

Resolução de problemas com apenas restrições lineares de igualdade

Marina Andretta

ICMC-USP

27 de outubro de 2018

Problema com restrições lineares de igualdade

Vamos nos concentrar em problemas apenas com **restrições lineares de igualdade**. Ou seja, estamos interessados em resolver o seguinte problema:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) \\ \text{Sujeita a} & Ax = b, \end{array} \quad (1)$$

onde

- $x \in \mathbf{R}^n$,
- $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbf{R}^m$,
- $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ função suave.

Problema com restrições lineares de igualdade

Ao trabalhar com o problema (1), trataremos apenas do caso em que a matriz A possui linhas linearmente independentes.

Isso é razoável na prática, pois quando alguma linha de A depende linearmente de outra, ou a linha em questão pode ser eliminada sem nenhuma alteração da solução de (1) ou a região viável é vazia, não havendo solução para o problema.

Problema com restrições lineares de igualdade

Vejamos algumas definições:

- Z é uma matriz de $\mathbb{R}^{n \times (n-m)}$ cujas **colunas formam uma base para núcleo** do espaço gerado pelas linhas da matriz A .
- Y é uma matriz de $\mathbb{R}^{n \times m}$ cujas **colunas formam uma base para a imagem** do espaço formado pelas linhas de A .

Note que $AZ = 0$ e AY é não-singular.

Problema com restrições lineares de igualdade

Uma vez escolhidas as matrizes Z e Y , todo vetor x em \mathbf{R}^n possui uma única representação da forma

$$x = Yx_y + Zx_z,$$

com $x_y \in \mathbf{R}^m$ e $x_z \in \mathbf{R}^{(n-m)}$.

Em particular, tomando x^* solução de (1), temos

$$x^* = Yx_y^* + Zx_z^*.$$

Problema com restrições lineares de igualdade

Como x^* é viável, vale que

$$Ax^* = A(Yx_y^* + Zx_z^*) = b.$$

Como $AZ = 0$ e AY é não-singular, temos

$$x_y^* = (AY)^{-1}b,$$

Problema com restrições lineares de igualdade

Assim, a **solução** x^* de (1) (assim como qualquer ponto viável de (1)) pode ser vista como a **soma de uma solução particular para o sistema linear** $Ax = b$ (tomando, por exemplo, $x_z^* = 0$) e de um ponto no núcleo do espaço gerado pelas linhas **de** A .

Desta forma, reduzimos o problema restrito original (1) a um **problema irrestrito de** $n - m$ variáveis, dado por

$$\text{Minimizar } \bar{f}(x_z) = f(Y(AY)^{-1}b + Zx_z) = f(x). \quad (2)$$

Problema com restrições lineares de igualdade

Note que o gradiente e a Hessiana de \bar{f} são dados por

$$\nabla \bar{f}(x_z) = Z^T \nabla f(x)$$

e

$$\nabla^2 \bar{f}(x_z) = Z^T \nabla^2 f(x) Z.$$

Problema com restrições lineares de igualdade

Para resolver o problema (2), podemos usar **qualquer método para resolução de problemas irrestritos**.

Formularemos, então, um algoritmo para resolver (2) baseado em busca linear que gera uma sequência de pontos viáveis.

Para manter a viabilidade de cada ponto gerado pelo algoritmo, a cada iteração k , partimos de um ponto x_k **viável** e calculamos um passo p_k tal que

$$Ap_k = 0.$$

Problema com restrições lineares de igualdade

Como x_k é viável e $Ap_k = 0$, temos

$$Ax_{k+1} = A(x_k + \alpha_k p_k) = Ax_k + \alpha_k Ap_k = Ax_k = b.$$

Ou seja, o ponto $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ é viável.

Problema com restrições lineares de igualdade

Note que

$$Ap_k = 0 \Leftrightarrow p_k = Zp_z,$$

para algum vetor $p_z \in \mathbf{R}^{(n-m)}$.

Resolução de problemas com restrições lineares de igualdade

Método de busca linear para minimização com restrições lineares de igualdade: Dados uma matriz $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$, $m < n$, de posto m , um vetor $b \in \mathbf{R}^m$, um ponto inicial x_0 viável e um escalar $\epsilon > 0$.

Passo 1: Faça $k \leftarrow 0$.

Passo 2: Calcule Z tal que $AZ = 0$.

Passo 3: Se $\|Z^T \nabla f(x_k)\| \leq \epsilon$, pare com x_k como solução.

