

M011
621:531.01
F224c
TES/UFU

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA

218.000
UMA CONTRIBUIÇÃO AOS PROCEDIMENTOS DE OTIMIZAÇÃO
APLICADOS A SISTEMAS MECÂNICOS

621:531.01 F224c /TES/UFU
DIRBI/UFU 00345/92



1000015251

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Uberlândia por MÁRIO LUIZ DE MENDONÇA FARIA para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, aprovada em 02/09/91 pela banca examinadora:

Dr. Valder Steffen Jr. (Orientador-UFU)
Dr. Carlos Roberto Ribeiro (UFU)
Dr. Francisco Paulo Lépore Neto (UFU)
Dr. Agenor de Toledo Fleury (IPT)

1952-

Aos meus: Márcia, Tiago e Tarcila.

MEUS AGRADECIMENTOS

- ao Prof. Valder, pela orientação sempre disponível, precisa e amiga;
- aos professores Ribeiro e Fleury, por honrarem-me participando da banca;
- ao Prof. Lépore, pelo incentivo à minha inscrição no Programa de Mestrado em Engenharia Mecânica e por sua presença na banca, o que muito me honra;
- ao Prof. Ríspoli; pelo importante auxílio em diversas ocasiões;
- aos amigos do DEEME, especialmente à Inez, pelas atenções com que fui distinguido;
- aos colegas do DEMAT, que, reduzindo minha carga didática, permitiram-me concluir esta dissertação;
- aos meus avós paternos, Mário e Tarcilla, e às minhas tias Maria Amélia e Clara, aos quais devo a minha formação;
- à Márcia; este trabalho é, em grande parte, fruto de seu apoio.

UMA CONTRIBUIÇÃO AOS PROCEDIMENTOS DE OTIMIZAÇÃO
APLICADOS A SISTEMAS MECÂNICOS

SUMÁRIO

. LISTA DE FIGURAS	vi
. LISTA DE TABELAS	vii
. LISTA DE SÍMBOLOS	ix
1. INTRODUÇÃO	1
2. O MÉTODO DO MULTIPLICADOR DE LAGRANGE AUMENTADO	6
2.1. Introdução	6
2.2. O Método da Penalidade Exterior	8
2.3. Critérios de caracterização do ótimo	9
2.4. Abordagem do problema com restrições apenas de igualdade	14
2.5. Abordagem do problema com restrições de desi- gualdade	19
2.6. O problema com restrições de igualdade e desi- gualdade	22
3. O ALGORITMO DE DAVIDON, FLETCHER E POWELL	26
3.1. Introdução	26
3.2. Métodos numéricos de otimização irrestrita	27
3.2.1. Métodos de ordem zero	28
3.2.2. Métodos de primeira ordem	29
3.2.3. Métodos de segunda ordem	31
3.3. Caracterização dos mínimos locais na otimização sem restrições	33
3.4. O Método de Davidon Fletcher e Powell	34

4. BUSCA UNIDIMENSIONAL	40
4.1. Introdução	40
4.2. Redução do intervalo de incerteza pelo Método da Secção Áurea	42
4.3. Estimativa do mínimo, utilizando aproximação polinomial no intervalo de incerteza reduzido	50
5. O PROGRAMA OTIM	53
5.1. Introdução	53
5.2. Estrutura do programa OTIM	54
5.2.1. A otimização restrita no programa OTIM	55
5.2.2. A otimização irrestrita no programa OTIM	59
5.2.3. A busca unidimensional no programa OTIM	63
6. APLICAÇÕES	66
6.1. Introdução	66
6.2. Minimização de funções matemáticas	67
6.3. Otimização em problemas estáticos de engenharia mecânica	78
6.4. Otimização em problemas dinâmicos de engenharia mecânica	85
7. CONCLUSÕES	93
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	95

FARIA, M. L. M.; Uma Contribuição aos Procedimentos de Otimização Aplicados a Sistemas Mecânicos, UFU, Uberlândia, 1991. 108 p.

RESUMO: Este trabalho apresenta a articulação de um conjunto de técnicas numérico-computacionais de programação não-linear, objetivando a otimização de projetos de engenharia. Utiliza-se o Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado para a abordagem do problema com restrições e o Algoritmo de Davidon, Fletcher e Powell para a otimização irrestrita. As buscas unidimensionais são efetuadas utilizando-se as técnicas da Secção Áurea e da Aproximação Polinomial. Para enfatizar a eficácia da metodologia empregada, são apresentados vários exemplos da aplicação do programa computacional resultante da combinação dos procedimentos utilizados, tanto na minimização de funções matemáticas, quanto na otimização de problemas típicos ligados ao projeto de sistemas mecânicos.

** projeto de sistemas mecânicos, otimização, programação não-linear.

FARIA, M. L. M.; A Contribution to the Optimization Procedures Applied to Mechanical Systems, UFU, Uberlândia, 1991. 108 p.

ABSTRACT: A combination of a group of numerical and computational techniques of nonlinear programming is presented, focusing the engineering design optimization. The Augmented Lagrange Multiplier Method is used to deal with the constrained problem and the algorithm due to Davidon, Fletcher and Powell for the unconstrained optimization. Line searches are made using the Golden Section and the Polynomial Approximation techniques. Different applications examples of the computational program which results of the combined procedures are presented to emphasize the methodology efficacy on the minimization of mathematical functions, as well as on the optimization of typical problems related to mechanical systems design.

** mechanical systems design, optimization, nonlinear programming

LISTA DE FIGURAS

FIGURA	DESCRIÇÃO	PÁGINA
4.1	Função unimodal	42
4.2	Casos (i) e (ii) do Teorema 4.1	43
4.3	Adoção de x_{s+1} e y_{s+1}	46
4.4	Divisão áurea de um intervalo	48
5.1	Escolha dos procedimentos de otimização pelo programa OTIM	55
5.2	Implementação do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado no programa OTIM	57
5.3	Implementação do Método de Davidon, Fletcher e Powell no programa OTIM	60
5.4	Implementação dos métodos da Secção Áurea e da Aproximação Polinomial no programa OTIM	64
6.1	Determinação da posição de equilíbrio estático de um sistema de molas	79
6.2	Determinação da posição de equilíbrio estático de um sistema de massas e molas	80
6.3	Minimização da massa de uma treliça	82
6.4	Minimização do volume de uma viga engastada-livre	83
6.5	Determinação da excentricidade de um mancal esférico ranhurado	85
6.6	Otimização de frequências naturais de um sistema	86

LISTA DE TABELAS

TABELA	DESCRIÇÃO	PÁGINA
6.1	Minimização da função do exemplo (a)	67
6.2	Minimização da função do exemplo (b)	68
6.3	Minimização da função do exemplo (c)	68
6.4	Minimização da função do exemplo (d)	69
6.5	Minimização da função do exemplo (e)	70
6.6	Minimização da função do exemplo (f)	70
6.7	Minimização da função do exemplo (g)	71
6.8	Minimização da função do exemplo (h)	72
6.9	Minimização da função do exemplo (i)	73
6.10	Minimização da função do exemplo (j)	74
6.11	Minimização da função do exemplo (l)	75
6.12	Minimização da função do exemplo (m), caso I	76
6.13	Minimização da função do exemplo (m), caso II	77
6.14	Minimização da função do exemplo (n)	78
6.15	Determinação da posição de equilíbrio estático do sistema da figura 6.1	79
6.16	Determinação da posição de equilíbrio estático do sistema da figura 6.2	81
6.17	Minimização da massa da treliça da figura 6.3	82
6.18	Minimização do volume da viga da figura 6.4	84

TABELA	DESCRIÇÃO	PÁGINA
6.19	Determinação da excentricidade de um mancal esférico	85
6.20	Otimização das frequências naturais do sistema da figura 6.6 para $m = 0.1 M_{\text{viga}}^0$	89
6.21	Otimização das frequências naturais do sistema da figura 6.6 para $m = 0.67 M_{\text{viga}}^0$	90
6.22	Otimização das frequências naturais do sistema da figura 6.6 para $m = 2 M_{\text{viga}}^0$	91

LISTA DE SÍMBOLOS

SÍMBOLO	SIGNIFICADO
A	função lagrangiano aumentado
F	função objetivo no problema irrestrito
$F(X^*)$	valor do objetivo ótimo no problema irrestrito
G	matriz métrica, definida em (3.8)
G^q	matriz métrica no início da q-ésima iteração do Método DFP
G_q^c	matriz de correção da métrica ao término da q-ésima iteração do Método DFP
H	matriz hessiana
I	intervalo de incerteza
I_n	matriz identidade de ordem n
L	função lagrangiana clássica
P	função polinomial de aproximação do objetivo na busca unidimensional
\bar{P}	função de penalização do Método da Penalidade Exterior
S^q	direção da q-ésima busca unidimensional efetuada pelo Método DFP
X	vetor das variáveis de decisão
X^p	vetor das variáveis de decisão ao término da p-ésima iteração do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado

SÍMBOLO

SIGNIFICADO

x^q	vetor das variáveis de decisão no início da q-ésima iteração do Método DFP
x^*	vetor das variáveis de decisão ótimas
z	vetor das variáveis de folga
a_i, b_i	limites inferior e superior, respectivamente, da i-ésima variável de decisão
a_s, b_s	limites inferior e superior, respectivamente, do (s+1)-ésimo intervalo de incerteza
c_0, c_1, c_2, c_3	coeficientes da aproximação polinomial cúbica da parametrização do objetivo no intervalo final de incerteza
f	função objetivo no problema restrito
$f(x^*)$	valor do objetivo ótimo no problema restrito
g_j	j-ésima restrição de desigualdade
h_k	k-ésima restrição de igualdade
l	número de restrições de desigualdade
m	número de restrições de igualdade
n	número de variáveis de decisão
r	coeficiente de penalidade
r_p	valor do coeficiente de penalidade, na p-ésima iteração do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado

SÍMBOLO

SIGNIFICADO

x_i	i-ésima variável de decisão
x_s, y_s	pontos que efetuam divisões áureas do (s+1)-ésimo intervalo de incerteza
z_j	j-ésima variável de folga
Γ	espaço de projeto, definido por (2.2)
Δ	fator de redução do intervalo de incerteza, definido por (4.15)
Λ	vetor dos multiplicadores de Lagrange
Λ^p	vetor dos multiplicadores de Lagrange na p-ésima iteração do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado
Λ^*	vetor dos multiplicadores de Lagrange no ótimo
α	variável de parametrização do objetivo na busca unidimensional
$\bar{\alpha}$	ponto de mínimo da aproximação polinomial da parametrização do objetivo no intervalo de incerteza
α^*	ponto de mínimo do objetivo na direção de busca
γ	fator de atualização do coeficiente de penalidade
ϵ	amplitude aproximada do intervalo final de incerteza
φ_j	função resultante da eliminação da variável de folga; definida por (2.29)

SÍMBOLO

SIGNIFICADO

λ_j	j-ésimo multiplicador de Lagrange
τ	número áureo dado por (4.14)
ω	função de parametrização do objetivo ao longo da direção de busca unidimensional

1 - INTRODUÇÃO

Os primeiros procedimentos de otimização remontam ao princípio da história humana. Ao longo dos séculos, o desenvolvimento tecnológico das civilizações deu-se como consequência direta do esforço deliberado do homem na busca, frequentemente realizada através de processos de tentativa e erro, da melhor forma de viabilizar seus propósitos.

Apesar dos procedimentos matemáticos de otimização possuírem raízes no trabalho desenvolvido por Cauchy [1] em meados do século XIX, a moderna metodologia numérica de otimização só veio a surgir por ocasião da segunda guerra mundial, no início dos anos 40, quando a complexidade do acompanhamento logístico favoreceu o advento da programação linear, cuja meta consiste na minimização ou maximização de um funcional linear, dito objetivo, atendendo a um certo número de restrições também lineares.

Quase vinte anos depois, particularmente após a divulgação do trabalho de Davidon [2], que propunha uma nova metodologia de minimização de funções matemáticas baseada apenas em informações sobre seus gradientes, presenciou-se o florescimento de inúmeros métodos numérico-iterativos de otimização de problemas matemáticos não-lineares, sem que nenhum deles tenha-se imposto como universal.

As técnicas de programação não-linear são frequentemente agrupadas em duas grandes categorias. Na primeira, encontram-se aquelas que, como o próprio método proposto por

Davidon [2,3], adequam-se apenas à solução de problemas sem restrições; são as chamadas técnicas de otimização irrestrita. Numa segunda categoria, a das técnicas de otimização restrita, encontram-se os métodos que objetivam a abordagem de problemas nos quais restrições devam ser consideradas.

Algumas técnicas de otimização restrita manipulam as restrições de uma forma direta. Dentre estas, encontram-se métodos como o das Direções Viáveis [4,5,6], onde o processo iterativo é totalmente desenvolvido no conjunto dos pontos viáveis (pontos que atendem a todas as restrições) do problema; o da Programação Linear Sequencial [4,5], onde, a cada iteração, o problema não linear é abordado executando-se procedimentos de programação linear sobre aproximações de primeira ordem do objetivo e das restrições; o do Gradiente Reduzido Generalizado [4,5], que efetua a eliminação das variáveis que dependem implicitamente das demais; o da Projeção do Gradiente [5,6], em que, na busca pelo ótimo, utiliza-se a projeção do gradiente do objetivo sobre os planos tangentes às superfícies definidas pelas restrições, e o das Assíntotas Móveis [7], onde o controle da convergência do processo é efetuado através de manipulações dos limites impostos às variáveis envolvidas. Outras técnicas, entretanto, lidam com as restrições de uma forma indireta, penalizando-as e acrescentando-as ao próprio objetivo através da criação de uma nova função, dita pseudo-objetivo, permitindo que a solução do problema com restrições seja alcançada através da resolução de uma série de otimizações irrestritas. Dentre estas técnicas, encontram-se os métodos da Penalidade Exterior e da Penalidade Interior [4], em que a

solução do problema é aproximada através de seus pontos viáveis ou não-viáveis, respectivamente, e o Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado [8,9], no qual o pseudo-objetivo é a soma da função lagrangiana associada ao problema, com o termo de penalização do Método da Penalidade Exterior.

A popularização do uso do computador nos últimos vinte anos transformou-o em um importante aliado do engenheiro projetista. Assim, paralelamente ao desenvolvimento de programas computacionais de análise de projetos de engenharia, presenciou-se a criação de diversas rotinas comerciais destinadas à sua otimização, tais como os programas CONMIN, ADS e outros incluídos em pacotes de elementos finitos. Entretanto, tais rotinas comerciais costumam apresentar diversas limitações em sua utilização, quer por serem fechadas ou, mesmo que abertas, por não se possuir conhecimento suficiente de sua estrutura para efetuar as modificações necessárias à sua adaptação à classe de problemas que se pretende solucionar.

Harmonizando técnicas e procedimentos matemáticos e levando em conta os aspectos citados, procurou-se então desenvolver um programa computacional arquitetado sobre algoritmos confiáveis, capaz de efetuar otimizações tanto restritas quanto irrestritas, e que pudesse ser facilmente ajustado para otimizar diferentes problemas de projeto mecânico, através de manipulações de seus arquivos de dados.

Na implementação do programa computacional, optou-se pela adoção do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado [8,9] para a abordagem do problema com restrições e do Algoritmo de

Davidon, Fletcher e Powell [3] para efetuar as otimizações irrestritas, já utilizados com sucesso por Imai [10] em problemas estáticos, por Steffen [11] em problemas dinâmicos e por Trompette [12] em problemas de otimização de forma. Nas buscas unidimensionais, visando precisão e confiabilidade, optou-se pelo uso combinado dos métodos da Secção Áurea e da Aproximação Polinomial [4].

Esta articulação de uma metodologia consistente de solução de problemas de programação não-linear possui o intuito de contribuir na consolidação do uso das técnicas de otimização no contexto do projeto mecânico na Universidade Federal de Uberlândia, através do desenvolvimento e utilização de um software local, adequado às necessidades do Laboratório de Dinâmica de Sistemas Mecânicos do Departamento de Engenharia Mecânica, que considera como eixos para o desenvolvimento da ciência e tecnologia em dinâmica, a identificação, o controle e a otimização.

Este trabalho está assim constituído:

- no capítulo 2, apresenta-se o problema geral de programação não-linear, são citadas as condições que caracterizam sua solução, é feita uma breve descrição da Técnica da Penalidade Exterior e desenvolve-se o Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado para a abordagem do mesmo;
- no capítulo 3, é apresentado o problema de otimização irrestrita, são brevemente esboçados os procedimentos

- envolvidos nas técnicas de ordem zero, de primeira e segunda ordem e, após serem citadas as condições que caracterizam as soluções do problema, é apresentado o Algoritmo de Davidon, Fletcher e Powell;
- no capítulo 4 , no contexto das técnicas capazes de efetuar as buscas unidimensionais requeridas em procedimentos de otimização, são apresentados os métodos da Secção Áurea e da Aproximação Polinomial;
 - no capítulo 5, é descrita a estrutura do programa computacional OTIM que, utilizando procedimentos apresentados nos capítulos anteriores, foi desenvolvido visando a resolução de problemas de otimização restrita ou irrestrita;
 - o capítulo 6 compõe-se dos resultados obtidos ao utilizar-se o programa OTIM na minimização de funções matemáticas, com ou sem restrições, e na otimização de problemas estáticos e dinâmicos de engenharia mecânica, restritos ou irrestritos;
 - finalmente, no capítulo 7 são relacionadas as conclusões deste trabalho.

2 - O MÉTODO DO MULTIPLICADOR DE LAGRANGE AUMENTADO

Neste capítulo, é apresentado o problema geral de otimização, são abordadas condições referentes à sua solução e é feita uma breve descrição do Método da Penalidade Exterior. O desenvolvimento do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado de Hesteness é descrito para o problema com restrições de igualdade e posteriormente estendido para o caso com restrições de desigualdade. Finalmente, é exposto o algoritmo geral para o caso em que restrições de ambos os tipos fazem-se presentes.

2.1 - INTRODUÇÃO

Os diferentes tipos de problemas de otimização presentes em situações de projeto em engenharia podem ser ajustados sob a seguinte formulação:

para

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

minimizar

$$f(X) \tag{2.1}$$

atendidas as condições:

$$g_j(X) \leq 0 \quad j = 1, 2, \dots, l$$

$$h_k(X) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, m < n$$

$$a_i \leq x_i \leq b_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

onde as funções f , g_j e h_k assumem valores em \mathbb{R} .

As variáveis x_1, x_2, \dots, x_n são ditas *variáveis de decisão* ou *de projeto*.

A função f a ser minimizada é denominada *função objetivo*. Problemas que envolvam a maximização de $f(X)$ podem ser reenunciados em termos da minimização de $-f(X)$.

