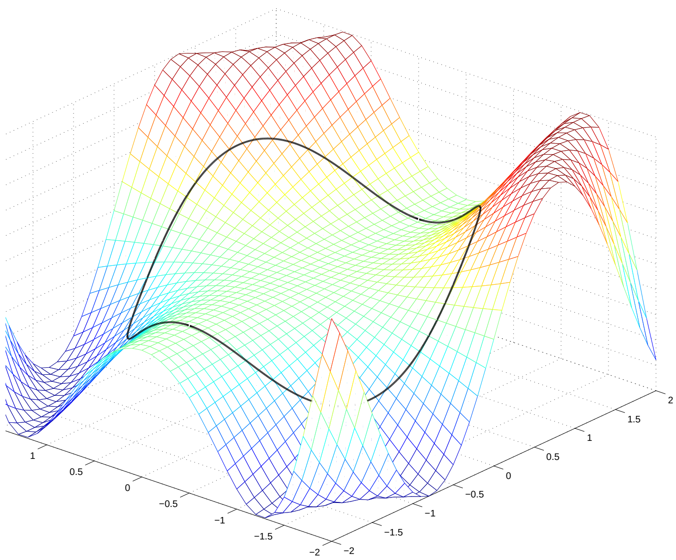
Joaquim João Alarcão Júdice

José Luis Esteves dos Santos

Fundamentos de optimização não-Linear



Departamento de Matemática
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade de Coimbra
2013

Conteúdo

Introdução

A Optimização é seguramente uma das áreas mais importantes da Matemática Aplicada e Investigação Operacional, não só pelo seu interesse intrínseco mas pelo elevado número de suas aplicações em várias áreas da ciência, engenharia, economia e finanças. Um problema de Optimização consiste em minimizar ou maximizar uma função linear ou não linear num subconjunto admissível X de $\mathbb{R}^n$ definido por restrições lineares ou não lineares. Em muitos casos, todas ou algumas das variáveis do problema assumem valores inteiros, dando lugar à chamada Optimização Discreta. Neste texto iremos debruçar-nos na Optimização Não Linear Diferenciável, em que as variáveis assumem valores reais e que a função a minimizar ou maximizar e as funções associadas às restrições são continuamente diferenciáveis num subconjunto aberto de $\mathbb{R}^n$ que contém o conjunto admissível. Contrariamente à denominada Optimização Global que se dedica à determinação de óptimos globais, a Optimização Não Linear preocupa-se com o estabelecimento de condições de optimalidade para mínimos ou máximos locais e algoritmos para os obter. Este texto debruça-se sobre o primeiro assunto, isto é, dos fundamentos da Optimização Não Linear e dos seus algoritmos. Houve a preocupação de tratar apenas os tópicos essenciais, apresentando-os de forma didática, com recurso frequente a exemplos e ilustrações. Pretendeu-se portanto, proporcionar uma leitura fácil e autocontida, susceptível de ser utilizada como bibliografia de referência num curso de optimização não linear e assim fornecer ao leitor um espaço de aprendizagem que suscite o interesse e promova a vontade de aprofundar a sua formação nesta área.

O livro está dividido em dois capítulos. O primeiro reúne uma série de conceitos matemáticos que o leitor deve dominar para poder progredir na sua aprendizagem. É neste contexto que se recorda a noção de conjunto e de sucessão, ambos indispensáveis para a compreensão da teoria de optimização. Efectua-se depois uma revisão das principais propriedades das funções reais com variáveis reais contínuas e diferenciáveis. O tópico das funções convexas/côncavas e a análise das suas propriedades é também desenvolvido na primeira parte do texto.

O segundo capítulo é dedicado às condições de optimalidade necessárias/suficientes para Programação Não-Linear. Optou-se por apresentá-las segundo uma complexidade crescente das restrições. Assim, começa-se com os problemas de optimização não linear sem restrições, seguindo-se o estudo das condições de Karush-Kuhn-Tucker para as restrições lineares e não lineares (primeiro as de igualdade e depois as de desigualdade). Uma lista de livros importantes para um melhor entendimento das propriedades da Programação Não Linear e um estudo aprofundado dos seus algoritmos e das suas aplicações é apresentada no final do livro.

Notação

- Seja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, então:
  - o gradiente de f em x, $\nabla f(x)$, é o vector de $\mathbb{R}^n$ definido por

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

  - a hessiana de f em x, $\nabla^2 f(x)$, é a matriz de ordem $n \times n$ definida por

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

- Se $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$, então:
  - o gradiente de F em x, $\nabla F(x)$, é a matriz de ordem $n \times m$ definida por

$$\nabla F(x) = \begin{bmatrix} \nabla F_1(x) & \cdots & \nabla F_m(x) \end{bmatrix},$$

    isto é

$$\nabla F(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial F_m}{\partial x_1}(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_1}{\partial x_n}(x) & \cdots & \frac{\partial F_m}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix}$$

  - o Jacobiano de F em x, $J_F(x)$, é a matriz de ordem $m \times n$ igual à transposta do gradiente de F em x, isto é, $J_F(x) = \nabla F(x)^{\mathsf{T}}$.

- Se A é uma matriz de ordem $m \times n$, então:
  - o núcleo de A é o conjunto $N(A) = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\}$;
  - o espaço gerado pelas colunas de A é o conjunto $Rank(A) = \{Ax : x \in \mathbb{R}^n\}$;
  - a característica de A é denotada por $car(A)$.

- Se X é um subconjunto de $\mathbb{R}^n$, então
  - $|X|$ representa o cardinal de X;
  - $int(X)$ e $fr(X)$ representam o interior e a fronteira do conjunto X.

Capítulo 1

Revisão de cálculo em $\mathbb{R}^n$

1.1 Conjuntos

Chama-se *Bola aberta* e *Bola fechada* de centro $a \in \mathbb{R}^n$ e raio $\varepsilon > 0$ aos conjuntos

$$B(a,\varepsilon) = \{x \in \mathbb{R}^n : ||x-a|| < \varepsilon\}$$

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

com $||.||$ uma norma de $\mathbb{R}^n$.

Dado um subconjunto C de $\mathbb{R}^n$, $a \in C$ é um *Ponto Interior* de C se existe uma bola de centro em a totalmente contida em C. O conjunto dos pontos interiores de C, chama-se *Interior de C* e representa-se por $int(C)$. Um ponto $a \in \mathbb{R}^n$ diz-se *Ponto Aderente* de C se qualquer bola de centro em a tem intersecção não vazia com o conjunto C. O conjunto dos pontos aderentes de C diz-se *Aderência de C* e representa-se por $c\ell(C)$. Das definições apresentadas tem-se

$$int(C) \subseteq C \subseteq c\ell(C), \forall C \subseteq \mathbb{R}^n.$$

Um ponto $a \in \mathbb{R}^n$ diz-se *Ponto Fronteiro* de C se é aderente de C mas não é interior. O conjunto dos pontos fronteiros de C chama-se *fronteira* de C e representa-se por $fr(C)$. Portanto,

$$c\ell(C) = int(C) \cup fr(C).$$

Um ponto $a \in \mathbb{R}^n$ diz-se *Ponto de Acumulação* de C se qualquer bola de centro em a intersecta o conjunto C num ponto diferente de a. O conjunto dos pontos de acumulação de C representa-se por C'.

Na figura 1.1 ilustram-se estes conceitos para o conjunto

$$C = \left\{x \in \mathbb{R}^2 : 1/2 < ||x|| \leq 1\right\} \cup \{(0,0)\}.$$

Neste exemplo, constatamos que

$$\begin{aligned} int(C) &= \left\{x \in \mathbb{R}^2 : 1/2 < ||x|| < 1\right\} \\ c\ell(C) &= \left\{x \in \mathbb{R}^2 : 1/2 \leq ||x|| \leq 1\right\} \cup \{(0,0)\} \\ fr(C) &= \left\{x \in \mathbb{R}^2 : ||x|| = 1/2 \vee ||x|| = 1\right\} \cup \{(0,0)\} \\ C' &= \left\{x \in \mathbb{R}^2 : 1/2 \leq ||x|| \leq 1\right\}. \end{aligned}$$

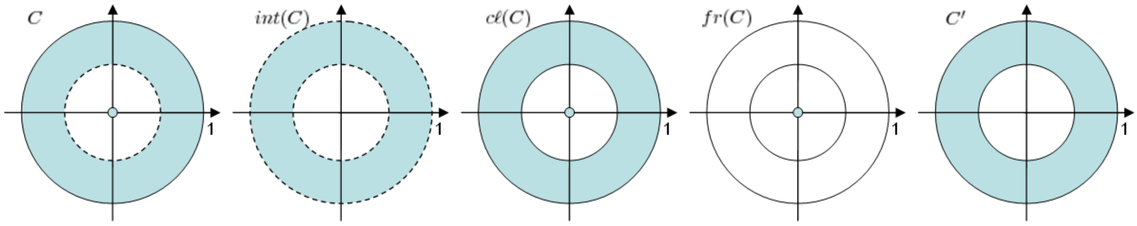


Figura 1.1: Pontos interiores, pontos aderentes e pontos fronteiros de C.

Um conjunto C diz-se *Aberto* se todos os seus elementos são pontos interiores, isto é, se $C = int(C)$. Um conjunto C é *Fechado* se contém todos os seus pontos fronteiros, isto é, se $fr(C) \subseteq C$, ou seja, se $C = c\ell(C)$. Uma bola aberta é um conjunto aberto enquanto que uma bola fechada é um conjunto fechado. O conjunto C apresentado na figura 1.1 não é aberto nem fechado.

Um conjunto $C \subseteq \mathbb{R}^n$ é limitado se existir um número real $L > 0$ tal que $||x|| \leq L$ para todo $x \in C$. Um conjunto C diz-se *Compacto* se é limitado e fechado.

Como iremos ver no decorrer deste curso, o conceito de conjunto convexo tem um papel muito importante em Optimização Não Linear. Se $x^1, \ldots, x^k$ são k vectores de $\mathbb{R}^n$ e $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ são k números reais não negativos tais que $\lambda_1 + \ldots + \lambda_k = 1$, então

$$z = \lambda_1 x^1 + \ldots + \lambda_k x^k = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i x^i$$

é uma *combinação convexa* dos vectores $x^1, \ldots, x^k$. Se $k = 2$, então

$$z = \lambda x^1 + (1 - \lambda) x^2$$

com $0 \leq \lambda \leq 1$ é uma combinação convexa de x^1 e x^2. Os conjuntos

$$[x^1, x^2] = \{z \in \mathbb{R}^n : z = \lambda x^1 + (1 - \lambda) x^2, \quad 0 \leq \lambda \leq 1\}$$

$$]x^1, x^2[= \{z \in \mathbb{R}^n : z = \lambda x^1 + (1 - \lambda) x^2, \quad 0 < \lambda < 1\}$$

são os *Intervalos de extremos* x^1 *e* x^2. Um conjunto C é *Convexo* se para quaisquer pontos x^1, x^2 de C, o intervalo $[x^1, x^2]$ está contido em C.

Para mostrar que um conjunto não é convexo é apenas necessário encontrar um valor $\lambda \in [0, 1]$ tal que $\lambda x^1 + (1 - \lambda) x^2 \notin C$ com $x^1 \in C$, $x^2 \in C$. Assim, o conjunto representado na figura 1.2 (à direita) não é convexo. Por outro lado, o outro conjunto é convexo pois $\lambda x^1 + (1 - \lambda) x^2 \in C$ para quaisquer $x^1, x^2 \in C$ e $\lambda \in [0, 1]$.

A tabela 1.1 resume as notações introduzidas nesta secção.

1.2 Sucessões

Como iremos discutir em capítulos posteriores, os algoritmos para resolução de problemas de optimização não linear são iterativos, isto é, geram uma sucessão de vectores cujo limite é a

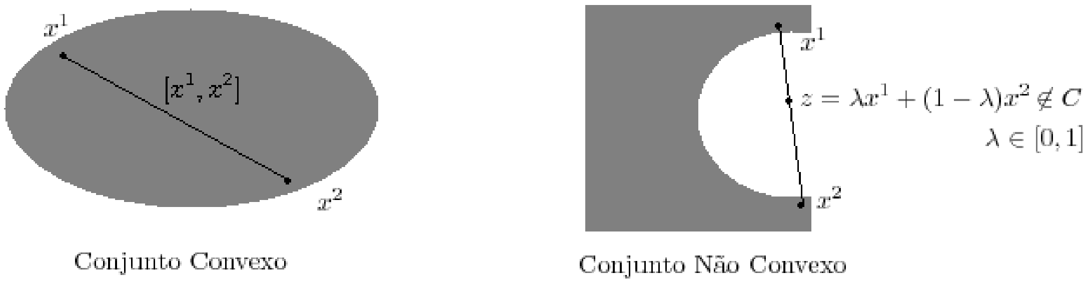


Figura 1.2: Exemplo de um conjunto convexo e de um conjunto não convexo.

$B(a, \varepsilon)$	$=$	$\{x \in \mathbb{R}^n : \|\|x - a\|\| < \varepsilon\}$
$c\ell B(a, \varepsilon)$	$=$	$\{x \in \mathbb{R}^n : \|\|x - a\|\| \leq \varepsilon\}$
$a \in int(C)$	$\Leftrightarrow$	$\exists \varepsilon > 0 : B(a, \varepsilon) \subset C$
$a \in c\ell(C)$	$\Leftrightarrow$	$\forall \varepsilon > 0 : B(a, \varepsilon) \cap C \neq \emptyset$
$a \in fr(C)$	$\Leftrightarrow$	$a \in c\ell(C) \backslash int(C)$
$a \in C'$	$\Leftrightarrow$	$\forall \varepsilon > 0 : (B(a, \varepsilon) \backslash \{a\}) \cap C \neq \emptyset$
$[x^1, x^2]$	$=$	$\{z \in \mathbb{R}^n : z = \lambda x^1 + (1-\lambda)x^2, 0 \leq \lambda \leq 1\}$
$]x^1, x^2[$	$=$	$\{z \in \mathbb{R}^n : z = \lambda x^1 + (1-\lambda)x^2, 0 < \lambda < 1\}$

Tabela 1.1: Notações

solução do problema. Nesta secção iremos rever os conceitos de convergência e de taxa de convergência de uma sucessão.

Uma sucessão de vectores $(x^m)_{m \in \mathbb{N}}$ de $\mathbb{R}^n$ diz-se *convergente* para $x^* \in \mathbb{R}^n$ se

$$\lim_{m \to \infty} ||x^m - x^*|| = 0.$$

O vector $x^* \in \mathbb{R}^n$ diz-se *Limite da Sucessão* e escreve-se

$$x^* = \lim_{m \to \infty} x^m$$

Se x^* é o limite da sucessão $(x^m)_{m \in \mathbb{N}}$, então para qualquer $\theta > 0$ existe $p \in \mathbb{N}$ tal que

$$m \geq p \Rightarrow ||x^m - x^*|| < \theta$$

O limite de uma sucessão é único. Além disso, se uma sucessão é convergente então qualquer subsucessão é convergente para o mesmo limite. Pode no entanto acontecer que uma sucessão não tenha limite, mas contenha uma subsucessão convergente. O limite dessa subsucessão diz-se um *Ponto de Acumulação* da sucessão dada. Além disso, verifica-se o chamado Teorema de Bolzano-Weierstrass:

Teorema 1.1 (Bolzano-Weierstrass) *Toda a sucessão limitada tem, pelo menos, um ponto de acumulação.*

É ainda possível caracterizar conjuntos fechados e compactos em termos de sucessões. Assim, verificam-se os seguintes resultados:

Teorema 1.2

1. *Um conjunto C é fechado se e só se o limite de qualquer sucessão convergente de elementos de C pertence a C.*

2. *Um conjunto C é compacto se e só se contém todos os pontos de acumulação de sucessões de elementos de C.*

Dada uma sucessão $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ de números reais, podemos considerar os seus *supremo* $\sup_k x_k$ e *ínfimo* $\inf_k x_k$ que são elementos de $\mathbb{R}\cup\{-\infty,\infty\}$ satisfazendo

$$\sup_k x_k = \sup\{x_k : k\in\mathbb{N}\}$$

$$\inf_k x_k = \inf\{x_k : k\in\mathbb{N}\}$$

Então podemos construir as sucessões $(y_m)_{m\in\mathbb{N}}$ e $(z_m)_{m\in\mathbb{N}}$ a partir de

$$y_m = \sup\{x_k : k\geq m\}$$

$$z_m = \inf\{x_k : k\geq m\}$$

Portanto, $(y_m)_{m\in\mathbb{N}}$ é uma sucessão não crescente (isto é, $y_m\geq y_{m+1}$ para todo $m\in\mathbb{N}$) e $(z_m)_{m\in\mathbb{N}}$ é não decrescente (isto é, $z_m\leq z_{m+1}$ para todo $m\in\mathbb{N}$). Então estas sucessões têm limite, possivelmente infinito, e podemos escrever

$$\lim_m \sup x_m = \lim_m y_m$$

$$\lim_m \inf x_m = \lim_m z_m$$

Além disso, verifica-se o seguinte teorema

Teorema 1.3

1. *Para qualquer sucessão $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ de números reais*

$$-\infty\leq \inf_k x_k\leq \lim_k \inf x_k\leq \lim_k \sup x_k\leq \sup_k x_k\leq +\infty$$

2. *$(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ é convergente se e só se*

$$\lim_k \inf x_k = \lim_k \sup x_k = \lim_k x_k$$

3. *$\lim_k \sup x_k$ ($\lim_k \inf x_k$) é o maior (menor) ponto de acumulação de $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$*

Como iremos ver mais adiante, em optimização não linear é muito importante estabelecer a velocidade de convergência dos termos de uma sucessão para o seu limite ou ponto de acumulação. Seguidamente, iremos introduzir as definições das *taxas de convergência* mais importantes.

1. A sucessão $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ *converge linearmente para* $\bar{x}$ se existe $c \in [0,1[$ tal que

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

   para todo o $k \geq \bar{k}$ com $\bar{k} \in \mathbb{N}$.

2. A sucessão $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ *converge superlinearmente para* $\bar{x}$ se existe uma sucessão $(c_k)_{k\in\mathbb{N}}$ de números não negativos e convergentes para zero tal que

$$||x^{k+1} - \bar{x}|| \leq c_k\,||x^k - \bar{x}||$$

3. A sucessão $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ *converge para* $\bar{x}$ *com ordem* p se existe $c > 0$ tal que

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

A convergência diz-se quadrática se $p = 2$.

As definições apresentadas permitem concluir que a convergência linear pode ser muito lenta se a constante c é relativamente elevada e próxima de um. Assim, por exemplo, consideremos a sucessão $\left(\frac{1}{2^k}\right)_{k\in\mathbb{N}}$ que é convergente para zero. Como

$$\frac{1}{2^{k+1}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2^k}$$

então a sucessão tem convergência linear com constante $c = \frac{1}{2}$. Uma análise aos termos desta sucessão indica uma grande lentidão na convergência para zero. No entanto, a sucessão $\left(\frac{1}{10^k}\right)_{k\in\mathbb{N}}$ também tem convergência linear, mas a sua velocidade é muito maior. Notar que $c = \frac{1}{10}$ neste último caso. Portanto, o valor da constante c é muito importante na rapidez da convergência da sucessão e a convergência linear só é rápida se houver a garantia do valor dessa constante ser muito pequena.

A convergência superlinear é caracterizada por uma grande rapidez quando x^k está relativamente próximo do limite $\bar{x}$. Assim, por exemplo, consideremos a sucessão $\left(\frac{1}{k!}\right)_{k\in\mathbb{N}}$. Então

$$\lim_k \frac{1}{k!} = 0, \quad \frac{1}{(k+1)!} = \frac{1}{k+1} \cdot \frac{1}{k!}, \quad \lim_k \frac{1}{k+1} = 0$$

pelo que a sucessão converge superlinearmente para zero. Após os primeiros termos relativamente elevados, a sucessão começa a convergir para zero de um modo muito rápido. Assim, há a garantia de a sucessão convergir rapidamente quando os termos estão suficientes próximos do limite.

Consideremos agora a sucessão $\left(\frac{1}{2^{2^k}}\right)_{k\in\mathbb{N}}$. Então,

$$\lim_k \frac{1}{2^{2^k}} = 0, \quad \frac{1}{2^{2^{k+1}}} = \frac{1}{2^{2^k.2}} \cdot \left(\frac{1}{2^{2^k}}\right)^2$$

pelo que a sucessão converge quadraticamente para zero. À semelhança do exemplo anterior, também neste caso se verifica uma grande rapidez na convergência dos termos da sucessão para zero. Aliás, a convergência quadrática implica a convergência superlinear, pois

k	$\lvert x^k - \bar{x}\rvert$	$\lvert y^k - \bar{x}\rvert$	$\lvert z^k - \bar{x}\rvert$	$\lvert w^k - \bar{x}\rvert$
1	5.00E-01	1.00E-01	1.00E-00	2.50E-01
2	2.50E-01	1.00E-02	5.00E-01	6.25E-02
3	1.25E-01	1.00E-03	1.67E-01	3.91E-03
4	6.25E-02	1.00E-04	4.17E-02	1.53E-05
5	3.13E-02	1.00E-05	8.33E-03	2.33E-10
6	1.56E-02	1.00E-06	1.39E-03	5.42E-20
7	7.81E-03	1.00E-07	1.98E-04	2.94E-39
8	3.91E-03	1.00E-08	2.48E-05	8.64E-78
9	1.95E-03	1.00E-09	2.76E-06	7.46E-155
10	9.77E-04	1.00E-10	2.76E-07	5.57E-309

Tabela 1.2: Erros para os dez primeiros elementos das sucessões $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$, $(y^k)_{k\in\mathbb{N}}$, $(z^k)_{k\in\mathbb{N}}$ e $(w^k)_{k\in\mathbb{N}}$.

$$\begin{aligned} ||x^{k+1} - \bar{x}|| &\leq c\,||x^k - \bar{x}||^2 \\ &= c\,||x^k - \bar{x}||\,||x^k - \bar{x}|| \\ &= c_k\,||x^k - \bar{x}|| \end{aligned}$$

e

$$\lim_k c_k = \lim_k c\,||x^k - \bar{x}|| = 0.$$

Por isso, sucessões com convergência quadrática terem taxas mais rápidas do que as que possuem os outros dois tipos de convergência.

Para exemplificar a rapidez das convergências linear, superlinear e quadrática, consideremos as quatro sucessões referidas anteriormente

$$(x^k)_{k\in\mathbb{N}}, \quad (y^k)_{k\in\mathbb{N}}, \quad (z^k)_{k\in\mathbb{N}}, \quad (w^k)_{k\in\mathbb{N}}.$$

Todas essas sucessões são convergentes para $\bar{x} = 0$ e verificam

$$|x^k - \bar{x}| = \frac{1}{2^k}, \quad |y^k - \bar{x}| = \frac{1}{10^k}, \quad |z^k - \bar{x}| = \frac{1}{k!}, \quad |w^k - \bar{x}| = \frac{1}{2^{2^k}}.$$

Os erros para os dez primeiros elementos destas sucessões estão indicados na tabela 1.2. Assim, podemos observar que a sucessão $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ vai convergindo lentamente para o limite $\bar{x}$, necessitando cerca de três iterações para atingir mais uma casa decimal de precisão (isto é, obter uma aproximação com um erro 10 vezes inferior). Na sucessão $(y^k)_{k\in\mathbb{N}}$ cada elemento contribui com uma nova casa decimal de precisão, pelo que converge mais rapidamente do que a sucessão $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$. A sucessão $(z^k)_{k\in\mathbb{N}}$ inicia-se com uma convergência lenta para $\bar{x}$, aumentando a rapidez de convergência à medida que se consideram mais elementos (é uma característica da convergência superlinear). Note-se que, considerando valores de k superiores a 10 na tabela anterior (e, portanto, $1/k < 1/10$), a sucessão $(z^k)_{k\in\mathbb{N}}$ começaria a convergir mais rapidamente para $\bar{x}$ do que a sucessão $(y^k)_{k\in\mathbb{N}}$, obtendo-se $||z^{k+1} - \bar{x}|| < ||y^{k+1} - \bar{x}||$ para todo $k > 25$. Finalmente, a sucessão $(w^k)_{k\in\mathbb{N}}$ praticamente duplica o número de casas decimais de precisão para cada elemento da sucessão.

1.3 Função real de várias variáveis reais

Uma *função de n variáveis* é uma correspondência entre vectores de um subconjunto de $\mathbb{R}^n$ e o conjunto de números reais. Assim, por exemplo

$$\begin{array}{rccl} f: & \mathbb{R}^4 & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & x=(x_1,x_2,x_3,x_4) & \mapsto & x_1x_2x_3+x_2^2e^{-x_4}+x_4\log x_1 \end{array}$$

é uma função de $\mathbb{R}^4$ em $\mathbb{R}$ ou uma função de 4 variáveis. Normalmente escrevemos

$$y=f(x_1,x_2,\ldots,x_n)$$

para representar a função f. Assim,

$$y=x_1x_2x_3+x_2^2e^{-x_4}+x_4\log x_1$$

representa a função do exemplo anterior.

Dada uma função de n variáveis, uma *Superfície de Nível* é representada por uma equação de forma

$$f(x_1,x_2,\ldots,x_n)=k$$

com $k\in\mathbb{R}$. Se $n=2$, então a equação $f(x_1,x_2)=k$ representa uma *curva de nível.* Cada função de n variáveis tem associada uma infinidade de superfícies de nível. A figura 1.3 apresenta o gráfico (à esquerda) e duas curvas de nível (à direita) da função $y=x_1^2+x_2^2$. O gráfico da função foi obtido utilizando o software MatLab executando as seguintes intruções:

```
[X, Y] = meshgrid(-1:0.1:1, -1:0.1:1);
Z = X.^2 + Y.^2;
mesh(X, Y, Z);
xlabel('x_1');
ylabel('x_2');
zlabel('y');
```

Substituindo o comando "`mesh(X, Y, Z)`" por "`contour(X,Y,Z,[0.5 1])`" obtemos as curvas de nível $f(x_1,x_2)=0.5$ e $f(x_1,x_2)=1$. Note-se que o comando "`meshc`" permite visualizar o gráfico e as curvas de nível na mesma figura.

Uma *função de n variáveis diz-se Linear* se se puder escrever na forma

$$y=b+c_1x_1+\ldots+c_nx_n=b+\sum_{i=1}^{n}c_ix_i$$

com $b,c_1,\ldots,c_n$ números reais. Dada a definição de produto escalar de dois vectores, obtemos a expressão vectorial da função linear

$$y=b+c\,.\,x=b+c^{\mathsf{T}}x$$

com $c=(c_1,\ldots,c_n)$ e $x=(x_1,\ldots,x_n)$. É de notar que em $\mathbb{R}^2$ as curvas de nível da função linear são rectas.

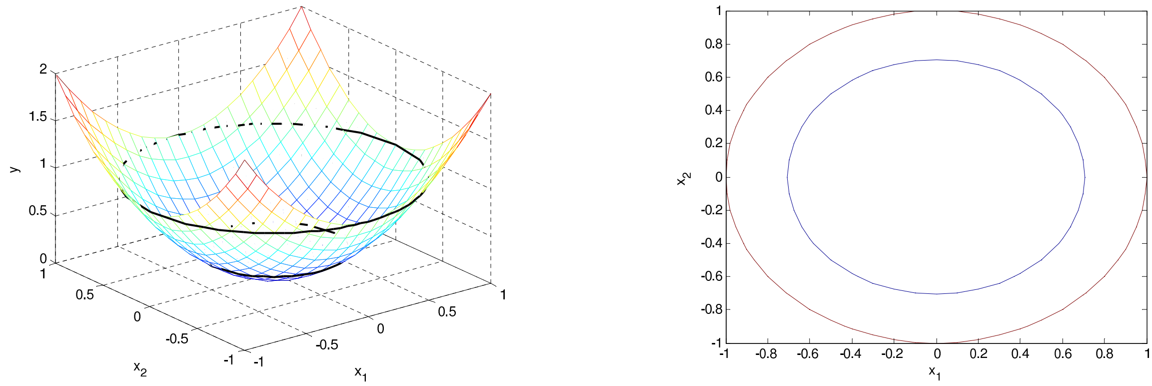


Figura 1.3: Gráfico e curvas de nível da função $y = x_1^2 + x_2^2$.

