Optimização e Algoritmos (2004/2005)

Instituto Superior Técnico – Engenharia Electrotécnica e de Computadores

Série de Problemas 5

Condições KKT, funções convexas

Minimização sem restrições e com restrições
(algoritmo gradientes conjugados e de ponto interior)

Dualidade

Problema 1. [Multiplicadores de Lagrange] Use o método dos multiplicadores de Lagrange para resolver os seguintes problemas de optimização com restrições:

(a)

$$\min_{x^2+xy+y^2=1} \quad xy$$

(b)

$$\min_{x^2+y^2+z^2=2} \quad (y-z)(z-x)(x-y)$$

(c)

$$\min_{4x+3y+z=25} \quad x^2+y^2+z^2$$

Problema 2. [Desigualdade média geométrica/média aritmética] Sejam $x_1, x_2, \ldots, x_n$ números reais positivos.

(a) Mostre que

$$(x_1 x_2 \cdots x_n)^{1/n} \leq \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n}.$$

Quando se verifica igualdade ? [**Pista:** considere o problema de optimização

$$p = \max_{\frac{x_1+x_2+\cdots+x_n}{n}=1} \quad \log\left[(x_1 x_2 \cdots x_n)^{1/n}\right] ,$$

e mostre que $p \leq 0$.]

(b) Use a alínea anterior para mostrar que, para qualquer matriz $A : n \times n$ definida positiva (em notação compacta, $A \succ 0$), se tem

$$\det(A)^{1/n} \leq \frac{1}{n}\mathsf{tr}(A).$$

Quando se verifica igualdade ?

(c) Usando os resultados das alíneas anteriores prove a seguinte caracterização variacional de $\det(A)^{1/n}$ para matrizes $A \succ 0$:

$$\det(A)^{1/n} = \min_{\substack{X \succ 0 \\ \det(X) = 1}} \quad \frac{1}{n}\,\mathsf{tr}(AX) \ .$$

Problema 3. [Ajuste de uma recta a uma constelação de pontos] Considere uma constelação de K pontos em $\mathbb{R}^2$ dada por

$$\mathcal{X} = \{(x_k, y_k) \,:\, k = 1, 2, \ldots, K\} \,.$$

(a) Mostre que a distância quadrática do ponto (x_k, y_k) à recta $y = ax+b$ é dada por

$$d_k(a,b)^2 = \frac{(ax_k + b - y_k)^2}{1+a^2}.$$

[**Pista:** determine $d_k(a,b)^2$ resolvendo o problema de optimização com restrições

$$d_k(a,b)^2 = \min_{y = ax+b} \quad (x_k - x)^2 + (y_k - y)^2 \qquad]$$

(b) Suponha que se ajustou uma recta $y = ax+b$ (ou seja, determinaram-se os parâmetros a e b) à constelação $\mathcal{X}$ de forma a minimizar o somatório das distâncias quadráticas, isto é,

$$(a^*, b^*) = \min_{a,\, b} \quad \underbrace{\sum_{k=1}^{K} d_k(a,b)^2}_{f(a,b)} \,.$$

Mostre que o centro de massa da constelação $\mathcal{X}$, isto é, o ponto

$$(\overline{x}, \overline{y}) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} (x_k, y_k)$$

pertence à recta óptima: $\overline{y} = a^* \overline{x} + b^*$. [**Pista:** utilize a equação de estacionariedade $\partial f(a^*, b^*)/\partial b = 0$.]

Problema 4. [Pontos KKT] Considere o problema

$$\min_{\substack{y - x^2 \geq 0 \\ x + y \leq 6 \\ x, y \geq 0}} \quad \left(x - \tfrac{9}{4}\right)^2 + (y-2)^2$$

(a) Escreva as condições KKT correspondentes e mostre que o ponto $(x^*, y^*) = (\frac{3}{2}, \frac{9}{4})$ as satisfaz.

(b) Interprete graficamente as condições KKT no ponto (x^*, y^*).

(c) Use as condições de KKT de 2^a ordem para mostrar que (x^*, y^*) é o minimizante global.

Problema 5. [Funções convexas: caracterizações diferenciais] Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. O uso da condição necessária e suficiente

$$f((1-\lambda)a + \lambda b) \leq (1-\lambda)f(a) + \lambda f(b)$$

para quaisquer $a, b \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in [0, 1]$ é pouco prática para verificar se f é convexa ou não. Neste problema, consideram-se caracterizações de convexidade mais práticas baseadas em informação de 1^a ordem (gradiente) e 2^a ordem (Hessiana) de f.

