Modelagem de problemas de otimização não-linear aplicados em Engenharia

Modeling Nonlinear Optimization Problems in Engineering

Isabella Rhaynara Lopes*, Tatiane Cazarin da Silva†

RESUMO

O estudo descrito nesse trabalho mostra a comparação teórica e numérica de métodos de otimização aplicados a minimização de funções. Inicialmente, foi realizado um estudo teórico acerca dos conceitos básicos de otimização, assim como métodos teóricos a minimização de problemas irrestritos, sendo eles: Método do Gradiente, Método de Newton, Método Quase-Newton e Método de Gradientes Conjugados. Tais métodos foram combinados com métodos exatos (Busca linear exata e Seção Áurea) e inexatos (Condição de Armijo) de busca. Posteriormente, utilizando o software Matlab, foi possível desenvolver códigos computacionais, para permitir a análise numérica e desempenho computacional dos métodos estudados, assim como estudar pacotes aplicados à minimização de problemas restritos. Para a discussão dos resultados, foi proposta a discussão numérica de uma função escolhida, para a qual os métodos foram aplicados. Como exemplo de aplicação, foi proposto um exemplo simples no contexto da engenharia, para o qual a otimização teórica aliada à implementação computacional torna-se bastante eficiente.

Palavras-chave: Otimização, métodos, minimização

ABSTRACT

The study described in this work shows the theoretical and numerical comparison of optimization methods applied to minimization of functions. Initially, a theoretical study was conducted on the basic concepts of optimization, as well as theoretical methods to minimize unrestricted problems, namely: Gradient Method, Newton Method, Quasi-Newton Method and Conjugated Gradient Method. Such methods were combined with exact (Exact Linear Search and Golden Section) and inaccurate (Armijo Condition) search methods. Subsequently, using the Matlab software, it was possible to develop computational codes, to allow numerical analysis and computational performance of the methods studied, as well as to study packages applied to the minimization of restricted problems. For the discussion of the results, the numerical discussion of a chosen function was proposed, for which the methods were applied. As an example of application, a simple example was proposed in the context of engineering, for which theoretical optimization combined with computational implementation becomes quite efficient.

Keywords: Optimization, methods, minimization

1 INTRODUÇÃO

De acordo com Takahashi (2007), a otimização na visão prática, é vista como um conjunto de métodos preparados para determinar melhores configurações dentre muitas possíveis para uma construção, ou o funcionamento de sistemas operacionais que facilitam os interesses humanos.

* Engenharia Civil, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campo Mourão, Paraná, Brasil; isabellarhaynara@alunos.utfpr.edu.br
† Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Campo Mourão; tatianecazarin@utfpr.edu.br

A definição de otimização é dada como a tarefa de encontrar a melhor solução, solução ótima, dentro de um conjunto de soluções existentes. Para tanto, são utilizados métodos que em sua maioria são formulados matematicamente (BRANDÃO, 2010). Dessa forma, seu conceito mais comum, matematicamente, é definido como um processo para encontrar pontos de mínimos e máximos de uma função seguindo determinados conjuntos de restrições (MONTEIRO, 2013).

A otimização pode ser aplicada em várias áreas como engenharias, matemática computacional, ciência da computação, economia e medicina veterinária, zootecnia, e em qualquer outra área que se consiga utilizar modelos computacionais para formular um sistema a ser analisado (TAKAHASHI, 2007). Os algoritmos de otimização são iterativos, onde a partir de estimativa inicial x_0 dada, geram uma sequência de aproximações que tendem a encontrar ou se aproximar do ponto mínimo (BRANDÃO, 2010).

Nesse trabalho serão expostos métodos teóricos de otimização matemática, assim como uma breve discussão numérica e computacional a respeito da aplicação de tais métodos. É possível estabelecer métodos eficientes para cada tipo de problema e compará-los numericamente? A fim de discutir tal pergunta, neste trabalho objetivamos estudar métodos teóricos de otimização matemática, assim como discutir de forma numérica e computacional a eficiência deles quando aplicados a alguns exemplos.