As condições $g_j(X) \leq 0$ e $h_k(X) = 0$ são ditas, respectivamente, *restrições de desigualdade* e *de igualdade*. Em casos específicos, pode ocorrer que, em algumas destas últimas, haja a possibilidade de explicitar-se certas variáveis de decisão em termos das demais, reduzindo-se assim tanto o seu número, quanto o número de restrições do problema.

As condições $a_i \leq x_i \leq b_i$ são designadas por *restrições laterais* ou *de fronteira*. Apesar de poder-se considerá-las como restrições de desigualdade, o mais conveniente é tratá-las separadamente, já que elas definem o subconjunto de \mathbb{R}^n .

$$\Gamma = \left\{ X \in \mathbb{R}^n \mid a_i \leq x_i \leq b_i \text{ com } i=1,2,\dots,n \right\} \quad (2.2)$$

no qual deve-se efetuar as buscas pelo ótimo, dito *região* ou *espaço de projeto*.

Diz-se que um ponto $\bar{X} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n)^T \in \mathbb{R}^n$ transforma uma restrição de desigualdade $g_j(X) \leq 0$ em ativa se $g_j(\bar{X}) = 0$. Analogamente, \bar{X} torna uma restrição lateral $a_i \leq x_i \leq b_i$ ativa se $\bar{x}_i = a_i$ ou $\bar{x}_i = b_i$.

Em relação a um problema específico de otimização, um ponto que satisfaça todas as restrições laterais é dito *viável* ou *factível* caso ele também satisfaça todas as restrições de igualdade e desigualdade.

A *solução* do problema (2.1) é o par $(X^*, f(X^*))$, onde X^* é o ponto de mínimo de f no conjunto dos pontos viáveis das condições do problema.

Na grande maioria dos casos que surgem em engenharia, tanto a função objetivo f quanto as restrições g_j e h_k são não lineares. Temos então o chamado *problema geral de programação não-linear*.

Os procedimentos de avaliação das funções presentes no problema podem diferir enormemente de um caso para outro. Em alguns, todas estas funções são disponíveis analiticamente em termos das variáveis de decisão, em outros, podem ser exigidos procedimentos numéricos bastante complexos para sua avaliação.

2.2 - O METODO DA PENALIDADE EXTERIOR

A idéia básica dos métodos que utilizam a penalização de restrições como artifício para resolver o problema (2.1) é a criação de uma função F , dita *pseudo-objetivo*, da forma

$$F(X,r) = f(X) + r \bar{P}(X) \quad (2.3)$$

onde $f(X)$ é a função objetivo original, $r > 0$ é o chamado *coeficiente de penalidade* e $\bar{P}(X)$ é a *função de penalização*, que depende das restrições envolvidas e do método adotado.

No método da penalidade exterior, adota-se:

$$\bar{P}(X) = \sum_{j=1}^l \left[\max \{ 0, g_j(X) \} \right]^2 + \sum_{k=1}^m \left[h_k(X) \right]^2 \quad (2.4)$$

É fácil verificar que, para todo X , $\bar{P}(X) \geq 0$; além disso, quando uma restrição é satisfeita, a parcela a ela correspondente na expressão de $\bar{P}(X)$ é nula, donde $\bar{P}(X) = 0$ apenas quando X é viável.

Para $r > 0$ fixo, a minimização de F em relação a X cria então uma situação de comprometimento entre a minimização da função objetivo original e o atendimento das restrições de igualdade e de desigualdade. Assim, para um certo valor fixo de r , caso se designe por $X(r)$ o ponto de mínimo de F em relação a X , $(X(r), f(X(r)))$ será uma aproximação da solução $(X^*, f(X^*))$ do problema inicial (2.1)

Este procedimento apresenta certos inconvenientes que, em certos casos, chegam a torná-lo desaconselhável. Primeiro, a aproximação $X(r)$ de X^* é normalmente um ponto não viável. Segundo, caso r seja pequeno, a aproximação é bastante pobre; melhores aproximações só são conseguidas para valores muito grandes de r , mas aí o problema de minimização de $F(X, r)$ em relação a X costuma tornar-se mal condicionado numericamente.

2.3 - CRITÉRIOS DE CARACTERIZAÇÃO DO ÓTIMO

A presença de restrições em problemas de otimização reduz, em \mathbb{R}^n , a região de busca pelo ótimo. Entretanto, esta redução, ao invés de simplificar os procedimentos de otimização a serem adotados, normalmente passa a exigir técnicas de abordagem mais sutil, já que, na presença de

restrições, o ótimo não é necessariamente um ponto estacionário da função objetivo.

Antes de enunciar os critérios que caracterizam a solução do seguinte problema de otimização:

para

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

minimizar

$$f(X) \tag{2.5}$$

atendidas as condições:

$$g_j(X) \leq 0 \quad j = 1, 2, \dots, l$$

$$h_k(X) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, m < n$$

é importante estabelecer-se alguns conceitos:

1. Diz-se que uma função $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa se, para todo X_1 e X_2 e para todo θ no intervalo $[0, 1]$, tem-se

$$f(\theta X_1 + (1-\theta)X_2) \leq \theta f(X_1) + (1-\theta) f(X_2) \tag{2.6}$$

2. Diz-se que uma função $F: \mathbb{R}^{m+n} \rightarrow \mathbb{R}$ possui um ponto de sela (X^*, Y^*) , com $X^* \in \mathbb{R}^m$ e $Y^* \in \mathbb{R}^n$, se

$$F(X, Y^*) \leq F(X^*, Y^*) \leq F(X^*, Y) \tag{2.7}$$

para todo (X, Y) numa certa vizinhança de (X^*, Y^*) , ou seja, se, em (X^*, Y^*) , F possui um máximo local em relação a X e um mínimo local em relação a Y .

3. A função lagrangiana, ou lagrangiana clássica, associada ao problema (2.5), é dada por

$$L(X, \Lambda) = f(X) + \sum_{j=1}^l \lambda_j g_j(X) + \sum_{k=1}^m \lambda_{k+1} h_k(X) \quad (2.8)$$

onde $\Lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{l+m})^T$ é o vetor dos multiplicadores de Lagrange.

Pode-se passar agora à abordagem de condições sobre a solução do problema (2.5).

Teorema 2.1 (Condição de ponto de sela suficiente ao ótimo) [5]

Se (X^*, Λ^*) for um ponto de sela da função lagrangiana (2.8) e se $\lambda_j \geq 0$ para $j = 1, 2, \dots, l$, então $(X^*, f(X^*))$ é a solução do problema (2.5).

É importante notar que o teorema estabelece apenas uma condição suficiente ao ótimo. Em certos casos, pode ocorrer que a função lagrangiana não possua nenhum ponto de sela.

Outros critérios estão relacionados com o chamado *problema de Kuhn-Tucker*, enunciado a seguir:

Caso, em (2.5) as funções f , g_j e h_k sejam diferenciáveis, obter

$$X \in \mathbb{R}^n \text{ e } \Lambda \in \mathbb{R}^{l+m}$$

que satisfaçam:

$$\begin{aligned}
\nabla f(X) + \sum_{j=1}^l \lambda_j \nabla g_j(X) + \sum_{k=1}^m \lambda_{k+1} \nabla h_k(X) &= 0 \\
g_j(X) &\geq 0 & j = 1, 2, \dots, l \\
h_k(X) &= 0 & k = 1, 2, \dots, m \\
\lambda_j g_j(X) &= 0 & j = 1, 2, \dots, l \\
\lambda_j &\geq 0 & j = 1, 2, \dots, l
\end{aligned} \tag{2.9}$$

É fácil notar que no primeiro requisito exige-se que o gradiente em relação a X da função lagrangiana seja nulo; nos seguintes, impõe-se que X seja um ponto viável e que os multiplicadores de Lagrange correspondentes às restrições de desigualdade sejam não negativos, sendo nulos caso a mesma seja ativa.

Teorema 2.2 (Condição necessária de Kuhn-Tucker para o ótimo) [5]

Seja $X^* \in \mathbb{R}^n$ a solução do problema de otimização (2.5), onde f , g_j e h_k são diferenciáveis. Se $\nabla g_j(X^*)$ e $\nabla h_k(X^*)$ forem linearmente independentes para todo $j \in J = \{ j \mid g_j(X^*) = 0 \}$ e para todo $k = 1, 2, \dots, m$, então existem multiplicadores Λ^* tais que (X^*, Λ^*) é uma solução do problema de Kuhn-Tucker.

Teorema 2.3 (Condição suficiente de Kuhn-Tucker para o ótimo) [5]

Imagine-se que, no problema de otimização (2.5), f e g_j sejam diferenciáveis. Além disso, suponha-se f convexa, g_j côncava ($-g_j$ convexa) para todo j e h_k linear para todo k . Então, caso exista uma solução (X^*, Λ^*) do problema de

Kuhn-Tucker (2.9), a solução do problema de otimização (2.5) será $(X^*, f(X^*))$.

Deve-se salientar que a abordagem através de Kuhn-Tucker de problemas de programação não-linear associados a situações de projeto em engenharia é frequentemente inviável, tanto no que se refere à resolução do problema (2.9), quanto nas verificações das hipóteses dos teoremas 2.2 e 2.3.

Além destas condições, ditas de primeira ordem, há outras, ditas de segunda ordem:

Teorema 2.4 (Condição de segunda ordem necessária ao ótimo) [5]

Se, no problema (2.5), as funções f , g_j e h_k são diferenciáveis até a segunda ordem, se X^* é um ponto viável, se $\nabla g_j(X^*)$ e $\nabla h_k(X^*)$ são linearmente independentes para todo $j \in J = \{ j \mid g_j(X^*) = 0 \}$ e para todo $k = 1, 2, \dots, m$, então para que X^* seja um mínimo local do problema é necessário que:

1. exista $\Lambda^* \in \mathbb{R}^{1+m}$ tal que (X^*, Λ^*) seja uma solução do problema de Kuhn-Tucker;
2. para cada vetor Y satisfazendo

$$Y^T \nabla g_j(X^*) = 0 \quad \text{para } j \in J$$

$$Y^T \nabla h_k(X^*) = 0 \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, m$$

aconteça

$$Y^T H_L(X^*, \Lambda^*) Y \geq 0$$

onde H_L é a matriz hessiana da função lagrangiana (2.8).

Teorema 2.5 (Condição de segunda ordem suficiente ao ótimo) [5]

Se, em (2.5), as funções f , g_j e h_k são diferenciáveis até a segunda ordem, para que X^* seja um mínimo local do problema é suficiente que:

1. exista $\Lambda^* \in \mathbb{R}^{1+m}$ tal que (X^*, Λ^*) seja uma solução do problema de Kuhn-Tucker;

2. para cada vetor não nulo Y satisfazendo

$$Y^T \nabla g_j(X^*) = 0 \quad \text{para } j \in J_1 = \{j \mid g_j(X^*) = 0 \text{ e } \lambda_j \geq 0\}$$

$$Y^T \nabla g_j(X^*) \geq 0 \quad \text{para } j \in J_2 = \{j \mid g_j(X^*) = 0 \text{ e } \lambda_j = 0\}$$

$$Y^T \nabla h_k(X^*) = 0 \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, m$$

aconteça

$$Y^T H_L(X^*, \Lambda^*) Y \geq 0$$

onde H_L denota a matriz hessiana da função lagrangiana (2.8).

Este teorema está envolvido no estudo da convergência do método desenvolvido a seguir.

2.4 - ABORDAGEM DO PROBLEMA COM RESTRIÇÕES APENAS DE IGUALDADE

O método do multiplicador de Lagrange aumentado foi inicialmente proposto por Hestenes [8] e Powell [13] para solucionar o problema de otimização com restrições de igualdade:

para

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

minimizar

$$f(X) \tag{2.10}$$

atendidas as condições

$$h_k(X) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, m < n$$

sabendo-se que as funções f e h_k são diferenciáveis e assumem valores em \mathbb{R} .

Os procedimentos adotados no método envolvem a criação de uma nova função, soma da lagrangiana (2.8) com o termo de penalização adotado no método da penalidade exterior. Assim, tem-se um pseudo-objetivo, dito *lagrangiano aumentado*, da forma

$$A(X, \Lambda, r) = f(X) + \sum_{k=1}^m \left[\lambda_k h_k(X) + r \left(h_k(X) \right)^2 \right] \tag{2.11}$$

onde X é o vetor das variáveis de decisão, Λ o vetor dos multiplicadores de Lagrange e $r > 0$ o coeficiente de penalidade.

É fácil perceber que, caso $\Lambda = 0$, tem-se a abordagem de (2.10) pelo método da penalidade exterior, que se pretende evitar pelos motivos anteriormente expostos. Entretanto, certas diferenças fazem-se aqui presentes. Caso se conheça de antemão o valor Λ^* da solução (X^*, Λ^*) do problema de Kuhn-Tucker associado a (2.10), a primeira das condições (2.9), que estabelece que X^* é solução de

$$\nabla L(X, \Lambda^*) = \nabla f(X) + \sum_{k=1}^m \lambda_k^* \nabla h_k(X) = 0 \quad (2.12)$$

juntamente com o fato de que no ótimo tem-se $h_k(X^*) = 0$ para todo k , permite afirmar que X^* é solução de

$$\nabla f(X) + \sum_{k=1}^m \left[\lambda_k^* + 2r h_k(X) \right] \nabla h_k(X) = \nabla A(X, \Lambda^*, r) = 0 \quad (2.13)$$

Nota-se então que X^* independe do valor adotado para o coeficiente de penalidade r . Desta forma, não se requer aqui que $r \rightarrow \infty$ como no método da penalidade exterior, evitando-se assim os problemas numéricos que daí decorrem. Além disso, o conhecimento prévio de Λ^* exige apenas uma minimização de $A(X, \Lambda^*, r)$ em relação a X para a obtenção de X^* .

É claro, entretanto, que não se conhece previamente o valor de Λ^* . Na prática, o que se faz é, fixado $r > 0$, adotar uma estimativa Λ^1 para Λ^* . Para este valor, minimiza-se $A(X, \Lambda^1, r)$ em relação a X para a obtenção de X^1 , primeira aproximação de X^* . A seguir, reavalia-se adequadamente Λ , encontrando-se Λ^2 , que permitirá a obtenção de X^2 , mínimo de $A(X, \Lambda^2, r)$ em relação a X . Tais procedimentos geram então duas seqüências de vetores, $\Lambda^1, \Lambda^2, \Lambda^3, \dots$ e X^1, X^2, X^3, \dots que, no limite, pretende-se que converjam para Λ^* e X^* respectivamente.

O principal problema aí existente, o da forma de atualizar Λ , foi abordado inicialmente por Hestenes [8]. Sua formulação, detalhada a seguir, apesar de não ser a única existente, é, por sua extrema simplicidade, largamente

utilizada .

Na p-ésima iteração, obtido X^P através da minimização de $\nabla A(X, \Lambda^P, r) = 0$ em relação a X , é necessário que

$$\nabla A(X^P, \Lambda^P, r) = \nabla f(X^P) + \sum_{k=1}^m \left[\lambda_k^P + 2 r h_k(X^P) \right] \nabla h_k(X^P) = 0 \quad (2.14)$$

e, no ótimo, as condições de Kuhn-Tucker estabelecem que

$$\nabla L(X^P, \Lambda^*, r) = \nabla f(X^P) + \sum_{k=1}^m \lambda_k^* \nabla h_k(X^P) = 0 \quad (2.15)$$

Assim, para que, no limite, a condição (2.14) se reduza a (2.15), sugere-se adotar

$$\lambda_k^{P+1} = \lambda_k^P + 2 r h_k(X^P) \quad (2.16)$$

para a obtenção de X^{P+1} através da minimização de $A(X, \Lambda^{P+1}, r)$.

Caso a sequência (Λ^P) convirja para $\bar{\Lambda}$, a própria forma através da qual é construída a sequência (X^P) assegura a convergência desta última para um certo \bar{X} . Além disso, $(\bar{X}, \bar{\Lambda})$ é uma solução do problema de Kuhn-Tucker.

Evidentemente, a priori, não se tem garantia de que (Λ^P) convirja. Além disso, mesmo que a convergência ocorra, o fato isolado de que $(\bar{X}, \bar{\Lambda})$ é uma solução do problema de Kuhn-Tucker não é suficiente para garantir que $(\bar{X}, f(\bar{X}))$ seja a solução do problema (2.10).

Antes que se discuta a convergência do processo, é necessário que sejam estabelecidos alguns conceitos:

1. Uma bola aberta em \mathbb{R}^n , de centro P e raio $r > 0$, é o seguinte conjunto:

$$B(P,r) = \left\{ X \in \mathbb{R}^n : \|X - P\| < r \right\} \quad (2.17)$$

onde $\| \cdot \|$ denota a norma euclidiana.

2. Uma função $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ é dita *lipschitziana* em $S \subset \mathbb{R}^n$ se existir $M > 0$ tal que para todo X e Y em S tenha-se

$$\|F(X) - F(Y)\| \leq M \|X - Y\| \quad (2.18)$$

Rockafellar [14] provou que o Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado converge para um mínimo global do problema (2.10) no caso em que a função objetivo e região viável são convexas.

Bertsekas [15] demonstrou que se:

i) existir uma solução (X^*, Λ^*) do problema de Kuhn-Tucker associado ao problema de otimização (2.10) que satisfaça as hipóteses do teorema 2.5,

ii) caso as matrizes hessianas das funções f e h_k sejam lipschitzianas numa bola aberta de centro X^* ,

então a sequência (X^p, Λ^p) convergirá para (X^*, Λ^*) mesmo para valores finitos de r ; além disso, $(X^*, f(X^*))$ será a solução global do problema (2.10). Nos demais casos, assegura-se apenas soluções locais.

A convergência da sequência (X^p, Λ^p) para (X^*, Λ^*) pode ser

acelerada ao utilizar-se X^{p-1} como ponto de partida para a determinação de X^p e se, a cada iteração, modificar-se adequadamente o valor de r . Assim, a obtenção de X^p é feita através da minimização de

$$A(X, \lambda^p, r_p) = f(X) + \sum_{k=1}^m \left[\lambda_k^p h_k(X) + r_p \left(h_k(X) \right)^2 \right] \quad (2.19)$$

Hestenes [8] sugere que se adote

$$r_{p+1} = \gamma r_p \quad (2.20)$$

para a atualização do coeficiente de penalidade, onde a constante γ não deve ser muito superior à unidade. Também propõe que se mantenha r_p inferior a um certo valor r_{\max} .

