de nível da função f .

Nesta seção e nas subseções, abordamos os métodos de descida, definimos o que é uma direção de descida e explicitamos o Método Gradiente. Na próxima seção, apresentaremos uma generalização do Método de Newton para minimização, já mostrado para funções de uma única variável na subseção 1.1.3, agora com a finalidade de tratar de funções de múltiplas variáveis. Se a matriz Hessiana $\nabla^2 f(x_k)$ for definida positiva para todo k , então o Método de Newton também será um método de descida com direção de descida dada por $d_k = -(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$.

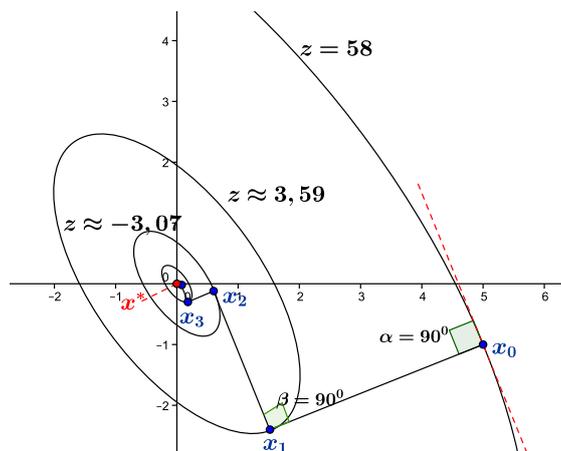


Figura 1.14: Curvas de nível da função f e as primeiras iterações referentes ao método de máxima descida. Duas direções consecutivas de busca, d_k e d_{k+1} , são ortogonais.

1.2.4 Método de Newton para minimizar funções de múltiplas variáveis

O Método de Newton também constitui uma técnica de otimização que é mais eficiente do que o Método de Gradiente, uma vez que apresenta maior velocidade de convergência, por isso a importância de explicitarmos seu funcionamento neste ponto do trabalho.

Consideremos novamente o problema de otimização irrestrita

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (1.2.2)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função duas vezes diferenciável no \mathbb{R}^n . Os pontos críticos deste problema são encontrados fazendo $\nabla f(x) = 0$, onde

$$\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \quad \text{e} \quad \phi(x) = \nabla f(x).$$

Portanto, podemos encontrar os pontos estacionários de f aplicando à equação $\phi(x) = 0$ o Método de Newton para encontrar zeros de sistemas não lineares, cujo caso particular foi explicitado na seção 1.1.2 para $n = 1$. Pelo que vimos, dada uma aproximação $x_k \in \mathbb{R}$ de um ponto estacionário x^* de f , a aproximação x_{k+1} é a solução da equação

$$f'(x_k) + f''(x_k)(x - x_k) = 0,$$

em relação a $x \in \mathbb{R}$.

Como agora estamos tratando de uma função $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ o método é usado para calcular

o zero do Gradiente da função, $\nabla f(x) = 0$, resolvendo a equação

$$\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x - x_k) = 0, \quad (1.2.3)$$

onde $\nabla^2 f(x)$ é a matriz Hessiana de f . Assumindo que $\nabla^2 f(x)$ é invertível, obtemos a fórmula de recorrência

$$x_{k+1} = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k). \quad (1.2.4)$$

Observe que a direção d_k é dada por

$$d_k = -(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k).$$

No cálculo de d , a matriz Hessiana não é invertida explicitamente. Em vez disso, resolve-se o sistema

$$(\nabla^2 f(x_k))d_k = -\nabla f(x_k). \quad (1.2.5)$$

Perto de um ponto x_k , podemos aproximar f pela expansão de Taylor

$$f(x) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T \cdot (\nabla^2 f(x_k))(x - x_k). \quad (1.2.6)$$

Veja que a equação de Newton (1.2.3) caracteriza os pontos estacionários de $f(x)$ em (1.2.6), que é uma função quadrática. Verifica-se, portanto, que o Método de Newton aproxima a função f a ser minimizada por uma quadrática. Então, se f for quadrática, a aproximação será exata e o método convergirá num só passo.

A seguir, apresentamos o algoritmo associado ao Método de Newton para minimização multidimensional extraído de [8].

Algoritmo 1.3 Método de Newton para minimização multidimensional

Se x_k é tal que $\nabla f(x_k) \neq 0$, os passos para determinar x_{k+1} são:

1. Determinar d_k tal que

$$\nabla^2 f(x_k)d_k = -\nabla f(x_k);$$

2. Fazer $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, onde α_k é o passo que garante que $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$.
-

Exemplo 1.2.8. Vamos aplicar este método para resolver o mesmo problema do Exemplo 1.2.7, ou seja, para minimizar a função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = 3x^2 + 2y^2 + 3xy - 4$. A resolução do mesmo problema é útil, pois permite uma comparação entre os métodos.

A função f deste problema é quadrática, logo o procedimento convergirá em um único passo.

Os dados do problema são

$$\nabla f(x, y) = (6x + 3y, 4y + 3x)^T \text{ e } \nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} 6 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}.$$

Para $x_0 = (2, 4)$ temos que

$$\nabla f \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 24 \\ 22 \end{pmatrix}.$$

Usando a fórmula de recorrência

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k,$$

com $\alpha_k = 1$ temos

$$x_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{4}{15} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{1}{5} & \frac{2}{5} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 24 \\ 22 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Observe que as condições necessárias e suficientes de otimalidade são atendidas para este ponto.

Mostraremos, agora, que a convergência em uma única iteração ocorrerá, neste exemplo, para qualquer que seja o valor inicial x_0 adotado, uma vez que f é quadrática. Para isso consideremos $x_0 = (x, y)^T$. Da fórmula de recorrência (1.2.4) temos

$$x_1 = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{4}{15} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{1}{5} & \frac{2}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6x + 3y \\ 4y + 3x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

A Tabela 1.5 apresenta algumas iterações da resolução deste problema pelo Método do Gradiente com o passo $\alpha = 0,1$, possibilitando uma comparação entre este e o Método de Newton.

Tabela 1.5: Método do Gradiente com passo $\alpha = 0,1$

k	x_k^T	$-\nabla^T f(x_k)$
1	(2,00000 ; 4,00000)	(-24,0000 ; -22,0000)
2	(-0,40000 ; 1,80000)	(-3,00000 ; -6,00000)
3	(-0,70000 ; 1,20000)	(0,60000 ; -2,70000)
4	(-0,64000 ; 0,93000)	(1,05000 ; -1,80000)
5	(-0,53500 ; 0,75000)	(0,96000 ; -1,39500)
6	(-0,43900 ; 0,61050)	(0,80250 ; -1,12500)
7	(-0,35875 ; 0,49800)	(0,65850 ; -0,91575)

Note que a sequência de pontos $\{x_k\}$ está convergindo para $(0, 0)^T$, porém a convergência é lenta. Observe que no Exemplo 1.2.6 foi usado o *método de máxima descida* para resolver este mesmo problema e, ainda assim, pode-se constatar que o Método de Newton é mais vantajoso, no sentido de possuir maior velocidade de convergência.

Assim como em uma variável, o método simples da forma que apresentamos não distingue minimizadores de maximizadores. Uma maneira de garantir que a direção de Newton seja realmente de descida é impor que a aproximação quadrática de f seja convexa. Isso acontece se $\nabla^2 f(x_k)$ for definida positiva. Mais geralmente, dada qualquer matriz $\nabla^2 f$, definida positiva, temos que se d é tal que $(\nabla^2 f)d = -\nabla f$, então d é de descida. Isso acontece porque, como os autovalores de $\nabla^2 f$ são positivos, os autovalores de $(\nabla^2 f)^{-1}$ também são, já que são o inverso dos de $\nabla^2 f$. Com isso $(\nabla^2 f)^{-1} > 0$ e, como $d = -(\nabla^2 f)^{-1}\nabla f$, temos que

$$\langle \nabla f, d \rangle = -\nabla^T f (\nabla^2 f)^{-1} \nabla f < 0.$$

Com essa observação, é possível modificar o Método de Newton para que ele sempre gere direções de descida. Isso é feito, simplesmente, substituindo $\nabla^2 f(x_k)$ em (1.2.5) por uma matriz definida positiva, caso $\nabla^2 f(x_k)$ não seja.

Neste capítulo, apresentamos alguns conceitos de otimização para problemas sem restrições. No próximo capítulo trataremos de conceitos associados a problemas de otimização com restrições.

Capítulo 2

OTIMIZAÇÃO NÃO LINEAR COM RESTRIÇÕES

No capítulo anterior, foram tratados os problemas de otimização sem restrições. Vimos alguns algoritmos que produzem uma sequência de pontos que em geral converge para um ponto estacionário da função objetivo. Encontrar um ponto de mínimo global neste contexto pode não ser uma tarefa fácil, uma vez que uma função pode admitir vários pontos estacionários. Neste capítulo trabalharemos com problemas restritos, que se caracterizam por limitarem a região em que a solução ótima deve ser procurada, sujeitando assim a função objetivo a um conjunto de restrições. Este texto não tem a pretensão de esgotar o assunto, que é amplo e complexo, mas pretendemos tratar parte da teoria matemática relacionada a otimização com restrições. Este capítulo está dividido da forma como descrita a seguir: Na seção 2.1, será abordado problemas com restrições lineares de igualdade. A seguir, nas subseções 2.1.1 e 2.1.2, enunciaremos as condições de primeira e segunda ordem, respectivamente, para este tipo de problema. Na seção 2.2, serão tratados problemas com restrições não-lineares de igualdade, sendo que, nas subseções 2.2.1 e 2.2.2 apresentaremos as condições necessárias de primeira e segunda ordem, respectivamente, para estes problemas.

Para introduzir o assunto de otimização com restrições, consideremos o exemplo a seguir.

Exemplo 2.0.9. Considere o seguinte problema:

$$\min(x_1 - 1)^2 + (x_2 - 3)^2, \quad \text{sujeito a } (x_1 + 2)^2 + (x_2 - 3)^2 - 4 = 0.$$

A região viável para este problema é o círculo de raio 2 e centro $(-2, 3)$. Observe que o interior deste círculo não é viável. Já a função objetivo mede o quadrado da distância do ponto (x_1, x_2) ao ponto $(1, 3)$. Portanto, a solução ótima é $x^* = (0, 3)^T$, conforme a Figura 2.1.

Na seção 2.2 trataremos mais detalhadamente da teoria para resolver este problema.

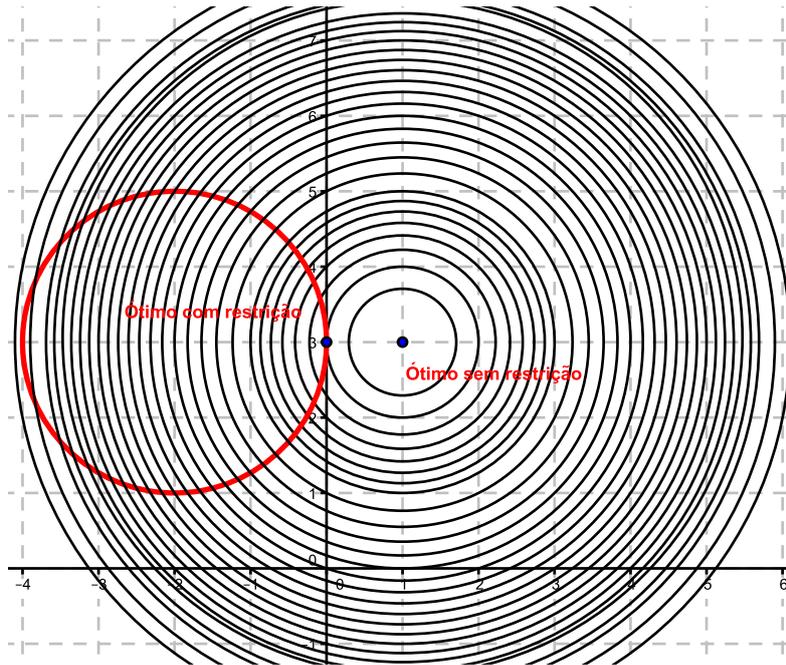


Figura 2.1: Curvas de nível e região viável do Exemplo 1.1.

2.1 Problemas com restrições lineares de igualdade

Nesta primeira seção, estudaremos o problema de otimização com restrições lineares de igualdade, ou seja, o problema de interesse é

$$\min f(x) \quad \text{sujeito a} \quad Ax = b, \quad (2.1.1)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é suave, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $1 \leq m < n$, posto de $A = m$ e $b \in \mathbb{R}^m$.

A estratégia adotada será a de transformar o problema (2.1.1) em um problema de minimização irrestrita com $n - m$ variáveis. Isto possibilitará o uso de técnicas para problemas irrestritos, como as estudadas no capítulo anterior. É importante observar que o posto de A deve ser máximo, caso contrário, ou o problema é inviável ou algumas das restrições são redundantes e podem ser omitidas sem afetar a solução do problema.

Se x^* é o minimizador de (2.1.1), então tem-se que $Ax^* = b$, ou seja, x^* pertence ao conjunto das soluções de $Ax = b$ que, conforme veremos nos próximos parágrafos, é paralelo ao conjunto das soluções de $Ax = 0$, este último chamado de núcleo de A , conforme será apresentado na Definição 2.1.1. Este fato é importante, pois como veremos nesta seção, partindo de uma solução particular \tilde{x} de $Ax = b$, o núcleo de A fornece um conjunto de direções que podem ser seguidas para obter-se outra solução de $Ax = b$. Obtém-se assim, portanto, um "caminho" a ser seguido para encontrar x^* .

Definição 2.1.1. O **espaço nulo** de uma matriz, também conhecido como núcleo, consiste de todos os vetores x que verifiquem $Ax = 0$. Ele é denotado por $N(A)$ e é um subespaço do \mathbb{R}^n .

Definição 2.1.2. O **espaço linha** de uma matriz A , denotado por $Im(A^T)$ é o subespaço de \mathbb{R}^n gerado pelos vetores-linha de A .

Exemplo 2.1.3. Encontrar o núcleo e o espaço linha de $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \end{pmatrix}$.

Seja $x = (x_1, x_2)^T$. De acordo com a Definição 2.1.1 o núcleo de A pode ser encontrado resolvendo a equação $Ax = 0$, que neste caso específico é dada por

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

A solução geral deste sistema é

$$x = t(-2, 1)^T, t \in \mathbb{R}.$$

Assim, $N(A) = \{x \in \mathbb{R}^2; x = t(-2, 1)^T, t \in \mathbb{R}\}$.

Pela Definição (2.1.2) sabemos que $Im(A^T)$ é gerado pelos vetores linhas de A , assim

$$Im(A^T) = \{x \in \mathbb{R}^2; x = t(1, 2)^T, t \in \mathbb{R}\}.$$

O próximo teorema relaciona o $N(A)$ e $Im(A^T)$.

Teorema 2.1.4. O espaço linha é ortogonal ao espaço nulo em \mathbb{R}^n .

Demonstração. Ver Anton e Busby [5]. □

Os conjuntos $N(A)$ e $Im(A^T)$ são ortogonais, conforme ilustrado na Figura 2.2.

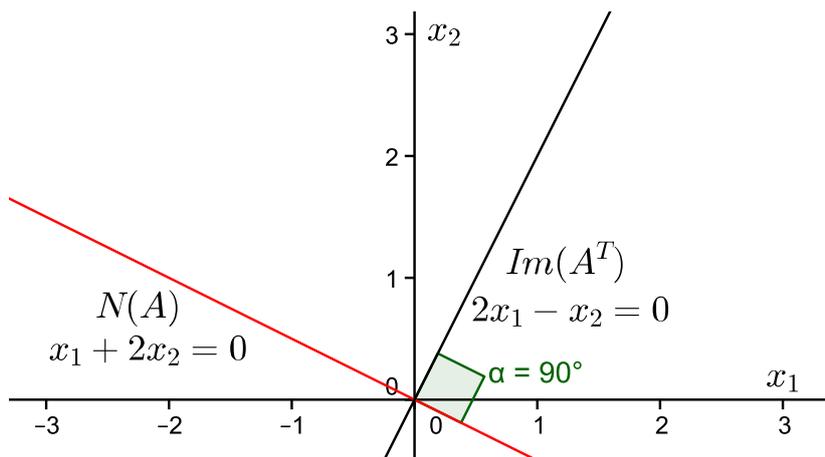


Figura 2.2: O Núcleo de A é ortogonal à $Im(A^T)$.

Os espaços ortogonais $N(A) = \{x \in \mathbb{R}^n; Ax = 0\}$ e $Im(A^T) = \{A^T y; y \in \mathbb{R}^m\}$ cujas dimensões são $n - m$ e m , respectivamente, satisfazem

$$N(A) + Im(A^T) = \mathbb{R}^n, \quad N(A) \cap Im(A^T) = 0. \quad (2.1.2)$$

Seja S o conjunto factível do problema (2.1.1). Pelos pressupostos da Álgebra Linear sabemos que o conjunto $S = \{x \in \mathbb{R}^n; Ax = b\}$ pode ser escrito como

$$S = \{\tilde{x} + \bar{x}; \bar{x} \in N(A)\}, \quad (2.1.3)$$

em que \tilde{x} é uma solução particular de $Ax = b$ e \bar{x} é tal que $A\bar{x} = 0$ (ver definição (2.1.1)). Isso é verdade, pois $A(\tilde{x} + \bar{x}) = A\tilde{x} + A\bar{x} = b + 0 = b$. Geometricamente, (2.1.3) significa que $N(A)$ é paralelo a S e passa pela origem. A Figura 2.3 ilustra a restrição $Ax = b$ (quando esta é uma reta) e o $N(A)$.

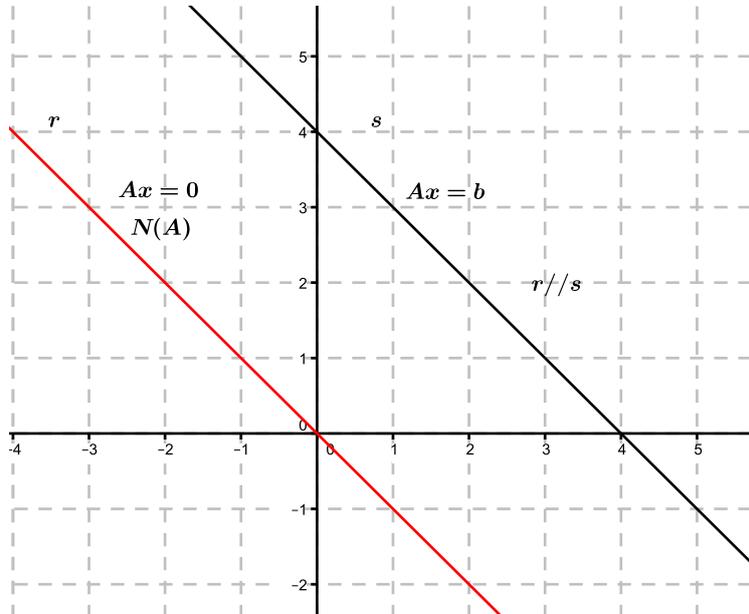


Figura 2.3: O conjunto de soluções de $Ax = b$ é paralelo a $Ax = 0$.

Se $d \in N(A)$ e \tilde{x} é um ponto viável de (2.1.1), então, de acordo com (2.1.3), $x = \tilde{x} + \alpha d$ também é factível para (2.1.1), pois $Ax = A(\tilde{x} + \alpha d) = A\tilde{x} + \alpha Ad = b + 0 = b$. Dito de outra forma, qualquer $d \in N(A)$ é uma direção no espaço que pode ser seguida, a partir de uma solução viável, sem que haja o risco de sair da região factível. Dessa forma, $N(A)$ é o conjunto de direções factíveis em S .

Se $Z \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$ é uma matriz cujas colunas representam uma base de $N(A)$, então para todo $d \in N(A)$ existe um $\gamma \in \mathbb{R}^{n-m}$ tal que $d = Z\gamma$. Se \tilde{x} é um ponto viável de (2.1.1), então

o conjunto S pode ser redefinido como

$$S = \{\tilde{x} + Z\gamma; \gamma \in \mathbb{R}^{n-m}\}. \quad (2.1.4)$$

Exemplo 2.1.5. Encontrar o conjunto das soluções factíveis para a restrição $x_1 + 2x_2 = 4$.

Neste caso, a matriz A é a mesma do Exemplo 2.1.3, ou seja, $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \end{pmatrix}$ e $\tilde{x} = (0, 2)^T$ é uma solução particular. Uma base para $N(A)$, conforme o Exemplo 2.1.3, é dada por $Z = (-2, 1)^T$. Portanto, de acordo com (2.1.4) as soluções dadas por

$$x = (0, 2)^T + (-2, 1)^T \gamma, \quad \gamma \in \mathbb{R}$$

são factíveis. Assim, se partirmos do ponto $(0, 2)^T$ e andarmos na direção do vetor $(-2, 1)^T$ teremos novas soluções factíveis. A Figura 2.4 ilustra algumas destas soluções.

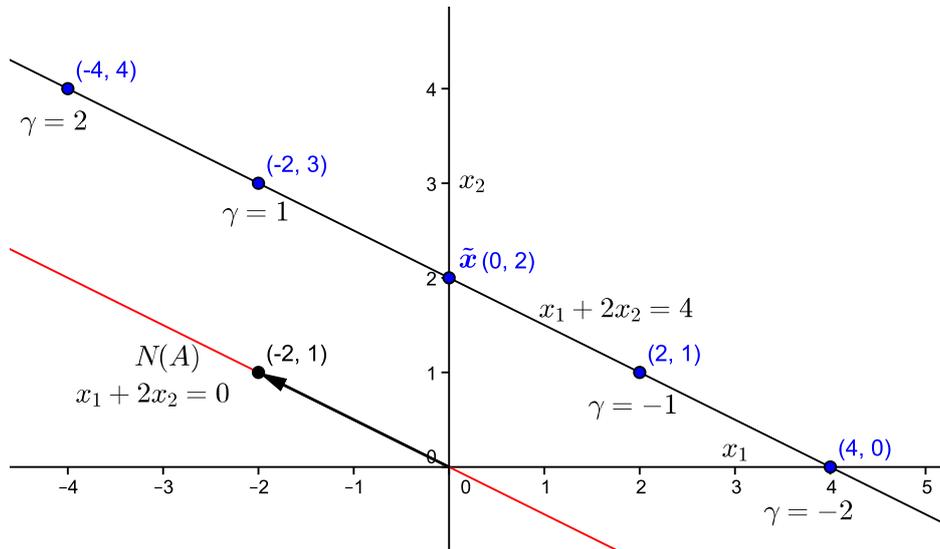


Figura 2.4: Soluções obtidas caminhando a partir da solução particular $\tilde{x} = (0, 2)^T$ na direção do vetor $(-2, 1)^T \in N(A)$.

Exemplo 2.1.6. Encontrar o conjunto das soluções factíveis para as restrições lineares

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Neste caso,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

e $\tilde{x} = (2, 0, 0)^T$ é uma solução particular. Para achar uma base Z para o $N(A)$ devemos resolver o sistema homogêneo

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ -x_1 + x_2 - x_3 = 0 \end{cases}.$$

A solução geral deste sistema é

$$x_g = t(-1, 0, 1)^T, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Portanto, concluímos que $Z = (-1, 0, 1)^T$ é uma base de $N(A)$. Assim, as soluções da forma

$$x = (2, 0, 0)^T + \gamma(-1, 0, 1)^T, \quad \gamma \in \mathbb{R}$$

são factíveis. Se partirmos do ponto $(2, 0, 0)^T$ e andarmos na direção do vetor $(-1, 0, 1)^T$ teremos novas soluções factíveis. A Figura 2.5 ilustra algumas destas soluções.

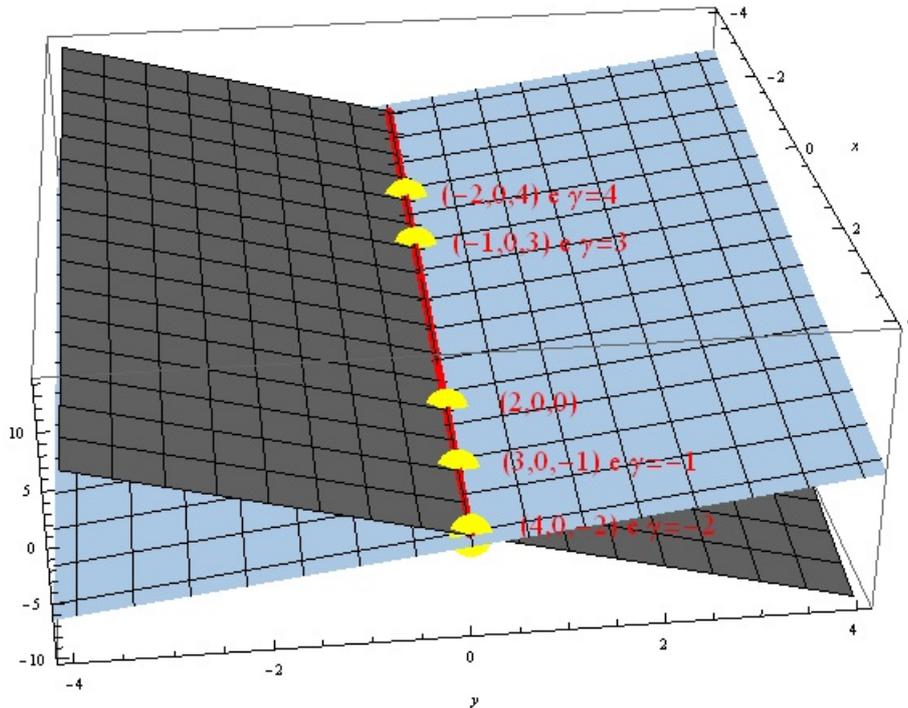


Figura 2.5: Soluções obtidas caminhando a partir da solução particular $\tilde{x} = (2, 0, 0)^T$ na direção do vetor $(-1, 0, 1)^T \in N(A)$. O plano azul representa a restrição $x_1 + 2x_2 + x_3 = 2$ e o plano cinza representa a restrição $-x_1 + x_2 - x_3 = -2$. A linha vermelha representa a região viável que é a interseção entre os dois planos. Os pontos amarelos são as soluções obtidas para os valores de γ indicados na figura.

Como toda solução factível é dada por $x = \tilde{x} + Z\gamma$, então o minimizador x^* de f no conjunto viável será também o minimizador da função $\varphi : \mathbb{R}^{n-m} \rightarrow \mathbb{R}$, dada por

$$\varphi(\gamma) = f(\tilde{x} + Z\gamma). \quad (2.1.5)$$

Podemos agora considerar o problema irrestrito:

$$\min_{\gamma \in \mathbb{R}^{n-m}} \varphi(\gamma). \quad (2.1.6)$$

Este, por sua vez, é equivalente a (2.1.1) e pode ser resolvido com os métodos da minimização irrestrita estudados no capítulo anterior. O exemplo a seguir ilustra o procedimento discutido nesta seção.

Exemplo 2.1.7. Considere o seguinte problema

$$\min f(x) = x_1^2 + x_2 - 2x_3$$

sujeito a

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 2 \\ -x_1 + x_2 - x_3 = -2 \end{cases}. \quad (2.1.7)$$

O conjunto viável é o mesmo do Exemplo 2.1.6, logo já sabemos que a base de $N(A)$ é dada por

$$Z = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Para definirmos $\varphi(\gamma)$ conforme (2.1.5), adotaremos a solução particular de (2.1.7), dada por

$$\tilde{x} = (2, 0, 0)^T.$$

Obtemos, assim, a partir de \tilde{x} e da relação definida em (2.1.4), a seguinte parametrização para o conjunto viável.

$$S = \{(2 - \gamma, 0, \gamma), \gamma \in \mathbb{R}\}. \quad (2.1.8)$$

O problema irrestrito definido em (2.1.6) para este caso particular é

$$\varphi(\gamma) = f(\tilde{x} + Z\gamma) = (2 - \gamma)^2 - 2\gamma.$$

Para a função $\varphi(\gamma)$ temos

$$\varphi'(\gamma) = -2(2 - \gamma) - 2.$$

Das condições necessárias de primeira ordem (Teorema 1.1.4) tem-se

$$\varphi'(\gamma) = 0 \text{ o que é equivalente a } -2(2 - \gamma) - 2 = 0,$$

cujas soluções são $\gamma = 3$. Substituindo este valor em (2.1.8), obtemos o seguinte candidato a minimizador do problema original:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Para condensar todas as etapas discutidas nesta seção em um único problema, resolveremos o exemplo a seguir.

Exemplo 2.1.8. Considere o seguinte problema

$$\min f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

sujeito a

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5 \end{cases}. \quad (2.1.9)$$

A fim de encontrar uma base Z para $N(A)$, resolveremos o sistema a seguir

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + 3x_3 = 0 \\ 2x_1 + 3x_2 - x_3 = 0 \end{cases}. \quad (2.1.10)$$

A solução geral de (2.1.10) é

$$x_g = t \left(-\frac{8}{5}, \frac{7}{5}, 1 \right)^T, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Portanto, concluímos que $Z = \begin{pmatrix} -\frac{8}{5} \\ \frac{7}{5} \\ 1 \end{pmatrix}$ é uma base de $N(A)$.

Para definirmos $\varphi(\gamma)$ conforme (2.1.5), adotaremos solução particular de (2.1.9), dada por

$$\tilde{x} = \left(\frac{8}{5}, \frac{3}{5}, 0 \right)^T.$$

Obtemos, assim, a partir de \tilde{x} e da relação definida em (2.1.4), a seguinte parametrização

para o conjunto viável.

$$S = \left\{ \frac{8}{5} - \frac{8}{5}\gamma, \frac{3}{5} + \frac{7}{5}\gamma, \gamma \right\}, \quad \gamma \in \mathbb{R}. \quad (2.1.11)$$

Isso nos leva ao problema unidimensional

$$\varphi(\gamma) = f(\tilde{x} + Z\gamma) = 2 \left(\frac{8}{5} - \frac{8}{5}\gamma \right)^2 + \left(\frac{3}{5} + \frac{7}{5}\gamma \right)^2 + \gamma^2.$$

Para a função $\varphi(\gamma)$ temos

$$\varphi'(\gamma) = -4 \left(\frac{8}{5} - \frac{8}{5}\gamma \right) \left(\frac{8}{5} \right) + 2 \left(\frac{3}{5} + \frac{7}{5}\gamma \right) \left(\frac{7}{5} \right) + 2\gamma.$$

Das condições necessárias de primeira ordem (Teorema 1.1.4) tem-se

$$\varphi'(\gamma) = 0 \text{ o que é equivalente a } -4 \left(\frac{8}{5} - \frac{8}{5}\gamma \right) \left(\frac{8}{5} \right) + 2 \left(\frac{3}{5} + \frac{7}{5}\gamma \right) \left(\frac{7}{5} \right) + 2\gamma = 0,$$

cuja a solução é $\gamma = \frac{107}{202}$. Substituindo este valor em (2.1.11), obtemos o seguinte candidato a minimizador do problema original:

$$x = \frac{1}{202} \begin{pmatrix} 152 \\ 271 \\ 107 \end{pmatrix}.$$

Após estudarmos as condições necessárias e suficientes de otimalidade (subseções 2.1.1 e 2.1.2), veremos que o ponto x encontrado é de fato a solução do problema.

2.1.1 Condições necessárias de primeira ordem

Nesta subseção apresentaremos as condições de otimalidade que permitem classificar um ponto como estacionário de um problema.

Pela equivalência dos problemas (2.1.1) e (2.1.6) vistos na seção 2.1, vale a seguinte proposição.

Proposição 2.1.9. O vetor γ^* é um minimizador local (global) de φ em \mathbb{R}^{n-m} se, e somente se, $x^* = \tilde{x} + Z\gamma^*$ é um minimizador local (global) de (2.1.1).

A seguir, formularemos as condições de otimalidade e apresentaremos um método computacional para resolver o problema (2.1.1).

Temos que $\varphi(\gamma) = f(g(\gamma))$, onde $g(\gamma) = \tilde{x} + Z\gamma$. Aplicando a regra da cadeia, obtemos

$$J_\varphi(\gamma) = J_f(g(\gamma))J_g(\gamma) = \nabla^T f(g(\gamma))Z,$$

sendo $J_f(x)$ a matriz jacobiana de f em x . Portanto,

$$\nabla\varphi(\gamma) = Z^T \nabla f(\tilde{x} + Z\gamma) = Z^T \nabla f(g(\gamma)). \quad (2.1.12)$$

A condição necessária de primeira ordem para (2.1.6) é

$$\nabla\varphi(\gamma^*) = 0. \quad (2.1.13)$$

De (2.1.12) e (2.1.13) deduz-se que

$$\nabla\varphi(\gamma^*) = Z^T \nabla f(\tilde{x} + Z\gamma^*) = Z^T \nabla f(x^*) = 0.$$

Logo, a condição necessária, de primeira ordem, para que x^* seja um minimizador local de (2.1.1) é

$$Z^T \nabla f(x^*) = 0. \quad (2.1.14)$$

Desta condição conclui-se que $z^i \perp \nabla f(x^*)$, onde z^i é a i -ésima coluna da matriz Z . Ou seja, $\nabla f(x^*)$ é ortogonal a uma base de $N(A)$. Portanto, pelo Teorema 2.1.4, temos que $\nabla f(x^*) \in \text{Im}(A^T)$. Isto significa que (2.1.14) é equivalente a dizer que existe $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla f(x^*) = A^T \lambda^*. \quad (2.1.15)$$

No sentido geométrico, as condições anteriores estabelecem que o gradiente da função objetivo é uma combinação linear das linhas de A . A Figura 2.6 ilustra as ideias contidas neste último parágrafo para o caso de uma única restrição.

O vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ denomina-se *vetor de multiplicadores de Lagrange*. Em síntese, se x^* é um minimizador local de 2.1.1, então existe um $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que (x^*, λ^*) é solução do seguinte sistema de equações, chamado de condições *KKT*:

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) = A^T \lambda^* \\ Ax^* = b \end{cases}. \quad (2.1.16)$$

É claro que é falsa a proposição que estabelece que o valor de x^* , obtido com a solução do sistema (2.1.16), é também uma solução de (2.1.1), uma vez que (2.1.16) está associado apenas às condições necessárias de primeira ordem para (2.1.6). Deste modo, as condições de segunda ordem, que serão tratadas na subseção seguinte, ajudam a determinar se o ponto encontrado é a solução do problema. Antes disso, observe que se f não é quadrática, então $\nabla f(x)$ não é linear. Neste caso pode ser difícil resolver (2.1.16).

Exemplo 2.1.10. Vamos retomar o problema tratado no Exemplo 2.1.7. Para facilitar a

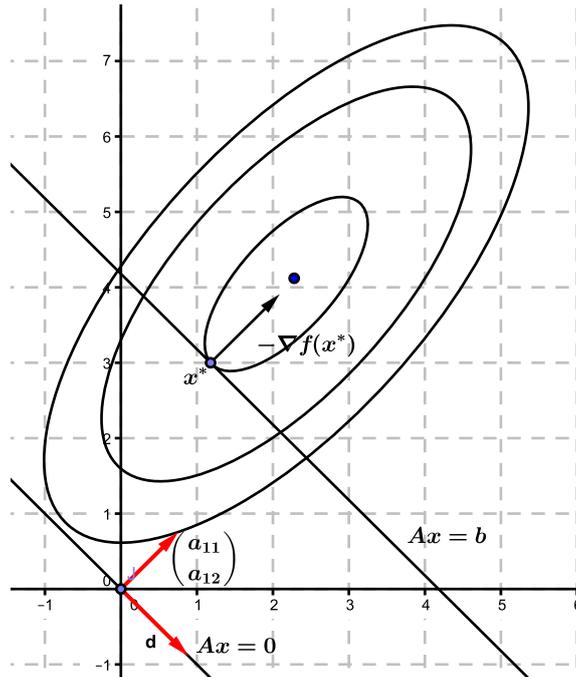


Figura 2.6: O vetor $\nabla f(x^*)$ é paralelo a A^T e, portanto, na resolução de problemas com restrições lineares temos que todo $d \in N(A)$ é ortogonal a ∇f .

leitura, repetiremos aqui o enunciado do problema

$$\min f(x) = x_1^2 + x_2 - 2x_3$$

sujeito a

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 2 \\ -x_1 + x_2 - x_3 = -2 \end{cases} \quad (2.1.17)$$

Para este problema temos

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} \text{ e } A^T = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

As condições necessárias de primeira ordem estabelecem a existência do vetor λ^* , que neste caso pertence ao \mathbb{R}^2 , associado ao minimizador x^* , de forma que o par (x^*, λ^*) é a solução do

sistema definido em (2.1.16) que neste caso é dado por

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix} \end{cases}.$$

A solução deste sistema é $x^* = (-1, 0, 3)^T$ e $\lambda^* = \left(-\frac{1}{3}, \frac{5}{3}\right)^T$. Veja que x^* é o mesmo encontrado quando este problema foi resolvido no Exemplo 2.1.7. Conforme previsto em (2.1.15) temos que

$$\nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{5}{3} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Desta forma, temos que $\nabla f(x^*)$ é uma combinação linear das colunas de A^T , ou seja, $\nabla f(x^*) \in \text{Im}(A^T)$.

