

MODIFICAÇÕES GLOBALMENTE CONVERGENTES PARA O
MÉTODO DAS ASSÍNTOTAS MÓVEIS E SOLUÇÃO DOS
SUBPROBLEMAS VIA REGIÕES DE CONFIANÇA

Mael Sachine

Doutorado em Matemática Aplicada

Sandra Augusta Santos

Orientadora

Márcia Aparecida Gomes-Ruggiero

Co-orientadora

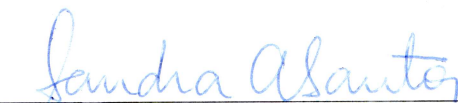
Tese de doutorado pelo Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica,
UNICAMP.

Este trabalho teve o apoio financeiro da FAPESP.

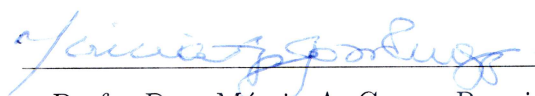
MODIFICAÇÕES GLOBALMENTE CONVERGENTES PARA O MÉTODO DAS ASSÍNTOTAS MÓVEIS E SOLUÇÃO DOS SUBPROBLEMAS VIA REGIÕES DE CONFIANÇA

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por **Mael Sachine** e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 30 de agosto de 2010.



Profa. Dra. Sandra A. Santos
Orientadora



Profa. Dra. Márcia A. Gomes-Ruggiero
Co-Orientadora

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Sandra Augusta Santos (IMECC/UNICAMP)

Prof. Dr. Clóvis Caesar Gonzaga (UFSC)

Prof. Dr. Paulo José da Silva e Silva (IME/USP)

Prof. Dr. José Mario Martínez (IMECC/UNICAMP)

Prof. Dr. Francisco de Assis Magalhães Gomes Neto (IMECC/UNICAMP)

Prof. Dr. Ademir Alves Ribeiro (UFPR)

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de **Doutor em Matemática Aplicada**.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP**

Bibliotecária: Maria Fabiana Bezerra Müller – CRB8 / 6162

Sachine, Mael

Sa14m Modificações globalmente convergentes para o método das assíntotas móveis e solução dos subproblemas via regiões de confiança/Mael
Sachine-- Campinas, [S.P. : s.n.], 2010.

Orientador : Sandra Augusta Santos; Márcia Aparecida Gomes-
Ruggiero

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de
Matemática, Estatística e Computação Científica.

1.Programação não-linear. 2.Método das assíntotas móveis.
3.Convergência global. 4.Parâmetro espectral. I. Santos, Sandra Augusta.
II.Ruggiero, Márcia Aparecida Gomes. III. Universidade Estadual de
Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.
IV. Título.

Título em inglês: Globally convergent modifications to the method of moving asymptotes and the solution of the subproblems using trust regions

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Nonlinear programming. 2. Method of moving asymptotes. 3. Global convergence. 4. Spectral parameter.

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

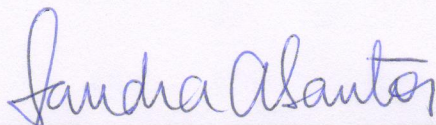
Banca examinadora: Profa. Dra. Sandra Augusta Santos (IMECC – UNICAMP)
Prof. Dr. Clovis Caesar Gonzaga (UFSC)
Prof. Dr. Paulo José da Silva e Silva (IME – USP)
Prof. Dr. José Mario Martínez Perez (IMECC – UNICAMP)
Prof. Dr. Francisco de Assis M. Gomes Neto (IMECC – UNICAMP)
Prof. Dr. Ademir Alves Ribeiro (UFPR)

Data da defesa: 30/08/2010

Programa de Pós-Graduação: Doutorado em Matemática Aplicada

Tese de Doutorado defendida em 30 de agosto de 2010 e aprovada

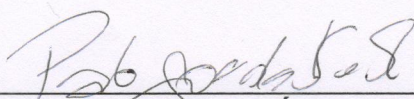
Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



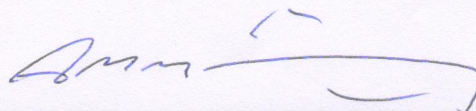
Prof(a). Dr(a). SANDRA AUGUSTA SANTOS



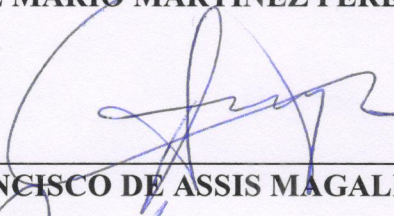
Prof(a). Dr(a). CLOVIS CAESAR GONZAGA



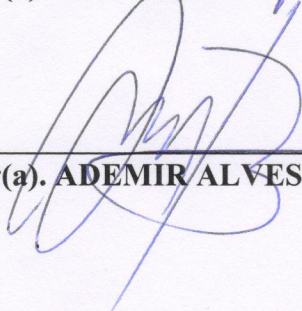
Prof(a). Dr(a). PAULO JOSÉ DA SILVA E SILVA



Prof(a). Dr(a). JOSÉ MARIO MARTINEZ PEREZ



Prof(a). Dr(a). FRANCISCO DE ASSIS MAGALHÃES GOMES NETO



Prof(a). Dr(a). ADEMIR ALVES RIBEIRO

Agradecimentos

À FAPESP, pelo apoio financeiro.

Às professoras Sandra e Márcia, pelo carinho e pela dedicação.

Aos meus pais e à minha irmã, por todo amor e afeto.

Ao João, por tudo.

Resumo

Neste trabalho propomos modificações globalmente convergentes para o Método das Assíntotas Móveis (MMA), baseadas no parâmetro espectral para a construção das aproximações das funções originais e na relaxação da condição conservadora. A informação de segunda ordem presente no parâmetro espectral é incluída nas aproximações racionais da função objetivo e das restrições não-lineares no início de cada iteração, de modo a melhorar a qualidade dos modelos. A condição conservadora é relaxada por meio de uma sequência forçante controlada somável, de maneira que a convergência global é mantida. Também, propomos uma nova estratégia para resolver os subproblemas MMA por meio do problema dual, usando uma técnica de região de confiança. Os experimentos numéricos realizados comprovam a eficiência das estratégias propostas. Ainda, por trabalharmos com um problema aumentado associado à formulação padrão para o problema de programação não-linear com restrições de desigualdade, estabelecemos relações entre os pontos KKT do problema aumentado e os pontos correspondentes do problema original associado.

Palavras-chave: programação não-linear, Método das Assíntotas Móveis, parâmetro espectral, convergência global, problema dual.

Abstract

In this work we propose globally convergent versions for the Method of Moving Asymptotes (MMA), based on the spectral parameter for updating the approximations of the original functions and on relaxing the conservative condition. The second-order information present in the spectral parameter is included in the rational approximations of the objective function and of the nonlinear constraints in the beginning of each iteration, so as to improve the quality of the models. The conservative condition is relaxed by means of a summable controlled forcing sequence, so that global convergence is maintained. Also, we propose a new strategy to solve the MMA subproblems by means of the dual problem, using a trust-region technique. The performed numerical experiments confirm the efficiency of the proposed strategies. In addition, by working with an extended problem associated with the standard formulation for the nonlinear programming problem with inequality constraints, we have established relationships between the KKT points of the extended problem and the corresponding points of the associated original problem.