2.5 - ABORDAGEM DO PROBLEMA COM RESTRIÇÕES DE DESIGUALDADE

Inúmeros condicionantes em projetos de engenharia, como limitações relativas a dimensões, deslocamentos, tensões e frequências, podem traduzir-se através de restrições de desigualdade impostas sobre as variáveis de projeto. Assim, é extremamente importante que uma técnica que se proponha a ser uma ferramenta efetiva para o engenheiro seja capaz de solucionar o seguinte problema:

para

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

minimizar

$$f(X) \tag{2.21}$$

atendidas as condições:

$$g_j(X) \leq 0 \quad j = 1, 2, \dots, l$$

A abordagem do problema (2.21), pelo Método do Lagrangiano Aumentado de Hestenes, efetuada por Rockafellar [9] consiste em, para cada restrição $g_j(X) \leq 0$, introduzir uma nova variável z_j , dita *variável de folga*, de tal forma que a solução de (2.21) possa ser obtida através da resolução do problema equivalente:

para

$$(X, Z) = (x_1, \dots, x_n, z_1, \dots, z_l)^T \in \mathbb{R}^{n+l}$$

minimizar

$$F(X, Z) = f(X) \tag{2.22}$$

atendidas as condições:

$$\bar{h}_j(X, Z) = g_j(X) + z_j^2 = 0 \quad j = 1, 2, \dots, l$$

Entretanto, em situações concretas de engenharia, o número de restrições de desigualdade pode ser elevado. Assim, apesar de (2.21) ser passível de ser resolvido pelo Método de Hestenes para problemas com restrições de igualdade, os procedimentos podem tornar-se consideravelmente mais demorados. Aconselha-se, então, eliminar do problema as variáveis de folga z_j da expressão do lagrangiano aumentado

$$A(X, Z, \Lambda, r) = f(X) + \sum_{j=1}^l \left[\lambda_j \left(g_j(X) + z_j^2 \right) + r \left(g_j(X) + z_j^2 \right)^2 \right] \quad (2.23)$$

associado a (2.21). Isto pode ser conseguido levando-se em conta que a minimização de $A(X, Z, \Lambda^p, r_p)$ pode ser feita em duas etapas, primeiramente em relação a Z e depois em relação a X . Como na primeira etapa deve-se ter $\nabla_Z A = 0$, resulta que, a cada iteração, para $j = 1, 2, \dots, l$

$$\frac{\partial A}{\partial z_j} = 2 z_j \left[\lambda_j^p + 2 r_p \left(g_j(X) + z_j^2 \right) \right] = 0 \quad (2.24)$$

donde

$$z_j^2 = 0 \quad \text{ou} \quad z_j^2 = -g_j(X) - \frac{\lambda_j^p}{2 r_p} \quad (2.25)$$

Evidentemente, $z_j^2 \geq 0$ para todo j . Deste modo,

$$z_j^2 = \max \left[0, -g_j(X) - \frac{\lambda_j^p}{2 r_p} \right] \quad (2.26)$$

donde

$$g_j(X) + z_j^2 = \max \left[g_j(X), -\frac{\lambda_j^p}{2 r_p} \right] \quad (2.27)$$

Assim, o lagrangiano aumentado (2.22) pode ser expresso independentemente de Z como

$$\bar{A}(X, \Lambda, r) = f(X) + \sum_{j=1}^l \left[\lambda_j \varphi_j(X, \Lambda, r) + r \left(\varphi_j(X, \lambda, r) \right)^2 \right] \quad (2.28)$$

onde

$$\varphi_j(X, \Lambda, r) = \max \left[g_j(X), -\frac{\lambda_j}{2r} \right] \quad (2.29)$$

Deste modo, a solução $(X^*, f(X^*))$ de (2.20) será obtida através de uma sequência de minimizações de $\bar{A}(X, \Lambda^p, r_p)$ em relação a X , com r_p e Λ^p atualizados respectivamente por (2.20) e por

$$\lambda_j^{p+1} = \lambda_j^p + 2 r_p \varphi_j(X^p, \Lambda^p, r_p) \quad (2.30)$$

2.6 - O PROBLEMA COM RESTRICÇÕES DE IGUALDADE E DESIGUALDADE

Todos os procedimentos relativos à resolução do problema geral de otimização (2.1) já foram abordados ao longo deste capítulo. Resta apenas agrupá-los em um algoritmo que englobe tanto restrições de desigualdade quanto de igualdade. Para isto será conveniente reescrever-se (2.1) como o problema de

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(X) \\ \text{atendidas} & \\ g_j(X) \leq 0 & j = 1, 2, \dots, l \\ h_k(X) = 0 & k = 1, 2, \dots, m < n \end{array} \quad (2.31)$$

com

$$X \in \Gamma = \left\{ X \in \mathbb{R}^n \mid a_i \leq x_i \leq b_i \text{ com } i=1,2,\dots,n \right\}$$

cujo lagrangiano aumentado associado é

$$A(X, \Lambda, r) = f(X) + \sum_{j=1}^l \left[\lambda_j \varphi_j(X, \Lambda, r) + r \left(\varphi_j(X, \lambda, r) \right)^2 \right] + \\ + \sum_{k=1}^m \left[\lambda_{k+1} h_k(X) + r \left(h_k(X) \right)^2 \right] \quad (2.32)$$

onde $\varphi_j(X, \Lambda, r)$ é dada por (2.29).

Feito isto, o algoritmo para a obtenção de $(X^*, f(X^*))$, a solução de (2.31), pode ser assim descrito:

Passo 1: Fazer $p = 1$. Adotar valores iniciais adequados para Λ^p e $r_p > 0$. Fixar r_{\max} .

Passo 2: Obter X^p , ponto de mínimo local de

$$F(X) = A(X, \Lambda^p, r_p) \quad X \in \Gamma \quad (2.33)$$

Passo 3: Atualizar os multiplicadores de Lagrange por

$$\lambda_j^{p+1} = \lambda_j^p + 2 r_p \varphi_j(X^p, \Lambda^p, r_p) \\ \text{e} \\ \lambda_{k+1}^{p+1} = \lambda_{k+1}^p + 2 r_p h_k(X^p) \quad (2.34)$$

Passo 4: Se $\Lambda^{p+1} = \Lambda^p$, a otimização está concluída e a solução de (2.31) é $(X^p, f(X^p))$. Caso contrário, efetuar o passo 5.

Passo 5: Fazer $\Lambda^p = \Lambda^{p+1}$. Atualizar o coeficiente de penalidade através de

$$r_{p+1} = \gamma r_p \quad (2.35)$$

onde γ não deve ser muito superior à unidade. Se $r_{p+1} > r_{\max}$, tomar $r_p = r_{\max}$; caso contrário, fazer $r_p = r_{p+1}$. Retornar ao passo 2.

É importante destacar aqui que este é o algoritmo básico do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado. Em sua implementação através de um programa computacional, pequenas alterações, como as descritas no capítulo 5 para o critério de convergência, poderão ser introduzidas, visando maior precisão e confiabilidade nos resultados.

A adoção do valor inicial $\Lambda = 0$ para o vetor dos multiplicadores de Lagrange é largamente utilizada.

As escolhas dos valores inicial r_1 e limite r_{\max} dos coeficientes de penalidade constituem, na prática, um problema bem mais delicado. Valores muito pequenos podem tornar a convergência do processo extremamente lenta, enquanto que valores muito elevados podem fazer com que as minimizações de (2.33) tornem-se mal condicionadas numericamente.

Finalmente, para encerrar este capítulo, cumpre analisar uma situação especial. Há casos em que sabe-se de antemão que alguma restrição lateral $a_i \leq x_i \leq b_i$ pode vir a tornar-se ativa no ótimo X^* . Nestes casos, dependendo dos procedimentos adotados na minimização de (2.33), a substituição da referida restrição lateral por

$$a_i - \mu \leq x_i \leq b_i + \mu \quad (2.36)$$

onde $\mu > 0$, combinada com a introdução de duas restrições de desigualdade adicionais

$$\bar{g}(X) = a_i - x_i \leq 0$$

e

$$\bar{\bar{g}}(X) = x_i - b_i \leq 0$$

(2.37)

pode tornar os procedimentos envolvidos melhor condicionados numericamente.

3 - O ALGORITMO DE DAVIDON, FLETCHER E POWELL

Neste capítulo, apresenta-se o problema de otimização irrestrita. Ao descrever-se a metodologia numérica básica de abordagem do mesmo, são brevemente esboçados os procedimentos que caracterizam as técnicas de ordem zero, de primeira e segunda ordem. Finalmente, após serem citadas as condições que caracterizam as soluções do problema, é apresentado o Algoritmo de Davidon, Fletcher e Powell.

3.1 - INTRODUÇÃO

Na otimização de projetos de engenharia, frequentemente defronta-se com o seguinte problema, denominado *problema de otimização sem restrições* ou *problema de otimização irrestrita*:

para

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$$

determinar mínimos locais de

(3.1)

$F(X)$

onde a função F assume valores em \mathbb{R} . Além disso, o problema (3.1) pode surgir como um subproblema a ser resolvido para solucionar o problema geral de otimização (2.1); é o que ocorre, por exemplo, quando, ao abordar (2.1) pelo Método do

Multiplicador de Lagrange Aumentado, recai-se em minimizações sucessivas de (2.33) no espaço de projeto Γ .

O Cálculo Diferencial dispõe de procedimentos analíticos para a resolução de (3.1), nos quais os mínimos locais de F são pesquisados no conjunto de pontos que anulam o seu gradiente. Entretanto, em situações de engenharia, a utilização destas técnicas é frequentemente inviabilizada, pois é comum não se dispor sequer da expressão explícita da função objetivo F em termos das variáveis de decisão. Assim, nestes casos, o problema (3.1) é geralmente abordado através de procedimentos iterativos.

3.2 - MÉTODOS NUMÉRICOS DE OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

Os métodos numéricos de resolução do problema (3.1) adotam o procedimento de, partindo de um ponto inicial X^1 arbitrariamente escolhido, construir em \mathbb{R}^n uma sequência de pontos X^1, X^2, X^3, \dots de modo que, no limite, a sequência $(X^q, F(X^q))$ convirja para a solução $(X^*, F(X^*))$ do problema. Na grande maioria destas técnicas, conhecido um termo X^q , a metodologia empregada para a obtenção de seu sucessor X^{q+1} é basicamente a mesma. Primeiramente, escolhe-se em \mathbb{R}^n uma direção adequada S^q , denominada *direção de busca*. A seguir, determina-se em \mathbb{R} , ou \mathbb{R}_+ , dependendo da técnica de otimização utilizada, o ponto de mínimo α^* da função de variável única

$$\omega(\alpha) = F(X^q + \alpha S^q) \quad (3.2)$$

Finalmente adota-se

$$X^{q+1} = X^q + \alpha^* S^q \quad (3.3)$$

O processo de obtenção de X^{q+1} através da minimização da função ω é denominado *busca unidimensional* ("line search", na literatura internacional).

As diferenças entre os diversos algoritmos que utilizam os procedimentos acima descritos encontram-se principalmente na maneira de se escolher a direção de busca S^q , a qual, a partir de X^q , conduzirá a X^{q+1} . Tais algoritmos podem ser enquadrados em três grupos básicos: métodos de ordem zero, de primeira e de segunda ordem.

3.2.1 - MÉTODOS DE ORDEM ZERO

Na busca pelo ótimo, certas técnicas não requerem os valores das derivadas da função objetivo. São os chamados *métodos de ordem zero*. Dentre os algoritmos deste tipo estão, por exemplo, os métodos: das Coordenadas Cíclicas, de Hooke e Jeeves, de Powell e de Rosenbrock [4,5,16]. Neles, a direção S^q de cada busca unidimensional geralmente está relacionada com as direções dos eixos coordenados ou com as adotadas nas buscas que a precederam.

Tais métodos apresentam várias características positivas: são fáceis de ser implementados computacionalmente, são confiáveis, podem lidar com funções tanto contínuas quanto

descontínuas, são capazes de trabalhar inclusive com funções de variáveis discretas e costumam apresentar sucesso em diversos casos em que métodos de primeira e de segunda ordem falham devido a maus condicionamentos numéricos. Infelizmente, entretanto, apresentam o inconveniente de exigir um número muito elevado de avaliações da função objetivo para se atingir uma certa precisão de resultados. Assim, seu uso adequa-se mais a problemas em que o número de variáveis de decisão é pequeno e o cálculo da função objetivo não exige procedimentos muito complexos.

3.2.2 - MÉTODOS DE PRIMEIRA ORDEM

As técnicas de abordagem do problema de otimização irrestrita (3.1) que utilizam, na determinação das direções de busca S^q , o gradiente da função objetivo

$$\nabla F = \left(\frac{\partial F}{\partial x_1}, \frac{\partial F}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F}{\partial x_n} \right) \quad (3.4)$$

recebem a designação de *métodos de primeira ordem*. Dentre eles pode-se citar os métodos do Gradiente ("steepest descent", na literatura internacional), de Fletcher e Reeves, da Projeção do Gradiente e os da Métrica Variável [4,5,16], dentre os quais se insere o Método de Davidon, Fletcher e Powell.

Evidentemente, por exigirem que o gradiente de F seja

disponível, quer diretamente, quer através de cálculos envolvendo diferenças finitas, tais técnicas adequam-se apenas a problemas em que a função objetivo é diferenciável.

O desempenho dos métodos de primeira ordem costuma ser bastante prejudicado quando as derivadas parciais de F são descontínuas. Entretanto, na hipótese delas serem contínuas, este desempenho é frequentemente superior aos dos métodos de ordem zero.

Dentre os algoritmos de primeira ordem, o de implementação mais simples é o Método do Gradiente, que, ao construir a sequência X^1, X^2, X^3, \dots , leva em conta que, na vizinhança de cada ponto X^q , F pode ser aproximada linearmente por

$$\mathcal{L}(X) = F(X^q) + [\nabla F(X^q)]^T \cdot (X - X^q) \quad (3.5)$$

É fácil notar que, no segundo membro de (3.5), a primeira parcela é fixa e a segunda corresponde ao produto escalar entre os vetores $\nabla F(X^q)$, que também é fixo, e $(X - X^q)$. Logo, o maior decréscimo da aproximação \mathcal{L} ocorrerá quando X for escolhido sobre a semi-reta de origem X^q e orientação $-\nabla F(X^q)$. Desta forma, ao adotar-se como direção de busca unidimensional o vetor

$$S^q = -\nabla F(X^q) \quad (3.6)$$

a sequência X^1, X^2, X^3, \dots , obtida através de minimizações de (3.2) em \mathbb{R}_+ , conduzirá a valores cada vez menores de $F(X)$.

Ao utilizar-se o Método do Gradiente, percebe-se que nos primeiros estágios da otimização seu desempenho é satisfatório, mas, ao aproximar-se do mínimo de F , sua performance muitas vezes decai sensivelmente, pois passa-se a efetuar uma série de pequenos passos ortogonais, retardando-se a convergência.

Para contornar este problema, vários métodos de primeira ordem adotam para direção de busca

$$s^q = - \nabla F(X^q) + g \quad (3.7)$$

ou

$$s^q = - G \nabla F(X^q) \quad (3.8)$$

onde g e G são, respectivamente, um vetor e uma matriz apropriados à aceleração da convergência do processo. Os Métodos da Métrica Variável, e dentre eles o Método de Davidon, Fletcher e Powell, efetuam a alteração estabelecida em (3.8).

3.2.2 - MÉTODOS DE SEGUNDA ORDEM

As técnicas de otimização que utilizam, na solução do problema de otimização sem restrições (3.1), a matriz hessiana da função objetivo

$$H_F = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

são denominados *métodos de segunda ordem*. Dentre eles, estão os métodos de Newton, de Newton Modificado e de Marquardt [4,5,16]. A utilização destas técnicas restringe-se aos problemas em que a função objetivo F é diferenciável até a segunda ordem, principalmente aos casos em que as derivadas parciais de ordem dois de F são contínuas.

O mais simples destes algoritmos é o Método de Newton. Os procedimentos aí envolvidos levam em conta que, numa vizinhança de X^q , F pode ser aproximada quadraticamente por

$$Q(X) = F(X^q) + [\nabla F(X^q)]^T (X - X^q) + \frac{1}{2} (X - X^q)^T H_F(X^q) (X - X^q) \quad (3.10)$$

Diferenciando (3.10) e levando-se em conta que um mínimo local de Q é, necessariamente, um zero de ∇Q , tem-se

$$\nabla F(X^q) + H_F(X^q) (X - X^q) = 0 \quad (3.11)$$

Então, caso a matriz $H_F(X^q)$ seja inversível, a adoção da direção de busca

$$s^q = - [H_F(X^q)]^{-1} \nabla F(X^q) \quad (3.12)$$

pode mostrar-se adequada para, através de minimizações de (3.2), contruir uma sequência X^1, X^2, X^3, \dots convergente para um mínimo local de F .

Na otimização de projetos de engenharia, a utilização de métodos de segunda ordem é frequentemente desaconselhável, pois geralmente a matriz hessiana só é disponível através de diferenças finitas, e, nestes casos, o elevado número de avaliações da função objetivo requerido a cada iteração e os erros que se introduz à matriz em tais avaliações acabam por inviabilizar o processo.

3.3 - CARACTERIZAÇÃO DOS MÍNIMOS LOCAIS NA OTIMIZAÇÃO SEM RESTRIÇÕES

Na resolução do problema de minimização irrestrita (3.1) através de procedimentos numéricos iterativos, é construída em \mathbb{R}^n uma sequência de pontos X^1, X^2, X^3, \dots que se espera convergir para uma solução local do problema. Assim, na hipótese da convergência de (X^q) para um certo X^* , é importante que se assegure que $(X^*, F(X^*))$ seja uma solução local de (3.1).

Antes de enunciar as condições que caracterizam estes mínimos locais, é conveniente destacar aqui os conceitos de matriz semi-definida positiva e definida positiva. Para isto, considere-se uma matriz quadrada M de ordem n . Diz-se que M é *semi-definida positiva* se, para todo vetor $Y \in \mathbb{R}^n$, tem-se

$$Y^T M Y \geq 0 \quad (3.13)$$

e definida positiva se, para todo vetor não nulo Y , tem-se

$$Y^T M Y > 0 \quad (3.14)$$

Estabelecidos estes conceitos, pode-se enunciar as condições relacionadas às soluções locais de (3.1) nos casos em que a função objetivo F é diferenciável até a segunda ordem.

Teorema 3.1 (Condições necessárias ao mínimo local) [5]

Para que $(X^*, F(X^*))$ seja uma solução local de (3.1) é necessário que

- i) $\nabla F(X^*) = 0$,
- ii) $H_F(X^*)$ seja semi-definida positiva.

