Otimização contínua

Ademir Alves Ribeiro

PPGM - UFPR

Março/2019

Aplicações da Matemática

Problemas reais em diversas áreas podem ser formulados matematicamente, dentre os quais:

- Análise de crédito (risco)
- Corte de barras e chapas (retalhos)
- Designação (pessoas e tarefas) (lucro)
- Diagnóstico de doenças (risco)
- Dieta nutricional (custo)
- Engenharia (Civil, Elétrica, Mecânica, etc) (confiabilidade)
- Formulação de misturas (lucro)
- Logística - transporte (custo)
- Aprendizagem de máquina (erro de avaliação)

Objetivo: minimizar ou maximizar certa função, chamada função objetivo.

Aplicações da Matemática

Problemas reais em diversas áreas podem ser formulados matematicamente, dentre os quais:

- Análise de crédito (risco)
- Corte de barras e chapas (retalhos)
- Designação (pessoas e tarefas) (lucro)
- Diagnóstico de doenças (risco)
- Dieta nutricional (custo)
- Engenharia (Civil, Elétrica, Mecânica, etc) (confiabilidade)
- Formulação de misturas (lucro)
- Logística - transporte (custo)
- Aprendizagem de máquina (erro de avaliação)

Objetivo: minimizar ou maximizar certa função, chamada função objetivo.

Aplicações da Matemática

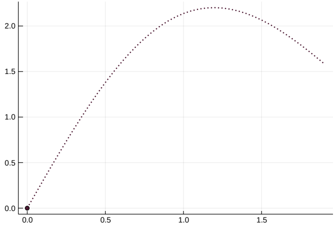
Problemas reais em diversas áreas podem ser formulados matematicamente, dentre os quais:

- Análise de crédito (risco)
- Corte de barras e chapas (retalhos)
- Designação (pessoas e tarefas) (lucro)
- Diagnóstico de doenças (risco)
- Dieta nutricional (custo)
- Engenharia (Civil, Elétrica, Mecânica, etc) (confiabilidade)
- Formulação de misturas (lucro)
- Logística - transporte (custo)
- Aprendizagem de máquina (erro de avaliação)

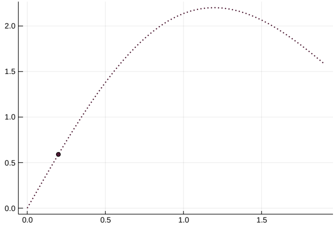
Objetivo: minimizar ou maximizar certa função, chamada função objetivo.