Uma *função de* n *variáveis diz-se Quadrática* se se puder escrever na forma

$$y = b + c^\top x + \frac{1}{2} x^\top H x. \tag{1.1}$$

É de notar que uma função quadrática pode ter várias representações equivalentes na forma vectorial. De facto, é fácil encontrar outras matrizes H' verificando $x^\top H' x = x^\top H x, \forall x \in \mathbb{R}^n$, como por exemplo $H' = \frac{1}{2}(H^\top + H)$. Contudo, se impusermos que H seja uma matriz simétrica, então há unicidade na representação vectorial. Por isso assumimos que H é simétrica em (1.1) e tem-se

$$\begin{aligned} y &= b + (c_1 x_1 + \ldots + c_n x_n) + \frac{1}{2} h_{11} x_1^2 + h_{12} x_1 x_2 + \ldots + h_{1n} x_1 x_n + \ldots + \\ &\quad \frac{1}{2} h_{22} x_2^2 + \ldots + h_{2n} x_2 x_n + \ldots + \frac{1}{2} h_{nn} x_n^2 \\ &= b + \sum_{i=1}^{n} c_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} h_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} h_{ij} x_i x_j \\ &= b + \sum_{i=1}^{n} c_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} h_{ij} x_i x_j. \end{aligned} \tag{1.2}$$

A passagem da forma analítica para a vectorial é fácil de efectuar se tivermos em conta as expressões (1.1) e (1.2). Com efeito, para se obter a forma vectorial a partir da analítica basta notar que H é simétrica e que se tem

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} h_{ii} &= \text{coeficiente de } x_i^2, i = 1, \ldots, n \\ h_{ij} &= \text{coeficiente de } x_i x_j, i < j. \end{aligned}$$

Assim, por exemplo, consideremos a função quadrática de 4 variáveis

$$y = 3 + 2x_1 - x_3 + 2x_4 + 3x_1^2 + 2x_1 x_2 - x_1 x_4 + x_2^2 - x_2 x_3 + x_2 x_4 - 3x_3^2 + x_3 x_4 - x_4^2.$$

Então,

$$b = 3, \qquad c = [2 \;\; 0 \;\; -1 \;\; 2], \qquad H = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 0 & -1 \\ 2 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & -6 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

Sejam agora dadas m funções f_i de n variáveis. Uma *função vectorial F de n variáveis com m valores* é definida por

$$\begin{array}{rccl} F: & \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R}^m \\ & x & \mapsto & F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \cdots \\ f_m(x) \end{bmatrix}. \end{array}$$

Uma função F é linear se todas as funções f_i o forem. Assim, F é linear se e só se para qualquer $x \in \mathbb{R}^n$

$$F(x) = \begin{bmatrix} b_1 + a_{11}x_1 + \ldots + a_{1n}x_n \\ b_2 + a_{21}x_1 + \ldots + a_{2n}x_n \\ \cdots \\ b_m + a_{m1}x_1 + \ldots + a_{mn}x_n \end{bmatrix} = b + Ax$$

com $b = [b_i] \in \mathbb{R}^n$ e $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Assim, toda a função linear tem associada uma e uma só matriz A que se chama *Matriz da Função Linear*.

1.4 Continuidade

Apresentamos nesta secção a definição e algumas propriedades da continuidade de uma dada função. Assim, f diz-se *Contínua num Ponto a* pertencente ao domínio $D \subseteq \mathbb{R}^n$ se e só se

$$\begin{aligned} \lim_{x \to a} f(x) = f(a) \Leftrightarrow \lim_{x \to a} ||f(x) - f(a)|| = 0 \\ \Leftrightarrow \forall \theta > 0, \exists \varepsilon > 0 : x \in B(a, \varepsilon) \cap D \Rightarrow ||f(x) - f(a)|| < \theta. \end{aligned}$$

Uma função diz-se *Contínua em $A \subseteq D$* se for contíniua em todos os pontos de $a \in D$.
O seguinte teorema indica algumas propriedades importantes sobre funções contínuas.

Teorema 1.4 *Sejam f e g duas funções reais de n variáveis reais contínuas em $D \subseteq \mathbb{R}^n$.*

1. *Se $\lambda \in \mathbb{R}$, então $h_1 : x \longrightarrow \lambda f(x)$ é contínua em A.*

2. *As funções*

$$\begin{aligned} h_2 : x &\longrightarrow f(x) + g(x) \\ h_3 : x &\longrightarrow f(x) - g(x) \\ h_4 : x &\longrightarrow f(x).g(x) \end{aligned}$$

   são contínuas em D.

3. *A função*

$$h_5 : x \longrightarrow \frac{f(x)}{g(x)}$$

   é contínua em $\{x \in D : g(x) \neq 0\}$.

4. Se h é contínua no seu domínio $D_h \subseteq \mathbb{R}$, então

$$h_6 : x \longrightarrow h(f(x))$$

é contínua em $\{x \in D : f(x) \in D_h\}$.

Como consequência desta propriedade podemos concluir que se f é contínua em $D \subseteq \mathbb{R}^n$ então

$$\begin{array}{lll} h_7 : x \longrightarrow & \left[f(x)\right]^n & (n \in \mathbb{N}) \\ h_8 : x \longrightarrow & |f(x)| & \\ h_9 : x \longrightarrow & \sqrt[k]{f(x)} & (k \in \mathbb{N}, k \text{ é ímpar}) \end{array}$$

são contínuas em D e

$$h_{10} : x \longrightarrow \sqrt[p]{f(x)} \qquad (p \in \mathbb{N}, p \text{ é par})$$

é contínua em $\{x \in D : f(x) \geq 0\}$. Além disso, se $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ é contínua em $D \subseteq \mathbb{R}^n$ e $||.||$ é uma norma qualquer, então

$$h_{11} : x \longrightarrow ||F(x)||$$

é contínua em D.

Ainda como consequência imediata da definição de função contínua num ponto a, podemos estabelecer o seguinte resultado.

Teorema 1.5 *Se $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua em $a \in \mathbb{R}^n$ e $f(a) > 0$ (< 0), então existe $\varepsilon > 0$ tal que $f(x) > 0$ (< 0) para todo $x \in B(a, \varepsilon)$.*

1.5 Derivadas direccionais

Dada uma função $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, chama-se *Derivada Direccional de f em $x \in \mathbb{R}^n$ na direccção $p \in \mathbb{R}^n$* ao número real

$$\frac{\partial f}{\partial p}(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x + hp) - f(x)}{h}$$

A derivada direccional aparece assim como generalização da derivada de uma função de uma variável. A *Derivada Parcial em ordem a x_i em x* denota-se por $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$ e é a derivada direccional na direcção e^i, onde e^i é o vector

$$e^i = (e^i_1, \ldots, e^i_n), \quad e^i_j = \left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ se } j = i \\ 0, \text{ se } j \neq i \end{array} \right. .$$

Assim,

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x + he^i) - f(x)}{h}.$$

O *Gradiente de f* em $x \in \mathbb{R}^n$ é o vector $\nabla f(x) \in \mathbb{R}^n$ cujas componentes são as n derivadas parciais de f em x, isto é,

$$\nabla f(x) = \left[\nabla_i f(x)\right] \in \mathbb{R}^n$$

com

$$\nabla_i f(x) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x), \quad i = 1, \ldots, n.$$

Das definições apresentadas facilmente se conclui que:

1. Se f é linear ($f(x) = b + c^\mathsf{T} x$), então $\nabla f(x) = c$, para todo $x \in \mathrm{I\!R}^n$. Portanto, o gradiente de uma função linear é constante.

2. Se f é quadrática ($f(x) = b + c^\mathsf{T} x + \frac{1}{2} x^\mathsf{T} H x$), então $\nabla f(x) = c + Hx$ para qualquer $x \in \mathrm{I\!R}^n$. Portanto, o gradiente de f em x é uma função linear em x.

Se $F : \mathrm{I\!R}^n \longrightarrow \mathrm{I\!R}^m$ é uma função vectorial, então podemos agrupar os m gradientes $\nabla f_i(x)$ das m funções f_i que constituem F e formar uma matriz de ordem $m \times n$ de forma

$$J_F(x) = \nabla F(x)^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} \nabla f_1(x)^\mathsf{T} \\ \cdots \\ \nabla f_m(x)^\mathsf{T} \end{bmatrix}$$

que se chama *Jacobiano de F em x*. É facil de concluir que o jacobiano de uma função vectorial linear é constante e igual à matriz A a si associada.

Uma função $f : \mathrm{I\!R}^n \longrightarrow \mathrm{I\!R}$ é *Gateaux Diferenciável* em $x \in \mathrm{I\!R}^n$ se as derivadas direccionais $\frac{\partial f}{\partial p}(x)$ existem para todas as direcções $p \in \mathrm{I\!R}^n$. Então, $\nabla f(x)$ existe e satisfaz

$$\frac{\partial f}{\partial p}(x) = \nabla f(x)^\mathsf{T} p$$

o que permite calcular facilmente a derivada direccional de f em x na direcção p. Uma função é *Gateaux Diferenciável* em $D \subseteq \mathrm{I\!R}^n$ se o é em cada $x \in D$.

Diz-se que uma função $f : \mathrm{I\!R}^n \longrightarrow \mathrm{I\!R}$ é *Frechet Diferenciável* em x se é Gateaux diferenciável em x e além disso

$$\lim_{y \longrightarrow 0} \frac{|f(x+y) - f(x) - \nabla f(x)^\mathsf{T} y|}{||y||} = 0.$$

Além disso, f é Frechet diferenciável em $D \subseteq \mathrm{I\!R}^n$ se o é em cada $x \in D$.

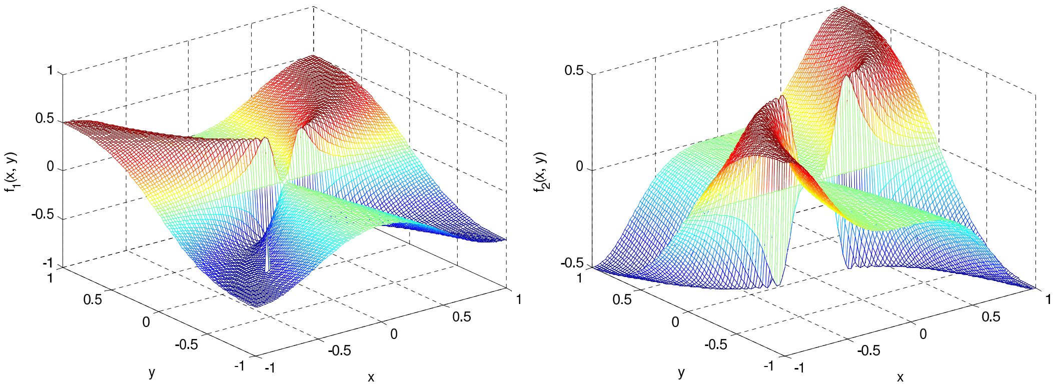
É fácil de ver que toda a função Frechet diferenciável em x é contínua nesse ponto, mas esse resultado não é necessariamente verdadeiro para funções apenas Gateaux diferenciáveis. A título de exemplo, podemos indicar as funções

$$f_1(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{x_1^2 x_2}{x_1^4 + x_2^2}, & \text{se } (x_1, x_2) \neq (0,0) \\ 0, & \text{se } (x_1, x_2) = (0,0) \end{cases} \quad \text{e} \quad f_2(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{x_1^3 x_2}{x_1^6 + x_2^2}, & \text{se } (x_1, x_2) \neq (0,0) \\ 0, & \text{se } (x_1, x_2) = (0,0) \end{cases}$$

cujos gráficos estão representados na figura 1.4. A função f_1 é Gateaux diferenciável em $(0,0)$ e

$$\forall p = (a,b) \in \mathrm{I\!R}^2, \frac{\partial f_1}{\partial p}((0,0)) = \begin{cases} \frac{a^2}{b}, & \text{se } b \neq 0 \\ 0, & \text{se } b = 0 \end{cases}.$$

Porém, uma vez que esta derivada não é uma função linear em p, então f_1 não é Frechet diferenciável no ponto $(0,0)$. Por outro lado, a função f_2 é Gateaux diferenciável em $(0,0)$ com $\frac{\partial f_2}{\partial p}((0,0)) = 0$ para todo o $p \in \mathrm{I\!R}^2$, sendo portanto um operador linear. No entanto, f_2 não é Frechet diferenciável em $(0,0)$ pois não é contínua nesse ponto, como se pode facilmente constatar calculando o limite da função ao longo da direcção definida por $x_1 = t$, $x_2 = t^3$, $t \in \mathrm{I\!R}$.



f_1 f_2

Figura 1.4: Gráfico de duas funções Gateaux diferenciável em $(0,0)$ que não são Frechet diferenciáveis nesse ponto.

Uma função vectorial $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ é (Gateaux, Frechet) diferenciável em x (em $D \subseteq \mathbb{R}^n$) se cada função f_i o fôr.

Seja agora uma função $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ diferenciável num subconjunto $D \subseteq \mathbb{R}^n$. Então, podemos considerar uma função vectorial em D

$$\begin{array}{rccc} \nabla f : & \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R}^n \\ & x & \mapsto & \nabla f(x) \end{array}.$$

Se esta função é contínua em x, diz-se que f é *Continuamente Diferenciável em* x. A função f é *Continuamente Diferenciável em* D, e escreve-se $f \in C^1(D)$, se o fôr em cada $x \in D$. Do mesmo modo, uma função vectorial $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ é *Continuamente Diferenciável em* x se cada f_i o fôr. Além disso, F é *Continuamente Diferenciável em* D, e escreve-se $F \in C^1(D)$, se o fôr em cada $x \in D$.

Consideremos novamente uma função f diferenciável em $D \subset \mathbb{R}^n$. Se a função ∇f definida anteriormente é diferenciável em $x \in D$, então existe o jacobiano de ∇f em x. Essa matriz é quadrada de ordem n, chama-se *Hessiana de* f *em* x e satisfaz

$$\nabla^2(x) = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \, \partial x_j}(x) \right]_{\substack{i=1,\ldots,n \\ j=1,\ldots,n}}.$$

Dada uma função diferenciável $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, chama-se *Segunda Derivada Direccional de* f *em* x *na direcção* p ao número real

$$\frac{\partial^2 f}{\partial p^2}(x) = \lim_{h \to 0} \frac{\frac{\partial f}{\partial p}(x + hp) - \frac{\partial f}{\partial p}(x)}{h}.$$

A função f diz-se *Duas Vezes Diferenciável em* x se a segunda derivada direccional em x existe para qualquer direcção p. É então possível provar que a hessiana em x satisfaz

$$\frac{\partial^2 f}{\partial p^2}(x) = p^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(x) p.$$

A função f é *Duas Vezes Continuamente Diferenciável em* x se a função vectorial $\nabla^2 f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^{n\times n}$ é contínua em x. A função diz-se duas vezes continuamente diferenciável em $D \subseteq \mathbb{R}^n$ se o fôr em cada $x \in D$ e escreve-se $f \in C^2(D)$. Se tal acontecer, é possível mostrar que a hessiana é simétrica. É ainda fácil ver que toda a função quadrática definida por $f(x) = b + c^\top x + \frac{1}{2}x^\top Hx$ é $C^2(\mathbb{R}^n)$ e tem hessiana constante e igual à matriz H, isto é, $\nabla^2 f(x) = H$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Em particular, a hessiana de uma função linear é nula para cada $x \in \mathbb{R}^n$.

1.6 Teoremas das funções continuamente diferenciáveis

Nesta secção apresentamos alguns teoremas de funções continuamente diferenciáveis que serão muito úteis em capítulos posteriores. Assim, verifica-se o chamado teorema dos Acréscimos Finitos, cujo enunciado e demonstração são apresentados a seguir.

Teorema 1.6 (Acréscimos Finitos) *Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e convexo e $f \in C^1(D)$, então para quaisquer $x, x+p \in D$, existe um número real $\lambda \in]0,1[$ tal que*

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+\lambda p)^\top p.$$

Demonstração: Consideremos a função

$$\begin{array}{rccl} g: & \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & t & \mapsto & g(t) = f(x+tp) \end{array}. \tag{1.3}$$

Então, g é continuamente diferenciável em $[0,1]$ por ser a composição de duas funções nessas condições. Além disso,

$$g(0) = f(x), \qquad g(1) = f(x+p), \qquad g'(t) = \nabla f(x+tp)^\top p.$$

Pelo teorema dos Acréscimos Finitos para funções de uma variável, existe $\lambda \in]0,1[$ tal que

$$g(1) = g(0) + g'(\lambda)(1-0).$$

Substituindo os valores de $g(1)$, $g(0)$ e $g'(\lambda)$ obtém-se o resultado pretendido. □

A figura 1.5 ilustra o gráfico das funções $f(x) = sin(\frac{x_1 x_2^2}{2})$ e $g(t)$ (no caso de $x = (0,0)$ e $p = (1,-1)$). Representa-se ainda nesta figura, em baixo, o gráfico de g apenas numa dimensão.

Se agora considerarmos a Fórmula de Taylor com Resto de Lagrange para a função g anterior e tendo em conta que

$$g''(t) = \frac{\partial^2 f}{\partial p^2}(x+tp) = p^\top \nabla^2 f(x+tp)p$$

é fácil de obter o seguinte resultado.

Teorema 1.7 *Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e convexo e $f \in C^2(D)$, então para quaisquer $x, x+p \in D$ existe $\lambda \in]0,1[$ tal que*

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^\top p + \frac{1}{2}p^\top \nabla^2 f(x+\lambda p)p.$$

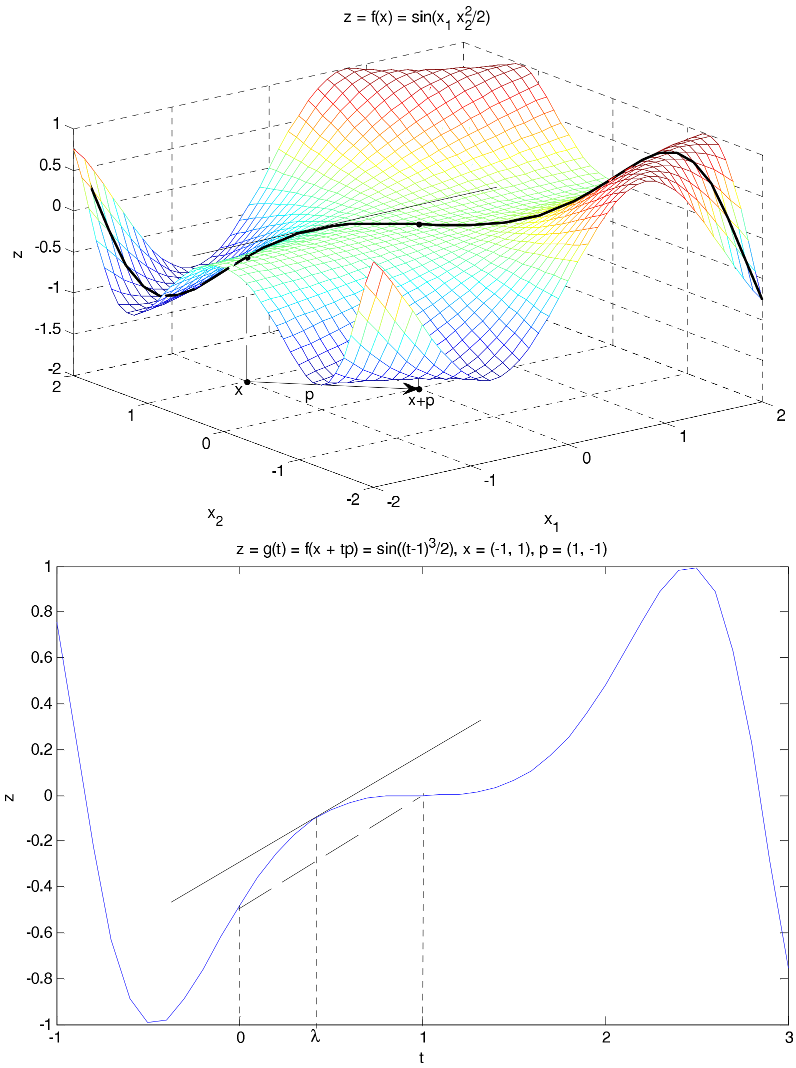


Figura 1.5: Exemplificação do teorema dos acréscimos finitos.

Utilizando agora a chamada Fórmula Fundamental do Cálculo Integral para funções de uma variável é possível estabelecer a seguinte propriedade.

Teorema 1.8 *Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e convexo e $f \in C^1(D)$, então para quaisquer $x, x+p \in D$*

$$f(x+p) = f(x) + \int_0^1 \nabla f(x+tp)^{\mathsf{T}} p \, dt.$$

Demonstração: Consideremos novamente a função dada em (1.3). Então, como vimos na demonstração do teorema 1.6, vem

$$g(0) = f(x), \qquad g(1) = f(x+p), \qquad g'(t) = \nabla f(x+tp)^{\mathsf{T}} p.$$

Mas, pela Fórmula Fundamental do Cálculo Integral, tem-se

$$g(1) - g(0) = \int_0^1 g'(t) \, dt.$$

Substituindo os valores anteriormente calculados na igualdade anterior, obtém-se o resultado pretendido. □

Contrariamente ao teorema dos acréscimos finitos, este teorema pode ser facilmente extendido a funções vectoriais. Com efeito verifica-se o seguinte resultado.

Teorema 1.9 *Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e convexo e $F \in C^1(D)$, então para quaisquer $x, x+p \in D$*

$$F(x+p) = F(x) + \int_0^1 \nabla F(x+tp)^{\mathsf{T}} p \, dt.$$

Demonstração: Pelo teorema anterior tem-se

$$f_i(x+p) = f_i(x) + \int_0^1 \nabla f_i(x+tp)^{\mathsf{T}} p \, dt, \quad i = 1, \ldots, m.$$

O resultado obtém-se a partir da definição de $F(y)$ e de $\nabla F(y)$. □

Definição 1.10 *Uma função $h : D \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ diz-se* Contínua à Lipschitz *em D se existe $\delta \geq 0$ tal que*

$$|h(x) - h(y)| \leq \delta |x - y|, \quad \forall x, y, \in D.$$

Para representar essa propriedade escreve-se $h \in Lip_\delta(D)$. O menor valor de δ que verifica esta desigualdade é denominado Constante de Lipschitz da função *h.*

Como consequência destes dois últimos teoremas, podemos estabelecer o seguinte resultado.

Teorema 1.11 *1. Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e convexo, $x \in D$, $f \in C^1(D)$ e $\nabla f \in Lip_\delta(D)$, então para quaisquer $x, x+p \in D$*

$$f(x+p) \leq f(x) + \nabla f(x)^{\mathsf{T}} p + \frac{\delta}{2} ||p||^2.$$

2. Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e convexo, $x \in D$, $F \in C^1(D)$ e $\nabla F \in Lip_\delta(D)$, então para quaisquer $x, x+p \in D$

$$||F(x+p) - F(x) - \nabla F(x)^{\mathsf{T}} p|| \leq \frac{\delta}{2} ||p||^2.$$

Demonstração: Iremos apenas provar (2), pois (1) é uma consequência desse resultado. Do teorema 1.9 vem que

$$\begin{aligned} F(x+p) - F(x) - \nabla F(x)^{\mathsf{T}} p = & \int_0^1 \nabla F(x+tp)^{\mathsf{T}} p \; dt - \nabla F(x)^{\mathsf{T}} p \\ & \int_0^1 \left(\nabla F(x+tp) - \nabla F(x) \right)^{\mathsf{T}} p \; dt. \end{aligned}$$

Considerando que as normas matricial e vectorial são compatíveis, tem-se

$$||F(x+p) - F(x) - \nabla F(x)^{\mathsf{T}} p|| \leq \int_0^1 ||\nabla F(x+tp) - \nabla F(x)|| \; ||p|| \, dt.$$

Como $\nabla F \in Lip_\delta(D)$, então $||\nabla F(x+tp) - \nabla F(x)|| \leq \delta\, ||tp|| = \delta\, |t|\, ||p||$. Portanto,

$$||F(x+p) - F(x) - \nabla F(x)^{\mathsf{T}} p|| \leq \delta\, ||p||^2 \int_0^1 t\, dt = \frac{\delta}{2} ||p||^2.$$

□

1.7 Funções convexas e côncavas

Seja D um conjunto convexo. Uma função $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ diz-se *Convexa em D* se para quaisquer $x^1, x^2 \in D$,

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \leq \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2), \quad \forall \lambda \in [0,1].$$

Se se verificar a desigualdade estrita para $x_1 \neq x_2$, isto é, se

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2), \quad \forall \lambda \in]0,1[$$

então f diz-se *Estritamente Convexa em D*.

Uma função diz-se *Côncava* (*Estritamente Côncava*) em D se $-f$ é convexa (estritamente convexa) em D. Assim, f é côncava em D se para quaisquer $x^1, x^2 \in D$,

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \geq \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2), \quad \forall \lambda \in [0,1]$$

e f é estritamente côncava em D se para quaisquer $x^1, x^2 \in D$ distintos,

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) > \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2), \quad \forall \lambda \in]0,1[.$$

Estas definições têm interpretações geométricas muito interessantes para funções de uma variável (ver figura 1.6). Assim, f é estritamente convexa em D se para quaisquer $x_1, x_2 \in D$, o segmento de recta que une os pontos $P_1(x_1, f(x_1))$ e $P_2(x_2, f(x_2))$ está acima da curva $y = f(x)$ que contém esses pontos. Se a função é convexa mas não é estritamente convexa, então a curva e o segmento podem coincidir. Do mesmo modo, para funções côncavas (estritamente ou não) a curva $y = f(x)$ está acima do segmento que une os pontos $P_1(x_1, f(x_1))$ e $P_2(x_2, f(x_2))$, onde $x_1, x_2 \in D, i \in \{1,2\}$.

Das definições apresentadas podemos estabelecer os seguintes resultados.

Teorema 1.12

1. *Toda a norma é uma função convexa.*
2. *Se f é [estritamente] convexa (côncava) em $D \subseteq \mathbb{R}^n$ e g é [estritamente] convexa e crescente (côncava e decrescente) em $\{y \in \mathbb{R} : y = f(x), x \in D\}$, então $g \circ f$ é [estritamente] convexa (côncava) em D.*

Demonstração:

1. Se $x^1, x^2 \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in [0,1]$, então

$$||\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2|| \leq ||\lambda x^1|| + ||(1-\lambda)x^2|| = \lambda ||x^1|| + (1-\lambda)||x^2||.$$

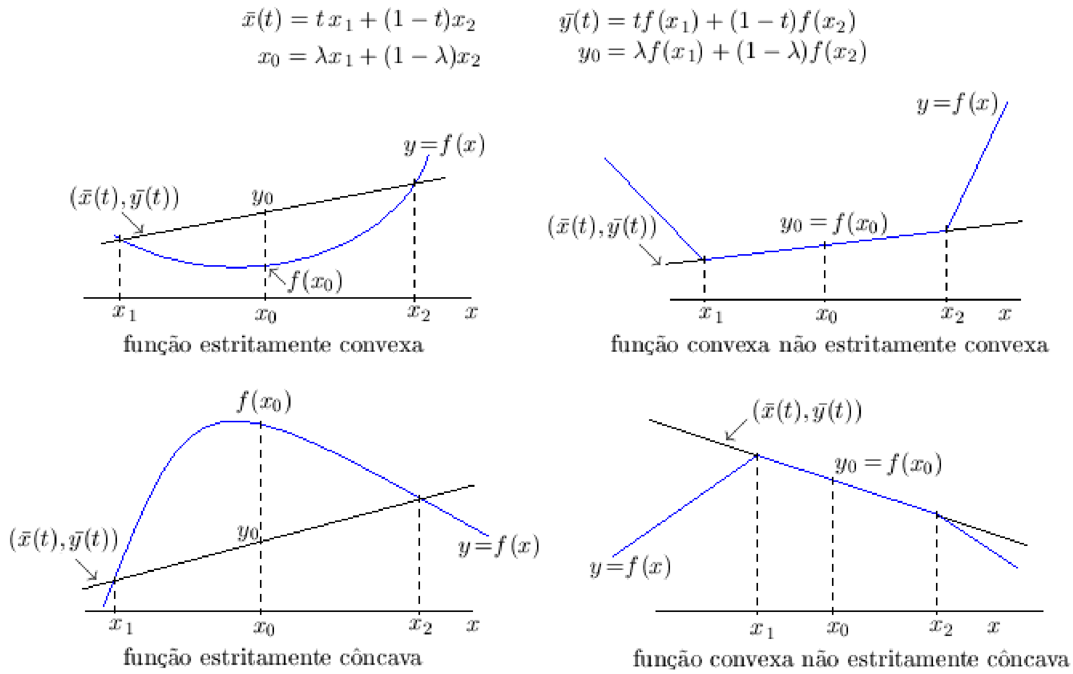


Figura 1.6: Exemplos de funções [estritamente] convexas/côncavas.

2. Sejam $x^1, x^2 \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in [0,1]$. Como f é convexa, então

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \leq \lambda f(x^1) + (1-\lambda)f(x^2).$$

Mas g é crescente e convexa e por isso

$$g\big(f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2)\big) \leq g\big(\lambda f(x^1) + (1-\lambda)f(x^2)\big) \leq \lambda g\big(f(x^1)\big) + (1-\lambda)g\big(f(x^2)\big). \qquad \square$$

Assim, por exemplo, a função

$$f : x \longrightarrow e^{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

é estritamente convexa em $\mathbb{R}^n$, pois é composição de $f : x \longrightarrow ||x||_2^2$ com a função exponencial g.

Em geral, as definições apresentadas são pouco úteis para estudar se uma função é convexa ou côncava. Seguidamente iremos estabelecer algumas propriedades que em alguns casos facilitam imenso essa tarefa. Antes de as apresentarmos, notemos que toda a função estritamente convexa (côncava) é convexa (côncava) e que f é convexa se e só se $-f$ é côncava. Por isso, limitar-nos-emos a demonstrar os resultados para funções convexas.