2 MÉTODO

Um problema de otimização pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} &Minimizar\ f(x) \\ &sujeito\ a\ x \in S \end{aligned} \tag{1}$$

onde a função $f : R^n \to R$, denomina-se a função objetivo e $S \subset R^n$, denomina-se o conjunto factível. esse caso S é um subconjunto do R^n, determinado por restrições de igualdade e/ou desigualdade. O objetivo torna-se determinar minimizadores locais ou globais de f pertencentes a S (FRIEDLANDER, 1994).

A Programação Linear (PL) trabalha com problemas quando a função objetivo e todas as restrições no conjunto S são lineares, ou seja, o valor ótimo da função objetivo só pode ocorrer em um dos vértices da região das restrições (PEIXOTO, 2011).

A programação não linear (PNL) não é um método que pode satisfazer todos os problemas. Os métodos aplicados são divididos em problemas de programação não linear restritos e irrestritos. O método irrestrito, ou sem restrições, é subdividido em dois: com derivadas e sem derivadas, já com restrições é adaptado a partir dos métodos sem restrições (PEIXOTO, 2011).

Segundo Ribeiro e Karas (2011), existem três aspectos pertencentes aos métodos de otimização: o primeiro consiste na criação do algoritmo levando em consideração a estrutura do problema e as propriedades satisfeitas da solução; o segundo refere-se às sequencias geradas pelo algoritmo e também se realmente converge para uma solução do problema; e o terceiro é a velocidade que a sequência converge para uma solução viável, conhecida como convergência local, sendo preciso uma aproximação do limite obtida em um tempo razoável.

Dessa forma, nos problemas de otimização que visam obter um minimizador, a solução é obtida por meio de processos iterativos, onde é considerado o ponto inicial x_0, obtém um ponto melhor x_1 repetindo o processo gerando uma sequência $(x^k) \subset R^n$ na qual a função decresce.

Construir um algoritmo consiste em escolher, a partir de cada ponto obtido, uma direção para dar o próximo passo. Uma possibilidade é determinar a direção segundo a qual a f decresce. Tal direção é chamada direção de descida (RIBEIRO; KARAS, 2011). Um algoritmo de descida, para um problema irrestrito, pode ser estruturado, de forma genérica, como apresentado a seguir (Algoritmo 1) onde tem por objetivo minimizar uma função $f : R^n \rightarrow R$.

Algoritmo 1: Algoritmo genérico:

Dados de entrada: $x_0 \in R^n$
$k = 0$
    Repita enquanto $\nabla f(x_k) \neq 0$
      Defina d_k *tal que* $\nabla f(x_k)^T d < 0$
      Obtenha $t_k > 0$ *que minimiza* $f(x_k + t_k d_k)$
      Faça $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$
      $k = k + 1$
Retorna x_k, k

A escolha tanto da direção d_k quanto do tamanho do passo t_k, na iteração k, tem que ser feita de modo a garantir a convergência de f. Dentre os métodos existentes para a determinação da direção, serão discutidos a seguir os métodos de Cauchy, Newton, Quase-Newton e Gradientes Conjugados. Tais métodos são aplicados a problemas irrestritos.

2.1 Escolha de direção

2.1.1 Método de Cauchy

O Método de Cauchy, também conhecido como Método do Gradiente, é um processo iterativo em que a cada etapa é buscada uma direção oposta ao vetor gradiente da função objetivo no ponto corrente. O motivo desse método ser dessa forma é baseado no fato de que o gradiente da função objetivo avaliado no ponto x aponta para a direção de maior crescimento da f a partir desse ponto, sendo assim a direção oposta ao vetor gradiente é onde ocorre o maior decrescimento da função objetivo (FERRAZ, 2017). Sendo assim, na iteração k, o algoritmo faz a escolha da direção obedecendo a relação $d_k = -\nabla f(x_k)$.