Key words: nonlinear programming, Method of Moving Asymptotes, spectral parameter, global convergence, dual problem.

Sumário

Introdução	1
1 Características do Método das Assíntotas Móveis	5
1.1 Problemas e propriedades básicas	5
1.2 A classe de métodos CCSA	19
1.2.1 Descrição de um método CCSA	20
1.2.2 Aproximações das funções originais	21
1.2.3 Exemplos de aproximações das funções originais	23
1.2.4 Atualização dos parâmetros $\rho_i^{(k,\ell)}$ e $\sigma_j^{(k)}$	26
1.3 Revisão bibliográfica	28
2 Duas modificações globalmente convergentes para o MMA	43
2.1 Informação de segunda ordem e o parâmetro espectral	44
2.2 Relaxando a condição conservadora	46
2.3 O Algoritmo	47
2.4 Análise teórica da convergência global	49
2.5 Resultados numéricos	59
2.5.1 Problemas acadêmicos	63
2.5.2 Sistema de duas barras (<i>2-bar truss</i>)	72
2.5.3 Viga em balanço (<i>cantilever beam</i>)	75
2.5.4 Conclusões dos resultados numéricos	78
3 Solução dos subproblemas MMA	79
3.1 Um método de pontos interiores para resolver os subproblemas MMA	80
3.2 Uma abordagem dual para resolver os subproblemas MMA	86
3.2.1 O dual do subproblema MMA	87
3.2.2 Propriedades da função objetivo dual	90
3.2.3 Método de região de confiança	96

3.3	Resultados numéricos	103
3.3.1	Problemas Acadêmicos	103
3.3.2	Sistema de duas barras (<i>2-bar truss</i>)	110
3.3.3	Viga em balanço (<i>cantilever beam</i>)	112
3.3.4	Conclusões dos resultados numéricos	114
Conclusões		115
Referências Bibliográficas		117
A Limitante superior para os multiplicadores de Lagrange		123

Introdução

A demanda crescente nas engenharias para projetar estruturas eficientes e economicamente viáveis torna necessário o aperfeiçoamento de métodos específicos de tomada de decisão, entre os quais métodos de otimização. Estes métodos são usados para resolver problemas de diversas áreas das ciências aplicadas, como por exemplo problemas de otimização estrutural, que surgem nos campos automotivo, aeroespacial, de engenharia civil, de projetos de máquinas, entre outros. Os estudos teóricos de tais métodos constituíram uma área de pesquisa intensa nas últimas décadas, e o avanço de tecnologia e técnicas computacionais tem se tornado uma ferramenta poderosa, permitindo a solução de problemas de tamanho e complexidade cada vez maiores.

No contexto de otimização estrutural, os métodos propostos buscam obter uma sequência convergente, partindo de um ponto inicial arbitrário, considerando que avaliações das funções envolvidas e seus gradientes têm alto custo computacional. Ainda neste contexto, é desejável que cada ponto desta sequência seja viável, diferentemente da maioria dos métodos puramente teóricos, em que é permitido que os iterandos saiam do conjunto de pontos viáveis ou alcancem a viabilidade apenas em pontos limite.

Estratégias para a resolução de problemas estruturais normalmente são baseadas em construir uma aproximação do problema estrutural original, e então empregar técnicas de otimização para resolver o problema aproximado. A solução ótima do problema aproximado é então usada para realizar uma ou mais análises estruturais com o propósito de atualizar ou refinar o problema aproximado. Estas análises estruturais são, na verdade, avaliações das funções envolvidas no problema e de seus gradientes, o que torna importante aproximar o problema original adequadamente para reduzir o número destas análises.

Este trabalho consiste no estudo, desenvolvimento e implementação de modificações para o Método das Assíntotas Móveis (MMA, do inglês *Method of Moving Asymptotes*), da classe de métodos de otimização baseada em aproximações separáveis, convexas e conservadoras (CCSA, do inglês *Conservative Convex Separable Approximations*), desenvolvido para resolver problemas estruturais e muito popular na área de otimização estrutural [45]. Para tanto, no Capítulo 1, consideramos o problema padrão de programação não-linear com restrições de

desigualdade e caixa e um problema aumentado relacionado, no qual variáveis artificiais são introduzidas na função objetivo, por meio de uma penalização, e nas funções que definem as restrições, com o objetivo de garantir que uma solução sempre possa ser encontrada, no caso em que o problema original tenha conjunto viável vazio ou não cumpra alguma condição de qualificação. De fato, o problema aumentado sempre possui conjunto viável qualificado e pelo menos uma solução ótima, que consequentemente satisfaz as condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) deste problema. Por estas razões, preferimos trabalhar com o problema aumentado, de modo que estabelecemos relações entre os pontos KKT do problema aumentado e os pontos correspondentes do problema original associado para que, ao obter um ponto estacionário do problema aumentado, possamos determinar quais propriedades o ponto correspondente satisfaz em relação ao problema original.

De qualquer maneira, sempre que o conjunto viável do problema original cumprir alguma condição de qualificação, resolver o problema aumentado será equivalente a resolver o original. Neste trabalho, trabalhar com o problema aumentado é particularmente vantajoso pois assegura a consistência dos subproblemas empregados pelo método e concorda com a filosofia de trabalhar com iterandos viáveis. Também, a nossa opção de considerar o problema aumentado se fundamenta pelo uso desta formulação em trabalhos de caráter tanto teórico [12, 30] quanto prático [40, 45, 51, 54].

Assim, uma vez bem caracterizadas as soluções do problema aumentado, ainda no Capítulo 1 realizamos uma descrição completa da classe de métodos CCSA, e também do método das assíntotas móveis. No MMA, uma sequência de subproblemas convexos é gerada e resolvida. Em cada subproblema, a função objetivo original e as funções que definem as restrições de desigualdade são substituídas por modelos separáveis e convexos, que aproximam as funções originais em torno da estimativa corrente. A solução ótima do subproblema pode ser aceita ou rejeitada: se for aceita, a iteração externa se completa; se rejeitada, uma nova iteração interna é realizada, na qual um novo subproblema é gerado e resolvido. As iterações internas são repetidas até que os valores das aproximações da função objetivo e das restrições se tornem maiores ou iguais aos valores das funções originais, quando avaliadas na solução ótima do subproblema, ou seja, até que a condição conservadora seja satisfeita para todas as funções envolvidas. As aproximações que caracterizam o MMA são funções racionais cujas assíntotas são atualizadas em cada iteração externa, acompanhando os iterandos correntes, justificando assim o nome do método. Vale observar que o uso de aproximações racionais se justifica pelo fato de que em diversos problemas da engenharia de estruturas surgem variáveis recíprocas em vez de variáveis diretas. É justamente para os problemas modelados com variáveis recíprocas que o método MMA se aplica de maneira adequada. Trazemos também uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos estudados, como por exemplo,

aqueles que antecederam o método das assíntotas móveis [23, 27], assim como várias versões do MMA propostas por Svanberg [40, 41, 42, 44, 45] e diversos estudos baseados no MMA [11, 35, 48, 50, 52, 53].