Exemplo 1: Calha

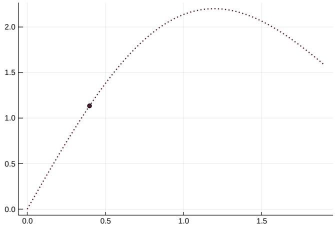
Exemplo 1: Calha



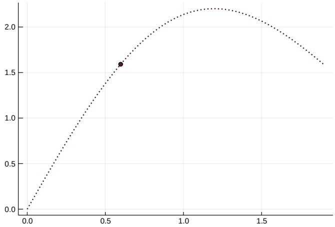
Exemplo 1: Calha



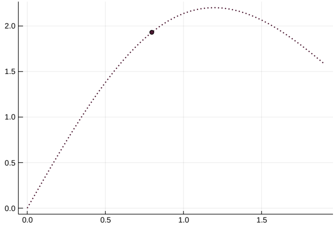
Exemplo 1: Calha



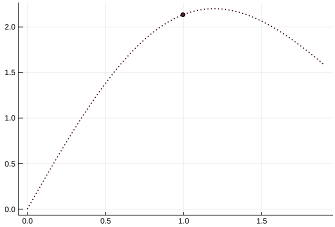
Exemplo 1: Calha



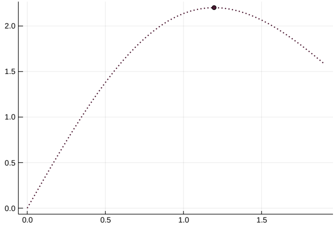
Exemplo 1: Calha



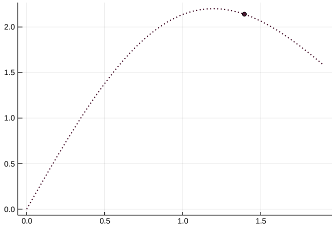
Exemplo 1: Calha



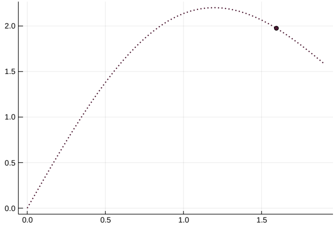
Exemplo 1: Calha



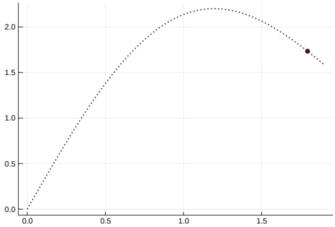
Exemplo 1: Calha



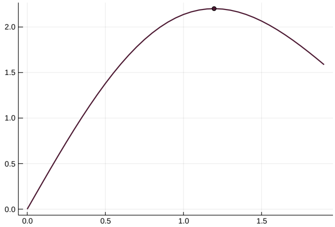
Exemplo 1: Calha



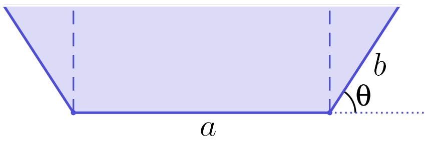
Exemplo 1: Calha



Exemplo 1: Configuração ótima



Exemplo 1: Formulação matemática

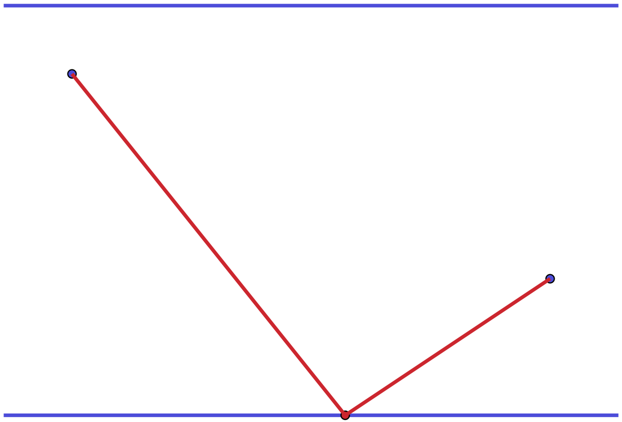


Problema de otimização

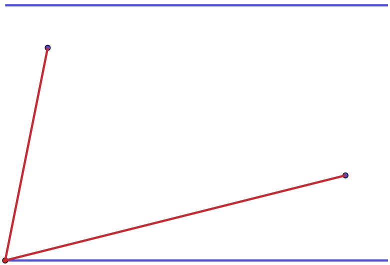
$$\begin{array}{ll} \text{maximizar} & f(\theta) = ab\sin(\theta) + \dfrac{b^2}{2}\sin(2\theta) \\ \text{sujeito a} & \theta \in [0, \bar{\theta}]. \end{array}$$