2.1.2 Condições de otimalidade de segunda ordem

Os próximos resultados são referentes às condições de segunda ordem para o problema com restrições lineares.

Aplicando a regra da cadeia novamente em (2.1.12), obteremos

$$\nabla^2 \varphi(\gamma) = Z^T \nabla^2 f(\tilde{x} + Z\gamma) Z. \quad (2.1.18)$$

Utilizando (2.1.18) e (2.1.14), chegaremos às seguintes condições necessárias de segunda ordem para um ponto ótimo x^* de (2.1.1):

$$Ax^* = b;$$

$$Z^T \nabla f(x^*) = 0;$$

$$Z^T \nabla^2 f(x^*) Z \geq 0.$$

Substituindo esta última condição por $Z^T \nabla^2 f(x^*) Z > 0$ teremos as condições suficientes para que x^* seja um minimizador de (2.1.1). Vale enfatizar que $Z^T \nabla^2 f(x^*) Z > 0$ significa que a matriz resultante do produto de matrizes $Z^T \nabla^2 f(x^*) Z$ deve ser definida positiva, ou seja, $0 < \gamma^T Z^T \nabla^2 f(x^*) Z \gamma$ para todo $\gamma \neq 0$. Como $N(A) = \{d = Z\gamma, \gamma \in \mathbb{R}^{n-m}\}$, temos que

$d^T \nabla^2 f(x^*) d > 0$ para todo d não nulo do $N(A)$.

Dessa forma, podemos enunciar os seguintes teoremas:

Teorema 2.1.11. Se o ponto x^* de S é um mínimo local de f em S , as seguintes condições são satisfeitas:

- (i) $\nabla f(x^*) = 0$;
- (ii) $d^T \nabla^2 f(x^*) d \geq 0$ para todo $d \in N(A)$. (Neste caso dizemos que $\nabla^2 f(x^*)$ é semidefinida positiva no núcleo de A).

Teorema 2.1.12. Um ponto x^* de S que satisfaz as condições:

- (i) $\nabla f(x^*) = 0$ para algum $x^* \in \mathbb{R}^m$;
 - (ii) $d^T \nabla^2 f(x^*) d > 0$ para todo $d \in N(A) - \{0\}$, ($\nabla^2 f(x^*)$ definida positiva no núcleo de A).
- é um ponto de mínimo local de f em S .

Exemplo 2.1.13. Resolveremos novamente o problema do Exemplo 2.1.8, mas agora usando as condições de primeira e segunda ordem que discutimos.

O problema é minimizar $f(x)$, onde

$$f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}, \quad f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

sujeito a

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5 \end{cases}.$$

O gradiente da função a ser minimizada é $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 4x_1 \\ 2x_2 \\ 2x_3 \end{pmatrix}$ e o sistema 2.1.16 (neste caso linear) associado ao problema é

$$\begin{cases} 4x_1 - 0x_2 + 0x_3 - \lambda_1 - 2\lambda_2 = 0 \\ 0x_1 + 2x_2 + 0x_3 + \lambda_1 - 3\lambda_2 = 0 \\ 0x_1 + 0x_2 + 2x_3 - 3\lambda_1 + \lambda_2 = 0 \\ x_1 - x_2 + 3x_3 + 0\lambda_1 + 0\lambda_2 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 - x_3 + 0\lambda_1 + 0\lambda_2 = 5 \end{cases}.$$

Solucionando este sistema, encontra-se o seguinte candidato a minimizador da função:

$$x^* = \frac{1}{202} \begin{pmatrix} 152 \\ 271 \\ 107 \end{pmatrix}.$$

A fim de conferir a condição de primeira ordem dada por (2.1.14), adotaremos a base Z , encontrada no Exemplo 2.1.8, para $N(A)$, isto é, adotaremos

$$Z = \begin{pmatrix} -\frac{8}{5} \\ \frac{7}{5} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Logo,

$$Z^T \nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} -\frac{8}{5} & \frac{7}{5} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{304}{101} \\ \frac{542}{202} \\ \frac{214}{202} \end{pmatrix} = 0.$$

Por fim, devemos ainda testar a condição de segunda ordem, estabelecida nesta seção.

$$\nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \text{ e } Z^T \nabla^2 f(x^*) Z = \begin{pmatrix} -\frac{8}{5} & \frac{7}{5} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{8}{5} \\ \frac{7}{5} \\ 1 \end{pmatrix} = \left(\frac{404}{25} \right) > 0.$$

$$\text{Concluimos então que } x^* = \frac{1}{202} \begin{pmatrix} 152 \\ 271 \\ 107 \end{pmatrix} \text{ é minimizador de } f.$$

Até agora foram apresentadas técnicas que permitem resolver problemas com restrições lineares de igualdade. A próxima seção será dedicada a estudar problemas com restrições não lineares.

2.2 Problemas com restrições não-lineares de igualdade

Nesta seção estudaremos problemas da forma

$$\min f(x) \quad \text{sujeito a} \quad h(x) = 0, \quad (2.2.1)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ são suaves e $m < n$. A partir de agora, será permitido que a função h seja não linear.

Para iniciar a discussão, voltemos ao seguinte problema proposto no início deste capítulo:

$$\min (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 3)^2, \quad \text{sujeito a} \quad (x_1 + 2)^2 + (x_2 - 3)^2 - 4 = 0.$$

Na ocasião em que abordamos este problema, vimos geometricamente que a solução ótima é $x^* = (0, 3)^T$.

Para a função objetivo e para a restrição, temos os seguintes vetores gradientes

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2(x_1 - 1) \\ 2(x_2 - 3) \end{pmatrix} \text{ e } \nabla h(x) = \begin{pmatrix} 2(x_1 + 2) \\ 2(x_2 - 3) \end{pmatrix}.$$

No ponto $x^* = (0, 3)^T$

$$\nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } \nabla h(x^*) = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.2)$$

Veja que os gradientes em (2.2.2) sugerem a existência de um escalar $\lambda^* = -2$ tal que

$$\nabla f(x^*) = \lambda^* \nabla h(x^*). \quad (2.2.3)$$

Como $\lambda^* \neq 0$, os vetores $\nabla f(x^*)$ e $\nabla h(x^*)$ são paralelos. Esta situação é muito semelhante às condições de primeira ordem para problemas com restrições lineares. Observe que se $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ for dada por $Ax = b$ onde A é uma matriz de m linhas e n colunas e $b \in \mathbb{R}^m$, então $(J_h(x))^T = A^T$.

Nos parágrafos a seguir, os teoremas e as definições destinam-se a comprovar a existência de λ^* tal como em (2.2.3). O conceito de plano tangente será importante nos argumentos a seguir. Para melhor entender este conceito, comecemos por analisar as superfícies formadas pelas restrições.

Consideremos o caso particular em que o problema (2.2.1) possua uma única restrição de igualdade em \mathbb{R}^2 . Neste caso, a região factível $S = \{x \in \mathbb{R}^2; h(x) = 0\}$ é uma curva, conforme ilustrado na Figura 2.4.

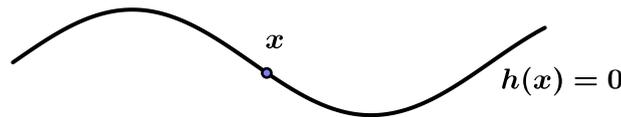


Figura 2.7: Curva em \mathbb{R}^2 .

No caso em que há uma restrição de igualdade em \mathbb{R}^3 , a região viável que é definida pelo conjunto $S \equiv \{x \in \mathbb{R}^3; h(x) = 0\}$ é uma superfície em \mathbb{R}^3 . Veja a Figura a seguir.

Por um ponto $\tilde{x} \in S$ passa uma família de curvas contidas em S . Sob certas condições, pode-se expressar cada uma dessas curvas, numa vizinhança do ponto \tilde{x} , com uma parametrização $x : \mathbb{R} \rightarrow S$ tal que $x(t) \in S$ para todo $t \in (a, b)$. Essas curvas passam por \tilde{x} , logo existe $\tilde{t} \in (a, b)$ tal que $x(\tilde{t}) = \tilde{x}$.

Se existir $x'(t)$ para todo $t \in (a, b)$, então o arco $x(t)$ é diferenciável. Em outras palavras, uma curva parametrizada $x : I \rightarrow \mathbb{R}^n$, onde I é um intervalo real e $x(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ é diferenciável se existir $x'_1(t), \dots, x'_n(t)$ para todo $t \in I$. O vetor $x'(t) = (x'_1(t), \dots, x'_n(t))$ é

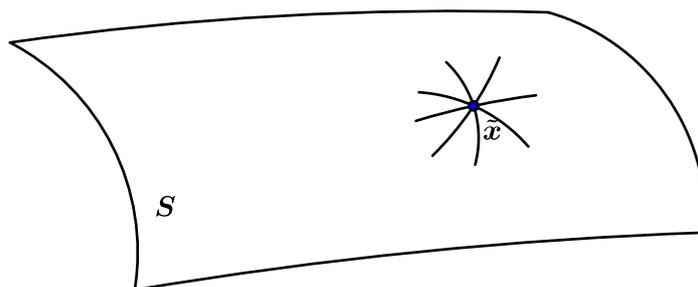


Figura 2.8: Superfície em \mathbb{R}^3 e algumas curvas sobre essa superfície.

tangente ao arco de curva no ponto \tilde{x} , portanto, tangente à superfície.

Se considerarmos todas as curvas diferenciáveis em S que passam por \tilde{x} , intuitivamente veremos que seus vetores tangentes em \tilde{x} definem um plano tangente T . Entender o conceito de plano tangente é importante, pois, conforme o Teorema 1.2.3, enunciado no capítulo 1 e o Teorema 2.2.3 que será enunciado nesta seção, dado um ponto x^* onde f atinge o valor mínimo no conjunto viável, então os vetores gradientes de f e h são perpendiculares ao plano tangente. Um ponto chave para a caracterização do plano tangente é o de *ponto regular*, conforme definição a seguir.

Definição 2.2.1. Um ponto \tilde{x} que satisfaz as equações $h(x) = 0$ é regular em relação às restrições se o conjunto de vetores $\nabla h_1(\tilde{x}), \dots, \nabla h_m(\tilde{x})$ é linearmente independente.

Nos pontos regulares, pode-se caracterizar o plano tangente como sendo o plano formado pelos vetores que são perpendiculares aos vetores gradientes das restrições. Isso é enunciado no Teorema a seguir:

Teorema 2.2.2. Se \tilde{x} é um ponto regular da superfície $S \equiv \{x \in \mathbb{R}^n; h(x) = 0\}$, então o plano tangente T é expresso na forma

$$T = \{y \in \mathbb{R}^n; J_h(\tilde{x})y = 0\}.$$

Demonstração. Ver Luenberger [13]. □

Sabemos, pelo Teorema 1.2.3, que os vetores gradientes das restrições são perpendiculares ao plano tangente. Assim $\nabla g(p)$ é ortogonal a todos os vetores tangentes a S no ponto p .

No problema proposto no início desta seção temos a restrição $h(x) = 0$, definida por $(x_1 + 2)^2 + (x_2 - 3)^2 - 4 = 0$. O conjunto $\{(x); h(x) = 0\}$ é a curva de nível 0 da função h . Veja que o Teorema 1.2.3 afirma que o $\nabla h(x^*)$ é normal a essa curva de nível no ponto x^* . De (2.2.2) temos que $x^* = (0, 3)^T$ e $\nabla h(x^*) = (4, 0)^T$. A curva definida por h é uma circunferência de centro $(-2, 3)$ e pode ser parametrizada por

$$\gamma(t) = (-2 + 2\cos(t), 3 + 2\sin(t))^T.$$

O que leva a

$$\gamma'(t) = (-2\text{sen}(t), 2\text{cos}(t))^T.$$

Veja que $\gamma(0) = (0, 3)^T$ e $\gamma'(0) = (0, 2)^T$. Portanto, o vetor $\vec{v} = (0, 2)^T$ é tangente à curva h no ponto $(0, 3)^T$. Observe que para que um vetor seja normal a uma curva em um ponto x^* desta curva, basta que ele seja perpendicular a algum vetor tangente a esta curva no ponto x^* .

Veja que $\vec{v} \cdot \nabla h(0, 3) = 0$, logo $\nabla h(0, 3) \perp \vec{v}$. Fato que ilustra a afirmação do Teorema 1.2.3 e pode ser visualizado na Figura 2.9.

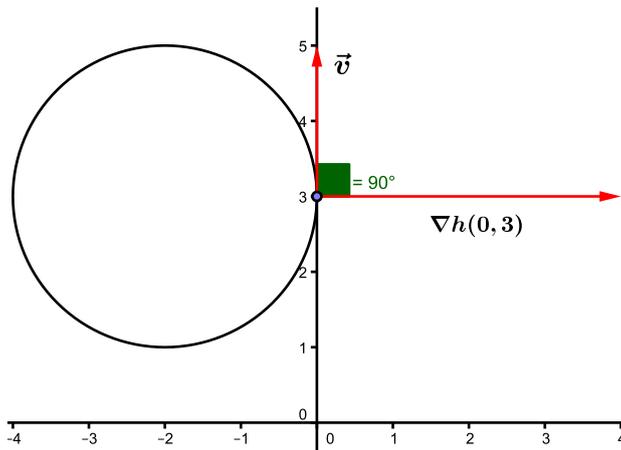


Figura 2.9: Ilustração do Teorema 1.2.3.

Apresentaremos agora mais uma evidência, com relação às curvas de nível, a favor da validade de (2.2.3). Para simplificar, consideremos $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Seja $f(x) = c_i$ uma curva de nível de f . Suponha que desejamos o valor máximo (ou mínimo) de f restrito às curvas de nível $h(x) = 0$. Imaginemos agora uma curva de nível de f , por exemplo, $f(x) = c_1$ que intersecte $h(x) = 0$ e que não seja tangente à curva descrita por $h(x) = 0$. É possível verificar que para os valores de c_i próximos de c_1 as curvas de nível descritas por $f(x) = c_i$ também intersectarão $h(x) = 0$. Com isso, teremos que pontos nesta curva de nível de f não serão minimizadores, uma vez que existem pontos viáveis com menores valores da função objetivo. Agora, consideremos que a curva de nível $f(x) = c_0$ seja tangente à $h(x) = 0$ num ponto x^* . Se as curvas de nível de f e h são tangentes neste ponto, então elas possuem a mesma reta tangente e, portanto, a mesma reta normal. Além disso, como vimos no Teorema 1.2.3, ∇h é ortogonal à curva $h(x) = 0$ neste ponto, logo os vetores ∇h e ∇f são paralelos no ponto (x^*) . A Figura 2.10 a seguir ilustra as ideias contidas neste parágrafo.

Teorema 2.2.3. Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e x^* um minimizador de $f(x)$ no conjunto S . Se C é uma curva diferenciável contida em S então ∇f é ortogonal a reta tangente de C em x^* .

Demonstração. Seja $C : r(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ uma curva sobre S com $t \in (a, b)$ que passa por

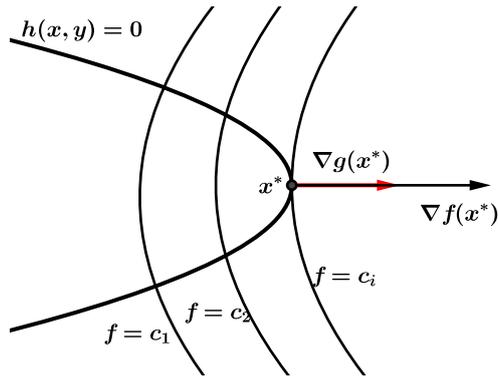


Figura 2.10: Em um minimizador temos que ∇f é paralelo a ∇h .

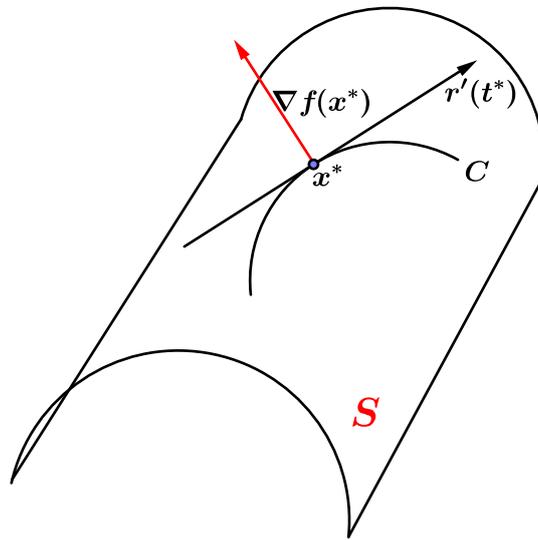


Figura 2.11: Ilustração do Teorema 2.2.3.

x^* . Consideremos, ainda, a função composta $g : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, $g(t) = f(r(t)) = f(x_1(t), \dots, x_n(t))$. Se $x = r(t)$ e $x^* = r(t^*)$ é um ponto de máximo ou mínimo de f sobre S , então t^* é um ponto de máximo ou mínimo de g e, conseqüentemente, $\frac{dg(t^*)}{dt} = 0$. Calculando $\frac{dg(t)}{dt}$, temos:

$$\frac{dg(t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x_1} \cdot \frac{dx_1(t)}{dt} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} \cdot \frac{dx_n(t)}{dt} = \left\langle \left(\frac{\partial f(x_1)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(x_n)}{\partial x_n} \right)^T, \left(\frac{dx_1(t)}{dt}, \dots, \frac{dx_n(t)}{dt} \right)^T \right\rangle.$$

Calculando em t^*

$$\begin{aligned} \frac{dg(t^*)}{dt} &= \langle \nabla f(x^*), r'(t^*) \rangle = 0, \\ \therefore \nabla f(x^*) &\perp r'(t^*). \end{aligned}$$

□

A relação estabelecida em (2.2.3), para $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, pode ser estendida para o caso geral. Assunto que trataremos na subseção 2.2.1. Antes da prova formal, faremos mais algumas considerações. Suponhamos que $f(x)$ seja uma função objetivo restrita a uma única restrição $h(x) = 0$, $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e x^* um minimizador de f na região viável. Pelo Teorema 1.2.3 temos que $\nabla h(x^*)$ é perpendicular à curva de nível $h(x) = 0$ e o Teorema 2.2.3 afirma que $\nabla f(x^*)$ também é perpendicular a qualquer curva sobre a superfície curva $h(x) = 0$. Perceba que isto só é possível se os vetores $\nabla f(x^*)$ e $\nabla h(x^*)$ forem paralelos.

2.2.1 Condições necessárias de primeira ordem

Nesta seção, apresentaremos o teorema que estabelece a condição necessária de primeira ordem para que x^* seja um minimizador local de (2.2.1). Desse modo será comprovada e generalizada a existência de λ^* como em (2.2.3).

Teorema 2.2.4. Seja x^* um minimizador local de (2.2.1). Suponhamos que x^* é um ponto regular das restrições. Então existe $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla h_i(x^*), \quad (2.2.4)$$

ou, equivalentemente,

$$Z^T \nabla f(x^*) = 0,$$

onde $Z \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$ e suas colunas formam uma base de $N(J_h(x^*))$.

Demonstração. Seja x^* um ponto regular de $S = \{x \in \mathbb{R}^n; h(x) = 0\}$ e um minimizador local de (2.2.1). Consideremos, também, a curva C em S representada na vizinhança de x pela parametrização $r(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$. Seja ainda t^* o valor de t , tal que $r(t^*) = x^*$.

(i) Como $r(t)$ está sobre a superfície $h(x) = 0$. Então, pelo Teorema 1.2.3 temos:

$$\nabla h_i(x^*) \perp r'(t), \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}.$$

Este fato, assegura que qualquer vetor no plano tangente de S está no núcleo do $J_h(x^*)$. O Teorema 2.2.2 garante que, quando x^* é regular, $N(J_h(x^*))$ de fato coincide com o plano tangente de S .

(ii) Se $x^* = r(t^*)$ é um minimizador de f sobre C , então, pelo Teorema 2.2.3 tem-se que:

$$\nabla f(x^*) \perp r'(t).$$

De (ii) temos que $\nabla f(x^*)$ também é ortogonal ao plano tangente de S . Sendo assim, temos

que $\nabla f(x^*)$ é ortogonal a qualquer base de $N(J_h(x^*))$, portanto,

$$Z^T \nabla f(x^*) = 0$$

.

Como $N(J_h(x^*))^\perp = \text{Im}(J_h(x^*)^T)$ temos que $\nabla f(x^*)$ é uma combinação linear de $\nabla h(x^*)$, logo podemos deduzir que existe $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$, tal que

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla h_i(x^*).$$

□

Existe uma maneira conveniente de se escrever a condição de primeira ordem (2.2.4). Para isto, definimos a *função lagrangiana*

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T h(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad \lambda \in \mathbb{R}^m. \quad (2.2.5)$$

Assim, é conveniente definir (2.2.4) usando

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) + \lambda^* \nabla h(x^*) = 0. \quad (2.2.6)$$

Além disso, a viabilidade do problema (2.2.1) pode ser expressa como $\nabla_\lambda L(x, \lambda) = h(x) = 0$. Desta forma, segue que (x^*, λ^*) é viável e satisfaz (2.2.4) se, e somente se, (x^*, λ^*) é um ponto crítico da função lagrangiana (2.2.5). Este resultado diz que procurar pelos candidatos à solução de um problema de otimização com restrições é o mesmo que procurar pelos pontos críticos da função lagrangiana. É possível mostrar, ver [6], que a solução do problema (2.2.1), pode ser encontrada fixando λ^* e resolvendo o problema irrestrito de minimizar $L(x, \lambda^*)$.

Assim como vimos nos problemas sem restrição, as condições de primeira ordem não garantem que um ponto estacionário seja minimizador do problema (2.2.1). Tal garantia será obtida com as condições suficientes de segunda ordem apresentadas na próxima subseção.

2.2.2 Condições necessárias de segunda ordem

As condições de segunda ordem serão enunciadas a seguir e podem ser encontradas em [9].

Teorema 2.2.5. Sejam x^* um ponto regular, minimizador de (2.2.1), e o plano tangente $T = \{y \in \mathbb{R}^n; J_h(x^*)y = 0\}$. Suponhamos $f, h \in C^2$. Então existem $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla f(x^*) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^* \nabla h_j(x^*) = 0$$

e

$$y^T \left(\nabla^2 f(x^*) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^* \nabla^2 h_j(x^*) \right) y \geq 0, \quad \text{para todo } y \in T. \quad (2.2.7)$$

Substituindo (2.2.7) por $y^T \left(\nabla^2 f(x^*) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^* \nabla^2 h_j(x^*) \right) y > 0$ para todo $y \in T - \{0\}$, obtemos as condições suficientes para que x^* seja um minimizador local estrito de (2.2.1).

Exemplo 2.2.6. Encontremos os minimizadores da função

$$f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + x_2^2,$$

sujeito a

$$x_1^2 + 2x_2^2 - 4 = 0.$$

O gradiente da função a ser minimizada é $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 4x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix}$, e o sistema das condições de primeira ordem associado ao problema é

$$\begin{cases} 4x_1 - 2\lambda x_1 = 0 \\ 2x_2 - 4\lambda x_2 = 0 \\ x_1^2 + 2x_2^2 = 4 \end{cases} .$$

Para este sistema temos as seguintes soluções:

- $\lambda = 2 \rightarrow P_1(2, 0) \quad e \quad P_2(-2, 0);$
- $\lambda = \frac{1}{2} \rightarrow P_3(0, \sqrt{2}) \quad e \quad P_4(0, -\sqrt{2}).$

Calculando o valor da função objetivo nestes pontos, tem-se:

$$f(P_1) = f(P_2) = 8 \quad e \quad f(P_3) = f(P_4) = 2,$$

portanto, os minimizadores da função são P_3 e P_4 .

Veja que a curva descrita pela restrição h é uma elipse. Adotaremos a seguinte parametrização para a curva descrita por h

$$\gamma(t) = (2\cos(t), \sqrt{2}\sin(t))^T.$$

Desta forma, a matriz jacobiana de γ em t é dada por

$$\gamma'(t) = \begin{bmatrix} -2\sin(t) \\ \sqrt{2}\cos(t) \end{bmatrix}.$$

Notemos que a reta tangente à curva definida por γ no ponto $\gamma(t_0)$ tem a direção do vetor $\gamma'(t_0)$.

Para $t = \pi/2$, tem-se o ponto $\gamma(t) = (0, \sqrt{2})^T = P_3$. O vetor diretor da reta tangente à $\gamma(t)$, neste ponto, é dado por $\gamma'(t) = (-2, 0)^T$ e o vetor gradiente da restrição é $(0, 4\sqrt{2})^T$.

Para conferir a condição suficiente de otimalidade de segunda ordem para o ponto P_3 . Veja que $J_h(P_3) = (0 \quad 4\sqrt{2})$ e, portanto, de acordo com o Teorema 2.2.2, os vetores do plano tangente são ortogonais à $\gamma'(t)$ para qualquer parametrização $\gamma(t)$, e são definidos por $(d, 0)^T$, $d \in \mathbb{R}$.

As matrizes Hessianas de f e h no ponto $(0, \sqrt{2})^T$ são, respectivamente:

$$\nabla^2 f = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad \text{e} \quad \nabla^2 h = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Veja que a condição de otimalidade dada em (2.2.7) exige que $y^T \left(\nabla^2 f(x^*) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^* \nabla^2 h_j(x^*) \right) y \geq 0$. Para este problema tem-se

$$(d, 0) \left(\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix} = 5d^2 > 0.$$

Com isso, está verificado que valem as condições de segunda ordem, portanto, P_3 realmente é um minimizador de f .

Na Figura 2.12 temos em vermelho a restrição e em preto algumas curvas de nível de $f(x_1, x_2)$. Observe nesta Figura que os pontos P_3 e P_4 são os únicos minimizadores da função restrita ao conjunto viável.

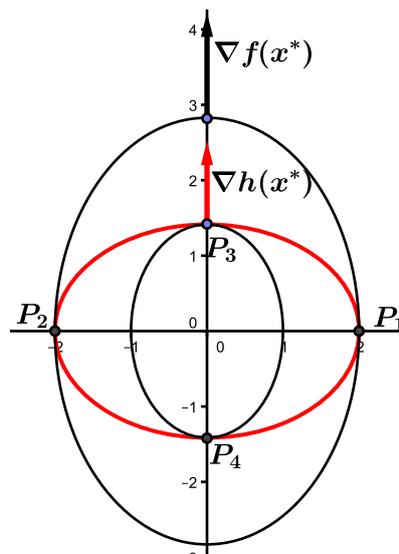


Figura 2.12: Ilustração do Exemplo 2.2.6.

No próximo capítulo, abordaremos outras técnicas que também permitem resolver problemas de otimização com restrições, porém, isso será feito sob o escopo de métodos computacionais. Para isso, vamos construir problemas sem restrições, cujas soluções se aproximam cada vez mais da solução original.

Capítulo 3

MÉTODOS DE PENALIDADE E DO LAGRANGIANO AUMENTADO

3.1 Método de penalidade

Nesta seção, estudaremos o problema

$$\min f(x) \quad \text{sujeito a} \quad h(x) = 0, \quad f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \text{ e } h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m. \quad (3.1.1)$$

com o auxílio de um método computacional do tipo de *penalidade*.

O Método de Penalização Externa ou simplesmente Método de Penalidade é aquele em que a função objetivo é acrescida de um termo penalizador $P(x)$, cujo valor é nulo em toda a região viável e positivo para os pontos que estão fora desta região, isto é, há uma penalização pela violação das restrições. O termo penalizador é associado a um parâmetro c que determina o quão rigorosa será a penalidade caso haja alguma violação das restrições. Desta forma, o problema (3.1.1), restrito, é aproximado pelo problema irrestrito

$$\min q(x, c) = f(x) + cP(x). \quad (3.1.2)$$

Para que a solução do problema (3.1.2) convirja à solução do problema original, geralmente o parâmetro escalar c , que multiplica o termo penalizador $P(x)$, deve crescer a mais infinito. Assim, para todo x fora da região viável, o valor de $q(x, c)$ cresce indefinidamente com o aumento de c e, com isso, há uma “penalização infinita” ao sair da região viável. Porém, como $P(x)$ é nulo na região viável, a solução de (3.1.2) tende à solução de (3.1.1), como veremos a seguir.

Para simplificar vamos expor o caso em que temos apenas uma restrição. O caso geral é completamente análogo e por isso não há perda de generalidade.

Uma possível escolha seria tomar $P(x) = |h(x)|$. Porém, tal escolha tornaria a função $q(x, c)$ não diferenciável. Para evitar este problema, adotaremos $P(x) = (h(x))^2$. Deste modo,

o problema (3.1.2) é transformado no problema

$$\min q(x, c) = f(x) + \frac{c}{2}(h(x))^2. \quad (3.1.3)$$

Notemos que, por ser c uma constante arbitrária, podemos substituí-la por $c/2$. O objetivo desta substituição é simplificar o cálculo do gradiente de q . Observemos que se $h(x) = 0$, então a penalização não ocorre, caso contrário, teremos a penalidade $(c/2)(h(x))^2$. O método assim definido, parte de um ponto inicial, possivelmente inviável, e gera novos pontos, provavelmente inviáveis, durante o processo iterativo. Em cada iteração o valor de c é atualizado para um valor maior, assim as penalidades pela violação de qualquer restrição tornam-se grandes, fazendo com que os pontos gerados se aproximem da região viável. Como para pontos viáveis $q(x, c) = f(x)$, temos que a medida que c aumenta a solução do problema penalizado converge para a solução do problema original. Vejamos alguns exemplos.

Exemplo 3.1.1. Consideremos $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $h(x) = x + 2$. A restrição $h(x) = 0$ impõe que a região viável seja o ponto $x = -2$. Neste caso, a função $P(x)$ será a parábola $(h(x))^2 = (x + 2)^2$. O termo penalizador $(c/2)(h(x))^2$ é ilustrado na Figura 3.1.

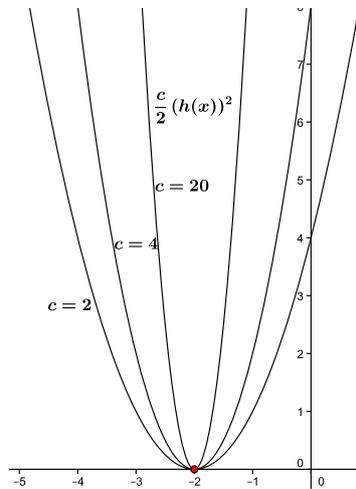


Figura 3.1: Desenho das parábolas que representam o termo penalizador $cP(x) = \frac{c}{2}(h(x))^2$, para $c \in \{2, 4, 20\}$.

Podemos observar na Figura 3.1 que à medida que o parâmetro c cresce, a penalização para valores de x fora da região viável se torna cada vez maior. Se tivéssemos interessados em resolver o problema de minimizar x^4 , sujeito a $h(x) = 0$, a função penalizada seria $q(x, c) = x^4 + (c/2)(x + 2)^2$. À medida que aumentamos c , deslocamos o minimizador de $q(x, c)$ para a solução do problema restrito. A Figura 3.2 ilustra este deslocamento.

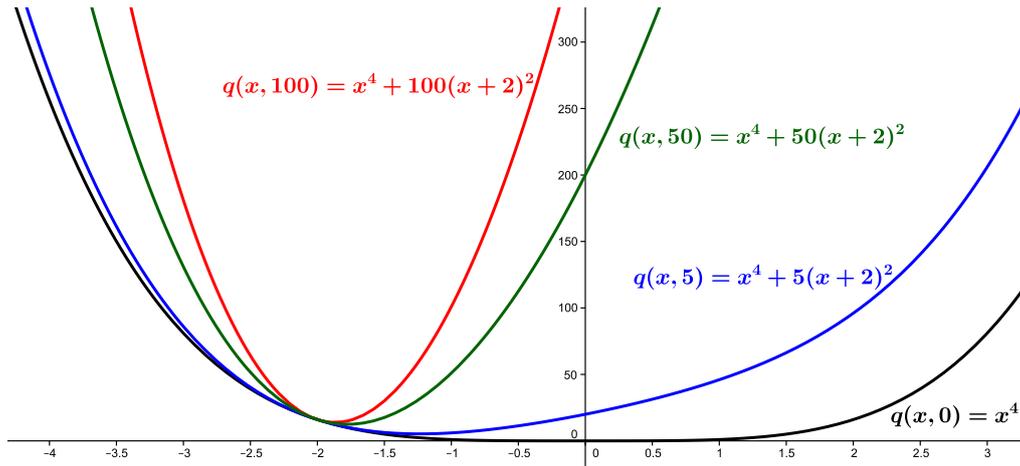


Figura 3.2: Gráfico da função penalizada $q(x, c) = x^4 + \frac{c}{2}(x + 2)^2$, para $c \in \{0, 10, 100, 200\}$. Quanto maior o valor de c , mais a função q se deforma de modo que seu minimizador se aproxima de 2.

O próximo exemplo ilustra o método para duas variáveis.

Exemplo 3.1.2. Seja o problema

$$\min f(x) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 2)^2$$

sujeito a

$$h(x) = x_1 - 4 = 0.$$

Veja na Figura 3.3 que as curvas de nível de $f(x)$ são círculos concêntricos ao ponto $(4, 2)$. Como o centro satisfaz $h(x) = 0$, ele deve ser o ponto de mínimo. Utilizando a função penalidade $P(x) = (h(x))^2$ temos

$$P(x) = (x_1 - 4)^2.$$

Desta forma, a função objetivo penalizada, tal como definida em (3.1.3), para este problema será

$$q(x, c) = f(x) + \frac{c}{2}(h(x))^2 = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 2)^2 + \frac{c}{2}(x_1 - 4)^2.$$

Veja, por exemplo, que para $c = 20$ e $x_1 = 10$ a penalidade será de 360, isto é, o custo de se “distanciar” de $h(x) = 0$ em 6 unidades é de 360 unidades.

O mínimo da função $q(x, c)$ ocorre em um ponto x^* em que o gradiente se anula (Teorema 1.1.4):

$$\nabla q(x, c) = \begin{bmatrix} 2(x_1 - 4) + c(x_1 - 4) \\ 2(x_2 - 2) \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{8+4c}{2+c} \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Fazendo $c \rightarrow +\infty$ em x_1^* temos

$$\lim_{c \rightarrow +\infty} \frac{8 + 4c}{2 + c} = 4.$$

Logo, os pontos gerados convergem para $x^* = (4, 2)$. Na verdade, para qualquer $c > 0$ teremos o mesmo ponto de mínimo $(4, 2)$. Isso acontece porque

$$\frac{8 + 4c}{2 + c} = \frac{4(2 + c)}{2 + c} = 4,$$

independente de c . A razão disso acontecer é porque o minimizador irrestrito de f já satisfaz a restrição. Por exemplo, para $c = 1$ tem-se

$$\nabla q(x, c) = \begin{bmatrix} 2(x_1 - 4) + (x_1 - 4) \\ 2(x_2 - 2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3(x_1 - 4) \\ 2(x_2 - 2) \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

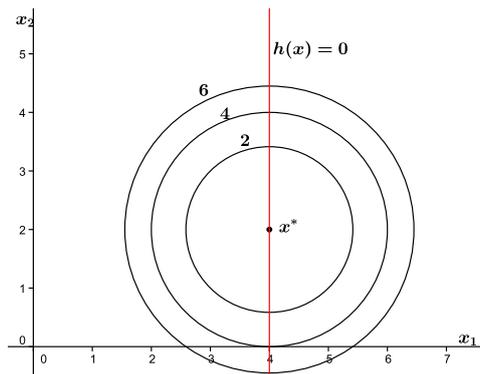
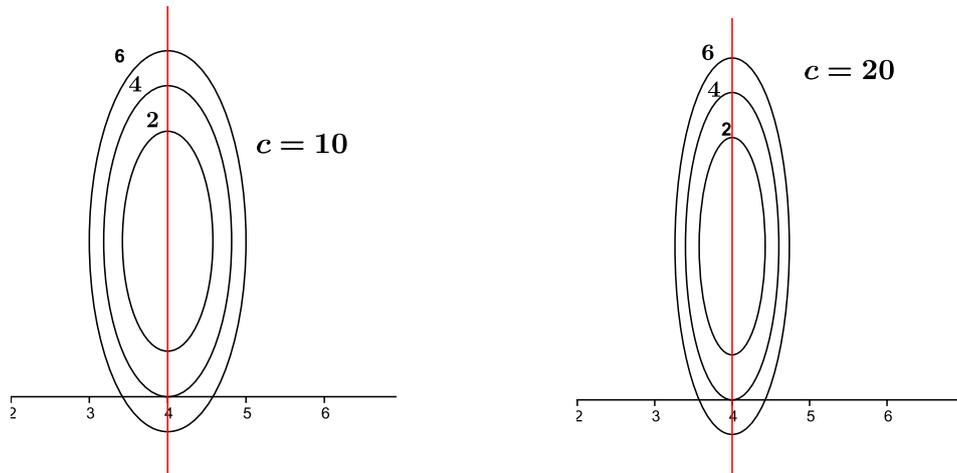


Figura 3.3: Curvas de nível da função original $f(x) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 2)^2$ com destaque para a região viável (reta vermelha).

