Estudos de métodos de otimização

Optimization methods studies

Josiane Mariane Batista[1], André Luís Machado Martinez[2]

RESUMO

Programação matemática, direta ou indiretamente, é um tema muito presente em diversos campos da ciência. Diversas áreas recorrem a técnicas de otimização na tomada de decisão. Dentre elas, pode-se citar, agricultura, finanças, transporte, processos químicos, produtivos, recursos naturais, ambientais e energéticos, entre outros. Deste modo, o objetivo principal é modelado matematicamente com o intuito de minimizar ou maximizar uma função em um determinado conjunto, como, por exemplo, o custo ou o lucro em determinado processo. Matematicamente, pode-se dizer que a otimização consiste em encontrar pontos de mínimo ou de máximo de uma função real sobre um conjunto de restrições. Assim, ao longo deste primeiro ano desenvolveu-se estudo introdutório sobre otimização, iniciando com conceitos de cálculo de funções de uma ou mais variáveis, em seguida, foi abordado as condições de otimalidade para funções reais de uma ou várias variáveis reais. Com este conhecimento, foi possível desenvolver algoritmos que testam o Método gradiente e Método gradiente com Seção Áurea, no *software* MATLAB.

PALAVRAS-CHAVE: Condições de otimalidade; MATLAB; Otimização.

ABSTRACT

Mathematical programming, directly or indirectly, is a very present topic in many fields of science. Several areas appeal to optimization techniques in decision-making. Among these, agriculture, finance, transportation, chemical processes, production, natural resources, environment and energy, and others. This way, the main goal is modeled mathematically in order to minimize or maximize a function in a given set, such as cost or profit in a given process. Mathematically, optimization can be said to consist of finding the minimum or maximum points of a real function over a set of constraints. Therefore, over this first year, an introductory study of optimization was carried out, starting with the concepts of calculating functions of one or more variables, followed by the optimality conditions for real functions of one or many real variables. With this knowledge, it was possible to develop algorithms that test the Gradient Method and Gradient with Golden Section in the MATLAB software.

KEYWORDS: Optimality conditions; MATLAB; Optimization.

INTRODUÇÃO

A otimização matemática, segundo Cardoso e Avila (2013), é a busca pela melhor solução possível, considerando diversas variáveis e um conjunto de restrições aplicadas a uma função. Isto, pois cotidianamente, em diversas áreas de atuação, surgem problemas que requerem soluções precisas, porém também apresentam condições, princípios, situações ou elementos variados em seu desenvolvimento (MARTÍNEZ; SANTOS, 1998). Sendo assim, para resolver essas questões é necessário chegar a valores mínimos ou máximos dentre os possíveis resultados, que estão em um intervalo determinado – conjunto de possibilidades. Portanto, este resultado, mínimo ou máximo, é chamado de solução ótima, pois demonstra o melhor resultado dentre todas as soluções factíveis do conjunto.

[1] Bolsista do Programa de Iniciação Científica e Mestrado (PICME) fomentado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Cornélio Procópio, Paraná, Brasil. E-mail: josianebatista@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 1986887915222059.

[2] Docente no Departamento Acadêmico de Matemática. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Cornélio Procópio, Paraná, Brasil. E-mail: martinez@utfpr.edu.br. ID Lattes: 3020385248940550.

O objetivo principal de utilizar a otimização nos projetos - independentemente de sua área - é para auxiliar na tomada de decisões, já que este método traz para a equipe a visão científica da melhor solução (RIBEIRO; KARAS, 2012). E, para que seja possível otimizar os problemas encontrados, é necessário aplicar os devidos métodos de resolução, conforme o tipo de função que o problema gera, ou seja, qual a situação que este traz. Uma das formas de resolução é aplicando a programação linear (PL), a qual é empregada apenas em casos com funções lineares e com restrições de representados por um conjunto de equações lineares; já outra delas, é a programação não-linear (PNL), que é utilizada nos casos formados por sistemas de equações não lineares, e esta é dividida em outros tipos: os determinísticos, os estocásticos e os enumerativos (CARDOSO; AVILA, 2013).