2.1.2 Método de Newton

O Método de Newton para a otimização é baseado no fato de que os pontos estacionários de f quando aplicados na derivada são iguais a zero (PENACHI, 2015). O método usa a ideia de aproximação da função f em $x = x^k$ pelo desenvolvimento da séria de Taylor, tendo como objetivo principal minimizar a função e assumir que a matriz Hessiana $H(x^k) = \nabla^2 f(x^k)$ é definida positiva (MONTEIRO, 2013). Assim, o algoritmo define a direção como sendo $d_k = -\left(\nabla^2 f(x_k)\right)^{-1} \nabla f(x_k)$.

2.1.3 Método de Quase-Newton

Os métodos de Quase-Newton necessitam apenas que o gradiente da função objetivo seja fornecido em cada iteração. Assim, obtêm-se estimativas da matriz inversa da Hessiana, evitando os cálculos da inversa em si. De acordo com Ribeiro e Karas (2011), a direção utilizada pelo método de Quase-Newton para minimizar uma função f é dada por $d_k = -H_k \nabla f(x_k)$, onde $H_0 \in R^{n \times n}$ é definida positiva.

2.1.4 Método dos Gradientes-Conjugados

O Gradiente Conjugado é um método iterativo para busca de mínimos locais de uma função, obtidos por meio da geração de aproximações para a solução. Para cada iteração são realizados dois produtos internos para se calcular os dois escalares definidos de forma que a sequência obedeça às condições de ortogonalidade, e gerem direções A-conjugadas da forma $\left(d^i\right)^T A d^j = 0$, para todos $i, j = 0, 1, \dots, k$, com $i \neq j$. (BECKER; CROSSETTI; PAZOS, 2008). O algoritmo atualiza as direções como sendo $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$, onde β_k é escolhido de tal forma que permite que d_{k+1} e d_k sejam direções A-conjugadas.

2.2 Escolha do tamanho do passo

2.2.1 Busca linear exata

A busca linear exata é um método iterativo de descida. Desse modo, dado o iterando x_k, o método computa uma direção d_k que decresce f a partir de x_k e calcula o tamanho de passo λ_k, obtendo um novo ponto x_{k+1} (SOUZA, 2019). De maneira geral, a busca linear exata define λ_k que minimiza $f(x_k + t_k d_k)$. Para o caso de uma função quadrática do tipo $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c$, a fórmula para a busca linear exata pode ser escrita por $t_k = -\frac{\nabla f(x)^T d}{d^T A d}$.

2.2.2 Seção Áurea

O método da Seção Áurea é aplicado em problemas de otimização apresentam apenas um extremo global em um intervalo $[a, b]$ conhecido, ou seja, funções uni modais de um dado intervalo, chamado de incerteza, pois não se sabe a localização exata do ponto ótimo. Ele executa operações nesse intervalo, onde supõe-se que exista um extremo para a função objetivo, o intervalo é reduzido a uma taxa igual a razão áurea, até que o critério de convergência seja satisfeito (ROSA, 2016).

2.2.3 Condição de Armijo

A condição de Armijo procura uma boa redução da função ao longo da direção, sem tentar minimizá-la. Tanto no ponto de vista computacional quanto no teórico, é importante que o tamanho de passo t_k não seja muito pequeno, uma maneira de garantir isso é adotando inicialmente $t_k = 1$ e, se necessário, reduzir t até que a condição $f(x_k + t_k d) \leq f(x_k) + \sigma \mathrm{t_k} \nabla f(x_k)^T d_k$, seja satisfeita (RIBEIRO; KARAS, 2011).

