

Introdução

Marina Andretta

ICMC-USP

4 de agosto de 2014

Baseado no livro Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright.

Otimizar significa encontrar a melhor maneira de fazer algo, dada uma medida do que é ser “melhor”.

Estamos sempre otimizando:

- Quando fazemos compras, queremos minimizar o dinheiro gasto, ou maximizar a qualidade do que foi comprado;
- Quando fazemos matrícula, queremos fazer o maior número possível de disciplinas, sem, no entanto, prejudicar nosso desempenho;
- Quando organizamos as horas de estudo, queremos aprender o máximo possível, de preferência no menor tempo.

Formulação matemática

Matematicamente falando, otimizar significa maximizar ou minimizar uma função sujeita a restrições a suas variáveis. Usaremos a seguinte notação:

- x é um vetor de **variáveis**, também chamadas de **incógnitas** ou **parâmetros**;
- f é a **função objetivo**, a função de x que deve ser minimizada ou maximizada;
- c é um vetor de **restrições** que o ponto x deve satisfazer. Este é um vetor de funções de x . O número de componentes de c é o número de restrições em x .

Assim, podemos escrever problemas de otimização da seguinte maneira:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) \\ \text{sujeita a} & c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \\ & c_i(x) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \end{array} \quad (1)$$

onde

- $x \in \mathbf{R}^n$, $f \in \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$, $c_i \in \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$,
- \mathcal{E} e \mathcal{I} são conjuntos de índices.

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \\ \text{sujeita a} & x_1^2 - x_2 \leq 0, \\ & x_1 + x_2 \leq 2. \end{array}$$

Este problema pode ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \\ \text{sujeita a} & c(x) = \begin{bmatrix} c_1(x) \\ c_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x_1^2 + x_2 \\ -x_1 - x_2 + 2 \end{bmatrix}, \\ & \mathcal{I} = \{1, 2\}, \mathcal{E} = \emptyset. \end{array}$$

Exemplo

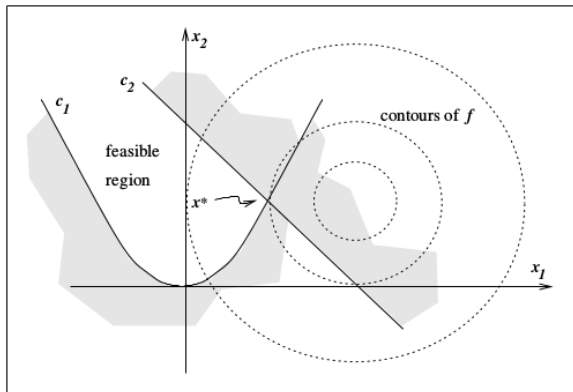


Figura : Exemplo de problema de otimização (Figura 1.1 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Note que um problema de **maximizar** f pode ser substituído por um problema de **minimizar** $-f$.

Problemas de otimização em geral podem ser escritos usando a formulação (1), que chamaremos de **formulação padrão**.

Exemplo: problema de transporte

Uma empresa química tem 2 fábricas F_1 e F_2 e 12 clientes R_1, R_2, \dots, R_{12} . Cada fábrica F_i pode produzir a_i toneladas de um certo produto químico por semana; a_i é chamado capacidade da planta. Cada cliente R_j possui uma demanda conhecida b_j de toneladas de um produto por semana. O custo de enviar uma tonelada de produto da fábrica F_i para o cliente R_j é c_{ij} .

O problema é determinar quanto do produto enviar de cada fábrica para cada cliente de modo a satisfazer todas as restrições e minimizar o custo. As variáveis do problema são x_{ij} , $i = 1, 2$, $j = 1, \dots, 12$, onde x_{ij} é o número de toneladas do produto enviado da fábrica F_i ao cliente R_j .

Exemplo: problema de transporte

Minimizar $\sum_{ij} c_{ij}x_{ij}$

sujeita a $\sum_{j=1}^{12} x_{ij} \leq a_i, \quad i = 1, 2,$

$\sum_{i=1}^2 x_{ij} \geq b_j, \quad j = 1, \dots, 12,$

$x_{ij} \geq 0, \quad i = 1, 2, \quad j = 1, \dots, 12,$

Em alguns casos, o valor das variáveis pode somente assumir valores inteiros.

Suponha que a empresa do exemplo anterior fabricasse pratos, no lugar de produtos químicos. Neste caso, a quantidade de produto a ser enviada das fábricas para os clientes (x_{ij}) deveria ser inteira. Ou seja, deveria haver uma restrição do tipo $x_{ij} \in Z$, para todo i e j . Este problema seria um problema de **programação inteira**.