Teorema 3.2 (Condições suficientes ao mínimo local) [5]

Se

- i) $\nabla F(X^*) = 0$,
- ii) $H_F(X^*)$ é definida positiva,

então $(X^*, F(X^*))$ é uma solução local de (3.1).

3.4 - O MÉTODO DE DAVIDON, FLETCHER E POWELL

Certos procedimentos iterativos de resolução de (3.1) utilizam, na determinação de cada direção de busca S^q , a

$F(x)$

$$S^q = -G^q \nabla F(X^q)$$

alteração estabelecida em (3.8), atualizando a matriz G a cada iteração. Nestes métodos, tem-se então:

$$S^q = - G^q \nabla F(X^q) \quad (3.15)$$

Tais técnicas são designadas por *Métodos da Métrica Variável* já que, em (3.8), a matriz G é dita *métrica*.

A idéia central nestes métodos é que ao atualizar G através de

$$G^{q+1} = G^q + G_c^q \quad (3.16)$$

a matriz de correção G_c^q seja escolhida de forma que a sequência G^1, G^2, G^3, \dots aproxime-se de $[H_F(X^*)]^{-1}$, a inversa da matriz hessiana de F no ponto ótimo. Por simular o Método de Newton, tais técnicas são também designadas por *Métodos de Quase-Newton*.

Normalmente, na primeira iteração adota-se $G^1 = I_n$ (matriz identidade de ordem n). Assim, a primeira busca unidimensional dá-se como se fosse utilizado o Método do Gradiente.

Para que se determine a matriz de correção G_c^q , leva-se em conta que, na proximidade de X^q , o gradiente de F pode ser aproximado linearmente por

$$\nabla F(X) \cong \nabla F(X^q) + H_F(X^q) (X - X^q) \quad (3.17)$$

Logo, caso $H_F(X^q)$ seja inversível,

$$(X^{q+1} - X^q) \cong [H_F(X^q)]^{-1} [\nabla F(X^{q+1}) - \nabla F(X^q)] \quad (3.18)$$

Assim, como pretende-se que G^{q+1} aproxime $[H_F(X^*)]^{-1}$, deve-se impor

$$(X^{q+1} - X^q) = (G^q + G_c^q) [\nabla F(X^{q+1}) - \nabla F(X^q)] \quad (3.19)$$

donde G_c^q deve ser uma solução da equação matricial

$$G_c^q Y = P - G^q Y \quad (3.20)$$

onde

$$P = X^{q+1} - X^q \quad (3.21)$$

e

$$Y = \nabla F(X^{q+1}) - \nabla F(X^q) \quad (3.22)$$

É fácil verificar, através de uma simples substituição, que, para todo W e Z em \mathbb{R}^n , a matriz

$$M = \frac{P W^T}{W^T Y} - \frac{G^q Y Z^T}{Z^T Y} \quad (3.23)$$

é uma solução de (3.20).

No método proposto inicialmente por Davidon [2] e posteriormente desenvolvido por Fletcher e Powell, o chamado *Método DFP*, adota-se

$$W = P \quad (3.24)$$

e

$$Z = G^q Y \quad (3.25)$$

donde

$$G_c^q = \frac{P P^T}{P^T Y} - \frac{G^q Y (G^q Y)^T}{(G^q Y)^T Y} \quad (3.26)$$

Cabe salientar aqui que outras escolhas de W e Z conduzem a variações do Método da Métrica Variável, como o Método de Broydon, Fletcher, Goldfarb e Shanno [5].

As escolhas de W e Z definidas em (3.24) e (3.25), juntamente com a adoção de $G^1 = I_n$, faz com que cada matriz da sequência G^1, G^2, G^3, \dots seja, além de simétrica, positiva definida [9]. Assim, a cada iteração,

$$[\nabla F(X^q)]^T S^q = - [\nabla F(X^q)]^T G^q \nabla F(X^q) < 0 \quad (3.27)$$

o que faz com que as direções de busca S^q atuem sempre no sentido de minimizar F , garantindo a estabilidade do processo. Além disso, nos casos em que F é quadrática, a convergência para a solução $(X^*, F(X^*))$ do problema dá-se em exatamente n iterações, onde n é o número de variáveis de decisão do problema, tendo-se ainda, conforme [9],

$$G^{n+1} = [H_F(X^*)]^{-1} \quad (3.28)$$

O Algoritmo de Davidon, Fletcher e Powell pode ser sumarizado através dos seguintes passos:

Passo 1: Fazer $q = 1$. Escolher o ponto inicial X^q , calcular o gradiente $\nabla F(X^q)$ e adotar $G^q = I_n$.

Passo 2: Tomar como direção de busca $S^q = -G^q \nabla F(X^q)$.

Passo 3: Obter $X^{q+1} = X^q + \alpha^* S^q$, onde α^* é o ponto de mínimo da função $\omega : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $\omega(\alpha) = F(X^q + \alpha S^q)$.

Passo 4: Calcular $\nabla F(X^{q+1})$ e atualizar G^q através de

$$G^{q+1} = G^q + \frac{P P^T}{P^T Y} - \frac{G^q Y (G^q Y)^T}{(G^q Y)^T Y} \quad (3.29)$$

Passo 5: Fazer $X^q = X^{q+1}$ e $G^q = G^{q+1}$. Retornar ao passo 2 até que a convergência seja alcançada.

O critério adotado para a convergência é que o gradiente de F se anule. Entretanto, pode-se adotar o critério alternativo de que o valor da função objetivo não se altere significativamente por duas ou mais iterações consecutivas.

Na implementação numérica do algoritmo através de um programa computacional, certos cuidados devem ser observados. Em primeiro lugar, a cada n iterações, onde n designa o número de variáveis de decisão, deve-se reiniciar o processo, fazendo $G^{n+1} = I_n$. Segundo, devido a erros numéricos, pode ocorrer que alguma matriz G^q deixe de ser definida positiva; assim, antes de se efetuar cada iteração, é conveniente verificar se a

condição (3.27) é satisfeita e, em caso negativo, reiniciar com $G^q = I_n$. Finalmente, deve-se assegurar de que α^* seja realmente o ponto de mínimo de $\omega(\alpha)$, o que é feito verificando-se se

$$[\nabla F(X^{q+1})]^T (X - X^q) = 0 \quad (3.30)$$

e, caso isto não ocorra, adotar $G^{q+1} = I_n$ ao efetuar a próxima iteração.

Com estes cuidados, o Algoritmo de Davidon, Fletcher e Powell revela-se, na prática, um método eficiente e confiável de resolução do problema de otimização irrestrita (3.1).

4 - BUSCA UNIDIMENSIONAL

Neste capítulo, após serem brevemente citadas as técnicas capazes de efetuar as buscas unidimensionais requeridas em procedimentos de otimização, são apresentados os métodos da Secção Áurea e da Aproximação Polinomial.

4.1 - INTRODUÇÃO

Tanto na otimização restrita através do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado, quanto na otimização irrestrita de funções com mais de uma variável de decisão, em determinadas etapas do processo, recai-se na chamada busca unidimensional, ou seja, na minimização de uma função real

$$\omega(\alpha) = F(X^q + \alpha S^q) \quad (4.1)$$

de um única variável real α . Assim, ao estabelecer-se procedimentos numéricos de programação não-linear, requer-se que neles sejam incluídas técnicas capazes de solucionar o seguinte problema:

para

$$\alpha \in I$$

minimizar

$$\omega(\alpha)$$

(4.2)

onde ω assume valores em \mathbb{R} e $I = [a_0, b_0]$ é um intervalo de \mathbb{R} .

Naturalmente, não se conhece a priori a exata localização do ponto de mínimo, α^* , de ω em I . Assim, I costuma ser designado por *intervalo de incerteza*.

É claro que as técnicas exatas do Cálculo Diferencial não se prestam à abordagem do problema (4.1) no contexto das otimizações de projetos de engenharia, já que elas requerem a expressão analítica da derivada de ω ,

$$\frac{d\omega}{d\alpha} = \frac{\partial F}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \alpha} + \frac{\partial F}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial \alpha} + \dots + \frac{\partial F}{\partial x_n} \frac{\partial x_n}{\partial \alpha} \quad (4.3)$$

em casos em que frequentemente não se dispõe sequer da expressão analítica de F em termos de $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$. Desta forma, impõe-se o estabelecimento de procedimentos numéricos de resolução de (4.2).

Dentre as técnicas numéricas de abordagem de (4.2), algumas, como os métodos da Busca Uniforme, de Fibonacci e da Secção Áurea, objetivam apenas a redução do intervalo de incerteza I a um intervalo de menor amplitude; outras, como os métodos da Aproximação Polinomial, de Newton-Raphson e da Bissecção, visam determinar uma aproximação de α^* , o ponto de mínimo de ω em I . As descrições de tais técnicas podem ser encontradas em [4], [5] e [16].

É comum optar-se por uma combinação de dois destes métodos. Assim, pode-se adotar, por exemplo, o Método da Secção Áurea para reduzir o intervalo I a um intervalo de incerteza menor $I' \subset I$ e, a seguir, utilizar uma aproximação

polinomial de ω em I' para estimar o ponto de mínimo α^* .

4.2 - REDUÇÃO DO INTERVALO DE INCERTEZA PELO MÉTODO DA SECÇÃO ÁUREA

As diversas técnicas de redução do intervalo de incerteza $[a_0, b_0]$, partem do pressuposto de que ω é unimodal neste intervalo. Assim, se α^* é o ponto de mínimo de ω em $[a_0, b_0]$, ω é decrescente em $[a_0, \alpha^*]$ e crescente em $[\alpha^*, b_0]$ (figura 4.1).

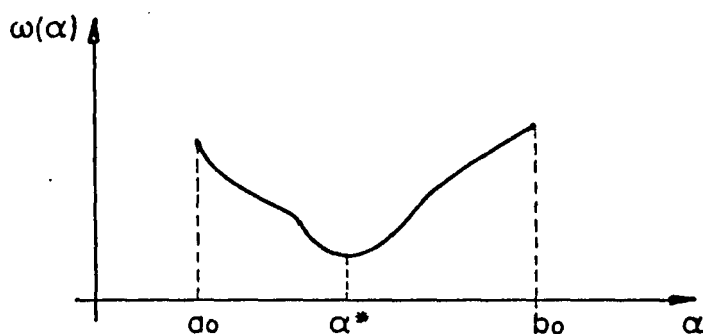


Figura 4.1. Função unimodal

Tais técnicas fundamentam-se no teorema a seguir:

Teorema 4.1 [5]

Seja α^* o ponto de mínimo em $[a_0, b_0]$ de uma função ω , unimodal neste intervalo. Sejam $x_0, y_0 \in (a_0, b_0)$ com $x_0 < y_0$.

Então,

- i) se $\omega(x_0) > \omega(y_0)$, $\alpha^* \in [x_0, b_0]$
- ii) se $\omega(x_0) < \omega(y_0)$, $\alpha^* \in [a_0, y_0]$

O teorema 4.1 pode ser ilustrado através da figura 4.2.

Apesar da igualdade $\omega(x_0) = \omega(y_0)$ ser rara na prática, sua ocorrência permite concluir que $\alpha^* \in [x_0, y_0]$, valendo assim, tanto a assertiva (i), quanto a assertiva (ii) do teorema.

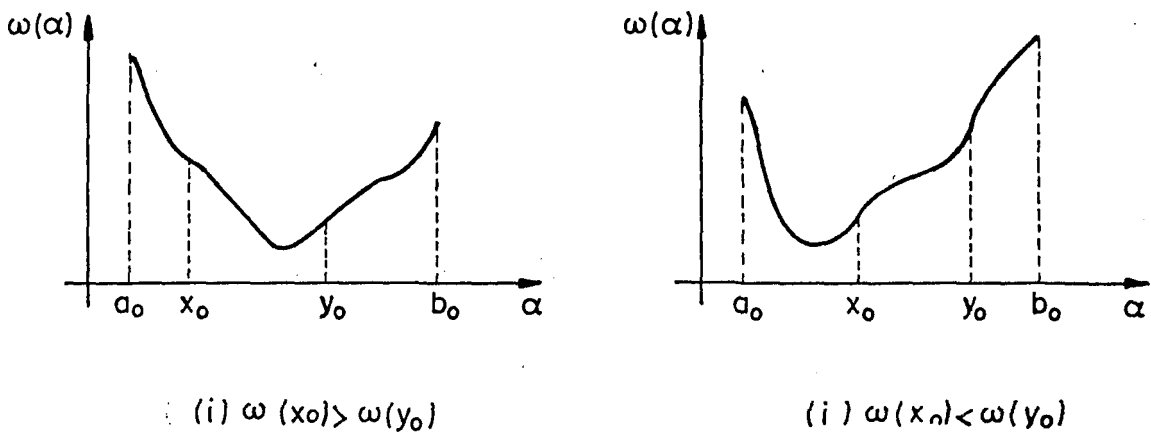


Figura 4.2. Casos (i) e (ii) do teorema 4.1

O teorema 4.1, ao estabelecer uma forma de eliminar do intervalo $[a_0, b_0]$ um subintervalo no qual sabe-se que o ponto de mínimo não se encontra, é, então, uma ferramenta efetiva para a redução de $[a_0, b_0]$ a um intervalo de incerteza menor, $[a_1, b_1]$, que, dependendo dos valores de $\omega(x_0)$ e $\omega(y_0)$ pode ser $[x_0, b_0]$ ou $[a_0, y_0]$. É fácil perceber que a aplicação iterativa destes procedimentos conduz à obtenção de uma sequência $[a_0, b_0], [a_1, b_1], [a_2, b_2], \dots$ de intervalos de incerteza cada vez menores.

Na construção desta sequência, ao reduzir-se o intervalo de incerteza de $[a_s, b_s]$ para $[a_{s+1}, b_{s+1}]$, é comum adotar-se x_s

e y_s equidistantes do centro de $[a_s, b_s]$, de forma que a amplitude do subintervalo eliminado seja a mesma, quer $\omega(x_s) > \omega(y_s)$, quer $\omega(x_s) < \omega(y_s)$.

Aparentemente, quanto mais próximos estiverem x_s e y_s do centro de $[a_s, b_s]$, mais rápido será o procedimento global de redução, já que maiores serão os subintervalos eliminados a cada iteração. Entretanto, não se deve esquecer que, na prática, as avaliações de $\omega(x_s)$ e $\omega(y_s)$ podem requerer procedimentos bastante complexos. Assim, a forma mais eficiente de se acelerar o processo não é necessariamente aquela em que, a cada iteração, o subintervalo eliminado seja o maior possível e sim aquela em que, para uma determinada taxa de redução do intervalo de incerteza, o número de avaliações da função ω seja o menor possível. Isto pode ser facilmente conseguido ao levar-se em conta que, dentre x_s e y_s , apenas um deles será um extremo de $[a_{s+1}, b_{s+1}]$ e que o outro estará no interior deste novo intervalo. Deste modo, apenas mais uma avaliação de ω em um ponto de $[a_{s+1}, b_{s+1}]$ será necessária para determinar o intervalo de incerteza $[a_{s+2}, b_{s+2}]$.

Observando-se estes aspectos, pode-se propor um algoritmo que satisfaça os seguintes requisitos:

- I. Que, a cada iteração, o comprimento do novo intervalo de incerteza $[a_{s+1}, b_{s+1}]$ seja uma fração fixa τ do comprimento do intervalo de incerteza anterior $[a_s, b_s]$. Para isto deve-se ter

$$b_s - x_s = y_s - a_s = \tau (b_s - a_s) \quad (4.4)$$

o que acarreta

$$x_s = a_s + (1 - \tau) (b_s - a_s) \quad (4.5)$$

e

$$y_s = a_s + \tau (b_s - a_s) \quad (4.6)$$

onde $\tau \in (0,1)$ é uma constante.

II. Que,

i) caso $\omega(x_s) > \omega(y_s)$, na iteração seguinte,
em

$$[a_{s+1}, b_{s+1}] = [x_s, b_s] \quad (4.7)$$

adote-se

$$x_{s+1} = y_s \quad (4.8)$$

ii) caso $\omega(x_s) < \omega(y_s)$, na iteração seguinte,
em

$$[a_{s+1}, b_{s+1}] = [a_s, y_s] \quad (4.9)$$

adote-se

$$y_{s+1} = x_s \quad (4.10)$$

Os casos (i) e (ii) do requisito II podem ser visualizados na figura 4.3.

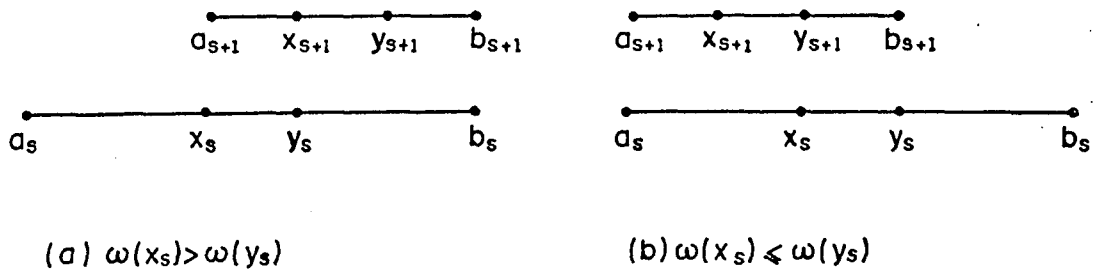


Figura 4.3. Adoção de x_{s+1} e y_{s+1}

Assim, caso $\omega(x_s) > \omega(y_s)$, deve-se ter

$$y_s = x_{s+1} = a_{s+1} + (1 - \tau)(b_{s+1} - a_{s+1}) = x_s + (1 - \tau)(b_s - x_s) \quad (4.11)$$

donde, considerando (4.5) e (4.6), conclui-se que τ deva satisfazer

$$\tau^2 + \tau + 1 = 0 \quad (4.12)$$

Também no caso em que $\omega(x_s) < \omega(y_s)$, quando

$$x_s = y_{s+1} = a_{s+1} + \tau(b_{s+1} - a_{s+1}) = a_s + \tau(y_s - a_s) \quad (4.13)$$

as equações (4.5) e (4.6) impõem que τ deva satisfazer (4.12).

Ora, (4.12) possui apenas uma solução no intervalo (0,1),

$$\tau = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} \cong 0.618034 \quad (4.14)$$

Logo, existe uma única técnica de redução do intervalo de incerteza que atenda simultaneamente os requisitos I e II e nela, a cada iteração, o comprimento do intervalo de incerteza reduz-se a aproximadamente 62% do comprimento do intervalo anterior.