A derivada de uma função é o equivalente ao coeficiente angular da reta tangente a esta função, em qualquer um de seus pontos. Quando o coeficiente angular da tangente é nulo para uma função continuamente derivável, identifica-se um ponto crítico para a função, este pode ser um máximo relativo, um mínimo relativo ou, então, um ponto de sela que, apesar de possuir declividade nula, apresenta elevação máxima em uma direção e mínima em outra. Estes dados são utilizados no estudo de otimalidade, contudo, somente valores mínimos ou máximos importam e, a cada problema variam entre si, sendo assim, é necessário distinguir qual dos casos ocorre a cada anulação da derivada.

Durante a pesquisa sobre os métodos de otimização, deu-se enfoque ao método gradiente comum e àquele com aplicação da seção áurea. Ambos os métodos foram estudados, aplicados e testados em códigos desenvolvidos por meio do *software* MATLAB, para que fosse possível realizar um comparativo sobre a funcionalidade deles com ou sem a aplicação do passo, determinado pela seção áurea. Portanto, o restante deste trabalho está dividido da seguinte forma. Uma seção sobre os métodos de otimização que apresenta a descrição do método gradiente e do método utilizado para determinação do tamanho do passo – o método da seção áurea. Na seção de testes numéricos é avaliada a eficiência da inclusão do método da seção áurea no método gradiente. Por fim, a última seção apresenta a conclusão do trabalho.

MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

Em diversas áreas, muito se emprega o cálculo das raízes de uma função como resolução de problemas, principalmente nas engenharias. Por isso, existem métodos formais, na matemática, que permitem a determinação exata dessas raízes – ou também chamadas, “zeros” da função. Contudo, estes métodos formais exatos são limitados, garantindo solução apenas aos polinômios de até terceiro grau, o que exige uma certa intuição no processo de resolução matemática para polinômios com maior grau, já que não existe uma fórmula exata para solução. Portanto, para determinar raízes em problemas envolvendo funções polinomiais de maior grau e funções não polinomiais, uma variedade de métodos foi criada para encontrar soluções aproximadas.

MÉTODO GRADIENTE

O método gradiente é um tipo de processo de otimização, utilizado para encontrar o mínimo de uma função. Este é um algoritmo de otimização de primeira ordem, sendo sua principal característica a simplicidade conceitual e implementação, seguindo uma abordagem incremental, atualizando iterativamente o ponto atual com base no gradiente, até que um critério de parada seja alcançado - critério este que pode ser: um número máximo de iterações, uma tolerância de erro mínima ou a convergência da função.

A atualização do ponto ocorre com base na direção oposta ao gradiente da função (∇f). O processo se inicia em um ponto x_0 e caminha sobre a linha determinada pelo gradiente – o qual aponta para o maior crescimento da função f, por isso, é utilizado seu oposto, que indica o decrescimento. Este processo pode ser descrito em termos matemáticos como na Eq. (3).

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k), \tag{3}$$

o valor de α pode ser alterado para obter uma convergência mais rápida, pois o passo do gradiente ($\alpha = 1$) pode dificultar a convergência.

Apesar desse método ser muito eficiente, especialmente em problemas com grande número de variáveis, pois a atualização do ponto é baseada apenas no gradiente local, o que permite que o método seja aplicado de forma escalável, é importante destacar que ele apresenta algumas limitações. Em funções não convexas, com muitos mínimos locais ou quando apresenta pouca variação, o método pode estacionar em regiões de platô ou pontos de sela, dificultando a convergência para uma solução. Nesses casos, pode ser aplicado a combinação com outros métodos de otimização para calcular o passo do método, como por exemplo o método da seção áurea.

SEÇÃO ÁUREA

Com a intenção de determinar com eficiência o tamanho do passo, o método da seção áurea se fez necessário. Tal método é baseado na busca do mínimo de função unidimensional utilizando a proporção áurea (ϕ), na intenção de dividir iterativamente o intervalo em intervalos menores, assim, adaptando o tamanho do passo do gradiente.

A técnica envolve dividir o intervalo – determinado por c_1 e c_2 – em duas partes usando a proporção áurea, avaliar a função nos pontos internos e atualizar o intervalo com base na comparação das avaliações. A partir da escolha inicial do intervalo, o método passa a reiterar os valores a cada passagem pelo código, até que se alcance o mínimo da função ou atinja um critério de parada.