Na Figura 3.4(a) e 3.4(b) são exibidas as curvas de nível da função $q(x, c)$, para $c = 10$ e $c = 20$, respectivamente. Observe que estas curvas de nível são as curvas de nível da função original, alongadas no conjunto viável. É verdade que, quanto maior o parâmetro c , mais acentuado será este alongamento. Este fato acaba por ocasionar uma instabilidade numérica, uma vez que para valores muito grandes de c as curvas de nível estarão bem próximas do conjunto viável, sendo, portanto, quase que indiferente a cada ponto factível.

A Figura 3.5 ilustra a exposição do último parágrafo, nela temos as curvas de nível 2, 10^3 e 10^4 para $c = 40000$. Note que é muito difícil diferenciar o valor de $q(x, 40000)$ para x viável, pois para $x_2 \in [0.6, 3.4]$, os pontos $(0, y)$ estão praticamente na mesma curva de nível de $q(x, 40000)$.



(a) Curvas de nível da função $q(x, c)$ com $c = 10$.

(b) Curvas de nível da função $q(x, c)$ com $c = 20$

Figura 3.4: Curvas de nível com destaque para a região admissível (reta vermelha). Os números indicam o valor do nível.

Isso acontece porque para este valor do parâmetro c , a curva de nível 2 de $q(x, c)$ possui um alongamento muito acentuado, fazendo com que ela esteja muito próxima à região viável.

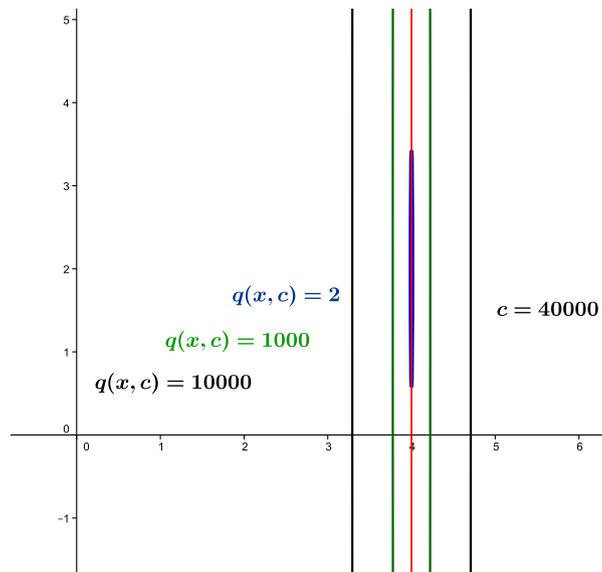


Figura 3.5: Curvas de nível 2, 10^3 e 10^4 da função $q(x, c)$, para $c = 40000$, com destaque para a região viável (reta vermelha).

No Exemplo 3.1.2 vimos um caso em que o minimizador restrito coincide com o minimizador irrestrito. No próximo exemplo, para efeito de comparação, estudaremos a mesma função objetivo, porém sujeita a uma restrição de modo que o minimizador irrestrito seja diferente do minimizador restrito.

Exemplo 3.1.3. Seja o problema

$$\min f(x) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 2)^2$$

sujeito a

$$h(x) = x_1 - 5 = 0.$$

No Exemplo 3.1.2 vimos que o minimizador irrestrito de f , $x^* = (4, 2)$, era também o minimizador de $q(x, c)$ e que esse minimizador independe de c . Naquele exemplo, $x^* = (4, 2)$ era também o minimizador restrito. Neste novo exemplo, o minimizador restrito é $x^* = (5, 2)$, conforme pode ser visualizado na Figura 3.6.

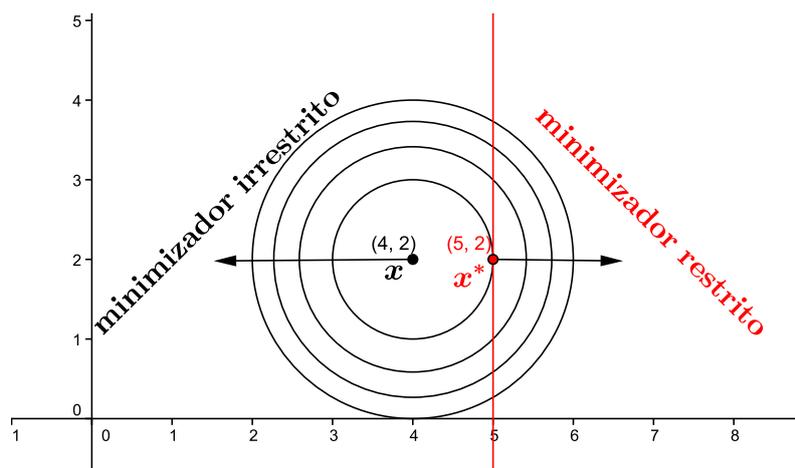


Figura 3.6: Curvas de nível da função original $f(x) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 2)^2$ com destaque para os pontos $x = (4, 2)$, que é o minimizador irrestrito, e o ponto $x^* = (5, 2)$, minimizador restrito de f . A reta vermelha representa a região viável.

A função penalidade $P(x) = (h(x))^2$ é dada por

$$P(x) = (x_1 - 5)^2.$$

A função objetivo penalizada, tal como definida em (3.1.3), para este problema é

$$q(x, c) = f(x) + \frac{c}{2}(h(x))^2 = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 2)^2 + \frac{c}{2}(x_1 - 5)^2.$$

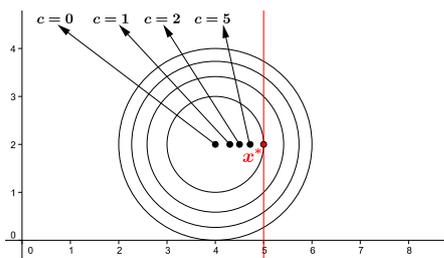
O mínimo da função $q(x, c)$ ocorre em um ponto x^* em que o gradiente se anula (Teorema 1.1.4):

$$\nabla q(x, c) = \begin{bmatrix} 2(x_1 - 4) + c(x_1 - 5) \\ 2(x_2 - 2) \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{8+5c}{2+c} \\ 2 \end{bmatrix}.$$

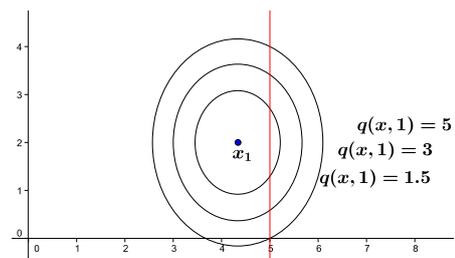
À medida que o valor de c aumenta, x_1 se aproxima de 5. Isso acontece porque

$$\lim_{c \rightarrow +\infty} \frac{8 + 5c}{2 + c} = 5.$$

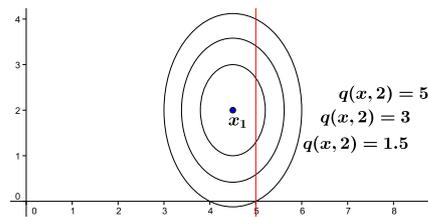
Diferente do que ocorreu no Exemplo 3.1.2, onde o minimizador de $q(x, c)$ independia de c , aqui, conforme o valor de c aumenta, o minimizador de $q(x, c)$ não é constante e se aproxima do minimizador restrito de f . Assim, no limite, o minimizador de $q(x, c)$ coincidirá com o minimizador de f restrito a $x - 5 = 0$. A Figura 3.7 ilustra este fato.



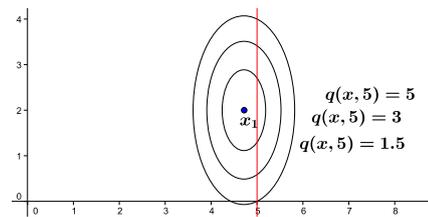
(a) Curvas de nível da função original $f(x) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 2)^2$. Os pontos pretos são os minimizadores da função $q(x, c)$ para os valores de c indicados.



(b) Curvas de nível da função penalizada $q(x, 1)$.



(c) Curvas de nível da função penalizada $q(x, 2)$.



(d) Curvas de nível da função penalizada $q(x, 5)$.

Figura 3.7: A medida que aumentamos o parâmetro c de penalização a solução do problema irrestrito converge à solução do problema original.

Voltando agora ao problema original, vamos considerar que x^{k+1} é um minimizador global

de (3.1.2) com $c = c^k$. Se $h(x^1) = 0$, então x^1 é um ponto factível e

$$f(x^1) = q(x^1, c^0) \leq q(x, c^0) = f(x)$$

para todo x factível. Portanto, x^1 é uma solução de (3.1.1). Porém, se $((h(x^1))^2 > 0$, devemos atualizar o parâmetro penalizador c para um valor $c^1 > c^0$ e resolver o problema (3.1.2) para este novo parâmetro. Se o ponto de mínimo global x^2 , satisfaz $h(x^2) = 0$, tem-se então que x^2 é um ponto ótimo de (3.1.1), caso contrário, adota-se $c^2 > c^1$ e resolve-se (3.1.2) novamente. Esse processo força os valores de x^k a se aproximarem do conjunto viável. Portanto, quando for obtida a viabilidade, com certa tolerância, podemos interromper o processo e declarar que encontramos uma boa aproximação para a solução do problema original.

A Proposição 3.1.4, descrita a seguir, garante a veracidade da ideia apresentada neste último parágrafo, que pode ser resumida com a sentença que diz que quando c aumenta, x torna-se mais viável.

Proposição 3.1.4. Seja x^{k+1} a solução de (3.1.2) com $c = c^k$, então

$$q(x^k, c^{k-1}) \leq q(x^{k+1}, c^k); \quad (3.1.4)$$

$$P(x^{k+1}) \leq P(x^k); \quad (3.1.5)$$

e

$$f(x^{k+1}) \geq f(x^k). \quad (3.1.6)$$

Demonstração. Pela otimalidade de x^k e x^{k+1} , o fato de $c^{k+1} > c^k$ e $P(x^{k+1}) \geq 0$ temos que

$$q(x^{k+1}, c^k) = f(x^{k+1}) + c^k P(x^{k+1}) \geq f(x^{k+1}) + c^{k-1} P(x^{k+1}) \geq f(x^k) + c^{k-1} P(x^k) = q(x^k, c^{k-1}). \quad (3.1.7)$$

Assim (3.1.4) está provado.

Segue ainda da condição de otimalidade de x^k e x^{k+1} que

$$f(x^k) + c^{k-1} P(x^k) \leq f(x^{k+1}) + c^{k-1} P(x^{k+1}) \quad (3.1.8)$$

e

$$f(x^{k+1}) + c^k P(x^{k+1}) \leq f(x^k) + c^k P(x^k). \quad (3.1.9)$$

Somando as desigualdades (3.1.8) e (3.1.9) obtemos

$$(c^k - c^{k-1})P(x^{k+1}) \leq (c^k - c^{k-1})P(x^k). \quad (3.1.10)$$

Como $c^k > c^{k-1}$, dividindo ambos os lados de (3.1.10) por $(c^k - c^{k-1})$, obtemos a prova de (3.1.5).

Considerando (3.1.8) e (3.1.5) obtemos

$$f(x^k) + c^{k-1}P(x^k) \leq f(x^{k+1}) + c^{k-1}P(x^{k+1}) \leq f(x^{k+1}) + c^kP(x^k),$$

o que prova (3.1.6). □

O Exemplos 3.1.1, 3.1.2 e 3.1.3 ilustraram a penalização para alguns valores de c . Neles foi possível ver que quanto maior o valor c , maior é o “custo” para sair da região viável. O Exemplo 3.1.5 ilustra o funcionamento do método como um todo.

Exemplo 3.1.5. Consideremos o problema

$$\min 2x_1^2 + x_2$$

sujeito a

$$x_1 - 2x_2 - 1 = 0.$$

A função objetivo penalizada é

$$q(x, c) = 2x_1^2 + x_2 + c(x_1 - 2x_2 - 1)^2.$$

Das condições de primeira ordem obtém-se

$$\nabla q(x, c) = \begin{pmatrix} 4x_1 + 2c(x_1 - 2x_2 - 1) \\ 1 - 4c(x_1 - 2x_2 - 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Resolvendo o sistema, chega-se a

$$x(c) = \left(-\frac{1}{8}, -\frac{1}{8c} - \frac{9}{16} \right)^T.$$

Como

$$\lim_{c \rightarrow \infty} x(c) = \left(-\frac{1}{8}, -\frac{9}{16} \right)^T,$$

então o ponto

$$\left(-\frac{1}{8}, -\frac{9}{16} \right)^T$$

é a solução do problema.

O gráfico representado na Figura 3.8 ilustra a trajetória dos pontos $x(c)$ das soluções dos problemas penalizados. Observe que os pontos $x(c)$ não são viáveis, porém $\lim_{c \rightarrow \infty} x(c) = x^*$, ou seja, o método apresenta convergência assintótica.

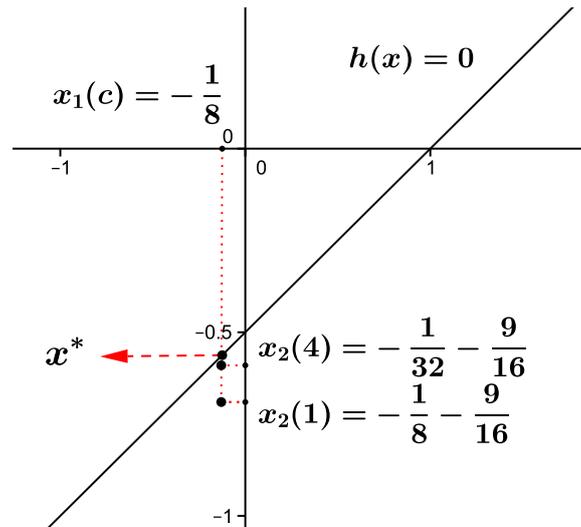


Figura 3.8: Trajetória das soluções dos problemas penalizados. O ponto $x(c)$ não está na reta $h(x) = 0$, mas $x(c)$ tende a x^* quando c tende a $+\infty$.

A seguir, apresentaremos um algoritmo para o Método de Penalidade (maiores detalhes sobre este algoritmo podem ser obtidos em [17]).

Algoritmo 3.1 Método de penalidade

1. Escolha escalares $\varepsilon > 0$, $\gamma > 1$ e um número $c^0 > 0$. Faça $k := 0$;
 2. Determine uma solução x^{k+1} do problema (3.1.2) com $c = c^k$;
 3. Se $P(x^{k+1}) \leq \varepsilon$, termine. Caso contrário, vá para o passo (4);
 4. Escolha $c^{k+1} = \gamma c^k$, tome $k := k + 1$. Retorne ao passo(2).
-

A convergência global do Método de Penalidade, ou mais precisamente a verificação de que qualquer ponto limite da sequência x^1, x^2, \dots de pontos gerados pelo método convergem à solução do problema, fica garantida com o próximo teorema. Sua demonstração usa a Proposição 3.1.4 mas é um pouco mais elaborada e, por simplicidade, vamos omiti-la aqui.

Teorema 3.1.6. Seja $\{x^k\}$ uma sequência gerada pelo Método de Penalidade. Então todo ponto limite dessa sequência será uma solução do problema (3.1.1).

Demonstração. Ver [13]. □

O critério de parada, estabelecido no passo (3) do Algoritmo 3.1, baseia-se no fato de que, dado um ε muito pequeno, o termo de penalização $P(x^k) = (h(x^k))^2$ estará muito próximo de 0, assim $h(x^k) \approx 0$. Desta forma, x^k é um ponto muito próximo de ser factível e já vimos que se x^k é viável então ele é a solução do problema original (3.1.1). Vale ainda ressaltar que a

solução x^{k+1} determinada pelo passo (2) pode ser obtida usando algum método de minimização irrestrita, geralmente partindo de x^k , solução do último problema irrestrito.

A seguir veremos um exemplo de aplicação do Algoritmo 3.1.

Exemplo 3.1.7. Consideremos o problema

$$\min(2x_1 + 1)^2 + (x_2 + 2)^2$$

sujeito a

$$x_1 + x_2 = 0.$$

Este é um problema de programação convexa e a única solução é $x^* = (0, 0)$. O termo penalizador é $P(x) = (h(x))^2 = (x_1 + x_2)^2$. A função objetivo penalizada é

$$q(x, c) = (2x_1 + 1)^2 + (x_2 + 2)^2 + \frac{c}{2}(x_1 + x_2)^2.$$

Um ponto de mínimo global é obtido resolvendo o sistema $\nabla q(x, c) = 0$, que neste caso é dado por.

$$\nabla q(x, c) = \begin{pmatrix} 4(2x_1 + 1) + c(x_1 + x_2) \\ 2(x_2 + 2) + c(x_1 + x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Cuja solução é

$$x(c) = \left(-\frac{4}{8 + 5c}, -\frac{16}{8 + 5c} \right)^T.$$

Aplicando o algoritmo para $c^0 = 1$, $\varepsilon = 10^{-6}$ e $\gamma = 10$, note que $c^{k+1} = 10c^k$, assim $c^k = 10^k$. Logo,

$$\begin{aligned} x^{k+1}(c^k) &= \left(-\frac{4}{8 + 5 \cdot 10^k}, -\frac{16}{8 + 5 \cdot 10^k} \right)^T \Rightarrow \\ \Rightarrow P(x^{k+1}) &= \left(-\frac{4}{8 + 5 \cdot 10^k} - \frac{16}{8 + 5 \cdot 10^k} \right)^2 = \left(-\frac{20}{8 + 5 \cdot 10^k} \right)^2. \end{aligned}$$

Desta forma,

$$P(x^{k+1}) \leq 10^{-6} \Leftrightarrow \left(-\frac{20}{8 + 5 \cdot 10^k} \right)^2 \leq 10^{-6} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{20}{8 + 5 \cdot 10^k} \right) \leq 10^{-3} \Leftrightarrow \frac{20}{10^{-3}} \leq 8 + 5 \cdot 10^k \Leftrightarrow 20000 \leq 8 + 5 \cdot 10^k \Leftrightarrow \frac{19992}{5} \leq 10^k \Leftrightarrow k \geq 4.$$

Portanto, o algoritmo termina na quinta iteração, já que começamos de $k = 0$. A seguir, faremos as duas primeiras iterações.

Iteração 0: O problema $\min q(x, c^0)$ tem o ponto de mínimo global $x(1) = \left(-\frac{4}{8+5 \cdot 1}, -\frac{16}{8+5 \cdot 1} \right)$. Como $P(x(1)) = P\left(-\frac{4}{13}, -\frac{16}{13}\right) = \left(-\frac{20}{13}\right)^2 \geq \varepsilon$, o algoritmo continua com o próximo passo, ou seja, vai para o passo (4).

Iteração 1: Nesta iteração $c^1 = 10$. O problema $\min q(x, c^1)$ tem o ponto de mínimo global

$x(10) = \left(-\frac{4}{8+5 \cdot 10}, -\frac{16}{8+5 \cdot 10}\right)$. Como $P\left(-\frac{4}{58}, -\frac{16}{58}\right) = \left(-\frac{20}{58}\right)^2 \geq \varepsilon$, o algoritmo continua com o próximo passo.

Mais um vez, note que os pontos $x(c)$ não são viáveis, mas $\lim_{c \rightarrow \infty} x(c) = (0, 0)$, que é a solução do problema. A Tabela 3.1 apresenta os resultados das cinco iterações, os três primeiros estão ilustrados na Figura 3.9.

Tabela 3.1: Método de Penalidade aplicado ao Exemplo 3.1.7

k	c^k	x_1^k	x_2^k	P
0	1	-0,307692	-1,230769	2,3668639053
1	10	-0,068966	-0,275862	0,1189060642
2	100	-0,007874	-0,031496	0,0015500031
3	1000	-0,000799	-0,003195	0,0000159489
4	10000	-0,000080	-0,000320	0,0000001599

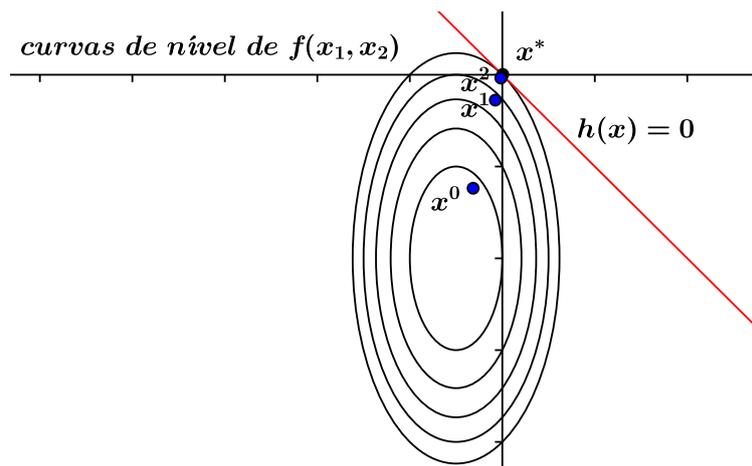


Figura 3.9: Trajetória dos pontos obtidos com as três primeiras iterações do Algoritmo do Método de Penalidade.

Voltemos ao problema descrito em (3.1.3). Das condições de primeira ordem para este problema tem-se

$$\nabla f(x) + ch(x)\nabla h(x) = 0,$$

ou, equivalentemente,

$$\nabla f(x) = \nabla h(x)(-ch(x)). \quad (3.1.11)$$

Como estamos tratando de um processo iterativo, cuja solução é x^{k+1} temos

$$\nabla f(x^k) = \nabla h(x^k)(-c^k h(x^k)). \quad (3.1.12)$$

Com isso obtemos que $\nabla f(x^k)$ é um múltiplo de $\nabla h(x^k)$ e podemos definir

$$\lambda^{k+1} = -c^k h(x^{k+1}). \quad (3.1.13)$$

Se x^* é um ponto *KKT* do problema, espera-se que, x^k convirja à x^* e λ^k convirja à λ^* quando k tender ao infinito, onde λ^* é o multiplicador de Lagrange associado a x^* , conforme estudado na seção anterior. Como $\lambda^k = c^k h(x^k)$ e $h(x^*) = 0$, só podemos ter que $\lambda^* \neq 0$ se c^k tender ao infinito.

Na próxima seção apresentaremos o Método do Lagrangiano Aumentado. A vantagem deste método com relação ao Método de Penalidade é que o parâmetro c não precisa tender ao infinito para que a convergência seja garantida. Esta propriedade resulta em um método que, do ponto de vista computacional, é mais estável. Para isso, usaremos estimativas dos multiplicadores de Lagrange, que serão dadas de modo semelhante ao que foi descrito nos parágrafos anteriores.

3.2 Método do Lagrangiano Aumentado

Assim como no Método de Penalidade, o Método do Lagrangiano Aumentado busca a solução de um problema de otimização com restrições resolvendo uma série de problemas sem restrições. A principal diferença, encontra-se no fato de que no novo método, além do termo penalizador, a função objetivo é acrescida também de múltiplos das restrições. Neste caso, a função penalizada é o Lagrangiano do problema restrito, enquanto no primeiro método a penalização é atribuída apenas à função objetivo original do problema. Além disso, no Método de Penalidade, para que haja convergência à solução do problema original, o parâmetro c de penalização tende ao infinito, fato que ocasiona instabilidade numérica. Veremos neste texto que este problema não ocorre no Método do Lagrangiano Aumentado, isso porque em muitas vezes o parâmetro de penalidade não precisa tender ao infinito para que a sequência convirja à solução do problema original.

Consideremos, novamente, o seguinte problema de otimização:

$$\min f(x) \quad \text{sujeito a} \quad h(x) = 0, \quad (3.2.1)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, são funções suaves. Conforme definido em (2.2.5) a função

Lagrangiana associada ao problema (3.2.1) é

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T h(x) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i h_i(x). \quad (3.2.2)$$

Se x^* é minimizador regular de (3.2.2), as condições de primeira ordem, estabelecidas em (2.2.4), garantem a existência de $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*) = 0, \quad (3.2.3)$$

o que é equivalente a

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla h_i(x^*) = 0. \quad (3.2.4)$$

Por ser um problema restrito, os candidatos a ponto ótimo são obtidos a partir da solução do sistema

$$\begin{cases} \nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla h_i(x) = 0 \\ h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (3.2.5)$$

Note que resolver o problema (3.2.1) equivale a solucionar o seguinte problema

$$\min L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T h(x) \quad \text{sujeito a} \quad h_i(x) = 0, \quad (3.2.6)$$

pois $L(x, \lambda) = f(x)$ quando $h(x) = 0$.

Veremos, a seguir, que o Método do Lagrangiano Aumentado consiste na aplicação do Método de Penalidade para obter a solução do problema (3.2.6) e que os multiplicadores de Lagrange não são fixos, isto é, são atualizados de modo a tentar satisfazer a primeira equação em (3.2.5).

Vejam um exemplo de como funciona o método. Para isso, vamos começar pensando em resolver o problema (3.2.1) pelo Método de Penalidades. Neste caso, o problema sem restrição a ser resolvido é

$$\min f(x) + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2. \quad (3.2.7)$$

Suponhamos que tenhamos adotado $c^0 = 10$ como parâmetro do termo penalizador e a solução obtida tenha sido x^1 . Consideremos, para efeito de ilustração, que as curvas de nível das restrições do problema (3.2.1) sejam tais como as da Figura 3.10.

Observe na Figura 3.10 que $h(x^1) = 3$, logo $\frac{c^0}{2} \|h(x^1)\|^2 = 5 \|3\|^2 = 45$, ou seja, $f(x^1) + 45$ é menor do que $f(x)$ para todo x em que $h(x) = 0$. A grosso modo, isso significa que vale a pena ficar 3 unidades inviável para reduzirmos a função objetivo. Como $h(x^1) \neq 0$, o próximo passo no Método de Penalidade seria atualizar c^0 para $c^1 > 10$. Ao invés disso, aplicaremos novamente o Método de Penalidades com uma nova restrição do tipo $h(x) + 3 = h(x) + h(x^1) = 0$. A intensão

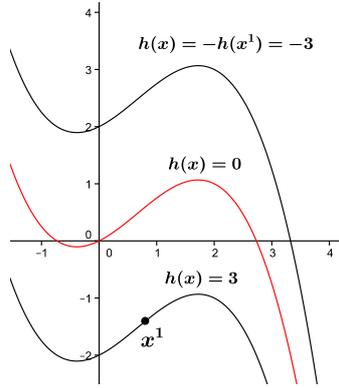


Figura 3.10: Curvas de nível $h(x) = k$, $k \in \{-3, 0, 3\}$.

disso é que, se for mantido o mesmo desvio com relação à região viável quando resolvido o novo problema, isto é, de três unidades, então o novo ponto será viável para o problema original. Com isso, o novo problema a ser resolvido é

$$\min f(x) + \frac{c}{2} \|h(x) + h(x^1)\|^2. \quad (3.2.8)$$

Em (3.2.8) estamos penalizando os pontos que estão fora da restrição $h(x) + h(x^1) = 0$, isto é, a penalização é atribuída aos pontos que não pertencem à restrição $h(x) = -3$. Este artifício corresponde a um deslocamento da restrição de três unidades. Não há garantia de que neste novo problema a solução encontrada estará em uma região com o mesmo desvio da restrição penalizada, a não ser que f e h tenham certa simetria em torno do conjunto viável.

A princípio, vamos supor que o deslocamento seja o mesmo e, portanto, a solução x^2 obtida a partir de (3.2.8) vai satisfazer a restrição $h(x) = 0$. Da mesma forma que no Método de Penalidades, x^2 será também a solução do problema (3.2.1), uma vez que

$$f(x^2) + \frac{c}{2} \|h(x^1)\|^2 = f(x^2) + \frac{c}{2} \|h(x^2) + h(x^1)\|^2 \leq f(x) + \frac{c}{2} \|h(x) + h(x^1)\|^2 = f(x) + \frac{c}{2} \|h(x^1)\|^2,$$

para todo x viável e portanto $f(x^2)$ é o menor valor de função objetivo no conjunto factível. Porém, caso $h(x^2) \neq 0$, o processo continua.

Para entender melhor como seriam os próximos passos, vamos desenvolver o quadrado em (3.2.8) obtendo

$$\min f(x) + c \sum_{i=1}^m h_i(x^1)h_i(x) + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2 + \frac{c}{2} \|h(x^1)\|^2. \quad (3.2.9)$$

Para uma função g arbitrária, sabe-se que o minimizador de $g(x)$ é igual ao minimizador de $g(x) + w$, sendo w uma constante. Então, conforme descrito anteriormente, $c^0 = 10$ e

$h(x^1) = 3$, a última parcela, $\frac{c}{2} \|h(x^1)\|^2 = 45$, pode ser descartada. Desse modo, resolver (3.2.9), que é mesmo que (3.2.8) em sua forma estendida, equivale a resolver

$$\min f(x) + c \sum_{i=1}^m h_i(x^1) h_i(x) + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2. \quad (3.2.10)$$

Como vimos em (3.1.13), $\lambda^1 = c^0 h(x^1)$ é uma aproximação para os multiplicadores de Lagrange. Deste modo, vemos que o problema (3.2.8) é equivalente a aplicarmos o Método de Penalidades Quadráticas à Lagrangiana apresentada em (3.2.2), ou seja, fixamos c e λ e minimizamos em x a função

$$q(x, \lambda, c) = f(x) + \lambda^T h(x) + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2. \quad (3.2.11)$$

A função definida em (3.2.11) é denominada de Lagrangiano Aumentado do problema (3.2.1). Vamos agora retornar ao processo de deslocamentos para o caso em que x^2 obtido ainda não seja viável. Desta forma, precisamos fazer um novo ajuste para tentar compensar a inviabilidade em x^2 . Com isso, o problema a ser resolvido será

$$\min f(x) + \frac{c^0}{2} \|h(x) + h(x^1) + h(x^2)\|^2, \quad (3.2.12)$$

que é equivalente a

$$\min f(x) + (c^0 h(x^1) + c^0 h(x^2))^T h(x) + \frac{c^0}{2} \|h(x)\|^2. \quad (3.2.13)$$

A comparação de (3.2.11) e (3.2.13) permite concluir que

$$\begin{cases} \lambda^1 = c^0 h(x^1) \\ \lambda^2 = \lambda^1 + c^0 h(x^2) \end{cases}. \quad (3.2.14)$$

Neste ponto, temos condição de perceber que estamos tratando de um processo iterativo. A partir de (3.2.14), podemos obter uma generalização para a atualização dos multiplicadores de Lagrange, isto é,

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + c^k h(x^{k+1}). \quad (3.2.15)$$

Perceba que temos adotado $\|h(x) + \sum_{i=1}^k h(x^i)\|^2$ como função penalizadora. Como $\sum_{i=1}^k h(x^i)$ não depende de x , denotaremos por W o vetor constante associada a esta soma. Deste modo, o problema a ser resolvido em cada iteração é da forma

$$\min f(x) + \frac{c}{2} \|h(x) + W\|^2. \quad (3.2.16)$$

Das condições de primeira ordem para (3.2.16) tem-se que

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^m c(h_i(x) + W_i) \nabla h_i(x) = 0. \quad (3.2.17)$$

A substituição de $(ch_i(x) + cW_i)$ por λ_i , em (3.2.17) leva a

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla h_i(x) = 0. \quad (3.2.18)$$

A equação (3.2.18) é a primeira equação do sistema associado às condições necessárias de primeira ordem exibidas em (3.2.5). Logo, resta apenas a segunda equação daquele sistema, ligada à viabilidade, para ser satisfeita. Se esta condição for satisfeita, obtemos que $W_i = \frac{\lambda_i}{c_i}$. Muitas vezes, a melhora da viabilidade ocorre como consequência dos deslocamentos empregados no método. Entretanto, caso não esteja ocorrendo um progresso suficiente, devemos adotar um valor maior para o parâmetro de penalidade, fazendo $c^{k+1} > c^k$.

No Algoritmo 3.2 está descrito o funcionamento do Método do Lagrangiano Aumentado.

Algoritmo 3.2 Método do Lagrangiano Aumentado

Escolher $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$, $\lambda^0 \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, $c^0 > 0$, $r \in (0, 1)$ e $\gamma > 1$. Tomar $k := 0$.

1. Calcular $x^{k+1} \in \mathbb{R}^n$, um minimizador da função objetivo dada pela fórmula (3.2.11) com $c = c^k$ e $\lambda = \lambda^k$;
 2. Tomar λ^{k+1} como a projeção de $\lambda^k + c^k h(x^{k+1})$ em $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$;
 3. Se $k \geq 1$ e $\|h(x_{k+1})\| \geq r \|h(x_k)\|$, adotar $c^{k+1} = \gamma c^k$, caso contrário $c^{k+1} = c^k$;
 4. Tomar $k := k + 1$ e retornar ao passo 1.
-

Assim como no Método de Penalidade, o Algoritmo 3.2 tem a propriedade de que todo ponto limite da sequência gerada por ele é a solução do problema original. A demonstração deste fato foge da proposta deste texto, mas pode ser encontrada em [10].

No passo 3, o algoritmo pede para tomar $c^{k+1} > c^k$ em certas ocasiões. Em princípio, gostaríamos de deixar c^k fixo, todavia esta estratégia não funcionará sempre. Entretanto, o Teorema 3.2.1 enunciado a seguir, cuja demonstração pode ser encontrada em [3], garante que em certas condições, a sequência $\{c^k\}$ dos parâmetros de penalidades gerada pelo Método do Lagrangiano Aumentado é limitada. Isso confere ao método grande vantagem quando comparado ao Método de Penalidades, por reduzir a possibilidade de mau condicionamento dos subproblemas, uma vez que no Método de Penalidades c^k tende a infinito.

Teorema 3.2.1. Sejam as hipóteses listadas abaixo

1. A sequência $\{x^k\}$ gerada pelo algoritmo converge à x^* ;

2. O ponto x^* é viável ($h_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$);
3. Os vetores gradientes das restrições $\nabla h_i(x^*)$ são linearmente independentes;
4. As funções f e h são duas vezes diferenciáveis numa vizinhança do ponto x^* com derivadas segundas contínuas neste ponto;
5. O ponto x^* satisfaz as condições suficientes de segunda ordem associado a $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$;
6. Para todo $i = 1, \dots, m, \lambda_i^* \in (\lambda_{\min}, \lambda_{\max})$.

Se as hipóteses (1 - 6) forem satisfeitas, então a sequência $\{c_k\}$ dos parâmetros de penalidade é limitada.

Demonstração. A demonstração pode ser encontrada em [3]. □

O Exemplo 3.2.2 é uma aplicação do Algoritmo 3.2 a um problema específico.

Exemplo 3.2.2. Consideremos o problema

$$\min(2x_1 + 1)^2 + (x_2 + 2)^2$$

sujeito a

$$x_1 + x_2 = 0.$$

A função Lagrangiana para o problema é

$$L(x_1, x_2) = (2x_1 + 1)^2 + (x_2 + 2)^2 + \lambda(x_1 + x_2).$$

Das condições de primeira ordem para a Lagrangiana tem-se que

$$\begin{cases} \nabla f(x) + \lambda \nabla h(x) = 0 \\ h(x) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \begin{pmatrix} 4(2x_1 + 1) \\ 2(x_2 + 2) \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ x_1 + x_2 = 0 \end{cases},$$

cujas soluções são $x^* = (0, 0)^T$ e $\lambda^* = -4$. Deste modo, $(0, 0)$ é o único candidato a minimizador do problema. A partir de agora, aplicaremos o método do Lagrangiano Aumentado para resolver o problema.