No Capítulo 2, propomos duas modificações globalmente convergentes para o método das assíntotas móveis. Nossa motivação para estas alterações vem da observação de que o método original de Svanberg, para alguns problemas, progride lentamente na solução da sequência de subproblemas resolvidos. A primeira modificação é baseada no parâmetro espectral [9, 16] para a atualização de um importante parâmetro que fornece a convexidade estrita das aproximações das funções originais. A informação de segunda ordem presente no parâmetro espectral é incluída nas funções que definem as aproximações racionais da função objetivo e das restrições não-lineares no início de cada iteração externa, melhorando assim a qualidade das aproximações. Além disso, a idéia preserva a propriedade de convergência global da classe de métodos CCSA. O parâmetro espectral foi usado no cenário de otimização para definir um tamanho de passo adequado na direção do gradiente, produzindo resultados muito melhores do que a tradicional abordagem de Cauchy, e sendo muitas vezes competitivo em relação aos métodos de Newton e quasi-Newton [4, 37, 38]. Mais tarde, o método foi estendido para problemas convexos com restrição [7, 8] e para problemas não-lineares com restrição gerais na abordagem dos algoritmos de restauração inexata [25].

A segunda modificação é baseada na relaxação da condição conservadora, que é realizada por meio de uma sequência forçante controlada somável. Assim, a condição conservadora é relaxada no início e atingida no fim, de maneira que a convergência global é mantida. A exigência de que a condição conservadora original seja satisfeita para todas as funções envolvidas, como critério para aceitação do iterando, fornece valores monotonamente decrescentes da função objetivo, e viabilidade para o problema aumentado. Ao relaxá-la, os iterandos externos do problema aumentado podem ser inviáveis, principalmente nas iterações iniciais, e o valor da função objetivo pode aumentar, mas de uma maneira controlada.

Os resultados dos testes computacionais realizados introduzindo no MMA a atualização espectral e a condição conservadora relaxada comprovam a eficiência das estratégias propostas. De fato, os resultados da estratégia que combina ambas as modificações mostram que os valores ótimos do parâmetro cuja atualização é baseada no parâmetro espectral se encarregam de verificar a condição conservadora relaxada após poucas tentativas, de maneira que o algoritmo precisa realizar poucas iterações internas para obter convergência, reduzindo o número de subproblemas resolvidos e sendo muito eficiente em relação ao tempo.

Finalmente, no Capítulo 3, propomos uma nova estratégia para resolver os subproblemas MMA por meio do problema dual, usando uma técnica de região de confiança. A solução dos subproblemas MMA por meio do problema dual foi considerada por Svanberg [40] em um

algoritmo de direções de descida com busca-linear aplicado ao dual do subproblema MMA. Svanberg também propôs uma abordagem de pontos interiores primal-dual [43], na qual uma sequência de condições KKT relaxadas é resolvida pelo método de Newton. Assim, nossa estratégia é uma alternativa a ambas as abordagens propostas anteriormente por Svanberg. O dual de um subproblema MMA é um problema de maximização de uma função objetivo côncava sujeito à não negatividade das variáveis duais (ou dos multiplicadores de Lagrange do problema primal), de modo que para resolvê-lo de maneira eficiente, tiramos proveito das várias propriedades da função objetivo dual. Em relação aos experimentos numéricos, nossa abordagem dual com região de confiança apresentou um desempenho bastante semelhante à abordagem primal-dual de Svanberg em relação ao número de iterações realizadas, mas foi superior em relação ao tempo de CPU utilizado.

Capítulo 1

Características do Método das Assíntotas Móveis

Neste capítulo apresentamos uma formulação padrão para o problema de programação não-linear com restrições de desigualdade e um problema aumentado relacionado que possui propriedades e características importantes. Em particular, o conjunto de pontos que satisfazem as condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) deste problema é não-vazio. Esta e outras qualidades nos fazem preferir trabalhar com o problema aumentado, que é cuidadosamente caracterizado pois é o problema que de fato será resolvido. Ainda, estabelecemos relações entre os pontos KKT do problema aumentado e os pontos correspondentes do problema original associado, e as ilustramos em alguns exemplos. Na Seção 1.2 realizamos uma descrição completa da classe de métodos CCSA, e também do método das assíntotas móveis MMA, que é um método da classe CCSA muito popular na área de otimização estrutural. Finalmente trazemos uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos estudados, como por exemplo aqueles que antecederam o método das assíntotas móveis, assim como várias versões do MMA propostas por Svanberg e diversos estudos baseados no MMA.

1.1 Problemas e propriedades básicas

Consideremos o seguinte problema de otimização, formulado como um problema de programação não-linear com restrições de desigualdade:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f_0(x) \\ &\text{sujeito a} && f_i(x) \leq 0, && i = 1, \dots, m, \\ &&& x_j^{\min} \leq x_j \leq x_j^{\max}, && j = 1, \dots, n, \end{aligned} \tag{1.1}$$

em que $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ é o vetor das variáveis, x_j^{min} e x_j^{max} são números reais dados tais que $-\infty < x_j^{min} < x_j^{max} < +\infty$ para cada j e f_0, f_1, \dots, f_m são funções reais duas vezes continuamente diferenciáveis.

Considerando a dificuldade de escolher uma estimativa inicial viável para o problema original (1.1) (e a possibilidade do conjunto viável do problema (1.1) ser vazio ou não cumprir alguma condição de qualificação), esta formulação é modificada, seguindo a proposta de Svanberg [45], com a introdução de variáveis artificiais $y = (y_1, \dots, y_m)^T$, obtendo-se assim o seguinte problema aumentado:

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f_0(x) + \sum_{i=1}^m c_i y_i \\ \text{sujeito a} \quad & f_i(x) - y_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ & x_j^{min} \leq x_j \leq x_j^{max}, \quad j = 1, \dots, n, \\ & y_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned} \tag{1.2}$$

em que as constantes $c_i > 0$ devem ser escolhidas suficientemente grandes para forçar que as variáveis y_i sejam nulas na solução ótima, caso o problema original seja viável. Ao longo do trabalho, iremos nos referir ao problema original (1.1) como o problema (PO), e ao problema aumentado (1.2) como o problema (PA). Ainda, é preferível trabalhar com (1.2) em vez de (1.1) pelas razões resumidas a seguir e justificadas ao longo desta seção:

- o problema (1.2) sempre possui soluções viáveis e pelo menos uma solução ótima, mesmo se o problema (1.1) não possui solução viável;
- o conjunto viável de (1.2) é qualificado, satisfazendo naturalmente uma condição de regularidade;
- toda solução ótima, local ou global, do problema (1.2) satisfaz as condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) deste problema.

De qualquer forma, sempre que o conjunto viável do problema (PO) cumprir uma condição de qualificação clássica, será possível escolher as constantes $c_i > 0$ de tal maneira que resolver o (PA) é equivalente a resolver o (PO). Neste trabalho, o artifício de se trabalhar com o problema aumentado é particularmente vantajoso pois assegura a consistência dos subproblemas empregados pelo método. Essas idéias ficarão mais claras ao longo desta seção.