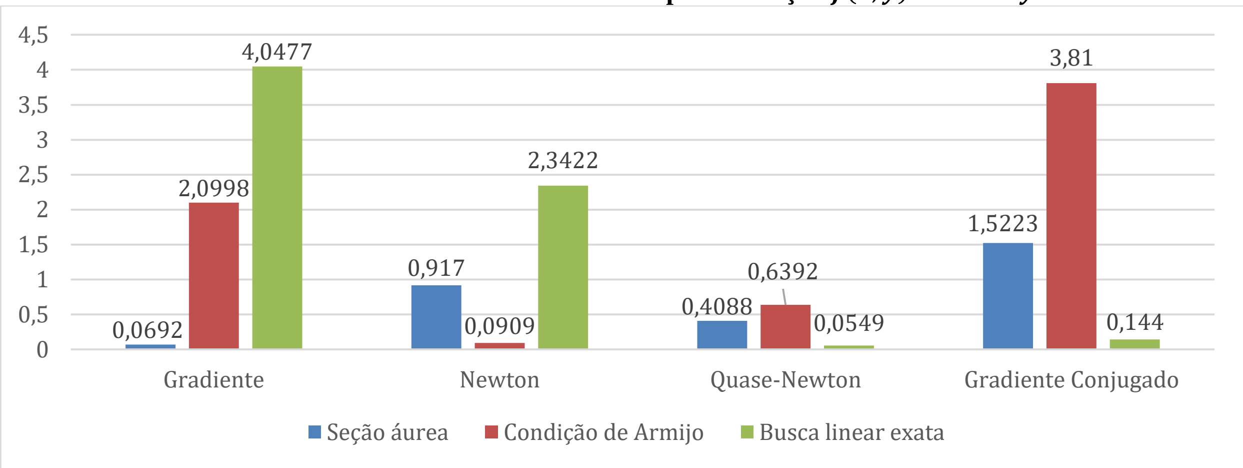
3 RESULTADOS

A fim de verificar numericamente os métodos discutidos aqui, será apresentada a análise numérica de uma função, como exemplo. A função escolhida para os testes de velocidade de convergência por métodos irrestritos foi $f(x, y) = x^2 + 3y^2$. Os resultados obtidos através da aplicação dos Métodos de Newton, Quase-Newton e Gradientes Conjugados, para os 3 métodos de escolha do passo considerados, podem ser vistos no Gráfico 1, a seguir. Os métodos foram implementados no software Matlab, sendo usados como parâmetros: Ponto inicial (5, 1) e como critério de parada $\nabla f(x, y) \leq 10^{-2}$.

É possível observar pelos resultados obtidos que com a aplicação dos métodos apresentados nesse trabalho, o Método do Gradiente combinado com a Busca Linear Exata foi o mais custoso para o programa para convergir, levando aproximadamente 4,05 segundos. Mas quando é alterado o tamanho de passo para Condição de Armijo e Seção Áurea dentro do método esse tempo é diminuído, considerado a Seção Áurea o mais eficiente.

Observando o método de Newton, para essa mesma função, é possível notar que a mudança de passo para a convergência foi significante igual ao caso anterior. A função foi custosa para o programa usando a Busca exata, levando, aproximadamente, 2,34 segundos, mas quando utiliza Condição de Armijo e Seção Áurea o tempo diminui consideravelmente, levando 0,09 e 0,92 segundos, respectivamente.

Gráfico 1: Resultados numéricos obtidos para a função $f(x, y) = x^2 + 3y^2$



Fonte: Autoria própria (2021)

No caso do Quase-Newton, a variação foi irrelevante comparando com os casos anteriores, considerando que a de convergência mais rápida, Busca Exata, levou 0,05 segundos, e a mais lenta foi a Condição de Armijo levando 0,64 segundos.

Já para o Método do Gradiente Conjugado combinado com a Condição de Armijo pode ser observada uma melhor eficiência quando empregado com a Busca Linear Exata, obtendo 0,14 segundos para convergir.

Aqui foram discutidos métodos aplicados para a minimização de uma função, sem restrições. Por outro lado, para problemas de otimização restrita, ou seja, que buscam minimizar uma função sujeita a restrições de igualdade ou desigualdade, a estratégia utilizada pode se tornar similar. São aplicados métodos de penalidade, que tornam o problema irrestrito, e a partir dele os métodos discutidos aqui podem ser empregados.

A título de ilustração, será apresentado um problema no contexto da Engenharia que visa encontrar um mínimo de um problema restrito, disponível em Valente (2020), e apresentada a seguir. Para isso, será empregada como ferramenta auxiliar de resolução numérica a rotina *fmincon*, presente na biblioteca do Matlab.