Passo 4: Calcule uma direção de descida $p_z \in \mathbf{R}^{(n-m)}$ e faça $p_k \leftarrow Zp_z$.

Passo 5: Faça $x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k p_k$, α_k satisfaz condições de Wolfe ou é calculado usando *backtracking* com Armijo.

Passo 6: Faça $k \leftarrow k + 1$ e volte para o Passo 3.

Cálculo da matriz Z

A primeira idéia para o cálculo da matriz Z é o uso da **fatoração LQ** da matriz A .

Nesta fatoração, que gasta $O(nm^2)$ operações, temos uma **matriz ortogonal** $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que

$$AQ = (L \ 0),$$

onde $L \in \mathbb{R}^{m \times m}$ é **triangular inferior**.

Cálculo da matriz Z

Como estamos supondo que as linhas da matriz A são linearmente independentes, a matriz L é não-singular.

Escrevendo a matriz Q como $Q = [Q_1; Q_2]$, com $Q_1 \in \mathbb{R}^{n \times m}$ e $Q_2 \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$, temos que

$$AQ_1 = L \text{ e } AQ_2 = 0.$$

É fácil ver que as colunas de Q_1 e Q_2 formam, respectivamente, uma base ortogonal para a imagem e o núcleo do espaço gerado pelas linhas de A .

Assim, uma escolha natural para a matriz Z é Q_2 .

Note que, usando, por exemplo, técnicas do tipo **Newton para calcular o passo p_z** (Passo 4), temos que

$$\text{cond}(Z^T \nabla^2 f(x_k) Z) \leq \text{cond}(\nabla^2 f(x_k)) (\text{cond}(Z))^2.$$

Assim, como este limitante é justo (pode valer a igualdade), quando o número de condição da matriz Z é grande, a matriz Hessiana projetada $Z^T \nabla^2 f(x_k) Z$ poderia ser mal-condicionada mesmo quando a matriz Hessiana $\nabla^2 f(x_k)$ é bem-condicionada.

Cálculo da matriz Z

No entanto, utilizando a **fatoração LQ** para determinar Z , temos **$\text{cond}(Z) = 1$** . Ou seja,

$$\text{cond}(Z^T \nabla^2 f(x_k) Z) \leq \text{cond}(\nabla^2 f(x_k)),$$

o que mostra que, neste caso, o condicionamento do problema (2) não é pior que o condicionamento do problema (1).

Portanto, uma grande **vantagem** do uso desta técnica é o fato de que esta escolha de Z **não piora o condicionamento do problema** de encontrar uma solução para (1).

Cálculo da matriz Z

Para formar a matriz Q usando a fatoração LQ é necessário calcular o produto de transformações ortogonais usadas para triangularizar a matriz A .

Na implementação de métodos que usam a matriz Z somente em produtos matriz-vetor, pode não ser eficiente calcular a matriz Q (e, consequentemente, Z) explicitamente, principalmente quando o número de restrições é pequeno.

Neste caso é mais interessante **armazenar as transformações ortogonais** de forma compacta e aplicá-las ao vetor apropriado para calcular o produto matriz-vetor sempre que necessário.

Cálculo da matriz Z

Apesar das vantagens do uso da **fatoração LQ** para o cálculo da matriz Z , esta é uma operação **computacionalmente custosa**.

Uma **alternativa** é a técnica de **redução de variáveis**.

Tomando a matriz A com linhas linearmente independentes, podemos particioná-la em

$$A = (V \quad U),$$

onde $V \in \mathbf{R}^{m \times m}$ é não-singular e $U \in \mathbf{R}^{m \times (n-m)}$.

Usando esta partição de A , a matriz Z pode ser definida como

$$Z = \begin{pmatrix} -V^{-1}U \\ I \end{pmatrix},$$

onde I é a matriz identidade $(n - m) \times (n - m)$.

Note que

$$AZ = (V \quad U) \begin{pmatrix} -V^{-1}U \\ I \end{pmatrix} = -VV^{-1}U + U = 0,$$

como desejamos.

Cálculo da matriz Z

Geralmente a matriz Z , tal como descrita acima, **não é armazenada explicitamente**.

Produtos matriz-vetor envolvendo Z e Z^T podem ser obtidos resolvendo sistemas lineares envolvendo V e V^T .

A grande **dificuldade** desta técnica é encontrar uma maneira eficiente de particionar A de forma que a matriz V **escolhida fique relativamente bem-condicionada**.