Teorema 1.13 *Se D é um conjunto aberto e convexo e $f \in C^1(D)$, então*

1. f é convexa em D se e só se para cada $\bar{x} \in D$

$$f(x) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^\mathsf{T}(x - \bar{x}), \quad \forall x \in D.$$

2. f é estritamente convexa em D se e só se para cada $\bar{x} \in D$

$$f(x) > f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}), \quad \forall x \in D - \{\bar{x}\}.$$

<u>Demonstração</u>:

1. Para provar a implicação "$\Rightarrow$", seja

$$y = \lambda x + (1-\lambda)\bar{x}, \quad \lambda \in]0,1[.$$

Como f é convexa em D, então

$$f(y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(\bar{x}) = f(\bar{x}) + \lambda \big(f(x) - f(\bar{x})\big). \tag{1.4}$$

Além disso $f \in C^1(D)$ e portanto, pelo Teorema 1.6, tem-se

$$f(y) = f(\bar{x} + \lambda(x - \bar{x})) = f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\eta)^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}) \tag{1.5}$$

com $\eta \in]\bar{x}, y[$. De (1.4) e (1.5) vem

$$\begin{aligned} f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\eta)^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}) &\leq f(\bar{x}) + \lambda \big(f(x) - f(\bar{x})\big) \\ \Leftrightarrow \nabla f(\eta)^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}) &\leq f(x) - f(\bar{x}). \end{aligned}$$

Fazendo tender y para $\bar{x}$, também η tende para $\bar{x}$ e como $f \in C^1(D)$ então

$$\nabla f(\eta) \to \nabla f(\bar{x}).$$

Portanto, $f(x) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} (x - \bar{x})$.
Para provar a implicação recíproca, suponhamos que para cada $\bar{x} \in D$

$$f(x) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}), \quad \forall x \in D$$

e provemos que f é convexa em D, isto é, que

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \leq \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2)$$

para quaisquer $x^1, x^2 \in D$ e $\lambda \in [0,1]$. Se $y = \lambda x^1 + (1-\lambda)x^2$, então

$$\begin{aligned} f(x^1) - f(y) &\geq \nabla f(y)^{\mathsf{T}} (x^1 - y) \\ f(x^2) - f(y) &\geq \nabla f(y)^{\mathsf{T}} (x^2 - y). \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2) - f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) &= \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2) - f(y) \\ &= \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2) - \big(\lambda + (1-\lambda)\big) f(y) \\ &= \lambda \big(f(x^1) - f(y)\big) + (1-\lambda)\big(f(x^2) - f(y)\big) \\ &\geq \lambda \nabla f(y)^{\mathsf{T}} (x^1 - y) + (1-\lambda) \nabla f(y)^{\mathsf{T}} (x^2 - y) \\ &= \nabla f(y)^{\mathsf{T}} \big(\lambda(x^1 - y) + (1-\lambda)(x^2 - y)\big) \\ &= \nabla f(y)^{\mathsf{T}} \big(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2 - y\big) = 0 \end{aligned}$$

e isso demonstra que f é convexa em D.

2. A demonstração da implicação "$\Leftarrow$" é semelhante à do caso de f ser convexa. Provemos então a implicação "$\Rightarrow$". Como toda a função estritamente convexa é convexa, pelo item anterior tem-se

$$f(x) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(x - \bar{x}) \tag{1.6}$$

para quaisquer $x \neq \bar{x}$. Para provar a desigualdade estrita, suponhamos que existe $\hat{x} \in D - \{\bar{x}\}$ tal que

$$f(\hat{x}) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(\hat{x} - \bar{x}). \tag{1.7}$$

Seja agora $\tilde{x} = \lambda\bar{x} + (1-\lambda)\hat{x}$ para certo $\lambda \in]0, 1[$. Como f é estritamente convexa em D, então

$$f(\tilde{x}) = f(\lambda\bar{x} + (1-\lambda)\hat{x}) < \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda)f(\hat{x}).$$

Mas de (1.7) vem

$$\begin{aligned}\lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda)f(\hat{x}) &= \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda)\big(f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(\hat{x} - \bar{x})\big)\\ &= f(\bar{x}) + (1-\lambda)\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(\hat{x} - \bar{x}).\end{aligned}$$

Como $\tilde{x} - \bar{x} = (1-\lambda)(\hat{x} - \bar{x})$ então

$$f(\tilde{x}) < f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(\tilde{x} - \bar{x})$$

o que contraria (1.6). □

Se f é uma função de uma variável, então $\nabla f(\bar{x}) = f'(\bar{x})$ e a condição

$$f(x) > f(\bar{x}) + f'(\bar{x})(x - \bar{x}), \text{ para todo } x \in D - \{\bar{x}\}$$

significa que a recta tangente em cada ponto $P(\bar{x}, f(\bar{x}))$ está abaixo da curva de equação $y = f(x)$ (ver figura 1.7).

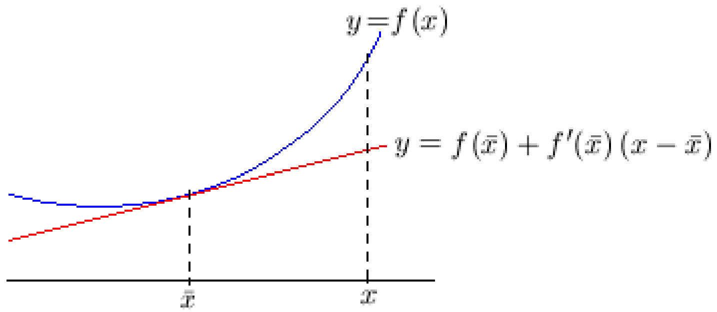


Figura 1.7: Exemplificação do teorema 1.13.

Este teorema tem interesse essencialmente teórico e não é por isso normalmente usado para estabelecer se uma função é convexa ou estritamente convexa. Para isso é bastante importante o seguinte resultado.

Definição 1.14 *Seja* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

1. A *é* Semi-Definida Positiva *(PSD) se* $x^{\mathsf{T}}Ax \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$.

2. *A é* Definida Positiva *(PD) se* $x^\mathsf{T} A\, x > 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n - \{0\}$.

3. *A é* Semi-Definida Negativa *(NSD) se* $x^\mathsf{T} A\, x \leq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$.

4. *A é* Definida Negativa *(ND) se* $x^\mathsf{T} A\, x < 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n - \{0\}$.

5. *A é* Indefinida *(IND) nos restantes casos, isto é, se existe* $x, y, \in \mathbb{R}^n$ *tal que* $x^\mathsf{T} A\, x < 0$ *e* $y^\mathsf{T} A\, y > 0$.

Além disso, usamos as notações SPSD, SPD, SNSD, SND e SIND para indicar que a matriz é simétrica e PSD, PD, NSD, ND ou IND, respectivamente.

Os seguintes critérios permitem estbelecer condições necessárias e suficientes para averiguar se uma matriz é SPD.

Teorema 1.15 *Seja* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *uma matriz simétrica. A é SPD se e só se*

1. *todos os valores próprios de A são positivos;*

2. $A = LDL^\mathsf{T}$ *com* $d_{ii} > 0$*, para todo o* $i = 1, \ldots, n$*;*

3. *todas as submatrizes líderes (isto é, as submatrizes quadradas de A formadas pelas k primeiras linhas e colunas de A) têm determinante positivo.*

4. *todas as submatrizes principais (isto é, as submatrizes quadradas de A cuja diagonal principal está contida na diagonal principal de A) têm determinante positivo.*

Estes critérios podem ser ajustados do seguinte modo para o caso das matrizes SPSD.

Teorema 1.16 *Seja* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *uma matriz simétrica. A é SPSD se e só se*

1. *todos os valores próprios de A são não negativos;*

2. *existe uma matriz de permutação P tal que* $PAP^\mathsf{T} = LDL^\mathsf{T}$ *com* $d_{ii} \geq 0$*, para todo o* $i = 1, \ldots, n$*;*

3. *todas as submatrizes principais (isto é, as submatrizes quadradas de A cuja diagonal principal está contida na diagonal principal de A) têm determinante não negativo.*

Note-se que o terceiro critério do teorema anterior não pode ser utilizado para matrizes SPSD, como acontece para as matrizes SPD. De facto, a matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

não é SPSD, mas todas as submatrizes líderes tem determinante não negativo.

Atendendo à definição de matriz SNSD e SND, conclui-se facilmente que A é SNSD (SND) se e só se $-A$ é SPSD (SPD) o que conduz ao seguinte resultado.

Teorema 1.17 *Considere $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simétrica.*

1. *A é SND se e só se*
   (a) *todos os valores próprios de A são negativos;*
   (b) *$A = LDL^\mathsf{T}$ com $d_{ii} < 0$, para todo o $i = 1, \dots, n$;*
   (c) *todas as submatrizes líderes de ordem par têm determinante positivo e as submatrizes líderes de ordem ímpar têm determinante negativo.*
   (d) *todas as submatrizes principais de ordem par têm determinante positivo e as submatrizes principais de ordem ímpar têm determinante negativo.*
2. *A é SNSD se e só se*
   (a) *todos os valores próprios de A são não positivos;*
   (b) *existe uma matriz de permutação P tal que $PAP^\mathsf{T} = LDL^\mathsf{T}$ com $d_{ii} \leq 0$, para todo o $i = 1, \dots, n$;*
   (c) *todas as submatrizes principais de ordem par têm determinante não negativo e as submatrizes principais de ordem ímpar têm determinante não positivo.*

Teorema 1.18 *Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e convexo e $f \in C^2(D)$, então*

1. *f é convexa de $D \Leftrightarrow \nabla^2 f(x)$ é SPSD para qualquer $x \in D$.*
2. *Se $\nabla^2 f(x)$ é SPD para qualquer $x \in D$, então f é estritamente convexa em D.*

Demonstração:

1. Iremos mostrar "$\Rightarrow$" por redução ao absurdo. Seja $\bar{x} \in D$ e suponhamos que

$$u^\mathsf{T} \nabla^2 f(\bar{x})\, u < 0$$

para um certo vector $u \in \mathbb{R}^n$. Como D é um conjunto aberto e convexo e f é duas vezes continuamente diferenciável em D, então existe $\bar{t} > 0$ tal que

$$u^\mathsf{T} \nabla^2 f(\bar{x} + tu)\, u < 0, \quad \forall t \in [0, \bar{t}].$$

Mas, pelo teorema 1.7,

$$f(\bar{x} + tu) = f(\bar{x}) + t\nabla f(\bar{x})^\mathsf{T} u + \frac{t^2}{2} u^\mathsf{T} \nabla^2 f(\bar{x} + \bar{\bar{t}}u)\, p$$

com $0 < \bar{\bar{t}} < t$. Donde

$$f(\bar{x} + tu) < f(\bar{x}) + t\nabla f(\bar{x})^\mathsf{T} u$$

o que é impossível pelo teorema 1.13.
Para provar "$\Leftarrow$" tem-se para $x, \bar{x} \in D$

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^\mathsf{T}(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x})^\mathsf{T} \nabla^2 f(\eta)\,(x - \bar{x})$$

com $\eta \in]x, \bar{x}[$. Como $\nabla^2 f(x)$ é SPSD para todo o $x \in D$, então

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

e f é convexa pelo teorema 1.13.

2. A demonstração é semelhante à da parte "$\Leftarrow$" da alínea anterior.

$\square$

Como referimos anteriormente, é possível obter facilmente destes dois teoremas as seguintes caracterizações para funções côncavas.

Teorema 1.19 *Seja $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo.*

1. *Se $f \in C^1(D)$, então*
   f é côncava (estritamente côncava) em D se e só se para cada $\bar{x} \in D$

$$f(x) \leq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^\mathsf{T} (x - \bar{x}), \quad \forall x \in D - \{\bar{x}\} \qquad (<).$$

2. *Se $f \in C^2(D)$, então*
   f é côncava em $D \Leftrightarrow \nabla^2 f(x)$ é SNSD para todo $x \in D$.
   $\nabla^2 f(x)$ é SND para qualquer $x \in D \Rightarrow f$ é estritamente côncava em D.

É ainda de notar que a hessiana de uma função estritamente convexa (côncava) pode não ser SPD (SND) em algum ponto do seu domínio. Com efeito, a função

$$\begin{array}{rccc} f: & \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & x & \mapsto & x^4 \end{array}$$

é estritamente convexa em $\mathbb{R}$. Além disso, para qualquer $x \in \mathbb{R}$,

$$f''(x) = \left(4x^3\right)' = 12x^2.$$

Portanto, $f''(x) = 0$ para $x = 0$.

Este teorema fornece o critério de maior aplicação prática para verificar se uma função é convexa, estritamente convexa, côncava, estritamente côncava ou não convexa. Consideremos, por exemplo, a função

$$f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_2^2 + 2x_1x_2.$$

Então,

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}(x) = 4x_1^3 + 2x_2 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{lcc} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) & = & 12x_1^2 \\ & & \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(x) & = & 2 \end{array} \right.$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2}(x) = 2x_1 + 2x_2 \Rightarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x) = 2$$

e

$$\nabla^2 f(x) = \left[\begin{array}{cc} 12x_1^2 & 2 \\ 2 & 2 \end{array} \right].$$

Deste modo, $\nabla^2 f(x)$ não é SNSD, pois o seu segundo elemento diagonal é positivo.

Para verificar se $\nabla^2 f(x)$ é SPD ou SPSD podemos optar por determinar a decomposição LDL^T de $\nabla^2 f(x)$ ou da sua permutação principal

$$P_{12} \nabla^2 f(x) P_{12} = \left[\begin{array}{cc} 2 & 2 \\ 2 & 12x_1^2 \end{array} \right].$$

Então tem-se

$$P_{12}\nabla^2 f(x)P_{12} = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 12x_1^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12x_1^2 - 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Donde

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad D = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12x_1^2 - 2 \end{bmatrix}$$

Portanto, dois casos podem acontecer e são discutidos a seguir.

1. Se $6x_1^2 - 1 \geq 0$, $P_{12}\nabla^2 f(x)P_{12}$ é SPSD. Então, também $\nabla^2 f(x)$ é SPSD e f é convexa nos conjuntos

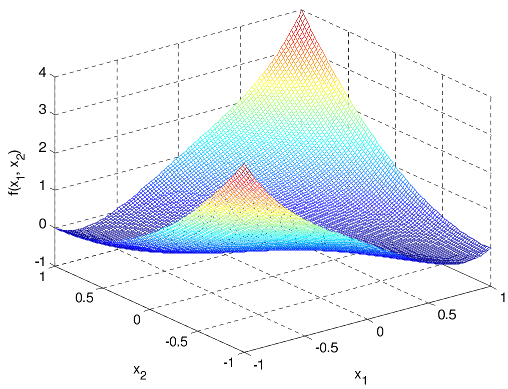
$$\{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_1 \leq -\frac{1}{\sqrt{6}}\} \qquad \text{e} \qquad \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_1 \geq \frac{1}{\sqrt{6}}\}$$

   sendo estritamente convexa pelo menos no interior de cada um dos conjuntos.

2. Se $6x_1^2 - 1 < 0$, então $P_{12}\nabla^2 f(x)P_{12}$ é SIND. Portanto, $\nabla^2 f(x)$ é SIND e a função é não convexa e não côncava em

$$\{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : 6x_1^2 - 1 < 0\} = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : -\frac{1}{\sqrt{6}} < x_1 < \frac{1}{\sqrt{6}}\}.$$

A figura 1.8 mostra o gráfico de f em $[-1, 1] \times [-1, 1]$ (à esquerda) e em $[-0.2, 0.2] \times [-0.2, 0.2]$ (à direita), ilustrando que f não é convexa em quando $x_1 \in (-\frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}})$.



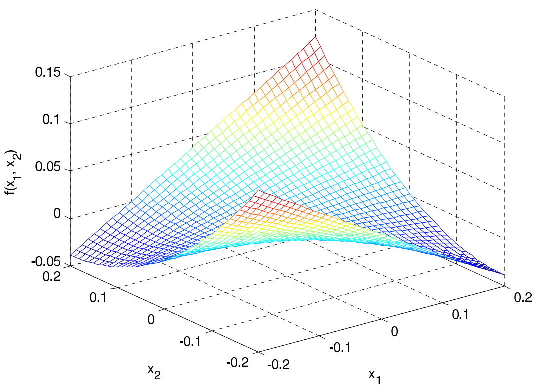


Figura 1.8: Gráfico da função $f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_2^2 + 2x_1x_2$ em $[-1, 1] \times [-1, 1]$ (à esquerda) e em $[-0.2, 0.2] \times [-0.2, 0.2]$ (à direita).

Apesar deste critério da hessiana ser de muita maior aplicação prática do que a definição para verificar se uma função é convexa ou côncava, é em geral difícil de estudar a convexidade ou concavidade de uma função usando este processo. Com efeito, a expressão da hessiana depende em geral do ponto $x = (x_1, \ldots, x_n)^\mathsf{T}$ e é bastante difícil estudar todos os casos onde $\nabla^2 f(x)$ é positiva ou negativa semi-definida.

Se uma função é quadrática, então a sua hessiana é constante e o processo de verificar a convexidade ou concavidade da função em $\mathbb{R}^n$ limita-se a estudar se a matriz associada é SPD, SPSD, SND, SNSD ou SIND. Com efeito, verifica-se o seguinte teorema

Teorema 1.20 *Seja* $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ *a função quadrática definida por* $f(x) = b + c^\top x + \frac{1}{2} x^\top H\, x$. *Então*

1. f *é estritamente convexa em* $\mathbb{R}^n \Leftrightarrow H$ *é SPD.*
2. f *é convexa em* $\mathbb{R}^n \Leftrightarrow H$ *é SPSD.*
3. f *é estritamente côncava em* $\mathbb{R}^n \Leftrightarrow H$ *é SND.*
4. f *é côncava em* $\mathbb{R}^n \Leftrightarrow H$ *é SNSD.*

Demonstração: Tendo em conta os teorema 1.18 e 1.19 e as relações entre funções convexas e côncavas, basta provar que se f é estritamente convexa quadrática, então H é SPD. Suponhamos que tal não acontece. Como toda a função estritamente convexa é convexa então, por 2, H é SPSD. Agora se H não é SPD então H é singular, ou seja, existe $\bar{x} \neq 0$ tal que $\bar{x}^\top H \bar{x} = 0$. Como f é estritamente convexa,

$$f(\lambda 0 + (1-\lambda)\bar{x}) < \lambda f(0) + (1-\lambda) f(\bar{x}),$$

para qualquer $\lambda \in]0,1[$. Mas

$$\begin{aligned} f(\lambda 0 + (1-\lambda)\bar{x}) &= b + c^\top \left(\lambda 0 + (1-\lambda)\bar{x}\right) + \frac{1}{2}\left(\lambda 0 + (1-\lambda)\bar{x}\right)^\top H \left(\lambda 0 + (1-\lambda)\bar{x}\right) = \\ &= b + (1-\lambda) c^\top \bar{x} + \frac{1}{2}(1-\lambda)^2 \bar{x}^\top H\, \bar{x} = b + (1-\lambda) c^\top \bar{x} \end{aligned}$$

e

$$f(0) = b, \quad f(\bar{x}) = b + c^\top \bar{x} + \frac{1}{2}\bar{x}^\top H\, \bar{x} = b + c^\top \bar{x}.$$

Donde

$$f(\lambda 0 + (1-\lambda)\bar{x}) = b + (1-\lambda) c^\top \bar{x} = \lambda b + (1-\lambda)\left(b + c^\top \bar{x}\right) = \lambda f(0) + (1-\lambda) f(\bar{x})$$

para qualquer $\lambda \in]0,1[$, o que é impossível. Portanto, H é SPD. □

A título de exemplo, consideremos a função

$$f(x_1, x_2, x_3) = 2 + x_1 - x_3 + \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 + 4x_3^2 + x_1 x_2 - x_1 x_3.$$

É fácil de ver que

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 8 \end{bmatrix} = L\,DL^\top$$

com

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}.$$

Como $d_{ii} > 0, \forall i \in \{1,2,3\}$, então H é SPD e f é estritamente convexa em $\mathbb{R}^n$. Por outro lado, a função

$$g(x_1, x_2) = x_1 x_2$$

não é convexa nem côncava em $\mathbb{R}^2$ (ver figura 1.9), uma vez que

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ é SIND.}$$

Ainda, como aplicação deste teorema, verifica-se o seguinte resultado.

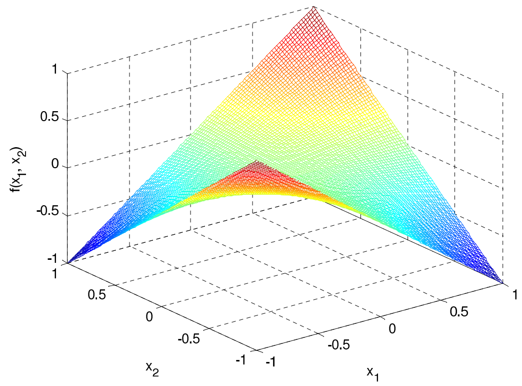


Figura 1.9: Gráfico da função $f(x) = x_1 x_2$, ilustrando uma função quadrática que não é convexa nem côncava.

Teorema 1.21 *Se M é uma matriz SPD, então a norma*

$$f : x \longrightarrow ||x||_M^2 = x^\mathsf{T} M\, x$$

é uma função estritamente convexa em $\mathbb{R}^n$.

Em particular, a função $f : x \longrightarrow ||x||_2^2$ é estritamente convexa em $\mathbb{R}^n$, pois obtém-se da norma anterior quando M é a matriz identidade.

Capítulo 2

Condições de optimalidade para programação não linear

2.1 Definições e primeiras propriedades

Uma função de n variáveis diz-se *Limitada Superiormente* num conjunto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ se existe $b \in \mathbb{R}$ tal que $f(x) \leq b$, para todo o $x \in D$. Se existe $a \in \mathbb{R}$ tal que $f(x) \geq a$, para todo o $x \in D$, então f diz-se *Limitada Inferiormente*. Finalmente, f diz-se *Limitada* se é limitada superiormente e inferiormente, isto é, se existem $a, b \in \mathbb{R}$ tais que $a \leq f(x) \leq b$ para qualquer $x \in D$.

O número real S diz-se *Supremo da função* f num conjunto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ e escreve-se

$$S = \sup_{x \in D} f(x)$$

se S é o menor dos números reais b tais que $f(x) \leq b$. Então, S é supremo de f em D se

1. $f(x) \leq S$, para todo $x \in D$;

2. Para qualquer $\theta > 0$, existe $y \in D$ tal que $f(y) > S - \theta$.

De igual modo, o número real I diz-se *Infimo da função* f no conjunto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ e escreve-se

$$I = \inf_{x \in D} f(x)$$

se satizfaz as seguintes condições:

1. $f(x) \geq I$, para todo $x \in D$;

2. Para qualquer $\theta > 0$, existe $y \in D$ tal que $f(y) < I + \theta$.

O supremo (ínfimo) diz-se *Máximo* (*Mínimo*) de f em D se existe um $\bar{x} \in D$ tal que $f(\bar{x}) = S \quad (f(\bar{x}) = I)$. Com um certo abuso de linguagem, diz-se que $\bar{x}$ é máximo (mínimo) de f em D. Portanto, tem-se

1. $\bar{x}$ é um máximo de f em $D \Leftrightarrow \bar{x} \in D$ e $f(x) \leq f(\bar{x}), \forall x \in D$;

2. $\bar{x}$ é um mínimo de f em $D \Leftrightarrow \bar{x} \in D$ e $f(x) \geq f(\bar{x}), \forall x \in D$.

Também se diz que $\bar{x}$ é máximo (mínimo) global para o distinguir de máximo (mínimo) local, conceitos a introduzir na secção seguinte.

As definições apresentadas indicam que só as funções limitadas inferiormente (superiormente) num conjunto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ podem ter mínimo (máximo). Contudo, f pode ser limitada inferiormente (superiormente) e não ter mínimo (máximo). Assim, por exemplo, a função exponencial de uma variável real é limitada inferiormente por zero e não tem mínimo em $\mathbb{R}$. O próximo teorema garante a existência de mínimo e máximo para certas categorias de conjuntos e funções.

Teorema 2.1 (Weierstrass) *Se f é uma função contínua num conjunto compacto $D \subseteq \mathbb{R}^n$, então f é limitada em D e tem mínimo e máximo nesse conjunto.*

Demonstração:

- Para provar que f é limitada em D é necessário provar que f é limitada superiormente e inferiormente nesse conjunto. Como as demonstrações são semelhantes, iremos apenas provar a primeira parte e fá-lo-emos por redução ao absurdo. Suponhamos que f não é limitada superiormente em D. Então, para qualquer $M \in \mathbb{R}$ existe $x \in D$ tal que $f(x) > M$. Seja $(M_n)_{n\in\mathbb{N}}$ uma sucessão de números reais divergente para $+\infty$. Então, existe uma sucessão $(x^n)_{n\in\mathbb{N}}$ de elementos de D tal que
$$f(x^n) > M_n.$$
Mas, $\lim_n M_n = +\infty$ e portanto $\lim_n f(x^n) = +\infty$.
Como D é compacto, a sucessão $(x^n)_{n\in\mathbb{N}}$ é limitada e, pelos teoremas 1.1 e 1.2, tem uma subsucessão $(x^{\phi_n})_{n\in\mathbb{N}}$ convergente para um dado $\tilde{x} \in D$. Como f é contínua, então
$$\lim_n f(x^{\phi_n}) = f(\tilde{x}).$$
Mas $(f(x^{\phi_n}))_{n\in\mathbb{N}}$ é uma subsucessão de uma sucessão divergente para $+\infty$ e, portanto, não pode ser convergente. Este resultado demonstra que f é limitada em D.

- Como f é limitada superiormente e inferiormente, então existem e são números reais
$$S = \sup\{f(x) : x \in D\}, \quad I = \inf\{f(x) : x \in D\}.$$
Para demonstrar o teorema, basta provar que existem $\bar{x}$ e x^* tais que
$$f(\bar{x}) = S \text{ e } f(x^*) = I.$$
Iremos apenas demonstrar a primeira parte, já que a segunda é semelhante. Suponhamos que não existe $x \in D$ tal que $f(x) = S$. Então, por definição de supremo tem-se

  1. $f(x) < S, \forall x \in D$
  2. $\forall \theta > 0, \exists y \in D : f(y) > S - \theta$.

  Consideremos agora a função
$$\begin{array}{rccc} g: & D & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & x & \mapsto & \frac{1}{S-f(x)} \end{array}.$$
A função g é contínua em D, por ser o quociente de duas funções contínuas e $f(x) < S$. Além disso, de $f(y) > S - \theta$, vem
$$g(y) = \frac{1}{S - f(y)} > \frac{1}{\theta}.$$
Portanto, g não é limitada superiormente, o que é impossível. Então S é atingido, isto é, existe $\bar{x} \in D$ tal que $f(\bar{x}) = S$. Esse ponto $\bar{x}$ é o máximo procurado. □

Um *Problema de Optimização* pode ser escrito na forma

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize} & f(x) \\ \text{sujeito a:} & x \in D \end{array} \tag{2.1}$$

com D um subconjunto de $\mathbb{R}^n$ e $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$. Como iremos ver no decorrer deste curso, o conjunto D não é em geral compacto. Nesses casos é difícil garantir a existência de mínimo global para esse programa. A coercividade de uma função é importante nesse sentido. Diz-se que uma função $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ é *coerciva* se

$$\lim_{||x|| \to +\infty} f(x) = +\infty$$

isto é, se para qualquer $\theta > 0$ existe $\delta > 0$ tal que

$$||x|| > \delta \Rightarrow f(x) > \theta.$$

Então verifica-se o seguinte teorema:

Teorema 2.2 *Se a função f é contínua e coerciva, então tem um mínimo global em $\mathbb{R}^n$.*

Demonstração: Seja $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Como f é coerciva, existe $r > 0$ tal que $f(x) > f(\bar{x})$ para todo o x tal que $||x|| > r$. Por outro lado, o conjunto

$$A = \{x \in \mathbb{R}^n : ||x|| \leq r\}$$

é compacto e portanto, pelo teorema anterior, existe $\tilde{x} \in A$ tal que $f(\tilde{x}) \leq f(x)$ para todo o $x \in A$. Seja $y \in \mathbb{R}^n$, o vector definido por

$$y = \begin{cases} \tilde{x}, & \text{se } f(\tilde{x}) \leq f(\bar{x}) \\ \bar{x}, & \text{se } f(\tilde{x}) > f(\bar{x}) \end{cases}$$

Então, é evidente que y é mínimo global de f em $\mathbb{R}^n$ e isso demonstra o teorema. □

Infelizmente, a maioria das funções não são coercivas, pelo que o teorema anterior tem pouca aplicação prática. É também fácil obter uma condição suficiente semelhante para a existência de um máximo global de uma função. O próximo resultado apresenta uma condição suficiente para a unicidade do mínimo ou máximo global de uma função.

Teorema 2.3 *Se f é uma função estritamente convexa (côncava) num conjunto convexo $D \subseteq \mathbb{R}^n$ e se o programa (2.1) tem um mínimo (máximo) em D, então esse mínimo (máximo) é único.*

Demonstração: Se x^1 e x^2 são dois mínimos de f em D, então

$$f(x^1) = f(x^2) \leq f(x), \text{ para todo o } x \in D.$$

Como f é estritamente convexa em D, então para qualquer $0 < \lambda < 1$ tem-se

$$f(\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1 - \lambda)f(x^2) = f(x^1) = f(x^2).$$

Portanto, x^1 e x^2 não podem ser mínimos e isso demonstra o teorema. A demonstração para o caso do máximo de uma função estritamente côncava é semelhante. □

É importante notar que este teorema não garante a existência de mínimo global para uma função estritamente convexa. Assim, por exemplo, a função exponencial de uma variável real é estritamente convexa em $\mathbb{R}$ mas não tem mínimo global nesse conjunto. Como exemplo de ilustração destes teoremas, consideremos o programa

$$\min_{x \in \mathbb{R}} x^2.$$

Como $f : x \longrightarrow x^2$ é contínua, coerciva e estritamente convexa em $\mathbb{R}$ e $x^2 \geq 0$, para todo $x \in \mathbb{R}$, então $x = 0$ é o único mínimo global do programa dado.

Para terminar esta secção, seja $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e fechado, $y \in \mathbb{R}^n$ um vector não pertencente a D e consideremos o programa

$$\min_{x \in D} ||x - y||_M^2 = (x - y)^\mathsf{T} M (x - y) \tag{2.2}$$

com M uma matriz SPD (figura 2.1). Então verifica-se o seguinte resultado.