Assuma que f é uma função de classe C^2 (ou seja, existem as derivadas parciais $\partial^2 f/(\partial x_i \partial x_j)$ e são contínuas).

(a) Mostre que f é convexa se e só se

$$f(x) \geq f(x_0) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0), \tag{1}$$

para quaisquer $x, x_0 \in \mathbb{R}^n$. [**Pista:** para provar a necessidade, use a convexidade de f para mostrar que

$$f(x) \geq f(x_0) + \frac{f(x_0 + \lambda(x - x_0)) - f(x_0)}{\lambda}$$

para qualquer $\lambda \in (0, 1)$ e depois considere o limite $\lambda \to 0$. Para provar a suficiência, ou seja, que $f((1-\lambda)a+\lambda b) \leq (1-\lambda)f(a)+\lambda f(b)$ para quaisquer $a, b \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in [0, 1]$, começe por utilizar duas vezes a inequação (1) com $x = a, x_0 = (1-\lambda)a + \lambda b$ e $x = b, x_0 = (1-\lambda)a + \lambda b$.]

(b) Para o caso $n = 1$, interprete graficamente a inequação (1).

(c) Utilize (1) para demonstrar as seguintes desigualdades:

$$e^x \geq x + 1 \quad (\text{para } x \in \mathbb{R}) \qquad \text{e} \qquad \log x \leq x - 1 \quad (\text{para } x > 0).$$

[**Pista:** utilize o facto de e^x e $-\log x$ serem funções convexas.]

(d) Suponha que f é convexa. Mostre: se x_0 é um ponto de estacionariedade de f, então x_0 é um minimizante global de f.

(e) Mostre que f é convexa se e só se

$$\nabla^2 f(x) \succeq 0 \tag{2}$$

para todo o $x \in \mathbb{R}^n$ (ou seja, a matriz Hessiana $\nabla^2 f(x)$ é semi-definida positiva para qualquer x). [**Pista:** para provar a suficiência, utilize a expansão de Taylor de 2^a ordem truncada

$$f(x) = f(x) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0) + \frac{1}{2}\,(x - x_0)^T\, \nabla^2 f(\overline{x})\,(x - x_0),$$

onde $\overline{x} = (1 - \mu)x_0 + \mu x$ para algum $\mu \in (0, 1)$, para gerar a condição suficiente da alínea (a). Para provar a necessidade, considere a expansão de Taylor

$$f(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0) + \frac{1}{2}\,(x - x_0)^T\, \nabla^2 f(x_0)\,(x - x_0) + o(\|x - x_0\|^2),$$

tome $x = td$ onde $t \in \mathbb{R}$ e $d \in \mathbb{R}^n$ (previamente escolhido), e considere o limite $t \to 0$ para concluir, usando a condição de convexidade em (1), que $d^T \nabla^2 f(x_0) d \geq 0$.]

(f) Usando a condição (2), mostre que as seguintes funções são convexas: **(i)** $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$, $f(x, y) = \frac{x^2}{y}$; **(ii)** $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, $f(x, y, z) = 2x^2 + 8y + y^2 + 2z^2 - 2xz + xy - 20x$; **(iii)** $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = h(Ax + b)$ onde $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ e $h : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ é uma função convexa de classe C^2.

Problema 6. [Gradientes conjugados] É comum utilizar o método dos gradientes conjugados para resolver sistemas lineares $Ax = b$, onde $A : n \times n$ é uma matriz definida positiva. De facto, a solução do sistema linear anterior coincide com o minimizante global do problema de optimização

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x. \tag{3}$$

É fácil verificar que o método dos gradientes conjugados aplicado ao problema (3) pode ser implementado (com um número mínimo de variáveis internas) da forma descrita na tabela 1. (Nota: a variável x, que contém as iterações, é sucessivamente re-escrita.)