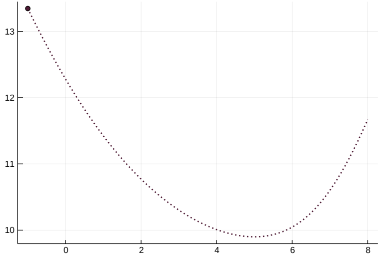
Exemplo 2: Subestação de energia

Exemplo 2: Subestação de energia

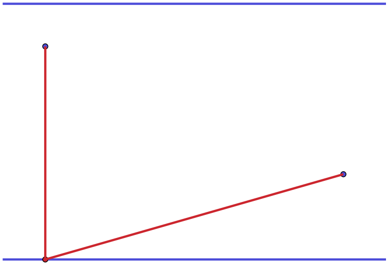


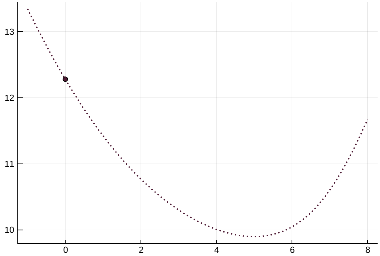
Exemplo 2: Subestação de energia



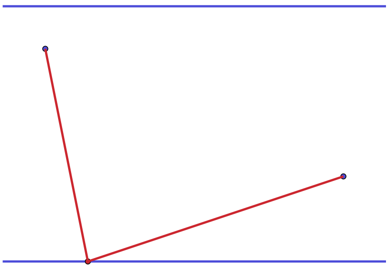


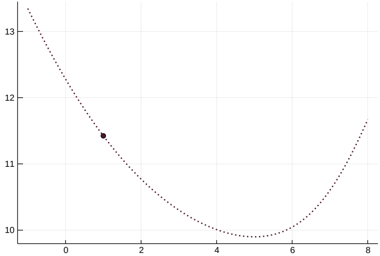
Exemplo 2: Subestação de energia



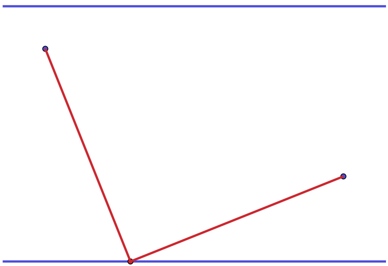


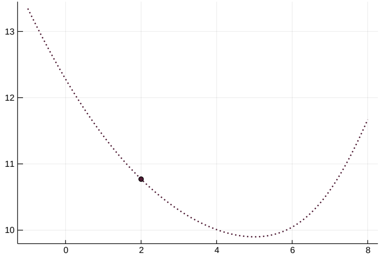
Exemplo 2: Subestação de energia



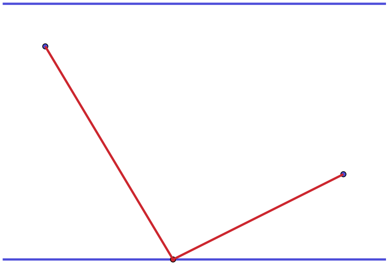


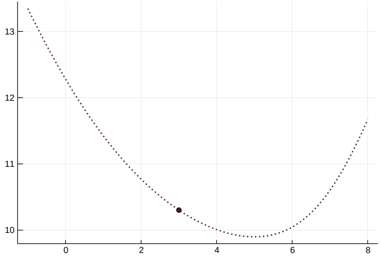
Exemplo 2: Subestação de energia



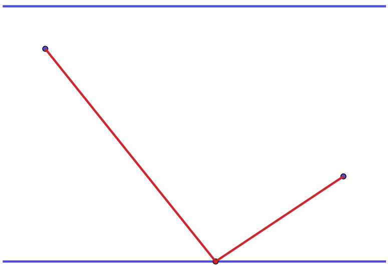


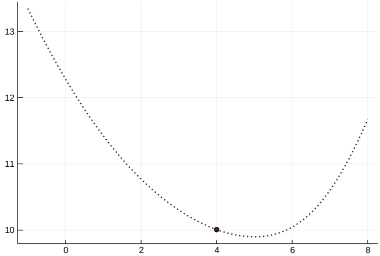
Exemplo 2: Subestação de energia



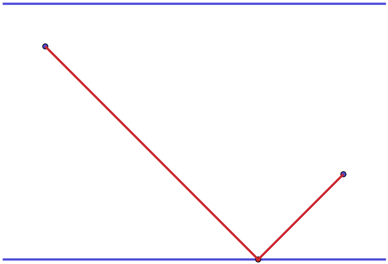


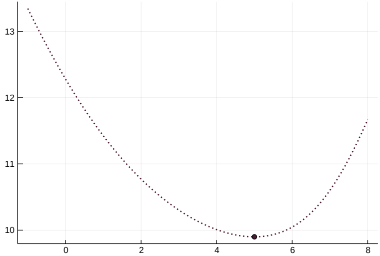
Exemplo 2: Subestação de energia



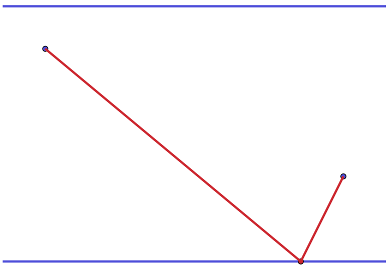


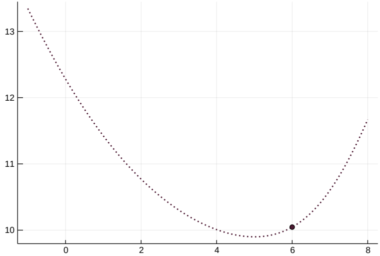
Exemplo 2: Subestação de energia



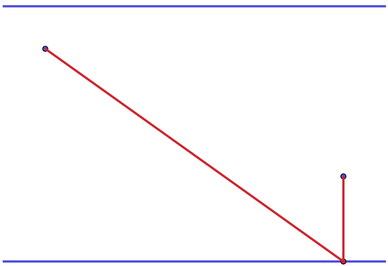


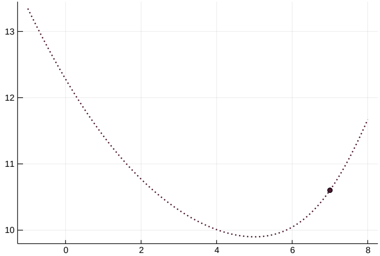
Exemplo 2: Subestação de energia