É fácil perceber que, se L_0 denota a amplitude do intervalo inicial $[a_0, b_0]$ e se L_s designa a amplitude do intervalo $[a_s, b_s]$, obtido após s iterações, então o chamado *fator de redução do intervalo de incerteza*,

$$\Delta = \frac{L_s}{L_0} \quad (4.15)$$

será

$$\Delta = \tau^s \quad (4.16)$$

com τ dado por (4.14).

Antes que se sumarize estes procedimentos, é importante destacar que, para $\tau = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2}$, os respectivos comprimentos l e L do menor e do maior subintervalos definidos em $[a_s, b_s]$ por x_s (ou por y_s) guardam entre si a seguinte relação:

$$\frac{l}{L} = \frac{L}{l+L} \quad (4.17)$$

donde x_s (e também y_s) efetua a chamada *divisão áurea* de $[a_s, b_s]$, representada na figura 4.4. Por este motivo, esta técnica costuma ser designada por Método da Secção Áurea.

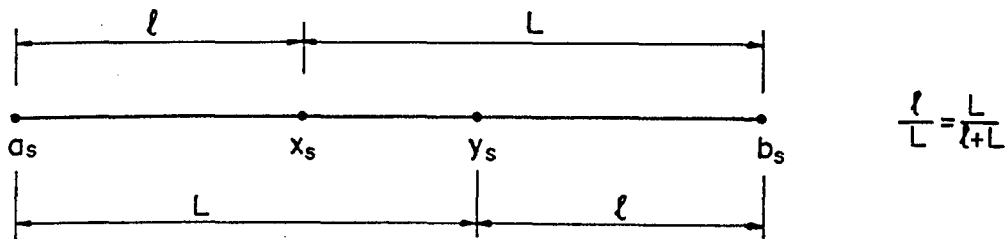


Figura 4.4. Divisão áurea de um intervalo

O Método da Secção Áurea pode ser apresentado através do seguinte algoritmo:

Passo 1: Fixar $\tau = 0.618034$. Definir $\Delta \in (0,1]$, o fator aproximado de redução que se pretende para o intervalo de incerteza. Calcular a amplitude aproximada do intervalo final de incerteza,

$$\epsilon = \Delta (b_0 - a_0) \quad (4.18)$$

Passo 2: Obter

$$x_0 = a_0 + (1 - \tau) (b_0 - a_0) \quad (4.19)$$

e

$$y_0 = a_0 + \tau (b_0 - a_0) \quad (4.20)$$

Avaliar $\omega(x_0)$ e $\omega(y_0)$. Fazer $s = 0$.

Passo 3: Comparar $\omega(x_s)$ e $\omega(y_s)$. Caso $\omega(x_s) < \omega(y_s)$, efetuar o passo 4; caso $\omega(x_s) \geq \omega(y_s)$, executar o passo 5.

Passo 4: Fazer $a_{s+1} = x_s$ e $b_{s+1} = b_s$. Tomar $x_{s+1} = y_s$ e obter

$$y_{s+1} = a_{s+1} + \tau (b_{s+1} - a_{s+1}) \quad (4.21)$$

Avaliar $\omega(y_{s+1})$ e efetuar o passo 6.

Passo 5: Fazer $a_{s+1} = a_s$ e $b_{s+1} = y_s$. Tomar $y_{s+1} = x_s$ e obter

$$x_{s+1} = a_{s+1} + (1 - \tau) (b_{s+1} - a_{s+1}) \quad (4.22)$$

Avaliar $\omega(x_{s+1})$ e efetuar o passo 6.

Passo 6: Verificar se

$$|b_{s+1} - a_{s+1}| \leq \varepsilon \quad (4.23)$$

Em caso positivo, o intervalo de incerteza

final é $[b_{s+1}, a_{s+1}]$ e o processo está encerrado; caso contrário, substituir $s+1$ por s e retornar ao passo 3.

Finalmente, é importante destacar que, na prática, pode ocorrer que não seja verificado o pressuposto de unimodalidade de ω , ou seja, ω pode possuir mais de um mínimo local no intervalo original $[a_0, b_0]$. Neste caso, o intervalo resultante das aplicação do Método da Secção Áurea, apesar de não delimitar necessariamente o mínimo global de ω em $[a_0, b_0]$, delimitará ao menos um dos mínimos locais.

4.3 - ESTIMATIVA DO MÍNIMO, UTILIZANDO APROXIMAÇÃO POLINOMIAL NO INTERVALO DE INCERTEZA REDUZIDO

É sabido que toda função contínua de \mathbb{R} em \mathbb{R} pode ser aproximada em um intervalo fechado através de um polinômio cujo grau depende tanto da amplitude do intervalo quanto da natureza da função. Assim, uma vez efetuada a redução do intervalo de incerteza, de $[a_0, b_0]$ a $[a_s, b_s]$, pode-se obter uma boa estimativa do ponto de mínimo α^* de ω ao determinar-se o ponto de mínimo $\bar{\alpha}$ de uma aproximação polinomial adequada de ω em $[a_s, b_s]$.

Normalmente, a amplitude do intervalo final de incerteza $[a_s, b_s]$ é pequena. Assim, em grande parte dos casos, o ponto de mínimo $\bar{\alpha}$ de uma aproximação polinomial cúbica de ω em $[a_s, b_s]$ revela-se como uma estimativa bastante precisa do

ponto de mínimo α^* de ω .

A obtenção de P , o polinômio de terceiro grau que aproxima ω em $[a_s, b_s]$, pode ser efetuada utilizando-se os pontos $\alpha_1 = a_s$, $\alpha_2 = x_s$, $\alpha_3 = y_s$ e $\alpha_4 = b_s$. Para isto, basta determinar os coeficientes c_0 , c_1 , c_2 e c_3 de

$$P(\alpha) = c_0 + c_1\alpha + c_2\alpha^2 + c_3\alpha^3 \quad (4.24)$$

de forma que

$$P(\alpha_i) = \omega(\alpha_i) \quad i = 1, \dots, 4 \quad (4.25)$$

É claro então que c_0 , c_1 , c_2 e c_3 são a solução do sistema linear

$$\sum : \begin{cases} c_0 + \alpha_1 c_1 + \alpha_1^2 c_2 + \alpha_1^3 c_3 = \omega(\alpha_1) \\ c_0 + \alpha_2 c_1 + \alpha_2^2 c_2 + \alpha_2^3 c_3 = \omega(\alpha_2) \\ c_0 + \alpha_3 c_1 + \alpha_3^2 c_2 + \alpha_3^3 c_3 = \omega(\alpha_3) \\ c_0 + \alpha_4 c_1 + \alpha_4^2 c_2 + \alpha_4^3 c_3 = \omega(\alpha_4) \end{cases} \quad (4.26)$$

onde a matriz dos coeficientes

$$C = \begin{bmatrix} 1 & \alpha_1 & \alpha_1^2 & \alpha_1^3 \\ 1 & \alpha_2 & \alpha_2^2 & \alpha_2^3 \\ 1 & \alpha_3 & \alpha_3^2 & \alpha_3^3 \\ 1 & \alpha_4 & \alpha_4^2 & \alpha_4^3 \end{bmatrix} \quad (4.27)$$

é de Vandermonde, cujo determinante,

$$\det C = \prod_{i>j} (\alpha_i - \alpha_j) \quad (4.28)$$

é não nulo, já que α_1 , α_2 , α_3 e α_4 são pontos distintos de $[a_s, b_s]$. Assim, Σ é um sistema determinado, o que assegura tanto a existência, quanto a unicidade da aproximação polinomial cúbica.

É bom ressaltar que os coeficientes c_i do polinômio P podem ser obtidos não apenas através da resolução do sistema (4.26), como também utilizando-se os métodos de interpolação polinomial de Lagrange ou Newton [17].

Uma vez obtidos os coeficientes de P , a determinação de seu ponto de mínimo $\bar{\alpha}$ é uma tarefa simples. Dentre os pontos para os quais

$$P'(\alpha) = c_1 + 2 c_2 \alpha + 3 c_3 \alpha^2 = 0 \quad (4.29)$$

é aquele em que

$$P''(\alpha) = 2 c_2 + 6 c_3 \alpha > 0 \quad (4.30)$$

Assim, o ponto de mínimo α^* de ω aproximado por

$$\alpha^* \approx \bar{\alpha} = \frac{-c_2 + \sqrt{c_2^2 - c_1 c_3}}{3 c_3} \quad (4.31)$$

5 - O PROGRAMA OTIM

Neste capítulo, é apresentada a estrutura do programa computacional OTIM que, incorporando vários dos procedimentos apresentados nos capítulos anteriores, foi desenvolvido com o objetivo de resolver problemas de otimização restrita ou irrestrita.

5.1 - INTRODUÇÃO

Devido ao número elevado de cálculos exigidos ao utilizar-se as técnicas descritas nos capítulos anteriores, sua aplicação em problemas de programação não-linear, notadamente ao otimizar-se projetos de engenharia, só se viabiliza através da implementação computacional de seus procedimentos. Assim, procurou-se desenvolver um programa computacional (programa OTIM) que, apesar de simples em sua utilização, pudesse ser suficientemente flexível para adequar-se, através de ajustes em seus arquivos de dados, a diferentes problemas de programação não-linear, quer restrita, quer irrestrita (nos casos em que se dispõe das expressões das restrições em termos das variáveis de decisão), e que pudesse lidar tanto com situações em que se conhece a expressão analítica da função objetivo,

quanto com situações em que suas avaliações sejam efetuadas por programas de análise (pacotes de elementos finitos ou outros) acoplados ao programa de otimização.

5.2 - ESTRUTURA DO PROGRAMA OTIM

O programa OTIM, implementado em linguagem Fortran, foi estruturado com o objetivo de se resolver dois tipos básicos de problemas de programação não-linear:

- I. Problemas de otimização restrita, quando é utilizada uma combinação dos métodos do Multiplicador de Lagrange Aumentado (MMLA), de Davidon, Fletcher e Powell (MDFP), da Secção Áurea (MSA) e da Aproximação Polinomial (MAP).
- II. Problemas de otimização irrestrita, quando utiliza-se uma combinação desses três últimos métodos.

O próprio programa computacional, conforme o número total de restrições seja nulo ou não, decide qual a combinação das técnicas acima citadas é a que deve ser adotada em cada problema específico (figura 5.1).

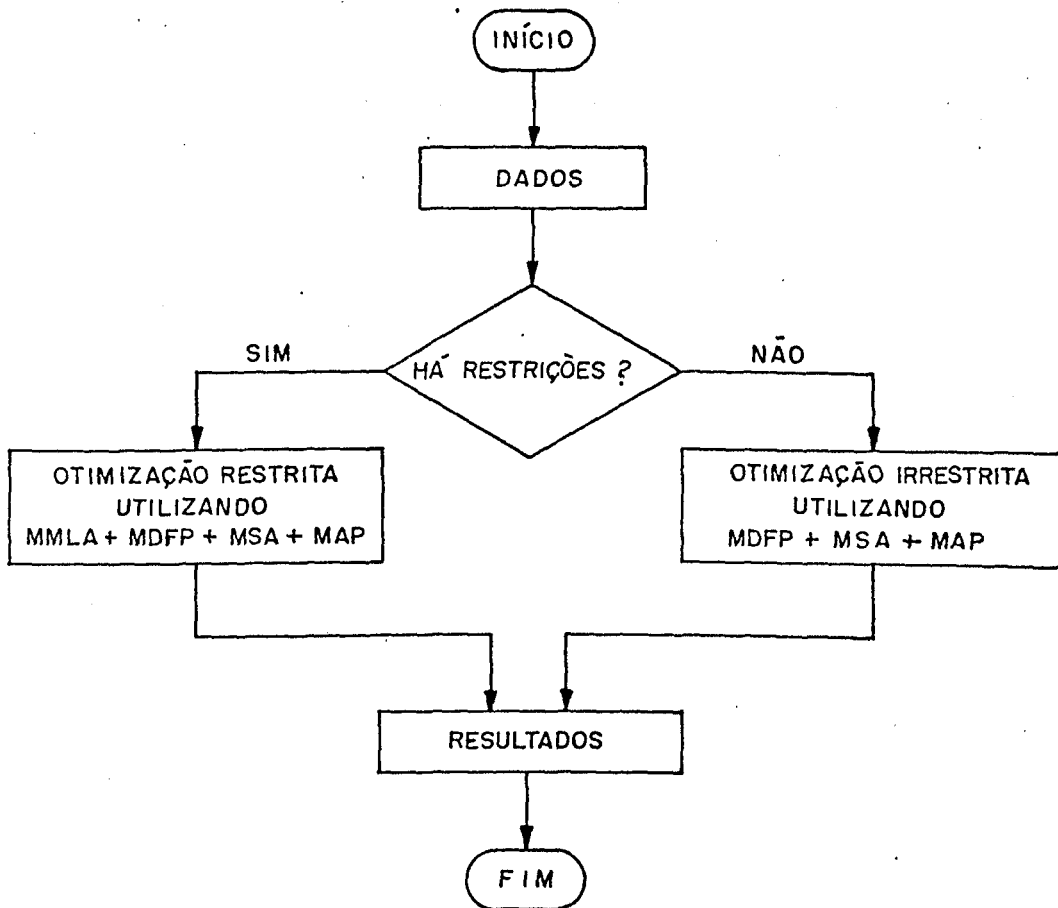


Figura 5.1. Escolha dos procedimentos de otimização pelo programa OTIM

5.2.1 - A OTIMIZAÇÃO RESTRITA NO PROGRAMA OTIM

Conforme foi visto no capítulo 2, o Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado é uma técnica iterativa de abordagem do seguinte problema:

minimizar $f(X)$

atendidas

$$g_j(X) \leq 0 \quad j = 1, 2, \dots, l \quad (5.1)$$

$$h_k(X) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, m$$

com

$$X \in \Gamma = \left\{ X \in \mathbb{R}^n \mid a_i \leq x_i \leq b_i \quad \text{com } i=1, 2, \dots, n \right\}$$

Viu-se, ainda, que a p-ésima iteração do método consiste em efetuar-se, no espaço de projeto Γ , a minimização (irrestrita) de

$$\begin{aligned} F(X) = A(X, \Lambda^p, r_p) = f(X) + \\ + \sum_{j=1}^l \left[\lambda_j \varphi_j(X, \Lambda^p, r_p) + r_p \left(\varphi_j(X, \Lambda^p, r_p) \right)^2 \right] + \\ + \sum_{k=1}^m \left[\lambda_{k+1}^p h_k(X) + r_p \left(h_k(X) \right)^2 \right] \quad (5.2) \end{aligned}$$

onde

$$\varphi_j(X, \Lambda^p, r_p) = \max \left[g_j(X) , - \frac{\lambda_j^p}{2 r_p} \right] \quad (5.3)$$

após a qual atualiza-se tanto os multiplicadores de Lagrange Λ^p , quanto o coeficiente de penalidade r_p .

As operações efetuadas pelo programa OTIM, ao implementar-se o método, compõem a figura 5.2.

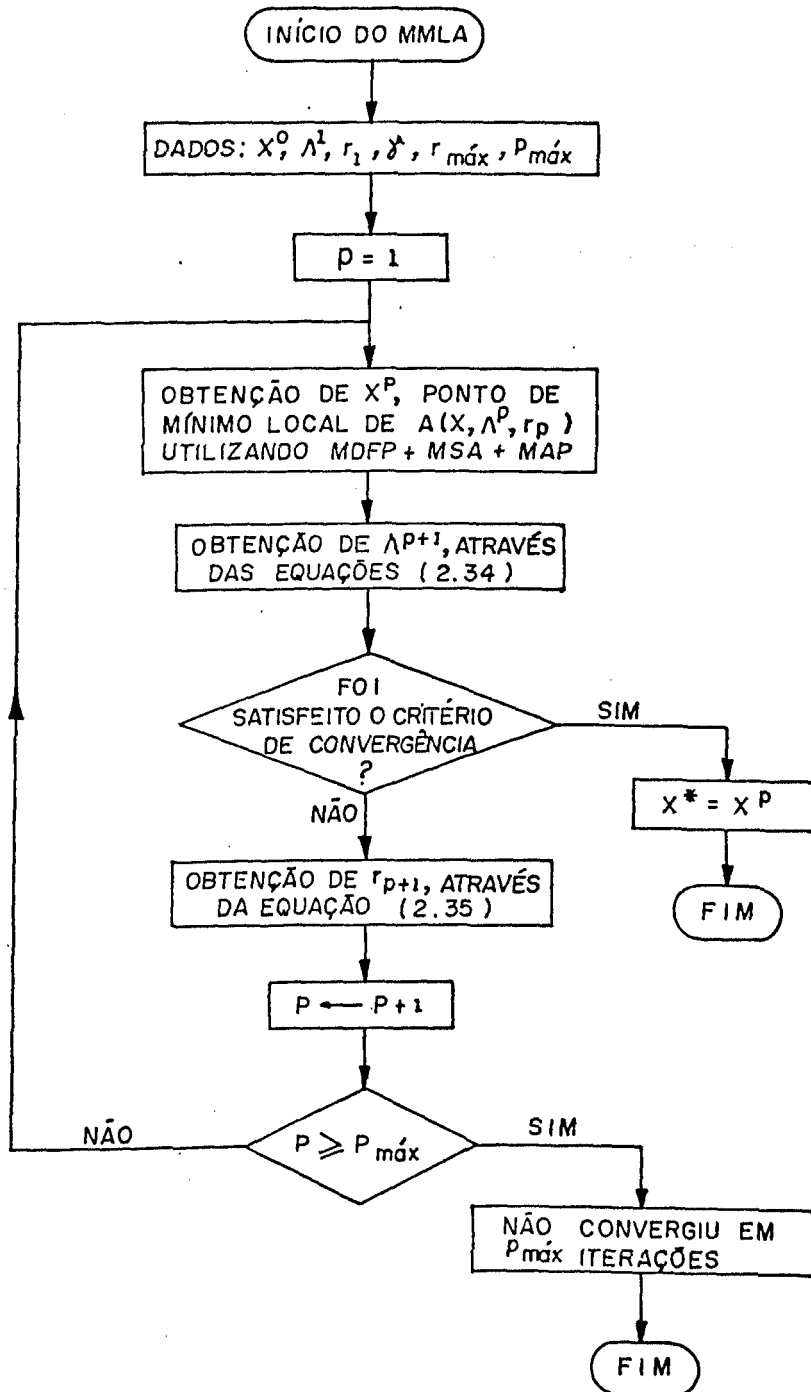


Figura 5.2. Implementação do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado no programa OTIM

O critério de convergência adotado foi o de que, por duas iterações consecutivas, sejam atendidas simultaneamente as seguintes condições:

i. que, para $i = 1, \dots, l+m$,

$$\left| \lambda_i^{p+1} - \lambda_i^p \right| < \varepsilon_L \quad \text{ou} \quad \left| \frac{\lambda_i^{p+1} - \lambda_i^p}{\lambda_i^{p+1}} \right| < \varepsilon_L \quad (5.4)$$

ii. que

$$\left| f(X^p) - f(X^{p-1}) \right| < \varepsilon_{OBJ} \quad \text{ou} \quad \left| \frac{f(X^p) - f(X^{p-1})}{f(X^p)} \right| < \varepsilon_{OBJ} \quad (5.5)$$

iii. que, para $j = 1, \dots, l$,

$$g_j(X^p) < \varepsilon_{RD} \quad (5.6)$$

iv. que, para $k = 1, \dots, m$,

$$\left| h_k(X^p) \right| < \varepsilon_{RI} \quad (5.7)$$

onde ε_L , ε_{OBJ} , ε_{RD} e ε_{RI} são constantes positivas

adequadamente escolhidas.