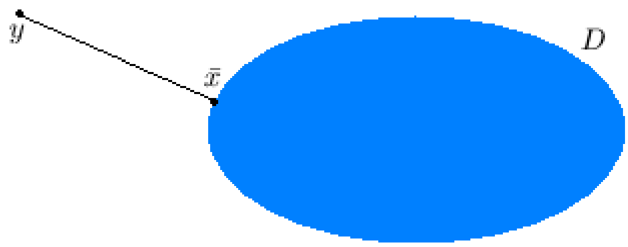


Figura 2.1: Solução (gráfica) do programa (2.2).

Teorema 2.4 (Teorema da projecção) *Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo e fechado, então o programa (2.2) tem um único mínimo global.*

Demonstração: Se $z \in D$, então o programa (2.2) pode ser escrito de forma equivalente

$$\min_{x \in \bar{D}} f(x) = ||x - y||_M^2$$

onde $\bar{D} = \{x \in D : ||x - y||_M \leq ||z - y||_M\}$. Como $\bar{D}$ é um conjunto compacto e convexo e, pelo teorema 1.21, a função f é estritamente convexa em $\bar{D}$, então existe um único mínimo global $\bar{x}$ desse programa, que também é mínimo global de (2.2). □

A solução óptima única $\bar{x}$ do programa (2.2) diz-se a *Projecção de y sobre o conjunto convexo D* e representa-se normalmente por $[y]^+_{M,D}$ ou simplesmente por $[y]^+$, quando não houver necessidade de mencionar o conjunto D e a norma euclideana for a usada.

2.2 Máximos e mínimos locais

Considere o programa

$$\min_{x\in D} f(x) \tag{2.3}$$

com $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ e $D \subseteq \mathbb{R}^n$. Diz-se que $\bar{x}$ é *Mínimo Local de f em D* se existe $\theta > 0$ tal que

$$f(\bar{x}) \leq f(x), \forall x \in D \cap B(\bar{x}, \theta).$$

A definição de *Máximo local* obtém-se da anterior substituindo $\leq$ por $\geq$.

Uma função f pode ter zero, um ou vários mínimos (máximos) locais. Além disso, podem existir mínimos (máximos) locais para o programa (2.3) e não haver mínimo (máximo) global. Assim, por exemplo, a função

$$\begin{array}{rccc} f: & \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & x & \mapsto & x^3 - 3x \end{array}$$

tem um mínimo local em $x = 1$, um máximo local em $x = -1$, mas não tem mínimo nem máximo globais (ver figura 2.2). No entanto, se f tem mínimo (máximo) global em D, então esse ponto é o mínimo (máximo) local com menor (maior) valor da função. Se a função é convexa (côncava), basta determinar um mínimo (máximo) local para obter o mínimo (máximo) global. Com efeito, verifica-se o seguinte resultado.

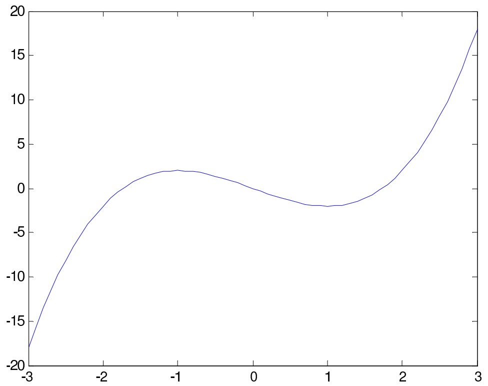


Figura 2.2: Função com mínimo e máximo locais, mas sem mínimo ou máximo globais.

Teorema 2.5 *Se $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo e $f : D \longrightarrow \mathbb{R}$ é uma função convexa (côncava) em D, então todo o mínimo (máximo) local é global.*

Demonstração: Iremos apenas provar o teorema para o caso de uma função convexa e usaremos o método de redução ao absurdo. Suponhamos que $\bar{x}$ é um mínimo local de f que não é global. Então existe $\varepsilon > 0$ tal que

$$f(\bar{x}) \leq f(x), \forall x \in B(\bar{x}, \varepsilon) \cap D.$$

Além disso, como $\bar{x}$ não é mínimo global, $f(x^*) < f(\bar{x})$ para certo $x^* \in D$. Como D é convexo, então $[\bar{x}, x^*] \subset D$. Se

$$\hat{x} \in B(\bar{x}, \varepsilon) \cap [\bar{x}, x^*]$$

então existe $\lambda \in]0,1[$ tal que

$$\hat{x} = \lambda\bar{x} + (1-\lambda)x^* \text{ e } f(\hat{x}) \leq \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda)f(x^*) < \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda)f(\bar{x}) = f(\bar{x})$$

o que impossível por $\hat{x} \in B(\bar{x}, \varepsilon)$ (ver figura 2.3). □

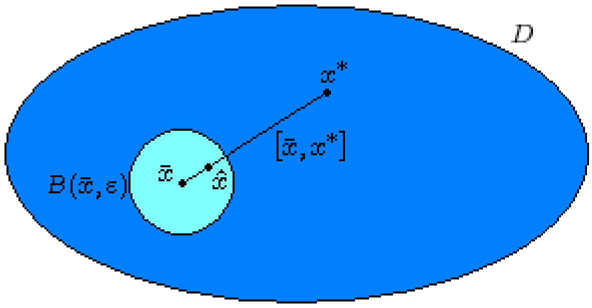


Figura 2.3: Exemplificação do teorema 2.5.

Na prática, é muito difícil verificar se $\bar{x}$ é um mínimo local ou não a partir da sua definição. Daí ser necessário estabelecer condições necessárias e suficientes de optimalidade. Consideremos novamente o problema

$$\min_{x \in D} f(x)$$

com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ e seja $\bar{x} \in D$. Diz-se que $p \in \mathbb{R}^n$ é uma *Direcção Admissível em* $\bar{x}$ se existe $\bar{\lambda} > 0$ tal que $\bar{x} + \lambda p \in D$ para todo $0 < \lambda \leq \bar{\lambda}$. A figura 2.4 ilustra esta definição. É evidente que p é uma direcção admissível se e só se para qualquer $\mu > 0$, μp também o é. Além disso, se D é um conjunto convexo, então para qualquer $x \in D$ e $\mu > 0$ a direcção $p = \mu(x - \bar{x})$ é admissível em $\bar{x}$. No entanto, essa igualdade não é verdadeira para um conjunto não convexo (ver figura 2.4).

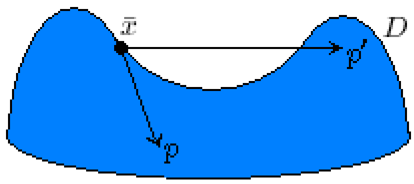


Figura 2.4: Exemplo de uma direcção admissível (p) e de uma direcção não admissível (p') em $\bar{x}$.

Seja $f \in C^1(S)$, com $S \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo D. Diz-se que $\bar{x} \in D$ é um *Ponto Estacionário de f em D* se

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p \geq 0, \text{ para toda a direcção admissível } p.$$

Portanto, se D é convexo, $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em D se

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(x - \bar{x}) \geq 0, \forall x \in D.$$

O próximo teorema mostra a importância do conceito de ponto estacionário na determinação de um mínimo de uma função.

Teorema 2.6 *Se $f \in C^1(S)$, com $S \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo D, então todo o mínimo local de f em D é um ponto estacionário de f nesse conjunto.*

Demonstração: Suponhamos que $\bar{x}$ não é ponto estacionário de f em D. Então, existe pelo menos uma direcção admissível p (isto é, $\bar{x} + \lambda p \in D, \forall \lambda \in (0, \bar{\lambda}]$) satisfazendo

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p < 0.$$

Como $f \in C^1(S), \exists \bar{\bar{\lambda}} > 0$ tal que $\nabla f(\bar{x} + \lambda p)^{\mathsf{T}} p < 0$, para todo $0 < \lambda \leq \bar{\bar{\lambda}} \leq \bar{\lambda}$. Mas, pelo teorema 1.6, para qualquer $0 < \lambda \leq \bar{\bar{\lambda}}$, existe $\tilde{\lambda} \in (0, \lambda)$ tal que

$$f(\bar{x} + \lambda p) = f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\bar{x} + \tilde{\lambda} p)^{\mathsf{T}} p.$$

Portanto, $\nabla f(\bar{x} + \tilde{\lambda} p)^{\mathsf{T}} p < 0$ e $f(\bar{x} + \lambda p) < f(\bar{x})$ para todo $0 < \lambda \leq \bar{\bar{\lambda}}$. Então, $\bar{x}$ não é mínimo local de f em D. $\square$

Como exemplo de ilustração deste teorema, consideremos o programa

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize} & f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{sujeito a} & x_1 + x_2 \geq 1 \\ & x_1 \leq 1,\ x_2 \leq 1 \end{array} \tag{2.4}$$

Como o programa só tem duas variáveis, pode ser resolvido geometricamente, bastando para isso encontrar o menor valor k para o qual a curva de nível $x_1^2 + x_2^2 = k$ intersecta o conjunto D definido pelas restrições. Tal como é representado na figura 2.5, $\bar{x} = (1/2, 1/2)$ é esse mínimo global (e local). O gradiente f em $\bar{x}$ é $\nabla f(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix}_{x=\bar{x}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$.

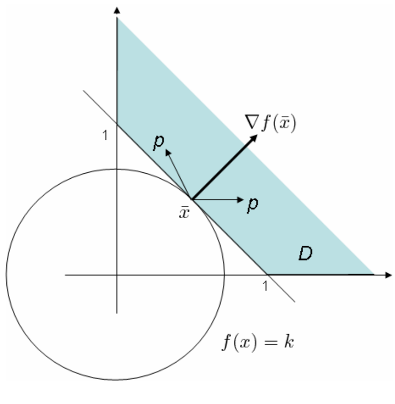


Figura 2.5: Exemplo de ponto estacionário que é um mínimo global (e local).

É fácil de ver que qualquer direcção admissível p faz um ângulo agudo α com $\nabla f(\bar{x})$ (figura 2.5) e

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p = \cos(\alpha)\, ||\nabla f(\bar{x})||_2\, ||p||_2 \geq 0.$$

Nestas condições, $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em D.

É de notar que o inverso deste teorema não é, em geral, verdadeiro. Assim, por exemplo, consideremos o programa:

$$\min_{x \in \mathbb{R}} x^3$$

Então $f'(x) = 3x^2$, $f'(0) = 0$ e $0.p \geq 0$, para todo o $p \in \mathbb{R}$. Portanto, f tem um ponto estacionário em $\bar{x} = 0$. No entanto, esse número real não é mínimo local, pois a função é estritamente crescente em $\mathbb{R}$. O próximo teorema mostra que essa implicação inversa é verdadeira para funções convexas.

Teorema 2.7 *Se $S \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto contendo o conjunto convexo D e $f \in C^1(S)$ é convexa em D, então $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em D se e só se $\bar{x}$ é mínimo global de f em D.*

Demonstração: Devido ao teorema 2.6, basta provar que se $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em D, então é mínimo global de f em D. Mas se f é convexa, então pelo teorema 1.13,

$$f(x) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}), \quad \forall x \in D.$$

Além disso, $\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}) \geq 0$, por $\bar{x}$ ser um ponto estacionário. Donde $f(x) \geq f(\bar{x})$ para todo o $x \in D$ e $\bar{x}$ é mínimo global de f em D. □

Consideremos novamente o programa (2.4). Como $\bar{x} = (1/2, 1/2)$ é um ponto estacionário de f em D e f é convexa em $\mathbb{R}^n$, então $\bar{x}$ é mínimo global de f em D. Além disso, $\bar{x}$ é o único mínimo global, por f ser estritamente convexa em $\mathbb{R}^n$.

2.3 Condições de optimalidade para conjuntos abertos e convexos

Para alguns subconjuntos de $\mathbb{R}^n$ é possível caracterizar pontos estacionários a partir de critérios práticos. Assim, verifica-se o seguinte resultado.

Teorema 2.8 (Condição necessária de optimalidade de primeira ordem)
Se $f \in C^1(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo, então $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em D se e só se $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

Demonstração: Se $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em D, então $\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p \geq 0$ para toda a direcção admissível p. Seja e^i o i-ésimo vector da base canónica de $\mathbb{R}^n$, isto é,

$$e^i_j = \begin{cases} 1, & \text{se } j = i \\ 0, & \text{se } j \neq i \end{cases}$$

Como D é aberto e convexo, então e^i e $(-e^i)$ são direcções admissíveis para todo o $i = 1, \ldots, n$. Então

$$\begin{aligned} \nabla_i f(\bar{x}) &= \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} e^i \geq 0 \\ -\nabla_i f(\bar{x}) &= \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} (-e^i) \geq 0. \end{aligned}$$

Donde $\nabla_i f(\bar{x}) = 0$ para todo o $i \in \{1, \ldots, n\}$ e $\nabla f(\bar{x}) = 0$. Inversamente, se $\nabla f(\bar{x}) = 0$, então é evidente que $\nabla f(\bar{x})\, p \geq 0$ para toda a direcção admissível p e $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em D. □

Como consequência deste teorema e dos teoremas 2.6 e 2.7 podemos enunciar o seguinte resultado.

Teorema 2.9 *Seja $f \in C^1(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo.*

1. *Se $\bar{x}$ é mínimo local de f em D, então $\nabla f(\bar{x}) = 0$.*
2. *Se f é convexa em D, então $\bar{x}$ é mínimo global de f em D se e só se $\nabla f(\bar{x}) = 0$.*

Este teorema indica que a determinação de um mínimo global de uma função convexa num conjunto convexo e aberto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ se resume à resolução de um sistema de n equações a n incognitas. Contudo, em geral, a resolução desse sistema pode não fornecer um mínimo local para a função f. Assim, por exemplo, a função $f : x \longrightarrow x^3$ tem gradiente nulo em $x = 0$, mas esse número não é mínimo local de f em $\mathbb{R}$.

A caracterização de mínimos locais de funções necessita de outras condições que envolvam derivadas parciais de segunda ordem. Assim, verifica-se o seguinte teorema.

Teorema 2.10 (Condição necessária de optimalidade de segunda ordem)
Seja $f \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo. Se $\bar{x}$ é um mínimo local de f em D, então

$$\nabla f(\bar{x}) = 0 \quad e \quad \nabla^2 f(\bar{x}) \text{ é SPSD.}$$

Demonstração: Devido ao teorema anterior, basta provar que se $\bar{x}$ é mínimo local de f em D, então $\nabla^2 f(\bar{x})$ é SPSD. Suponhamos que tal não acontece. Então, existe $p \in \mathbb{R}^n$ tal que $x + p \in D$ e $p^\mathsf{T} \nabla^2 f(\bar{x})\, p < 0$. Como $f \in C^2(D)$ e D é convexo, existe $\bar{\lambda} \in]0, 1[$ tal que

$$p^\mathsf{T} \nabla^2 f(\bar{x} + \lambda p)\, p < 0$$

para todo o $0 < \lambda \leq \bar{\lambda}$. Mas, pelo teorema 1.7, tem-se

$$f(\bar{x} + \lambda p) = f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\bar{x})^\mathsf{T} p + \frac{\lambda^2}{2} p^\mathsf{T} \nabla^2 f(\bar{x} + \bar{\bar{\lambda}} p)\, p$$

com $0 < \bar{\bar{\lambda}} \leq \lambda$. Como $\nabla f(\bar{x}) = 0$ e $p^\mathsf{T} \nabla^2 f(\bar{x} + \bar{\bar{\lambda}} p)\, p < 0$, então $f(\bar{x} + \lambda p) < f(\bar{x})$, o que contradiz o facto de $\bar{x}$ ser mínimo local de f em D. $\square$

Apesar de muito útil para indicar pontos estacionários que não são mínimos locais, esta condição não pode ser utilizada afirmativamente por ser apenas uma condição necessária de optimalidade. Com efeito, se considerarmos novamente a função $f : x \longrightarrow x^3$, então $x = 0$ satisfaz as duas condições do teorema anterior mas não é mínimo local de f em $\mathbb{R}$. O próximo teorema mostra que se pode obter uma condição suficiente de optimalidade substituindo SPSD por SPD no teorema anterior.

Teorema 2.11 (Condição suficiente de optimalidade de segunda ordem)
Seja $f \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo. Se

$$\nabla f(\bar{x}) = 0 \quad e \quad \nabla^2 f(\bar{x}) \text{ é SPD,}$$

então $\bar{x}$ é um mínimo local de f em D.

Demonstração: Se $\nabla^2 f(\bar{x})$ é SPD, então $p^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x})\, p > 0$ para todo o $p \neq 0$. Como D é aberto e convexo e $f \in C^2(D)$, existe $\bar{\lambda} > 0$ tal que

$$\nabla^2 f(\bar{x} + \lambda p)\, p > 0$$

para todo $0 < \lambda \leq \bar{\lambda}$. Mas, pelo teorema 1.7, tem-se

$$f(\bar{x} + \lambda p) = f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p + \frac{\lambda^2}{2} p^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x} + \bar{\bar{\lambda}} p)\, p$$

com $0 < \bar{\bar{\lambda}} \leq \lambda$. Como $\nabla f(\bar{x}) = 0$ e $p^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x} + \bar{\bar{\lambda}} p)\, p > 0$, então

$$f(\bar{x} + \lambda p) > f(\bar{x})$$

para todo $0 < \lambda \leq \bar{\lambda}$ e para todo o $p \in \mathrm{IR}^n$. Assim, f tem um mínimo local em $\bar{x}$. □

Tendo em conta estes teoremas e que $\bar{x}$ é mínimo local de f em D se e só se é máximo local de $-f$ nesse conjunto, então podemos considerar os seguintes casos respeitantes à existência de mínimos e máximos locais de uma função duas vezes continuamente diferenciável num conjunto aberto e convexo $D \subseteq \mathrm{IR}^n$.

1. Se $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$ ou $\bar{x} \notin D$, $\bar{x}$ não é mínimo nem máximo local de f em D.
2. Se $\nabla f(\bar{x}) = 0$, $\bar{x} \in D$ e $\nabla^2 f(\bar{x})$ não é SPSD (SNSD), então $\bar{x}$ não é mínimo (máximo) local de f em D.
3. Se $\nabla f(\bar{x}) = 0$, $\bar{x} \in D$ e $\nabla^2 f(\bar{x})$ é SPD (SND), então $\bar{x}$ é mínimo (máximo) local de f em D.
4. Se $\nabla f(\bar{x}) = 0$, $\bar{x} \in D$ e $\nabla^2 f(\bar{x}) \neq 0$ é SPSD (SNSD) singular, então $\bar{x}$ não é máximo (mínimo) local, podendo ser mínimo (máximo) local ou não.

A tabela 2.1 resume as observações acabadas de realizar.

$\nabla f(\bar{x}) = 0$ e $\bar{x} \in D$?	$\nabla^2 f(\bar{x})$ singular?	$\nabla^2 f(\bar{x})$ é:	mínimo	máximo	ponto sela
Não	Qualquer	Qualquer	—	—	—
Sim	Sim mas $\neq 0$	SPSD	?	—	?
		SNSD	—	?	?
		SIND	—	—	X
Sim	Não	SPD	X	—	—
		SND	—	X	—
		SIND	—	—	X

Tabela 2.1: Existência de mínimos/máximos locais de uma função $f \in C^2(D)$ em D, com $D \subseteq \mathrm{IR}^n$ um conjunto aberto e convexo.

A título de exemplo, consideremos a função

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

cujo gráfico se apresenta na figura 2.6. Então,

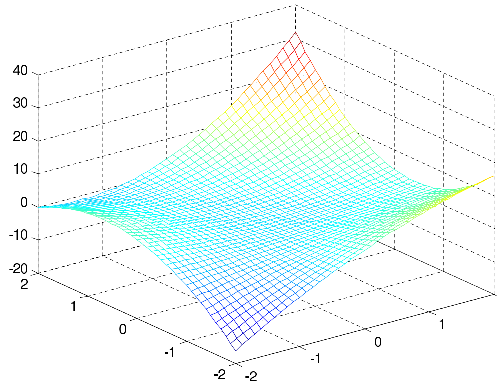


Figura 2.6: Gráfico da função $f(x_1,x_2) = 2x_1x_2^2 + x_2x_1^2 + x_1^2 + x_2^2$ para visualização dos pontos extremos.

$$\nabla f(x_1,x_2) = 0 \Longleftrightarrow \left\{ \begin{array}{lll} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1,x_2) = & 2x_2^2 + 2x_1x_2 + 2x_1 & = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1,x_2) = & 4x_1x_2 + x_1^2 + 2x_2 & = 0 \end{array} \right. \Longleftrightarrow \left\{ \begin{array}{ll} 2x_2^2 + 2x_1x_2 + 2x_1 & = 0 \\ 4x_1x_2 + x_1^2 + 2x_2 & = 0 \end{array} \right.$$

É fácil de ver que $\bar{x} = (0,0)$ é uma solução desse sistema e, portanto, pode ser mínimo ou máximo local de f em $\mathbb{R}^2$. Para verificar se tal acontece, precisamos de calcular a hessiana nesse ponto. Assim,

$$\nabla^2 f(x_1,x_2) = \left[\begin{array}{cc} 2x_2 + 2 & 4x_2 + 2x_1 \\ 4x_2 + 2x_1 & 4x_1 + 2 \end{array} \right].$$

Portanto,

$$\nabla^2 f(0,0) = \left[\begin{array}{cc} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{array} \right] \text{ é SPD}$$

e $\bar{x} = (0,0)$ é mínimo local de f em $\mathbb{R}^2$. Note-se que o gráfico da função f apresentado na figura 2.6 conduzia-nos a uma conclusão errada, pelo que devemos utilizar o gráfico de uma função apenas como um meio auxiliar. Na verdade, ampliando o gráfico em torno da origem podemos confirmar o resultado analítico acabado de obter (figura 2.7(a)).

Os restantes pontos extremos não são tão faceis de obter. Contudo, traçando as curvas do sistema $\nabla f(x,y) = 0$ (figura 2.7(b)) podemos localizar esses pontos e determiná-los utilizando a função "`fsolve`" do matLab obtendo as seguintes aproximações para os pontos estacionários:

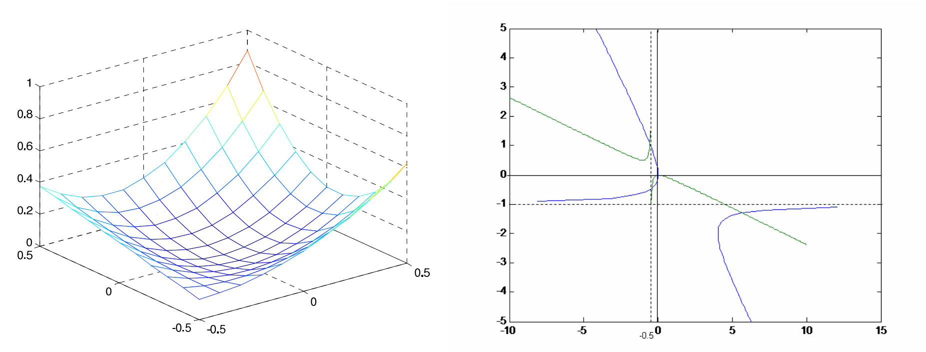
$$\bar{\bar{x}} = (-0.4101, -0.4673); \quad \hat{x} = (-0.5753, 1.0988); \quad \tilde{x} = (5.6520, -1.2982)$$

Calculando a Hessiana nesses pontos, obtemos

$$\nabla^2 f(\bar{\bar{x}}) = \left[\begin{array}{cc} -0.9347 & -2.6895 \\ -2.6895 & 0.3598 \end{array} \right]; \quad \nabla^2 f(\hat{x}) = \left[\begin{array}{cc} 2.1977 & 3.2448 \\ 3.2448 & -0.3012 \end{array} \right];$$

$$\nabla^2 f(\tilde{x}) = \left[\begin{array}{cc} -2.5963 & 6.1114 \\ 6.1114 & 24.6081 \end{array} \right].$$

Como as Hessianas nesses pontos são SIND, os pontos estacionários $\bar{\bar{x}}$, $\hat{x}$ e $\tilde{x}$ não são mínimos nem máximos locais.



(a) (b)

Figura 2.7: (a) Gráfico da função $f(x_1, x_2) = 2x_1x_2^2 + x_2x_1^2 + x_1^2 + x_2^2$ em torno da origem. (b) Curvas que definem o sistema $\nabla f(x_1, x_2) = 0$.

A discusão anteriormente apresentada sugere que a determinação de um mínimo ou máximo local se resume à resolução do sistema $\nabla f(x) = 0$ e à verificação se a Hessiana nas soluções desse sistema é SPD, SPSD, SND, SNSD. Como iremos ver mais adiante, não é exactamente assim que se determina o mínimo ou máximo local de uma função, mas a condição $\nabla f(x) = 0$ é importantíssima para esse cálculo.

Consideremos agora uma função quadrática

$$f(x) = b + c^{\mathsf{T}}x + \frac{1}{2}x^{\mathsf{T}}H\,x.$$

Como vimos anteriormente,

$$\nabla f(x) = c + Hx$$

e $\nabla f(x) = 0$ reduz-se ao sistema de equações lineares

$$Hx = -c$$

para o qual existem algoritmos muito eficientes. A resolução do sistema e o facto da hessiana de uma função quadrática ser constante implicam os seguintes casos possíveis para a existência de mínimos e máximos num conjunto aberto e convexo $D \subseteq \mathbb{R}^n$.

1. Se $Hx = -c$ não tem solução $\bar{x} \in D$, a função quadrática não tem mínimos nem máximos locais em D.

2. Se $Hx = -c$ tem solução $\bar{x} \in D$ e H é SPSD (SNSD), então $\bar{x}$ é mínimo (máximo) global de f em D.

3. Se $Hx = -c$ tem solução $\bar{x} \in D$ e H é SIND, então $\bar{x}$ não é mínimo nem máximo local de f em D.

Consideremos ainda o caso especial da função quadrática ser estritamente convexa. Então H é SPD e portanto não singular, pelo que o sistema $Hx = -c$ tem solução única. Deste modo, podem acontecer dois casos para a minimização de uma função quadrática estritamente convexa num conjunto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ aberto e convexo:

1. Se a única solução $\bar{x}$ de $Hx = -c$ pertence a D, então $\bar{x}$ é o único mínimo global de f em D.

2. Se $\bar{x} \notin D$, então a função quadrática não tem mínimo local (nem global) em D.

Se a função é estritamente côncava, então H é SND e obtemos resultados semelhantes substituindo o termo "mínimo" por "máximo".

A título de exemplo, consideremos a função quadrática

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_1 - x_2 + 2x_3.$$

Então, f é estritamente convexa e quadrática em $\mathbb{R}^3$. Além disso, $H = 2I$, $c = [1 \;\; -1 \;\; 2]^\top$ e

$$Hx = -c \Longleftrightarrow \begin{cases} 2x_1 = 1 \\ 2x_2 = -1 \\ 2x_3 = 2 \end{cases}.$$

Deste modo, $\bar{x} = (1/2, -1/2, 1)$ é o único mínimo global de f em $\mathbb{R}^3$. Contudo, a função dada não tem mínimo global (nem local) no conjunto aberto definido pela restrição

$$x_1 + x_2 + x_3 > 3,$$

uma vez que $\bar{x}$ não pertence a esse conjunto. O próximo teorema mostra que esta última situação não pode ocorrer em conjuntos convexos e fechados.

Teorema 2.12 *Toda a função quadrática estritamente convexa em $\mathbb{R}^n$ admite um mínimo global único num conjunto convexo e fechado $D \subseteq \mathbb{R}^n$.*

Demonstração: Seja $f(x) = b + c^\top x + \frac{1}{2}x^\top H\, x$ uma função quadrática estritamente convexa. Então esta função tem um mínimo global $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz $H\bar{x} = -c$. Se $\bar{x} \in D$, então o teorema está demonstrado. De outro modo, pelo teorema 2.4, existe uma solução óptima única $y \in D$ para o programa

$$\min_{x \in D} \{\frac{1}{2}||x - \bar{x}||_H^2\}.$$

Portanto, para qualquer $x \in D$,

$$\frac{1}{2}||y - \bar{x}||_H^2 \leq \frac{1}{2}||x - \bar{x}||_H^2$$

ou seja

$$\frac{1}{2}(y - \bar{x})^\top H\, (y - \bar{x}) \leq \frac{1}{2}(x - \bar{x})^\top H\, (x - \bar{x})$$

para todo o $x \in D$. Mas,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(y - \bar{x})^\top H\, (y - \bar{x}) &= \frac{1}{2}[y^\top H\, y + \bar{x}^\top H\, \bar{x} - 2y^\top H\, \bar{x}] \\ &= \frac{1}{2}\bar{x}^\top H\, \bar{x} + (c^\top y + \frac{1}{2}y^\top H\, y) \\ &= \frac{1}{2}\bar{x}^\top H\, \bar{x} - b + f(y). \end{aligned}$$

Donde

$$f(y) \leq b + c^\top x + \frac{1}{2}x^\top H\, x$$

e y é a solução óptima de f em D. □

Assim, por exemplo, consideremos o programa

$$\begin{array}{rl} Minimize & x_1^2 + 2x_2^2 + \ldots + nx_n^2 \\ s.a. & x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2 \leq 1 \end{array} \tag{2.5}$$

Como a função é quadrática, estritamente convexa e não negativa, o conjunto

$$D = \{x \in \mathbb{R}^n : x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2 \leq 1\}$$

é convexo e fechado e $0 \in D$, então $\bar{x} = 0$ é o único mínimo global desse programa.

Tendo em conta a relação entre funções convexas e côncavas e os problemas de maximização e minimização, então verifica-se o seguinte resultado.