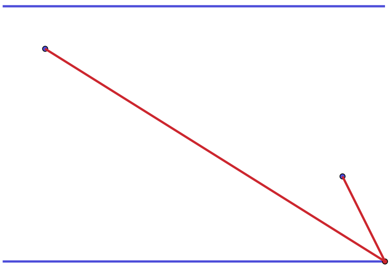


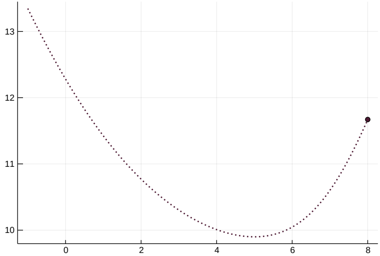
Exemplo 2: Subestação de energia



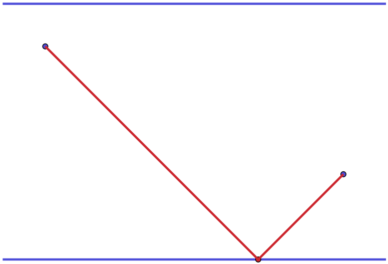


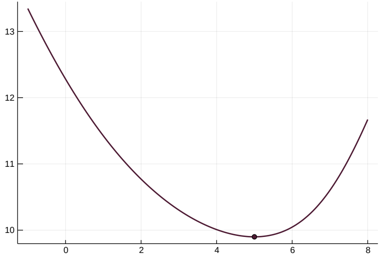
Exemplo 2: Subestação de energia



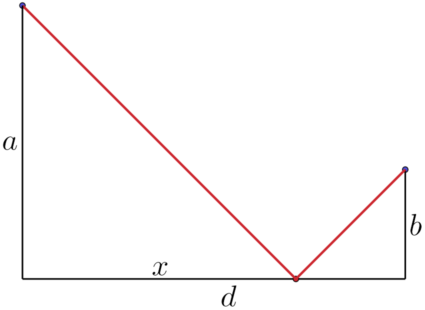


Exemplo 2: Configuração ótima





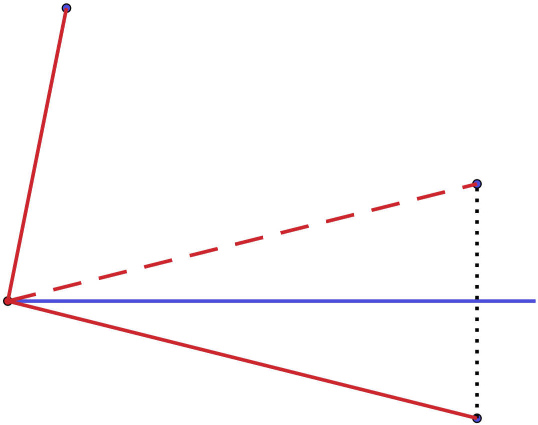
Exemplo 2: Formulação matemática



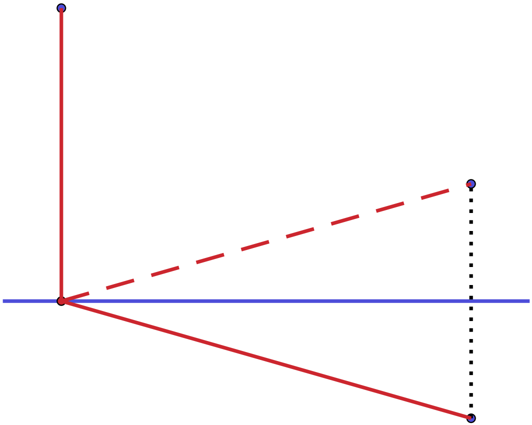
Problema de otimização

minimizar $f(x) = \sqrt{a^2 + x^2} + \sqrt{b^2 + (d - x)^2}$

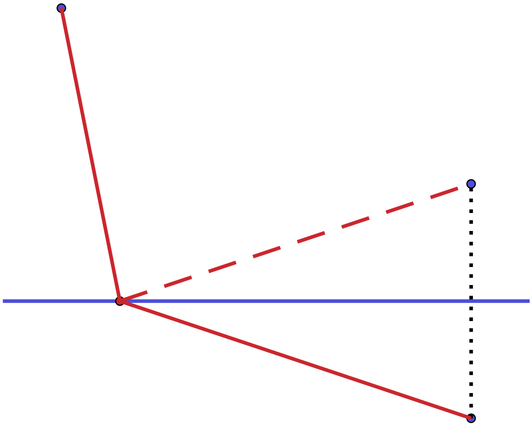
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



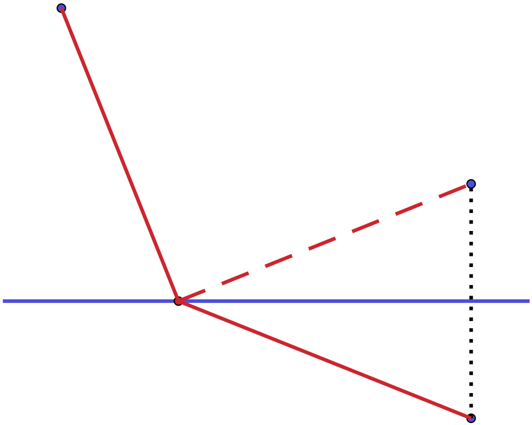
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



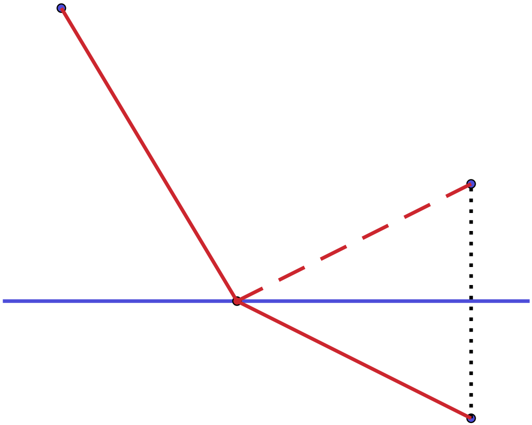
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



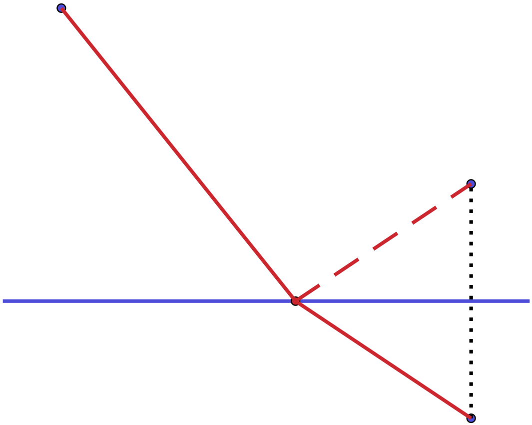
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



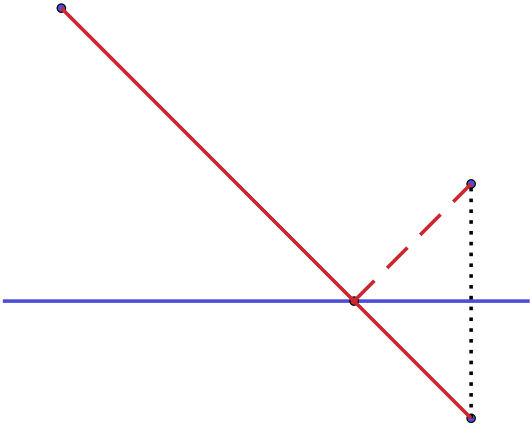
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



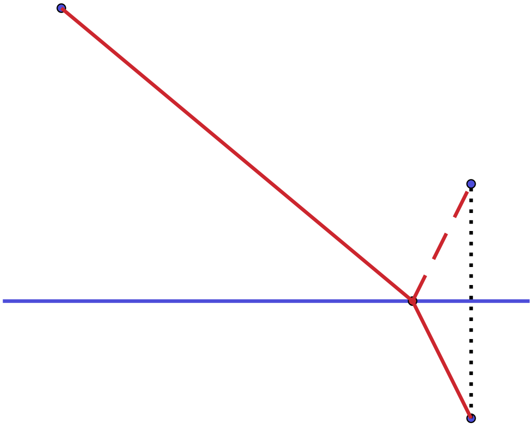
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