Em geral, são necessárias n iterações para resolver exactamente o sistema $Ax = b$. Contudo, o algoritmo de gradientes conjugados exibe a seguinte propriedade interessante: se apenas existirem k valores próprios distintos de A, então são suficientes apenas k iterações. Para $k \ll n$ tal significa que o sistema linear é resolvido rapidamente. O objectivo deste problema é ilustrar este efeito. Para isso, codifique em MATLAB o algoritmo da tabela 1, utilizando como iteração inicial $x = 0$ e tolerância $\epsilon = 10^{-5}$. Faça $n = 10$ e gere aleatoriamente uma matriz $Q : n \times n$ ortogonal e um vector $b : n \times 1$, utilizando a sequência de comandos MATLAB:

$$\begin{aligned} \texttt{[Q,R]} &= \texttt{qr(randn(n,n))}; \\ \texttt{b} &= \texttt{randn(n,1)}. \end{aligned}$$

inicialização	▶	`escolher ponto inicial` x
	▶	`escolher parâmetro` $\epsilon > 0$ `para critério de paragem`
	▶	$r = b - Ax$
	▶	$d = r$
	▶	$\gamma_0 = r^T r$
	▶	$\gamma_1 = \gamma_0$
ciclo	▶	`se` $\gamma_0 < \epsilon$ `terminar`
	▶	$q = Ad$
	▶	$\alpha = \frac{\gamma_1}{q^T d}$
	▶	$x = x + \alpha d$
	▶	$r = r - \alpha q$
	▶	$\gamma_0 = \gamma_1$
	▶	$\gamma_1 = r^T r$
	▶	$\beta = \frac{\gamma_1}{\gamma_0}$
	▶	$d = r + \beta d$
	▶	`retornar ao ciclo`

Tabela 1: Algoritmo de gradientes conjugados [Problema 6]

Depois, defina a matriz $A = Q\Lambda Q^T$, fazendo as seguintes escolhas para a matriz dos valores próprios Λ:

$$\begin{aligned}
\texttt{Lambda} &= \texttt{diag}([\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ ]) \\
\texttt{Lambda} &= \texttt{diag}([\ 1\ 1\ 1\ 1\ 2\ 2\ 2\ 2\ 2\ 2\ ]) \\
\texttt{Lambda} &= \texttt{diag}([\ 1\ 1\ 2\ 2\ 3\ 3\ 3\ 3\ 3\ 3\ ]) \\
\texttt{Lambda} &= \texttt{diag}([\ 1\ 1\ 2\ 2\ 3\ 3\ 4\ 4\ 4\ 4\ ]).
\end{aligned}$$

Para cada caso, quantas iterações do algoritmo de gradientes conjugados foram executadas ?

Problema 7. [Elipse Löwner-John. Algoritmo ponto interior com barreira logarítmica] Seja $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^2$ um conjunto limitado. A elipse

Löwner-John de $\mathcal{K}$ é a elipse com àrea mínima que contém o conjunto $\mathcal{K}$. A título de exemplo, a figura 1 exibe uma constelação $\mathcal{K}$ de 10 pontos e a respectiva elipse de Löwner-John. A constelação de pontos encontra-se

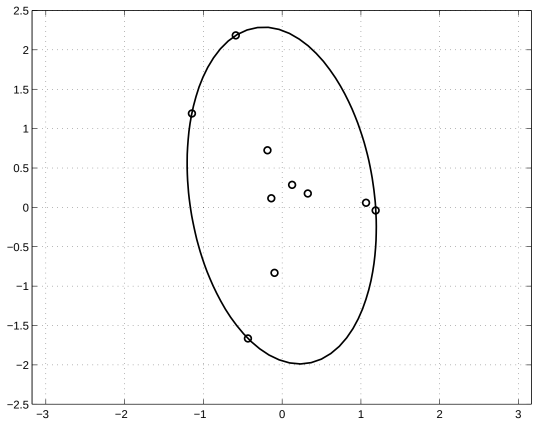

Figura 1: Exemplo de uma elipse de Löwner-John [Problema X]

discriminada na tabela 2.

k	x_k	y_k
1	-0.4326	-1.6656
2	0.1253	0.2877
3	-1.1465	1.1909
4	1.1892	-0.0376
5	0.3273	0.1746
6	-0.1867	0.7258
7	-0.5883	2.1832
8	-0.1364	0.1139
9	1.0668	0.0593
10	-0.0956	-0.8323

Tabela 2: Constelação $\mathcal{K}$ de pontos da figura 1 [Problema 7]