Teorema 2.13 *Toda a função quadrática estritamente côncava em $\mathbb{R}^n$ admite um máximo global único num conjunto convexo e fechado $D \subseteq \mathbb{R}^n$.*

2.4 Condições de optimalidade para programação não linear com restrições lineares

2.4.1 Condições de complementaridade para ponto estacionário

Consideremos o programa não linear

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x) \\ s.a. & x \in X \end{array} \tag{2.6}$$

onde $X \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo constituído por restrições lineares (igualdade e desigualdade) e f é uma função continuamente diferenciável num subconjunto aberto e convexo $D \subseteq \mathbb{R}^n$ que contém X. Se $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X então, como vimos anteriormente,

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(x - \bar{x}) \geq 0, \forall x \in X.$$

Deste modo, $\bar{x}$ é solução óptima do programa linear

$$\begin{array}{rl} Minimize & \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} x \\ s.a. & x \in X \end{array} \tag{2.7}$$

Para estabelecer as condições de optimalidade de ponto estacionário, sejam $b \in \mathbb{R}^m$, A uma matriz de ordem $m \times n$ com linhas A_i, $i \in \{1, \ldots, m\}$, $m_1 \leq m$ e

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : A_i x = b_i, 1 \leq i \leq m_1, \quad A_j x \geq b_j, m_1 + 1 \leq j \leq m\}.$$

Da teoria da dualidade de programação linear, $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X (isto é, $\bar{x}$ é solução óptima de (2.7)) se e só se existir um $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tal que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ é solução do problema de complementaridade

$$
\begin{array}{rl}
\nabla f(x) = A^\top \lambda & \\
A_i x = b_i, & i = 1, \ldots, m_1 \\
\left.\begin{array}{r} A_j x \geq b_j \\ \lambda_j \geq 0 \\ \lambda_j(A_j x - b_j) \end{array}\right\}, & j = m_1 + 1, \ldots, m
\end{array}
\tag{2.8}
$$

As variáveis λ_i são chamadas *Multiplicadores de Lagrange* e as condições (2.8) são conhecidas por *Condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)*. É de notar que cada multiplicador de Lagrange associado a uma igualdade não tem restrição de sinal, enquanto o correspondente a uma desigualdade tem de assumir valores não negativos e satisfazer uma condição de complementaridade (ou ortogonalidade) com o resíduo dessa desigualdade.

Como exemplo de ilustração, consideremos o programa não linear

$$
\begin{array}{ll}
Minimize & f(x_1, x_2, x_3) = x_1 x_2^2 + x_2^3 x_3 \\
\text{sujeito a} & \\
& \begin{array}{llll} x_1 & +x_2 & +x_3 & = 3 \\ x_1 & & -2x_3 & \geq 2 \\ x_1 & & & \geq 0 \\ & x_2 & & \geq 0. \end{array}
\end{array}
$$

Então, existem quatro multiplicadores de Lagrange (um por cada restrição), tendo os três últimos restrição de sinal. Cada restrição dá lugar a uma coluna da matriz $A^\top$ que aparece multiplicada pelo respectivo multiplicador de Lagrange na igualdade $\nabla f(x) = A^\top \lambda$. Além disso,

$$
\nabla f(x) = \begin{bmatrix} x_2^2 \\ 2x_1x_2 + 3x_2^2x_3 \\ x_2^3 \end{bmatrix}.
$$

Portanto, as condições de ponto estacionário são as seguintes:

$$
\begin{array}{l}
\begin{bmatrix} x_2^2 \\ 2x_1x_2 + 3x_2^2x_3 \\ x_2^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} \\
x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\
x_1 \qquad - 2x_3 \geq 2 \\
x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0 \\
\alpha_2 \geq 0, \quad \beta_1 \geq 0, \quad \beta_2 \geq 0 \\
\alpha_2(x_1 - 2x_3 - 2) = 0 \\
\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 = 0
\end{array}
$$

É de notar que utilizamos $\lambda^\top = \begin{bmatrix} \alpha^\top & \beta^\top \end{bmatrix}$ com letras diferentes para as restrições de limites ($x_j \geq l_j$ ou $x_j \leq u_j$) e para as restantes restrições. No nosso curso, iremos muitas vezes seguir este tipo de notação mas tal não é obrigatório.

Das condições apresentadas concluímos que o sistema de restrições que define o ponto estacionário é bastante complexo e não linear. Se a função é quadrática, então o gradiente é linear em x e o sistema

$$
\nabla f(x) = A^\top \lambda
$$

é linear. Assim, consideremos o programa

$$
\begin{array}{rl}
\mathit{Minimize} & f(x_1,x_2) = x_1 - x_2 + x_1^2 + 2x_2^2 + x_1x_2 \\
\text{sujeito a} & \\
& \begin{array}{rrl} x_1 & +x_2 & \leq 1 \\ x_1 & & \geq 0 \\ & x_2 & \geq 0 \end{array}
\end{array}
$$

Então,

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

e as condições são as seguintes:

$$
\begin{array}{l}
\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} \alpha + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} \\
-x_1 - x_2 \geq -1 \\
x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0 \\
\alpha \geq 0, \beta_1 \geq 0, \beta_2 \geq 0 \\
\alpha(1 - x_1 - x_2) = 0 \\
\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 = 0
\end{array}
$$

Salientamos que a restrição $x_1 + x_2 \leq 1$ foi reescrita na forma padrão $-x_1 - x_2 \geq -1$. É também de notar que, neste exemplo, todas as variáveis do sistema obtido têm restrição de sinal e, além disso, há complementaridade para cada multiplicador. Por outro lado, para o programa

$$
\begin{array}{rl}
\mathit{Minimize} & f(x_1,x_2) = x_1^2 + x_2^3 \\
\text{sujeito a} & x_1 + x_2 = 2
\end{array}
$$

as condições de ponto estacionário são simplesmente,

$$
\begin{array}{l}
\begin{bmatrix} 2x_1 \\ 3x_2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \lambda \\
x_1 + x_2 = 2
\end{array}
\tag{2.9}
$$

Seguidamente, apresentamos alguns casos particulares para o conjunto X e função objectivo que irão ser importantes na resolução de programas lineares.

- Se X só contém restrições de igualdades $Ax = b$, então as condições constituem o sistema de equações não lineares

$$
\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla f(x) & = & A^{\mathsf{T}} \lambda \\ Ax & = & b \end{array} \right.
\tag{2.10}
$$

  Se f é quadrática, isto é, tem a forma

$$
f(x) = b_0 + c^{\mathsf{T}} x + \frac{1}{2} x^{\mathsf{T}} H \, x,
$$

então $\nabla f(x) = c + Hx$ e as condições de KKT são

$$\begin{cases} c + Hx &= A^{\mathsf{T}}\lambda \\ Ax &= b \end{cases}$$

ou ainda, na forma aumentada

$$\begin{bmatrix} H & -A^{\mathsf{T}} \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix}.$$

- Se $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, \;\; x \geq 0\}$, então as condições de KKT têm a forma:

$$\begin{aligned} \nabla f(x) &= A^{\mathsf{T}}\lambda + w \\ Ax &= b \\ x &\geq 0 \\ w &\geq 0 \\ x^{\mathsf{T}}w &= 0 \end{aligned}$$

2.4.2 Condições de optimalidade para programas com restrições lineares de igualdade

Consideremos o programa não linear

$$\begin{aligned} \mathit{Minimize} \quad & f(x) \\ \text{sujeito a} \quad & Ax = b \end{aligned}$$

onde $x \in \mathbb{R}^n$, A é uma matriz de ordem $m \times n$ e característica $car(A) = m < n$, $b \in \mathbb{R}^m$ e f é uma função continuamente diferenciável num subconjunto aberto e convexo de $\mathbb{R}^n$ que contenha

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}.$$

Como vimos anteriormente, $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X se existir $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tal que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ satisfaz as condições (2.10). Além disso, de acordo com os teoremas 2.6 e 2.7 da secção 2.2, tem-se:

- Se f é convexa em X, então $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X se e só se $\bar{x}$ é mínimo global de f em X.

- Se f é duas vezes continuamente diferenciável num conjunto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ aberto e convexo contendo X ($f \in C^2(D)$), então o mínimo local $\bar{x}$ de f em X satisfaz as condições (2.10) e

  $$p^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(\bar{x})p \geq 0$$

  para toda a direcção admissível p.

- Se $f \in C^2(D)$, $\bar{x}$ satisfaz as condições (2.10) e

  $$p^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(\bar{x})p > 0$$

  para toda a direcção admissível p não nula, então $\bar{x}$ é mínimo local de f em X.

Seguidamente iremos discutir formas algébricas equivalentes para essas condições. Notar que uma direcção p é admissível em $\bar{x} \in X$ se $\bar{x} + \varepsilon p \in X,$ para todo $\varepsilon > 0$.

Mas, $\bar{x} + \varepsilon p \in X$ se e só se $A(\bar{x} + \varepsilon p) = b$. Como, $A\bar{x} = b$, então $Ap = 0$. Assim, as direcções admissíveis para programas com restrições lineares de igualdade são caracterizadas por $Ap = 0$. Seja

$$N(A) = \{p \in \mathbb{R}^n : Ap = 0\}$$

o *núcleo ou subespaço nulo* de A e

$$R(A^\top) = \{v \in \mathbb{R}^n : v = A^\top \lambda, \lambda \in \mathbb{R}^m\}$$

o *subespaço imagem de* $A^\top$. Então

$$R(A^\top) \perp N(A)$$

$$\mathbb{R}^n = R(A^\top) \oplus N(A)$$

onde $\perp$ e $\oplus$ representam ortogonalidade e soma directa de subespaços. Como $dim(R(A^\top)) = m$, então

$$dim(N(A)) = n - m$$

onde $dim(B)$ representa a dimensão do subespaço B. Portanto, uma base de $N(A)$ tem $n-m$ vectores de $\mathbb{R}^n$ os quais constituem uma matriz

$$Z = [z^1, \ldots, z^{n-m}] \in \mathbb{R}^{n\times(n-m)}. \tag{2.11}$$

Além disso, tem-se

- $AZ = 0$
- $p = Zd, d \in \mathbb{R}^{n-m}$, para todo o $p \in N(A)$

O seguinte teorema permite substituir a condição envolvendo os multiplicadores de Lagrange por uma outra que usa o chamado *Gradiente Reduzido de f*.

Teorema 2.14 $\nabla f(x) = A^\top \lambda \Longleftrightarrow Z^\top \nabla f(x) = 0.$

Demonstração: Se $\nabla f(x) = A^\top \lambda$, então

$$Z^\top \nabla f(x) = Z^\top (A^\top \lambda) = (AZ)^\top \lambda = 0^\top \lambda = 0.$$

Por outro lado, se $Z^\top \nabla f(x) = 0$, então $\nabla f(x)$ é ortogonal a $N(A)$ e $\nabla f(x) \in R(A^\top)$. Donde,

$$\nabla f(x) = A^\top \lambda,$$

com $\lambda \in \mathbb{R}^m$. □

Tendo em conta esta equivalência, $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}$ se e só se é solução do sistema

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^\top \nabla f(x) & = & 0 \\ Ax & = & b \end{array} \right. . \tag{2.12}$$

É de notar que este sistema tem n equações e n incognitas, pelo que é, em geral, mais tratável do que o sistema (2.10) que tem $n + m$ equações e $n + m$ incognitas.

Como qualquer direcção admissível p pertence a $N(A)$, então $p = Zd$ e podemos enunciar o seguinte teorema.

Teorema 2.15 *Seja $f \in C^2(D)$, com D um conjunto aberto e convexo que contém $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}$.*

1. *Se $\bar{x}$ é mínimo local de f em X, então $\bar{x}$ é ponto estacionário e $Z^\top \nabla^2 f(\bar{x}) Z$ é SPSD.*

2. *Se $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X e $Z^\top \nabla^2 f(\bar{x}) Z$ é SPD, então $\bar{x}$ é mínimo local de f em X.*

Demonstração:

1. Como vimos anteriormente, se $\bar{x}$ é mínimo local de f em X, então $\bar{x}$ é ponto estacionário e

$$p^\top \nabla^2 f(\bar{x}) p \geq 0$$

para toda a direcção admissível p. Mas se p é admissível, então $p = Zd$, com $d \in \mathbb{R}^{n-m}$. Portanto,

$$(Zd)^\top \nabla^2 f(\bar{x})(Zd) \geq 0$$

para todo o vector $d \in \mathbb{R}^{n-m}$. Donde

$$d^\top (Z^\top \nabla^2 f(\bar{x}) Z) d \geq 0$$

para qualquer $d \in \mathbb{R}^{n-m}$ e $Z^\top \nabla^2 f(\bar{x}) Z$ é SPSD.

A demonstração de 2. é semelhante. □

Como exemplo de ilustração, consideremos o seguinte programa não linear

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x_1, x_2, x_3) = x_1^4 + x_2^4 + x_3^4 - 4x_1x_2x_3 \\ s.a. & x_1 + x_2 + x_3 = 3. \end{array}$$

Como

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} 4x_1^3 - 4x_2x_3 \\ 4x_2^3 - 4x_1x_3 \\ 4x_3^3 - 4x_1x_2 \end{bmatrix}$$

então $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em $X = \{x \in \mathbb{R}^n : x_1 + x_2 + x_3 = 3\}$, se existir $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}$ tal que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ é solução do sistema

$$\left\{ \begin{array}{ccc} \begin{bmatrix} 4x_1^3 - 4x_2x_3 \\ 4x_2^3 - 4x_1x_3 \\ 4x_3^3 - 4x_1x_2 \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \lambda \\ x_1 + x_2 + x_3 & = & 3 \end{array} \right.$$

Então, $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ é solução de um sistema não linear de 4 equações e 4 incógnitas. Como vimos anteriormente, $\bar{x}$ pode ser calculado a partir do sistema (2.12). Para isso é necessário determinar a matriz $Z \in \mathbb{R}^{3\times 2}$ constituída por dois vectores linearmente independentes de $\mathbb{R}^3$ que satisfaz $AZ = 0$, isto é, cujas colunas formam uma base de $N(A)$. Então,

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

serve os nossos propósitos, pois tem-se

$$AZ = 0, \quad car(Z) = 2.$$

Mas

$$Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4x_1^3 - 4x_2x_3 \\ 4x_2^3 - 4x_1x_3 \\ 4x_3^3 - 4x_1x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4x_1^3 - 4x_2x_3 - 4x_2^3 + 4x_1x_3 \\ 4x_2^3 - 4x_1x_3 - 4x_3^3 + 4x_1x_2 \end{bmatrix}$$

e o sistema (2.12) tem a forma

$$\begin{cases} 4x_1^3 - 4x_2x_3 - 4x_2^3 + 4x_1x_3 & = & 0 \\ 4x_2^3 - 4x_1x_3 - 4x_3^3 + 4x_1x_2 & = & 0 \\ x_1 + x_2 + x_3 & = & 3 \end{cases}$$

Facilmente se conclui que $\bar{x} = (1, 1, 1)^{\mathsf{T}}$ é solução desse sistema e, por isso, é um ponto estacionário de f em X.

Para verificar se $\bar{x}$ é mínimo local é necessário estudar se

$$Z^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x}) Z$$

é SPD. Mas

$$\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} 12x_1^2 & -4x_3 & -4x_2 \\ -4x_3 & 12x_2^2 & -4x_1 \\ -4x_2 & -4x_1 & 12x_3^2 \end{bmatrix}$$

e

$$\begin{aligned} Z^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x}) Z &= \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 12 & -4 & -4 \\ -4 & 12 & -4 \\ -4 & -4 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= 16 \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Portanto, $Z^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x}) Z$ é SPD e $\bar{x}$ é mínimo local de f em X.

Tal como no caso de programas não lineares sem restrições, as condições necessárias e suficientes para máximos locais são obtidas das anteriores substituindo as classes de matrizes SPSD e SPD pelas SNSD e SND respectivamente.

Seja agora $f \in C^2(D)$ com D um conjunto aberto e convexo contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}$, o conjunto admissível do programa não linear

$$\min \{f(x) : x \in X\}.$$

Se x, $\bar{x}$ são dois elementos de X então, pelo teorema de Taylor, tem-se

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} (x - \bar{x}) + \frac{1}{2} (x - \bar{x})^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\eta)(x - \bar{x})$$

com $\eta \in]x, \bar{x}[$. Mas,

$$A(x - \bar{x}) = Ax - A\bar{x} = b - b = 0$$

e, portanto, $x - \bar{x} = Zd, d \in \mathbb{R}^{n-m}$. Substituindo na fórmula anterior vem,

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}}(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}d^{\mathsf{T}}(Z^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(\eta)Z)d.$$

Usando agora uma demonstração semelhante à do teorema 1.18 do capítulo 1, podemos estabelecer o seguinte resultado.

Teorema 2.16 *Se $f \in C^2(D)$, com D um subconjunto aberto e convexo de $\mathbb{R}^n$ que contém X, então*

1. *f é convexa em $X \iff Z^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)Z$ é SPSD para todo o $x \in X$.*
2. *f é côncava em $X \iff Z^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)Z$ é SNSD para todo o $x \in X$.*
3. *$Z^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)Z$ é SPD, $\forall x \in X \Longrightarrow f$ é estritamente convexa em X.*
4. *$Z^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)Z$ é SND, $\forall x \in X \Longrightarrow f$ é estritamente côncava em X.*

Se f é quadrática, isto é, se

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

então a equivalência verifica-se nos pontos 3. e 4. do teorema anterior. Além disso, é possível estabelecer o seguinte resultado.

Teorema 2.17 *Seja f uma função definida por $f(x) = b_0 + c^{\mathsf{T}}x + \frac{1}{2}x^{\mathsf{T}}H\,x$ e $\bar{x}$ um ponto estacionário de f em X, isto é, $\bar{x}$ verifica*

$$\left\{\begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}}H\,x & = & -Z^{\mathsf{T}}c \\ Ax & = & b \end{array}\right. \iff \left\{\begin{array}{rcl} Hx - A^{\mathsf{T}}\lambda & = & -c \\ Ax & = & b \end{array}\right. .$$

Então,

1. *Se $Z^{\mathsf{T}}H\,Z$ é SPSD, $\bar{x}$ é mínimo global de f em X.*
2. *Se $Z^{\mathsf{T}}H\,Z$ é SNSD, $\bar{x}$ é máximo global de f em X.*
3. *Se $Z^{\mathsf{T}}H\,Z$ é SIND, $\bar{x}$ é ponto sela de f em X.*

Demonstração: A demonstração desse resultado é consequência do teorema anterior, do facto da hessiana de uma função quadrática ser constante e de um ponto estacionário de uma função convexa (côncava) ser um mínimo (máximo) global dessa função. □

Como exemplo de ilustração deste teorema, consideremos o seguinte programa quadrático

$$\begin{array}{rl} \textit{Minimize} & f(x) = x_1^2 + x_2^2 - x_3^2 \\ \text{sujeito a} & x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ & 2x_1 - x_2 + x_3 = 2 \end{array}$$

A matriz $Z \in \mathbb{R}^{3\times 1}$ é um vector linearmente independente (não nulo) que satisfaz

$$AZ = 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} z_1 + z_2 + z_3 & = & 0 \\ 2z_1 - z_2 + z_3 & = & 0 \end{array} \right. .$$

Fazendo, por exemplo, $z_3 = -1$ vem

$$\left\{ \begin{array}{rcl} z_1 + z_2 & = & 1 \\ 2z_1 - z_2 & = & 1 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} z_1 & = & 2/3 \\ z_2 & = & 1/3 \end{array} \right. .$$

Donde,

$$Z = \begin{bmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ -1 \end{bmatrix}$$

é uma possível escolha para Z. Agora, um ponto estacionário de f no conjunto de restrições do programa é obtido resolvendo o sistema

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^\top \nabla f(x) & = & 0 \\ Ax & = & b \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} \frac{4}{3}x_1 + \frac{2}{3}x_2 + 2x_3 & = & 0 \\ x_1 + x_2 + x_3 & = & 3 \\ 2x_1 - x_2 + x_3 & = & 2 \end{array} \right. .$$

Este sistema linear tem solução única $\bar{x} = (4, 5/2, -7/2)$, que assim constitui o único ponto estacionário de f nesse conjunto X de restrições. Além disso,

$$Z^\top H Z = \begin{bmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ -1 \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ -1 \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} 4/3 \\ 2/3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8/9 \end{bmatrix}.$$

Donde $Z^\top HZ$ é SND e $\bar{x}$ é o máximo global de f em X. A função f não tem mínimo global (nem local) em X, pois só tem um ponto estacionário. Aliás, é fácil de ver que f tende para $-\infty$ quando x_3 tende para $+\infty$.

2.4.3 Condições de optimalidade para programas com restrições lineares de desigualdade

Consideremos o programa não linear

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x) \\ s.a. & Ax \geq b \end{array}$$

onde $x \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$, A é uma matriz de ordem $m \times n$ (notar que pode acontecer $car(A) < m$ ou $m \geq n$) e f é uma função continuamente diferenciável num conjunto aberto e convexo $D \subseteq \mathbb{R}^n$ que contém

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \geq b\}.$$

Uma restrição $A_i x = b_i$ consitui um hiperplano perpendicular ao vector A_i, isto é, um hiperplano cuja base é $N(A_i)$. Este hiperplano divide $\mathbb{R}^n$ em dois semi-espaços fechados: o semi-espaço $A_i x \geq b_i$, que está do lado que é apontado pelo vector A_i, e o semi-espaço $A_i x \leq b_i$,

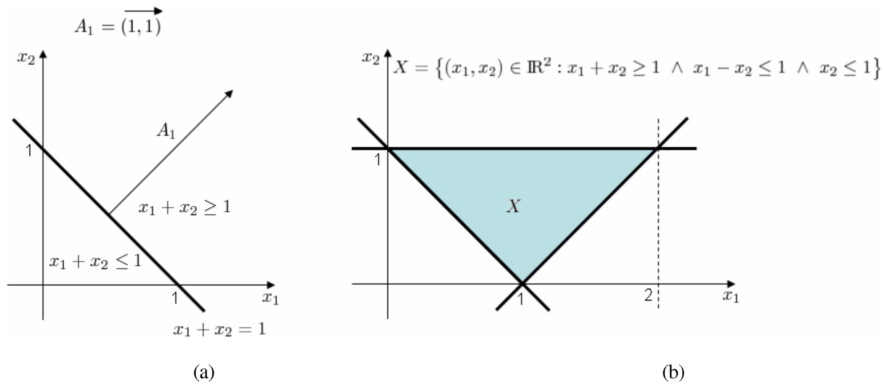


Figura 2.8: (a) Semi-espaços definidos pelo hiperplano $x_1 + x_2 = 1$.
(b) Poliedro $X = \big\{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_1 + x_2 \geq 1 \ \wedge \ x_1 - x_2 \leq 1 \ \wedge \ x_2 \leq 1\big\}$.

que está do lado contrário (ver figura 2.8(a)). Deste modo, se $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \geq b\}$, então X resulta da intersecção de um número finito de semi-espaços, originando um poliedro (ver figura 2.8(b)).

Para estabelecer as condições de ponto estacionário em $\bar{x} \in X$, devemos atender que cada uma das restrições $A_i x \geq b_i$ pode ser verificada como igualdade ou como desigualdade estrita no ponto $\bar{x}$. Supondo que $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em X, as restrições que se verificam como desigualdade estrita ($A_i \bar{x} > b_i$) não restringem a função f em torno do ponto $\bar{x}$. De facto, se fossem removidas de X, $\bar{x}$ manter-se-ia ponto estacionário de f no novo conjunto de restrições. Porém, se retirarmos alguma restrição $A_i x \geq b_i$ que se verifica como igualdade em $\bar{x}$, pode verificar-se descréscimo do valor da função objectivo no semi-espaço $A_i x < b_i$ e $\bar{x}$ pode deixar de ser ponto estacionário no novo conjunto de restrições. Chamamos *Restrição Activa* a uma restrição que se verifica como igualdade em $\bar{x}$. Seja $ACT(\bar{x})$ o conjunto dos índices i associados a essas restrições. Quando não houver ambiguidade relativamente ao ponto $\bar{x}$ considerado, simplificamos a notação escrevendo simplesmente ACT. Se $A_i x \geq b_i$ não é activa em $\bar{x}$, então diz-se *Restrição Inactiva em* $\bar{x}$.

A figura 2.9 ilustra este conceito de restrição activa para

$$X = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 + x_2 \leq 1 \wedge x_1 \geq 0 \wedge x_2 \geq 0\}.$$

Neste exemplo

- $\bar{x} = (1, 0)$ tem duas restrições activas: $x_1 + x_2 \leq 1$ e $x_2 \geq 0$.
- $\hat{x} = (1/2, 1/2)$ tem uma restrição activa: $x_1 + x_2 \leq 1$.
- $\tilde{x} = (1/4, 1/3)$ tem zero restrições activas.

Denotemos por $\bar{A}$ o conjunto das linhas de A correspondentes às restrições activas em $\bar{x}$, isto é, a submatriz de A contendo as linhas $A_i, i \in ACT$, e seja $\bar{\bar{A}}$ as linhas de A que não estão em $\bar{A}$, procedendo do mesmo modo com b. Atendendo a esta notação, podemos escrever

$$\bar{A}\bar{x} = \bar{b}, \quad \bar{\bar{A}}\bar{x} > \bar{\bar{b}}.$$

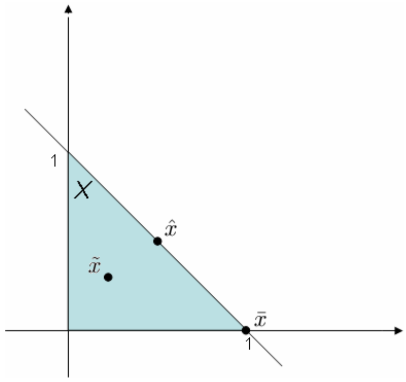


Figura 2.9: Pontos com 2, 1 ou 0 restrições activas.

Para caracterizar os pontos estacionários de f em X, necessitamos de identificar as direcções admissíveis em $\bar{x}$, que devem satisfazer:

$$\begin{aligned} \exists \bar{\varepsilon} > 0 : \bar{x} + \varepsilon p \in X, \forall \varepsilon \in (0, \bar{\varepsilon}] \quad &\Leftrightarrow \quad \exists \bar{\varepsilon} > 0 : \bar{A}(\bar{x} + \varepsilon p) \geq \bar{b} \wedge \bar{\bar{A}}(\bar{x} + \varepsilon p) \geq \bar{\bar{b}}, \forall \varepsilon \in (0, \bar{\varepsilon}] \\ &\Leftrightarrow \quad \bar{A}p \geq 0 \wedge \exists \bar{\varepsilon} > 0 : \varepsilon \bar{\bar{A}} p \geq \bar{\bar{b}} - \bar{\bar{A}} \bar{x}, \forall \varepsilon \in (0, \bar{\varepsilon}] \end{aligned}$$

Se nos focarmos nas restrições activas em $\bar{x}$, concluímos que p deve verificar $\bar{A}p \geq 0$. Além disso, para cada restrição inactiva $A_i x < b_i$, $\varepsilon A_i p \geq b_i - A_i \bar{x}$. Se $A_i p \geq 0$ a desigualdade é válida para todo o $\varepsilon > 0$. Caso contrário, $A_i p < 0$ e a desigualdade só é válida para $\varepsilon \leq (b_i - A_i \bar{x})/(A_i p)$, pelo que $\bar{\varepsilon}$ deverá ser inferior ou igual a essa quantidade. Concluímos assim que as direcções admissíveis são caracterizadas apenas à custa das restrições activas ($\bar{A}p \geq 0$), enquanto as inactivas apenas limitam o valor de $\bar{\varepsilon}$, pois

$$\bar{\varepsilon} \leq \min \{(b_i - A_i \bar{x})/(A_i p) : 1 \leq i \leq m \wedge A_i p < 0\}.$$

Atendendo a que as restrições inactivas não interferem na caracterização de uma direcção admissível, então todo o ponto estacionário $\bar{x}$ de f em $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax \geq b\}$, é também um ponto estacionário de f em $\left\{x \in \mathbb{R}^n : \bar{A}x = \bar{b}\right\}$. Portanto

$$\exists \lambda \in \mathbb{R}^{|ACT|} : \nabla f(\bar{x}) = \bar{A}^{\mathsf{T}} \lambda. \tag{2.13}$$

onde $|ACT|$ representa o cardinal do conjunto ACT.

Contudo, existem pontos estacionários de f em $\left\{x \in \mathbb{R}^n : \bar{A}x = \bar{b}\right\}$ que podem não ser pontos estacionários de f em $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax \geq b\}$ (ver figura 2.10). Para eliminar possíveis soluções que não sejam pontos estacionários, note-se que uma qualquer direcção admissível deve satisfazer

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p \geq 0 \Rightarrow \lambda^{\mathsf{T}} \bar{A} p \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq 0,$$

uma vez que $\bar{A}p \geq 0$.

Resumindo, $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em X, se e só se $\nabla f(\bar{x})$ é combinação linear da linhas de A associadas às restrições activas em $\bar{x}$ com coeficientes não negativos. Portanto,

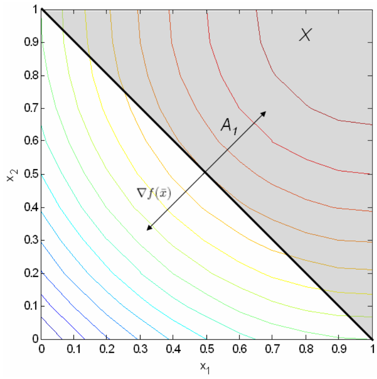


Figura 2.10: Exemplo de pontos estacionário de f em $Ax = b$ que não é ponto estacionário de f em $Ax \geq b$.