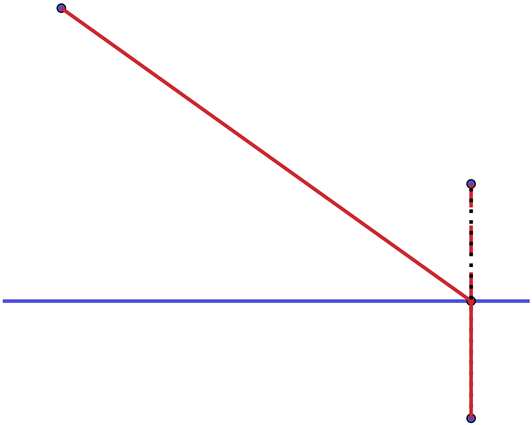
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



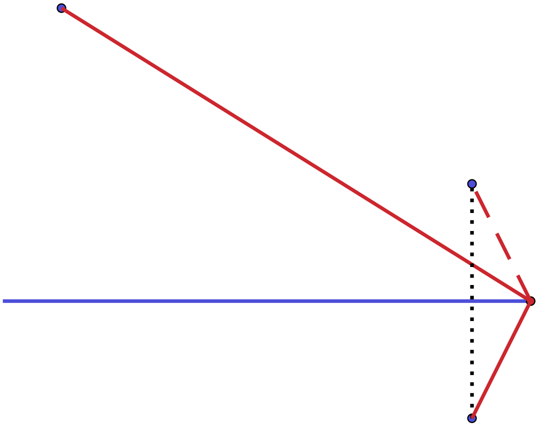
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



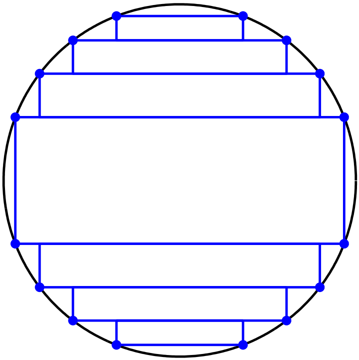
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



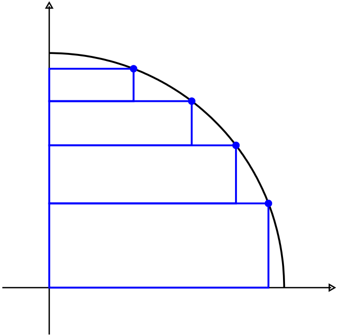
Exemplo 2: Solução usando geometria analítica



Exemplo 3: Barras condutoras de energia



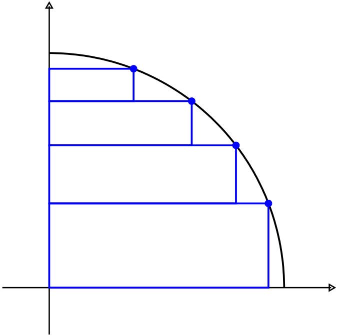
Exemplo 3: Formulação matemática



Problema de otimização com restrições

$$\begin{array}{ll} \text{maximizar} & f\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{4} x_i y_i - \sum_{i=1}^{3} x_{i+1} y_i \\ \text{sujeito a} & x_i^2 + y_i^2 - r^2 = 0, \ i = 1, \dots, 4 \\ & x, y \geq 0. \end{array}$$

Exemplo 3: Formulação matemática

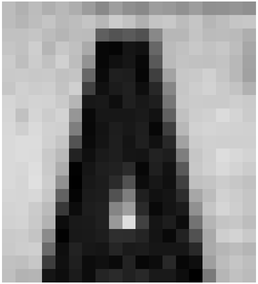


Problema de otimização com restrições

$$\begin{array}{ll} \text{maximizar} & f\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{4} x_i y_i - \sum_{i=1}^{3} x_{i+1} y_i \\ \text{sujeito a} & x_i^2 + y_i^2 - r^2 = 0, \ i = 1, \ldots, 4 \\ & x, y \geq 0. \end{array}$$

Exemplo 4: Aprendizagem de máquina

Exemplo 4: Aprendizagem de máquina



Exemplo 4: Aprendizagem de máquina

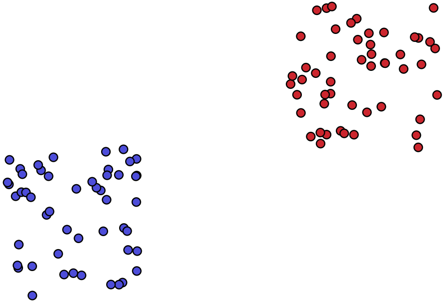
$$\rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1} & \cdots & a_{pq} \end{pmatrix}_{p\times q} \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

Exemplo 4: Aprendizagem de máquina

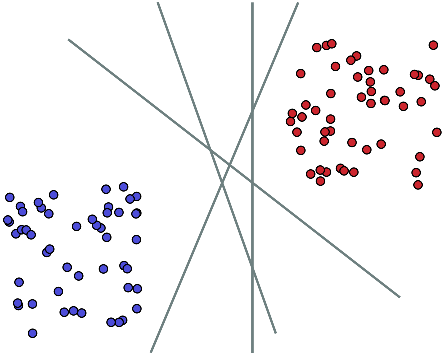
Problema de classificação

Dado um vetor $x \in \mathbb{R}^n$, como decidir qual classe ele representa?