Neste problema, considera-se uma versão simplificada do problema de Löwner-Johnson. Nomeadamente, supõe-se dada uma constelação de pontos $\mathcal{K} = \{(x_k, y_k) \, : \, k = 1, 2, \ldots, K\}$ e pretende-se encontrar a elipse com menor àrea e *alinhada com eixos coordenados*, que contém $\mathcal{K}$. Portanto, só se consideram elipses da forma

$$\mathcal{E}(\lambda_1, \lambda_2, p_1, p_2) = \left\{ (x, y) \, : \, \frac{(x-p_1)^2}{\lambda_1^2} + \frac{(y-p_2)^2}{\lambda_2^2} \leq 1 \right\},$$

onde (p_1, p_2) são as coordenadas do centro da elipse, e $\lambda_1, \lambda_2 > 0$ definem a excentridade da elipse. Por exemplo, para $\lambda_1 = \lambda_2 = R$, temos a bola de raio R centrada em (p_1, p_2). Note que a àrea da elipse $\mathcal{E}(\lambda_1, \lambda_2, p_1, p_2)$ é dada por $\mathsf{A}[\mathcal{E}(\lambda_1, \lambda_2, p_1, p_2)] = \pi\lambda_1\lambda_2$.

Em suma, pretende-se resolver o problema de optimização

$$(\lambda_1^*, \lambda_2^*, p_1^*, p_2^*) = \underset{\substack{(x_1,y_1)\in\mathcal{E}(\lambda_1,\lambda_2,p_1,p_2)\\ \vdots \\ (x_K,y_K)\in\mathcal{E}(\lambda_1,\lambda_2,p_1,p_2)\\ \lambda_1,\lambda_2>0}}{\operatorname{argmin}} \quad \mathsf{A}(\mathcal{E}(\lambda_1, \lambda_2, p_1, p_2))$$

(a) Fazendo a mudança de variáveis $s_i = 1/\lambda_i$ e $t_i = p_i/\lambda_i$, mostre que temos o problema de optimização convexo equivalente

$$(s_1^*, s_2^*, t_1^*, t_2^*) = \underset{\substack{g_1(s_1,s_2,t_1,t_2)\le 0\\ \vdots \\ g_K(s_1,s_2,t_1,t_2)\le 0\\ s_1,s_2>0}}{\operatorname{argmin}} \quad -\log(s_1) - \log(s_2)\ , \tag{4}$$

onde $g_k(s_1, s_2, t_1, t_2) = (s_1x_k - t_1)^2 + (s_2y_k - t_2)^2 - 1$.

(b) Resolva o problema de optimização (4) da alínea anterior usando um algoritmo de ponto interior com barreira logarítmica. Ou seja, resolva o problema (4) resolvendo a sequência de subproblemas (indexados por $n = 1, 2, 3, \ldots$)

$$(s_1^{*n}, s_2^{*n}, t_1^{*n}, t_2^{*n}) = \underset{(s_1,s_2,t_1,t_2)\in S}{\operatorname{argmin}} \quad \phi_n(s_1, s_2, t_1, t_2) \tag{5}$$

onde

$$\phi_n(s_1, s_2, t_1, t_2) = -\log(s_1) - \log(s_2) + \epsilon_n\, B(s_1, s_2, t_1, t_2)$$

representa a função objectivo para o n-ésimo subproblema,

$$B(s_1, s_2, t_1, t_2) = \sum_{k=1}^{K} -\log\left(-g_k(s_1, s_2, t_1, t_2)\right) - \log(s_1) - \log(s_2)$$

é a barreira logarítmica,

$$S = ((s_1, s_2, t_1, t_2)\ :\ g_k(s_1, s_2, t_1, t_2) < 0, \forall_{k=1,\ldots,K} \text{ e } -s_1 < 0, -s_2 < 0\}$$

é o conjunto de restrições, e ϵ_n é uma sequência decrescente de números positivos que converge para zero. Para este problema, tome $\epsilon_1 = 10$ e $\epsilon_{n+1} = 0.1\epsilon_n$.