Consideremos inicialmente a função Lagrangiano do problema (1.1):

$$L_{PO}(x, \lambda, \nu, \zeta) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{j=1}^n (\nu_j (x_j^{min} - x_j) + \zeta_j (x_j - x_j^{max})),$$

onde $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$, $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_n)^T$ e $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_n)^T$ são os multiplicadores não-negativos dos diferentes blocos de restrições de (1.1). Consideremos agora a função Lagrangiano do problema (1.2):

$$\begin{aligned} L_{PA}(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu) = & f_0(x) + \sum_{i=1}^m c_i y_i + \sum_{i=1}^m \lambda_i (f_i(x) - y_i) + \\ & + \sum_{j=1}^n (\nu_j (x_j^{min} - x_j) + \zeta_j (x_j - x_j^{max})) - \sum_{i=1}^m \mu_i y_i, \end{aligned}$$

onde $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$, $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_n)^T$, $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_n)^T$ e $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_m)^T$ são os multiplicadores não-negativos das restrições de (1.2). Finalmente, as condições KKT destes problemas são:

- Condições KKT do problema (1.1) - problema original (PO):

$$\nabla f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla f_i(x) - \nu + \zeta = 0, \quad (\nabla_x L_{PO} = 0) \quad (1.3a)$$

$$f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade primal}) \quad (1.3b)$$

$$x_j^{min} - x_j \leq 0 \quad \text{e} \quad x_j - x_j^{max} \leq 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{viabilidade primal}) \quad (1.3c)$$

$$\lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade dual}) \quad (1.3d)$$

$$\nu_j \geq 0 \quad \text{e} \quad \zeta_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{viabilidade dual}) \quad (1.3e)$$

$$\lambda_i f_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{complementaridade}) \quad (1.3f)$$

$$\nu_j (x_j^{min} - x_j) = 0 \quad \text{e} \quad \zeta_j (x_j - x_j^{max}) = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{complementaridade}). \quad (1.3g)$$

- Condições KKT do problema (1.2) - problema aumentado (PA):

$$\nabla f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla f_i(x) - \nu + \zeta = 0, \quad (\nabla_x L_{PA} = 0) \quad (1.4a)$$

$$c - \lambda - \mu = 0, \quad (\nabla_y L_{PA} = 0) \quad (1.4b)$$

$$f_i(x) - y_i \leq 0 \quad \text{e} \quad y_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade primal}) \quad (1.4c)$$

$$x_j^{min} - x_j \leq 0 \quad \text{e} \quad x_j - x_j^{max} \leq 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{viabilidade primal}) \quad (1.4d)$$

$$\lambda_i \geq 0 \quad \text{e} \quad \mu_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade dual}) \quad (1.4e)$$

$$\nu_j \geq 0 \quad \text{e} \quad \zeta_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{viabilidade dual}) \quad (1.4f)$$

$$\lambda_i (f_i(x) - y_i) = 0 \quad \text{e} \quad \mu_i y_i = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{complementaridade}) \quad (1.4g)$$

$$\nu_j (x_j^{min} - x_j) = 0 \quad \text{e} \quad \zeta_j (x_j - x_j^{max}) = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{complementaridade}). \quad (1.4h)$$

O coeficiente c_i na função objetivo do problema (PA) representa a taxa de variação desta função em relação à variável y_i , o que na prática representa o custo de se aumentar em uma unidade o lado direito da i -ésima restrição. Para favorecer a obtenção de pontos viáveis de (PO), c_i deve ser suficientemente grande e dada a interpretação de c_i descrita acima, na prática é possível obter estimativas para estes valores sem comprometer o condicionamento do problema.

Além disto, para cada solução de (PA), podemos interpretar o vetor x correspondente como sendo y -viável, uma vez que:

$$f_i(x) - y_i \leq 0 \Leftrightarrow f_i(x) \leq y_i, \quad i = 1, \dots, m.$$

Se $y_i = 0$, $i = 1, \dots, m$ então x será viável para o problema (PO). No entanto, se mesmo para c_i suficientemente grande tivermos $y_i > 0$, interpretamos que a viabilidade só é obtida se permitirmos uma relaxação no lado direito da i -ésima restrição, que deve ser no mínimo igual a y_i com custo na função objetivo igual a c_i .

Teoricamente, os valores de c_i fornecem limitantes superiores para os multiplicadores (variáveis duais) λ_i , uma vez que de (1.4b) e (1.4e) temos:

$$c_i - \lambda_i - \mu_i = 0 \quad \text{e} \quad \mu_i \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_i \leq c_i, \quad i = 1, \dots, m.$$

Do ponto de vista da modelagem, a literatura destaca que em problemas aplicados o usuário conhece limitantes razoáveis para as variáveis duais, ou seja, para os coeficientes c_i , associados a características físicas do problema [45].

Antes de estabelecer algumas relações entre os pontos KKT do problema aumentado e os pontos correspondentes do problema original associado, vamos caracterizar as soluções do problema (PA). Para tanto, mostraremos que este problema é equivalente ao seguinte problema não-diferenciável:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} \quad f_0(x) + \sum_{i=1}^m c_i f_i^+(x) \\ &\text{sujeito a} \quad x \in X, \end{aligned} \tag{1.5}$$

em que $f_i^+(x) = \max\{0, f_i(x)\}$ e X é o conjunto compacto:

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n; x_j^{\min} \leq x_j \leq x_j^{\max}, j = 1, \dots, n\}.$$

Esta formulação não será usada para resolver o problema (1.2), mas será útil na caracterização de suas soluções, o que é feito por meio das seguintes proposições. As quatro primeiras são

originais de [45], mas aqui incluímos as demonstrações em detalhes, referentes ao problema (1.2). A quinta proposição é uma das contribuições deste trabalho, bem como a análise e os exemplos que a seguem. A primeira proposição é importante para determinar um ponto inicial viável para o algoritmo.

Proposição 1. *Se $x \in X$ é mantido fixo no problema (1.2), os valores ótimos correspondentes das variáveis y_i são únicos. Estes valores ótimos são $y_i = f_i^+(x)$, para $i = 1, \dots, m$.*

Demonstração: Fixando $x \in X$ no problema (1.2), obtemos o seguinte problema na variável $y \in \mathbb{R}^m$

$$\begin{aligned} & \underset{y}{\text{minimizar}} && M + \sum_{i=1}^m c_i y_i \\ & \text{sujeito a} && N_i - y_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ & && y \geq 0, \end{aligned} \tag{1.6}$$

em que $M = f_0(x)$ e $N_i = f_i(x)$, para $i = 1, \dots, m$.

Note que o problema (1.6) é separável. Assim, ele é equivalente a m subproblemas unidimensionais

$$\begin{aligned} & \underset{y_i}{\text{minimizar}} && c_i y_i \\ & \text{sujeito a} && N_i - y_i \leq 0, \\ & && y_i \geq 0, \end{aligned} \tag{1.7}$$

sendo que (1.7) possui uma única solução ótima $y_i = \max\{0, N_i\} = \max\{0, f_i(x)\} = f_i^+(x)$, pois $c_i > 0, \forall i \in \{1, \dots, m\}$. ■

As variáveis artificiais y_i podem ser formalmente eliminadas do problema (1.2). O problema resultante é exatamente (1.5). O próximo resultado estabelece a equivalência entre as soluções dos problemas (1.2) e (1.5).