$\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X se e só se $\exists \lambda \in \mathbb{R}^{|ACT|}$ tal que $(\bar{x}, \lambda)$ satisfazem

$$\begin{array}{rcl} \nabla f(x) & = & \bar{A}^{\mathsf{T}}\lambda \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \\ Ax & \geq & b \\ \lambda & \geq & 0 \end{array} \tag{2.14}$$

Notar que estas condições são equivalentes às condições de complementaridade referidas na secção 2.4.1. Com efeito, se agora introduzirmos as linhas de A associadas as restrições inactivas em $\bar{x}$ na combinação linear com coeficientes nulos, isto é, considerando o vector $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tal que $\lambda_i = 0$ para $i \notin ACT$, então $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X se e só se $\bar{x}$ e $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ satisfazem as condições de complementaridade

$$\begin{array}{rcl} \nabla f(x) & = & A^{\mathsf{T}}\lambda \\ \lambda & \geq & 0 \\ Ax & \geq & b \\ (A_i x - b_i)\lambda_i & = & 0, \quad i = 1, \ldots, m. \end{array} \tag{2.15}$$

Se $t = |ACT| < n$ então, como vimos na secção anterior,

$$\nabla f(x) = \bar{A}^{\mathsf{T}}\lambda$$

é equivalente a

$$Z^{\mathsf{T}}\nabla f(x) = 0$$

com Z a matriz de ordem $n \times (n-t)$ constituída por vectores de uma base do subespaço nulo de $\bar{A}$. Portanto, na determinação de um ponto estacionário, escolhe-se um conjunto de t restrições activas e considera-se a matriz $\bar{A}$ definida pelas restrições activas. Então, há dois casos:

1. Se $t \geq n$, resolver o sistema $\bar{A}x = \bar{b}$.

2. Se $t < n$, resolver o sistema definido por $Z^{\mathsf{T}}\nabla f(x) = 0$, $\bar{A}x = \bar{b}$.

Uma vez determinado o vector $\bar{x}$, calculam-se os multiplicadores $\hat{\lambda}$ a partir de

$$\bar{A}^{\mathsf{T}}\,\hat{\lambda} = \nabla f(\bar{x})$$

e $\bar{x}$ é ponto estacionário se e só se $\hat{\lambda} \geq 0$.

Como exemplo de ilustração, consideremos o programa não linear

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{sujeito a} & x_1 \geq 1/2 \\ & x_2 \geq 0 \\ & x_1 + x_2 \leq 1 \Leftrightarrow -x_1 - x_2 \geq -1 \end{array} \tag{2.16}$$

Analisemos as várias situações possíveis.

- Para haver um ponto estacionário no interior do conjunto das restrições X, isto é, para $t = 0$, tem de acontecer

  $$\nabla f(x) = 0$$

  para certo $x \in X$. Mas

  $$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

  Como esse vector não pertence a X, não há qualquer ponto estacionário no interior de X.

- Consideremos agora a restrição $x_1 \geq 1/2$ como a única restrição activa de um possível ponto estacionário. Então

  $$\bar{b} = 1/2, \qquad \bar{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad Z = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

  Donde

  $$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}}\,\nabla f(x) & = & 0 \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} & = & 0 \\ x_1 & = & 1/2 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} x_2 & = & 0 \\ x_1 & = & 1/2 \end{array} \right.$$

  ou seja, $\bar{x} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \end{bmatrix}$. Para verificar se $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X tem de se calcular o multiplicador de Lagrange λ associado à restrição activa $x_1 = 1/2$, a partir de

  $$\bar{A}^{\mathsf{T}}\,\lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \lambda = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \lambda = 1.$$

  Então, $\lambda \geq 0$ e $\bar{x}$ é ponto estacionário. Aliás, $\bar{x}$ é o único mínimo global de f em X, pois f é estritamente convexa em $\mathbb{R}^2$ (ver figura 2.11).

- Consideremos, a seguir, a restrição $x_1 + x_2 \leq 1$ como a única restrição activa de um ponto estacionário. Como $x_1 + x_2 \leq 1$ se e só se $-x_1 - x_2 \geq -1$, tem-se

$$\bar{b} = -1, \qquad \bar{A} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \end{bmatrix} \qquad Z = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

A determinação de $\bar{x}$ é feita a partir de

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) & = & 0 \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} & = & 0 \\ -x_1 - x_2 & = & -1 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} x_1 & = & 1/2 \\ x_2 & = & 1/2 \end{array} \right. .$$

Donde $\bar{x} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}$ é o único candidato a ponto estacionário. Além disso,

$$\bar{A}^{\mathsf{T}} \lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} \lambda = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \lambda = -1.$$

Como $\lambda < 0$, $\bar{x}$ não é ponto estacionário.

- Finalmente, consideremos a restrição $x_2 \geq 0$ como a única restrição activa de um ponto estacionário. Nesse caso,

$$\bar{b} = 0, \qquad \bar{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad Z = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Consequentemente,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) & = & 0 \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} & = & 0 \\ x_2 & = & 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} x_1 & = & 0 \\ x_2 & = & 0 \end{array} \right. .$$

Donde $\bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ é o único candidato a ponto estacionário. Porém, este ponto não está em X.

Note-se que, no estudo anterior, falta considerar os casos em que $\bar{x}$ tem, simultaneamente, 2 ou 3 restrições activas. Para $t = 3$ o sistema $\bar{A}x = \bar{b}$ é impossível. Se considerarmos as restrições activas $x_1 + x_2 \leq 1$ e $x_1 \geq 1/2$, obtemos o ponto $\bar{x} = [1/2 \;\; 1/2]^{\mathsf{T}}$ já analisado. As restrições activas $x_1 + x_2 \leq 1$ e $x_2 \geq 0$ conduzem ao ponto $\bar{x} = [1 \;\; 0]^{\mathsf{T}}$ e tem-se

$$\bar{A}^{\mathsf{T}} \lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \lambda = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

e portanto $\bar{x}$ não é ponto estacionário. Finalmente, as restrições activas $x_1 \geq 1/2$ e $x_2 \geq 0$ produzem o ponto $\bar{x} = [1/2 \;\; 0]^{\mathsf{T}}$ já estudado.

A determinação de um ponto estacionário para um programa não linear com igualdades e desigualdades lineares é feito de modo semelhante ao caso das desigualdades lineares, tendo em conta que as restrições de igualdades são consideradas sempre como activas e os multiplicadores de Lagrange correspondentes não têm restrições de sinal.

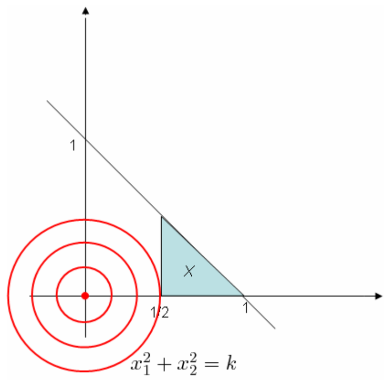
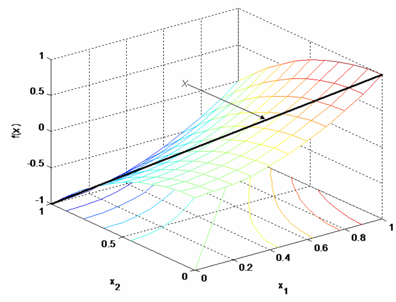


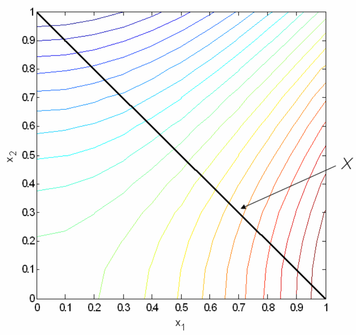
Figura 2.11: Solução óptima do problema (2.16) a partir das curvas de nível: $\bar{x} = (1/2, 0)$.

A título de exemplo, consideremos o programa

$$\begin{array}{rl} \mathit{Minimize} & f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2 \\ \text{sujeito a} & x_1 + x_2 = 1 \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{array}$$



(a)



(b)

Figura 2.12: (a) Gráfico da função $x_1^2 - x_2^2$ e conjunto de restrições; (b) Curvas de nível da função $x_1^2 - x_2^2$ e conjunto de restrições.

O conjunto de restrições X é o segmento de recta representado na figura 2.12 e facilmente se verifica que $(0, 1)$ é o único mínimo global desse programa. Para confirmar analiticamente este resultado, temos de verificar que $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X. Assim,

$$\bar{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad \bar{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Portanto, $t = n = 2$ e $\bar{x}$ calcula-se a partir de

$$\bar{A}x = \bar{b} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} x_1 & = & 0 \\ x_1 + x_2 & = & 1 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} x_1 & = & 0 \\ x_2 & = & 1 \end{array} \right. .$$

Além disso,

$$\bar{A}^{\mathsf{T}}\lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{lcr} \lambda_1 & = & 2 \\ \lambda_2 & = & -2 \end{array} \right. .$$

Então $\lambda_1 > 0$ (λ_2 não tem restrição de sinal, pois corresponde a uma restrição de igualdade) e $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X.

Falta provar que $\bar{x}$ é mínimo global de f em X. Para o efeito, note-se que f é convexa no conjunto

$$\bar{X} = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 + x_2 = 1\}.$$

Com efeito, uma possível escolha para Z é

$$\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

e

$$Z^{\mathsf{T}}HZ = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = 0.$$

Donde $Z^{\mathsf{T}}HZ$ é SPSD e f é convexa em $\bar{X}$ (teorema 2.16). Portanto, f é convexa em X e $\bar{x}$ é mínimo global de f em X.

Tal como discutimos anteriormente, um ponto estacionário pode ser ou não um mínimo global ou local. Se f é convexa no conjunto X de restrições do programa, então todo o ponto estacionário de f em X é mínimo global. No entanto, a verificação da convexidade de uma função num conjunto definido por desigualdades lineares é mais complexo do que nos casos anteriores. Para isso, notemos que se X é o conjunto definido por

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \geq b\}$$

então p é uma direcção admissível se $Ap \geq 0$. Portanto, f é convexa (estritamente convexa) em X se para cada $x \in X$ o programa

$$\begin{array}{rl} \mathit{Minimize} & p^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)\, p \\ \text{sujeito a} & Ap \geq 0 \\ & e^{\mathsf{T}}p = 1 \end{array}$$

tem mínimo não negativo (positivo), onde $e \in \mathbb{R}^n$ é o vector com componentes unitárias. Notar que é necessário a determinação do mínimo global, pelo que a solução deste programa não é trivial. Portanto, a verificação da convexidade de uma função não quadrática é um problema muito difícil. Em muitos casos, e tal como no exemplo anterior, o programa é definido por igualdades e desigualdades e f é convexa (estritamente convexa) no conjunto definido pelas igualdades, sendo também no conjunto de restrições do programa.

Se a função não é convexa em X, então um ponto estacionário pode ser ou não um mínimo local. Antes de estabelecermos uma condição suficiente para que tal aconteça, iremos apresentar uma condição necessária para um ponto estacionário ser um mínimo local. Seja $\bar{x}$ um mínimo local de uma função duas vezes continuamente diferenciável num conjunto aberto e convexo $D \subseteq \mathbb{R}^n$ que contenha $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \geq b\}$. Seja

$$\bar{A} = [A_i]_{i \in ACT}, \qquad \bar{b} = [b_i]_{i \in ACT}$$

o conjunto das linhas de A e das componentes de b correspondentes às restrições activas em $\bar{x}$. Se $t = |ACT| < n$, então podemos considerar a matriz Z constituída pelos vectores de uma base do subespaço nulo de $\bar{A}$. Como $\bar{x}$ é um mínimo local do programa de igualdades lineares

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x) \\ \text{sujeito a} & \bar{A}x = \bar{b} \end{array}$$

então o teorema 2.15 deste capítulo implica o seguinte resultado.

Teorema 2.18 *Se $f \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo que contém $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \geq b\}$. Se $\bar{x}$ é mínimo local de f em X, então $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X e $Z^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\, Z$ é SPSD (se Z existir).*

O próximo exemplo mostra que contrariamente aos casos anteriores a condição suficiente de mínimo local não se obtém substituindo simplesmente $SPSD$ por SPD. Consideremos o programa

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2 \\ \text{sujeito a} & x_2 \geq 0 \end{array}$$

Se considerarmos a restrição activa $x_2 = 0$, então

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow Z = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Portanto, o possível ponto estacionário com restrição activa $x_2 \geq 0$ é obtido por

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}}\,\nabla f(x) & = & 0 \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{c} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2x_1 \\ -2x_2 \end{bmatrix} = 0 \\ x_2 = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Além disso,

$$\bar{A}^{\mathsf{T}}\lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \lambda = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \lambda = 0$$

e, portanto, $\bar{x} = (0, 0)^{\mathsf{T}}$ é ponto estacionário de f em $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_2 \geq 0\}$.

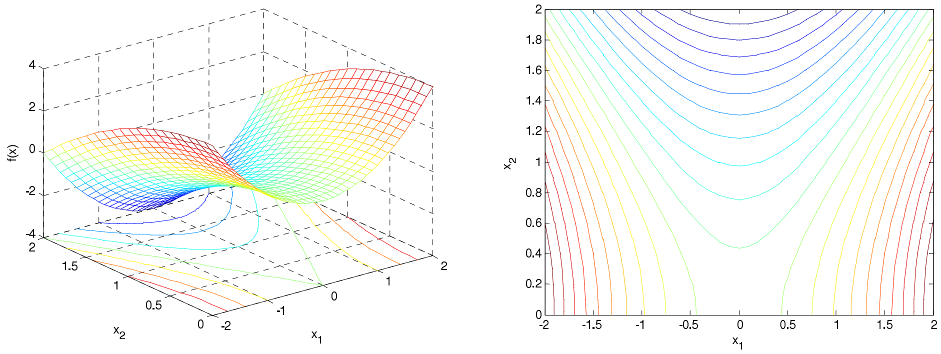
Como

$$\nabla^2 f(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

então

$$Z^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\, Z = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \end{bmatrix} \in \text{SPD}.$$

No entanto, $\bar{x}$ não é mínimo local de f em X. Com efeito, se $p = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}}$, então para qualquer $\alpha \neq 0$



(a) (b)

Figura 2.13: (a) Gráfico da função $x_1^2 - x_2^2$ no conjunto $x_2 \geq 0$; (b) Curvas de nível da função $x_1^2 - x_2^2$ no conjunto $x_2 \geq 0$.

$$f(\bar{x} + \alpha p) = f\left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right) = f\left(\begin{bmatrix} 0 \\ \alpha \end{bmatrix}\right) = -\alpha^2 < 0 = f(\bar{x}).$$

É de notar que $\lambda = 0$ neste exemplo. O próximo teorema indica que a condição $Z^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(x)\, Z$ ser SPD (se existir) é suficiente se todos os multiplicadores λ_i forem positivos.

Teorema 2.19 *Seja $f \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo que contém X. Se*

- *$\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em X,*
- *todos os multiplicadores associados às restrições activas em $\bar{x}$ são positivos,*
- *$Z^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x})\, Z$ é SPD (se Z existir),*

então $\bar{x}$ é mínimo local de f em X.

Demonstração: Suponhamos que $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em X e sejam $\bar{A} = [A_i]_{i \in ACT}$, $\bar{b} = [b_i]_{i \in ACT}$, com ACT o conjunto dos índices correspondentes às restrições activas em $\bar{x}$. Se $t = |ACT| \geq n$ ou $Z^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(\bar{x})\, Z$ é SPD, então $\bar{x}$ é mínimo local do problema de optimização com restrições lineares de igualdade

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x) \\ \text{sujeito a} & \bar{A}x = \bar{b}. \end{array}$$

Portanto, não haverá hipótese de a função decrescer de valor se a direcção de movimento mantiver as mesmas restrições activas. Contudo, poderá haver decréscimo no valor da função numa direcção p que torne inactiva pelo menos uma restrição activa. Para demonstrar o teorema, basta provar que isso é impossível se o correspondente multiplicador fôr positivo. Se p é uma direcção admissível que torna inactiva a restrição $A_i x \geq b_i$, então

$$A_i p > 0 \quad \wedge \quad A_j p \geq 0, \forall j \neq i.$$

Como
$$\nabla f(\bar{x}) = \bar{A}^{\mathsf{T}}\lambda$$
então
$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p = (\bar{A}^{\mathsf{T}}\lambda)^{\mathsf{T}} p = \lambda^{\mathsf{T}}(\bar{A}p) = \sum_{j\neq i} \lambda_j (Ap)_j + \lambda_i (Ap)_i > 0$$
pois $A_i p > 0$ e $A_j p \geq 0, \forall j \neq i$. Portanto,
$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p > 0.$$
Como f é continuamente diferenciável em X, existe $\bar{\alpha} > 0$ tal que
$$\nabla f(\bar{x} + \alpha p)^{\mathsf{T}} p > 0$$
para todo o $\alpha \in]0, \bar{\alpha}]$. Então, para cada um desses α, existe $\tilde{\alpha} \in]0, \alpha[$ tal que
$$f(\bar{x} + \alpha p) = f(\bar{x}) + \alpha \nabla f(\bar{x} + \tilde{\alpha} p)^{\mathsf{T}} p > f(\bar{x}).$$
Portanto, $\bar{x}$ é mínimo local de f em X. □

A terminar este capítulo, apresentamos um exemplo da determinação dos mínimos/máximos locais de uma função. Consideremos o programa
$$\begin{array}{rl} \mathit{Minimize} & f(x_1, x_2) = x_1^2 - 4x_2^2 \\ \text{sujeito a} & x_1 + x_2 \leq 1 \\ & x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0 \end{array}$$

Em primeiro lugar, devemos resolver o problema sem restrições ($t = 0$) para ver se o ponto estacionário assim obtido pertence à região $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 + x_2 \leq 1 \wedge x_1, x_2 \geq 0\}$. Assim,
$$\nabla f(x) = 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2x_1 \\ -8x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \in X.$$
Contudo,
$$\nabla^2 f(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -8 \end{bmatrix} \text{ é SIND,}$$
pelo que f não atinge um mínimo nem um máximo no interior de X.

No caso de considerar uma única restrição activa ($t = 1$), temos que distinguir 3 situações:

- Se $x_1 + x_2 \leq 1$ $(-x_1 - x_2 \geq -1)$ é a restrição activa, então
$$\bar{A} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \bar{b} = \begin{bmatrix} -1 \end{bmatrix}, \quad Z = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$
Assim,
$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) & = & 0 \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \end{array} \right. \Leftrightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} 4/3 \\ -1/3 \end{bmatrix} \notin X.$$

- Se $x_1 \geq 0$ é a restrição activa, então

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

Portanto,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) & = & 0 \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \end{array} \right. \Leftrightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Para saber se o ponto $\bar{x}$ é estacionário, resolvemos

$$\bar{A}^{\mathsf{T}} \lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \lambda = 0.$$

Deste modo, nada se pode concluir a partir destas condições. Contudo, analisando mais detalhamente a função objectivo, vemos que ela aumenta de valor segundo a direcção admissível $p = (1, 0)$ e decresce segundo a direcção admissível $p = (1, 1)$. Logo, $\bar{x} = (0, 0)$ não é um mínimo nem um máximo de f em X.

- Se $x_2 \geq 0$ é a restrição activa, então

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

Assim,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) & = & 0 \\ \bar{A}x & = & \bar{b} \end{array} \right.$$

obtendo-se novamente $\bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$.

Uma vez que as três restrições não podem ser activas simultaneamente, então resta estudar os casos em que há duas restrições activas em $\bar{x}$:

- Se as restrições activas escolhidas forem $x_1 + x_2 \leq 1$ e $x_1 \geq 0$, então

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

Neste caso, a matriz Z não existe uma vez que $dim(N(A)) = 0$ e

$$\bar{A}x = \bar{b} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} -x_1 - x_2 & = & -1 \\ x_1 & = & 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Para verificar se $\bar{x}$ é ponto estacionário, calcula-se λ por

$$\bar{A}^{\mathsf{T}} \lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -8 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \lambda = \begin{bmatrix} 8 \\ 8 \end{bmatrix} \geq 0.$$

Portanto, $\bar{x}$ é ponto estacionário e como $\lambda_i > 0, i \in \{1, 2\}$, então $\bar{x}$ é mínimo local de f em X.

- Se as restrições activas escolhidas forem $x_1 + x_2 \leq 1$ e $x_2 \geq 0$, então

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

A matriz Z não existe e

$$\bar{A}x = \bar{b} \Leftrightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Para verificar se $\bar{x}$ é ponto estacionário, calcula-se λ por

$$\bar{A}^{\mathsf{T}}\lambda = \nabla f(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \lambda = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix} < 0.$$

Logo, $\bar{x}$ não é ponto estacionário de f em X. Contudo, $\bar{x}$ é ponto estacionário de $-f$ em X uma vez que, nesse caso, os multiplicadores de Lagrange são os simétricos dos encontrados neste caso. Assim, os novos λ_i são positivos, $i \in \{1, 2\}$, pelo que $\bar{x}$ é mínimo local de $-f$ em X, ou seja, $\bar{x}$ é máximo local de f em X.

- Se as restrições activas forem $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$, então obtemos novamente o ponto $\bar{x} = (0, 0)$ que já analisámos.

A figura 2.14 permite visualizar os extremos da função f no conjunto X.

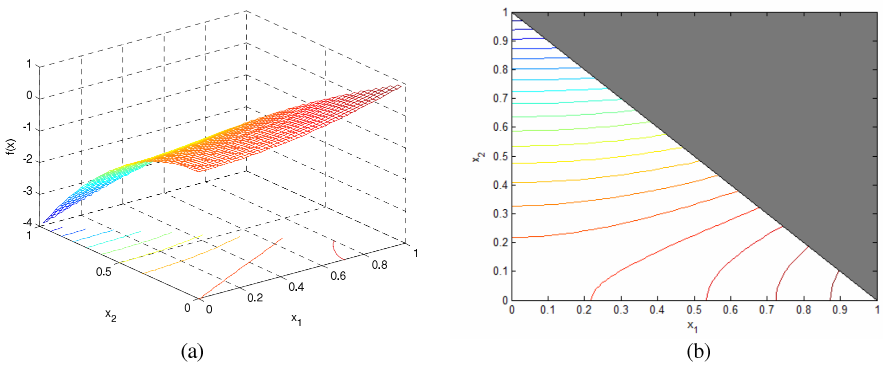


Figura 2.14: (a) Gráfico da função $x_1^2 - 4x_2^2$ no conjunto definido por $x_1 + x_2 \leq 1$ e $x_1, x_2 \geq 0$; (b) Curvas de nível da função $x_1^2 - 4x_2^2$ no conjunto definido por $x_1 + x_2 \leq 1$ e $x_1, x_2 \geq 0$.

Portanto, a função tem um só mínimo e um só máximo local no conjunto de restrições dado. É importante realçar a necessidade de uma grande pesquisa no conjunto das restrições activas para a determinação de um mínimo ou máximo local de uma função. Os denominados algoritmos de restrições activas procuram investigar esse conjunto de uma forma inteligente até à determinação de um ponto estacionário de f no conjunto admissível do programa não linear.

2.5 Condições de optimalidade para programação não linear com restrições não lineares

Nesta secção iremos considerar o programa não linear

$$\begin{array}{ll} Minimize & f(x) \\ s.a. & x \in X \end{array}$$

onde $X \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto constituído por restrições não lineares (igualdade e desigualdade) e f é uma função continuamente diferenciável num subconjunto aberto de $\mathbb{R}^n$ que contém X. Deste modo, X pode ser escrito na forma

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0,\ g(x) \geq 0\}$$

onde $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ e $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$ são funções continuamente diferenciáveis num subconjunto aberto de $\mathbb{R}^n$ que contém X.

A principal diferença relativamente ao problema estudado na secção anterior reside no facto dos movimentos rectilíneos poderem ser não admissíveis, isto é, conduzirem a pontos exteriores a X. Aliás, direcções admissíveis podem mesmo não existir para qualquer ponto de X, como se ilustra na figura 2.15 para o conjunto $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_2 = \sin(x_1)\}$.

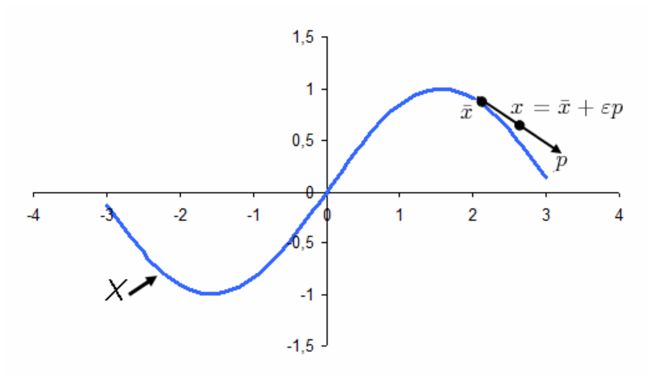


Figura 2.15: Ilustração da inexistência de direcções admissíveis para pontos do conjunto $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_2 = \sin(x_1)\}$.

Esta situação extrema apenas ocorre quando X é definido por restrições não-lineares de igualdade. Deste modo, para estudar as condições de ponto estacionário e as condições de optimalidade, os movimentos rectilíneos devem ser substituídos por movimentos curvilíneos descritos através de *arcos parametrizados* da forma:

$$\begin{array}{rccc} \mathcal{X}: & [0,b] \subset \mathbb{R} & \longrightarrow & X \\ & t & \mapsto & \mathcal{X}(t). \end{array}$$

Note-se que um movimento rectilíneo em $\bar{x}$ segundo a direcção $p \in \mathbb{R}^n$ pode também ser representado pelo arco $\mathcal{X}(t) = \bar{x} + tp$, $t \in [0, \bar{\lambda}]$, pelo que este conceito generaliza o introduzido nas secções anteriores.

Um arco $\mathcal{X} : [0, b] \to X$ diz-se admissível em $\bar{x}$ se e só se

$$\forall t \in [0, b],\ \mathcal{X}(t) \in X \quad \wedge \quad \mathcal{X}(0) = \bar{x}.$$

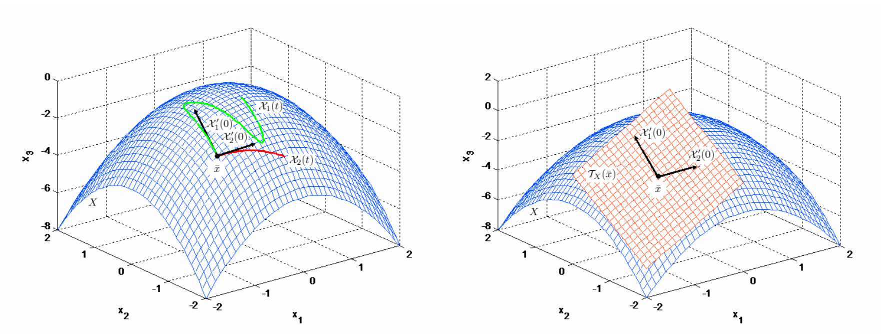
2.5.1 Plano tangente a X

Um arco $\mathcal{X}:[0,b]\to X$ diz-se diferenciável se e só se existe $\mathcal{X}'(t)=[\mathcal{X}_1'(t)\ldots\mathcal{X}_n'(t)]^\mathsf{T}$ com t pertencente a um conjunto aberto contendo $[0,b]$. Neste caso, o vector $\mathcal{X}'(\bar{t})$ é um vector tangente ao arco $\mathcal{X}$ no ponto $\mathcal{X}(\bar{t})$ com $\bar{t}\in[0,b]$.

O conjunto de todos os vectores tangentes a arcos admissíveis em $\bar{x}\in X$ diz-se *Plano Tangente a X em $\bar{x}$* e representa-se por $\mathcal{T}_X(\bar{x})$. Deste modo,

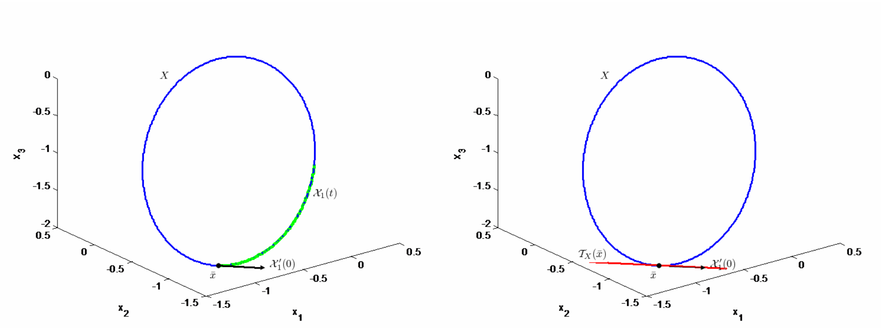
$$p\in\mathcal{T}_X(\bar{x})\Leftrightarrow\exists_{\mathcal{X}:[0,b]\to X}:\forall t\in[0,b],\mathcal{X}(t)\in X\quad\wedge\quad\mathcal{X}(0)=\bar{x}\quad\wedge\quad\mathcal{X}'(0)=p.$$

Nas figuras 2.16 e 2.17 estão ilustradas duas superfícies de $\mathbb{R}^3$ e os respectivos planos tangentes.



(a) (b)

Figura 2.16: Conjunto $X=\left\{x\in\mathbb{R}^3:h(x)=0\right\}$, com $h(x)=x_1^2+x_2^2+x_3$, arcos admissíveis (a) e plano tangente (b) em $\bar{x}=(-1,-1,-2)$.