A função Lagrangiana Aumentada, tal como definida em (3.2.11) é

$$q(x, \lambda, c) = (2x_1 + 1)^2 + (x_2 + 2)^2 + \lambda(x_1 + x_2) + \frac{c}{2}(x_1 + x_2)^2.$$

Para esta função temos

$$\nabla_x q(x, \lambda, c) = \begin{pmatrix} 4(2x_1 + 1) + \lambda + c(x_1 + x_2) \\ 2(x_2 + 2) + \lambda + c(x_1 + x_2) \end{pmatrix}$$

e

$$\nabla_x^2 q(x, \lambda, c) = \begin{pmatrix} 8 + c & c \\ c & 2 + c \end{pmatrix}.$$

Esta matriz Hessiana depende apenas do parâmetro c , que é sempre positivo. Como o determinante de $\nabla_x^2 q(x, \lambda, c)$ é $10c + 16 > 0$ e sua diagonal é positiva, teremos que $\nabla_x^2 q(x, \lambda, c)$ será sempre definida positiva. Desta forma, os pontos estacionários dos subproblemas serão de fato minimizadores. Além disso, adotaremos $\lambda^0 = 0$, $c^0 = 10$ e $r = 0.5$, com isso, veremos que $c^k = 10$, para todo k , ou seja, manteremos o parâmetro de penalidade constante. O primeiro subproblema será, portanto:

$$\min q(x, 0, 10) = (2x_1 + 1)^2 + (x_2 + 2)^2 + \frac{10}{2}(x_1 + x_2)^2.$$

A condição de primeira ordem para este problema estabelece que $\nabla q(x, 0, 10) = 0$, logo

$$\begin{pmatrix} 4(2x_1 + 1) + 10(x_1 + x_2) \\ 2(x_2 + 2) + 10(x_1 + x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = -\frac{4}{58} \\ x_2 = -\frac{16}{58} \end{cases}.$$

Portanto, o candidato a minimizador de $q(x, 0, 10)$ é $x^1 = (-\frac{4}{58}, -\frac{16}{58})^T$.

Como $h(x^1) = -\frac{20}{58} \neq 0$, o processo deve continuar. Para isso, devemos atualizar o multiplicador de Lagrange, da forma como definida em (3.2.15). Assim, temos

$$\lambda^1 = \lambda^0 + c^0 h(x^1) = 0 + 10 \left(-\frac{20}{58} \right) = -\frac{200}{58}.$$

O novo subproblema irrestrito, é, portanto

$$\min q \left(x, -\frac{200}{58}, 10 \right) = (2x_1 + 1)^2 + (x_2 + 2)^2 - \frac{200}{58}(x_1 + x_2) + \frac{10}{2}(x_1 + x_2)^2.$$

Uma vez que a condição de primeira ordem determina que $\nabla q \left(x, -\frac{200}{58}, 10 \right) = 0$, temos que

$$\nabla_x q \left(x, -\frac{200}{58}, 10 \right) = \begin{pmatrix} 4(2x_1 + 1) - \frac{200}{58}x_1 + 10(x_1 + x_2) \\ 2(x_2 + 2) - \frac{200}{58}x_2 + 10(x_1 + x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = -\frac{8}{841} \\ x_2 = -\frac{32}{841} \end{cases}.$$

Portanto, o minimizador de $q \left(x, -\frac{200}{58}, 10 \right)$ é $x^2 = \left(-\frac{8}{841}, -\frac{32}{841} \right)^T$. Neste ponto temos que $h(x^2) = \left(-\frac{8}{841} - \frac{32}{841} \right) = \left(-\frac{40}{841} \right) \approx -0,05$. Caso queiramos melhorar a precisão, devemos continuar o processo. Faremos isso, a partir de agora, com o uso de uma fórmula de recorrência.

Fazendo $\nabla_x q(x_1, x_2, \lambda, c) = 0$, obtém-se

$$\nabla_x q \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4(2x_1 + 1) + \lambda + c(x_1 + x_2) \\ 2(x_2 + 2) + \lambda + c(x_1 + x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Para este sistema a solução é

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{4+\lambda}{8+5c} \\ -4 \left(\frac{4+\lambda}{8+5c} \right) \end{pmatrix}.$$

Mais uma vez, note que $\lambda^* = -4$ implica $x^* = (0, 0)^T$, para qualquer valor de c .

De (3.2.15) tem-se que a fórmula de recorrência para a atualização do λ neste problema é dada por $\lambda^{k+1} = \lambda^k + c h(x^{k+1})$. Como

$$h(x^{k+1}) = x_1^{k+1} + x_2^{k+1} = -\frac{4 + \lambda^k}{8 + 5c} - 4 \left(\frac{4 + \lambda^k}{8 + 5c} \right) = -5 \left(\frac{4 + \lambda^k}{8 + 5c} \right),$$

temos,

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k - 5c \left(\frac{4 + \lambda^k}{8 + 5c} \right).$$

A Tabela 3.2 mostra os resultados das iterações calculadas a partir do algoritmo do Lagrangiano Aumentado com c constante igual a 10, já que em todas as iterações a inviabilidade foi reduzida, pelo menos à metade.

Tabela 3.2: Método do Lagrangiano Aumentado

k	x_1^k	x_2^k	λ^k	$ h $
0	-	-	0	-
1	-0,068966	-0,275862	-3,448276	0,344828
2	-0,009512	-0,038050	-3,923900	0,047562
3	-0,001312	-0,005248	-3,989503	0,006560
4	-0,000181	-0,000724	-3,998552	0,000905
5	-0,000025	-0,000100	-3,999800	0,000125
6	-0,000003	-0,000014	-3,999972	0,000017
7	0,000000	-0,000002	-3,999996	0,000002

Este mesmo problema foi resolvido no Exemplo 3.1.7, quando tratamos do Método de Penalidades. Naquela ocasião, foi possível ver que, dado o parâmetro inicial $c^0 = 1$ e $c^{k+1} = 10c^k$, o algoritmo precisava de 5 iterações para obter $h(x) \approx -0,0004$, ou seja, o erro admitido era da ordem de 10^{-3} . Na quinta iteração o parâmetro de penalidade atinge o valor $c = 10000$. Pela Tabela 3.2 veja que a mesma precisão também foi obtida na quarta iteração no Método do Lagrangiano Aumentado, pois $h(x^4) \approx -0,000905$, novamente um erro no ordem de 10^{-3} . Além disso, em todas as iterações o parâmetro de penalidade utilizado foi $c = 10$, o que melhora o condicionamento do problema resolvido.

Nos capítulos seguintes usaremos o software ALGENCAN na resolução dos problemas de otimização que apresentaremos. ALGENCAN é um programa computacional desenvolvido pelos integrantes do projeto TANGO ¹ para resolução de problemas de programação não linear, que tem por base um método do Lagrangiano Aumentado. O programa é codificado em FORTRAN, suporta um grande número de variáveis e restrições nos problemas a serem resolvidos e é implementado de maneira eficiente, de modo a obter uma boa velocidade na resolução dos mesmos. Nos capítulos anteriores, abordamos somente problemas com restrições de igualdade, entretanto, é possível estender estas ideias para desigualdades e ALGENCAN contempla também este caso.

Um tutorial inicial para utilização de ALGENCAN encontra-se na dissertação [15]. Com este mesmo espírito, nós também criamos um tutorial básico para utilização de ALGENCAN, que está disponível em

<https://drive.google.com/file/d/0B5GtHLr2LmzcdGY5ajlKcVA0Zjg/view?ths=true>

¹ TANGO: (TRUSTABLE ALGORITHMS FOR NONLINEAR GENERAL OPTIMIZATION) - projeto desenvolvido por uma parceria entre o Departamento de Matemática Aplicada da Universidade Estadual de Campinas e o Departamento de Computação Científica da Universidade de São Paulo, trata-se de um conjunto de rotinas para otimização codificadas em FORTRAN.

É importante ressaltar que estes tutoriais não têm a intenção de esgotar o assunto ALGENCAN, mas sim de servir como uma abordagem inicial. Para um maior entendimento recomenda-se a leitura do livro cuja referência está em [6] e das próprias instruções do site do projeto TANGO.

Capítulo 4

PROBLEMAS DE EMPACOTAMENTO EM CONTÊINERES SIMPLES

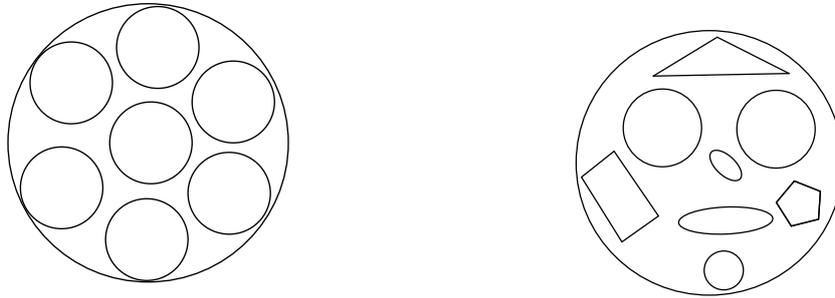
Os problemas de empacotamento consistem em distribuir itens em um contêiner R , isto é, num subconjunto R do espaço. Embora existam diferentes possibilidades de empacotamentos, todas elas tem ao menos dois pontos em comum, são eles:

- dois itens quaisquer do arranjo não podem ocupar o mesmo espaço;
- todos os itens devem estar inteiramente contidos no interior de R .

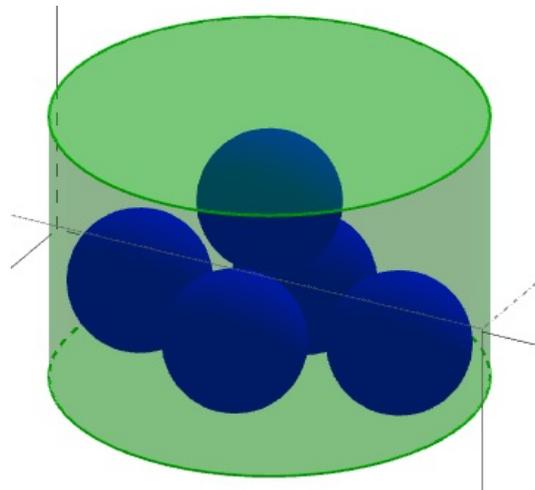
Três exemplos de empacotamento estão ilustradas na Figura 4.1.

Neste capítulo, estudaremos alguns problemas de empacotamento em contêineres bidimensionais, tal como o ilustrado na Figura 4.1(a), que representa um empacotamento de itens circulares de raio constante em um contêiner simples. Especificamente, estudaremos aqui o empacotamento de itens circulares idênticos em contêineres circulares, quadrangulares e triangulares. No capítulo seguinte, trataremos o caso de contêineres elípticos e estudaremos alguns problemas de empacotamentos em uma região limitada inferiormente pela quadrática $y = x^2$ e superiormente pela reta $y = c$ e, por último, uma análise similar será destinada à quártica $y = x^4$. No texto que segue, chamaremos de Λ ao conjunto de índices e de B_i o i -ésimo item do arranjo, com $i \in \Lambda$.

Os problemas de empacotamento de círculos são, do ponto de vista matemático, instigantes e desafiadores. No entanto, a motivação para o estudo destes problemas transcendem os aspectos puramente teóricos da matemática e encontra ambiência nas diversas aplicações que se desenvolvem a partir deles. Algumas destas aplicações são inclusive contra-intuitivas, ou seja, difíceis de serem imaginadas por pessoas leigas. Este é o caso, por exemplo, dos "Códigos Corretores de Erros", ou seja, códigos utilizados para corrigir os erros que ocorrem por influência de diversos fatores nas comunicações via computador, rádio, televisão e satélites. Estes



(a) Círculos de raio 1 em um contêiner circular. (b) Itens diferentes em um contêiner circular.



(c) Esferas de raio 1 em um contêiner cilíndrico.

Figura 4.1: Formas de empacotamento.

erros fazem com que uma determinada mensagem enviada por um transmissor seja diferente da mensagem decodificada pelo receptor. A solução deste problema possui estreita relação com problemas de empacotamento esférico, maiores detalhes podem ser encontrados em [1].

Outras aplicações são mais tangíveis, como por exemplo as aplicações voltadas para a indústria. Para este caso, o artigo [2] traz uma série de ilustrações. Algumas delas são descritas a seguir:

- Indústria de motores elétricos: dentre outras peças, os motores elétricos são compostos por algumas circulares, como é o caso dos rotores, que em geral são fabricados por materiais caros, como o aço de silício. Neste caso, a preocupação da indústria é: Dada uma chapa de aço, como extrair peças circulares de modo a desperdiçar a menor quantidade de material

possível? Este problema está relacionado com a redução de custos;

- Indústria de papel: neste setor, os produtos são entregues tanto em folhas planas como em bobinas. Um dos custos que influenciam diretamente no preço do produto está relacionado com a armazenagem e com o transporte, que são custos logísticos. No caso do papel entregue em bobinas, a preocupação que se tem é: como colocá-las em pallets de modo a conseguir armazenar uma maior quantidade de bobinas utilizando a menor área possível?;
- Layouts de rede de comunicações sem fios: aqui o problema identificado é onde colocar os transceptores para que a cobertura do sinal seja a máxima possível. Problema semelhante à alocação das torres de rádio, que consiste em determinar os pontos estratégicos para a instalação das torres, de modo que a área de cobertura seja a máxima e com o mínimo de interferência possível.

Todos estes problemas estão, de alguma forma, relacionados aos problemas de empacotamento de círculos. No último caso, a diferença é que admite-se um relaxamento das restrições de não sobreposição de itens, uma vez que sinais vindo de diferentes transmissores podem alcançar uma mesma região sem que isso seja um problema. Uma possível ilustração geométrica para os casos aqui exemplificados é apresentada na Figura 4.2.

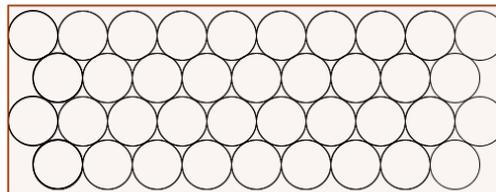


Figura 4.2: Representação geométrica para os problemas de empacotamento citado. Neste caso específico, o contêiner é um retângulo e poderia, por exemplo, representar um bloco de silício para a extração de peças circulares para a fabricação dos motores elétricos, ou um pallet e os círculos as bobinas de papel, no caso da indústria de papel. Ou ainda, os centros dos círculos poderiam representar as coordenadas das estações de rádio e o círculo a área de abrangência desta estação, para o caso do melhor Layout de rede de comunicação sem fios.

4.1 Empacotamento de itens circulares em contêineres circulares

Nesta seção, abordaremos o problema de empacotar círculos em um outro círculo. A estratégia será a de encontrar as coordenadas do centro c_i do i -ésimo item que será alocado no

interior do contêiner.

Sejam $c_i = (c_i^x, c_i^y) \in \mathbb{R}^2$ e $r_i \in \mathbb{R}$ o centro e o raio, respectivamente, do i -ésimo item considerado, para $i \in \Lambda$. Denotemos por $d(a, b)$ a distância euclidiana entre os pontos a e b . A condição de que não haja a sobreposição entre os itens empacotados depende de suas formas geométricas e, por estarmos tratando de itens circulares, tal condição pode ser representada pelo seguinte sistema de inequações (Figura 4.3)

$$d(c_i, c_j) \geq r_i + r_j, \forall i < j, i, j \in \Lambda. \quad (4.1.1)$$

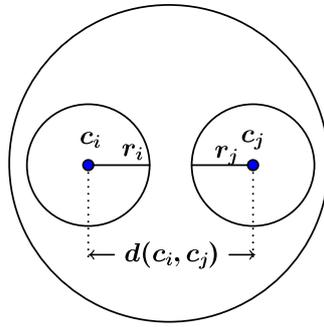


Figura 4.3: Exemplo da formulação matemática para evitar a sobreposição dos círculos.

Conforme explicado no início deste capítulo, neste tipo de problema, temos que considerar que cada item deve estar inteiramente contido no interior do contêiner. Esta restrição está associada à forma do contêiner. Como estamos tratando de um círculo, para que os itens estejam contidos em seu interior, as seguintes inequações devem ser satisfeitas

$$\rho \geq d(C, c_i) + r_i, \forall i \in \Lambda. \quad (4.1.2)$$

em que C denota o centro do contêiner e ρ o seu raio (Figura 4.4).

De (4.1.1) e (4.1.2) tem-se que para que não haja sobreposição de itens e para que eles estejam inteiramente contidos em R , os centros c_i dos itens e seus respectivos raios, devem satisfazer ao seguinte sistema de inequações

$$\begin{cases} d(C, c_i) \leq \rho - r_i, \forall i \in \Lambda \\ d(c_i, c_j) \geq r_i + r_j, \forall i < j, i, j \in \Lambda \end{cases}. \quad (4.1.3)$$

A região formada por (4.1.3) será a região viável para os problemas de otimização tratados nesta seção.

Na subseção seguinte, usaremos um modelo de programação não linear para estudar o

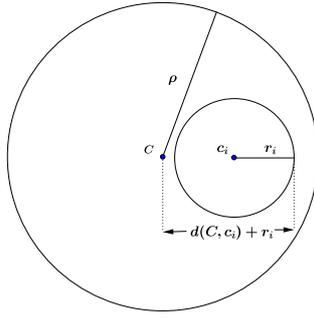


Figura 4.4: Condição de não sobreposição dos itens.

problema de encontrar a quantidade máxima de itens que podem ser alocados em contêiner circular de raio fixo.

4.1.1 Número máximo de itens circulares idênticos em um contêiner circular

Dentre as variantes existentes para os problemas de empacotamentos, nesta subseção estudaremos aquela que busca maximizar a quantidade de itens circulares idênticos no interior de um contêiner circular, sem que haja sobreposição dos mesmos.

Modelar o encaixe de itens circulares no interior de um contêiner circular é uma tarefa simples, reduz-se a perguntar se os centros dos itens estão em uma região menor com a mesma estrutura da original, chamada de r -Núcleo (Figura 4.5), conforme definido a seguir.

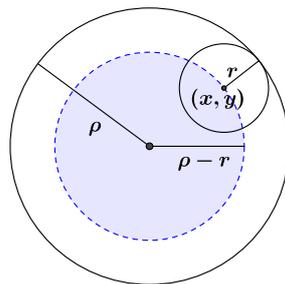


Figura 4.5: r -Núcleo de um círculo de raio ρ .

Definição 4.1.1. Seja $R \in \mathbb{R}^n$ ($n = 2, 3$) uma região, chamamos de r -Núcleo de R ao conjunto

$$K_r(R) = \{x \in R, d(x, \partial R) \geq r\}.$$

Na definição anterior ∂R representa a fronteira da região R . A Figura 4.5 mostra que o r -Núcleo de um círculo de centro C e raio ρ também é um círculo de centro C , mas raio $\rho - r$. Portanto, para modelar o empacotamento proposto é necessário encontrar o r -Núcleo do contêiner. Consideremos, para isso, que o círculo maior (contêiner) de raio ρ , esteja centrado em C , isto é, $R = B[C, \rho]$. Caso o centro de um item não esteja no interior do r -Núcleo o item não estará contido no contêiner (Figura 4.6 (b)).

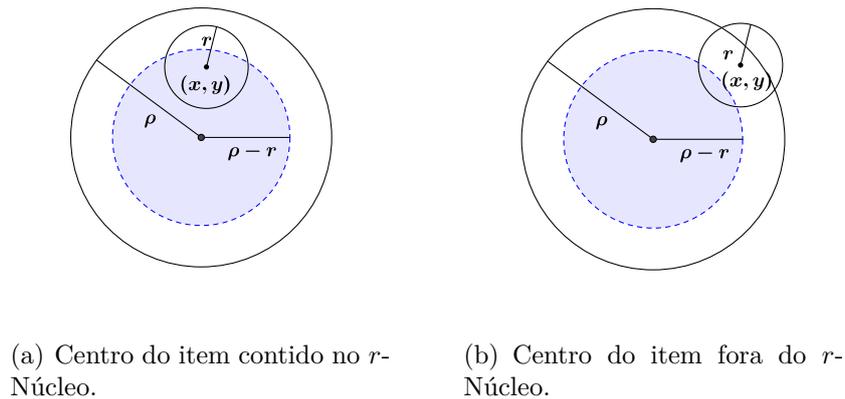


Figura 4.6: r -Núcleo.

Assim, em conformidade com a Definição 4.1.1, pode-se provar que (detalhes sobre a prova pode ser encontrado em [7])

$$K_r(R) = B[C, \rho - r].$$

Como estamos considerando itens idênticos, temos que $r_i = r_j = r$, $\forall i, j \in \Lambda$, deste modo, $r_i + r_j = 2r$. Destas observações e supondo, sem perda de generalidade, que R está centrado na origem, tem-se que o sistema definido em (4.1.3) é equivalente ao sistema

$$\begin{cases} (c_i^x)^2 + (c_i^y)^2 \leq (\rho - r)^2, \forall i \in \Lambda = \{1, \dots, k\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4r^2, \forall i < j, i, j \in \Lambda = \{1, \dots, k\} \end{cases} \quad (4.1.4)$$

Desta forma, encontrar a quantidade máxima de círculos equivale a determinar o maior valor inteiro de $k \in \Lambda$ para o qual o sistema (4.1.4) tenha solução.

Exemplo 4.1.2. Considere o problema de empacotar k discos não sobrepostos de raio $r = 1$ em um contêiner definido por $R = \{(x, y) \mid x^2 + y^2 \leq 9\}$, um círculo de raio 3 centrado na origem. Denotamos por (c_i^x, c_i^y) o centro do i -ésimo círculo a ser inserido no contêiner. Com o objetivo de encontrar a solução para este problema, devemos resolver o seguinte problema de viabilidade:

$$\begin{cases} (c_i^x)^2 + (c_i^y)^2 \leq (3 - 1)^2, \forall i = 1, \dots, k. \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4, \forall i < j \end{cases} .$$

Esse sistema tem $k + k(k - 1)/2$ inequações. As primeiras k inequações definem restrições de desigualdades e garantem que os itens estejam no interior do contêiner. As outras $k(k - 1)/2$ inequações também definem restrições de desigualdade e garantem que os itens não se sobreponham. Se o problema tem solução, então a quantidade de itens no interior do círculo é pelo menos k . Uma estratégia para descobrir a maior quantidade de discos que cabem em R , consiste em resolver uma sequência de problemas de viabilidade com k crescente.

Supondo que o limite inferior k_{li} do número de discos idênticos de raio r que podem ser colocados no contêiner é conhecido (k_{li} igual a zero é uma escolha viável), o procedimento inicia tentando resolver o problema de viabilidade com $k = k_{li} + 1$. Se uma solução viável é encontrada, atribuímos $k \leftarrow k + 1$ e tentamos novamente. O procedimento para quando k é tal que uma solução viável não pode ser encontrada e $k^* = k - 1$ é considerada a solução com a maior quantidade de itens possível.

Uma solução para este exemplo específico é apresentada na Tabela 4.1 e ilustrada na Figura 4.7:

Tabela 4.1: Coordenadas dos centros dos itens

i	c_i^x	c_i^y
1:	-1.00000000	-1.73205081
2:	1.00000000	-1.73205081
3:	-2.00000000	0.00000000
4:	0.00000000	0.00000000
5:	2.00000000	0.00000000
6:	-1.00000000	1.73205081
7:	1.00000000	1.73205081

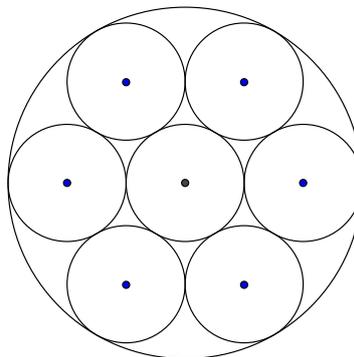


Figura 4.7: Sete itens circulares em um contêiner circular.

Observe que a quantidade máxima de itens em um contêiner circular de raio 3 é 7.

Nesta subseção, ilustramos um procedimento para encontrar a maior quantidade de itens circulares idênticos no interior de um contêiner circular de raio fixo. Na próxima, a abordagem estudada será a de encontrar o contêiner circular de menor área que contenha em seu interior um número fixo de itens circulares.

4.1.2 Contêiner circular de tamanho mínimo

Nesta subseção estudaremos uma variante dos problemas de empacotamento, que consiste em minimizar o raio ρ de um contêiner circular centrado em C , de modo a comportar em seu interior um dado número de itens circulares idênticos sem que haja a sobreposição destes itens.

Supondo que C esteja na origem e, considerando as condições (4.1.1) e (4.1.2), este problema pode ser formulado por

$$\min \rho, \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} (c_i^x)^2 + (c_i^y)^2 \leq (\rho - r)^2, \forall i \in \Lambda \\ d(c_i, c_j) \geq 2r, \forall i < j \end{cases} . \quad (4.1.5)$$

Exemplo 4.1.3. Encontrar o menor raio para que um círculo (contêiner) possa conter dois outros círculos (itens) de raio 1.

Modelagem:

$$\min \rho, \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} (c_1^x)^2 + (c_1^y)^2 - (\rho - 1)^2 \leq 0 \\ (c_2^x)^2 + (c_2^y)^2 - (\rho - 1)^2 \leq 0 \\ (c_1^x - c_2^x)^2 + (c_1^y - c_2^y)^2 \geq 4 \end{cases} .$$

As duas primeiras restrições garantem que os círculos menores estejam dentro do maior (4.1.2) e a última assegura que não há sobreposição dos itens (4.1.1).

Não é difícil ver que o menor raio possível para o (contêiner) é 2. Este problema admite infinitas soluções, ou seja, existem infinitas possibilidades para os centros dos dois itens, uma delas é apresentada na Tabela 4.2. A ilustração da configuração do empacotamento para a solução obtida está na Figura 4.8.

Tabela 4.2: Coordenadas dos centros dos itens e raio do contêiner

Raio do contêiner $\rho = 2$		
i	c_i^x	c_i^y
1	0,68	0,74
2	-0,68	-0,74

Esta solução satisfaz as condições de primeira ordem dadas por (2.2.4). Veja que para a

função objetivo e as três restrições que compõem o modelo temos os seguintes vetores gradientes

$$\nabla f = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1(1-\rho) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla h_1 = \begin{bmatrix} 2c_1^x \\ 2c_1^y \\ 2(1-\rho) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla h_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2(1-\rho) \\ 2c_2^x \\ 2c_2^y \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \nabla h_3 = \begin{bmatrix} 2(c_1^x - c_2^x) \\ 2(c_1^y - c_2^y) \\ 0 \\ -2(c_1^x - c_2^x) \\ -2(c_1^y - c_2^y) \end{bmatrix}.$$

Considerando os multiplicadores de Lagrange $\lambda_1 = 0,25$, $\lambda_2 = 0,25$ e $\lambda_3 = -0,125$, teremos

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 0,25 \begin{bmatrix} 1,36 \\ 1,48 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + 0,25 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ -1,36 \\ -1,48 \end{bmatrix} + (-0,125) \begin{bmatrix} 2,72 \\ 2,96 \\ 0 \\ -2,72 \\ -2,96 \end{bmatrix}.$$

O lado esquerdo da equação acima é o gradiente da função objetivo. As parcelas no lado direito são os gradientes das restrições multiplicados por seus respectivos multiplicadores de Lagrange, calculados no ponto ótimo.

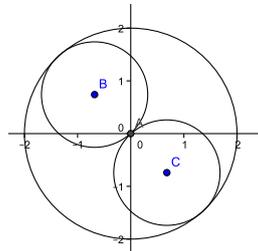


Figura 4.8: Dois itens circulares de raio $r = 1$ em um contêiner circular de raio $\rho = 2$.

Exemplo 4.1.4. Este exemplo é semelhante ao anterior, porém, neste caso, queremos encontrar o menor raio para que um círculo (contêiner) possa conter seis círculos (itens) de raio 1.

Modelagem:

$$\min \rho, \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} (c_i^x)^2 + (c_i^y)^2 \leq (\rho - 1)^2, i \in \{1, \dots, 6\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4, i < j, i, j \in \{1, \dots, 6\} \end{cases}.$$

Uma possível solução para este problema, encontrada com o auxílio do ALGENCAN, a partir do ponto inicial descrito na Tabela 4.3, é apresentada na Tabela 4.4. A ilustração da

configuração do empacotamento para o ponto inicial, bem como para a solução obtida é exibida na Figura 4.9, a e b, respectivamente.

Tabela 4.3: Coordenadas dos centros dos itens e raio do contêiner

Raio do contêiner $\rho = 3,00000000$

i	c_i^x	c_i^y
1	0,370000	1,660000
2	-1,460000	0,870000
3	0,680000	-1,560000
4	1,690000	0,160000
5	-1,280000	-1,120000
6	2,7000000	-1,120000

Tabela 4.4: Coordenadas dos centros dos itens e raio do contêiner

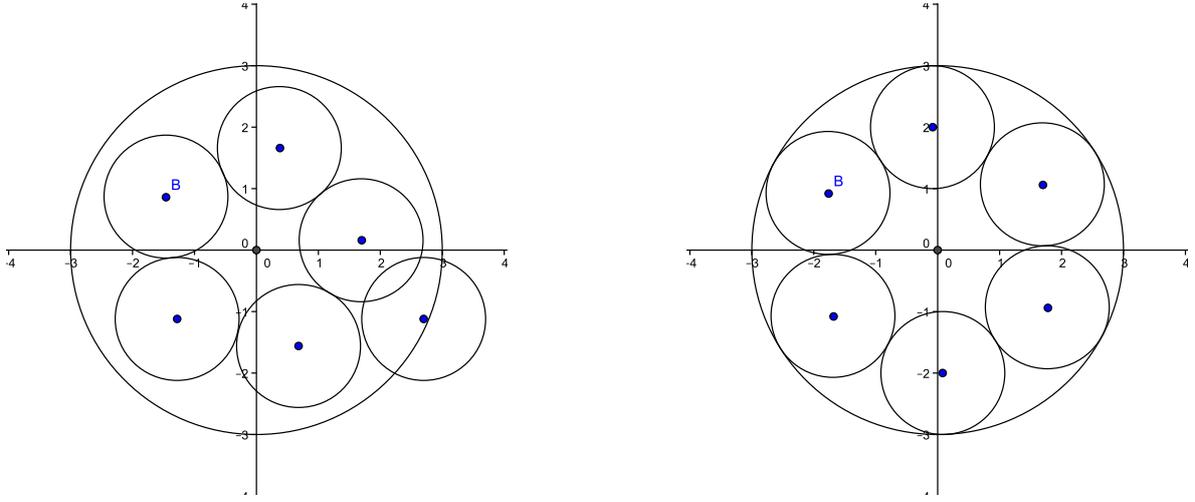
Raio do contêiner $\rho = 3,00000000$

i	c_i^x	c_i^y
1	-0,08365139	1,99824985
2	-1,77236083	0,92668069
3	0,08365139	-1,99824985
4	1,68870943	1,07156916
5	-1,68870943	-1,07156916
6	1,77236083	-0,92668068

4.2 Empacotamento de itens circulares em um polígono

Nesta seção, abordaremos o problema de empacotar círculos idênticos em um polígono. A estratégia adotada será análoga à da seção anterior, ou seja, deveremos encontrar as coordenadas do centro c_i do i -ésimo item que será alocado no interior do contêiner de modo que $d(c_i, \partial R) \geq r$. Conforme exposto na seção anterior, é possível garantir que para uma região R , $d(c_i, \partial R) \geq r$, sempre que c_i estiver no interior de $K_r(R)$, ou seja, no núcleo de R . Logo, para resolver o problema de empacotar itens circulares em uma região poligonal, devemos obter uma caracterização para o núcleo do polígono em questão. Suponhamos que a região R seja definida por

$$R = \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid \langle a^i, x \rangle \leq b_i \quad \forall i \in I_m = \{1, \dots, m\} \right\}.$$



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 4.3.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 4.4.

Figura 4.9: Seis itens circulares de raio 1 no interior de um contêiner circular de raio mínimo.

Pode-se afirmar que o núcleo $K_r(R)$ é

$$K_r(R) = \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid \begin{array}{l} \langle a^i, x \rangle \leq b_i - r \|a^i\| \\ \forall i \in I_m = \{1, \dots, m\} \end{array} \right\}. \quad (4.2.1)$$

Detalhes e propriedades teóricas sobre esta afirmação, que se baseia na distância de um ponto a um subespaço, podem ser encontradas em [7]. Nas próximas subseções trataremos de alguns contêiner específicos (quadrado e triângulo).

4.2.1 Empacotamento de itens circulares em um contêiner quadrado

Nesta subseção, consideraremos o problema de maximizar a quantidade de itens circulares idênticos no interior de um contêiner quadrado.

Seja, por exemplo, o caso específico de um quadrado de lado 4 descrito por

$$R = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid \begin{array}{l} x \leq 4 \\ -x \leq 0 \\ y \leq 4 \\ -y \leq 0 \end{array} \right\}.$$

Observe que neste caso particular $\|a^i\| = 1, \forall i \in \{1, 2, 3, 4\}$ e o quadrado está centrado no ponto $(2, 2)$. Assim, de (4.2.1) tem-se que

$$K_r(R) = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \left| \begin{array}{l} x \leq 4 - r \\ -x \leq 0 - r \\ y \leq 4 - r \\ -y \leq 0 - r \end{array} \right. \right\}.$$

A Figura 4.10 ilustra as regiões R e $K_r(R)$.

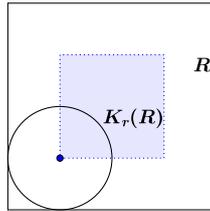


Figura 4.10: Item circular no interior de R .

No exemplo a seguir resolveremos o problema de encontrar a maior quantidade possível de itens que podem ser alocados em um contêiner quadrado.

Exemplo 4.2.1. Encontrar o número máximo de itens circulares de raio 1 que podem ser alocados no interior de um quadrado de lado 4.

A solução para este problema pode ser obtida encontrando o maior valor de k para o qual o sistema abaixo tenha solução

$$\left\{ \begin{array}{l} c_i^x \leq 3, i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^x \leq -1, i \in \{1, \dots, k\} \\ c_i^y \leq 3, i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^y \leq -1, i \in \{1, \dots, k\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4 \forall i < j, i, j \in \{1, \dots, k\} \end{array} \right. .$$

A solução apresentada na Tabela 4.5 foi obtida com o auxílio do ALGENCAN. Notemos que o problema tem solução com $k = 4$, mas não com $k = 5$. A Figura 4.11 ilustra a solução encontrada.

No exemplo anterior temos um caso em que o contêiner encontrado é também o menor possível para alocar os 4 itens. No próximo exemplo veremos que isto nem sempre ocorre.

Exemplo 4.2.2. Neste exemplo, vamos considerar o caso específico de um quadrado de lado 7 centrado na origem. Queremos encontrar o número máximo de itens circulares de raio 1 que podem ser alocados em seu interior.

Tabela 4.5: Coordenadas dos centros dos itens

i	c_i^x	c_i^y
1:	1.00000000	1.00000000
2:	1.00000000	3.00000000
3:	3.00000000	1.00000000
4:	3.00000000	3.00000000

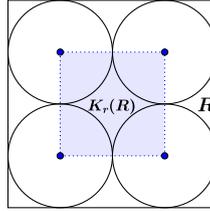


Figura 4.11: Itens circulares no interior de um contêiner quadrado de lado 4.

Este quadrado pode ser descrito por

$$R = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \left| \begin{array}{l} x \leq 3,5 \\ -x \leq 3,5 \\ y \leq 3,5 \\ -y \leq 3,5 \end{array} \right. \right\},$$

cujo o r -Núcleo é dado por

$$K_r(R) = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \left| \begin{array}{l} x \leq 3,5 - 1 \\ -x \leq 3,5 - 1 \\ y \leq 3,5 - 1 \\ -y \leq 3,5 - 1 \end{array} \right. \right\}.$$

O número máximo de itens circulares de raio 1 que podem ser alocados no interior deste quadrado, é obtido encontrando o maior valor de k para o qual o sistema abaixo tenha solução

$$\left\{ \begin{array}{l} c_i^x \leq 2,5, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^x \leq 2,5, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ c_i^y \leq 2,5, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^y \leq 2,5, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4 \quad \forall i < j, \quad i, j \in \{1, \dots, k\} \end{array} \right. .$$

A Tabela 4.6 apresenta a solução que está ilustrada na Figura 4.12.