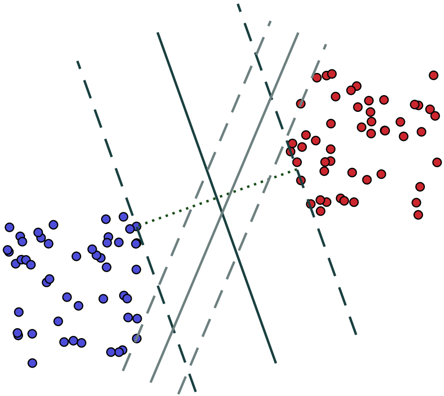
Exemplo 4: Aprendizagem de máquina



Exemplo 4: Aprendizagem de máquina



Exemplo 4: Aprendizagem de máquina



Exemplo 4: Aprendizagem de máquina

Problema de otimização com restrições

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f\begin{pmatrix} w \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\|w\|^2 \\ \text{sujeito a} & y_i(w^T x^i + b) \geq 1. \end{array}$$

Programação não linear

Problema geral

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & g(x) \leq 0 \\ & h(x) = 0 \end{array}$$

- $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$, $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$
- $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) \leq 0, h(x) = 0\}$

Programação não linear

Desafio

Desenvolver algoritmos computacionais robustos e eficientes para resolver os problemas.

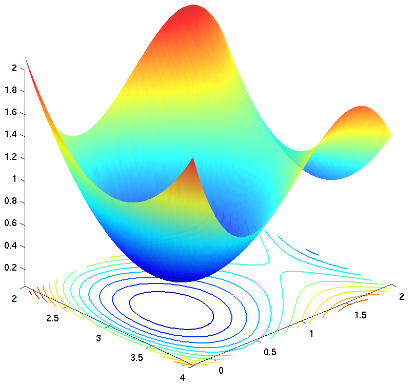
O interesse pode ser do ponto de vista:

- teórico,
- computacional,
- ou de aplicação.

Problema irrestrito e condições de otimalidade

Problema irrestrito

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ x \in \mathbb{R}^n & \end{array}$$



Condições de otimalidade

Teorema

Se x^* é um minimizador local, então

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

Condições de otimalidade - problemas com restrições

- Problemas com restrições de igualdade
  Joseph Louis Lagrange.

Problema

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & h(x) = 0 \end{array}$$

Condições de otimalidade - restrições de igualdade

Teorema - Condição de Otimalidade de Lagrange

Se $x^* \in \Omega$ é solução, então existe $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$, conhecido como multiplicador de Lagrange, tal que

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

Condições de otimalidade - problemas com restrições gerais

- Problemas com restrições de igualdade e desigualdade
  F. John (1948), H. W. Kuhn, A. W. Tucker (1951) e W. Karush (1939 - mestrado).

Problema

$$
\begin{array}{ll}
\text{minimizar} & f(x) \\
\text{sujeito a} & g(x) \leq 0 \\
 & h(x) = 0
\end{array}
$$

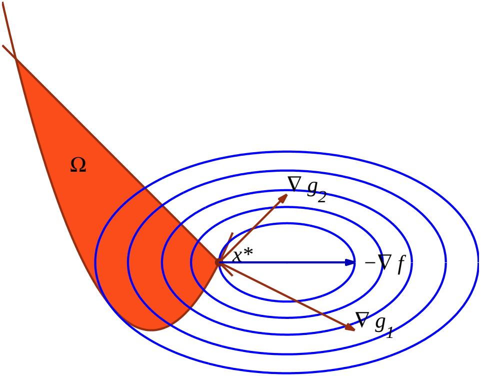
Condições de otimalidade - restrições gerais

Teorema - Condições de Otimalidade de Karush-Kuhn-Tucker

Se um ponto $x^* \in \Omega$ é uma solução do problema e satisfaz uma condição de qualificação, então existem $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ e $\mu^* \in \mathbb{R}^p$ tais que

$$\begin{aligned} -\nabla f(x^*) &= \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* \nabla h_i(x^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla g_j(x^*) \\ \mu_j^* &\geq 0 \quad j = 1, \ldots, p \\ \mu_j^* g_j(x^*) &= 0 \quad j = 1, \ldots, p. \end{aligned}$$

Condição de otimalidade satisfeita



Exemplo 1 - solução obtida de modo direto

Problema irrestrito

$$\underset{x \in \mathbb{R}}{\text{minimizar}} \quad f(x) = \frac{x^3}{3} - x^2 + 2$$

Derivada

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

Solução

$$x^* = 2$$

Exemplo 1 - solução obtida de modo direto

Problema irrestrito

$$\text{minimizar} \quad f(x) = \frac{x^3}{3} - x^2 + 2$$
$$x \in \mathbb{R}$$

Derivada

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

Solução

$$x^* = 2$$

Exemplo 1 - solução obtida de modo direto

Problema irrestrito

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) = \dfrac{x^3}{3} - x^2 + 2 \\ x \in \mathbb{R} & \end{array}$$

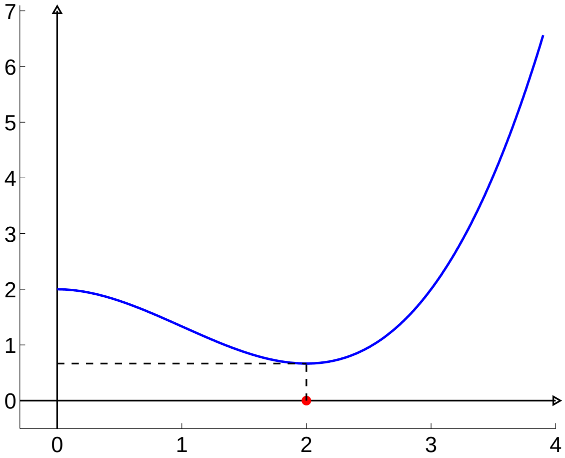
Derivada

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

Solução

$$x^* = 2$$

Exemplo 1



Exemplo 2 - solução obtida apenas de modo aproximado

Problema irrestrito

$$\text{minimizar} \quad f(x) = \frac{\sin x}{x}$$
$$x \in \mathbb{R}$$

Solução

$$x^* = ?$$

Solução

$$\tan x^* = x^*$$

Exemplo 2 - solução obtida apenas de modo aproximado

Problema irrestrito

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) = \dfrac{\sin x}{x} \\ x \in \mathbb{R} & \end{array}$$