(a) (b)

Figura 2.17: Conjunto $X=\left\{x\in\mathbb{R}^3:h(x)=0\right\}$, com $h(x)=(x_1^2+x_2^2+x_3,\ x_1+x_2-x_3)$, arcos admissíveis (a) e plano tangente (b) em $\bar{x}=(-1,-1,-2)$.

O plano tangente a X vai ter um papel relevante na caracterização do mínimo local de f em X. De facto, se $\bar{x}$ é mínimo local de f em X, então $t=0$ deverá ser mínimo local da função φ definida por

$$\varphi(t)=f(\mathcal{X}(t)),t\in[0,b].$$

Portanto, $\varphi'(0) \geq 0$ e atendendo a que

$$\varphi'(t) = \nabla f(\mathcal{X}(t))^{\mathsf{T}} \mathcal{X}'(t),$$

tem-se $\varphi'(0) = \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p \geq 0$, com $p = \mathcal{X}'(0) \in \mathcal{T}_X(\bar{x})$. Como $\mathcal{X}(t)$ é um arco admissível genérico, concluímos que

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p \geq 0, \forall p \in \mathcal{T}_X(\bar{x}). \tag{2.17}$$

Um vector $\bar{x} \in X$ que verifica (2.17) diz-se um *ponto estacionário de f em X*. Deste modo, o conceito de direcção admissível utilizado na secção 2.4 será agora substituído pelo de vector tangente a X em $\bar{x}$ e verifica-se o seguinte resultado.

Teorema 2.20 *Seja $f \in C^1(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo X. Se $\bar{x}$ é mínimo local de f em X, então $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em X.*

No caso de $\bar{x} \in int(X)$, temos total liberdade nos movimentos em torno de $\bar{x}$ pelo que $\mathcal{T}_X(\bar{x}) = \mathbb{R}^n$. Contudo, o problema é mais complexo quando $\bar{x} \in fr(X)$. Para simplificar a exposição, admita-se que X é descrito apenas por restrições de igualdade, isto é, $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$, pelo que $int(X) = \emptyset$ e $fr(X) = X$. O teorema seguinte ajuda a caracterizar o plano tangente em X nesta situação.

Teorema 2.21 *Seja $h \in C^1(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$. Então*

$$\mathcal{T}_X(\bar{x}) \subseteq N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$$

onde $N(A) = \{p \in \mathbb{R}^n : Ap = 0\}$.

<u>Demonstração</u>: Dado $p \in \mathcal{T}_X(\bar{x})$, existe $\mathcal{X} : [0, b] \to X$ admissível tal que $\mathcal{X}'(0) = p$. Como $\mathcal{X}$ é admissível, então $h(\mathcal{X}(t)) = 0$, $\forall t \in [0, b]$ e, consequentemente, $\frac{d}{dt} h(\mathcal{X}(t)) = 0$, $\forall t \in [0, b]$. Atendendo a que $\frac{d}{dt} h(\mathcal{X}(t)) = \nabla h(\mathcal{X}(t))^{\mathsf{T}} \mathcal{X}'(t)$ tem-se

$$0 = \nabla h(\mathcal{X}(0))^{\mathsf{T}} \mathcal{X}'(0) = \nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}} p,$$

ou seja, $p \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$. $\square$

Note-se que a condição indicada no teorema anterior é apenas necessária. De facto, pode acontecer que existam vectores de $N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$ que não são tangentes a X em $\bar{x}$. A título de exemplo, considere-se o conjunto

$$X = \left\{x \in \mathbb{R}^3 : h(x) = 0\right\}, \text{ com } h(x) = \begin{bmatrix} h_1(x) \\ h_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x_1^2 + x_3 \\ x_3 \end{bmatrix}.$$

De $h(x) = 0$ concluímos $x_1 = x_3 = 0$, pelo que $X = \{(0, x_2, 0) : x_2 \in \mathbb{R}\}$. Deste modo, há dois tipos de arcos admissíveis num ponto $\bar{x} \in X$:

$$\mathcal{X}(t) = \bar{x} + t[0 \;\; 1 \;\; 0]^{\mathsf{T}} \;\text{ e }\; \tilde{\mathcal{X}}(t) = \bar{x} + t[0 \;\; -1 \;\; 0]^{\mathsf{T}}.$$

Então, $\mathcal{T}_X(\bar{x}) = \{(0, t, 0) : t \in \mathbb{R}\}$. Mas,

$$\nabla h(x)^{\mathsf{T}} = \begin{bmatrix} \nabla h_1(x)^{\mathsf{T}} \\ \nabla h_2(x)^{\mathsf{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e $\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ para todo $\bar{x} \in X$. Consequentemente,

$$N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}}) = \{(\alpha, \beta, 0) : \alpha, \beta \in \mathbb{R}\},$$

pelo que $p = (1, 1, 0) \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$, mas não é tangente a X em nenhum ponto $\bar{x}$ (ver figura 2.18).

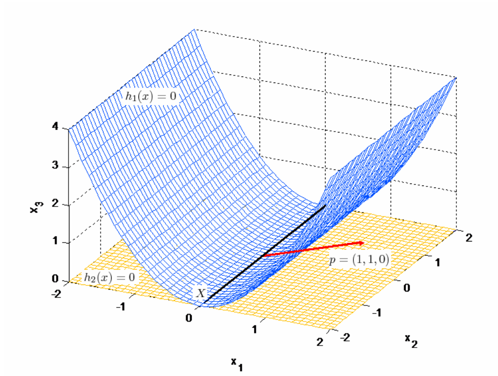


Figura 2.18: Exemplo de um vector de $N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$ que não é tangente a X.

Para evitar este tipo de ocorrência, necessitamos de acrescentar uma restrição de qualificação em $\bar{x}$. Entre outros tipos de restrições que têm sido sugeridas por vários autores, escolhemos a exigência dos gradientes $\nabla h_i(\bar{x})$ das funções h_i serem linearmente independentes. Notar que esta condição não se verificava no exemplo anterior. Se essa restrição de qualificação em $\bar{x}$ é verdadeira, então $\bar{x}$ diz-se um *ponto regular de* X e podemos completar a caracterização de $\mathcal{T}_x(\bar{x})$ à custa de $\nabla h(\bar{x})$.

Teorema 2.22 *Seja $h \in C^1(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e $\bar{x} \in X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$ um ponto regular. Então,*

$$\mathcal{T}_X(\bar{x}) = N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}}).$$

Demonstração: Pelo teorema 2.21, basta provar que $N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}}) \subseteq \mathcal{T}_X(\bar{x})$, para todo o ponto regular $\bar{x}$. Seja $p \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$ e considere-se a matriz Z de ordem $n \times (n-m)$ cujas colunas constituem uma base para $N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$. Defina-se agora a função

$$\begin{array}{rccl} f: & \mathbb{R}^{n+1} & \longrightarrow & \mathbb{R}^n \\ & (t, x) & \mapsto & f(t, x) = \begin{bmatrix} h(x) \\ Z^{\mathsf{T}}(x - \bar{x} - tp) \end{bmatrix} \end{array}$$

que é continuamente diferenciável num aberto contendo $\{0\} \times X$ e cujas derivadas em ordem a x são dadas por $\nabla_x f(t, x) = [\nabla h(x) \;\; Z]$. Como $\bar{x}$ é um ponto regular, então $\nabla_x f(0, \bar{x})$ é não singular. Pelo teorema da função implícita, existe um aberto U contendo $\bar{x}$, um intervalo (a, b) contendo 0 e uma única função $\psi : (a, b) \to U$ tal que

$$\begin{aligned} \forall t \in (a, b), \qquad & \psi(t) \in U, \\ & f(t, \psi(t)) = f(0, \bar{x}) = 0, && (2.18) \\ & \psi'(t) = -\left(\nabla_x f(t, \psi(t))^{\mathsf{T}}\right)^{-1} \frac{\partial f}{\partial t}(t, \psi(t)). && (2.19) \end{aligned}$$

De (2.18) conclui-se que $h(\psi(t)) = 0$, $\forall t \in (a,b)$, e que $\psi(0) = \bar{x}$, pelo que ψ é um arco admissível em $\bar{x}$. Por outro lado, de (2.19) obtém-se $\psi'(0) = -\left(\nabla_x f(0,\bar{x})^{\mathsf{T}}\right)^{-1} \frac{\partial f}{\partial t}(0,\bar{x})$. Note-se que a inversa de $\nabla_x f(0,\bar{x})^{\mathsf{T}} = \begin{bmatrix} \nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}} \\ Z^{\mathsf{T}} \end{bmatrix}$ é uma matriz $[A\ B]$ tal que

$$I = [A\ B] \begin{bmatrix} \nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}} \\ Z^{\mathsf{T}} \end{bmatrix} = A\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}} + BZ^{\mathsf{T}}$$

com I a matriz identidade. Portanto,

$$\begin{aligned} \psi'(0) &= -\left(\nabla_x f(0,\bar{x})^{\mathsf{T}}\right)^{-1} \frac{\partial f}{\partial t}(0,\bar{x}) \\ &= -[A\ B] \begin{bmatrix} 0 \\ -Z^{\mathsf{T}} p \end{bmatrix} \\ &= BZ^{\mathsf{T}} p \\ &= (I - A\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})p = p \end{aligned}$$

uma vez que $p \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$. Donde, $p \in \mathcal{T}_X(\bar{x})$. □

Note-se que, no caso de as restrições serem lineares,

$$h(x) = Ax - b \quad \Rightarrow \quad \nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}} = A.$$

Deste modo, os movimentos são rectilíneos e seguem uma direcção de $\mathcal{T}_X(\bar{x})$ (isto é, $N(A)$), o que permite obter a caracterização de direcções admissíveis feita na secção 2.4.

2.5.2 Condições de optimalidade para programas com restrições não lineares de igualdade

Consideremos o programa não linear

$$\begin{aligned} Minimize \quad & f(x) \\ \text{sujeito a} \quad & h(x) = 0 \end{aligned} \tag{2.20}$$

onde $x \in \mathbb{R}^n$ e f e h são funções continuamente diferenciáveis num conjunto aberto que contenha $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$. O próximo teorema permite caracterizar de uma forma mais simples os pontos estacionários de f em X.

Teorema 2.23 *Sejam $f, h \in C^1(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$ e $\bar{x} \in X$ é um ponto regular. Então $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X se e só se*

$$Z^{\mathsf{T}} \nabla f(\bar{x}) = 0 \tag{2.21}$$

onde $Z \in \mathbb{R}^{n\times(n-m)}$ é uma matriz cujas colunas formam uma base de $N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$.

Demonstração: Como $\bar{x}$ é um ponto regular estacionário, então

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p \geq 0, \forall p \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}}).$$

Mas, se $p \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$, então $-p$ também pertence a esse conjunto e

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p = 0, \forall p \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$$

A fórmula (2.21) é agora consequência desta última igualdade. □

A demonstração do teorema anterior permite concluir que, no caso de $\bar{x}$ ser regular, os pontos estacionários verificam

$$\nabla f(\bar{x}) \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})^{\perp}.$$

Como

$$N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})^{\perp} = Rank(\nabla h(\bar{x}))$$

então podemos enunciar o teorema anterior na forma equivalente.

Teorema 2.24 *Sejam $f, h \in C^1(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$ e $\bar{x} \in X$ é um ponto regular. Então $\bar{x}$ é ponto estacionário de f se e só se existe $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tal que*

$$\nabla f(\bar{x}) = \nabla h(\bar{x})\lambda. \tag{2.22}$$

Tal como anteriormente, λ é o vector dos multiplicadores de Lagrange associados à restrição $h(x) = 0$. Notar que a condição (2.22) se pode escrever na forma:

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

O teorema 2.23 (ou equivalentemente o teorema 2.24) é insuficiente para distinguir pontos estacionários que sejam mínimos ou máximos locais de f em X. De forma semelhante ao caso das restrições lineares, será necessário para esse efeito avaliar a curvatura de f, isto é, usar as segundas derivadas de f. Seguidamente apresentamos alguns exemplos ilustrativos da curvatura de f.

Consideremos o programa

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x) = -x_1^2 + x_2 \\ \text{sujeito a} & h(x) = -2x_1^2 + x_2 = 0 \end{array}$$

Neste caso todos os pontos admissíveis são regulares. De facto,

$$\nabla h(x)^{\mathsf{T}} = [-4x_1 \;\; 1]$$

e a característica de $\nabla h(x)^{\mathsf{T}}$ ($car(\nabla h(x)^{\mathsf{T}})$) é um para todo o $x \in \mathbb{R}^2$. Além disso, uma base para $N(\nabla h(x)^{\mathsf{T}})$ é formada pelo vector $[1 \;\; 4x_1]^{\mathsf{T}}$.

Os pontos estacionários de f em X podem ser determinados resolvendo o sistema

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) & = & 0 \\ h(x) & = & 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} [1 \;\; 4x_1] \begin{bmatrix} -2x_1 \\ 1 \end{bmatrix} & = & 0 \\ x_2 & = & 2x_1^2 \end{array} \right. \Rightarrow x = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Seguidamente mostramos que $\bar{x} = [0 \;\; 0]^\mathsf{T}$ é um mínimo global de f no conjunto definido pela restrição $h(x) = 0$. Na verdade, como o conjunto X pode ser descrito pelo arco

$$\mathcal{X}(t) = (t, 2t^2), t \in \mathbb{R},$$

o problema dado é equivalente a minimizar a função definida por

$$\varphi(t) = f(\mathcal{X}(t)) = -t^2 + 2t^2 = t^2$$

em $\mathbb{R}$. Assim,

$$\forall x \in X, f(x) = \varphi(x_1) = x_1^2 \geq 0 = f(\bar{x}).$$

Se considerarmos agora a função $\tilde{h}(x) = -\frac{1}{2}x_1^2 + x_2$, que é semelhante à função h anterior com uma curvatura menos acentuada, obtemos igualmente $\bar{x} = [0 \;\; 0]^\mathsf{T}$ como único ponto estacionário de f. No entanto, $\bar{x}$ é agora máximo (global) de f sujeito à restrição $\tilde{h}(x) = 0$. A mesma situação ocorre quando se considera a restrição $\hat{h}(x) = 2x_1^2 + x_2 = 0$ em vez de $h(x) = 0$. Por último, se considerarmos a função $\bar{h}(x) = -x_1^3 - x_1^2 + x_2$ para definir a restrição do programa, obtemos ainda $\bar{x} = [0 \;\; 0]^\mathsf{T}$ como único ponto estacionário de f em X que, neste caso, é um ponto sela. A figura 2.19 ilustra os exemplos acabados de referir.

Para estabelecer as condições necessárias de segunda ordem para um ponto $\bar{x}$ ser mínimo local de f em X iremos introduzir uma função auxiliar, denominada *Função Lagrangeana* e definida do seguinte modo:

$$\begin{array}{llll} L: & \mathbb{R}^{n+m} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & (x,\lambda) & \mapsto & L(x,\lambda) = f(x) - \lambda^\mathsf{T} h(x) \\ & & & = f(x) - \sum_{k=1}^m \lambda_k h_k(x). \end{array}$$

As primeiras derivadas desta função são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial x_i}(x,\lambda) &= \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) - \sum_{k=1}^m \lambda_k \frac{\partial h_k}{\partial x_i}(x), \quad i \in \{1,\ldots,n\} \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_j}(x,\lambda) &= -h_j(x), \quad j \in \{1,\ldots,m\}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\nabla_x L(x,\lambda) = \nabla f(x) - \nabla h(x)\lambda \tag{2.23}$$

$$\nabla_\lambda L(x,\lambda) = -h(x) \tag{2.24}$$

Deste modo, a condição apresentada no teorema 2.24 para que um ponto regular $\bar{x}$ seja estacionário, pode ser escrita numa forma mais simples:

$$\exists \bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m : \nabla_x L(\bar{x},\bar{\lambda}) = 0. \tag{2.25}$$

Além disso, verifica-se

$$\bar{x} \in X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\} \quad \Leftrightarrow \quad \nabla_\lambda L(\bar{x},\bar{\lambda}) = 0. \tag{2.26}$$

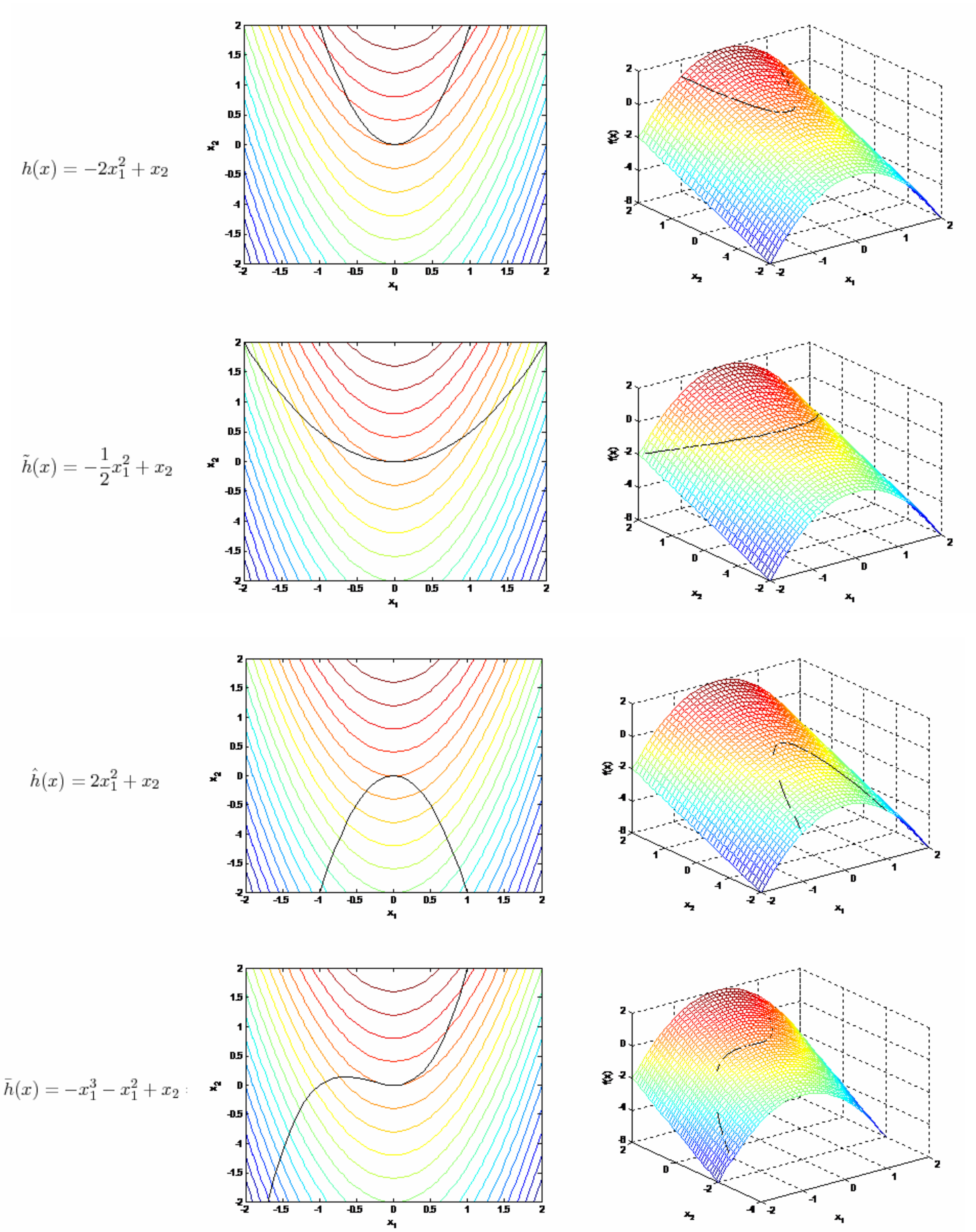


Figura 2.19: Influência da curvatura de h na determinação dos extremos de $f(x) = -x_1^2 + x_2$. O conjunto X das restrições está representado pela curva a preto.

Portanto, $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ é um ponto estacionário de f em X se e só se existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla L(\bar{x}, \bar{\lambda}) = \begin{bmatrix} \nabla_x L(\bar{x}, \bar{\lambda}) \\ \nabla_\lambda L(\bar{x}, \bar{\lambda}) \end{bmatrix} = 0.$$

Concluimos que um ponto $\bar{x}$ é um ponto estacionário de f em $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$ se e só se existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tal que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ é um ponto estacionário de L em $\mathbb{R}^{n+m}$.

Relativamente às segundas derivadas de L, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 L}{\partial x_i \, \partial x_j}(x, \lambda) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \, \partial x_j}(x) - \sum_{k=1}^m \lambda_k \frac{\partial^2 h_k}{\partial x_i \, \partial x_j}(x), \quad i, j \in \{1, \ldots, n\} \\
\frac{\partial^2 L}{\partial \lambda_i \, \partial x_j}(x, \lambda) &= -\frac{\partial h_i}{\partial x_j}(x), \quad i \in \{1, \ldots, m\}, j \in \{1, \ldots, n\} \\
\frac{\partial^2 L}{\partial x_i \, \partial \lambda_j}(x, \lambda) &= -\frac{\partial h_j}{\partial x_i}(x), \quad i \in \{1, \ldots, n\}, j \in \{1, \ldots, m\} \\
\frac{\partial^2 L}{\partial \lambda_i \, \partial \lambda_j}(x, \lambda) &= 0, \quad i, j \in \{1, \ldots, m\}
\end{aligned}$$

Portanto, o gradiente e a hessiana da função Lagrangeana são dados por

$$\nabla L(x, \lambda) = \begin{bmatrix} \nabla f(x) - \nabla h(x)\lambda \\ -h(x) \end{bmatrix}, \nabla^2 L(x, \lambda) = \begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) - \sum_{k=1}^m \lambda_k \nabla^2 h_k(x) & -\nabla h(x) \\ -\nabla h(x)^\mathsf{T} & 0 \end{bmatrix}.$$

Consideremos agora um arco admissível $\mathcal{X}(t)$, $t \in [0, b]$, e fixemos $\lambda \in \mathbb{R}^m$. Então podemos definir

$$\psi(t) = L(\mathcal{X}(t), \lambda) = f(\mathcal{X}(t)) - \sum_{k=1}^m \lambda_k h_k(\mathcal{X}(t)), t \in [0, b]. \tag{2.27}$$

Como o arco é admissível, então $h(\mathcal{X}(t)) = 0$, $t \in [0, b]$ e

$$\psi(t) = f(\mathcal{X}(t)) = \varphi(t), \; t \in [0, b].$$

Além disso, as derivadas de ψ são dadas por

$$\begin{aligned}
\psi'(t) &= \nabla_x L(\mathcal{X}(t), \lambda)^\mathsf{T} \mathcal{X}'(t) \\
\psi''(t) &= \left(\nabla_x \nabla_x L(\mathcal{X}(t), \lambda) \; \mathcal{X}'(t)\right)^\mathsf{T} \mathcal{X}'(t) + \nabla_x L(\mathcal{X}(t), \lambda)^\mathsf{T} \mathcal{X}''(t) \\
&= \mathcal{X}'(t)^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\mathcal{X}(t), \lambda) \; \mathcal{X}'(t) + \nabla_x L(\mathcal{X}(t), \lambda)^\mathsf{T} \mathcal{X}''(t)
\end{aligned}$$

Estamos agora em condições de estabelecer o seguinte teorema.

Teorema 2.25 *Sejam $f, h \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$ e $\bar{x} \in X$ é um ponto regular. Se $\bar{x}$ é mínimo local de f em X, então existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tal que*

$$\nabla_x L(\bar{x}, \bar{\lambda}) = 0 \tag{2.28}$$

$$Z^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z \quad \text{é} \quad SPSD \tag{2.29}$$

com Z uma matriz cujas colunas formam uma base de $N(\nabla h(\bar{x})^\mathsf{T})$.

<u>Demonstração</u>: A equação (2.28) resulta directamente da equação (2.25), pois $\bar{x}$ é um ponto regular e estacionário de f. Suponhamos agora que (2.29) é falsa. Então,

$$\exists p \in N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}}) : p^{\mathsf{T}} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) p < 0.$$

Como $\bar{x}$ é um ponto regular, existe um arco admissível $\mathcal{X}(t)$, $t \in [0, b]$, tal que $p = \mathcal{X}'(0)$. Atendendo a (2.28) vem

$$\psi''(0) = p^{\mathsf{T}} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) p < 0.$$

Portanto existe $\bar{b} \in (0, b)$ tal que $\psi''(t) < 0$, $0 \leq t \leq \bar{b} < b$. Deste modo,

$$\psi(t) = \psi(0) + t\psi'(0) + \frac{t^2}{2}\psi''(\bar{t}), \bar{t} \in (0, t).$$

Mas $\psi'(0) = 0$, por $\nabla_x L(\bar{x}, \bar{\lambda}) = 0$. Além disso, $\psi''(\bar{t}) < 0$ e $t = 0$ não pode ser mínimo local de ψ. Mas $\psi(t) = f(\mathcal{X}(t))$ e $\bar{x}$ também não pode ser mínimo de f em X, contrariando a hipótese. $\square$

Finalmente apresentamos uma condição suficiente de optimalidade, cuja demonstração é semelhante à anterior.

Teorema 2.26 *Sejam $f, h \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0\}$ e $\bar{x}$ é um ponto regular de X. Se existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tal que*

$$\begin{array}{rcl} \nabla_x L(\bar{x}, \bar{\lambda}) & = & 0 \\ Z^{\mathsf{T}} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z & \in & SPD \end{array}$$

com Z uma matriz cujas colunas formam uma base de $N(\nabla h(\bar{x})^{\mathsf{T}})$, então $\bar{x}$ é mínimo local de f em X.

Para finalizar esta subsecção, consideremos o seguinte exemplo

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x) = x_1^2 + x_2 \\ \text{sujeito a} & h(x) = -\cos(2x_1) + x_2 = 0 \end{array}$$

Começamos por mostrar que todos os pontos de $\mathbb{R}^2$ são regulares. Com efeito,

$$\nabla h(x)^{\mathsf{T}} = [2\sin(2x_1) \quad 1],$$

e $car(\nabla h(x)^{\mathsf{T}}) = 1$, $\forall x \in \mathbb{R}^2$. Além disso, uma possível escolha para Z é $[-1 \quad 2\sin(2x_1)]^{\mathsf{T}}$.

Os pontos estacionários podem ser calculados resolvendo

$$\left\{ \begin{array}{rcl} Z^{\mathsf{T}} \nabla f(x) & = & 0 \\ h(x) & = & 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} [-1 \quad 2\sin(2x_1)] \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 1 \end{bmatrix} & = & 0 \\ -\cos(2x_1) + x_2 & = & 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} x_1 & = & \sin(2x_1) \\ x_2 & = & \cos(2x_1) \end{array} \right. .$$

Este sistema tem uma solução trivial que é $\bar{x} = [0 \quad 1]^{\mathsf{T}}$ e tem outras duas soluções dadas por $[\pm 0.9477 \quad -0.3189]^{\mathsf{T}}$ (obtidas com a função `fsolve` do *software* MatLab). Atendendo à simetria de f e h em relação à recta $x_1 = 0$, iremos apenas considerar $\hat{x} = [0.9477 \quad -0.3189]^{\mathsf{T}}$.

Relativamente ao ponto $\bar{x} = [0 \quad 1]^\mathsf{T}$, podemos calcular o multiplicador de Langrange $\bar{\lambda}$ associado à restrição $h(x) = 0$ resolvendo

$$\nabla f(\bar{x}) = \bar{\lambda} \nabla h(\bar{x}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \bar{\lambda} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \bar{\lambda} = 1.$$

Como

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

então

$$Z^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z = [-1 \quad 0] \left(\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \bar{\lambda} \begin{bmatrix} 4\cos(2x_1) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right)_{(\bar{x}, \bar{\lambda}) = ([0 \quad 1]^\mathsf{T}, 1)} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} = [-2]$$

é SND pelo que $\bar{x}$ é um máximo local de f em X. Repetindo agora o mesmo raciocínio para $\hat{x}$, então também $\hat{\lambda} = 1$ é solução de $\nabla f(\hat{x}) = \lambda \nabla h(\hat{x})$. Como

$$Z^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\hat{x}, \hat{\lambda}) Z = [3.2757]$$

é SPD então $\bar{x}$ é um mínimo local de f em X.

Para melhor visualização dos extremos de f em X incluímos na figura 2.20 o gráfico e as curvas de nível de f conjuntamente com o conjunto X. Além disso, ilustramos na figura 2.21 as perturbações do gráfico de $L(x, \lambda)$ quando se consideram vários valores de λ.

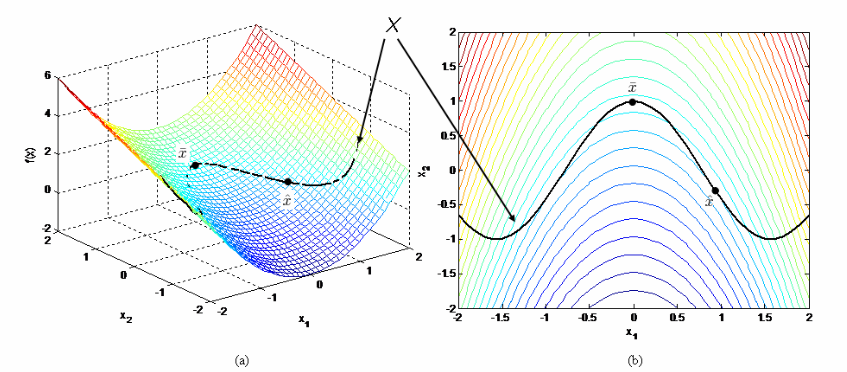


Figura 2.20: Gráfico (a) e curvas de nível (b) da função $f(x) = x_1^2 + x_2$, conjunto $X = \{x \in \mathbb{R}^3 : \cos(x_1) - x_2 = 0\}$, um mínimo ($\hat{x}$) e um máximo local ($\bar{x}$) de f em X.