Tabela 4.6: Coordenadas dos centros dos itens

i	c_i^x	c_i^y
1:	-0.38847944	-2.46256974
2:	1.68638107	-2.46256974
3:	-2.46256974	-2.40604024
4:	0.38770923	-0.53836151
5:	2.46256974	-0.53836151
6:	-2.46256974	-0.33117972
7:	-0.92836404	1.06569501
8:	2.46256974	1.53649900
9:	-2.46256974	2.46256974
10:	0.60584167	2.46256974

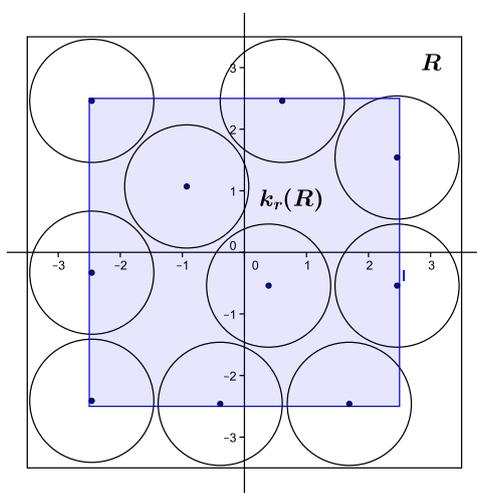


Figura 4.12: Dez itens circulares no interior de um contêiner quadrado de lado 7.

Notemos que neste caso o quadrado de lado 7 não é o menor possível para alocar 10 círculos de raio 1, porém 10 é o número máximo de itens que cabem em seu interior.

4.2.2 Contêiner quadrado de tamanho mínimo

Nesta subseção, estudaremos novamente o problema de empacotar itens circulares idênticos em um contêiner quadrado, porém agora iremos minimizar as dimensões do contêiner para que em seu interior possa ser alocado um dado número de itens.

A função objetivo para este problema é a que busca minimizar o lado L do quadrado. Supondo agora que o contêiner esteja centrado na origem do sistema cartesiano e que queremos

empacotar k itens, teremos o seguinte modelo:

$$\min L, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} c_i^x \leq \frac{L}{2} - r, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^x \leq \frac{L}{2} - r, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ c_i^y \leq \frac{L}{2} - r, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^y \leq \frac{L}{2} - r, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4, \quad i < j, \quad i, j \in \{1, \dots, k\} \end{array} \right. .$$

Note que as restrições do modelo garantem que os centros dos itens estejam no r -Núcleo, conforme apresentado na Figura 4.13.

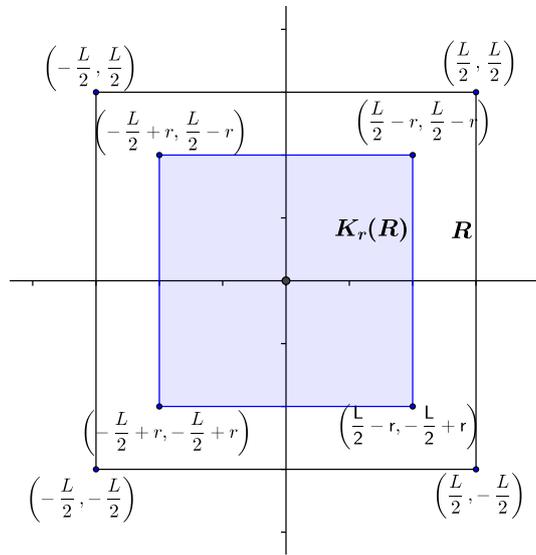


Figura 4.13: Item circular no interior de um contêiner quadrado de lado 7.

Exemplo 4.2.3. Consideremos, como exemplo, o problema de encontrar o menor lado de um quadrado, centrado na origem, para que caibam no seu interior 10 círculos de raio 1. O modelo para este problema é

$$\min L, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} c_i^x \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, 10\} \\ -c_i^x \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, 10\} \\ c_i^y \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, 10\} \\ -c_i^y \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, 10\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4, \quad i < j, \quad i, j \in \{1, \dots, 10\} \end{array} \right. .$$

A Tabela 4.7 apresenta a solução que está ilustrada na Figura 4.14.

Tabela 4.7: Coordenadas dos centros dos itens e lado do contêiner

Lado do contêiner $L = 6.7602787$

i	c_i^x	c_i^y
1	-0.4482877	2.3801394
2	0.4482877	-0.9659258
3	2.3801394	2.3801394
4	-0.9659258	0.4482877
5	2.3801394	-0.4482877
6	1.8625013	-2.3801394
7	-2.3801394	-0.9659258
8	-2.3801394	1.8625013
9	-0.9659258	-2.3801394
10	0.9659258	0.9659258

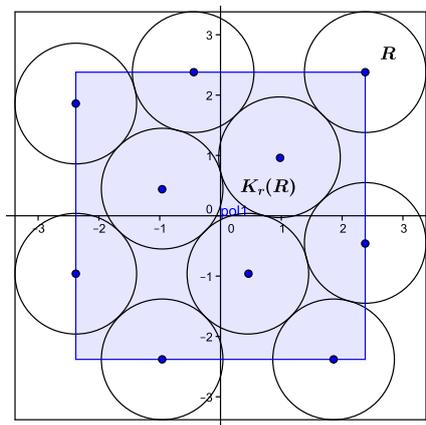


Figura 4.14: Dez itens circulares no interior de um contêiner quadrado de lado mínimo.

Esta solução foi obtida com o ALGENCAN, para tanto adotamos o ponto inicial conforme a Tabela 4.8.

É importante ressaltar que, por estarmos tratando de um processo iterativo, com diversas soluções locais, a solução final é qualitativamente dependente dos dados iniciais fornecidos pelo usuário. Para ilustrar esta ideia, vejamos a solução fornecida pelo ALGENCAN, caso o ponto inicial adotado seja aquele apresentado na Tabela 4.9.

Para este ponto inicial, o ALGENCAN fornece a solução apresentada na Tabela 4.10 e o empacotamento é ilustrado na Figura 4.15. Com este exemplo fica claro que a qualidade da solução obtida para um problema de empacotamento depende do ponto inicial, sendo este fornecido pelo usuário.

Para entendermos melhor este problema, consideremos agora o empacotamento de 4 círculos

Tabela 4.8: Coordenadas iniciais dos centros dos itens e valor inicial do lado do contêiner

Lado do contêiner $L = 7$		
i	c_i^x	c_i^y
1	-0.3500000	2.0000000
2	0.3000000	-1.0000000
3	2.0000000	2.5000000
4	0.0000000	0.5000000
5	3.0000000	-0.5000000
6	2.0000000	-2.0000000
7	-2.0000000	-1.0000000
8	-2.5000000	2.0000000
9	-1.0000000	-2.0000000
10	1.0000000	0.5000000

Tabela 4.9: Coordenadas iniciais dos centros dos itens e valor inicial do lado do contêiner

Lado do contêiner $L = 8$		
i	c_i^x	c_i^y
1	-2.0000000	0.0000000
2	0.0000000	0.0000000
3	2.0000000	0.0000000
4	-2.0000000	2.0000000
5	0.0000000	2.0000000
6	2.0000000	2.0000000
7	-2.0000000	-2.0000000
8	0.0000000	-2.0000000
9	2.0000000	-2.0000000
10	0.0000000	4.0000000

de raio 1 em um quadrado de lado L mínimo. A fim de obtermos uma representação gráfica do problema, manteremos dois círculos fixos. As coordenadas dos centros destes círculos são $(0, 1)$ e $(0, -1)$. Além disso, faremos com que os outros dois círculos tenham coordenadas $(x_1, 0)$ e $(x_2, 0)$. Nessas condições, teremos um problema com duas variáveis, fato que possibilita sua representação gráfica. As três configurações possíveis para este problema são apresentadas na Figura 4.16.

Notemos na Figura 4.16 (a) que o lado do quadrado que conterà os círculos centrados em $(x_1, 0)$ e $(x_2, 0)$, além dos círculos fixados em $(0, 1)$ e $(0, -1)$, é dado por $2 \cdot (|x_1| + 1)$. Justifica-se esta medida, pois estamos considerando que o quadrado está centrado na origem, ou seja, é simétrico com relação à reta $x_1 = 0$, motivo pelo qual devemos multiplicar $|x_1| + 1$ por 2. Além disso, estamos somando 1, $|x_1| + 1$, para garantir que o círculo centrado em $(x_1, 0)$, cujo raio é 1, esteja inteiramente contido no quadrado. De modo análogo, no caso da Figura 4.16 (c),

Tabela 4.10: Coordenadas dos centros dos itens e lado do contêiner

Lado do contêiner $L = 8$		
i	c_i^x	c_i^y
1	-2.0991069	0.0000000
2	0.0000000	-1.0000000
3	2.0991069	0.0000000
4	-2.0991069	2.3755845
5	0.0000000	1.0000000
6	2.0991069	2.3755845
7	-2.099106	-2.375584
8	0.0000000	-3.0000000
9	2.0991069	-2.375584
10	0.0000000	3.0000000

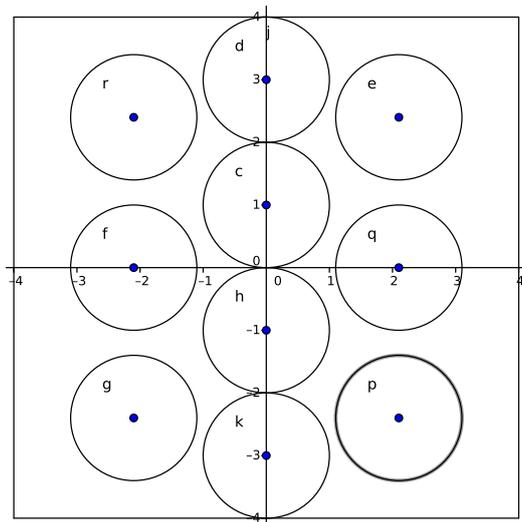
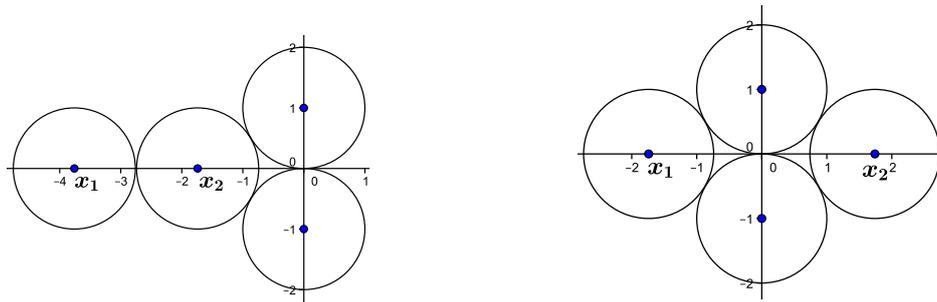


Figura 4.15: Dez itens circulares no interior de um contêiner quadrado mínimo. Neste caso, uma solução local foi obtida.

temos x_2 como sendo variável de maior valor absoluto. Neste caso, o valor da função objetivo será dado por $L = 2 \cdot (|x_2|+1)$. A soma $|x_2|+1$ garante que o círculo centrado em $(x_2, 0)$ fique inteiramente contido no quadrado, caso contrário, apenas metade dele ficaria. Isto posto, tem-se que a função objetivo nestes casos é dada por

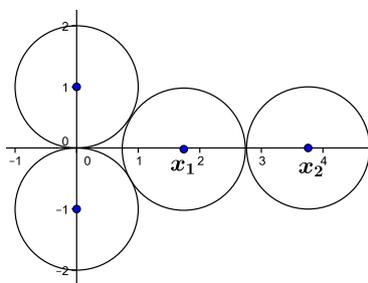
$$L = \text{Max}\{2 \cdot (|x_1|+1), 2 \cdot (|x_2|+1)\}.$$

Para o caso de x_1 e x_2 terem sinais opostos, a função objetivo para este problema poderia ser escrita como $L = |x_1 - x_2|+2$. De fato, os círculos centrados em $(x_1, 0)$ e $(x_2, 0)$ são os



(a) Os dois círculos no lado esquerdo.

(b) Um círculo de cada lado.



(c) Os dois círculos no lado direito.

Figura 4.16: Configurações possíveis para o problema.

únicos que estão livres, logo, a medida do lado do quadrado que os contém, deveria ser no mínimo $|x_1 - x_2| + 2$, ou seja, a distância entre os centros mais dois. Este acréscimo de duas unidades seria necessário para garantir que os dois círculos ficassem inteiramente contidos no interior do quadrado. No entanto, nem sempre os círculos estão de lados opostos, como pode ser observado na Figura 4.16. De toda forma, teremos sempre que $2 \cdot (|x_1| + 1) \geq |x_1 - x_2| + 2$ ou $2 \cdot (|x_2| + 1) \geq |x_1 - x_2| + 2$.

Portanto, um modelo que dá um limitante para este problema, além de coincidir com ele para vários valores de x_1 e x_2 é

$$\min L, \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} x_1^2 + 1 \geq 4 \\ x_2^2 + 1 \geq 4 \\ (x_1 - x_2)^2 \geq 4 \end{cases} .$$

As três restrições asseguram que os círculos não fiquem sobrepostos. A Figura 4.17 mostra a região viável para este problema.

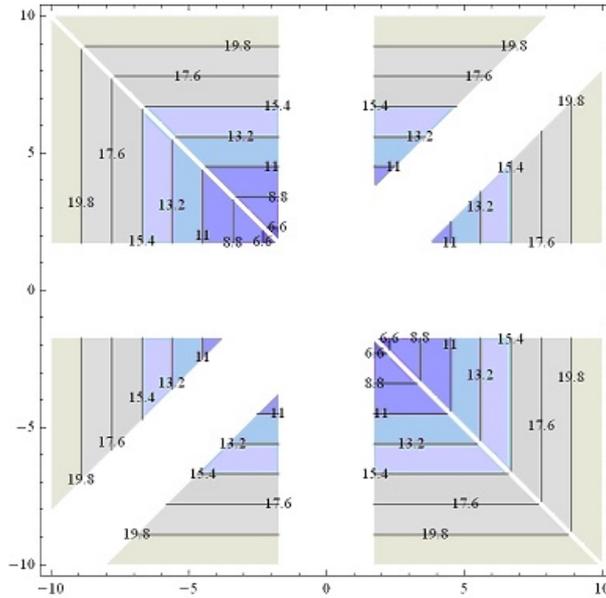


Figura 4.17: Região viável do problema de empacotamento de quatro círculos, mas com apenas duas variáveis livres. Em branco tem-se a região inviável.

A função de penalidade $q(x, c)$, visto no capítulo 3, para este problema é dada por

$$q(x, c) = L + c[(\text{Max}\{0, 4 - (y - x)^2\})^2 + (\text{Max}\{0, 4 - (x^2 + 1)\})^2 + (\text{Max}\{0, 4 - (y^2 + 1)\})^2].$$

Esta expressão é basicamente a encontrada em (3.1.3) mas, para considerarmos restrições do tipo $h(x) \leq 0$, substituímos $h(x)$ por $\text{Max}\{0, h(x)\}$ para penalizarmos apenas pontos inviáveis.

A Figura 4.18 ilustra graficamente esta função para $c = 5$. As elevações que aparecem no gráfico estão na região inviável, parte branca da Figura 5.16, representando, portando, a penalidade a ser paga quando o par de valores x_1 e x_2 for inviável. Quando x_1 e x_2 estão próximos da origem, temos a maior inviabilidade, pois 3 restrições são violadas, o que ocasiona o pico apresentado no gráfico.

Vejamos, a partir de agora, as diferentes soluções encontradas pelo ALGENCAN, para diferentes pontos iniciais. Vale ressaltar que o comportamento do ALGENCAN não será exatamente como o do Método do Lagrangiano Aumentado, descrito no capítulo anterior, pois o problema aqui resolvido é não suave e também porque o ALGENCAN não resolve cada subproblema exatamente, mas sim com uma tolerância dada.

Consideremos, então, os seguintes valores iniciais $x_1 = -1$ e $x_2 = -2.5$. Na Figura 4.19 vê-se a configuração para este ponto inicial. Claramente este não é o melhor agrupamento possível, uma vez que nem ao menos é viável. Após uma iteração o ALGENCAN adotou $c = 68$ como parâmetro de penalidade e encontrou os seguintes valores: $x_1 = -2.06$, $x_2 = -4.14$ e $L = 10.28$. Esta solução está em conformidade com a função objetivo adotada, $L = \text{Max}\{2 \cdot (|x_1| + 1), 2 \cdot (|x_2| + 1)\}$, basta ver que $2 \cdot (|x_2| + 1) = 2 \cdot (4.14 + 1) = 10.28$. A Figura 4.20 ilustra o resultado

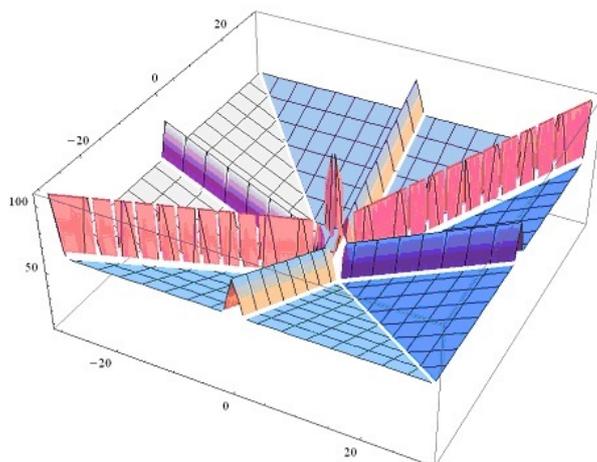


Figura 4.18: Gráfico da função $q(x, c)$ com $c = 5$.

desta iteração.

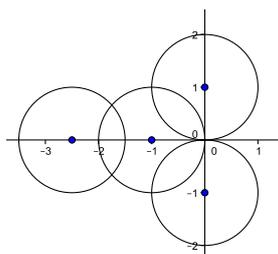


Figura 4.19: Configuração correspondente ao o ponto inicial $x_1 = -1$ e $x_2 = -2.5$.

O ALGENCAN aumentou o parâmetro de penalidade para $c = 100$ e apresentou a seguinte solução: $x_1 = -1.73$, $x_2 = -3.73$ e $L = 9.46$. A solução está ilustrada na Figura 4.21. O ALGENCAN realizou mais três iterações, em todas elas adotou $c = 1000$ obtendo sempre a mesma solução, ou seja, $x_1 = -1.73$ e $x_2 = -3.73$. Os pontos encontrados em cada iteração estão ilustrado na Figura 4.22.

Situação muito semelhante acontece ao adotar $x_1 = 8$ e $x_2 = 1$, dois círculos livres do lado direito dos fixos, como ponto inicial. Os resultados das iterações estão na Tabela 4.11 e a solução final está ilustrada na Figura 4.23

Analisaremos, agora, as iterações obtidas a partir do ponto inicial $x_1 = 8$ e $x_2 = -4$. A Figura 4.24 ilustra a configuração para este ponto inicial. Na primeira iteração o ALGENCAN adotou $c = 6.2$ como parâmetro de penalidade e encontrou a seguinte solução: $x_1 = 7.84$, $x_2 = -5.92$ e $L = 17.84$. O problema foi resolvido em 6 iterações, conforme a Tabela 4.12. A solução obtida está representada na Figura 4.25.

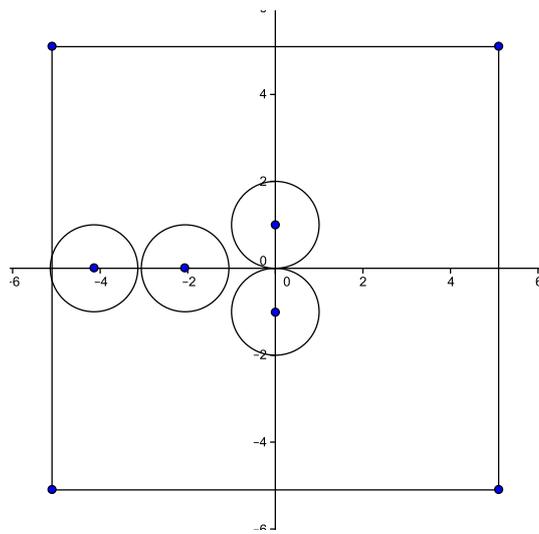


Figura 4.20: Solução obtida na primeira iteração.

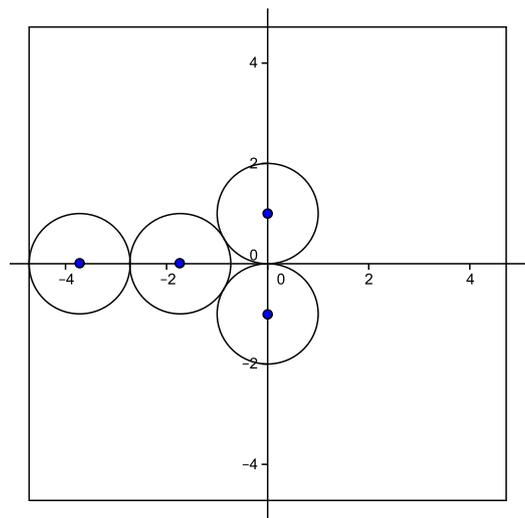


Figura 4.21: Solução obtida na segunda iteração: $x_1 = -1.73$, $x_2 = -3.73$.

Como última análise deste problema, vejamos o caso em que $x_1 = x_2 = 0$. Observando a Figura 4.26 é possível notar que o ponto A , que é um mínimo local, é simétrico ao ponto G em relação a origem, que também é um mínimo local e, a função objetivo neste ponto tem o mesmo valor que no ponto A . O mesmo ocorre para os pontos E e D , B e C . Este fato faz com que o ALGENCAN seja indiferente entre uma direção e o oposto dela. Neste caso, o ALGENCAN não consegue encontrar a solução do problema e fica estacionado no ponto $(0, 0)$, que é um ponto estacionário da inviabilidade, mesmo sendo um pico da função penalizada (veja Figura 4.18). Maiores detalhes sobre o comportamento do ALGENCAN em problemas simétricos podem ser

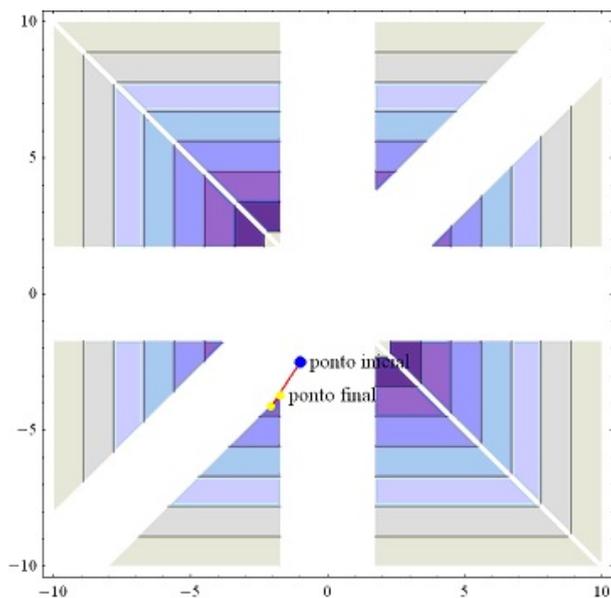


Figura 4.22: Pontos obtidos nas iterações. O ponto inicial está em azul e os demais em amarelo.

Tabela 4.11: Iterações obtidas pelo ALGENCAN a partir do ponto $x_1 = 8$ e $x_2 = 1$

i	c	x_1	x_2	L
0		8	1	8
1	5,9	6,7255	1,4921	15,0170
2	150	3,8748	1,7326	9,7672
3	150	3,7199	1,7321	9,4399
4	150	3,7331	1,7321	9,4663
5	150	3,7320	1,7321	9,4639
6	150	3,7321	1,7321	9,4641
7	150	3,7320	1,7321	9,4641
8	150	3,7320	1,7321	9,4641

Tabela 4.12: Iterações obtidas pelo ALGENCAN a partir do ponto $x_1 = 8$ e $x_2 = -4$

i	c	x_1	x_2	L
0		8	-4	8
1	6,2	7,842	-5,9205	17,684
2	180	1,7028	-1,7153	5,4181
3	180	1,7325	-1,7325	5,4684
4	180	1,7320	-1,7320	5,4641
5	180	1,7321	-1,7321	5,4641
6	180	1,7321	-1,7321	5,4641

encontrados em [15].

Os caminhos percorridos pelo ALGENCAN, a partir dos pontos iniciais analisados neste problema, estão representados na Figura 4.27. Observe que quanto mais próximo da origem,

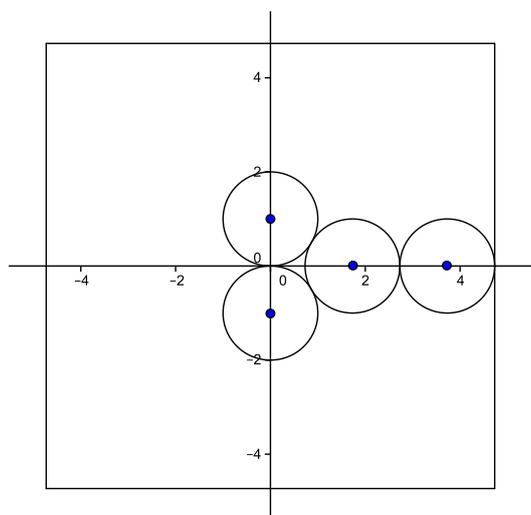


Figura 4.23: Solução obtida a partir do ponto inicial $x_1 = 8$ e $x_2 = 1$.

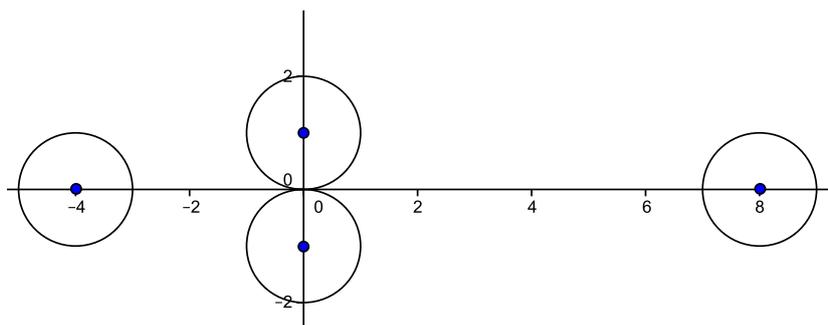


Figura 4.24: Configuração para o ponto inicial: $x_1 = 8$ e $x_2 = -4$.

menor seria a função objetivo, já que estaríamos mais próximos do centro do contêiner. Deste modo, fica claro que as soluções encontradas são minimizadores locais do problema original. Uma vez que a função objetivo é convexa, podemos concluir também que são as restrições que têm papel decisivo na obtenção dos minimizadores locais não globais. Pelas Figuras 4.27 e 4.18 vemos que nestes pontos teríamos que atravessar a região inviável e, portanto, uma subida na função penalizada, para obtermos um ponto melhor. Como o ALGENCAN é um método de descida, isso acaba não acontecendo e acabamos encontrando soluções locais. Para problemas com mais variáveis a situação se repete, aumentando ainda mais as chances de obtermos minimizadores locais. Estes fatos justificam as dificuldades apresentadas anteriormente e ressaltam a importância da escolha de bons pontos iniciais em otimização não linear.

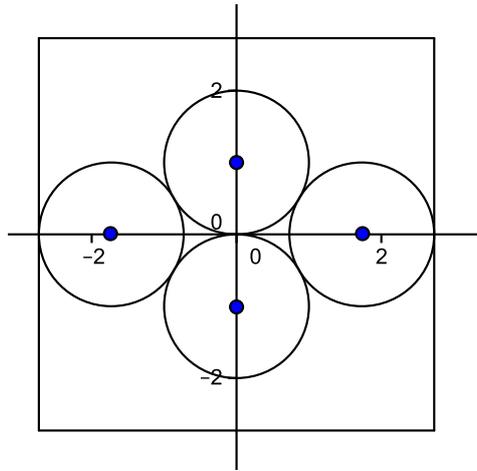


Figura 4.25: Solução encontrada pelo ALGENCAN.

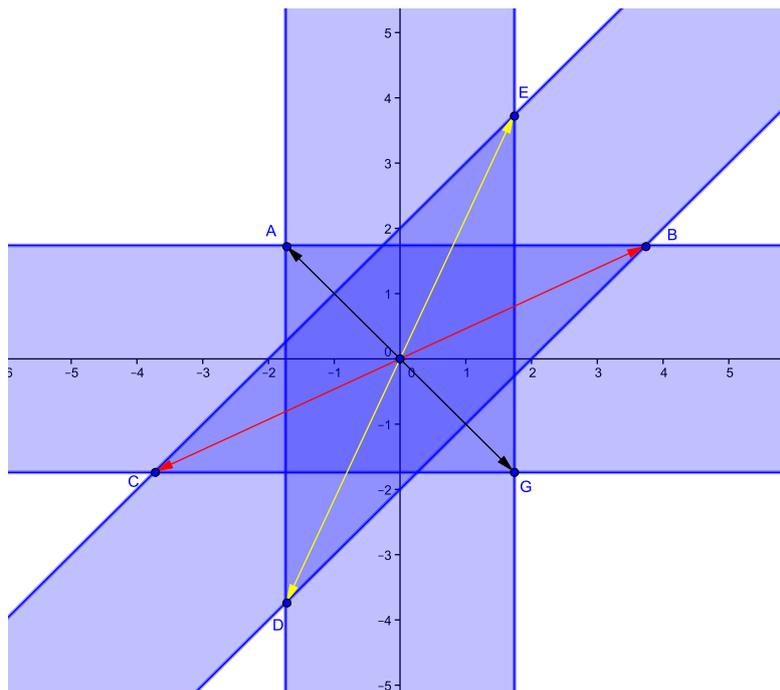


Figura 4.26: Simetria em relação ao ponto $(0,0)$. Em azul tem-se a região inviável.

4.2.3 Círculos em um triângulo equilátero de menor área

Estudaremos, agora, o caso de empacotar k itens circulares idênticos de raio $r = 1$ em um triângulo equilátero com dimensões mínimas. Consideremos o triângulo com um lado sobre o

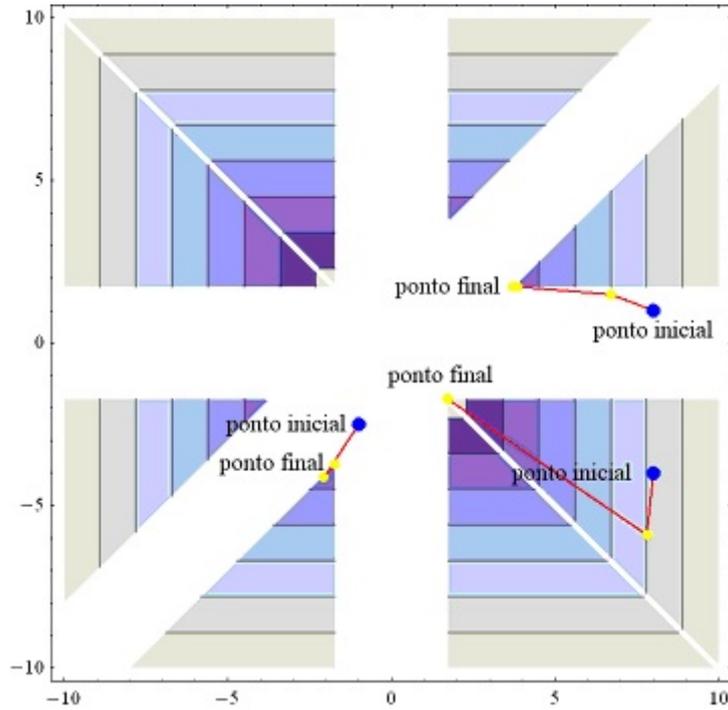


Figura 4.27: Pontos obtidos nas iterações. Os pontos iniciais estão em azul e os demais em amarelo.

eixo x e mediana em y (Figura 4.28)

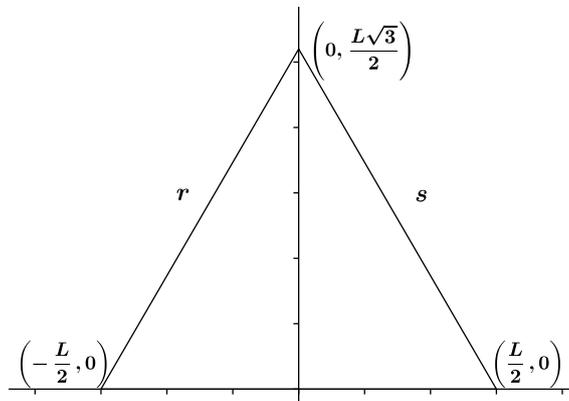


Figura 4.28: Contêiner triangular.

A fim de encontrar as restrições para o modelo, consideremos as duas retas r e s da Figura 4.28, cujas equações são:

$$y = \sqrt{3}x + \frac{L\sqrt{3}}{2} \quad (4.2.2)$$

$$y = -\sqrt{3}x + \frac{L\sqrt{3}}{2} \quad (4.2.3)$$

Assim, a região formada pelo triângulo equilátero é definida por

$$R = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \left| \begin{array}{l} -\sqrt{3}x + y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} \\ \sqrt{3}x + y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} \\ -y \leq 0 \\ x \leq \frac{L}{2} \\ -x \leq \frac{L}{2} \end{array} \right. \right\} \quad (4.2.4)$$

Para encontrar o r -Núcleo desta região, devemos calcular $\|a^i\|$, tal como indicado em (4.2.1). Com este objetivo, representaremos R por meio do seguinte sistema de inequações

$$\begin{bmatrix} -\sqrt{3} & 1 \\ \sqrt{3} & 1 \\ 0 & -1 \\ 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} \frac{L\sqrt{3}}{2} \\ \frac{L\sqrt{3}}{2} \\ 0 \\ \frac{L}{2} \\ \frac{L}{2} \end{bmatrix}. \quad (4.2.5)$$

Note que os vetores a^i estão alocados nas linhas da matriz do lado esquerdo de (4.2.5). Desta forma temos $\|a^1\| = 2$, $\|a^2\| = 2$, $\|a^3\| = 1$, $\|a^4\| = 1$ e $\|a^5\| = 1$. Portanto, de (4.2.1) tem-se

$$K_r(R) = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \left| \begin{array}{l} -\sqrt{3}x + y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} - 2r \\ \sqrt{3}x + y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} - 2r \\ -y \leq 0 - 1r \\ x \leq \frac{L}{2} - 1r \\ -x \leq \frac{L}{2} - 1r \end{array} \right. \right\}. \quad (4.2.6)$$

A Figura 4.29 ilustra o núcleo do triângulo.

Estamos interessados em encontrar o menor triângulo equilátero que possa conter em seu interior k círculos de raio $r = 1$, sem que estes se sobreponham. De (4.2.6) e (4.1.1) temos o seguinte modelo

$$\min L, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} -\sqrt{3}c_i^x + c_i^y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} - 2, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ \sqrt{3}c_i^x + c_i^y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} - 2, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^y \leq -1, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ c_i^x \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ -c_i^x \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, k\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4, \quad i < j, \quad i, j \in \{1, \dots, k\} \end{array} \right. \quad (4.2.7)$$

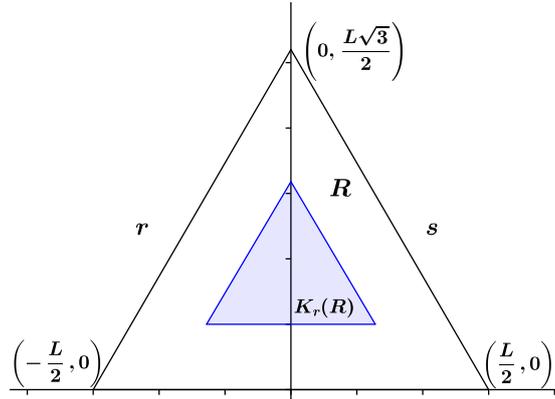


Figura 4.29: r -Núcleo de um contêiner triangular.