Para resolver o subproblema (5) utilize o algoritmo de Newton conjuntamente com uma regra de Armijo que assegura que cada iteração é um ponto interior. Ou seja, resolva (5) utilizando as iterações

$$\left(s_1^{m+1}, s_2^{m+1}, t_1^{m+1}, t_2^{m+1}\right) = \left(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m\right) + \alpha^m d^m, \quad m = 0, 1, 2, \ldots, \tag{6}$$

onde

$$d^m = -\left[\nabla^2 \phi_n\left(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m\right)\right]^{-1} \nabla \phi_n\left(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m\right)$$

representa a direcção de Newton e $\alpha^m = \beta^{r_m} s$, onde r_m é o primeiro inteiro não-negativo r que satisfaz

$$\begin{aligned}\phi_n\left(\left(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m\right) + \beta^r s d^m\right) \quad \leq \quad & \phi_n\left(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m\right) + \\ & \sigma \beta^r s \nabla \phi_n\left(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m\right)^T d^m\end{aligned}$$

e também

$$\left(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m\right) + \beta^r s d^m \in S.$$

Tome $s = 1$, $\beta = 0.9$ e $\sigma = 0.8$ para a implementação da regra de Armijo. Para inicializar as iterações em (6), use a solução do subproblema anterior, ou seja, faça

$$\left(s_1^0, s_2^0, t_1^0, t_2^0\right) = \left(s_1^{*n-1}, s_2^{*n-1}, t_1^{*n-1}, t_2^{*n-1}\right).$$

Além disso, escolha $(s_1^{*0}, s_2^{*0}, t_1^{*0}, t_2^{*0})$ de modo que a elipse associada seja a bola centrada no centro de massa da constelação $\mathcal{K}$ e dobro da distância máxima dos pontos de $\mathcal{K}$ ao centro de massa. Ou seja, calcule

$$\begin{aligned}(\overline{x}, \overline{y}) &= \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}(x_k, y_k) \\ R &= \max\left\{\|(x_k, y_k) - (\overline{x}, \overline{y})\| \,:\, k = 1, 2, \ldots, K\right\}\end{aligned}$$

e faça $s_1^{*0} = s_2^{*0} = \dfrac{1}{2R}$, $t_1^{*0} = \dfrac{\overline{x}}{2R}$ e $t_2^{*0} = \dfrac{\overline{y}}{2R}$.

As iterações em (6) terminam (ou seja, considera-se o n-ésimo subproblema resolvido) quando

$$\|\nabla \phi_n(s_1^m, s_2^m, t_1^m, t_2^m)\| < 0.001.$$

Para ilustrar o comportamento típico do algoritmo de ponto interior, considere de novo a constelação $\mathcal{K}$ de pontos na figura 1 e listada na tabela 2. A figura 2 ilustra a elipse inicial e as que correspondem às soluções dos três primeiros subproblemas em (5).

Considere a constelação $\mathcal{K}$ ilustrada na figura 3 e discriminada na tabela 3. Implemente o algoritmo de ponto interior em MATLAB e resolva o problema de optimização 4 que corresponde a esta constelação.