2.5.3 Condições de optimalidade para programas com restrições não lineares de desigualdade

Consideremos o programa não linear

$$\begin{array}{rl} \mathit{Minimize} & f(x) \\ \text{sujeito a} & g(x) \geq 0 \end{array} \qquad (2.30)$$

com $f, g \in C^1(D)$, $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^p$ e $D \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto que contém $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \geq 0\}$.

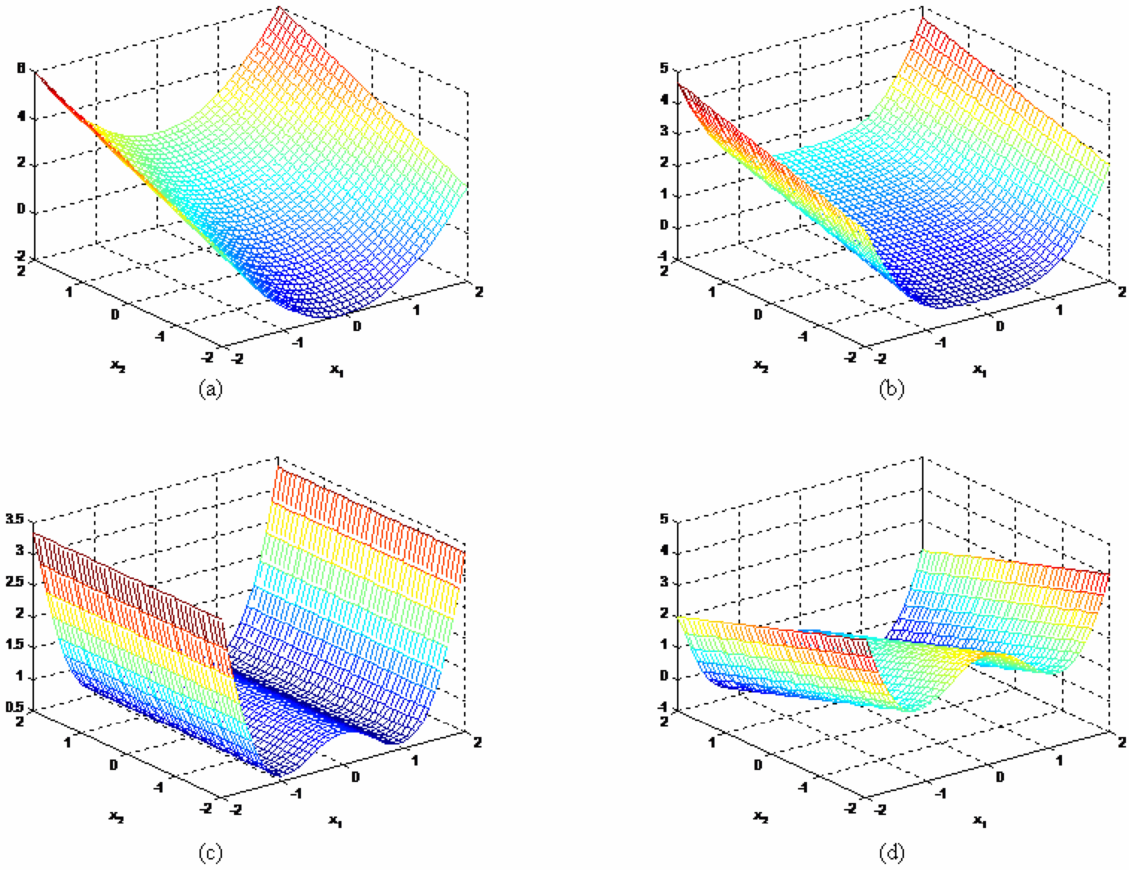


Figura 2.21: Função Lagrangeana $L(x, \lambda)$ com vários valores de λ: (a) $\lambda = 0.0$, (b) $\lambda = 0.5$, (c) $\lambda = 1.0$, (d) $\lambda = 1.5$.

Procedendo do mesmo modo que no caso das restrições lineares, devemos em primeiro lugar identificar os movimentos admissíveis a partir de $\bar{x} \in X$ distingindo as restrições activas (isto é, as que se verificam como igualdade) das inactivas em $\bar{x}$. Seja t o número de restrições activas e considere-se $ACT = \{i_1, \ldots, i_t\}$ o conjunto dos índices i_k das componentes de g correspondentes às restrições activas em $\bar{x}$ (isto é, $g_{i_k}(\bar{x}) = 0, \forall k \in \{1, \ldots, t\}$). Podemos então definir $\bar{g} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^t$, com $\bar{g}_k(x) = g_{i_k}(x), k = 1, \ldots, t$.

Um ponto $\bar{x}$ diz-se regular se e só se $car(\nabla \bar{g}(\bar{x}))^\mathsf{T} = t$. Usando um raciocínio semelhante ao do caso das restrições de igualdade, é possível demonstrar que para $\bar{x}$ regular, os arcos admissíveis $\mathcal{X} : [0, b] \longrightarrow X$ em $\bar{x}$ caracterizam-se por $\nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T} \mathcal{X}'(0) \geq 0$. Assim, o plano tangente em $\bar{x}$ é definido por

$$\mathcal{T}_X(\bar{x}) = \left\{ p \in \mathbb{R}^n : \nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T} p \geq 0 \right\}.$$

A título de exemplo, considere-se o conjunto

$$X = \left\{ (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : g(x) \geq 0 \right\}, \quad g(x) = (x_2, \ -x_1^2 - x_2 + 2, \ x_1^3 - x_2),$$

e os pontos $\bar{x} = [1 \;\; 1]^\mathsf{T}$ e $\hat{x} = [0 \;\; 0]^\mathsf{T}$. No ponto $\bar{x}$, apenas a segunda e a terceira restrição são activas, pelo que $\bar{g}(x) = (-x_1^2 - x_2 + 2,\; x_1^3 - x_2)$. Além disso,

$$\nabla \bar{g}(x)^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} -2x_1 & -1 \\ 3x_1^2 & -1 \end{bmatrix} \Rightarrow car\left(\nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T}\right) = car\left(\begin{bmatrix} -2 & -1 \\ 3 & -1 \end{bmatrix}\right) = 2$$

e $\bar{x}$ é regular. Assim, os vectores tangentes a X em $\bar{x}$ satisfazem

$$\nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T} p \geq 0 \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{lcl} -2p_1 - p_2 & \geq & 0 \\ 3p_1 - p_2 & \geq & 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{lcl} p_2 & \leq & -2p_1 \\ p_2 & \leq & 3p_1 \end{array} \right. .$$

Por outro lado, $\hat{x} = [0 \;\; 0]^\mathsf{T}$ tem como activas a primeira e a terceira restrições. Deste modo, $\bar{g}(x) = (x_2,\; x_1^3 - x_2)$

$$\nabla \bar{g}(x)^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 3x_1^2 & -1 \end{bmatrix} \Rightarrow car\left(\nabla \bar{g}(\hat{x})^\mathsf{T}\right) = car\left(\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right) = 1 < 2$$

e $\hat{x}$ não é regular. Assim podem existir vectores que satisfazem $\nabla \bar{g}(\hat{x})^\mathsf{T} p \geq 0$ e não são tangentes a X, como por exemplo $p = [-1 \;\; 0]^\mathsf{T}$. Com efeito,

$$\nabla \bar{g}(\hat{x})^\mathsf{T} p \geq 0 \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{lcl} p_2 & \geq & 0 \\ -p_2 & \geq & 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow p_2 = 0.$$

Na figura 2.22 podemos visualizar o conjunto X e os pontos $\bar{x}, \hat{x} \in X$. Além disso, a região limitada pelas duas rectas a tracejado contém os vectores tangentes a X no ponto $\bar{x}$.

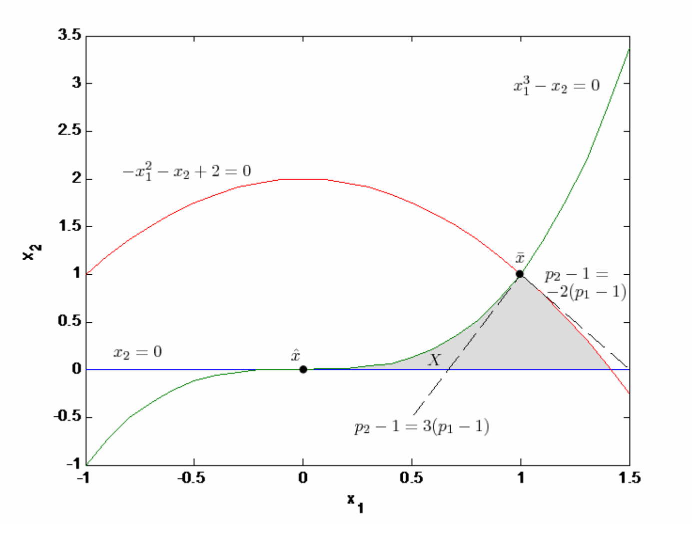


Figura 2.22: Representação do conjunto $X = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_2 \geq 0,\; -x_1^2 - x_2 + 2 \geq 0,\; x_1^3 - x_2 \geq 0\}$, de um ponto regular ($\bar{x}$) e outro não regular ($\hat{x}$) de X.

Apresentamos de seguida as condições necessárias de primeira ordem para que $\bar{x} \in X$ seja ponto estacionário de f em X.

Teorema 2.27 *Sejam $f, g \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \geq 0\}$ e $\bar{g}$ a função constituída pelas componentes de g correspondentes às t restrições activas em $\bar{x}$. Se $\bar{x} \in X$ é um ponto regular e um mínimo local de f em X, então existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^t$ tal que*

$$\left\{ \begin{array}{ccc} \nabla f(\bar{x}) & = & \nabla \bar{g}(\bar{x})\bar{\lambda} \\ \bar{\lambda} & \geq & 0, \end{array} \right.$$

Demonstração: Se $\bar{x} \in X$ é mínimo local de f em X, então $\bar{x}$ é também mínimo local de f em $\bar{X} = \{x \in \mathbb{R}^n : \bar{g}(x) = 0\}$. Deste modo, pelo teorema 2.24, existe um único vector $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^t$ tal que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ é solução de $\nabla f(x) = \nabla \bar{g}(x)\lambda$. Por outro lado, o teorema 2.20 garante que $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X e, portanto,

$$\nabla f(\bar{x})^\mathsf{T} p \geq 0, \quad \forall p \in \mathcal{T}_X(\bar{x}) = \left\{ p \in \mathbb{R}^n : \nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T} p \geq 0 \right\}.$$

Portanto $\bar{\lambda}^\mathsf{T} \nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T} p \geq 0$, para qualquer $p \in \mathcal{T}_X(\bar{x})$ o que implica $\bar{\lambda} \geq 0$. □

Tal como anteriormente, este teorema não permite distinguir se $\bar{x}$ corresponde a um mínimo ou um máximo. Como ilustração, considere-se o programa

$$\min \{f(x) : x \in X\}, \quad f(x) = -x_1^2 + x_2, \quad X = \left\{ x \in \mathbb{R}^2 : x_2 \geq 2x_1^2 \right\}.$$

Então $g : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^1$ é definida por $g(x) = -2x_1^2 + x_2$. Note-se que, f não tem mínimos nem máximos locais em $int(X)$, pois $\nabla f(x) \neq 0, \forall x \in X$. Além disso, o único ponto estacionário de f em X é $\bar{x} = [0 \;\; 0]^\mathsf{T}$ (note-se que todos os pontos de X são regulares), uma vez que é o único vector para o qual existe algum $\bar{\lambda} \geq 0$ (neste caso $\bar{\lambda} = 1$) tal que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ é solução de

$$\left\{ \begin{array}{ccc} \nabla f(x) & = & \lambda \nabla g(x) \\ g(x) & = & 0 \end{array} \right. \tag{2.31}$$

Assim, $\bar{x}$ corresponde a um mínimo local (e global) de f em X uma vez que todos os pontos de X verificam $x_2 \geq 2x_1^2$ e, portanto,

$$\forall x \in X, f(x) = -x_1^2 + x_2 \geq x_1^2 \geq 0 = f(\bar{x}).$$

Se considerarmos agora $X = \left\{ x \in \mathbb{R}^2 : x_2 \geq \frac{1}{2}x_1^2 \right\}$, isto é, se $g(x) = -\frac{1}{2}x_1^2 + x_2$, $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ continua a ser a única solução de (2.31) mas agora $\bar{x}$ não é ponto estacionário de f em X, pois a função cresce ao longo da direcção de $p = [0 \;\; 1]^\mathsf{T}$ e decresce ao percorrer o arco $\mathcal{X}(t) = (t, \frac{1}{2}t^2), t \geq 0$ (na figura 2.19 está representada a função f e a fronteira do conjunto admissível nos dois casos supracitados).

Tal como na secção anterior, o estudo das segundas derivadas permite-nos distinguir entre mínimos e máximos locais de f.

Teorema 2.28 *Sejam $f, g \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \geq 0\}$ e $\bar{g} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^t$ a função constituída pelas componentes de g que correspondem a restrições activas em $\bar{x}$. Se $\bar{x} \in X$ é um ponto regular e mínimo local de f em X, então existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^t$ tal que*

$$\left\{ \begin{array}{ccc} \nabla f(\bar{x}) & = & \nabla \bar{g}(\bar{x})\bar{\lambda} \\ \bar{\lambda} & \geq & 0 \\ Z^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z & \in & \textit{SPSD (se Z existir)}, \end{array} \right.$$

com Z uma matriz cujas colunas formam uma base de $N(\nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T})$.

Demonstração: As duas primeiras condições do sistemas são consequências do teorema 2.27. A última condição obtém-se do teorema 2.25 e do facto de $\bar{x}$ ser um mínimo local de f em $\bar{X} = \{x \in \mathbb{R}^n : \bar{g}(x) = 0\}$. □

Finalmente, apresentamos condições para um ponto estacionário ser um mínimo local de f em X.

Teorema 2.29 *Sejam $f, g \in C^2(D)$, com $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo contendo $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \geq 0\}$, $\bar{x} \in X$ um ponto regular e $\bar{g} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^t$ a função constituída pelas componentes de g que correspondem a restrições activas em $\bar{x}$. Se*

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \exists \bar{\lambda} \in \mathbb{R}^t : \nabla f(\bar{x}) & = & \nabla \bar{g}(\bar{x})\bar{\lambda} \\ \bar{\lambda} & > & 0 \\ Z^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z & \in & SPD \text{ (se } Z \text{ existir)}, \end{array} \right.$$

com Z uma matriz cujas colunas formam uma base de $N(\nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T})$, então $\bar{x}$ é um mínimo local de f em X.

Demonstração: As duas primeiras condições indicam que $\bar{x}$ é ponto estacionário de f em X. Deste modo, $\bar{x}$ é também ponto estacionário de f em $\bar{X} = \{x \in \mathbb{R}^n : \bar{g}(x) = 0\}$. Assim, se $t = |ACT| \geq n$ ou $Z^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z \in SPD$, $\bar{x}$ é mínimo local de f em $\bar{X}$. Consideremos então um qualquer arco admissível $\mathcal{X}$, $t \in [0, b]$, que torne inactiva pelo menos uma das restrições activas em $\bar{x}$ e seja $p = \mathcal{X}'(0)$. Como $\mathcal{X}$ é admissível, então $\nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T} p \geq 0$, sendo necessário distinguir dois casos que se apresentam a seguir.

- Se $p \in N(\nabla \bar{g}(\bar{x})^\mathsf{T})$, consideremos a função

$$\psi(t) = L(\mathcal{X}(t), \bar{\lambda}) = f(\mathcal{X}(t)) - \sum_{k=1}^{t} \bar{\lambda}_k \bar{g}_k(\mathcal{X}(t)).$$

Seja i_r o índice de uma restrição activa que se torna inactiva segundo o arco $\mathcal{X}$, isto é,

$$\bar{g}(\mathcal{X}(t)) > 0, t \in (0, b] \quad \text{e} \quad \psi(0) = f(\mathcal{X}(0)) = f(\bar{x}).$$

Atendendo às fórmulas das derivadas de primeira e segunda ordem para ψ, tem-se:

$$\psi'(0) = \nabla_x L(\bar{x}, \bar{\lambda})^\mathsf{T} \mathcal{X}'(0) = \left(\nabla f(\bar{x}) - \sum_{k=1}^{t} \bar{\lambda}_k \nabla \bar{g}_k(\bar{x}) \right)^\mathsf{T} p = 0$$

e

$$\psi''(0) = p^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda})\, p + \left(\nabla f(\bar{x}) - \sum_{k=1}^{t} \bar{\lambda}_k \nabla \bar{g}_k(\bar{x}) \right)^\mathsf{T} \mathcal{X}''(0) = p^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda})\, p > 0$$

Atendendo à continuidade das funções envolvidas, é possível garantir a existência de um intervalo $(0, \bar{b})$ tal que $\psi''(t) > 0$, $\forall t \in (0, \bar{b})$. Assim, para cada $t \in (0, \bar{b})$ tem-se

$$\psi(t) = \psi(0) + t\psi'(0) + \frac{t^2}{2}\psi''(\varepsilon), \quad \varepsilon \in (0, t).$$

Deste modo, $f(\mathcal{X}(t)) > \psi(t) > \psi(0) = f(\mathcal{X}(0)) = f(\bar{x})$ pelo que o valor de f cresce ao longo de qualquer arco admissível que seja tangente à superfície $\bar{g}(x) = 0$ no ponto $\bar{x}$.

- Se $p = \mathcal{X}'(0) \notin N(\nabla \bar{g}(\bar{x})^{\mathsf{T}})$, então há uma restrição $r \in ACT$ tal que $\nabla \bar{g}_r(\bar{x})^{\mathsf{T}} p > 0$. Definindo

$$\varphi(t) = f(\mathcal{X}(t)), \quad , t \in [0, b]$$

tem-se $\varphi'(0) = \nabla f(\bar{x})^{\mathsf{T}} p = \sum_{k=1}^{t} \bar{\lambda}_k \nabla \bar{g}_k(\bar{x})^{\mathsf{T}} p > 0$. Deste modo, existe $\bar{b} > 0$ tal que $\varphi'(t) > 0$, $\forall t \in (0, \bar{b})$. Consequentemente, para cada $t \in (0, \bar{b})$, verifica-se

$$\varphi(t) = \varphi(0) + t\varphi'(\epsilon), \quad 0 < \epsilon < t < \bar{b} < b.$$

Portanto, $f(\mathcal{X}(t)) = \varphi(t) > \varphi(0) = f(\bar{x})$ e $\bar{x}$ é mínimo local de f em $\bar{x}$.

$\square$

Para terminar esta secção, apresentamos exemplos da determinação dos mínimos e máximos locais de uma função. Consideremos o programa

$$\begin{array}{rl} Minimize & f(x_1, x_2) = e^{x_1} - x_2 \\ \text{sujeito a} & x_2 \geq 1 - (x_1 + 1)^2 \\ & x_2 \geq 1 - (x_1 - 1)^2 \\ & x_2 \leq 2 - x_1^2. \end{array}$$

Note-se que neste exemplo

$$g(x) = \begin{bmatrix} (x_1 + 1)^2 + x_2 - 1 \\ (x_1 - 1)^2 + x_2 - 1 \\ -x_1^2 - x_2 + 2 \end{bmatrix}$$

e que todos os pontos de $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \geq 0\}$ são regulares. De facto,

$$\nabla g(x) = \begin{bmatrix} 2(x_1 + 1) & 2(x_1 - 1) & -2x_1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

pelo que quaisquer duas linhas de $\nabla g(x)$ são linearmente independentes e não existe solução de $g(x) = 0$.

Seguidamente apresentamos a análise dos pontos estacionários $\bar{x}$ com t restrições activas, $t \in \{0, 1, 2\}$. No caso de não haver restrições activas ($\bar{x} \in int(X)$), tem-se

$$\nabla f(x) = [e^{x_1} \quad -1]^{\mathsf{T}} \neq 0.$$

Portanto não há pontos estacionários em $int(X)$.

Se existir apenas uma restrição activa no ponto $\bar{x}$, há a distinguir os seguintes casos

- $g_1(\bar{x}) = 0$. As condições de ponto estacionário constituem o sistema

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla f(x) & = & \lambda \nabla g_1(x) \\ g_1(x) & = & 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{c} e^{x_1} + 2(x_1 + 1) = 0 \\ x_2 = 1 - (x_1 + 1)^2 \\ \lambda = -1 \end{array} \right.$$

que tem solução $\bar{x} = [-1.1572 \quad 0.9753]^{\mathsf{T}}$ e $\bar{\lambda} = -1$. Contudo, $\bar{x}$ não é uma solução admissível para o problema pois $g_3(\bar{x}) = -0.3144 < 0$.

- $g_2(\bar{x}) = 0$. Então,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla f(x) & = & \lambda \nabla g_2(x) \\ g_2(x) & = & 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{c} e^{x_1} + 2(x_1 - 1) = 0 \\ x_2 = 1 - (x_1 - 1)^2 \\ \lambda = -1 \end{array} \right.$$

e obtém-se $\bar{x} = [0.3149 \;\; 0.5307]^\mathsf{T}$ e $\bar{\lambda} = -1$. Então $\bar{x}$ é uma solução admissível mas não é um ponto estacionário.

- $g_3(\bar{x}) = 0$. Neste caso

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla f(x) & = & \lambda \nabla g_3(x) \\ g_3(x) & = & 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{c} e^{x_1} - 2x_1 = 0 \\ x_2 = 2 - x_1^2 \\ \lambda = 1 \end{array} \right.$$

originando $\bar{x} = [-0.3517 \;\; 1.8763]^\mathsf{T}$ e $\bar{\lambda} = 1$. Então, $\bar{x}$ é uma solução admissível e um ponto estacionário regular de f em X. Além disso, $\bar{x}$ é um mínimo local de f em X. Com efeito, $Z = [1 \;\; 0.7035]^\mathsf{T}$ é uma base de $N(\nabla g_3(\bar{x})^\mathsf{T})$ e tem-se

$$Z^\mathsf{T} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.7035 \end{bmatrix}^\mathsf{T} \begin{bmatrix} 2.7035 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0.7035 \end{bmatrix} = [2.7035] \in SPD.$$

Faltam considerar os casos em que existem duas restrições activas em simultâneo. Assim, denotando por $\bar{g}$ as componentes de g correspondentes às restrições activas em $\bar{x}$, há três casos possíveis:

- $\bar{g}(x) = \begin{bmatrix} (x_1+1)^2 + x_2 - 1 \\ -x_1^2 - x_2 + 2 \end{bmatrix}$. Então

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla f(x) & = & \nabla \bar{g}(x) \lambda \\ \bar{g}(x) & = & 0 \end{array} \right. \Rightarrow \bar{x} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \;\; \bar{\lambda} = \begin{bmatrix} \frac{e^{-1}-2}{2} \\ \frac{e^{-1}}{2} \end{bmatrix}$$

e $\bar{x}$ não é um ponto estacionário de f em X, pois existem multiplicadores de Langrange de sinais contrários.

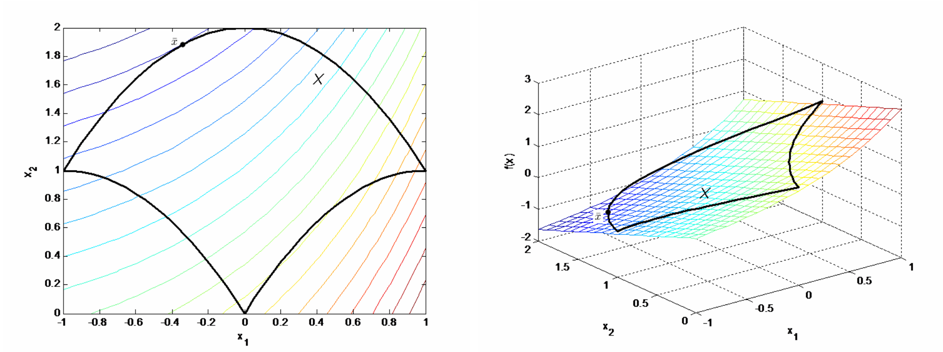
- $\bar{g}(x) = \begin{bmatrix} (x_1-1)^2 + x_2 - 1 \\ -x_1^2 - x_2 + 2 \end{bmatrix}$. A solução do sistema é $\bar{x} = [1 \;\; 1]^\mathsf{T}$ e $\bar{\lambda} = [-\frac{e^1+2}{2} \;\; -\frac{e^1}{2}]^\mathsf{T}$. Como $\bar{\lambda} < 0$, $\bar{x}$ não é um ponto estacionário para o programa $\min\{f(x) : x \in X\}$.

- $\bar{g}(x) = \begin{bmatrix} (x_1+1)^2 + x_2 - 1 \\ (x_1-1)^2 + x_2 - 1 \end{bmatrix}$. Neste caso obtemos $\bar{x} = [0 \;\; 0]^\mathsf{T}$, $\bar{\lambda} = [-1/4 \;\; -3/4]^\mathsf{T}$ e portanto $\bar{x}$ não é ponto estacionário do programa $\min\{f(x) : x \in X\}$.

Na figura 2.23 ilustra-se a região admissível e o gráfico da função para o exemplo apresentado, estando também marcado o mínimo $\bar{x}$ de f em X.

Consideremos agora o programa

$$\begin{array}{rl} Maximize & f(x_1, x_2) = e^{x_1} - x_2 \\ \text{sujeito a} & x_2 \geq 1 - (x_1+1)^2 \\ & x_2 \geq 1 - (x_1-1)^2 \\ & x_2 \leq 2 - x_1^2. \end{array}$$



(a) (b)

Figura 2.23: Gráfico de $f(x) = e^{x_1} - x_2$, região admissível do programa $\min\{f(x) : g(x) \geq 0\}$, com $g(x) = ((x_1+1)^2 + x_2 - 1, (x_1-1)^2 + x_2 - 1, -x_1^2 - x_2 + 2)$ e $\bar{x}$ é o mínimo local deste programa.

Então o conjunto admissível X é o mesmo do que o do problema anterior e facilmente se conclui que o único candidato a ponto estacionário com apenas uma restrição activa se obtém quando $g_2(x) = 0$. Neste caso, como vimos anteriormente, $\bar{x} = [0.3149 \quad 0.5307]^{\mathsf{T}}$ e $\bar{\lambda} = -1 < 0$, mas não é máximo local uma vez que $Z = [1 \quad 1.3702]^{\mathsf{T}}$ é uma base de $N(\nabla g_2(\bar{x})^{\mathsf{T}})$ e $Z^{\mathsf{T}} \nabla^2_{xx} L(\bar{x}, \bar{\lambda}) Z = [3.3702] \in SPD$.

No que diz respeito ao caso de 2 restrições activas existem dois casos que conduzem a pontos estacionários:

- $\bar{g}(x) = \begin{bmatrix} (x_1+1)^2 + x_2 - 1 \\ (x_1-1)^2 + x_2 - 1 \end{bmatrix}$. Neste caso obtemos $\bar{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, $\bar{\lambda} = \begin{bmatrix} -1/4 \\ -3/4 \end{bmatrix} < 0$ e portanto $\bar{x}$ é um máximo local de f em X.

- $\bar{g}(x) = \begin{bmatrix} (x_1-1)^2 + x_2 - 1 \\ -x_1^2 - x_2 + 2 \end{bmatrix}$, que corresponde à solução $\bar{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ e $\bar{\lambda} = \begin{bmatrix} -\frac{e^1+2}{2} \\ -\frac{e^1}{2} \end{bmatrix}$. Uma vez que $\lambda < 0$, então $\bar{x}$ é outro máximo local (e neste caso, também global) de f em X.

Bibliografia

[1] M. Bazaraa, H. Sherali and C. Shetty. *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms.* John Wiley, New York, 2006.

[2] Aharon Ben-Tal and Arkadi Nemirovski. *Lectures on Modern Convex Optimization.* SIAM, Philadelphia, 2001.

[3] D. Bertsekas. *Nonlinear Programming.* Athena Scientific, Massaschusetts, 1995.

[4] D. Bertsekas. *Convex Analysis and Optimization.* Athena Scientific, Massaschusetts, 2003.

[5] J. Dennis and R. Schnabel *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations.* Prentice-Hall, New Jersey, 1983.

[6] E. Fernandes. *Computação Numérica.* Universidade do Minho, Braga, 1998.

[7] A. Friedlander. *Elementos de Programação Não-Linear.* Unicamp, Campinas, 1994.

[8] G. Golub and C. Van Loan. *Matrix Computations.* The Johns Hopkins University Press, 1996.

[9] R. Horst, P. Pardalos and N. Van Thoai. *Introduction to Global Optimization.* Kluwer Academic Publishers, New York, 2000.

[10] J. Júdice e J. Patrício. *Sistemas de Equações Lineares.* Departamento de Matemática, Universidade de Coimbra, 1993.

[11] D. Li and X. Sun. *Nonlinear Integer Programming.* Springer, New York, 2006.

[12] B. Martos. *Nonlinear Programming: Theory and Methods.* North-Holland, New York, 1975.

[13] K. Murty. *Optimization Models for Decision Making.* Springer, New York, 2010.

[14] S. Nash and A. Sofer. *Linear and Nonlinear Programming.* Mc. GrawHill, New York, 1996.

[15] J. Nocedal and S. Wright. *Numerical Optimization.* Springer, New York, 1999.

[16] R. T. Rockafellar. *Convex Analysis.* Princeton University Press, 1997.

[17] L.N. Vicente. *Elementos de Análise Convexa e Optimização.* Departamento de Matemática, Universidade de Coimbra, 2000.