Exemplo 4.2.4. Consideremos, como exemplo, o problema de encontrar o menor lado L de um triângulo equilátero, para que caibam em seu interior 5 círculos de raio 1. O modelo para este problema é

$$\min L, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} -\sqrt{3}c_i^x + c_i^y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} - 2, \quad i \in \{1, \dots, 5\} \\ \sqrt{3}c_i^x + c_i^y \leq \frac{L\sqrt{3}}{2} - 2, \quad i \in \{1, \dots, 5\} \\ -c_i^y \leq -1, \quad i \in \{1, \dots, 5\} \\ c_i^x \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, 5\} \\ -c_i^x \leq \frac{L}{2} - 1, \quad i \in \{1, \dots, 5\} \\ (c_i^x - c_j^x)^2 + (c_i^y - c_j^y)^2 \geq 4, \quad i < j, \quad i, j \in \{1, \dots, 5\} \end{array} \right.$$

A Tabela 4.13 apresenta a solução que está ilustrada na Figura 4.30. Mesmo com um espaço vazio considerável no contêiner é possível ver que não há um rearranjo simples que resultará em um triângulo menor. Desta forma, podemos concluir que provavelmente pelo menos estamos em um minimizador local do problema.

Tabela 4.13: Coordenadas dos centros dos itens e lado do contêiner

Lado do contêiner $L = 7.464101$		
i	c_i^x	c_i^y
1	0.000000	4.4641016
2	-1.000000	2.7320508
3	0.000000	1.000000
4	-2.000000	1.000000
5	2.000000	1.000000

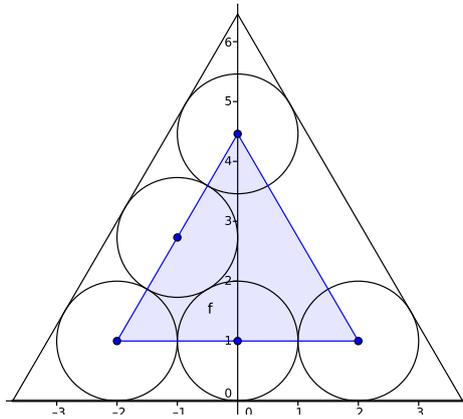


Figura 4.30: Cinco itens circulares no interior de um contêiner triangular de lado mínimo.

Capítulo 5

EMPACOTAMENTO EM CONTÊINERES EM QUE O r -NÚCLEO NÃO É SIMPLES

Neste capítulo, abordaremos o problema de empacotar itens circulares idênticos em contêineres em que o r -Núcleo não é facilmente descrito. Primeiramente vamos focar no caso de empacotamento em elipses e parábolas, os quais já foram estudados na tese de doutorado de Hector F. Callisaya [7]. Posteriormente, analisaremos a possibilidade de estender estes resultados para contêineres descritos por equações quárticas.

5.1 Empacotamento de círculos em elipses

No capítulo anterior, tratamos de contêineres em forma de círculo, quadrado e triângulo. Para estes casos, modelar o encaixe de itens circulares no interior do contêiner não é uma tarefa difícil, exige-se apenas que os centros dos itens estejam em uma região menor com a mesma estrutura da original, o r -Núcleo. Ou seja, se o contêiner é quadrado, é necessário que os centros dos itens estejam em um quadrado menor, o mesmo vale para contêineres circulares e triangulares. Essa maneira de modelar a pertinência de itens circulares não é válida para contêineres elípticos, uma vez que a região interna a qual o centro do item deve pertencer não é uma elipse (veja a Figura 5.1). Note na Figura 5.1(a) que, por exemplo, o círculo de raio r , centrado no ponto $(0, b - r)$, está inteiramente contido na elipse maior e que o mesmo não ocorre para outros itens de mesmo raio centrados em outros pontos da borda da elipse azul. Já a Figura 5.1(b) ilustra o r -Núcleo e dá pra ver que nos pontos $(-c, 0)$ e $(c, 0)$ temos uma falta de suavidade, o que impede da figura ser uma elipse.

Pelo exposto, é possível afirmar que a dificuldade de modelar o empacotamento de itens circulares, de raio r , no interior de uma elipse, reside no fato de ser difícil de determinar seu r -Núcleo. Ou seja, o ponto chave é descobrir qual é a região interna que garanta que a distância



(a) Alguns itens não estão contidos no contêiner quando o r -Núcleo é uma elipse menor.

(b) Nos pontos $(-c, 0)$ e $(c, 0)$ a curva que define o r -Núcleo não é suave, portanto não é uma elipse.

Figura 5.1: Ilustração do porquê do r – Núcleo de uma elipse não ser uma elipse.

entre o centro do círculo à borda da elipse seja maior ou igual a r , quando o centro do círculo estiver contido no interior desta região. A estratégia adotada para sanar esta dificuldade será encontrar o ponto $q = (x, y) \in \partial E$, em que ∂E representa a borda da elipse, cuja distância a um determinado ponto $p = (u, v)$ no interior da elipse seja a menor possível. Para determinar tal ponto, comecemos por analisar o caso particular em que $v = 0$, ou seja, analisaremos o caso em que p esteja no eixo focal da elipse definida por

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad (5.1.1)$$

onde $a > b$, conforme mostra a Figura 5.2.

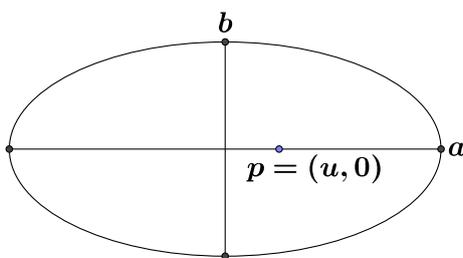


Figura 5.2: Centro do círculo no eixo focal.

Os pontos que estão na borda desta elipse têm coordenadas da forma $(x, \pm b\sqrt{1 - x^2/a^2})$, $x \in [-a, a]$. Deste modo, a distância entre p e $q \in \partial E$ é determinada pela função:

$$d(p, \partial E) = f(x) = \sqrt{(x - u)^2 + b^2 \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)}. \quad (5.1.2)$$

De (5.1.2) tem-se que para os pontos onde $f(x) \neq 0$

$$f'(x) = \frac{(x-u) - \frac{b^2}{a^2}x}{\sqrt{(x-u)^2 + b^2\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)}}. \quad (5.1.3)$$

Fazendo $f'(x) = 0$ em (5.1.3) obtemos o seguinte candidato a minimizador de $f(x)$

$$x = \frac{a^2u}{a^2 - b^2}. \quad (5.1.4)$$

Para simplificar o desenvolvimento a seguir, nossa análise versará sobre os pontos que pertencem à borda da elipse situados no primeiro ou segundo quadrante, isto é, nos pontos com ordenada positiva. Para os demais pontos a análise é completamente análoga. Esta observação é importante, pois podem existir dois pontos, q e q' , ambos na borda da elipse cujas distâncias ao ponto p são iguais a distância mínima (Figura 5.3).

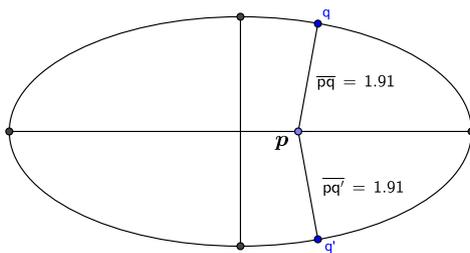


Figura 5.3: Existência de dois pontos q e q' cujas distâncias ao ponto p são iguais a 1,91, que é a mínima.

Deste modo, consideremos o ponto em ∂E

$$\left(x, b\sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}\right). \quad (5.1.5)$$

Substituindo (5.1.4) em (5.1.5) obteremos as coordenadas (x, y) do ponto $q \in \partial E$ mais próximo do ponto $p = (u, 0)$. Desta forma, dado um ponto no eixo OX , o ponto da borda da elipse mais próximo é dado por

$$\left(\frac{a^2u}{a^2 - b^2}, b\sqrt{1 - \frac{a^2u^2}{(a^2 - b^2)^2}}\right). \quad (5.1.6)$$

Vejamos, a seguir, um exemplo do que foi dito nos parágrafos anteriores.

Exemplo 5.1.1. Consideremos a elipse, cuja equação é $x^2/4^2 + y^2/2^2 = 1$ e o ponto $p = (1, 0)$. Estamos interessados em determinar o ponto (x, y) na borda da elipse mais próximo de p , além disso, para simplificar, queremos que o ponto tenha ordenada positiva.

De (5.1.4) temos que a coordenada x do ponto procurado é dada por

$$x = \frac{a^2 u}{a^2 - b^2} = \frac{4^2 \cdot 1}{4^2 - 2^2} = \frac{16}{12},$$

assim, de (5.1.5) conclui-se que o ponto procurado é

$$(x, y) = \left(\frac{16}{12}, 2\sqrt{1 - \left(\frac{1}{3}\right)^2} \right).$$

Estes pontos estão ilustrados na Figura 5.4.

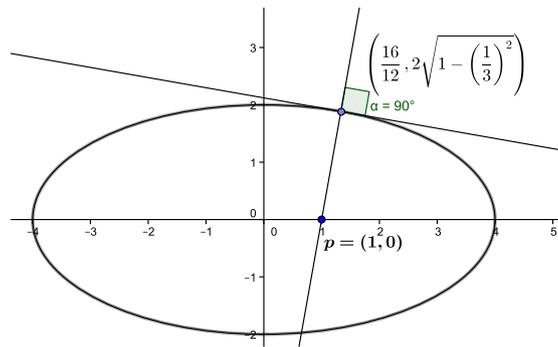


Figura 5.4: Ponto na borda da elipse $x^2/4^2 + y^2/2^2 = 1$ mais próximo do ponto $(1, 0)$.

Na Figura 5.4 pode-se observar que o ponto $\left(\frac{16}{12}, 2\sqrt{1 - \left(\frac{1}{3}\right)^2} \right)$ está na reta perpendicular à ∂E que passa por $(1, 0)$. Isso acontece, pois as curvas de nível da função distância até p são círculos e, para o ponto mais próximo, a solução ótima deve apenas tocar na elipse. Este é o ponto chave da estratégia que adotaremos para empacotar itens circulares no interior de um contêiner elíptico - o ponto $q = (x, y) \in \partial E$ mais próximo do ponto $p = (u, 0)$ está na reta que é perpendicular à ∂E e passa por p .

Uma maneira analítica de ver o fato mencionado no último parágrafo é considerar a equação vetorial da reta normal à elipse descrita em (5.1.1) num dado ponto (x, y) , a qual é definida por

$$r_n(t) = \begin{bmatrix} 2b^2x \\ 2a^2y \end{bmatrix} \cdot t + \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (5.1.7)$$

Para $t^* = -1/2a^2$ temos que

$$r_n(t^*) = \begin{bmatrix} x \left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.1.8)$$

é um ponto sobre o eixo focal da elipse definida em (5.1.1).

Substituindo em (5.1.8) o valor de x obtido em (5.1.4), como faremos a seguir, teremos o ponto p .

$$\begin{bmatrix} x \left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right) \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{a^2 u}{a^2 - b^2} \left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right) \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{a^2 u}{a^2 - b^2} - \frac{b^2 u}{a^2 - b^2} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \frac{a^2 - b^2}{a^2 - b^2} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Este fato ratifica nossa afirmação anterior, qual seja, aquela em que foi dito que o ponto $q \in \partial E$ mais próximo de p está na reta que é perpendicular à ∂E e passa por p .

No início deste capítulo, foi dito que para o empacotamento em contêineres elípticos era necessário encontrar o ponto $q \in \partial E$, cuja distância a um determinado ponto p no interior da elipse seja a menor possível. Os resultados obtidos até aqui nos permitem afirmar que, para o caso particular em que o ponto no interior da elipse é da forma $p = (u, 0)$, o ponto $q \in \partial E$ deve ser aquele que está na reta perpendicular à ∂E e passa por p .

Consideremos agora o segmento \overline{pq} . Pode-se afirmar que para qualquer ponto $k \in \overline{pq}$ o ponto mais próximo a ele em ∂E é justamente o ponto q . Deste modo, dado um círculo de raio r , se fizermos o seu centro deslizar ao longo de \overline{pq} , partindo de p em direção a q , o primeiro ponto da elipse que será tangenciado pelo círculo será o ponto q . A Figura 5.5 ilustra esta afirmação.

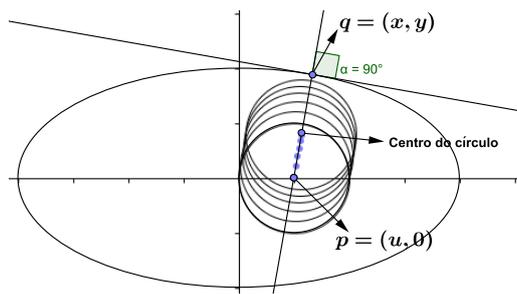


Figura 5.5: Círculos centrados no segmento \overline{pq} .

A aplicação definida em (5.1.7), para $t^* = -1/2a^2$, leva um ponto $(x, y) \in \partial E$ em um ponto no eixo focal da elipse. Estamos agora interessados em uma aplicação que leve um ponto da borda da elipse à um ponto $k \in \overline{pq}$, ou seja, uma aplicação que leve um ponto da borda da elipse à região E interna a ela. Consideremos então a aplicação $H : \partial E \times [0, 1] \rightarrow E$ definida

por

$$H(x, y, s) = (\sigma(s)x, sy), \quad (5.1.9)$$

onde $\sigma(s) = \left(1 + (s - 1)\frac{b^2}{a^2}\right)$.

Faremos, a seguir, um exemplo que ilustra o funcionamento desta aplicação.

Exemplo 5.1.2. Assim como fizemos no Exemplo 5.1.1, consideremos a elipse $x^2/4^2 + y^2/2^2 = 1$, os pontos $p = (1, 0)$ e $q = \left(\frac{16}{12}, 2\sqrt{1 - \left(\frac{1}{3}\right)^2}\right)$ e $s = 0,5$. Neste caso, o ponto pertencente ao seguimento \overline{pq} é o ponto k , cujas coordenadas, de acordo com (5.1.9) são

$$\left(\left(1 + (0.5 - 1)\frac{2^2}{4^2}\right) \frac{16}{12}, 2 \cdot 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{1}{3}\right)^2} \right).$$

Os pontos p , k e q estão representados na Figura 5.6.

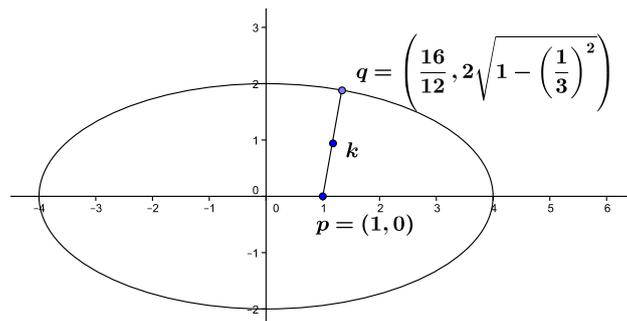


Figura 5.6: Ponto $k \in \overline{pq}$ obtido com a aplicação H .

Notemos que, por ser $s = 0,5$, k está na metade do segmento \overline{pq} .

Na aplicação H , cada ponto no interior da elipse é representado por três números reais (x, y, s) , onde $(x, y) \in \partial E$ e $s \in [0, 1]$ é um parâmetro que indica o grau de proximidade (pois para $s = 1$ tem-se que $H(x, y, s) \in \partial E$) do ponto (x, y) à fronteira ∂E .

Com esta aplicação, podemos calcular a distância entre um ponto $k \in E$ e ∂E , pois $k = H(q, s)$ para algum $(q, s) \in \partial E \times [0, 1]$. Assim, tem-se que $d(k, \partial E) = d(k, q)$, isto é, com a descrição do ponto k em termos da fronteira de E mais um parâmetro adicional s , podemos calcular $d(k, \partial E)$. Na Figura 5.7 ilustramos graficamente as ideias contidas neste parágrafo. Observe que, em confirmação ao que já foi exposto em parágrafos anteriores, para todos os pontos no segmento entre c_1 e c_2 existem dois pontos que satisfazem a menor distância à fronteira. Além disso, a reta determinada pelo eixo OX também é perpendicular à fronteira da

elipse e passa pelos pontos em $\overline{c_1c_2}$. No entanto, dado que

$$p = H(q, s) = H(x, y, s) = \left(\left(1 + (s-1) \frac{b^2}{a^2} \right) x, sy \right),$$

sendo que (x, y) é um ponto da fronteira, só existem duas maneiras do um ponto p estar no eixo OX , são elas:

1. Quando $s = 0$ e $y \neq 0$. Neste caso, há duas possibilidades para o ponto $q = (x, y)$. Uma com $y < 0$ e outra com $y > 0$;
2. Quando $y = 0$. Neste caso, necessariamente, $x = \pm a$. Assim, novamente haverá duas possibilidades para o ponto q , $q = (a, 0)$ ou $q = (-a, 0)$.

Este último caso coincide com a única possibilidade em que a função distância definida em 5.1.2 não é diferenciável.

Em ambos os casos, o ponto p só poderá ser mapeado por no máximo dois pontos, q e q' distintos. No primeiro caso, p será equidistante aos pontos q e q' . Já no segundo, os pontos q e q' são mutuamente excludentes, uma vez que $s \in [0, 1]$.

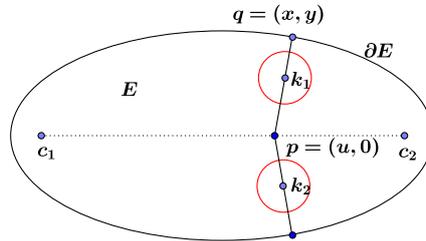


Figura 5.7: As igualdades $d(k, \partial E) = d(H(q, s), \partial E) = d(H(q, s), q)$, permitem determinar facilmente a distância de um ponto à fronteira da elipse.

A representação H definida em (5.1.9) permite que a principal dificuldade de empacotamentos em regiões elípticas seja superada, uma vez que para todo $k \in E$, $k = H(q, s)$ para algum $q \in \partial E$ e $s \in [0, 1]$ temos que

$$d(k, \partial E) = d(H(q, s), q) = (s-1) \sqrt{x^2 \left(\frac{b}{a} \right)^4 + y^2}.$$

Deste modo, obtemos um método para calcular a distância à fronteira da região E , o qual

permite encontrar o núcleo de E .

$$H(q, s) \in K_r(E) \Leftrightarrow \begin{cases} q \in \partial E \\ 0 \leq s \leq 1 \\ d(q, H(q, s)) \geq r \end{cases} . \quad (5.1.10)$$

O problema de empacotamento de k itens circulares de raio r em um contêiner elíptico pode, portanto, ser solucionado resolvendo-se o seguinte problema de viabilidade:

$$\begin{cases} b^2(x^i)^2 + a^2(y^i)^2 = a^2b^2 \\ (s_i - 1)^2 \left[(x^i)^2 \left(\frac{b}{a}\right)^4 + (y^i)^2 \right] \geq r \\ (\sigma(s_i)x^i - \sigma(s_j)x^j)^2 + (s_iy^i + s_jy^j)^2 \geq (2r)^2 \\ 0 \leq s_i \leq 1 \\ \forall i, j \in I_k = \{1, \dots, k\} \end{cases} , \quad (5.1.11)$$

onde $\sigma(s) = \left(1 + (s - 1) \left(\frac{b}{a}\right)^2\right)$.

Veamos, a seguir, uma das possíveis variações para o problema de empacotamento. No Exemplo 5.1.3, estaremos interessados em determinar a elipse de menor área que comporte uma determinada quantidade de itens circulares de raio constante.

Exemplo 5.1.3. Neste exemplo, desejamos encontrar a elipse de menor área que possa conter 6 discos de raio $r = 1$. Este problema pode ser formulado como sendo o seguinte problema de programação não linear

$$\min ab, \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} b^2(x^i)^2 + a^2(y^i)^2 = a^2b^2, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ (s_i - 1)^2 \left[(x^i)^2 \left(\frac{b}{a}\right)^4 + (y^i)^2 \right] \geq 1, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ (\sigma(s_i)x^i - \sigma(s_j)x^j)^2 + (s_iy^i + s_jy^j)^2 \geq 4, \quad i < j \\ s_i \leq 1, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ 0 \leq s_i, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ b \leq a \end{cases} ,$$

onde $\sigma(s) = \left(1 + (s - 1) \left(\frac{b}{a}\right)^2\right)$. Neste problema o número de variáveis é $n = 3k + 2 = 3 \cdot 6 + 2 = 20$ e o número de restrições é $m = 4k + \frac{k(k-1)}{2} + 1 = 40$.

Apresentaremos, a seguir, duas soluções para este problema, cada uma delas obtidas a partir de um ponto inicial distinto. O objetivo desta abordagem, conforme explicado na seção 4.2.2, é enfatizar a importância de uma escolha adequada do ponto inicial, ao tratarmos de processos iterativos para minimizar funções não convexas. Isso ocorre uma vez que estas funções podem possuir diversos pontos estacionários, alguns deles não sendo mínimos globais, que são os pontos que nos interessam. Assim, a depender do ponto inicial adotado, teremos uma solução de melhor

ou pior qualidade.

A solução apresentada a seguir foi obtida com o ALGENCAN. O ponto inicial adotado está representado na Tabela 5.1 e sua representação gráfica está ilustrada da Figura 5.8(a). A solução obtida a partir deste ponto está na Tabela 5.2 e a ilustração do empacotamento na Figura 5.8(b).

Tabela 5.1: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valores iniciais para a e b

$a = 3,99999997$ e $b = 2,80000003$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-2,99999997	0,00000000	0,5000000
2	-1,00000001	0,00000000	0,5000000
3	0,99999996	0,00000000	0,5000000
4	3,00000003	0,00000000	0,5000000
5	0,00000000	1,74000000	0,5000000
6	0,00000000	-1,74000002	0,5000000

Tabela 5.2: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda da elipse, para os valores de s_i e para as medidas de a e b

$a = 4,00000000$ e $b = 3,46410161$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-4,00000000	0,00000000	0,6666666
2	-4,00000000	0,00000000	0,0000000
3	4,00000000	0,00000000	0,0000000
4	4,00000000	0,00000000	0,6666666
5	0,00000000	3,46410161	0,5136864
6	0,00000000	-3,46410161	0,5136864

Pela aplicação definida em (5.1.9), as coordenadas dos centros (x_i, y_i) podem ser recuperadas usando

$$(c_i^x, c_i^y) = (\sigma(s_i)x^i, s_i y^i), \text{ onde } \sigma(s) = \left(1 + (s - 1)\frac{b^2}{a^2}\right).$$

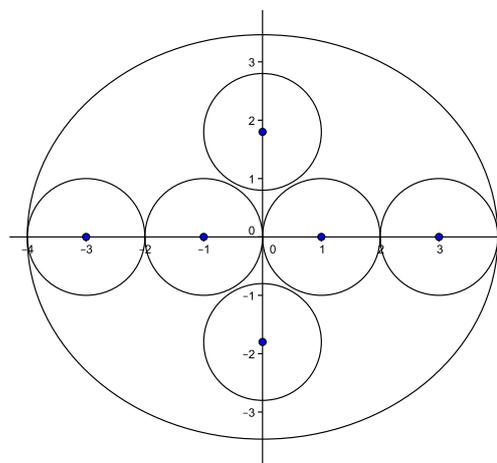
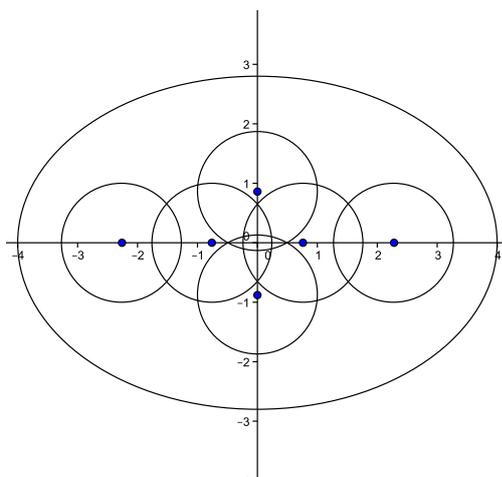
As coordenadas dos centros dos itens na configuração final, obtidas após a conversão, estão elencadas na Tabela 5.3.

Claramente esta não é a melhor solução possível, uma alternativa para conseguir uma solução melhor é escolher um novo ponto inicial. Isto posto, consideremos então como novo ponto inicial aquele representado na Tabela 5.4, cuja ilustração gráfica esta na Figura 5.9(a).

A solução obtida a partir deste novo ponto está na Tabela 5.5. As coordenadas dos centros dos itens na configuração final, após a conversão, estão na Tabela 5.6 e a ilustração do empa-

Tabela 5.3: Coordenadas dos centros dos itens na solução

i	c_i^x	c_i^y
1	-3,00000000	0,00000000
2	-1,00000000	0,00000000
3	1,00000000	0,00000000
4	3,00000000	0,00000000
5	0,00000000	1,77946189
6	0,00000000	-1,77946189



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.1.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.2.

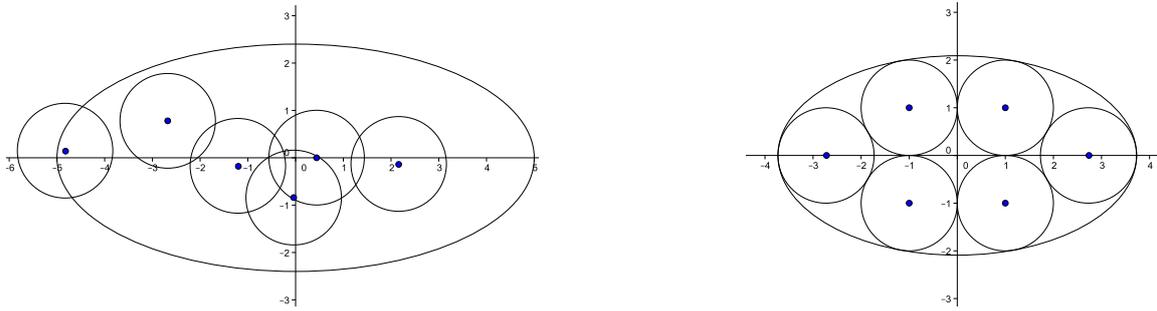
Figura 5.8: Seis itens circulares de raio 1 no interior de uma elipse cuja área não é a menor possível. Fato ocasionado pela escolha não adequada do ponto inicial.

Tabela 5.4: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valores iniciais para a e b

$a = 4.99999996$ e $b = 2.40000002$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	0,49994119	-0,00644197	0,5000000
2	-1,36971345	-0,34241841	0,5000000
3	2,44288554	-0,26778967	0,5000000
4	-0,04558455	-1,67985744	0,5000000
5	-3,02626780	1,55419635	0,5000000
6	-5,45934406	0,30583843	0,5000000

cotamento na Figura 5.9(b). Pode-se observar que a solução encontrada foi bem melhor que a exibida na Figura 5.8(b). Aparentemente a configuração obtida é a melhor possível.

Dado que um círculo é um caso particular de uma elipse, o problema tratado na seção



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.4.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.5.

Figura 5.9: Solução para o problema do Exemplo 5.1.3.

Tabela 5.5: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda da elipse, para os valores de s_i e para as medidas de a e b

$a = 3,73205080$ e $b = 2,09094154$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-1,18426403	1,98287678	0,5043177
2	1,18426403	-1,98287678	0,5043177
3	1,18426403	1,98287678	0,5043177
4	3,73205080	0,00000000	0,1463816
5	-3,73205080	0,00000000	0,1463816
6	-1,18426403	-1,98287678	0,5043177

Tabela 5.6: Coordenadas dos centros dos itens na solução

i	c_i^x	c_i^y
1	-0,99999997	0,99999986
2	0,99999997	-0,99999986
3	0,99999997	0,99999986
4	2,73205079	0,00000000
5	-2,73205079	0,00000000
6	-0,99999997	-0,99999986

5.1.2 deste trabalho, onde queríamos minimizar o raio ρ de um contêiner circular, pode ser resolvido usando a mesma modelagem apresentada nesta seção, a única alteração que faremos será substituir a restrição $b \leq a$ por $b = a$. O Exemplo 5.1.4, desenvolvido a seguir, traz esta abordagem e nos permite fazer uma comparação com o modelo anterior.

Exemplo 5.1.4. Neste exemplo, desejamos encontrar o círculo de menor área que possa conter 6 discos de raio $r = 1$. Este mesmo problema foi resolvido no Exemplo 4.1.4, do capítulo an-

terior, no entanto, resolveremos aqui novamente, para comparar os dois modelos. No Exemplo 5.1.3, apresentamos um caso similar a este, porém, lá queríamos encontrar a elipse de menor área. Neste, queremos encontrar o círculo de menor área. Conforme mencionamos no parágrafo anterior, a única alteração que faremos no modelo será substituir a última restrição do sistema apresentado naquele exemplo pela restrição $b = a$. Deste modo, este problema pode ser formulado como sendo o seguinte problema de programação não linear

$$\min a, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} b^2(x^i)^2q + a^2(y^i)^2 = a^2b^2, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ (s_i - 1)^2 \left[(x^i)^2 \left(\frac{b}{a}\right)^4 + (y^i)^2 \right] \geq 1, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ (\sigma(s_i)x^i - \sigma(s_j)x^j)^2 + (s_i y^i + s_j y^j)^2 \geq 4, \quad i < j \\ s_i \leq 1, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ 0 \leq s_i, \quad i \in \{1, \dots, 6\} \\ b = a \end{array} \right.,$$

onde $\sigma(s) = \left(1 + (s - 1) \left(\frac{b}{a}\right)^2\right)$. Neste problema o número de variáveis é $n = 3k + 2 = 3 \cdot 6 + 2 = 20$ e o número de restrições é $m = 4k + \frac{k(k-1)}{2} + 1 = 40$.

O ponto inicial adotado está representado na Tabela 5.4, o mesmo para a segunda solução do problema exposto no Exemplo 5.1.3, sua representação gráfica está ilustrada na Figura 5.9(a), porém, para uma melhor comparação entre a configuração inicial e final, exibimos também na Figura 5.10(a). A solução obtida a partir deste ponto está na Tabela 5.7 e a ilustração do empacotamento na Figura 5.10(b). As coordenadas dos centros dos itens, obtidas a partir da Tabela 5.7 e usando a aplicação definida em (5.1.9), estão representadas na Tabela 5.8.

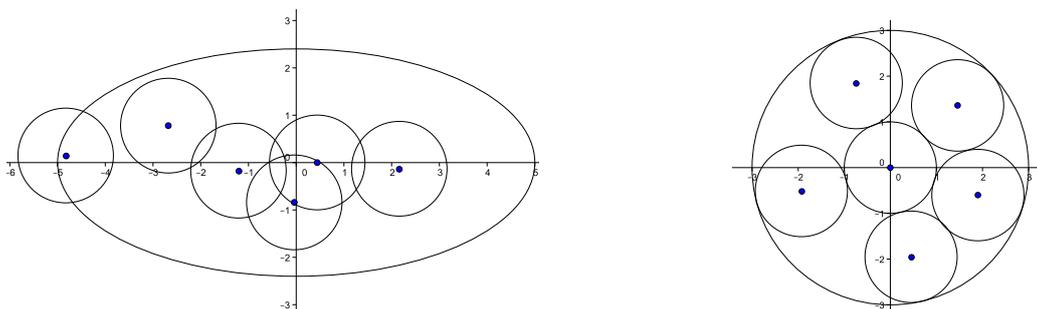
Tabela 5.7: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda do contêiner circular, para os valores de s_i e para as medidas de a e b

$a = b = 3,00000000$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	2,19268222	2,04747275	0,66666667
2	-2,67514750	1,35778709	0,00000000
3	2,86950440	-0,87518254	0,66666667
4	0,67682189	-2,92265498	0,66666667
5	-1,12854561	2,77963753	0,66666667
6	-2,90215133	-0,75994581	0,66666667

Este problema, quando resolvido com o uso da modelagem apresentada na seção 4.1.2 tem 13 variáveis, 21 restrições e o ALGENCAN demora 0,1 segundos para encontrar a solução. Neste novo modelo, usamos 20 variáveis e 40 restrições, além disso, o ALGENCAN demorou 0,14 segundos para encontrar a solução. Como o raio do contêiner obtido foi o mesmo para

Tabela 5.8: Coordenadas dos centros dos itens na solução

c_i^x	c_i^y
1,46178815	1,36498183
0,00000000	0,00000000
1,91300293	-0,58345503
0,45121459	-1,94843665
-0,75236374	1,85309169
-1,93476755	-0,50663054



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.4.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.7.

Figura 5.10: Seis círculos em um contêiner circular de área mínima.

os dois modelos, apesar das configurações terem sido diferentes, acreditamos que embora seja possível resolvê-lo usando a modelagem proposta nesta seção, provavelmente o modelo anterior, para o caso do contêiner circular, é melhor.

5.2 Empacotamento de círculos em uma região delimitada por uma parábola e pela reta $y = c$

A estratégia adotada para o empacotamento em um contêiner limitado inferiormente por uma parábola e superiormente por uma reta será similar a adotada para contêineres elípticos. De modo análogo ao caso do contêiner elíptico, estamos interessados em encontrar o ponto $q = (x, y) \in \partial E$, onde ∂E é a borda da região E delimitada pela curva $y = x^2$, mais próximo de um dado ponto $p \in E$. Para encontrar o ponto q , partiremos do caso particular em que o ponto p tem coordenadas $(0, y)$ e assumiremos que, assim como no contêiner elíptico, o ponto q mais próximo de p é o ponto (x, y) da borda que está na reta normal à curva em q e passa por p .

A reta normal à curva $y = x^2$ no ponto (x, y) é dada por

$$r_n(t) = \begin{bmatrix} -2x \\ 1 \end{bmatrix} \cdot t + \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (5.2.1)$$

Queremos que esta reta passe pelo ponto p . Como p tem a abscissa nula e, considerando que a coordenada x de q é diferente de zero, temos que:

$$-2xt + x = 0 \Leftrightarrow t^* = \frac{1}{2}.$$

Deste modo, para $t^* = \frac{1}{2}$ temos

$$r_n(t^*) = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} + y \end{bmatrix}. \quad (5.2.2)$$

Logo, para um determinado ponto q de coordenadas (x, y) , o ponto p terá coordenadas $(0, \frac{1}{2} + y)$ e a reta pq será normal à curva. O Exemplo 5.2.1 ilustra esta afirmação.

Exemplo 5.2.1. Neste exemplo, o ponto p terá as seguintes coordenadas $(0, 1.5)$. Estamos interessados em encontrar o ponto $q \in \partial E$, tal que a reta pq seja normal à curva em q . Para encontrar q , em conformidade com (5.2.2), devemos resolver a seguinte equação

$$\frac{1}{2} + y = \frac{1}{2} + x^2 = 1.5.$$

Esta equação possui as seguintes soluções reais:

$$x_1 = -1 \text{ ou } x_2 = 1 \text{ e } y = 1$$

Além disso, a reta tangente à parábola dada por $f(x) = x^2$ no ponto $(0, 0)$ é horizontal, uma vez que $f'(0) = 0$, portanto, paralela ao eixo das abscissas, conseqüentemente, normal ao eixo das ordenadas. Como o ponto p está no eixo das ordenadas, temos que a reta que passa por $(0, 0)$ e por p é normal à parábola. Podemos, então, concluir que as retas que passam por $(0, 1.5)$ e pelos pontos q_1, q_2 e q_3 , cujas coordenadas são, respectivamente,

$$\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

são normais à curva $y = x^2$. A Figura 5.11 ilustra estas retas.

O próximo passo será determinar para qual $q_i, i \in \{1, 2, 3\}$ a distância entre p e q será mínima. A distância entre estes pontos é determinada pela função

$$d(p, q) = f(x) = \sqrt{(x - 0)^2 + (x^2 - 1, 5)^2}. \quad (5.2.3)$$

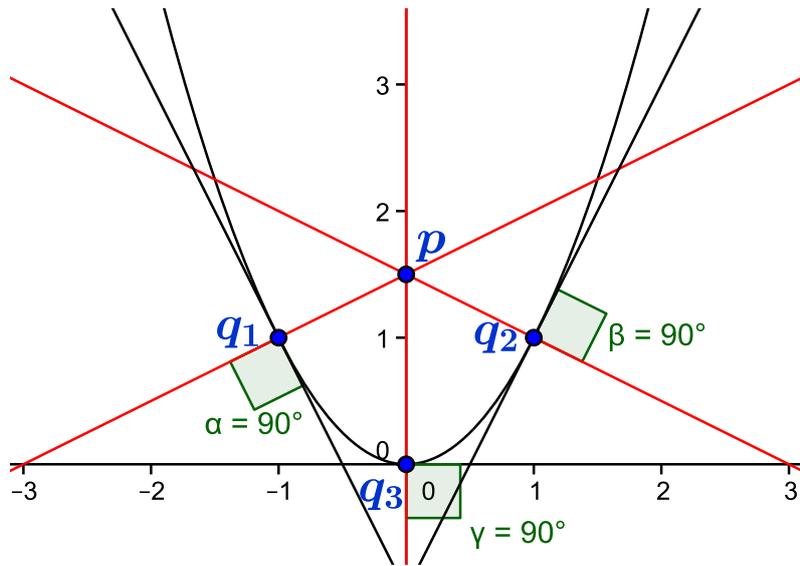


Figura 5.11: Retas normais à curva $y = x^2$ nos pontos q_1 , q_2 e q_3 passando pelo ponto p .