Solução

$$x^* = ?$$

Solução

$$\tan x^* = x^*$$

Exemplo 2 - solução obtida apenas de modo aproximado

Problema irrestrito

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) = \dfrac{\sin x}{x} \\ x \in \mathbb{R} & \end{array}$$

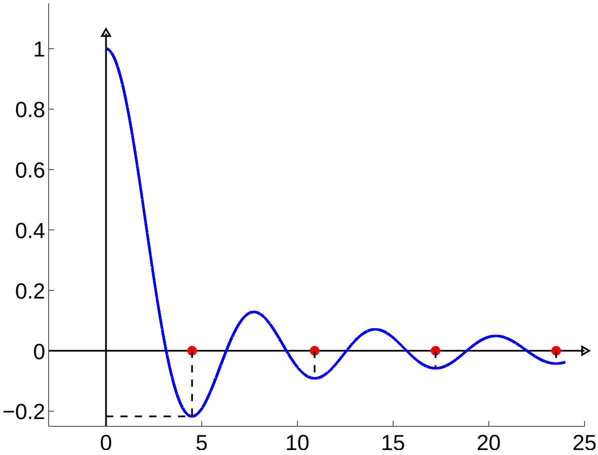
Solução

$$x^* = ?$$

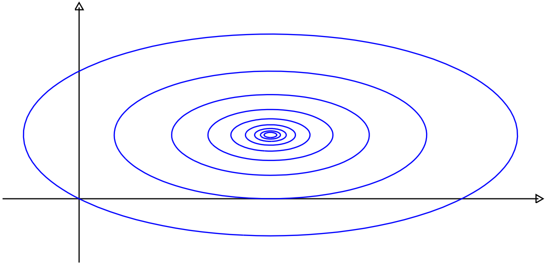
Solução

$$\tan x^* = x^*$$

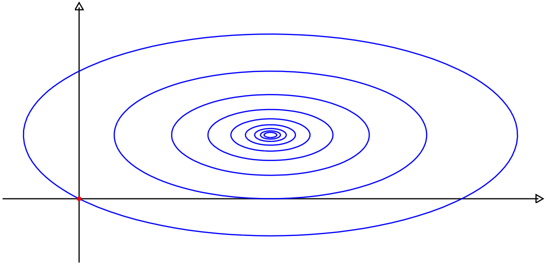
Exemplo 2



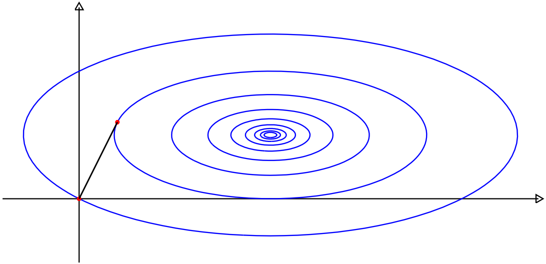
Algoritmo de Cauchy



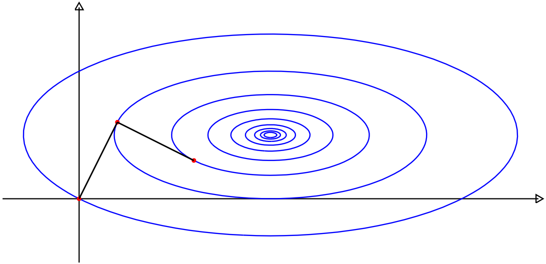
Algoritmo de Cauchy



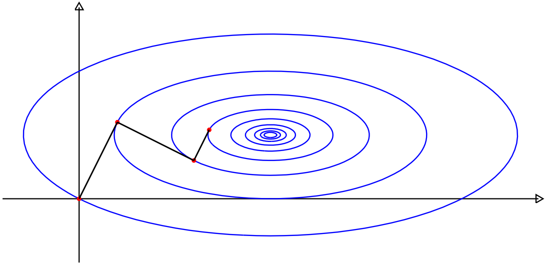
Algoritmo de Cauchy



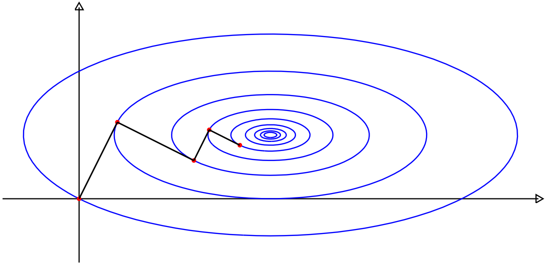
Algoritmo de Cauchy



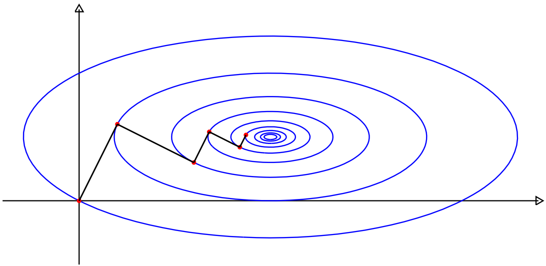
Algoritmo de Cauchy



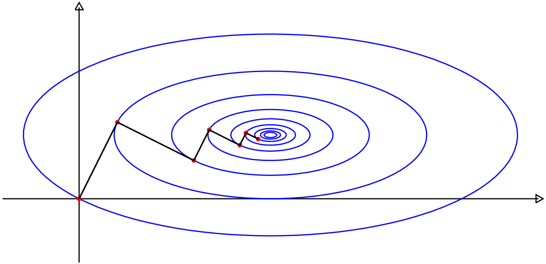
Algoritmo de Cauchy



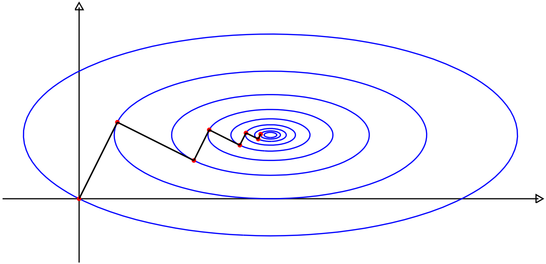
Algoritmo de Cauchy



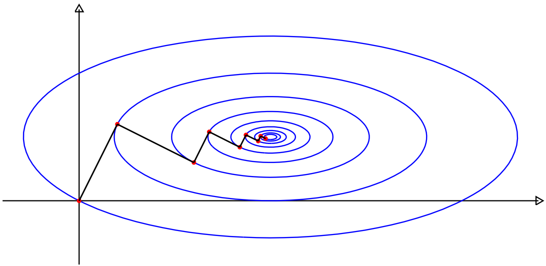
Algoritmo de Cauchy



Algoritmo de Cauchy



Algoritmo de Cauchy



Algoritmos clássicos

- Método do gradiente
- Método de Newton
- Métodos Quase-Newton
- Método de gradientes conjugados
- Método de região de confiança

Interesse teórico

Considere a sequência gerada pelo algoritmo.

- A sequência tem ponto de acumulação?
- Algum ponto de acumulação é estacionário?
- Todos os pontos de acumulação são estacionários?
- A sequência converge? Com que velocidade?
- Qual a complexidade do algoritmo proposto para determinada classe de problemas?

Interesse teórico

Considere a sequência gerada pelo algoritmo.

- A sequência tem ponto de acumulação?
- Algum ponto de acumulação é estacionário?
- Todos os pontos de acumulação são estacionários?
- A sequência converge? Com que velocidade?
- Qual a complexidade do algoritmo proposto para determinada classe de problemas?

Interesse teórico

Considere a sequência gerada pelo algoritmo.

- A sequência tem ponto de acumulação?
- Algum ponto de acumulação é estacionário?
- Todos os pontos de acumulação são estacionários?
- A sequência converge? Com que velocidade?
- Qual a complexidade do algoritmo proposto para determinada classe de problemas?

Interesse teórico

Considere a sequência gerada pelo algoritmo.

- A sequência tem ponto de acumulação?
- Algum ponto de acumulação é estacionário?
- Todos os pontos de acumulação são estacionários?
- A sequência converge? Com que velocidade?
- Qual a complexidade do algoritmo proposto para determinada classe de problemas?

Interesse teórico

Considere a sequência gerada pelo algoritmo.

- A sequência tem ponto de acumulação?