Otimização contínua *versus* discreta

O termo genérico **otimização discreta** se refere a problemas cujas variáveis assumem valores em um conjunto finito. Em contraste, o termo **otimização contínua** se refere a problemas cujas variáveis podem assumir valores em conjuntos infinitos não-enumeráveis, tipicamente, um conjunto de valores reais.

Problemas de **otimização contínua** normalmente são mais fáceis de resolver do que problemas de **otimização discreta**. A suavidade da função objetivo e das funções das restrições permite que, a partir da informação em um ponto x , possamos deduzir o comportamento destas funções em uma vizinhança de x . Métodos para resolver problemas de **otimização contínua** fazem uso destas propriedades quando buscam a solução do problema.

No caso de problemas de **otimização discreta**, uma solução “vizinha” de outra pode não apresentar valores da função objetivo próximos. Neste caso, uma alternativa seria enumerar as possíveis soluções, buscando a de menor valor de função objetivo. No entanto, para problemas maiores, o tempo gasto com essa busca é proibitivo.

Em alguns casos, algumas variáveis do problema são contínuas e outras são discretas. Estes problemas são chamados de problemas de **programação inteira mista**.

Problemas do tipo (1) podem ser classificados de várias maneiras:

- Quanto à **natureza da função objetivo**: linear, não-linear, convexa, etc;
- Quanto ao **número de variáveis**: pequeno, médio ou grande;
- Quanto à **suavidade das funções**: diferenciável ou não-diferenciável;
- Etc.

Uma distinção importante entre problemas do tipo (1) é com relação às restrições. Se não há restrições, dizemos que o problema é **irrestrito**. Se há pelo menos uma restrição, dizemos que o problema é **restrito**.

Problemas irrestritos surgem de modelos de problemas que naturalmente não possuem restrições. Em alguns casos, o problema teria restrições, mas elas podem ser ignoradas. Em outros casos, problemas originalmente restritos têm as restrições transformadas em um termo de penalidade na função objetivo, tornando-se irrestritos.

Otimização irrestrita *versus* restrita

Problemas restritos surgem de modelos que possuem restrições explícitas. As restrições podem ser:

- Simples limitantes nas variáveis, como $0 \leq x \leq 10$. Estas restrições são chamadas de **restrições de caixa**;
- **Restrições lineares**, como $\sum_i x_i \leq 1$;
- **Restrições não-lineares**, como $\sin(x) + \cos(x) = 1$.

Problemas nos quais tanto a função objetivo como as restrições são lineares em x , são chamados de **problemas de programação linear**. Se a função objetivo ou alguma das restrições não é linear, o problema é chamado de **problema de programação não-linear**.

Otimização local *versus* global

Os termos **otimização local** e **otimização global** se referem à qualidade da solução a ser buscada.

Os algoritmos mais rápidos de otimização buscam encontrar uma solução local, ou seja, um ponto no qual o valor da função objetivo vale menos (no caso de minimização) do que os pontos em sua vizinhança.

Um algoritmo para otimização global se compromete a encontrar um ponto x , dentre os possíveis valores que x pode assumir, que possui o menor valor de função objetivo possível. Em geral, encontrar uma solução global é muito mais difícil do que encontrar uma solução local.

Algoritmos de otimização são iterativos. Eles partem de um “chute” inicial dos valores das variáveis e geram uma sequência com valores aprimorados das variáveis até atingir a solução.

A estratégia usada para ir de um iterando a outro é o que distingue um algoritmo de outro. A maioria das estratégias usa o valor da função objetivo f , o valor das restrições c e, possivelmente, a primeira e segunda derivadas dessas funções.

Alguns algoritmos armazenam as informações obtidas em cada iteração, enquanto outros usam apenas informação local do ponto x atual.

Todo bom algoritmo de otimização deve possuir os seguintes objetivos:

- **Robustez:** deve funcionar bem em uma grande variedade de problemas da classe que ele pretende resolver, para todas as escolhas razoáveis de pontos iniciais;
- **Eficiência:** não deve exigir muito tempo computacional ou espaço em memória para ser executado;
- **Precisão:** deve ser capaz de identificar uma solução com precisão, sem ser muito sensível a erros nos dados ou a erros de arredondamento que podem ocorrer durante sua execução.

Estes objetivos podem ser conflitantes. Por exemplo, um método que convirja rapidamente para a solução pode necessitar de muito espaço de armazenamento para problemas de grande porte. Por outro lado, métodos mais robustos podem ser mais lentos.

O equilíbrio entre velocidade de convergência e armazenamento necessário, robustez e velocidade, etc, são pontos centrais em otimização numérica.