5.2.2 - A OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA NO PROGRAMA OTIM

Ao implementar-se o Método de Davidon, Fletcher e Powell, objetivou-se utilizar o mesmo conjunto de subrotinas em duas circunstâncias distintas:

- i. na solução de problemas sem restrições, da forma:

$$\text{minimizar} \quad f(X)$$

$$\text{com} \quad (5.8)$$

$$X \in \Gamma = \left\{ X \in \mathbb{R}^n \mid a_i \leq x_i \leq b_i \quad \text{com} \quad i=1,2,\dots,n \right\}$$

- ii. em problemas com restrições, ao solucionar o subproblema da minimização de (5.2) em Γ .

Os principais procedimentos envolvidos são apresentados na figura 5.3.

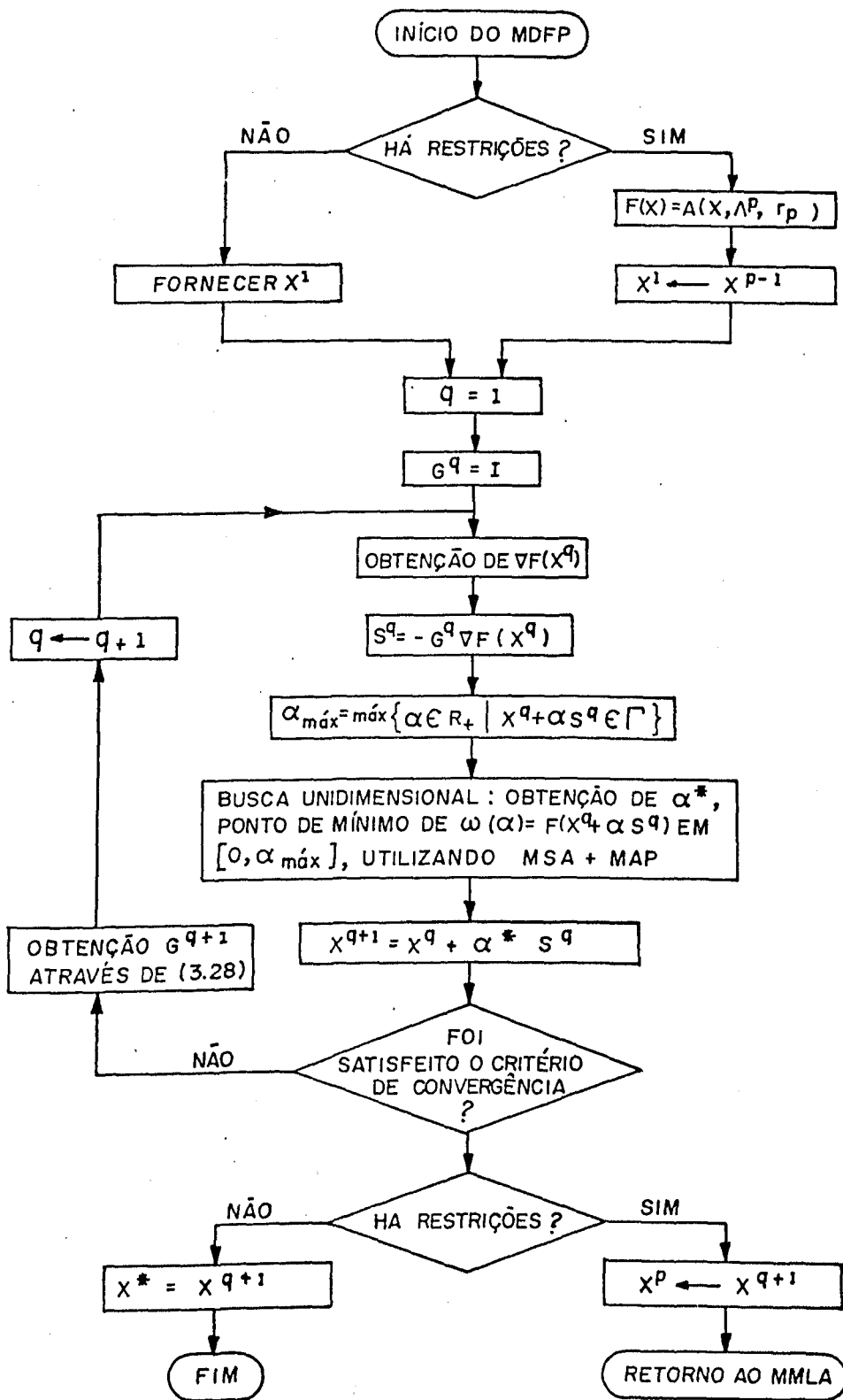


Figura 5.3. Implementação do Método de Davidon, Fletcher e Powell (MDFP) no programa OTIM

O critério de convergência adotado foi o de que, por duas iterações consecutivas, ocorra

$$\left| f(X^{q+1}) - f(X^q) \right| < \epsilon_{DFP} \quad \text{ou} \quad \left| \frac{f(X^{q+1}) - f(X^q)}{f(X^p)} \right| < \epsilon_{DFP} \quad (5.9)$$

onde ϵ_{DFP} é uma constante positiva adequada.

No programa, o gradiente da função objetivo pode ser tanto fornecido analiticamente, quanto calculado através de diferenças finitas. O gradiente do lagrangiano aumentado requer sempre cálculos utilizando diferenças finitas. Em todas as avaliações numéricas das derivadas parciais, utilizou-se diferenças ascendentes ao invés de centradas, com o objetivo de diminuir o tempo computacional. A cada iteração, normaliza-se o gradiente de F em relação ao módulo de sua maior coordenada.

Dispõe-se da opção de normalizar as variáveis de decisão, expediente que pode ser aconselhável no caso em que eles possuam ordens de grandeza sensivelmente diferentes. O próprio programa executa esta normalização antes de efetuar as iterações do Método de Davidon, Fletcher e Powell, dividindo cada variável de decisão pelo seu respectivo valor absoluto.

O programa inclui, opcionalmente, procedimentos de controle sobre a matriz G, visando minimizar o efeito do acúmulo

de erros numéricos, atender requisitos teóricos do método [3] e assegurar a estabilidade do processo. Estes procedimentos envolvem a adoção de $G^q = I_n$ nas seguintes situações:

- i. a cada n iterações, onde n designa o número de variáveis de decisão;
- ii. quando

$$[\nabla F(X^q)]^T S^q > 0 \quad (5.10)$$

pois, neste caso, a direção de busca S^q não assegura o decréscimo de F ;

- iii. para efetuar novamente a q -ésima iteração, caso

$$\nabla F(X^{q+1}) > \nabla F(X^q) \quad (5.11)$$

Outro procedimento de controle relaciona-se com o fato de que se $X^{q+1} = X^q + \alpha^* S^q$, onde α^* é o ponto de mínimo de ω em $[0, \alpha_{\max}]$, então

$$[\nabla F(X^{q+1})]^T S^q = 0 \quad (5.12)$$

Assim, caso

$$[\nabla F(X^{q+1})]^T S^q > 10^{-2} \quad (5.13)$$

deixa-se de atualizar G na iteração seguinte, excetuando-se os casos em que $G^q = I_n$ ou em que na iteração anterior já havia ocorrido o mesmo problema.

Finalmente, o processo é interrompido quando, atingido um número preestabelecido q_{\max} de iterações, o critério de convergência não tenha ainda sido satisfeito.

5.2.3 - A BUSCA UNIDIMENSIONAL NO PROGRAMA OTIM

No programa OTIM, a busca unidimensional, ou seja, a determinação de α^* , ponto de mínimo de ω em $[0, \alpha_{\max}]$, é normalmente executada em duas etapas. Na primeira, utilizando-se o Método da Secção Áurea, reduz-se o intervalo de incerteza $[0, \alpha_{\max}]$ a um subintervalo seu, cujo comprimento é uma fração Δ da amplitude do intervalo original $[0, \alpha_{\max}]$. Na segunda, efetua-se uma aproximação polinomial cúbica de ω no intervalo de incerteza reduzido e adota-se o mínimo $\bar{\alpha}$ da aproximação polinomial como uma estimativa de α^* .

Dispõe-se no programa, através da adoção de $\Delta = 1$, da opção de, omitindo-se a redução do intervalo de incerteza, efetuar-se apenas a aproximação polinomial em $[0, \alpha_{\max}]$.

As operações executadas no programa OTIM ao realizar-se a busca unidimensional compõem a figura 5.4.

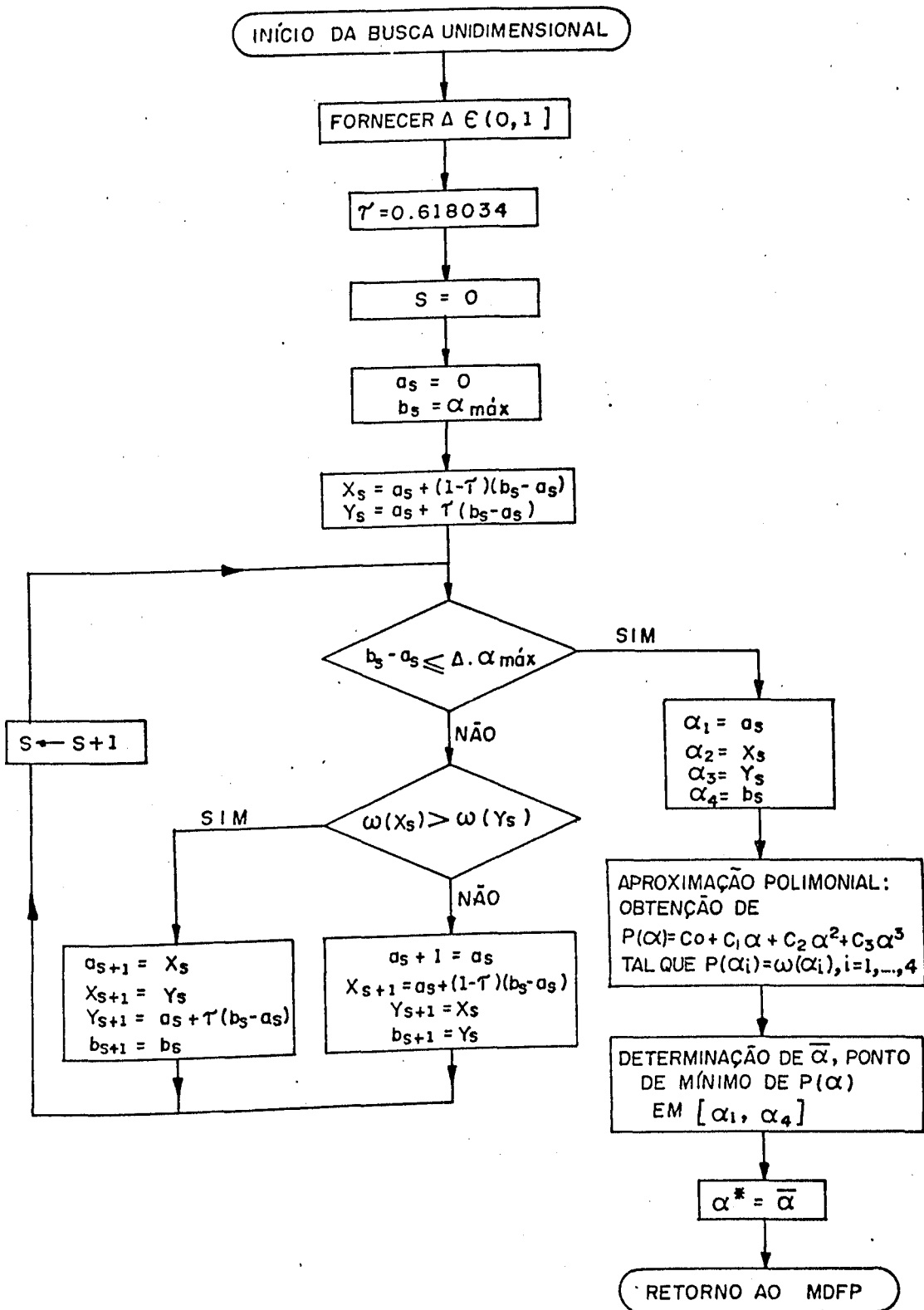


Figura 5.4. Implementação dos métodos da Secção Áurea e da Aproximação Polinomial no programa OTIM

Adotou-se o Método da Interpolação Polinomial de Newton [17] na determinação dos coeficientes c_i do polinômio P , objetivando minimizar os problemas numéricos presentes nos casos em que os pontos α_i estiverem muito próximos um do outro.

5.2.4 - OS ARQUIVOS DE DADOS DO PROGRAMA OTIM

Uma das características mais importantes do programa OTIM, a sua flexibilidade de ajuste a diferentes problemas de programação não-linear, é devida à organização de seus arquivos de dados.

O primeiro arquivo de dados, OTIM1.DAT, é constituído por aqueles parâmetros característicos de cada problema de otimização, tais como os números de variáveis de decisão, de restrições de igualdade e desigualdade, bem como os valores iniciais, mínimos e máximos de cada variável de decisão.

O segundo arquivo de dados, OTIM2.DAT, é composto por parâmetros do próprio algoritmo de otimização. Dentre eles, encontram-se os coeficientes de penalidade inicial e final (r_1 e r_{\max}), o fator de atualização do coeficiente de penalidade (γ), as tolerâncias adotadas (ϵ_L , ϵ_{OBJ} , ϵ_{RD} , ϵ_{RI} e ϵ_{DFP}) e o fator de redução do intervalo de incerteza (Δ).

Apesar de requerer-se um certo conhecimento dos métodos e procedimentos adotados no programa OTIM para manipular estes dados, é justamente variando-os que se consegue ajustar o programa a diferentes problemas de programação não-linear, permitindo que se prestigie tanto a precisão de resultados quanto o baixo número de avaliações da função objetivo.

6 - APLICACOES

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos ao utilizar-se o programa computacional OTIM na minimização de funções matemáticas, com ou sem restrições, e na otimização de problemas estáticos e dinâmicos de engenharia mecânica, restritos ou irrestritos. No final do capítulo faz-se uma apreciação de tais resultados.

6.1 - INTRODUÇÃO

Para evidenciar a eficácia dos métodos e procedimentos adotados nos capítulos anteriores, o programa computacional descrito no capítulo 5 (programa OTIM) foi utilizado para solucionar diversos problemas de otimização, vários deles descritos na literatura como sendo de difícil solução. Em alguns dos exemplos apresentados, o gradiente da função objetivo foi fornecido analiticamente, em outros, o próprio programa calculou-o através de diferenças finitas.

No que diz respeito à precisão de resultados, número de iterações do método utilizado e número de avaliações da função objetivo, vários problemas dentre os aqui apresentados puderam ter sua solução numérica comparada com resultados apresentados na literatura.

6.2 - MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES MATEMÁTICAS

a. $F(X) = 10 x_1^4 - 20 x_1^2 x_2 + 10 x_2^2 + x_1^2 - 2 x_1 + 5$

Os resultados obtidos através do Método de Davidon, Fletcher e Powell (MDFP) são apresentados na tabela 6.1.

Tabela 6.1. Minimização da função do exemplo (a)

	INÍCIO	RESULTADOS		
		Teórico	Apresentado por Madsen [18]	Obtido pelo programa OTIM.
F(X)	26.5	4	4.020	4.001
x_1	-0.5	1	—	0.969
x_2	1	1	—	0.936
Número de iterações do MDFP			8	8
Número de avaliações da função objetivo			99	48

b. $F(X) = 100 (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$, a função de Rosenbrock.

Os resultados compõem a tabela 6.2.

Tabela 6.2. Minimização da função do exemplo (b)

	INÍCIO	RESULTADOS		
		Teórico	Apresentado por Fletcher [3]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	24.2	0	1×10^{-8}	8×10^{-14}
x_1	-1.2	1	—	1.000
x_2	1	1	—	1.000
Número de iterações do MDFP			18	12
Número de avaliações da função objetivo			—	110

$$\begin{aligned}
 \text{c. } F(X) = & 100 (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 + 90 (x_4 - x_3^2)^2 + \\
 & + (1 - x_3^2)^2 + 10.1 [(x_2 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2] + \\
 & + 19.8 (x_2 - 1) (x_4 - 1)
 \end{aligned}$$

$$\text{com } -10 \leq x_i \leq 10$$

Os resultados da minimização desta função, apresentada em Himmelblau [19], estão na tabela 6.3.

Tabela 6.3. Minimização da função do exemplo (c)

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Teórico	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	19192	0	0.005
x_1	-3	1	1.04
x_2	-1	1	1.08
x_3	-3	1	0.96
x_4	-3	1	0.92
Número de iterações do MDFP			19
Número de avaliações da função objetivo			344

$$d. \quad F(X) = \sum_{i=1}^{10} \left\{ [\ln(x_i - 2)]^2 + [\ln(10 - x_i)]^2 \right\} - \left(\prod_{i=1}^{10} x_i \right)^{0.2}$$

com

$$2.001 \leq x \leq 9.999$$

Os resultados são apresentados na tabela 6.4.

Tabela 6.4. Minimização da função do exemplo (d)

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentado em Himmelblau [19]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	-43134	-45778	-45778
$x_i (i=1, \dots, 10)$	9	9.351	9.350
Número de iterações do MDFP		—	3
Número de avaliações da função objetivo		—	57

$$e. \quad F(X) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$$

Os resultados estão apresentados na tabela 6.5.

Tabela 6.5. Minimização da função do exemplo (e)

	INÍCIO	RESULTADOS		
		Teórico	Apresentado por Fletcher [3]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	215	0	2.5×10^{-8}	1.2×10^{-8}
x_1	3	0	—	-0.008
x_2	-1	0	—	0.001
x_3	0	0	—	-0.003
x_4	1	0	—	-0.003
Número de iterações do MDFP			6	14
Número de avaliações da função objetivo			—	128

$$f. \quad F(X) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 + \frac{0.04}{g(X)} + \frac{h^2(X)}{0.2}$$

$$\text{com } g(X) = 1 - 0.25x_1^2 - x_2^2 \quad \text{e} \quad h(X) = 1 + x_1 - 2x_2$$

Os resultados obtidos na determinação de um mínimo local de F compõem a tabela 6.6.