- Algum ponto de acumulação é estacionário?
- Todos os pontos de acumulação são estacionários?
- A sequência converge? Com que velocidade?
- Qual a complexidade do algoritmo proposto para determinada classe de problemas?

Interesse computacional

- Implementação computacional.
  - Como escolher a direção de busca?
  - Como calcular o comprimento do passo?
  - Proposta de novos algoritmos.
- Testes computacionais.
  - Comparação com outros algoritmos existentes.
  - Escolha dos problemas a serem testados.
  - O algoritmo é eficiente?
  - O algoritmo é robusto?
- Análise dos resultados.
  - É possível melhorar a eficiência e robustez?

Interesse computacional

- Implementação computacional.
  - Como escolher a direção de busca?
  - Como calcular o comprimento do passo?
  - Proposta de novos algoritmos.
- Testes computacionais.
  - Comparação com outros algoritmos existentes.
  - Escolha dos problemas a serem testados.
  - O algoritmo é eficiente?
  - O algoritmo é robusto?
- Análise dos resultados.
  - É possível melhorar a eficiência e robustez?

Interesse computacional

- Implementação computacional.
  - Como escolher a direção de busca?
  - Como calcular o comprimento do passo?
  - Proposta de novos algoritmos.
- Testes computacionais.
  - Comparação com outros algoritmos existentes.
  - Escolha dos problemas a serem testados.
  - O algoritmo é eficiente?
  - O algoritmo é robusto?
- Análise dos resultados.
  - É possível melhorar a eficiência e robustez?

Interesse prático

- Uso dos algoritmos na resolução de problemas reais.
    - Modelagem matemática do problema.
    - Aplicação do método para sua resolução.
    - Análise dos resultados.

Conclusões

O que vimos aqui é insuficiente para dar uma idéia da gama de aplicações, curiosidades e sutilezas que tem a matemática. Vários campos da ciência fazem uso das ferramentas de otimização, com o objetivo de ajudar na tomada de decisões:

- Economia
- Engenharia
- Informática
- Logística - transporte
- Medicina
- Processos sísmicos

Quase sempre o objetivo é minimizar ou maximizar certa variável, como o custo ou o lucro em determinado processo.

Ementa da disciplina

- Otimização sem restrições. Condições de otimalidade e convexidade.
- Teorema global de convergência. Velocidade de convergência.
- Métodos de busca unidimensional.
- Métodos clássicos: Gradiente e Newton. Métodos Quase-Newton e Gradiente conjugado.
- Condições de otimalidade para problemas com restrições de igualdade e desigualdade. Teorema de Karush-Kuhn-Tucker.