Proposição 2. *O par (\hat{x}, \hat{y}) é um ótimo global do problema (1.2) se e somente se \hat{x} é um ótimo global do problema (1.5), em que $\hat{y}_i = f_i^+(\hat{x})$, $i = 1, \dots, m$.*

Demonstração: Seja (\hat{x}, \hat{y}) um ótimo global de (1.2). Então (\hat{x}, \hat{y}) é viável para (1.2), ou seja, $\hat{x} \in X$,

$$\hat{y}_i \geq 0 \quad \text{e} \quad \hat{y}_i \geq f_i(\hat{x}), \quad \forall i = 1, \dots, m. \tag{1.8}$$

Também, para todo par (x, y) viável para (1.2) temos

$$f_0(\hat{x}) + \sum_{i=1}^m c_i \hat{y}_i \leq f_0(x) + \sum_{i=1}^m c_i y_i. \tag{1.9}$$

Portanto, \hat{x} é um ótimo global de (1.5) pois $\hat{x} \in X$ e usando (1.8) e (1.9) obtemos

$$f_0(\hat{x}) + \sum_{i=1}^m c_i f_i^+(\hat{x}) \leq f_0(\hat{x}) + \sum_{i=1}^m c_i \hat{y}_i \leq f_0(\hat{x}) + \sum_{i=1}^m c_i y_i \leq f_0(\hat{x}) + \sum_{i=1}^m c_i f_i^+(x),$$

onde a última desigualdade vale pois, para cada $x \in X$, o par $(x, f_i^+(x))$ é viável para (1.2).

Seja agora \hat{x} um ótimo global de (1.5). Então $\hat{x} \in X$ e

$$f_0(\hat{x}) + \sum_{i=1}^m c_i f_i^+(\hat{x}) \leq f_0(\hat{x}) + \sum_{i=1}^m c_i f_i^+(x), \quad \forall x \in X.$$

De $f_i^+(x) = \max\{0, f_i(x)\}$ temos que

$$f_i^+(x) \geq 0 \quad \text{e} \quad f_i^+(x) \geq f_i(x),$$

logo o par $(\hat{x}, f_i^+(\hat{x}))$ é viável para (1.2). Portanto, o par (\hat{x}, \hat{y}) é um ótimo global de (1.2), em que $\hat{y}_i = f_i^+(\hat{x})$. ■

A proposição a seguir assegura que o problema tratado está bem formulado.

Proposição 3. *O problema (1.2) possui pelo menos um ótimo global.*

Demonstração: A função objetivo do problema (1.5) é contínua no conjunto compacto X , logo o problema (1.5) possui pelo menos uma solução ótima global. Portanto, pela Proposição 2, o problema (1.2) possui pelo menos uma solução ótima global. ■

No resultado a seguir fica evidenciada a qualificação do conjunto viável do problema (1.2).

Proposição 4. *Se (\hat{x}, \hat{y}) é um ótimo, local ou global, do problema (1.2), então existem multiplicadores de Lagrange que, junto com (\hat{x}, \hat{y}) , satisfazem as condições KKT deste problema.*

Demonstração: Considere a condição de qualificação de Arrow, Hurwicz e Uzawa ([2], ver também [5, p.329]): seja x^* um minimizador local do problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeito a} && g_1(x) \leq 0, \dots, g_m(x) \leq 0, \end{aligned} \tag{1.10}$$

em que f e g_i são funções continuamente diferenciáveis de \mathbb{R}^n em \mathbb{R} . Suponha que existe um vetor $d \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\nabla g_i(x^*)^T d < 0, \quad \forall i \in A(x^*)$$

onde $A(x)$ define o conjunto das restrições ativas de (1.10) em x , para qualquer ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Então existem multiplicadores de Lagrange que, junto com x^* , satisfazem as condições KKT do problema (1.10).

Observe que esta condição de qualificação, caso particular da condição de qualificação de Mangasarian-Fromovitz¹ ([33], ver também [5, p.329]) para o problema apenas com restrições de desigualdade, é satisfeita para o problema (1.2). De fato, suponha que (\hat{x}, \hat{y}) é uma solução ótima de (1.2) e construa um vetor $d = (d_x, d_y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ da seguinte maneira:

$$(d_x)_j = \begin{cases} 1, & \text{se } \hat{x}_j = x_j^{\min} \\ -1, & \text{se } \hat{x}_j = x_j^{\max}, \quad j = 1, \dots, n, \\ 0, & \text{cc;} \end{cases} \quad (d_y)_i = 1 + \sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\hat{x}) \right|, \quad i = 1, \dots, m;$$

então o produto interno entre o vetor d e o vetor gradiente, calculado em (\hat{x}, \hat{y}) , de toda restrição ativa de (1.2) é estritamente negativo. Portanto existe um vetor de multiplicadores de Lagrange que, junto com (\hat{x}, \hat{y}) , satisfaz as condições KKT do problema (1.2). ■

É importante notar que um ponto KKT do problema aumentado (1.2) depende das constantes positivas c_i . De fato, ao usar constantes c_i , $i = 1, \dots, m$ para construir o problema aumentado (1.2), podemos denominar o problema (PA) como PA(c). Assim, suponha que $(\hat{x}(c), \hat{y}(c), \hat{\lambda}(c), \hat{\nu}(c), \hat{\zeta}(c), \hat{\mu}(c))$ é ponto KKT do problema aumentado (1.2). O que podemos afirmar sobre o ponto $(\hat{x}(c), \hat{\lambda}(c), \hat{\nu}(c), \hat{\zeta}(c))$ em relação ao problema original (1.1)? Independentemente do valor de $\hat{y}(c)$, sempre podemos dizer que $\hat{x}(c)$ é um ponto $\hat{y}(c)$ -viável do problema (1.1). No caso mais simples em que x é tal que $f(x) \leq 0$ e portanto $y = 0$, comparando (1.3) e (1.4), temos que o ponto (x, λ, ν, ζ) é KKT do problema (1.1). Caso contrário, se o par (x, y) é tal que $y = f(x) > 0$, então o ponto x não está no conjunto viável de (1.1).

Algumas relações entre os pontos KKT do problema aumentado e os pontos correspondentes do problema original associado são estabelecidas na Proposição 5, a qual utiliza argumentos dos métodos de penalidade.

Proposição 5. *Considere a formulação aumentada PA(c) e seja $(\hat{x}(c), \hat{y}(c), \hat{\lambda}(c), \hat{\nu}(c), \hat{\zeta}(c), \hat{\mu}(c))$ ponto KKT deste problema.*

- (1) *Se $\hat{y}(c) = 0$ então $(\hat{x}(c), \hat{\lambda}(c), \hat{\nu}(c), \hat{\zeta}(c))$ é ponto KKT do problema original (PO).*
- (2) *Se $\hat{y}(c) \neq 0$ então, tomando $c \equiv c^{(0)}$ e fazendo $c^{(k)} \rightarrow \infty$, conforme k cresce, obtemos, para cada k , um problema aumentado PA($c^{(k)}$) e um ponto KKT $(\hat{x}(c^{(k)}), \hat{y}(c^{(k)}), \hat{\lambda}(c^{(k)}), \hat{\nu}(c^{(k)}), \hat{\zeta}(c^{(k)}), \hat{\mu}(c^{(k)}))$.*

¹Um ponto viável x do problema minimizar $f(x)$, sujeito à $h(x) = 0$, $g(x) \leq 0$ satisfaz a condição de qualificação de Mangasarian-Fromovitz se os vetores $\{\nabla h_i(x)\}_{i=1}^m$ são linearmente independentes e existe uma direção $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $\nabla h_i(x)^T d = 0$, $i = 1, \dots, m$ e $\nabla g_j(x)^T d < 0$, $\forall j \in I(x)$, onde $I(x) = \{j \in \{1, \dots, r\} \mid g_j(x) = 0\}$.