De (5.2.3) tem-se que

$$f'(x) = \frac{2(x^3 - x)}{\sqrt{x^4 - 2x^2 + 2,25}} \quad (5.2.4)$$

e

$$f''(x) = \frac{2(x^6 - 3x^4 + 6,75x^2 - 2,25)}{(\sqrt{x^4 - 2x^2 + 2,25})^3}. \quad (5.2.5)$$

Calculando $f'(x)$ e $f''(x)$ nos pontos x_i , $i \in \{1, 2, 3\}$ temos:

- $f'(x_1) = f'(-1) = 0$ e $f''(x_1) \approx 3,58$. Portanto, x_1 é um minimizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_2) = f'(1) = 0$ e $f''(x_2) \approx 3,58$. Portanto, x_2 é um minimizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_3) = f'(0) = 0$ e $f''(x_3) \approx -1,33$. Portanto, x_3 é um maximizador local da distância entre p e q .

Os resultados obtidos até aqui nos permitem inferir que, para o caso particular em que o ponto no interior do contêiner é da forma $p = (0, y)$, o ponto $q \in \partial E$ deve ser aquele que está na reta perpendicular à ∂E e passa por p . Consideremos agora o segmento \overline{pq} . O gráfico exibido na Figura 5.12 mostra que o disco de centro $p = (0, y)$ e raio $r = d(q, p)$ está contido na região E e intercepta ∂E em q . Isso mostra que a distância entre $p = (0, y)$ e ∂E é igual a $d(q, p)$. Além disso, como pode ser observado na mesma figura, um disco com centro $k \in \overline{pq}$ e raio menor que $d(q, p)$ também está contido em E e tangencia ∂E justamente em q , isto mostra

que para o ponto $k \in \overline{pq}$ o ponto mais próximo a ele em ∂E é exatamente o ponto q . Por este motivo, temos novamente que o ponto q que realiza a menor distância de k até ∂E está na reta perpendicular ao contêiner, maiores detalhes sobre estas propriedades podem ser encontrados em [7].

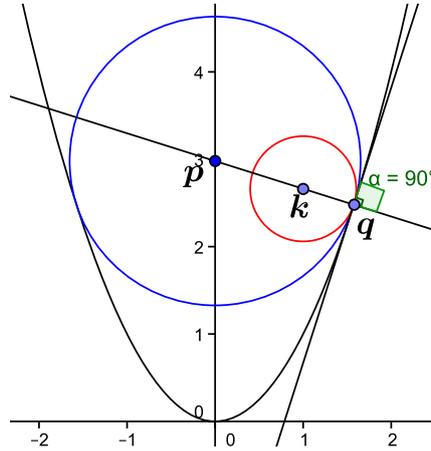


Figura 5.12: O disco centrado em $p = (0, y)$ e raio $r = d(q, p)$ e o disco com centro $k \in \overline{pq}$ e raio $r < d(q, p)$ estão contidos na região E .

Precisamos agora de uma maneira de representar o ponto k . Para esta representação, podemos usar a aplicação $H : \partial E \times [0, 1] \rightarrow E$, definida por:

$$H(q, s) = \left(sx, y + \frac{1-s}{2} \right), \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (5.2.6)$$

Na aplicação definida em (5.2.6) a variação de s no intervalo $[0, 1]$ faz o t da reta definida em (5.2.1) variar de 0 a $1/2$. Para um melhor entendimento deste processo, vamos comparar a aplicação definida em (5.2.6) para alguns valores de s com os pontos da reta definida em (5.2.1).

- para $s = 0$, $H(q, 0) = \left(0, y + \frac{1}{2} \right)$. O mesmo ponto é obtido adotando $t = \frac{1}{2}$ em (5.2.1);
- para $s = \frac{1}{2}$, $H\left(q, \frac{1}{2}\right) = \left(\frac{1}{2}x, y + \frac{1}{4} \right)$. O mesmo ponto é obtido adotando $t = \frac{1}{4}$ em (5.2.1);
- para $s = 1$, $H(q, 1) = (x, y)$. O mesmo ponto é obtido adotando $t = 0$ em (5.2.1).

Portanto, quando s varia no intervalo $[0, 1]$, o ponto da reta definida em (5.2.1) se desloca entre a fronteira e o eixo y , conforme a ilustração exibida na Figura 5.13.

No Exemplo 5.2.1, vimos que o ponto $x_3 = 0$ é um maximizador local da distância entre o ponto $(0, 0) \in \partial E$ e o ponto $(0, 1.5)$. Mostraremos, agora que $(0, 0)$ é um maximizador da distância para o caso em que $p = (0, y)$, sempre que $y > 0, 5$.

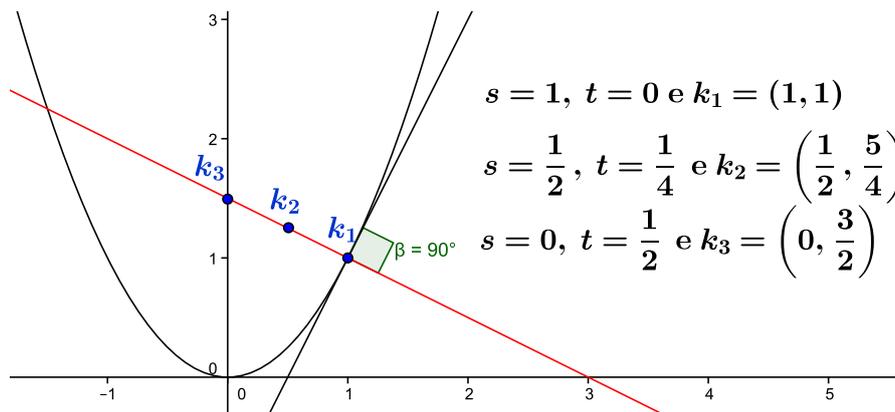


Figura 5.13: Variação de s no intervalo $[0, 1]$. Para $s = 1$, tem-se $t = 0$ e $k_1 = q = (1, 1)$, ou seja, um ponto da borda da curva $y = x^2$. Para $s = \frac{1}{2}$, tem-se $t = \frac{1}{4}$ e $k_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{5}{4}\right)$, ou seja, o ponto médio do segmento \overline{pq} . Finalmente, quando $s = 0$, tem-se $t = \frac{1}{2}$ e $k_3 = p = \left(0, \frac{3}{2}\right)$, ou seja, um ponto do eixo y .

Consideremos o ponto p com as seguintes coordenadas $(0, y)$. Já sabemos, do Exemplo 5.2.1, que a reta que passa por p e pelo ponto $(0, 0)$ é normal à curva. A distância entre este ponto p e um ponto (x, x^2) qualquer da parábola é dada por

$$d(p, q) = f(x) = \sqrt{(x - 0)^2 + (x^2 - y)^2}. \quad (5.2.7)$$

De (5.2.7) tem-se que

$$f'(x) = \frac{4x(x^2 - y) + 2x}{2\sqrt{(x^2 - y)^2 + x^2}}$$

e

$$f''(x) = \frac{4(x^2 - y) + 8x^2 + 2}{2\sqrt{(x^2 - y)^2 + x^2}} - \frac{(4x(x^2 - y) + 2x)^2}{4((x^2 - y)^2 + x^2)^{3/2}}.$$

Calculando $f'(x)$ e $f''(x)$ no ponto $x = 0$ temos:

$$f'(0) = 0 \text{ e } f''(0) = \frac{-4y + 2}{2y}.$$

Resolvendo a inequação $f''(0) < 0$ obtemos

$$\frac{-4y + 2}{2y} < 0 \Leftrightarrow -4y + 2 < 0 \Leftrightarrow -4y < -2 \Leftrightarrow 4y > 2 \Leftrightarrow y > \frac{1}{2}.$$

Deste modo, para qualquer ponto $p = (0, y)$, com $y > 0.5$, teremos que $q = (0, 0)$ é um

maximizador da distância entre estes pontos. Além disso, caso $p = (0, y)$, para $0 < y < 0.5$, teremos apenas uma reta normal à parábola passando por p , qual seja, a reta que passa pelo ponto $(0, 0)$. Como justificativa, consideremos a equação reduzida da reta normal à parábola no ponto $(x_0, y_0) \neq (0, 0)$, dada por

$$r(x) = \frac{-1}{2x_0}(x - x_0) + x_0^2. \quad (5.2.8)$$

Uma vez que queremos que esta reta passe por um ponto $(0, y)$, para $0 < y < 0.5$, devemos ter $r(0) < 0.5$. Assim, de (5.2.8) temos

$$r(0) = -\frac{1}{2x_0}(0 - x_0) + x_0^2 < \frac{1}{2} \Leftrightarrow \frac{1}{2x_0}x_0 + x_0^2 < \frac{1}{2} \Leftrightarrow x_0^2 < 0. \quad (5.2.9)$$

Como a inequação estabelecida em (5.2.9) não tem solução, podemos afirmar que não existe reta normal à parábola em $(x_0, y_0) \neq (0, 0)$ que passa por um ponto $p = (0, y)$, para $0 < y < 0.5$. Logo, a única reta normal à parábola que passa por p é aquela que passa pelo ponto $(0, 0)$.

Esta é uma característica importante deste contêiner uma vez que, por estarmos tratando de itens circulares de raio 1, sabemos que necessariamente o ponto p , caso seja mapeado no eixo das ordenadas, terá coordenadas da forma $(0, y)$, com $y > 1$ e mais ainda, para pontos assim, existem dois pontos q e q' que o mapeia, sendo que p é equidistante a estes pontos. Além disso, por p pode ainda passar outra reta normal à curva, aquela que passa pelo ponto $(0, 0)$. No entanto, conforme vimos no exemplo anterior, a reta que passa por $(0, 0)$ maximiza a distância de p a q . Desta forma, no máximo duas retas serão consideradas, ambas realizando a mesma distância de p a q . Esta observação é importante, pois como pode ser visto na próxima seção deste trabalho, a existência de diferentes pontos q que mapeiam p , com distâncias distintas, pode gerar alguns problemas.

Agora que temos a aplicação H , caso queiramos empacotar k círculos de raio 1 no interior do menor contêiner delimitado pela curva $y = x^2$ e a tampa $y = c$, devemos resolver o seguinte problema de otimização:

$$\min c, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} (x^i)^2 = y^i \\ (s_i x^i - x^i)^2 + \left(\frac{1-s_i}{2}\right)^2 \geq 1 \\ (s_i x^i - s_j x^j)^2 + \left(\left(y^i + \frac{1-s_i}{2}\right) - \left(y^j + \frac{1-s_j}{2}\right)\right)^2 \geq 4, i < j \\ y^i + \frac{1-s_i}{2} \leq c - 1 \\ 0 \leq s_i \leq 1 \\ \forall i, j \in I_k = \{1, \dots, k\} \end{array} \right.$$

O número de variáveis deste problema é $n = 3k + 1$, sendo k o número de círculos. O número

de restrições é $m = 5k + \frac{k(k-1)}{2}$. As restrições, na ordem em que se apresentam, asseguram que os pontos (x^i, y^i) estejam na borda da região, que a distância entre os pontos internos à região e a borda seja maior ou igual a 1 (garantia de que o círculo de raio 1 esteja contido em E), asseguram também que o quadrado da distância entre os centros sejam maior ou igual que 4 (não sobreposição dos discos), garantem que os círculos estejam abaixo da tampa e, por fim, as últimas garantem que s esteja entre 0 e 1, condição necessária para que o centro do círculo esteja no segmento \overline{pq} .

No exemplo que segue, estaremos interessados em determinar o menor contêiner limitado inferiormente pela curva $y = x^2$ e superiormente pela reta $y = c$, de modo a comportar em seu interior uma determinada quantidade de itens circulares de raio constante.

Exemplo 5.2.2. Neste exemplo, desejamos encontrar o menor contêiner limitado inferiormente pela curva $y = x^2$ e superiormente pela reta $y = c$ de modo que possa conter em seu interior 7 discos de raio $r = 1$. Este problema pode ser formulado como sendo o seguinte problema de programação não linear

$$\min c, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} (x^i)^4 = y^i, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ (s_i x^i - x^i)^2 + \left(\frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right)^2 \geq 1, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ (s_i x^i - s_j x^j)^2 + \left(\left(y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right) - \left(y^j + \frac{1-s_j}{4(x^j)^2}\right)\right)^2 \geq 4, \quad i < j \\ y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2} \leq c - 1, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ s_i \leq 1, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ 0 \leq s_i, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \end{array} \right.$$

O número de variáveis deste problema é $n = 3 \cdot 7 + 1 = 22$ e número de restrições é $m = 5 \cdot 7 + \frac{7(7-1)}{2} = 56$.

Apresentaremos, a seguir, uma solução para este problema obtida com o auxílio do ALGENCAN, a partir do ponto inicial descrito na Tabela 5.9. Pela aplicação definida em (5.2.6), as coordenadas dos centros (c_i^x, c_i^y) podem ser recuperadas usando

$$(c_i^x, c_i^y) = \left(s_i x, y + \frac{1-s_i}{2} \right).$$

A Figura 5.14(a) ilustra a configuração para o ponto inicial adotado. A solução está representado na Tabela 5.10 e ilustrada na Figura 5.14(b). As coordenadas dos centros dos itens na solução, obtidas após a conversão, estão elencadas na Tabela 5.11.

Aparentemente a solução descrita na Tabela 5.10 não é a melhor possível, este fato ocorre, conforme temos enfatizado neste texto, por causa da escolha do ponto inicial. Para melhorar esta solução adotaremos o ponto inicial descrito na Tabela 5.12. A partir deste ponto é obtida a solução que está na Tabela 5.13. A Tabela 5.14 apresenta as coordenadas dos centros dos

Tabela 5.9: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valor inicial de c

c=8,00000000			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	0,90000000	0,81000000	0,00000000
2	2,00000000	4,00000000	0,50000000
3	1,50000000	2,25000000	0,50000000
4	-2,00000000	4,00000000	0,50000000
5	-1,50000000	2,25000000	0,50000000
6	2,50000000	6,25000000	0,50000000
7	2,70000000	7,24000000	0,10000000

Tabela 5.10: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda do contêiner, para os valores de s_i e para a medida de c

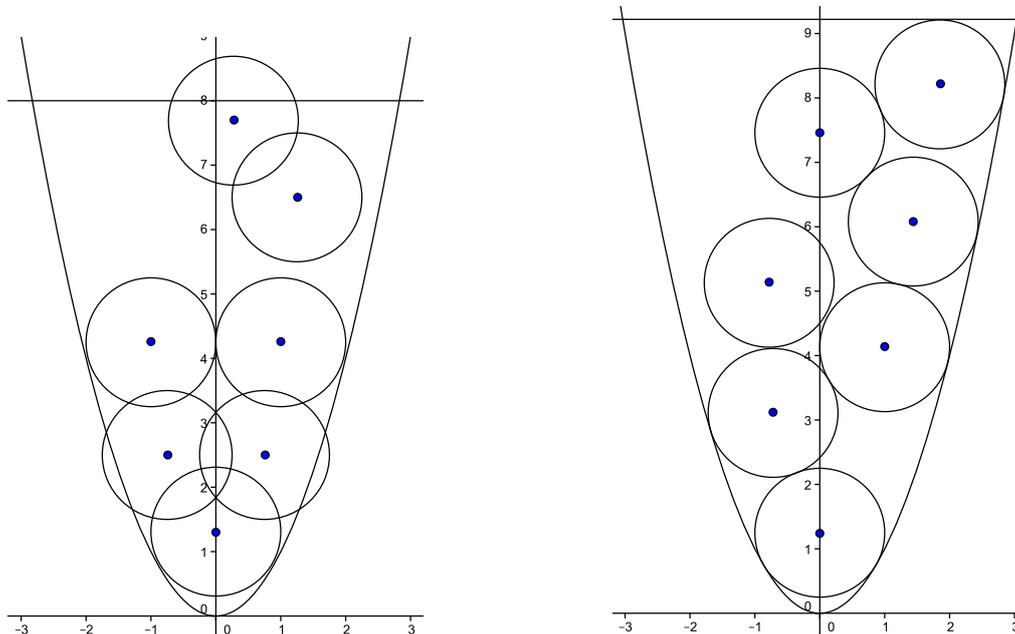
c=9,21747154			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	0,86602540	0,75000000	0,00000000
2	2,42397639	5,87566156	0,59596080
3	1,97016062	3,88153289	0,50802346
4	-2,19076722	4,79946103	0,35502941
5	-1,68214019	2,82959562	0,43015971
6	2,83616902	8,04385473	0,65276636
7	2,63834156	6,96084620	0,00000000

Tabela 5.11: Coordenadas dos centros dos itens na solução

i	c_i^x	c_i^y
1	0,00000000	1,25000000
2	1,44459491	6,07768116
3	1,00088781	4,12752116
4	-0,77778679	5,12194633
5	-0,72358894	3,11451577
6	1,85135573	8,21747155
7	0,00000000	7,46084620

itens. A configuração inicial e a final estão ilustradas na Figura 5.15. A função objetivo deste problema é dada por c . Para o primeiro ponto inicial obtivemos a solução $c = 9,21747154$, já para o segundo ponto inicial obtivemos $c = 8,95499764$, ou seja, houve uma melhora na solução obtida.

Apesar desta última solução ter sido melhor, quando comparada com a primeira, é possível ver, na Figura 5.15(b), que ainda não temos a melhor configuração possível. Para melhorá-la, buscaremos uma nova solução, agora tendo como ponto inicial aquele descrito na Tabela 5.15.



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.9.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.10.

Figura 5.14: Sete círculos em um contêiner limitado pela curva $y = x^2$ e pela reta $y = c$.

Tabela 5.12: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valor inicial de c

$c=8,50000000$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	0,90000000	0,81000000	0,00000000
2	1,61000000	2,59000000	0,41000000
3	-1,61000000	2,59000000	0,41000000
4	2,16000000	4,67000000	0,54000000
5	-2,16000000	4,67000000	0,54000000
6	2,50000000	6,25000000	0,47000000
7	-2,50000000	6,25000000	0,47000000

A solução obtida está descrita na Tabela 5.16 e as coordenadas dos centros dos itens obtidas após a conversão estão na Tabela 5.17. A Figura 5.16 ilustra as configurações inicial e final para o empacotamento.

Um outra possibilidade para a configuração final é apresentada na Figura 5.17, porém não há melhora no valor da função objetivo e será exibida aqui apenas como ilustração.

Tabela 5.13: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda do contêiner, para os valores de s_i e para a medida de c

c=8,95499764			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	0,87566662	0,76679203	0,00000000
2	1,96924554	3,87792802	0,50780890
3	-1,96924554	3,87792802	0,50780890
4	2,41476360	5,83108328	0,41411921
5	-2,41476360	5,83108328	0,41411921
6	2,78900257	7,77853538	0,64707547
7	-2,78900257	7,77853538	0,64707547

Tabela 5.14: Coordenadas dos centros dos itens na solução

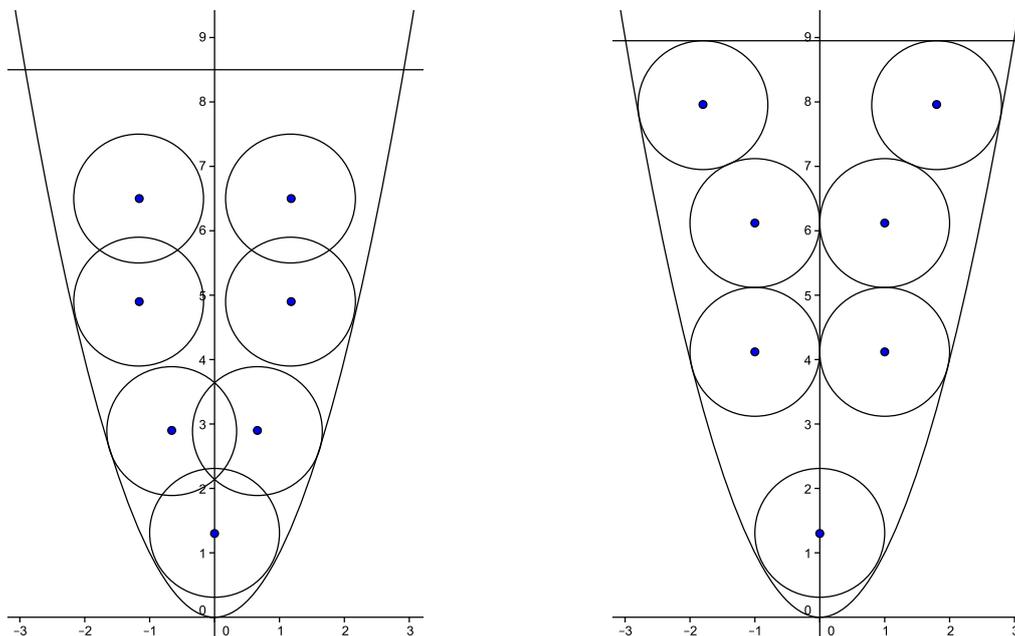
i	c_i^x	c_i^y
1	0,00000000	1,26679203
2	1,00000041	4,12402357
3	-1,00000041	4,12402357
4	0,99999999	6,12402368
5	-0,99999999	6,12402368
6	1,80469515	7,95499765
7	-1,80469515	7,95499765

Tabela 5.15: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valor inicial de c

c=8,50000000			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	0,87500000	0,76700000	0,00000000
2	1,96900000	3,87800000	0,50000000
3	-1,96900000	3,87800000	0,50000000
4	2,41400000	5,83100000	0,41000000
5	-2,41400000	5,83100000	0,41000000
6	1,78900000	7,77800000	0,64000000
7	-2,78900000	7,77800000	0,64000000

5.3 Empacotamento de círculos em uma região delimitada inferiormente pela curva $y = x^4$ e superiormente pela reta $y = c$

Nesta subseção, estudaremos o problema de empacotar círculos idênticos em uma região E , limitada inferiormente pela curva $y = x^4$ e superiormente pela reta $y = c$. Nesta abordagem,



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.12.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.13.

Figura 5.15: Sete círculos em um contêiner limitado pela curva $y = x^2$ e pela reta $y = c$.

Tabela 5.16: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda do contêiner, para os valores de s_i e para a medida de c

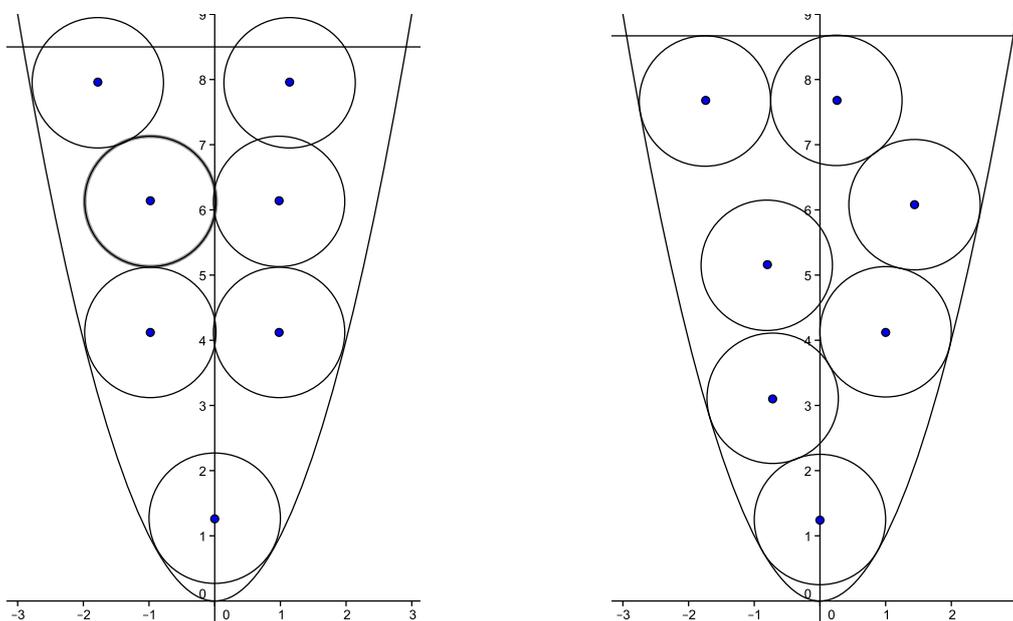
$c=8,67826300$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	0,86602540	0,74999999	0,00000000
2	1,97016062	3,88153288	0,50802346
3	-1,68214019	2,82959562	0,43015970
4	2,42397639	5,87566156	0,59596080
5	-2,19921738	4,83655710	0,36611499
6	2,68773314	7,22390943	0,09129294
7	-2,73836483	7,49864193	0,64075791

aplicaremos uma técnica similar a adotada para o empacotamento em uma região elíptica ou parabólica.

Assim como nos casos anteriores, estamos interessados em encontrar o ponto $q = (x, y) \in \partial E$, onde ∂E é a borda da região E , agora delimitada pela curva $y = x^4$ e pela reta $y = c$, mais próximo de um dado ponto $p \in E$. Nos casos anteriores, foi visto que o ponto q mais próximo

Tabela 5.17: Coordenadas dos centros dos itens na solução

i	c_i^x	c_i^y
1	0,00000000	1,24999999
2	1,00088781	4,12752115
3	-0,72358892	3,11451577
4	1,44459491	6,07768116
5	-0,80516645	5,15349961
6	0,24537106	7,67826296
7	-1,75462893	7,67826298



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.15.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.16.

Figura 5.16: Sete círculos em um contêiner limitado pela curva $y = x^2$ e pela reta $y = c$.

de p é o ponto (x, y) da borda que está na reta normal à curva em q e passa por p . Isto também é verdadeiro neste contexto, pois as curvas de nível da função distância a um ponto dado são círculos e, portanto, a curva que passa pelo ponto de menor distância tangencia o contêiner. Entretanto, para o contêiner aqui estudado, veremos que para um dado ponto $p \in E$ podem existir na fronteira ∂E diferentes pontos q e q' , tais que as retas pq e pq' são normais à curva e nem todos eles realizam a menor distância. A seguir tentaremos elucidar este fato.

Estamos interessados em responder a seguinte pergunta: Qual é o ponto q , da fronteira,

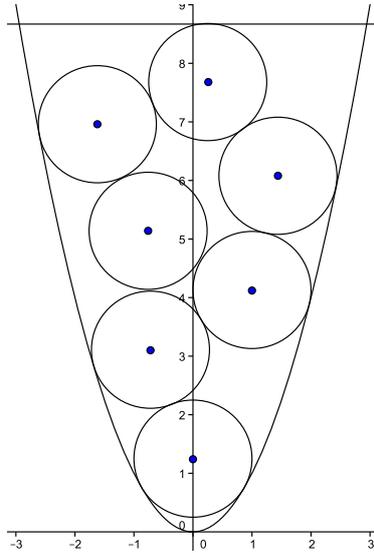


Figura 5.17: Sete círculos em um contêiner limitado pela curva $y = x^2$ e pela reta $y = c$.

mais próximo de um ponto $p \in E$ dado? Admitamos que, assim como nos casos anteriores, o ponto q seja tal que a reta pq seja normal à curva. Neste caso, um caminho natural para responder a questão seria encontrar a equação desta reta. Para tanto, analisaremos o caso particular em que o ponto p tem coordenadas $(0, y)$, ou seja, p é um ponto do eixo y .

A reta normal à curva $y = x^4$ no ponto (x, y) é dada por

$$r_n(t) = \begin{bmatrix} -4x^3 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot t + \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Queremos que esta reta passe pelo ponto p . Como p tem a abscissa nula e, considerando que a coordenada x de q é diferente de zero, temos que:

$$-4x^3t + x = 0 \Leftrightarrow t^* = \frac{1}{4x^2}.$$

Deste modo, para $t^* = \frac{1}{4x^2}$ temos

$$r_n(t^*) = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{4x^2} + y \end{bmatrix}. \quad (5.3.1)$$

Assim, para um determinado ponto q de coordenadas (x, y) , o ponto p terá coordenadas $(0, \frac{1}{4x^2} + y)$ e a reta pq será normal à curva. Para ilustrar, estudaremos, no exemplo a seguir, o caso em que p seja o ponto $(0, 1.25)$.

Exemplo 5.3.1. Neste exemplo, o ponto p terá as seguintes coordenadas $(0, 1.25)$. Estamos interessados em encontrar o ponto $q \in \partial E$, tal que a reta pq seja normal à curva em q . Para encontrar q , em conformidade com (5.3.1), devemos resolver a seguinte equação

$$\frac{1}{4x^2} + y = \frac{1}{4x^2} + x^4 = 1.25.$$

Esta equação possui as seguintes soluções reais:

$$x_1 = -1, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = -\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}}, \quad x_4 = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}}.$$

Com isso, teremos pelo menos 4 retas distintas que passam por $(0, 1.25)$ e são normais à curva $y = x^4$ nos pontos q_1, q_2, q_3 e q_4 , cujas coordenadas são, respectivamente,

$$\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}} \\ \left(-\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}}\right)^4 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}} \\ \left(\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}}\right)^4 \end{bmatrix}.$$

Além destas retas, dado o ponto $q_5 = (0, 0)$, a reta pq_5 também será normal à curva, neste caso no ponto $(0, 0)$. A Figura 5.18 ilustra o caso em que a reta pq_2 é normal à curva $y = x^4$ no ponto $(1, 1)$.

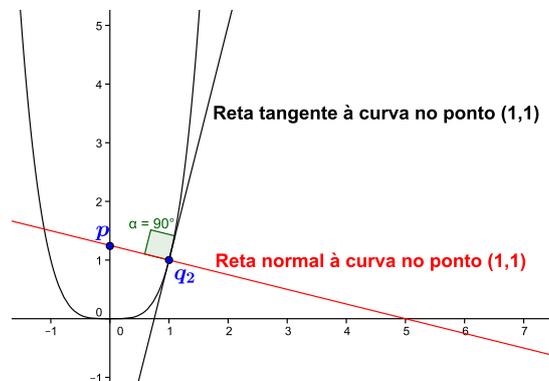


Figura 5.18: Reta normal à curva no ponto q_2 de coordenadas $(1, 1)$ passando pelo ponto p .

Contabilizamos cinco retas que passam por $(0, 1.25)$ e são normais à curva nos diferentes pontos $q_i, i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$. O próximo passo será determinar para qual q_i a distância entre p e q será mínima.

A distância entre p e q é determinada pela função

$$d(p, q) = f(x) = \sqrt{(x - 0)^2 + (x^4 - 1, 25)^2}. \quad (5.3.2)$$

De (5.3.2) tem-se que, para $f(x) \neq 0$,

$$f'(x) = \frac{x + 4x^3(x^4 - 1, 25)}{\sqrt{x^2 + (x^4 - 1, 25)^2}} \quad (5.3.3)$$

e

$$f''(x) = \frac{32x^6 + 24(x^4 - 1, 25)x^2 + 2}{2\sqrt{(x^4 - 1, 25)^2 + x^2}} - \frac{(8(x^4 - 1, 25)x^3 + 2x)^2}{4((x^4 - 1, 25)^2 + x^2)^{3/2}}. \quad (5.3.4)$$

Calculando $f'(x)$ e $f''(x)$ nos pontos x_i , $i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ temos:

- $f'(x_1) = f'(-1) = 0$ e $f''(x_1) \approx 13,58$. Portanto, x_1 é um minimizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_2) = f'(1) = 0$ e $f''(x_2) \approx 13,58$. Portanto, x_2 é um minimizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_3) = f'\left(-\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}}\right) = 0$ e $f''(x_3) \approx -1,44$. Portanto, x_3 é um maximizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_4) = f'\left(\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}}\right) = 0$ e $f''(x_4) \approx -1,44$. Portanto, x_4 é um maximizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_5) = f'(0) = 0$ e $f''(x_5) \approx 0,8$. Por fim, x_5 também é um minimizador local da distância entre p e q .

A existência de diferentes retas que passam por p e são normais à curva, conforme anunciado no segundo parágrafo desta seção e ilustrado no exemplo anterior, gera alguns inconvenientes, conforme veremos no Exemplo 5.3.2. Estes problemas que surgem, mostram que não é trivial a extensão do modelo proposto para os casos anteriores às curvas que não são descritas por equações quádricas. Prossigamos então com a execução da técnica, semelhante a usada nos contêineres elípticos ou parabólicos. Neste caso, para um dado ponto $p \in E$ o ponto $q \in \partial E$ estaria na reta pq normal à curva. Além disso, para qualquer ponto k no segmento \overline{pq} o ponto da fronteira mais próximo de k seria justamente o ponto q . Precisamos agora de uma maneira de representar o ponto k . Para esta representação podemos usar a aplicação $H : \partial E \times [0, 1] \rightarrow E$ definida por:

$$H(q, s) = \left(sx, y + \frac{1-s}{4x^2} \right), \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (5.3.5)$$

Como exemplo, vamos adotar $q = (1, 1)$ e $s = 0,5$. Neste caso o ponto pertencente ao seguimento \overline{pq} será o ponto k de coordenadas $(0,5, 1,125)$ conforme ilustrado na Figura 5.19.

Agora que temos a aplicação H , caso queiramos empacotar k círculos de raio 1 no interior do menor contêiner delimitado pela curva $y = x^4$ e a tampa $y = c$, devemos resolver o seguinte

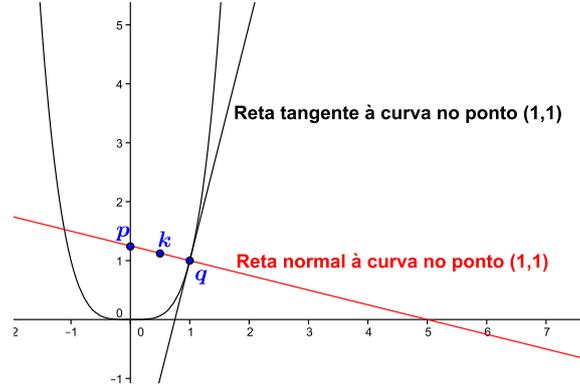


Figura 5.19: Ponto k pertencente ao segmento \overline{pq} .

problema de otimização:

$$\min c, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} (x^i)^4 = y^i \\ (s_i x^i - x^i)^2 + \left(\frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right)^2 \geq 1 \\ (s_i x^i - s_j x^j)^2 + \left(\left(y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right) - \left(y^j + \frac{1-s_j}{4(x^j)^2}\right)\right)^2 \geq 4 \\ y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2} \leq c - 1 \\ 0 \leq s_i \leq 1 \\ \forall i, j \in I_k = \{1, \dots, k\} \end{array} \right.$$

O número de variáveis deste problema é $n = 3k + 1$, sendo k o número de círculos. O número de restrições é $m = 5k + \frac{k(k-1)}{2}$. As restrições, na ordem em que se apresentam, asseguram que os pontos (x^i, y^i) estejam na borda da região, que o quadrado da distância entre os pontos internos à região e a borda seja maior ou igual a 1 (garantia de que o círculo de raio 1 esteja contido em E), asseguram também que o quadrado da distância entre os centros sejam maior ou igual que 4 (não sobreposição dos discos), garantem que os círculos estejam abaixo da tampa e, por fim, as últimas garantem que s esteja entre 0 e 1, condição necessária para que o centro do círculo esteja no segmento \overline{pq} .

No exemplo que segue, estaremos interessados em determinar o menor contêiner limitado inferiormente pela curva $y = x^4$ e superiormente pela reta $y = c$, de modo a comportar em seu interior um único item circular de raio 1. Este exemplo será útil para ilustrar o tipo de problema que pode ocorrer neste contêiner.

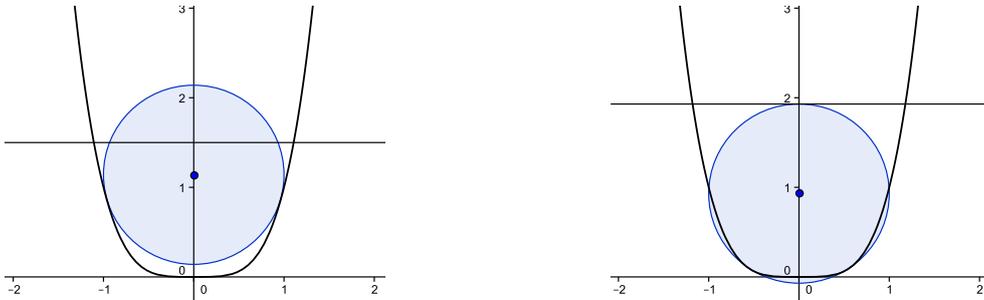
Exemplo 5.3.2. Neste exemplo, desejamos encontrar o menor contêiner limitado inferiormente pela curva $y = x^4$ e superiormente pela reta $y = c$ de modo que possa conter em seu interior um único disco de raio $r = 1$.