A maior vantagem da aplicação do método da seção áurea é descartar uma maior parte do intervalo a cada iteração, fazendo com que convirja mais rápido para o resultado procurado (mínimo ou máximo da função). No entanto, este método não é eficaz quando se trata de funções que possuem mais de um mínimo dentro do intervalo considerado, portanto, deve-se analisar previamente quais valores de c_1 e c_2 serão adotados, caso a função não seja unimodal.

TESTES NUMÉRICOS

Durante os estudos, foram desenvolvidos dois códigos no software *Matrix Laboratory* (MATLAB) para comparação da convergência de mínimo da função utilizando cada método. Sendo o primeiro deles desenvolvido apenas com base no método gradiente e o outro aplicando o passo da seção áurea.

A fim de comparar a funcionalidade dos códigos, escolheu-se 10 funções de várias variáveis com - pelo menos - 1 ponto de mínimo. A cada aplicação, o mesmo ponto inicial e precisão foram inseridos em ambos os programas. Para melhor visualizar a convergência de cada método, foi desenvolvido o quadro comparativo, nele é apresentado o ponto inicial e a precisão escolhida para os métodos, bem como os resultados: o ponto de mínimo encontrado e o número de iterações gastas para isso, como apresentado na Figura 1.

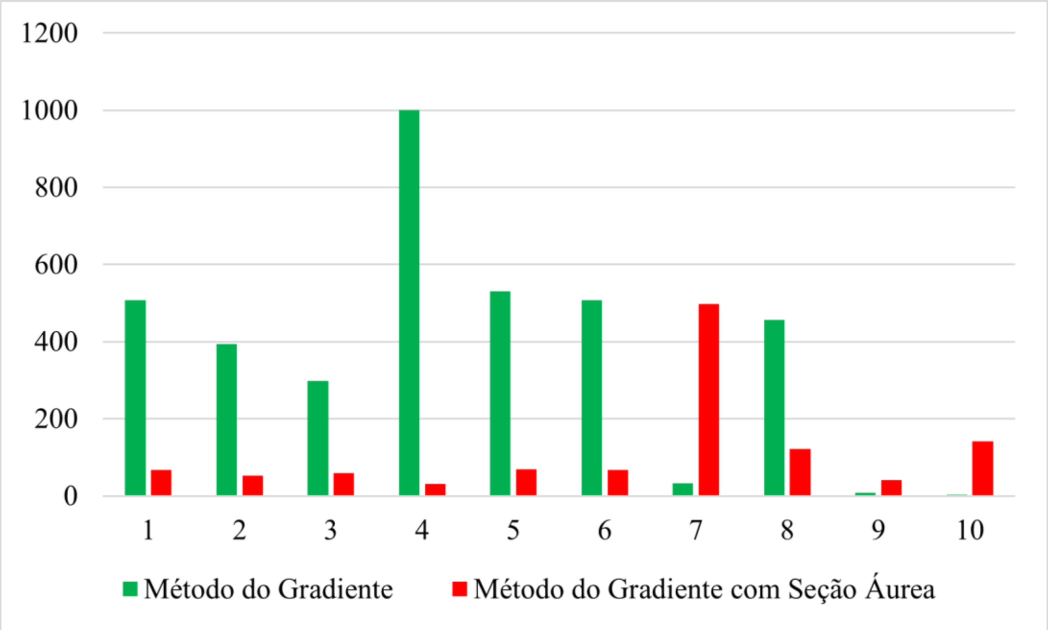
Figura 1 – Quadro de testes comparativos entre métodos