$\hat{\nu}(c^{(k)}), \hat{\zeta}(c^{(k)}), \hat{\mu}(c^{(k)})$). Considerando a sequência $\{(\hat{x}(c^{(k)}), \hat{y}(c^{(k)}), \hat{\lambda}(c^{(k)}), \hat{\nu}(c^{(k)}), \hat{\zeta}(c^{(k)}), \hat{\mu}(c^{(k)}))\}_{k=1}^{\infty}$, temos que se $\hat{y}_i(c^{(k)}) > 0$ para pelo menos um índice $i \in \{1, \dots, m\}$ então, para cada k , $\hat{x}(c^{(k)})$ não é viável em relação ao problema (PO) e:

(a) se $\hat{y}_i(c^{(k)}) \rightarrow 0$ para todo i então o conjunto viável do problema original (PO) é não-vazio. Neste caso, para cada k , $(\hat{x}(c^{(k)}), \hat{\lambda}(c^{(k)}), \hat{\nu}(c^{(k)}), \hat{\zeta}(c^{(k)}))$ não é ponto KKT do problema (PO), mas $\hat{x}(c^{(k)})$ é um ponto $\hat{y}(c^{(k)})$ -viável em relação ao problema original (PO).

(b) se $\hat{y}_i(c^{(k)}) \rightarrow \hat{y}_i > 0$ para pelo menos um índice $i \in \{1, \dots, m\}$ e $\{\hat{x}(c^{(k)})\}$ é uma sequência de minimizadores locais dos respectivos problemas $PA(c^{(k)})$ em que $c_i^{(k)} \equiv \hat{c}^{(k)}$ para todo i , então os pontos limite de $\{\hat{x}(c^{(k)})\}$ minimizam localmente a medida de inviabilidade

$$\sum_{i=1}^m f_i^+(x).$$

Demonstração: A demonstração de (1) segue comparando as condições KKT (1.3) e (1.4) dos problemas original e aumentado, respectivamente.

Considerando o caso (2), note que se $\hat{y}(c^{(k)}) = 0$ para algum $c^{(k)}$ então recai-se em (1), de modo que podemos supor sem perda de generalidade que $\hat{y}_i(c^{(k)}) > 0$ para pelo menos um índice $i \in \{1, \dots, m\}$. Assim, de (1.4g) temos $\hat{\mu}_i(c^{(k)}) = 0$. Por (1.4b) temos que $\hat{\lambda}_i(c^{(k)}) = c_i^{(k)} > 0$ e por (1.4g) temos $f_i(\hat{x}(c^{(k)})) = \hat{y}_i(c^{(k)}) > 0$. Logo $\hat{x}(c^{(k)})$ não é viável para o problema original (PO).

No caso (2a), como $\hat{y}(c^{(k)})$ é diferente de zero em cada ponto $(\hat{x}(c^{(k)}), \hat{y}(c^{(k)}), \hat{\lambda}(c^{(k)}), \hat{\nu}(c^{(k)}), \hat{\zeta}(c^{(k)}), \hat{\mu}(c^{(k)}))$, então $(\hat{x}(c^{(k)}), \hat{\lambda}(c^{(k)}), \hat{\nu}(c^{(k)}), \hat{\zeta}(c^{(k)}))$ não é ponto KKT de (PO). Agora, como $\{\hat{x}(c^{(k)})\}$ possui subsequência convergente na caixa compacta X , seja \hat{x} ponto limite desta subsequência. De

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \hat{y}_i(c^{(k)}) = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (1.11)$$

segue que $f_i(\hat{x}) \leq 0$, logo o conjunto viável de (PO) é não-vazio. No entanto, como o ponto $(\hat{x}(c^{(k)}), \hat{y}(c^{(k)}), \hat{\lambda}(c^{(k)}), \hat{\nu}(c^{(k)}), \hat{\zeta}(c^{(k)}), \hat{\mu}(c^{(k)}))$ satisfaz as condições KKT (1.4) do problema (PA), $\hat{x}(c^{(k)})$ é um ponto $\hat{y}(c^{(k)})$ -viável em relação ao problema original (PO).

Finalmente, no caso (2b), se existe $i \in \{1, \dots, m\}$ tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} \hat{y}_i(\hat{c}^{(k)}) = \hat{y}_i > 0$ e além disso, se $\hat{x}(\hat{c}^{(k)})$ é minimizador local de $PA(\hat{c}^{(k)})$, pela equivalência entre as soluções dos problemas (1.2) e (1.5), existe $\epsilon^{(k)} > 0$ tal que para todo $x \in B_{\epsilon^{(k)}}(\hat{x}(\hat{c}^{(k)})) \cap X$ temos

$$f_0(\hat{x}(\hat{c}^{(k)})) + \sum_{i=1}^m \hat{c}^{(k)} f_i^+(\hat{x}(\hat{c}^{(k)})) \leq f_0(x) + \sum_{i=1}^m \hat{c}^{(k)} f_i^+(x), \quad (1.12)$$

onde $B_{\epsilon^{(k)}}(\hat{x}(\hat{c}^{(k)}))$ é a bola aberta centrada em $\hat{x}(\hat{c}^{(k)})$, de raio $\epsilon^{(k)}$. Dividindo (1.12) por $\hat{c}^{(k)}$ vem

$$\frac{f_0(\hat{x}(\hat{c}^{(k)}))}{\hat{c}^{(k)}} + \sum_{i=1}^m f_i^+(\hat{x}(\hat{c}^{(k)})) \leq \frac{f_0(x)}{\hat{c}^{(k)}} + \sum_{i=1}^m f_i^+(x),$$

ou, equivalentemente,

$$\frac{f_0(\hat{x}(\hat{c}^{(k)})) - f_0(x)}{\hat{c}^{(k)}} \leq \sum_{i=1}^m (f_i^+(x) - f_i^+(\hat{x}(\hat{c}^{(k)}))) \quad (1.13)$$

para todo $x \in B_{\epsilon^{(k)}}(\hat{x}(\hat{c}^{(k)})) \cap X$.