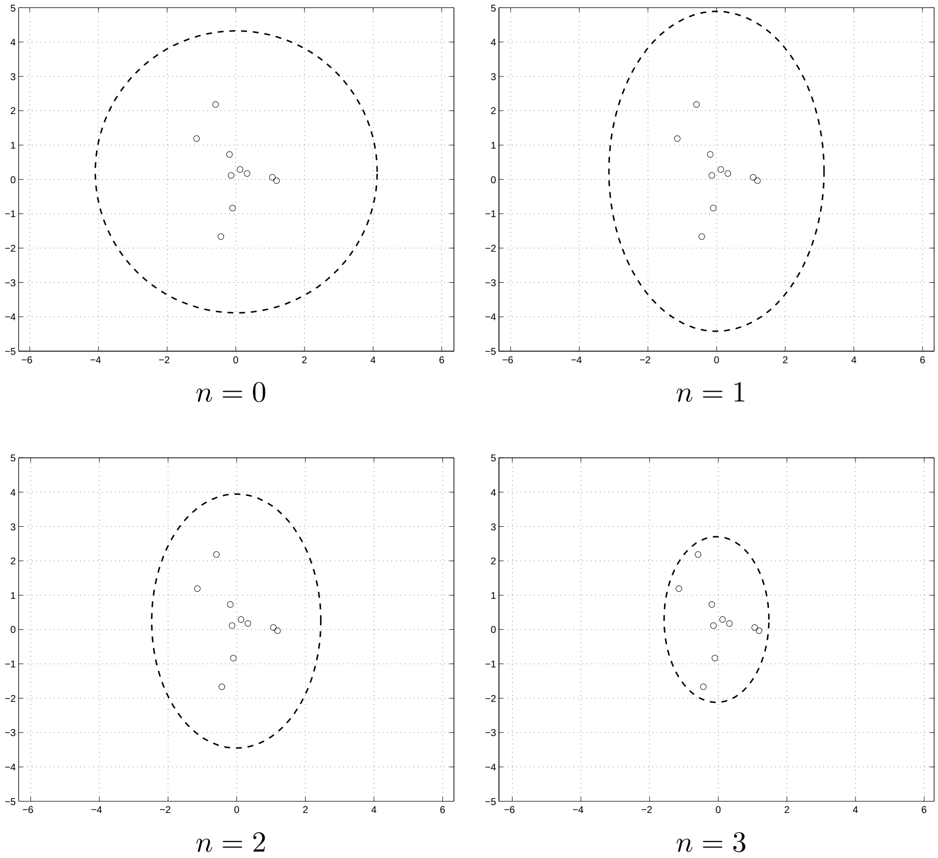

Figura 2: Elipses correspondentes a $(s_1^{*n}, s_2^{*n}, t_1^{*n}, t_2^{*n})$ para $n = 0, 1, 2, 3$

Sugestão: para um dado (s_1, s_2, t_1, t_2), desenhe a elipse que lhe corresponde utilizando a função em MATLAB na tabela 4.

Problema 8. [Dualidade] Seja

$$p = \min_{1 \geq x_1 \geq x_2 \geq \cdots \geq x_n \geq 0} c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n$$

Neste problema, mostra-se que

$$p = \max \{0, c_1, c_1 + c_2, c_1 + c_2 + c_3, \ldots, c_1 + c_2 + c_3 + \cdots + c_n\}.$$

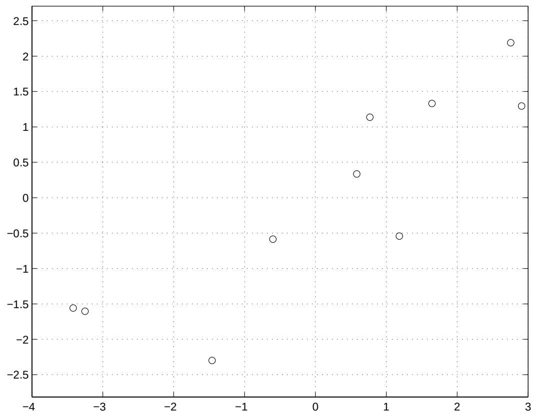

Figura 3: Constelação $\mathcal{K}$ de pontos [Problema 7]

k	x_k	y_k
1	0.7686	1.1377
2	1.6451	1.3311
3	-0.5997	-0.5861
4	-3.4161	-1.5583
5	0.5818	0.3357
6	2.9083	1.2945
7	2.7532	2.1884
8	-1.4567	-2.2981
9	-3.2492	-1.6038
10	1.1849	-0.5421

Tabela 3: Constelação $\mathcal{K}$ de pontos da figura 3 [Problema 7]

(a) Comece por mostrar que o programa linear dual é dado por

$$p = \begin{array}{cc} \max & y \\ y \leq 0 & \\ y \leq c_1 & \\ y \leq c_1 + c_2 & \\ \vdots & \\ y \leq c_1 + c_2 + \cdots + c_n & \end{array}$$

```
function desenhar(s1,s2,t1,t2);
p1 = t1/s1;
p2 = t2/s2;
ax = ([ 1/s1 ; 1/s2 ]);
[M,iM] = max(ax);
[m,im] = min(ax);
ecc = axes2ecc(M,m);
if iM == 1 rot = 0 else rot = 90; end;
[elat,elon] = ellipse1(p1,p2,[M ecc],rot);
plot(elat,elon,'k--','LineWidth',1.5);
```

Tabela 4: Código MATLAB para desenhar a elipse de (s_1, s_2, t_1, t_2)

[**Pista:** note que $1 \geq x_1 \geq x_2 \geq \cdots \geq x_n \geq 0$ equivale a

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ \vdots \\ s_n \end{bmatrix}, \quad s_1 + s_2 + \cdots s_n \leq 1, s_i \geq 0.]$$

(b) Usando a formulação dual da alínea (a), conclua que

$$p = \max\left\{0, c_1, c_1 + c_2, c_1 + c_2 + c_3, \ldots, c_1 + c_2 + c_3 + \cdots + c_n\right\}.$$