	Função	Ponto Inicial	Precisão	Método do Gradiente	Nº de interações	Método do Gradiente + Seção Áurea	Nº de interações
1	$f(x,y) = x^2 + y^2$	(1,1)	10^{-4}	$(0{,}35\,;0{,}35)\cdot 10^{-4}$	508	$(0{,}26\,;0{,}26)\cdot 10^{-4}$	67
2	$f(x,y) = x^2 + y^2 - 2x - 6y$	(2,2)	10^{-3}	(1,00 ; 2,99)	394	(1,00 ; 2,99)	52
3	$f(x,y) = (x-1)^2 + y^2 + (6-x-2y)^2$	(3,3)	10^{-4}	não convergiu	299	(1,83 ; 1,66)	59
4	$f(x,y) = x^3 + y^3 - 3xy + 4$	(3,3)	10^{-3}	não convergiu	1001	(1,00 ; 1,00)	32
5	$f(x,y) = x^2 + y^2 - 2x$	(2,2)	10^{-4}	(1,00 ; 0,00)	531	(1,00 ; 0,00)	69
6	$f(x,y) = x^2 + y^2 - 16y$	(1,9)	10^{-4}	(0,00 ; 8,00)	508	(0,00 ; 8,00)	67
7	$f(x,y) = \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{9}y^2 - 4x - y$	(6,6)	10^{-4}	(8,00 ; 4,50)	33	(8,00 ; 4,50)	498
8	$f(x,y) = x^2 + \frac{4}{9}y^2 - x - 3y$	(0,3)	10^{-4}	$(-0{,}50\,;3{,}37)$	456	$(-0{,}50\,;3{,}37)$	122
9	$f(x,y) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{4}y^4 - x - y + 4$	(2,2)	10^{-4}	não convergiu	8	(1,00 ; 1,00)	41
10	$f(x,y) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}y^2 + 32$	(3,3)	10^{-4}	$(0{,}03\,;0{,}03)\cdot 10^{-4}$	3	$(0{,}64\,;0{,}64)\cdot 10^{-4}$	142

Fonte: Próprio autor.

Além disso, foi criado um gráfico de barras que contrasta a diferença no número de interações, que ocorrem até o ponto de mínimo ser encontrado, para aplicação de método, como pode ser observado pela Figura 2.

Figura 2 – Gráfico em barras: Nº de interações dos métodos de otimização



Fonte: Próprio autor.

CONCLUSÃO

Com os resultados dos testes realizados, foi perceptível que em equações onde o coeficiente da derivada aumenta – seja por conta do coeficiente de x e y na função ou, então, pelo grau da própria – o método gradiente comum exibe divergência. Em contrapartida, à medida que o coeficiente diminui, o método converge mais rapidamente, podendo até superar a velocidade do método adaptado com seção áurea.

Agradecimentos

À Olímpiada Brasileira de Matemática das Escolas Públicas (OBMEP), pela oportunidade de fazer parte do Programa de Iniciação Científica e Mestrado (PICME), que foi proporcionada por meio das premiações nesta.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), por fomentar a pesquisa concedendo a bolsa de estudos.

À Universidade Estadual de Londrina (UEL) e à Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), pela oportunidade e auxílio para realização da pesquisa.

Ao professor Dr. André Luís Machado Martinez, meu orientador, por todo ensinamento e orientação.

Conflito de interesse

Não há conflito de interesse.

REFERÊNCIAS

AVILA, Sergio Luciano; CARDOSO, Rafael Pacheco. Matemática Aplicada na Busca do Ótimo: resolução dos problemas cacheiro viajante e circuito magnético. **RTC Revista Técnico-Científica do Ifsc**, Jaraguá do Sul, v. 1, n. 8, p. 4-12, 12 nov. 2019. Disponível em: https://periodicos.ifsc.edu.br/index.php/rtc/article/view/1033. Acesso em: 23 ago. 2023.

LUZ, Ana Maria. **Máximos e Mínimos de Funções de Duas Variáveis**. [S.L.], 2016. 14 slides, color. Disponível em: https://www.professores.uff.br/anamluz/wp-content/uploads/sites/36/2017/07/maximos_minimos_duas_variaveis.pdf. Acesso em: 05 dez. 2022.

MARTINEZ, José Mario; SANTOS, Sandra Augusta. **Métodos Computacionais de Otimização**. Rio de Janeiro: Sociedade Brasileira de Matemática, 1995. 256 p. Disponível em: https://www.ime.unicamp.br/~sandra/MT601/handouts/MCDO_set2020.pdf. Acesso em: 05 dez. 2022.

RIBEIRO, Ademir Alves; KARAS, Elizabeth Wegner. **Um curso de otimização**. 2012. Disponível em: https://docplayer.com.br/74239030-Um-curso-de-otimizacao-ademir-alves-ribeiro-elizabeth-wegner-karas.html. Acesso em: 23 ago. 2023.

STEWART, James. Aplicações de Derivação. In: STEWART, James. **Cálculo**: Volume 1. 7. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2013. Cap. 4. p. 247-323.