Tabela 6.6. Minimização da função do exemplo (f)

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentado em Himmelblau [19]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	5.99	0.16904	0.16904
x_1	2	1.7954	1.7954
x_2	2	1.3779	1.3778
Nro. de iter. do MDFP		—	4
Nro. de aval. do objetivo		—	53

Observação: Passos muito grandes levarão a outros valores (na fronteira do espaço de projeto), pois F não é uma função limitada inferiormente.

$$g. \quad F(X) = 100 \left\{ \left(x_3 - 10 \theta \right)^2 + \left(\sqrt{x_1^2 + x_2^2} - 1 \right)^2 \right\} + x_3^2$$

onde

$$\theta = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \arctg \left(\frac{x_2}{x_1} \right) & \text{se } x_1 > 0 \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \arctg \left(\frac{x_2}{x_1} \right) & \text{se } x_1 < 0 \end{cases}$$

Os resultados encontram-se na tabela 6.7.

Tabela 6.7. Minimização da função do exemplo (g)

	INÍCIO	RESULTADOS		
		Teórico	Apresentado por Fletcher [3]	Obtido pelo programa OTIM
$F(X)$	25000	0	7×10^{-8}	3×10^{-11}
x_1	-1	1	1	1
x_2	0	0	10^{-5}	2×10^{-6}
x_3	0	0	10^{-5}	3×10^{-6}
Número de iterações do MDFP			18	20
Número de avaliações da função objetivo			—	220

$$h. \quad F(X) = u_1 + u_2 + u_3$$

$$\text{onde } u_i = c_i - x_1 (1 - x_2^i)$$

$$\text{com } c_1 = 1.5, \quad c_2 = 2.25 \quad \text{e} \quad c_3 = 2.625$$

Os resultados obtidos na minimização desta função, apresentada em Himmelblau [19], estão na tabela 6.8.

Tabela 6.8. Minimização da função do exemplo (h)

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Teórico	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	0.52978	0	3×10^{-7}
x_1	2	3	2.999
x_2	-1	0.5	0.500
Número de iterações do MDFP			12
Número de avaliações da função objetivo			131

$$i. \quad f(X) = 4x_1 - x_2^2 - 12$$

com as restrições:

$$g(X) = 34 + x_1^2 + x_2^2 - 10x_1 - 10x_2 \leq 0$$

$$h(X) = 25 - x_1^2 - x_2^2 = 0$$

$$\text{e } x_1 \geq 0$$

Os resultados da otimização através do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado (MMLA) compõem a tabela 6.9.

Tabela 6.9. Minimização da função do exemplo (i)

	INÍCIO	RESULTADOS		
		Teórico	Apresentado por Madsen [18]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	-9	-32	-31.998	-31.993
x_1	1	1	1.0019	1.0010
x_2	1	4.899	4.8986	4.8987
g(X)	16	0.0010	0.0025	0.0012
h(X)	23	0	-0.0017	0.0012
Número de iterações do MMLA			5	5
Número de avaliações da função objetivo			198	178

$$j. f(X) = (x_1 - x_2)^2 + (x_2 + x_3 - 2)^2 + (x_4 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2$$

com as restrições:

$$h_1(X) = x_1 + 3x_2 = 0$$

$$h_2(X) = x_3 + x_4 - 2x_5 = 0$$

$$h_3(X) = x_2 - x_5 = 0$$

Os resultados encontram-se na tabela 6.10.

Tabela 6.10. Minimização da função do exemplo (j)

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentado por Miele [20]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	0	4.0930	4.0826
x ₁	1	-0.7674	-0.7668
x ₂	1	0.2558	0.2562
x ₃	1	0.6279	0.6319
x ₄	1	-0.1162	-0.1171
x ₅	1	0.2558	0.2572
h ₁ (X)	4	—	0.0018
h ₂ (X)	0	—	0.0003
h ₃ (X)	0	—	-0.0010
Nro. de iter. do MDFP		—	14
Nro. de aval. do objetivo		—	129

$$1. f(X) = \exp(x_1 x_2 x_3 x_4 x_5)$$

com as restrições:

$$h_1(X) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 - 10 = 0$$

$$h_2(X) = x_2 x_3 - 5 x_4 x_5 = 0$$

$$h_3(X) = x_1^3 + x_2^3 - 1 = 0$$

Os resultados são apresentados na tabela 6.11.

Tabela 6.11. Minimização da função do exemplo (1)

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentado por Powell [13]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	3×10^{-4}	0.054	0.047
x_1	-2	-1.717	-1.624
x_2	2	1.596	1.760
x_3	2	1.827	1.742
x_4	-1	-0.764	-0.784
x_5	-1	-0.764	-0.784
$h_1(X)$	4	—	0.001
$h_2(X)$	0	—	0.007
$h_3(X)$	0	—	-0.001
Número de iterações do MMLA		5	4
Número de avaliações do objetivo		—	169

m. $f(X) = x_1^2 - 5x_1 + x_2^2 - 5x_2 + 2x_3^2 - 21x_3 + x_4^2 + 7x_4 + 50,$

a função de Rosen-Suzuki.

Para

$$f_1(X) = x_1^2 - x_1 + 2x_2^2 + x_3^2 + 2x_4^2 - x_4 - 10$$

$$f_2(X) = x_1^2 + x_1 + x_2^2 - x_2 + x_3^2 + x_3 + x_4^2 - x_4 - 8$$

$$f_3(X) = 2x_1^2 + 2x_1 + x_2^2 - x_2 + x_3^2 - x_4 - 5$$

foram considerados dois casos de minimização restrita distintos:

I. com as restrições:

$$f_1(X) \leq 0, \quad f_2(X) \leq 0 \quad \text{e} \quad f_3(X) \leq 0$$

II. com as restrições:

$$f_1(X) \leq 0, \quad f_2(X) = 0 \quad \text{e} \quad f_3(X) = 0$$

Os resultados obtidos nos dois casos são exibidos nas tabelas 6.12 e 6.13.

Tabela 6.12. Minimização da função do exemplo (m), caso I.

	INÍCIO	RESULTADOS		
		Teórico	Apresentado por Madsen [18]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	31	6	6.12	6.03
x_1	1	0	0.03	0.06
x_2	1	1	1.03	0.95
x_3	1	2	1.95	1.95
x_4	1	-1	-1.05	-1.04
$f_1(X)$	-4	-1	-0.89	-1.11
$f_2(X)$	-6	0	-0.11	0.01
$f_3(X)$	-1	0	-0.12	0.04
Número de iterações do MMLA			9	4
Número de avaliações da função objetivo			347	329

Tabela 6.13. Minimização da função do exemplo (m), caso II.

	INÍCIO	RESULTADOS		
		Teórico	Apresentado por Madsen [18]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	31	6	6.0075	6.0074
x ₁	1	0	0.016	0.000
x ₂	1	1	1.028	0.999
x ₃	1	2	1.980	2.000
x ₄	1	-1	-1.018	-0.999
f ₁ (X)	-4	-1	-0.890	-1.008
f ₂ (X)	-6	0	-0.005	-0.003
f ₃ (X)	-1	0	-0.004	0.0002
Número de iterações do MMLA			6	5
Número de avaliações da função objetivo			304	309

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Biblioteca

$$n. \quad f(X) = (x_1 - 1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_3 - 1)^2 + (x_4 - 1)^4 + (x_5 - 1)^6$$

com as restrições:

$$h_1(X) = x_1^2 x_4 + \sin(x_4 - x_5) - 2\sqrt{2} = 0$$

$$h_2(X) = x_2 - x_3^4 x_4^2 - 8 - \sqrt{2} = 0$$

Os resultados compõem a tabela 6.14.

Tabela 6.14. Minimização da função do exemplo (n)

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentado por Miele [20]	Obtido pelo programa OTIM
F(X)	16300	0.242	0.239
x_1	6	1.17	1.16
x_2	6	1.18	1.17
x_3	6	1.38	1.38
x_4	6	1.51	1.50
x_5	6	1.61	1.62
$h_1(X)$	213	—	-0.038
$h_2(X)$	46652	—	-0.019
Número de iterações do MDFP		—	15
Número de avaliações da função objetivo		—	715

6.3 - OTIMIZAÇÃO EM PROBLEMAS ESTÁTICOS DE ENGENHARIA MECÂNICA

- a. Um sistema mecânico simples, constituído por duas molas é solicitado por duas forças constantes (figura 6.1). O problema consiste em determinar a posição de equilíbrio estático do sistema, através da minimização de sua energia potencial E_p e está apresentado em [4].

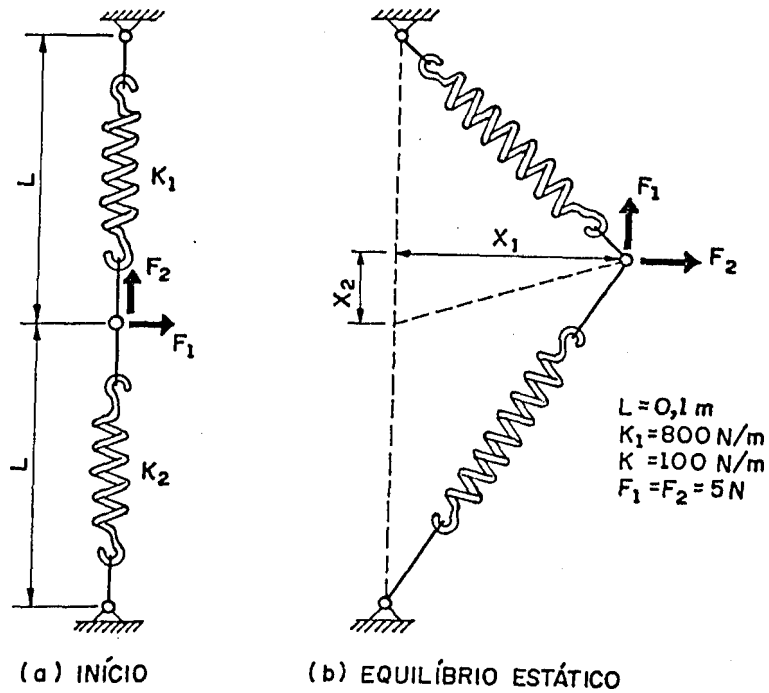


Figura 6.1. Determinação da posição de equilíbrio estático de um sistema de molas

Os resultados compõem a tabela 6.15.

Tabela 6.15. Determinação da posição de equilíbrio estático do sistema da figura 6.1.

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Teórico	Obtido pelo programa OTIM
E_p	0	-41.81	-41.81
x_1	0	8.63	8.62
x_2	0	8.53	8.52
Nro. de iterações do MDFP		8	
Nro. de aval. do objetivo		48	

- b. Determinação da posição de equilíbrio estático de um sistema contituído por massas e molas (figura 6.2).

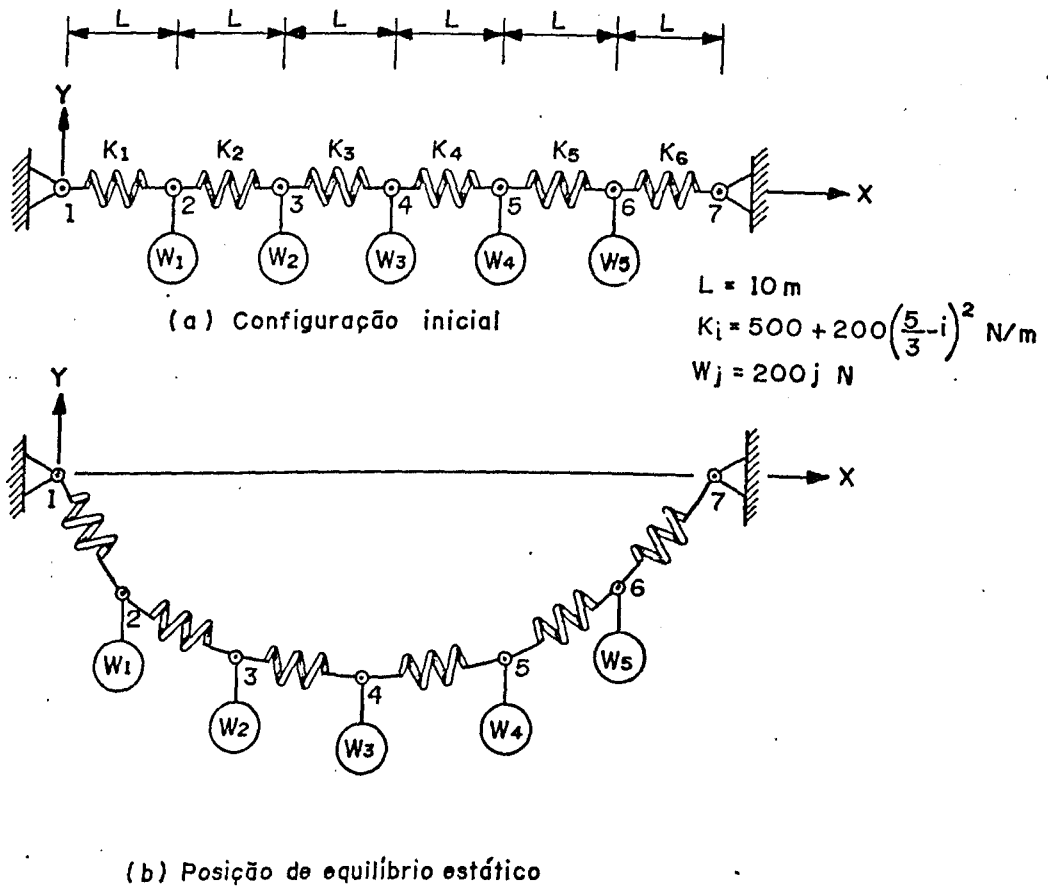


Figura 6.2. Determinação da posição de equilíbrio estático de um sistema de massas e molas

As variáveis de decisão são as coordenadas das articulações 2, 3, 4, 5 e 6 e os resultados estão sumarizados na Tabela 6.16.

Tabela 6.16. Determinação da posição de equilíbrio estático do sistema da figura 6.2.

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentado por Vanderplaats [4]	Obtido pelo programa OTIM
E_p	0	-4378	-4416
x_2	10	10.2	10.3
x_3	20	20.8	21.1
x_4	30	31.4	31.7
x_5	40	41.8	42.1
x_6	50	51.4	51.7
y_2	0	-4.6	-4.3
y_3	0	-8.2	-7.9
y_4	0	-10.0	-9.8
y_5	0	-9.2	-9.4
y_6	0	-5.4	-6.0
Número de iterações do MDFP		26	19
Número de avaliações da função objetivo		383	261

- c. Uma treliça de três barras (figura 6.3) é solicitada, ora por uma força F_1 , ora por uma força F_2 . O problema consiste em determinar as áreas A_1 , A_2 e A_3 das três barras, de forma que a massa M da estrutura seja mínima. Impõe-se que $A_1 = A_3$ e que

$$-10.55 \times 10^4 \leq \sigma_{ij} \leq 14.06 \times 10^4 \quad (\text{N/m}^2)$$

onde σ_{ij} designa a tensão normal na barra i , quando a estrutura é solicitada apenas pelo esforço F_j .

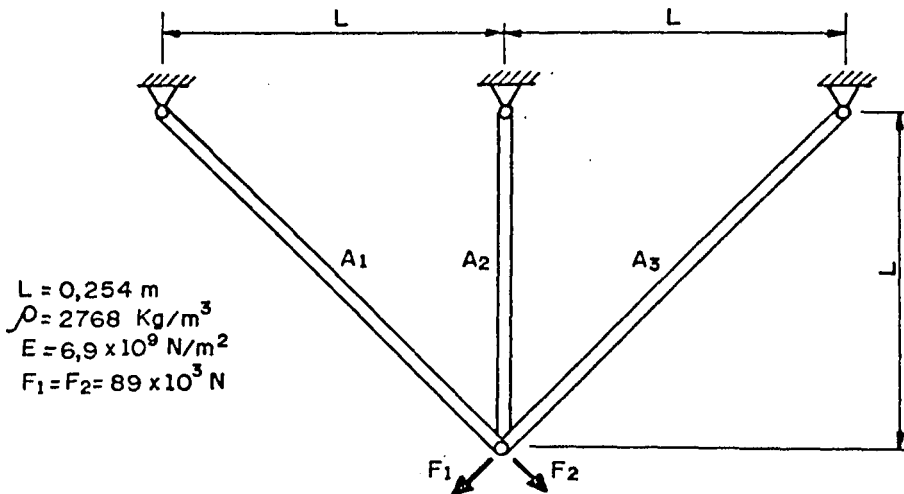


Figura 6.3. Minimização da massa de uma treliça.

Os resultados compõem a tabela 6.17.

Tabela 6.17. Minimização da massa da treliça da figura 6.3.

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentado por Madsen [18]	Obtido pelo programa OTIM
M	1.70	1.17	1.17
A_1 e A_3 (cm^2)	6.45	5.09	5.09
A_2 (cm^2)	6.45	2.64	2.63
σ_{11} e σ_{32} (N/cm^2)	9.94	14.06	14.06
σ_{21} e σ_{22} (N/cm^2)	5.82	10.29	10.30
σ_{31} e σ_{12} (N/cm^2)	-4.12	-3.77	-3.77
Número de iterações do MMLA		6	4
Número de avaliações da função objetivo		185	183

d. Uma viga engastada-livre sujeita a um esforço P é discretizada em 5 elementos de mesmo comprimento (figura 6.4). O problema consiste em determinar as dimensões b_i e h_i da seção retangular de cada elemento, de forma a minimizar V , o volume total da viga. São impostas, para $i = 1, 2, \dots, 5$, as seguintes restrições:

$$0.0254 \leq h_i \leq 0.762 \quad (\text{m})$$

$$0.0127 \leq b_i \leq 0.127 \quad (\text{m})$$

$$h_i \leq 30 b_i$$

$$\sigma_i \leq 14.06 \times 10^4 \quad (\text{N/m}^2)$$

onde σ_i é a máxima tensão normal no elemento i .