Este problema pode ser formulado como sendo o seguinte problema de programação não

linear

$$\min c, \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} (x)^4 = y \\ (sx - x)^2 + \left(\frac{1-s}{4x^2}\right)^2 \geq 1 \\ y + \frac{1-s}{4x^2} \leq c - 1 \\ s \leq 1 \\ 0 \leq s. \end{cases}$$

Este problema foi resolvido com o auxílio do ALGENCAN, para tanto, adotamos três pontos iniciais distintos, o primeiro é dado por $(x, y, s, c) = (-0.48, 0.05, 0, 1.5)$. A solução obtida a partir deste ponto é, arredondando para duas casas decimais, $(x, y, s, c) = (-0.55, 0.09, 0, 1.93)$ e, em conformidade com (5.3.5), as coordenadas do centro do círculo são $(c^x, c^y) = (0, 0.93)$. A Figura 5.20 exibe as configurações para estes pontos.



(a) Configuração para o ponto inicial $(x, y, s, c) = (-0.48, 0.05, 0, 1.5)$.

(b) Configuração para o ponto final $(x, y, s, c) = (-0.55, 0.09, 0, 1.93)$.

Figura 5.20: Um círculo em um contêiner limitado pela curva $y = x^4$ e pela reta $y = c$.

Embora o ALGENCAN tenha encontrado, o ponto $(x, y, s, c) = (-0.55, 0.09, 0, 1.93)$ como solução do problema, é possível ver na Figura 5.20(b) que este ponto não é de fato uma solução. Isso é ocasionado por conta da existência de diferentes retas, normais à curva, que passam por $(c^x, c^y) = (0, 0.93)$, que é o centro do círculo obtido a partir da solução $(x, y, s, c) = (-0.55, 0.09, 0, 1.93)$. Em algumas destas retas temos minimizadores da distância entre o centro do círculo e a borda da região, em outras, temos maximizadores. Neste caso, o ponto encontrado é um maximizador local da distância entre o centro do círculo e a borda da região. A Figura 5.21 exibe os 4 segmentos $\overline{pq_i}$, das retas pq_i , $i \in \{1, 2, 3, 4\}$, que são normais à curva $y = x^4$ e passam pelo centro do círculo $(0, 0.93)$.

O ponto mapeado pelo ALGENCAN é o ponto q_2 , cuja distância ao centro do círculo é 1. Entretanto, a menor distância do centro do círculo à borda da curva é 0.94, que corresponde aos pontos q_1 e q_4 , conforme pode ser visualizado na Figura 5.21. Como essa distância é menor que 1, que é o raio do círculo, o item não fica inteiramente contido no contêiner.

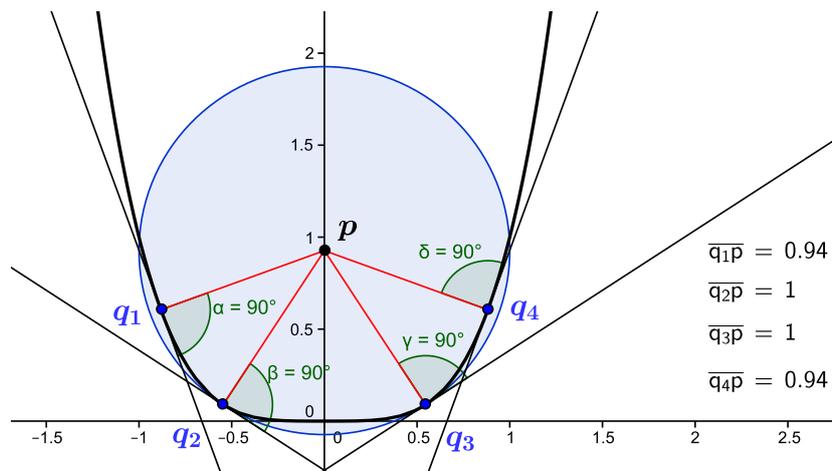
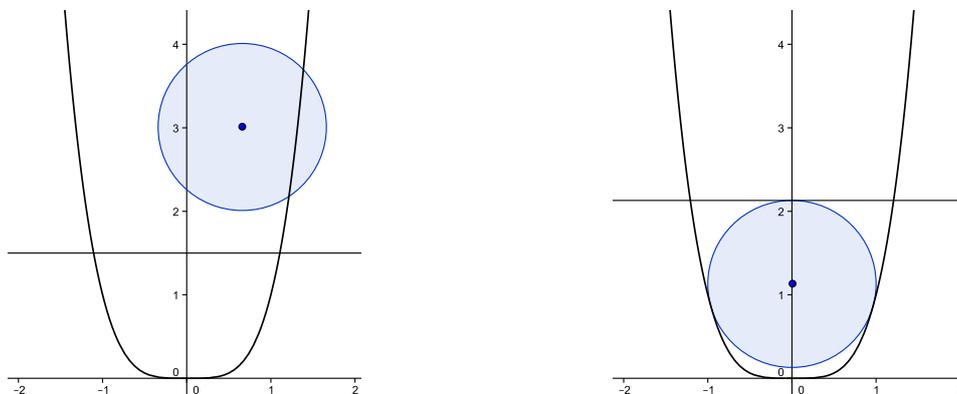


Figura 5.21: Segmentos de retas normais à curva passando pelo centro $p = (c^x, c^y) = (0, 0.93)$ do círculo.

Pela Figura 5.20(a) pode-se ver que o ponto inicial na verdade já era uma solução para o problema. Isso acontece porque a parametrização usada para descrever aquele círculo não era adequada, uma vez que é oriunda de pontos da quártica que não são minimizadores da distância até o centro. Adotando como ponto inicial $(x, y, s, c) = (-0.96, 0.86, 0, 1.5)$ descrevemos o mesmo círculo. Neste caso, o ALGENCAN declara como solução o próprio ponto inicial, ajustando apenas o valor de c , para isso, foi necessário dar boas estimativas dos multiplicadores de Lagrange, ou seja, adotamos $\lambda^0 = (2, -1, 1)^T$.

Conforme mencionado anteriormente, esse problema pode ser solucionado adotando-se um ponto inicial adequado. Se tivermos sorte de, a partir do ponto inicial, obtermos parametrizações que estejam associadas a minimizadores, o ponto encontrado será de fato uma solução, caso que ocorre a seguir. O terceiro ponto inicial, escolhido ao acaso, tem as seguintes coordenadas $(x, y, s, c) = (-1.31, 2.94, 0.5, 1.5)$, a solução obtida é $(x, y, s, c) = (-0.96, 0.86, 0, 2.13)$ e as coordenadas do centro do círculo são $(c^x, c^y) = (0, 1.13)$, que coincide com a solução encontrada no segundo caso (neste caso, tivemos a sorte descrita anteriormente). A Figura 5.22 exhibe as configurações para estes pontos.

No Exemplo 5.3.1, estudamos um caso particular em que p era um ponto do eixo y . Naquele caso, foi visto que existem 5 retas que passam por p e são normais à curva nos pontos q_i , $i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$, além disso, verificamos que dois deles eram maximizadores da distância ao ponto p . Já no Exemplo 5.3.2, vimos um caso em que a solução encontrada pelo ALGENCAN também era um ponto do eixo das ordenadas, caso em que $s = 0$ na aplicação definida em 5.3.5. Além disso, foi possível verificar que, por haver diferentes retas normais à curva, que passam pelo ponto p encontrado pelo ALGENCAN, pode ocorrer do círculo não ficar inteiramente contido



(a) Configuração para o ponto inicial
 $(x, y, s, c) = (-1.31, 2.94, 0.5, 1.5)$.

(b) Configuração para o ponto final
 $(x, y, s, c) = (-0.96, 0.86, 0, 2.13)$.

Figura 5.22: Um círculo em um contêiner limitado pela curva $y = x^4$ e pela reta $y = c$.

no contêiner. No próximo exemplo, veremos que este problema - o círculo não ficar inteiramente contido no contêiner - pode ocorrer também para pontos fora do eixo y .

Exemplo 5.3.3. Neste exemplo, estuaremos o ponto $p = (0.1, 1)$. Queremos encontrar o ponto $q = (x, x^4) \in \partial E$, tal que a reta pq seja normal à curva $y = x^4$ em q . Para tanto, consideremos a equação reduzida desta reta dada por

$$r_n(x_r) = -\frac{1}{4x^3}(x_r - x) + x^4. \quad (5.3.6)$$

Queremos que esta reta passe por p , portanto, de (5.3.6) temos:

$$1 = -\frac{1}{4x^3}(0.1 - x) + x^4.$$

Esta equação possui as seguintes soluções reais:

$$x_1 \approx -0.90, \quad x_2 \approx -0.57, \quad x_3 \approx 0.10, \quad x_4 \approx 0.45 \text{ e } x_5 \approx 0.93.$$

Com isso, teremos 5 retas distintas que passam por p e são normais à curva nos pontos $q_i = (x_i, x_i^4)$, $i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$. No entanto, conforme pode ser observado na Figura 5.23, os pontos q_1 e q_2 não serão mapeados pela aplicação H , uma vez que para estes pontos $s \notin [0, 1]$.

Analisaremos agora os pontos mapeados, a fim de identificar quais são maximizadores e quais são minimizadores da distância ao ponto p . Para isso, consideremos que a distância entre

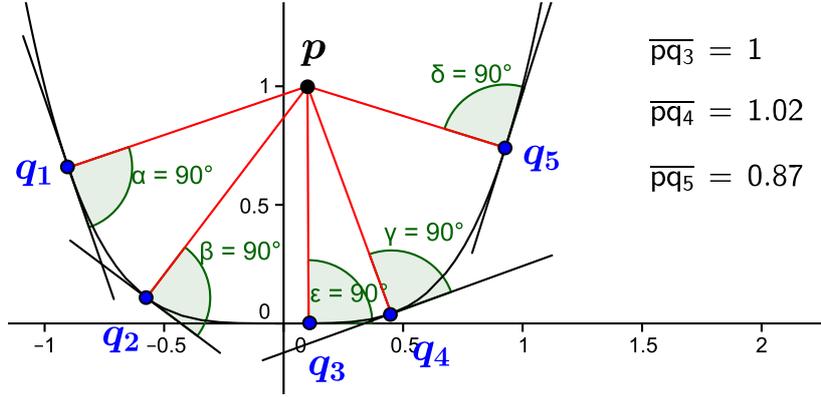


Figura 5.23: Cinco segmentos de retas normais à curva passando pelo ponto $p = (0.1, 1)$.

p e q é determinada pela função

$$d(p, q) = f(x) = \sqrt{(x - 0.1)^2 + (x^4 - 1)^2}. \quad (5.3.7)$$

De (5.3.7) tem-se que, para $f(x) \neq 0$,

$$f'(x) = \frac{8x^3(x^4 - 1) + 2(x - 0.1)}{2\sqrt{(x^4 - 1)^2 + (x - 0.1)^2}} \quad (5.3.8)$$

e

$$f''(x) = \frac{32x^6 + 24(x^4 - 1)x^2 + 2}{2\sqrt{(x^4 - 1)^2 + (x - 0.1)^2}} - \frac{(8(x^4 - 1)x^3 + 2(x - 0.1))^2}{4((x^4 - 1)^2 + (x - 0.1)^2)^{3/2}}. \quad (5.3.9)$$

Calculando $f'(x)$ e $f''(x)$ nos pontos x_i , $i \in \{3, 4, 5\}$ temos:

- $f'(x_3) = f'(0.10) = 0$ e $f''(x_3) \approx 0.87$. Portanto, x_3 é um minimizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_4) = f'(0.45) = 0$ e $f''(x_4) \approx -1.18$. Portanto, x_2 é um maximizador local da distância entre p e q ;
- $f'(x_5) = f'(0.93) = 0$ e $f''(x_5) \approx 9.83$. Portanto, x_3 é um minimizador local da distância entre p e q .

O ponto x_3 é um minimizador da distância entre p e q . Além disso, conforme pode ser visto na Figura 5.23, a distância entre estes dois pontos é 1, ou seja, $q = (x_3, x_3^4)$ é considerado viável. No entanto, como a distância entre os pontos p e q_5 é menor do que 1, então o círculo de raio 1 não ficará inteiramente contido no contêiner, caso semelhante ao que ocorreu no Exemplo 5.3.2.

No Exemplo 5.3.2, vimos que o ponto q encontrado era um maximizador local da distância do ponto p à borda da região. Naquela ocasião, pensávamos ser possível solucionar o problema do círculo não ficar inteiramente contido no contêiner, inserindo no modelo proposto, uma nova restrição, impondo que a derivada segunda da função que mede a distância entre o centro do círculo à borda da região seja sempre positiva. Evitaríamos assim, que maximizadores fossem encontrados. Porém, conforme visto no exemplo anterior, esta não é uma estratégia adequada, uma vez que o problema ocorre também quando minimizadores são encontrados.

Para esclarecer a dificuldade de encontrar pontos iniciais adequados, suponhamos que, assim como ocorreu no Exemplo 5.3.3, cada ponto p da região seja mapeado por três pontos q distintos e que apenas um deles seja de fato o correto. Assim, para um dado ponto inicial, a probabilidade de ele ser o correto seria $1/3$. Para o caso de k círculos, a probabilidade seria, portanto, $(1/3)^k$, o que torna muito improvável de obter parametrizações corretas para k grande. Na verdade, a situação é um pouco melhor, pois para círculos longe da borda do contêiner, onde a distância até a borda seja muito maior do que 1, é provável que mesmo parametrizações erradas, ainda levem a soluções corretas.

Exemplo 5.3.4. Neste exemplo, desejamos encontrar o menor contêiner limitado inferiormente pela curva $y = x^4$ e superiormente pela reta $y = c$, de modo que possa conter em seu interior 3 discos de raio $r = 1$. Este problema pode ser formulado como sendo o seguinte problema de programação não linear

$$\min c, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} (x^i)^4 = y^i, \quad i \in \{1, \dots, 3\} \\ (s_i x^i - x^i)^2 + \left(\frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right)^2 \geq 1, \quad i \in \{1, \dots, 3\} \\ (s_i x^i - s_j x^j)^2 + \left(\left(y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right) - \left(y^j + \frac{1-s_j}{4(x^j)^2}\right)\right)^2 \geq 4, \quad i < j \\ y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2} \leq c - 1, \quad i \in \{1, \dots, 3\} \\ s_i \leq 1, \quad i \in \{1, \dots, 3\} \\ 0 \leq s_i, \quad i \in \{1, \dots, 3\} \end{array} \right.$$

O número de variáveis deste problema é $n = 3 \cdot 3 + 1 = 10$ e número de restrições é $m = 5 \cdot 3 + \frac{3(3-1)}{2} = 18$.

Apresentaremos, a seguir, duas soluções. A primeira delas, obtida a partir do ponto inicial descrito na Tabela 5.18, cuja configuração está ilustrada na Figura 5.24(a), é representada na Tabela 5.19 e exibida na Figura 5.24(b). Pela aplicação definida em (5.3.5), as coordenadas dos centros (c_i^x, c_i^y) podem ser recuperadas usando

$$(c_i^x, c_i^y) = \left(s_i x, y + \frac{1-s_i}{4x^2} \right).$$

Deste modo, as coordenadas dos centros dos itens na solução, obtidas após a conversão, estão

elencadas na Tabela 5.20.

Tabela 5.18: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valor inicial de c

$c=6,50000000$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-1,31000000	2,94000000	0,50000000
2	-0,28000000	0,00640000	0,50000000
3	-0,28000000	0,00640000	0,50000000

Tabela 5.19: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda do contêiner, para os valores de s_i e para a medida de c

$c=5,86760663$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-1,47944278	4,79063069	0,32607535
2	-0,29263671	0,00733357	0,00000000
3	0,54633702	0,08909278	0,00000000

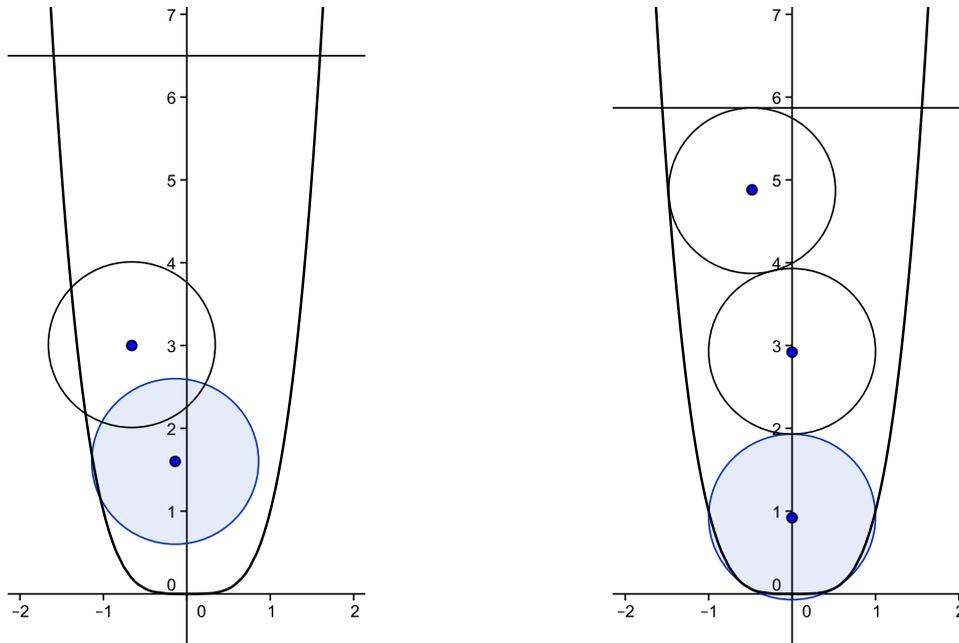
Tabela 5.20: Coordenadas dos centros dos itens na solução

i	c_i^x	c_i^y
1	-0,48240982	4,86760663
2	0,00000000	2,92665824
3	0,00000000	0,92665822

A segunda solução, foi obtida a partir do ponto inicial descrito na Tabela 5.21. A Figura 5.25(a) ilustra a configuração para o ponto inicial adotado. A solução está representado na Tabela 5.22 e ilustrada na Figura 5.25(b). Para este segundo ponto inicial, as coordenadas dos centros dos itens estão elencadas na Tabela 5.23. Para o primeiro caso, a solução obtida não foi viável, já para o segundo sim. Para obtermos sucesso na resolução do problema, foi necessário testar alguns pontos iniciais diferentes.

Tabela 5.21: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valor inicial de c

$c = 6,00000000$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-0,97000000	-0,86000000	0,50000000
2	1,28000000	2,97000000	0,50000000
3	-1,47000000	4,80000000	0,50000000



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.18 .

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.19.

Figura 5.24: Três círculos em um contêiner limitado pela curva $y = x^4$ e pela reta $y = c$.

Tabela 5.22: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda do contêiner, para os valores de s_i e para a medida de c

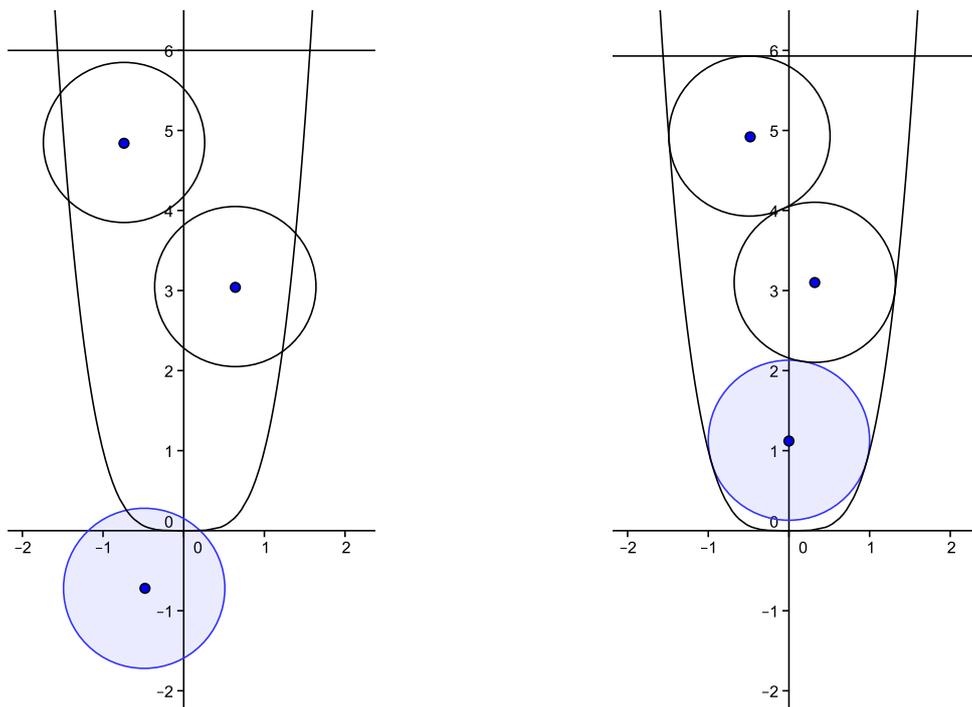
$c = 5,93266420$			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-0,96297396	0.85992023	0,00000000
2	1,3154533	2,9943446	0,24434954
3	-1,48449974	4,85646770	0,32833075

Devido a dificuldade de encontrarmos pontos iniciais adequados, no Exemplo 5.3.5, tivemos que adotar um ponto inicial bem próximo da solução para que esta pudesse ser recuperada pelo ALGENCAN.

Exemplo 5.3.5. Neste exemplo, desejamos encontrar o menor contêiner limitado inferiormente pela curva $y = x^4$ e superiormente pela reta $y = c$ de modo que possa conter em seu interior 7

Tabela 5.23: Coordenadas dos centros dos itens na solução

i	c_i^x	c_i^y
1	0,00000000	1,12951466
2	0,32143042	3,10351631
3	-0,48740691	4,93266424



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.21.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.22.

Figura 5.25: Três círculos em um contêiner limitado pela curva $y = x^4$ e pela reta $y = c$.

discos de raio $r = 1$. A modelagem para este problema é

$$\min c, \quad \text{sujeito a} \quad \left\{ \begin{array}{l} (x^i)^4 = y^i, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ (s_i x^i - x^i)^2 + \left(\frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right)^2 \geq 1, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ (s_i x^i - s_j x^j)^2 + \left(\left(y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2}\right) - \left(y^j + \frac{1-s_j}{4(x^j)^2}\right)\right)^2 \geq 4, \quad i < j \\ y^i + \frac{1-s_i}{4(x^i)^2} \leq c - 1, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ s_i \leq 1, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \\ 0 \leq s_i, \quad i \in \{1, \dots, 7\} \end{array} \right.$$

O número de variáveis deste problema é $n = 3 \cdot 7 + 1 = 22$ e número de restrições é $m = 5 \cdot 7 + \frac{7(7-1)}{2} = 56$.

O ponto inicial está descrito na Tabela 5.24, sua representação gráfica é exibida na Figura 5.26(a). A solução obtida está na Tabela 5.25. As coordenadas dos centros dos itens estão na Tabela 5.26 e a representação gráfica na Figura 5.26(b).

Tabela 5.24: Coordenadas iniciais (x_i, y_i, s_i) e valor inicial de c

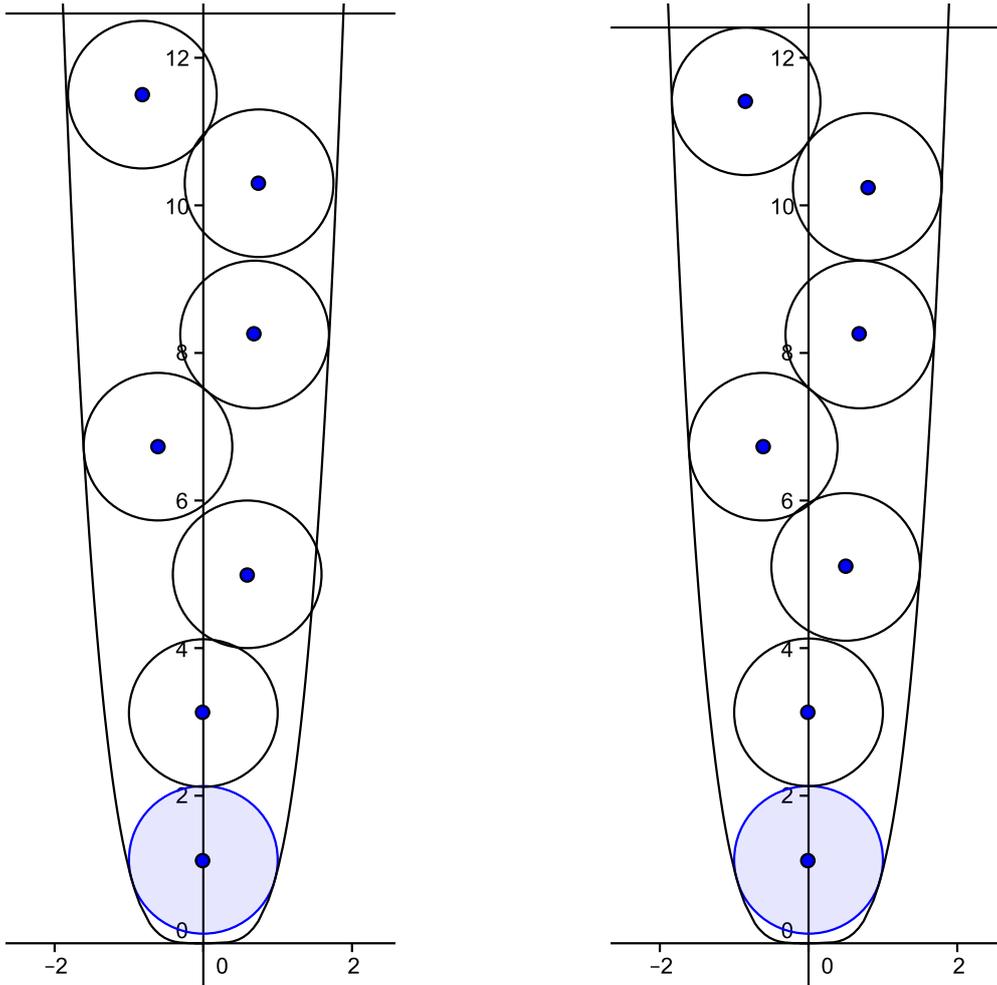
c=12,600000000			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-0,96000000	0,86000000	0,00000000
2	1,31000000	2,98000000	0,00000000
3	-1,61000000	6,67000000	0,38000000
4	1,49000000	4,99000000	0,33000000
5	1,69000000	8,20000000	0,41000000
6	1,79000000	10,26000000	0,42000000
7	-1,84000000	11,46000000	0,45000000

Tabela 5.25: Solução obtida para as coordenadas dos pontos na borda do contêiner, para os valores de s_i e para a medida de c

c=12,41337717			
i	coordenada-x	coordenada-y	s
1	-0,96297396	0,85992023	0,00000000
2	1,31440494	2,98481030	0,00000000
3	-1,60720965	6,67252366	0,37892866
4	1,49474963	4,99199138	0,33285820
5	1,69214685	8,19883601	0,40981982
6	1,78729636	10,20437204	0,44103131
7	-1,83640795	11,37304245	0,45590182

Tabela 5.26: Coordenadas dos centros dos itens na solução

i	c_i^x	c_i^y
1	0,00000000	1,12951467
2	0,00000000	3,12951467
3	-0,60901780	6,73263224
4	0,49753967	5,06663991
5	0,69347532	8,25036463
6	0,78825366	10,24811764
7	-0,83722173	11,41337716



(a) Configuração para o ponto inicial descrito na Tabela 5.24.

(b) Configuração para o ponto final descrito na Tabela 5.25.

Figura 5.26: Sete círculos em um contêiner limitado pela curva $y = x^4$ e pela reta $y = c$.

Capítulo 6

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Questões relativas a resolução de problemas de empacotamento constituem uma boa oportunidade para se aplicar técnicas de otimização. Essas técnicas são de uso amplo em diversas áreas práticas, notadamente em processos industriais. Apresentá-las de forma didática em uma dissertação de mestrado profissional é um modo de torná-las mais acessíveis a alunos de graduação, proporcionando-lhes uma oportunidade de fixar conceitos de Cálculo e Álgebra Linear. Em nossas pesquisas, encontramos textos acadêmicos de qualidade que abordam o tema, porém que não têm, pela natureza do gênero a que pertencem, a preocupação específica com a organização pedagógica de uma linguagem menos hermética e mais voltada à um público iniciante no assunto.

Para possibilitar ao leitor um primeiro contato com técnicas de resolução de problemas embasados em teorias de otimização, realizamos um percurso que passou pela teoria matemática para otimização irrestrita. Isso porque as técnicas utilizadas para a resolução destes tipos de problema constituem a base fundamental, mais natural, para se chegar ao tema específico deste trabalho: a otimização com restrições. Neste percurso, abordamos métodos iterativos para encontrar zeros de funções e adaptamos esses processos para encontrar pontos estacionários de uma função, uma vez que neste ponto é verdade que as derivadas da função objetivo se anulam.

Continuando o processo, nos concentramos na otimização restrita, técnica matemática usada para resolução de problemas de empacotamento, uma vez que as condições de não sobreposição de itens e de que os itens estejam inteiramente contidos no contêiner constituem restrições que compõem o modelo.

Para atender ao objetivo primordial deste trabalho, cujo viés é didático, escolhemos problemas de empacotamento. A escolha deste tema foi motivada pelo forte apelo visual que estes problemas possuem. A importância de diferentes registros para a representação de um problema matemático é fundamentada nos trabalhos de Raymond Duval, que pode ser lido em [16], sobre os registros de representação semiótica. Nosso pensamento se coaduna ao pensamento de Duval, ao entendermos, assim como ele que

[...] objetos matemáticos não estão diretamente acessíveis à percepção ou à expe-

riência intuitiva imediata, como são os objetos comumente ditos “reais” ou “físicos”. É preciso, portanto, dar representantes. E por outro lado, a possibilidade de efetuar tratamentos sobre os objetos matemáticos depende diretamente do sistema de representação semiótico utilizado. [...] As representações semióticas desempenham um papel fundamental na atividade matemática. (DUVAL, 2012, p. 268)

Duval esclarece ainda que

[...] é essencial, na atividade matemática, poder mobilizar muitos registros de representação semiótica (figuras, gráficos, escrituras simbólicas, língua natural, etc...) no decorrer de um mesmo passo, poder escolher um registro no lugar de outro. E, independentemente de toda comodidade de tratamento, o recurso a muitos registros parece mesmo uma condição necessária para que os objetos matemáticos não sejam confundidos com suas representações e que possam também ser reconhecidos em cada uma de suas representações.”(DUVAL, 2012, p. 270)

Por fim, Duval esclarece que o funcionamento cognitivo do pensamento humano se revela inseparável da existência de uma diversidade de registros semióticos de representação. Ao explicar que a “semiose” é a apreensão ou produção de uma representação semiótica e que a “noesis” é a apreensão conceitual de um objeto, enfatiza que a noesis é inseparável da semiose.

Entendemos, assim, que a imagem é um elemento facilitador e essencial na construção de conceitos matemáticos, entre eles, aqueles ligados à teoria de otimização. Por conta deste entendimento, foi utilizado em diversas oportunidades ao longo deste texto diferentes registros, algébricos, gráficos, tabular e a própria linguagem natural.

Conscientes então de que os problemas de empacotamento são ricos em suas representações, passamos a estudar alguns problemas em contêineres de formatos específicos, círculos, quadrados, triângulos, elipses, parábolas e por fim estudamos o contêiner delimitado pela quártica $y = x^4$ e pela reta $y = c$. Essas formas foram escolhidas, uma vez que por meio delas, é possível apresentar os aspectos essenciais relacionados à teoria objeto deste estudo.

Ao estudar um contêiner delimitado por uma quártica, foi possível verificar que o modelo matemático desenvolvido para empacotamentos em quádricas não se adapta de modo trivial a este tipo de curva. Esta é, portanto, a sugestão que fazemos para futuras pesquisas, estudar uma forma de adaptar o modelo desenvolvido para as quádricas a outros tipos de curvas.

Finalmente, também faz parte de nosso entendimento, que a prática do professor não constitui-se em um fluxo unidirecional, mas sim em uma via de mão dupla, onde ocorre uma interação contínua, dialógica, entre ensino e pesquisa, ensino e aprendizado. Nesse sentido, Bachelard, no livro “A formação do espírito científico” traz a seguinte indagação: Criar – e sobretudo manter – um interesse vital pela pesquisa desinteressada não é o primeiro dever do

educador, em qualquer estágio de formação? Podemos adaptar esta pergunta a este trabalho e questionar se criar – e sobretudo manter – um interesse vital pelo aprendizado não é o primeiro dever do educador, em qualquer estágio de formação? Com esta reflexão, queremos esclarecer que este trabalho foi produzido sem que o autor tivesse cursado qualquer disciplina de otimização não linear na graduação nem na pós graduação, vale ainda esclarecer que estudar otimização requer o aprendizado de conceitos relacionados à Álgebra Linear, Cálculo em Várias Variáveis e Lógica de Programação. O que possibilitou, portanto, esta escrita foi a consciência da necessidade de, como professor, atualizar-se continuamente, em um mundo em constante dinamismo.

Referências

- [1] Carlile C. Lavor et al. *Uma introdução à teoria de códigos*. Vol. 21. São Carlos: SBMAC, 2006.
- [2] Ignacio Castillo et al. “Solving circle packing problems by global optimization: numerical results and industrial applications”. Em: *European Journal of Operational Research* 191 (2008). Ed. por Elsevier, pp. 786–802.
- [3] Roberto Andreani et al. “On Augmented Lagrangian methods with general lower-level constraints”. Em: *SIAM Journal on Optimization* 18 (2007). Ed. por Society for Industrial e Applied Mathematics, pp. 1286–1309.
- [4] Saddo Almouloud. *Fundamentos da didática da matemática*. Curitiba: UFPR, 2007.
- [5] Howard Anton e Busby Robert C. *Álgebra linear contemporânea*. Porto Alegre: Bookman, 2007.
- [6] Ernesto G. Birgin e José Mario Martínez. *Practical augmented lagrangian methods for constrained optimization*. Philadelphia: SIAM, 2014.
- [7] Hector F. Callisaya. “Empacotamento em Quadráticas”. Tese de doutorado. Universidade Estadual de Campinas, 2012.
- [8] Ana Friedlander. *Elementos de programação não linear*. Campinas: UNICAMP, 1994.
- [9] Alexey Izmailov e Mikhail Solodov. *Otimização - condições de otimalidade, elementos de análise convexa e de dualidade*. Vol. 1. IMPA, 2009.
- [10] Alexey Izmailov e Mikhail Solodov. *Otimização—métodos computacionais*. Vol. 2. IMPA, 2012.
- [11] Elon L. Lima. *Análise Real*. Vol. 2. Rio de Janeiro: IMPA, 2013.
- [12] Elon L. Lima. *Análise Real - funções de uma variável*. Vol. 1. Rio de Janeiro: IMPA, 2010.
- [13] David G. Luenberger e Yinyu Ye. *Linear and Nonlinear Programming*. Terceira. New York: Springer, 2008.
- [14] Gerson P. Oliveira. *Ensino de Ciências e Matemática: análise de problemas*. Vol. 1. In: Witter, Geraldina P.; Fujiwara, Ricardo (Org.). São Paulo: Ateliê Editorial, 2009.
- [15] Rian Penachi. “Uma introdução à otimização não linear e a soluções de problemas simétricos via ALGENCAN”. Diss. de mestrado. Universidade Estadual de Campinas, 2015.
- [16] Raymond Duval e Trad. Méricles Moretti. “Registros de representação semiótica e funcionamento cognitivo do pensamento Registres de représentation sémiotique et fonctionnement cognitif de la pensée”. Em: *Revemat: Revista Eletrônica de Educação Matemática* 7.2 (2012), pp. 266–297. URL: <https://periodicos.ufsc.br/index.php/revemat/article/view/1981-1322.2012v7n2p266>.

- [17] Peter Zörnig. *Introdução à programação não linear*. Brasília: editora UNB, 2011.