Exemplo: Pretende-se construir um tanque cilíndrico com mínimo custo. O custo depende das variáveis de projeto (diâmetro e comprimento), pois elas influenciam a massa do tanque e os comprimentos da soldadura. O tanque precisa acomodar-se no fundo de um caminhão e carregar o volume solicitado de material de $0{,}8\ \mathrm{m}^3$. Esses dados vigoram em um problema de otimização com restrições. A função de custo do tanque é dada pela função a seguir, onde D é o diâmetro do tanque e L o comprimento (ambos em metros):

$$f(D, L) = 36000\left\{L\pi\left[\left(\frac{D}{2} + 0.03\right)^2 - \left(\frac{D}{2}\right)^2\right] + 2\pi\left(\frac{D}{2} + 0.03\right)^2 0.03\right\} + 80\pi(D + 0.03)$$

Para que o tanque cilíndrico se encaixe no caminhão é necessário impor limites máximos para as variáveis de projeto, como sendo $D \leq 1{,}0\mathrm{m}$ e $L \leq 2{,}0\mathrm{m}$. A fim de satisfazer o volume necessário, tem-se que o volume do tanque cilíndrico deve ter capacidade de $0{,}8\ \mathrm{m}^3$, ou seja, $\pi\left(\frac{D}{2}\right)^2 L = 0{,}8$. Temos então um problema de otimização restrita. Utilizando a rotina *fmincon* temos que a solução ótima do problema é $(D^*, L^*) = (0.9834, 1.9002)$, com um custo total de R$ 5.723,15.

Após simples ilustrações, teórica e aplicada, de um problema de otimização, percebe-se que fornecido a procedência do problema que precisa ser minimizado, os métodos podem variar suas convergências, por isso eles devem ser ajustados para cada tipo de análise e assim ser escolhido o melhor método para ele.

4 CONCLUSÃO

De acordo com as pesquisas que foram desenvolvidas nesse trabalho foi possível perceber a importância da minimização em várias áreas. Recorrendo aos algoritmos de otimização percebe-se que através deles os custos vão ser minimizados, tendo também uma maior eficiência para que no final seja alcançado o melhor resultado para o cliente.

Foi exposto nesse estudo apenas alguns métodos existentes de otimização, mostrando suas vantagem e desvantagem. Cabe então aos profissionais especializados escolher qual método vai ter um resultado mais eficiente na convergência em cada situação. Deve-se fazer essa escolha por testes computacionais, como apresentado nesse trabalho, para assim ter uma análise mais branda de qual método chegou com maior rapidez no resultado estimado.

REFERÊNCIAS

BECKER, C.; CROSSETTI, G. L.; PAZOS, R. E. P. **Método do Gradiente Conjugado na otimização de problemas modelados na catalisação de polímeros.** UNISC – Santa Cruz do Sul, 2008.

BRANDÃO, M. A. L. **Estudos de alguns métodos determinísticos de otimização irrestrita.** Dissertação de Mestrado, UFU – Uberlândia, 2010.

FERRAZ, Bruna Alves. **Métodos computacionais de otimização**. Instituto de Geociências e Ciências Exatas, UNESP - Rio Claro, 2017.

FRIEDLANDER, A. **Elementos de programação não-linear.** Editora Unicamp, 1994.

MONTEIRO, A. J. T. **Otimização Não Linear de Mínimos Quadrados**. Departamento de Matemática, Universidade de Aveiro - Portugal, 2013.

PEIXOTO, T. C. L. C. **Reuso de água: Comparação entre os métodos DFA, programação linear e programação não linear.** Dissertação de Mestrado, UFRJ – Rio de Janeiro, 2011.

RIBEIRO, Ademir Alves; KARAS, Elizabeth Wegner. **Um curso de otimização**. Curitiba, 2011.

ROSA, A. C. **Uma introdução à problemas de otimização utilizando o método da seção áurea e algoritmos genéticos.** Dissertação de mestrado, UFG – Catalão, 2016.

TAKAHASHI, R. H. C. **Otimização Escalar e Vetorial**. Departamento de Matemática, UFMG - Belo Horizonte, 2007.

VALENTE, E. C. M. **Otimização em problemas de Engenharia Civil.** Dissertação de mestrado, FEUP – Porto, 2020.