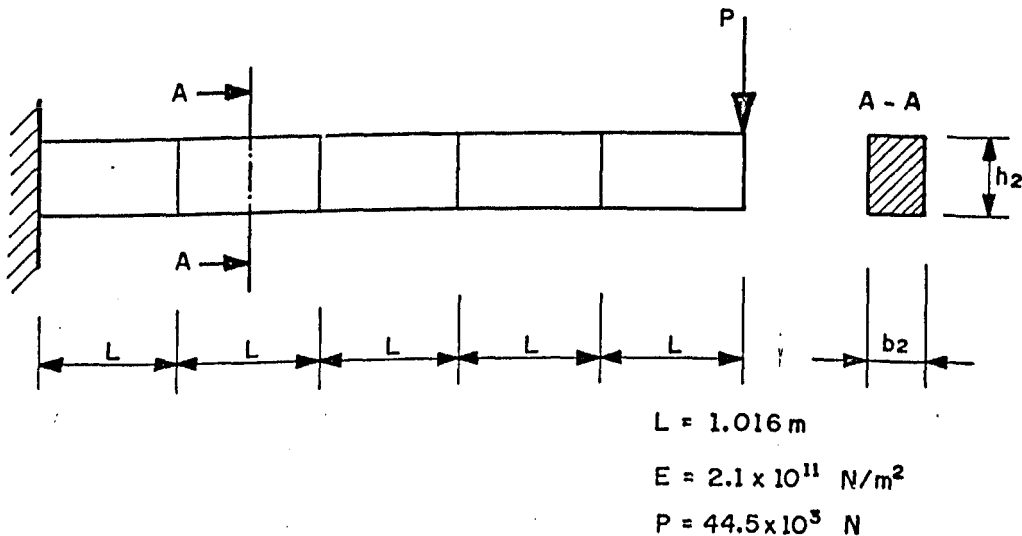


Figura 6.4. Minimização do volume de uma viga engastada-livre.

Os resultados são apresentados na Tabela 6.18.

Tabela 6.18. Minimização do volume da viga da figura 6.4.

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Apresentados por Madsen [18]	Obtidos pelo programa OTIM
V	0.1475	0.0525	0.0535
h_1	0.381	0.662	0.642
h_2	0.381	0.625	0.614
h_3	0.381	0.559	0.548
h_4	0.381	0.504	0.482
h_5	0.381	0.390	0.370
b_1	0.076	0.023	0.024
b_2	0.076	0.020	0.021
b_3	0.076	0.019	0.020
b_4	0.076	0.016	0.017
b_5	0.076	0.013	0.014
σ_1 (N/cm ²)	12.50	14.03	13.98
σ_2 (N/cm ²)	10.00	13.90	13.99
σ_3 (N/cm ²)	7.50	13.41	14.00
σ_4 (N/cm ²)	5.00	13.30	13.99
σ_5 (N/cm ²)	2.50	14.14	13.86
Número de iterações do MMLA		25	30
Número de avaliações da função objetivo		3390	973

6.4 - OTIMIZAÇÃO EM PROBLEMAS DINÂMICOS DE ENGENHARIA MECÂNICA

- a. Em [21], desenvolveu-se rotinas computacionais capazes de solucionar o problema de determinar a força adimensionalizada de sustentação hidrodinâmica $F = F(E) = (F_1(E), F_2(E), F_3(E))$, gerada em um mancal esférico ranhurado (figura 6.4), conhecida sua excentricidade adimensionalizada, $E = (e_x, e_y, e_z)$. Estas rotinas foram acopladas ao programa OTIM para a solução do problema inverso, que consiste em, conhecida a força $\bar{F} = (\bar{F}_x, \bar{F}_y, \bar{F}_z)$ atuante, determinar a correspondente excentricidade. Com este intuito, minimizou-se

$$\phi(E) = \text{máx} \left\{ |F_1(E) - \bar{F}_x|, |F_2(E) - \bar{F}_y|, |F_3(E) - \bar{F}_z| \right\}$$

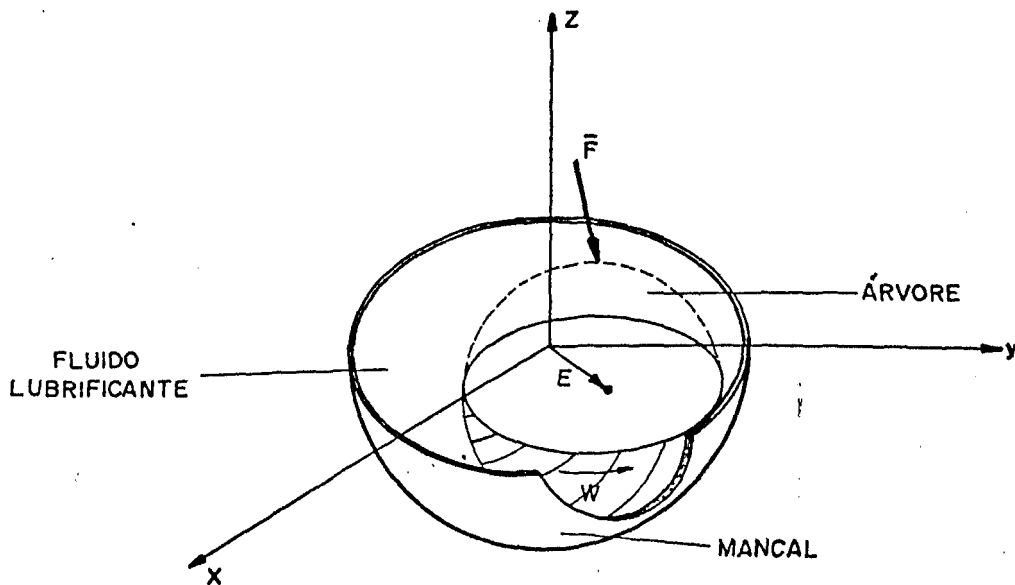


Figura 6.5. Determinação da excentricidade de um mancal esférico ranhurado.

Os resultados obtidos encontram-se na tabela 6.19.

Tabela 6.19. Determinação da excentricidade de um mancal esférico.

	INÍCIO	RESULTADOS	
		Teórico	Obtido pelo programa OTIM
$\phi(E)$	0.16925	0	5×10^{-4}
e_x	0	0.2	0.1993
e_y	0	0.3	0.3002
e_z	0	0.1	0.0996
Número de iterações do MDFP			8
Número de avaliações do objetivo			80

- b. Uma viga engastada-livre, com um sistema massa-mola suspenso em sua extremidade livre é discretizada em 3 elementos de mesmo comprimento (Figura 6.6).

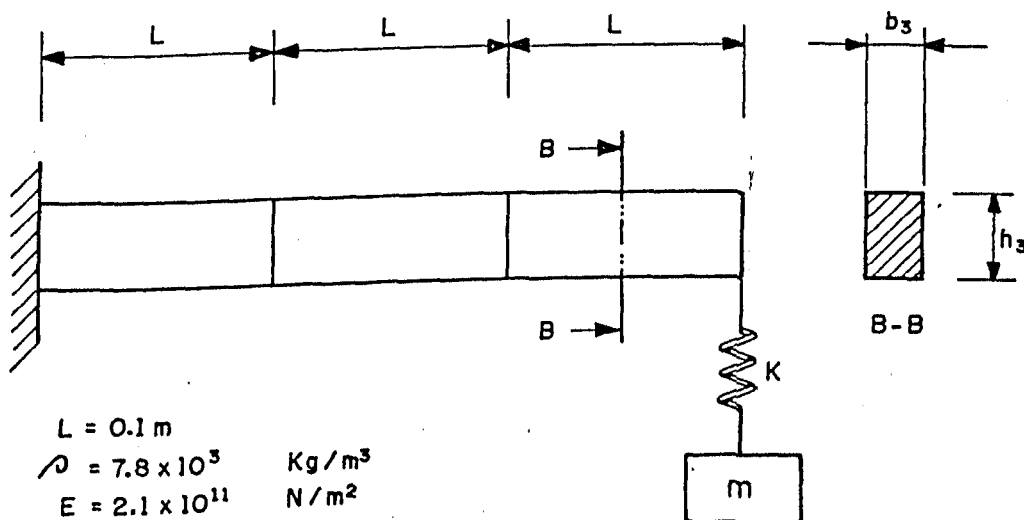


Figura 6.6. Otimização de frequências de um sistema.

Acoplado-se o programa OTIM a subrotinas capazes de obter, utilizando o Método dos Elementos Finitos, as três primeiras frequências naturais do sistema discretizado, ω_1 , ω_2 e ω_3 , foram abordados três problemas de otimização distintos:

I. Maximização de ω_1

II. Maximização de $(\omega_2 - \omega_1)$

III. Maximização simultânea de $(\omega_2 - \omega_1)$ e $(\omega_3 - \omega_2)$

Considerou-se como variáveis de decisão as dimensões, b_i e h_i , das seções retangulares de cada elemento e a rigidez K da mola. Foram impostas as seguintes restrições:

$$0.02 \leq b_i \leq 0.03 \quad (\text{m}) \quad i = 1, 2, 3$$

$$0.02 \leq h_i \leq 0.03 \quad (\text{m}) \quad i = 1, 2, 3$$

$$190 \times 10^3 \leq K \leq 760 \times 10^3 \quad (\text{N/m})$$

Em cada um dos três problemas abordados, enfocou-se três possibilidades para o valor da massa suspensa m :

$$m = 0.10 M_{\text{viga}}^{\circ}, m = 0.67 M_{\text{viga}}^{\circ} \text{ e } m = 2 M_{\text{viga}}^{\circ}$$

onde M_{viga}° é a massa da viga em sua configuração inicial.

No problema III, a função multi-objetivos adotada foi

$$F = \frac{\beta_1}{M_1} \left(\omega_2 - \omega_1 \right) + \frac{\beta_2}{M_2} \left(\omega_3 - \omega_2 \right)$$

onde M_1 e M_2 são os respectivos máximos individuais das funções uni-objetivo $(\omega_2 - \omega_1)$ e $(\omega_3 - \omega_2)$ e as constantes de ponderação β_1 e β_2 são tais que $\beta_1 + \beta_2 = 1$. Foram estudados os casos:

$$\text{III.a. } \beta_1 = 0.3 \text{ e } \beta_2 = 0.7$$

$$\text{III.b. } \beta_1 = 0.5 \text{ e } \beta_2 = 0.5$$

$$\text{III.c. } \beta_1 = 0.7 \text{ e } \beta_2 = 0.3$$

Os resultados compõem as tabelas 6.20, 6.21 e 6.22.

Tabela 6.20. Otimização das frequências do sistema da figura 6.6 para $m = 0.1 M_{\text{viga}}^{\circ}$

	Início	RESULTADOS				
		I	II	III.a	III.b	III.c
b_1 (mm)	25	30	20	28	30	30
b_2 (mm)	25	30	20	24	21	20
b_3 (mm)	25	20	20	20	20	20
h_1 (mm)	25	30	20	30	30	30
h_2 (mm)	25	30	20	30	30	30
h_3 (mm)	25	20	20	27	21	20
K (KN/m)	380	760	760	393	454	760
ω_1 (Hz)	5.55	8.11	4.47	6.77	7.14	7.96
ω_2 (Hz)	10.68	—	14.57	12.70	14.45	16.88
ω_3 (Hz)	46.59	—	—	47.10	45.23	54.84
Nro. de iterações do MMLA		4	6	3	3	4
Nro. de avaliações do objetivo		1323	1734	540	593	1245

Tabela 6.21. Otimização das frequências do sistema da figura 6.6 para $m = 0.67 M_{\text{viga}}^{\circ}$

	Início	RESULTADOS				
		I	II	III.a	III.b	III.c
b_1 (mm)	25	30	30	30	30	30
b_2 (mm)	25	30	20	24	24	20
b_3 (mm)	25	23	20	20	20	20
h_1 (mm)	25	30	30	30	30	30
h_2 (mm)	25	30	30	30	30	20
h_3 (mm)	25	30	20	27	23	20
K (KN/m)	380	760	760	376	387	414
ω_1 (Hz)	2.51	3.56	3.43	2.76	2.79	2.82
ω_2 (Hz)	9.14	—	15.17	12.10	13.03	13.82
ω_3 (Hz)	46.58	—	—	47.40	45.68	54.45
Nro. de iterações do MMLA		8	10	3	3	4
Nro. de avaliações do objetivo		1572	2253	619	541	2076

Tabela 6.22. Otimização das frequências do sistema da figura 6.6 para $m = 2 M_{\text{viga}}^{\circ}$

	Início	RESULTADOS				
		I	II	III.a	III.b	III.c
b_1 (mm)	25	30	30	30	30	30
b_2 (mm)	25	30	20	24	24	24
b_3 (mm)	25	26	20	20	20	20
h_1 (mm)	25	30	30	30	30	30
h_2 (mm)	25	30	30	30	30	30
h_3 (mm)	25	30	20	28	23	20
K (KN/m)	380	760	760	381	391	402
ω_1 (Hz)	1.47	2.09	2.01	1.61	1.62	1.63
ω_2 (Hz)	9.01	—	15.02	12.00	12.89	13.56
ω_3 (Hz)	56.70	—	—	57.46	55.91	53.94
Nro. de iterações do MMLA		4	4	5	3	3
Nro. de avaliações do objetivo		984	1398	929	515	697

Finalmente, cabe salientar que, conforme atestam os diversos exemplos apresentados neste capítulo, o programa computacional mostrou-se bastante flexível para adaptar-se, através de ajustes em seus arquivos de dados, a diferentes problemas de otimização. A eficácia do programa OTIM é evidenciada através da comparação dos resultados obtidos com aqueles apresentados na literatura, no que diz respeito tanto à precisão alcançada, quanto ao número de avaliações da função objetivo.

7 - CONCLUSÕES

Este trabalho representa uma contribuição aos procedimentos de otimização de projetos de engenharia, particularmente tendo em vista os sistemas mecânicos.

A metodologia empregada, uma combinação do Método do Multiplicador de Lagrange Aumentado, que aborda o problema com restrições, com o Algoritmo de Davidon, Fletcher e Powell, que efetua as otimizações irrestritas, com os métodos da Secção Áurea e da Aproximação Polinomial, que, combinados, executam as buscas unidimensionais, foi descrita objetivando elucidar as várias técnicas envolvidas.

O programa computacional (programa OTIM) mostrou-se facilmente adaptável, através de ajustes de seus arquivos de dados, a diferentes problemas de programação não-linear.

Os exemplos apresentados procuraram espelhar várias situações típicas de otimização encontradas na prática. Cabe entretanto salientar que os procedimentos numérico-computacionais desenvolvidos são plenamente aplicáveis a outras classes de problemas de projeto, tais como os encontrados na otimização de forma, na dinâmica de rotores flexíveis e na robótica.

É conveniente destacar que, através da obtenção do programa OTIM, este trabalho contribui na consolidação do uso dos métodos de otimização no contexto do Laboratório de Dinâmica de Sistemas Mecânicos do Departamento de Engenharia Mecânica da UFU.

O estudo sistematizado de outras técnicas de programação não-linear, como, por exemplo, do Método das Assíntotas Móveis, constitui um possível assunto de pesquisas futuras para o autor.

A análise de sensibilidade, importante ferramenta adicional na tarefa de otimização de projetos de engenharia, impõe-se como um desdobramento natural deste trabalho.

8 - REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 - CAUCHY, A.; Méthode Générale pour la Résolution des Systèmes d'Equations Simultanées, Compt. Rend. Acad. Sci., 25: 536-538, 1847
- 2 - DAVIDON, W. C.; Variable Method for Minimization, Research and Development Report ANL-5990, 1969.
- 3 - FLETCHER, R., POWELL, M. J. D., A Rapidly Convergent Descent Method for Minimization, Computer J., 6 (2): 163-168, 1963.
- 4 - VANDERPLAATS, G. N.; Numerical Optimization Techniques for Engineering Design, McGraw-Hill, New York, 1984. 332p.
- 5 - REKLAITIS, G. V., RAVINDRAN, A., RAGSDALL, R. M.; Engineering Optimization, John Wiley and Sons, New York, 1983.
- 6 - LUENBERGER, D.G.; Introduction to Linear and Nonlinear Programming, Addison-Wesley, Reading, MA, 1973. 356 p.
- 7 - SVANBERG, K.; The Method of Moving Assymptotes - A New Method for Structural Optimization, Int. J. Num. Meth. in Engineering, 24: 359-373, 1987.
- 8 - HESTENES, M.; Multiplier and Gradient Methods, J. Optim. Theory Appl., 4 (5): 303-320, 1969.
- 9 - ROCKAFELLAR, R. T.; Augmented Lagrange Multiplier Functions and Duality in Nonconvex Programming, SIAM J. of Control, 12 (2): 268-285, May 1974.

- 10 - IMAI, K., SCHMIT, L. A.; Configuration Optimization of Trusses, J. Struct. Div., ASCE, 107: 745-756, May 1981.
- 11 - STEFFEN Jr., MARCELIN, J. R.; On the Optimization of Vibration Frequencies of Rotors, Int. J. of Anal. and Exp. Modal Analysis, 3 (3): 77-80, July 1988.
- 12 - TROMPETTE, P., MARCELIN, J. L.; On the Choice of the Objectives in Shape Optimization, Proc. NATO Advanced Institute on Computer Aided Optimal Design, Troia, Portugal, 1986.
- 13 - POWELL, M. J. D.; Algorithms for Nonlinear Constraints that use Lagrangian Functions, Math. Programming, 14: 224-248, 1978.
- 14 - ROCKAFELLAR, R. T.; The Multiplier Method of Hestenes and Powell Applied to Convex Programming, J. Optim. Theory Appl., 12 (6): 555-562, 1973.
- 15 - BERTSEKAS, D. P.; On Penalty and Multiplier Methods for Constrained Minimization, SIAM J. of Control and Optim., 14 (2): 216-235, February 1976.
- 16 - BAZARAA, M. S., SHETTY, C. M.; Nonlinear Programming, John Wiley and Sons, New York, 1979. 560p.
- 17 - CARNAHAN, B., LUTHER, H. A., WILKES, J. O.; Applied Numerical Methods, John Wiley and Sons, New York, 1969. 604p.
- 18 - MADSEN, L. E.; Engineering Design Optimization by the Augmented Lagrange Multiplier Method, Master Thesis, Naval Postgraduate School, Monterey, CA, 1981. 65p.
- 19 - HIMMELBLAU, D. M.; Applied Nonlinear Programming, McGraw-Hill, New York, 1972. 498p.

- 20 - MIELE, A., MOSELEY, P. E., LEVY, A. V., COGGINS, G. M.; On the Method of Multipliers for Mathematical Programming Problems, J. Optim. Theory Appl., 10 (1): 1-33, 1972.
- 21 - DUARTE, M. V., RIBEIRO, C. R.; Análise de Mancais Esféricos Ranhurados via Diferenças Finitas , Anais do III Enc. Nac. Cienc. Térmicas, 1: 491-494, Florianópolis, 1990.