Fazendo $k \rightarrow \infty$, da compacidade da caixa X podemos tomar subsequência infinita e convergente $\{\hat{x}(\hat{c}^{(k)})\}_{k \in K} \rightarrow \hat{x} \in X$. Agora, seja $\mathcal{I} \in \{1, \dots, m\}$ tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} \hat{y}_{\mathcal{I}}(\hat{c}^{(k)}) = \hat{y}_{\mathcal{I}} > 0$. Como $0 < \hat{y}_{\mathcal{I}} = f_{\mathcal{I}}^+(\hat{x}) = \max\{0, f_{\mathcal{I}}(\hat{x})\}$ temos que $\hat{y}_{\mathcal{I}} = f_{\mathcal{I}}(\hat{x})$. Também, de $\hat{y}_{\mathcal{I}} > 0$, existe $\delta > 0$, por exemplo $\delta = \hat{y}_{\mathcal{I}}/2$, tal que para todo $\hat{y}_i(\hat{c}^{(k)}) \in B_{\delta}(\hat{y}_{\mathcal{I}})$ temos $\hat{y}_i(\hat{c}^{(k)}) > 0$. Portanto, pela continuidade das funções $f_i, \forall i \in \{1, \dots, m\}$, temos que existe $\hat{\epsilon} > 0$ tal que se $\hat{x}(\hat{c}^{(k)}) \in X \cap B_{\hat{\epsilon}}(\hat{x})$ então $f_i(\hat{x}(\hat{c}^{(k)})) = \hat{y}_i(\hat{c}^{(k)}) \in B_{\delta}(f_{\mathcal{I}}(\hat{x})) \equiv B_{\delta}(\hat{y}_{\mathcal{I}})$.

Assim, pela continuidade das funções $f_i, i = 0, 1, \dots, m$ e pela limitação de f_0 em X , passando (1.13) ao limite para $k \in K$ temos

$$0 \leq \sum_{i=1}^m (f_i^+(x) - f_i^+(\hat{x}))$$

para todo $x \in B_{\hat{\epsilon}}(\hat{x}) \cap X$. Logo, $\hat{x} \in X$ é minimizador local da medida de inviabilidade

$$\sum_{i=1}^m f_i^+(x). \quad \blacksquare$$

Observe que as variáveis artificiais y_i não serão maiores que o necessário, desde que as constantes positivas c_i sejam suficientemente grandes. Assim, quando $y_i \neq 0$ para algum índice $i \in \{1, \dots, m\}$, teremos $y_i = f_i(x) > 0$, $\mu_i = 0$ e $\lambda_i = c_i$. Para os outros índices i , teremos $y_i = 0$, $\mu_i = c_i - \lambda_i \geq 0$. Finalmente, o vetor x é aquele que satisfaz $\nabla_x L_{PO} = \nabla_x L_{PA} = 0$. Ao introduzir as variáveis artificiais y_i , o conjunto viável de (1.1) aumenta: o ponto x encontrado é viável, com relação à restrição $f_i(x) - y_i \leq 0$, para o problema (1.2), mas não é viável para o problema (1.1), considerando a restrição $f_i(x) \leq 0$.

Para ilustrar as relações entre os pontos KKT dos problemas original e aumentado presentes na Proposição 5, vamos apresentar dois exemplos: no Exemplo 1 não existe (x, λ, ν, ζ) que satisfaz as condições KKT do problema original, enquanto no Exemplo 2 o conjunto viável do problema original é vazio.

Exemplo 1. Considere o problema com conjunto viável não-vazio, cujo gráfico está representado na Figura 1.1:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && 1 - x \\ &\text{sujeito a} && x^3(x - 2)^3 \leq 0. \end{aligned} \tag{1.14}$$

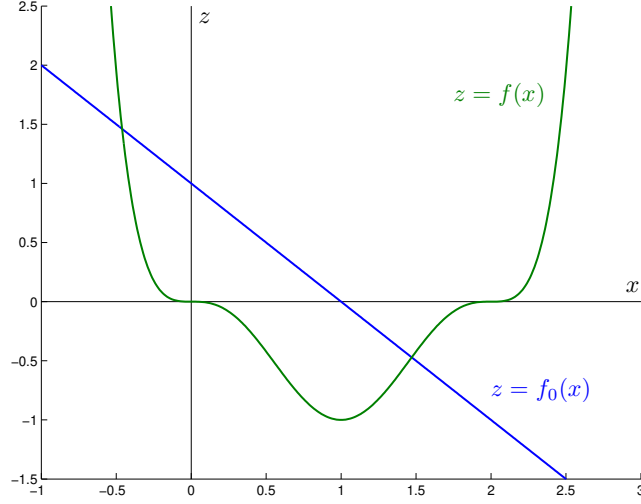


Figura 1.1: Gráfico associado ao problema (1.14).

Note que não existe nenhum ponto x na região viável $[0, 2]$ e nenhum $\lambda \geq 0$ que satisfazem as condições KKT deste problema:

$$\begin{aligned} -1 + \lambda(6x^2(x-2)^2(x-1)) &= 0, \\ x^3(x-2)^3 &\leq 0, \\ \lambda &\geq 0, \\ \lambda(x^3(x-2)^3) &= 0. \end{aligned}$$

Ao introduzir a variável artificial y , obtemos o seguinte problema aumentado (1.15):

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && 1 - x + cy \\ &\text{sujeito a} && x^3(x - 2)^3 - y \leq 0, \\ &&& y \geq 0, \end{aligned} \tag{1.15}$$

no qual a região viável, dada por um intervalo contendo $[0, 2]$, aumentou. De fato, tomando $y = 1$ obtemos o intervalo $[-0.4142, 2.4142]$, como mostra a Figura 1.2.

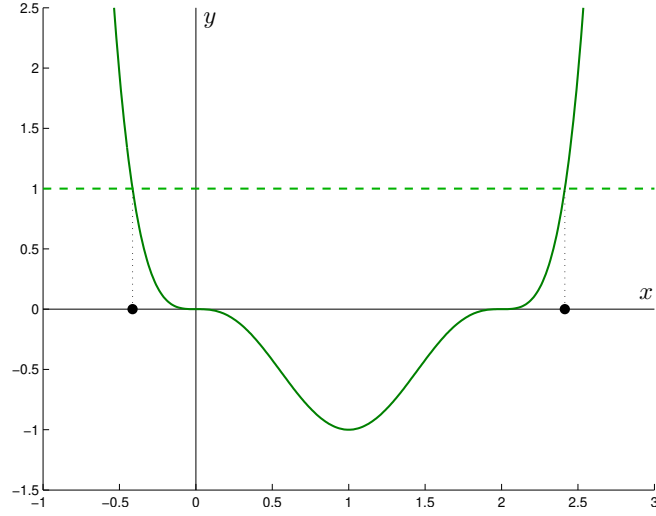


Figura 1.2: Regiões viáveis dos problemas (1.14) e (1.15).

As condições KKT do problema aumentado (1.15) são:

$$-1 + \lambda(6x^2(x-2)^2(x-1)) = 0, \quad (1.16a)$$

$$c - \lambda - \mu = 0, \quad (1.16b)$$

$$x^3(x-2)^3 - y \leq 0 \text{ e } y \geq 0, \quad (1.16c)$$

$$\lambda \geq 0 \text{ e } \mu \geq 0, \quad (1.16d)$$

$$\lambda(x^3(x-2)^3 - y) = 0, \quad (1.16e)$$

$$\mu y = 0. \quad (1.16f)$$

Da igualdade (1.16a), temos $\lambda \neq 0$. Logo, de (1.16e), temos que $y = x^3(x-2)^3 > 0$ pois $x \neq 0$ e $x \neq 2$. Daí $\mu = 0$ por (1.16f) e $\lambda = c > 0$ por (1.16b). Ainda, combinando esta última expressão e (1.16a), temos que x é solução da equação $6x^2(x-1)(x-2)^2 = \frac{1}{c}$. A Figura 1.3 mostra o gráfico do polinômio $p(x) = 6x^2(x-1)(x-2)^2$ e as retas horizontais $z = 1/c$, para $c = 1, 10$. As duas menores soluções reais da equação $6x^2(x-1)(x-2)^2 = \frac{1}{c}$ produzem valores negativos de y para qualquer valor finito de c . Assim, escolhendo $c = 1000$, obtemos o ponto:

$$x = 2.0064138, \quad y = 0.00000213, \quad \lambda = 1000, \quad \mu = 0.$$

Portanto, existe um ponto x na região viável do problema (1.15), mas não na região viável do problema (1.14), e um multiplicador $\lambda \geq 0$, que satisfazem as condições KKT do problema aumentado (1.15), inclusive a condição $\nabla_x L_{PA}(x, \lambda) = \nabla_x L_{PO}(x, \lambda) = 0$.

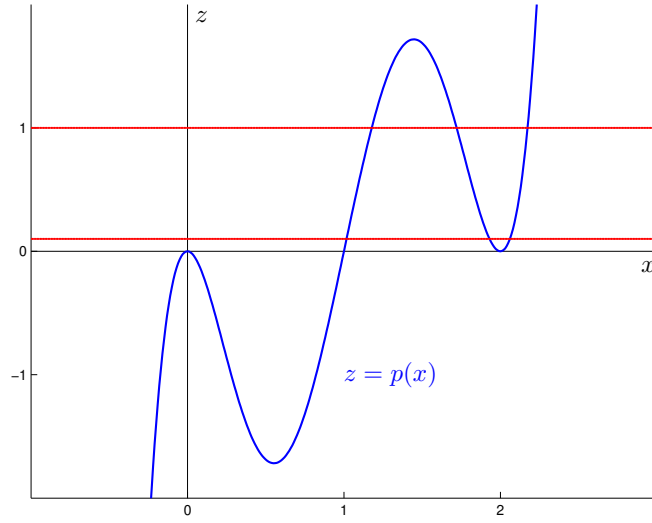


Figura 1.3: Gráfico do polinômio $p(x) = 6x^2(x-1)(x-2)^2$ e as retas $z = 1/c$.

Como vimos na Proposição 4, o conjunto viável de todo problema escrito na forma ampliada (1.2) satisfaz a condição de qualificação de Arrow, Hurwicz e Uzawa [2], caso particular da condição de qualificação de Mangasarian-Fromovitz [33] para o problema apenas com restrições de desigualdade. Em consequência, sabe-se que o conjunto formado por todos os multiplicadores de Lagrange é um conjunto limitado [24]. É possível obter um limitante superior para os multiplicadores de Lagrange usando, por exemplo, o Exercício 5.3.3 de [5]. No Apêndice A, mostramos que os multiplicadores do problema aumentado satisfazem $\sum_i \lambda_i \leq \sum_i c_i$. Deste modo, o limitante superior obtido para o multiplicador $\lambda \in \mathbb{R}$ do problema (1.15) é

$$\lambda \leq c. \quad \square$$

O próximo exemplo ilustra a situação (2b) da Proposição 5.

Exemplo 2. Considere o seguinte problema com conjunto viável vazio:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && x \\ &\text{sujeito a} && 6.5x^4 - 6.5x^2 - 1.5x + 3 \leq 0, \end{aligned} \tag{1.17}$$

cujos gráfico é dado na Figura 1.4.

O problema aumentado $\text{PA}(c^{(k)})$ associado é:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && x + c^{(k)} y \\ &\text{sujeito a} && 6.5x^4 - 6.5x^2 - 1.5x + 3 - y \leq 0, \\ &&& y \geq 0, \end{aligned}$$

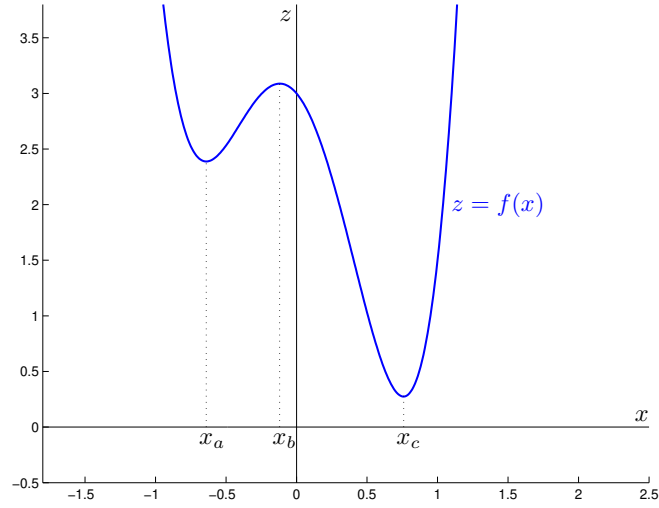


Figura 1.4: Gráfico do polinômio $f(x) = 6.5x^4 - 6.5x^2 - 1.5x + 3$ e seus pontos críticos.

cujas condições KKT são:

$$\begin{aligned}
 1 + \lambda(26x^3 - 13x - 1.5) &= 0, \\
 c^{(k)} - \lambda - \mu &= 0, \\
 6.5x^4 - 6.5x^2 - 1.5x + 3 - y &\leq 0 \quad \text{e} \quad y \geq 0, \\
 \lambda &\geq 0 \quad \text{e} \quad \mu \geq 0, \\
 \lambda(6.5x^4 - 6.5x^2 - 1.5x + 3 - y) &= 0, \\
 \mu y &= 0.
 \end{aligned}$$

Da primeira igualdade, vem que $\lambda \neq 0$, logo $y = 6.5x^4 - 6.5x^2 - 1.5x + 3 > 0$. Daí $\mu = 0$ e $\lambda = c^{(k)} > 0$. Ainda, x é tal que

$$26x^3 - 13x - 1.5 = \frac{-1}{c^{(k)}},$$

de modo que para $c^{(k)}$ suficientemente grande obtemos os seguintes pontos KKT do problema $\text{PA}(c^{(k)})$, que aproximam os pontos estacionários x_a , x_b e x_c do polinômio de grau 4 que define a restrição, e nos quais $y > 0$:

$$\begin{aligned}
 x_A = -0.640224, \quad x_B = -0.118732, \quad x_C = 0.758956, \\
 y_A = 2.388118, \quad y_B = 3.087757, \quad y_C = 0.274124.
 \end{aligned}$$

Outros valores de $c^{(k)}$ foram usados para resolver o problema aumentado $\text{PA}(c^{(k)})$, de

modo que as seguintes soluções locais foram obtidas na vizinhança do minimizador local da inviabilidade x_a :

$$c^{(k)} = 0.7 \Rightarrow x = -0.704343, \quad y = 2.431613,$$

$$c^{(k)} = 1.2 \Rightarrow x = -0.679917, \quad y = 2.404120,$$

$$c^{(k)} = 3 \Rightarrow x = -0.657043, \quad y = 2.390881,$$

$$c^{(k)} = 10^6 \Rightarrow x = -0.640224, \quad y = 2.388118,$$

como pode ser visto na Figura 1.5, que mostra também as bolas $B_{\epsilon^{(k)}}$ presentes na prova da Proposição 5. \square

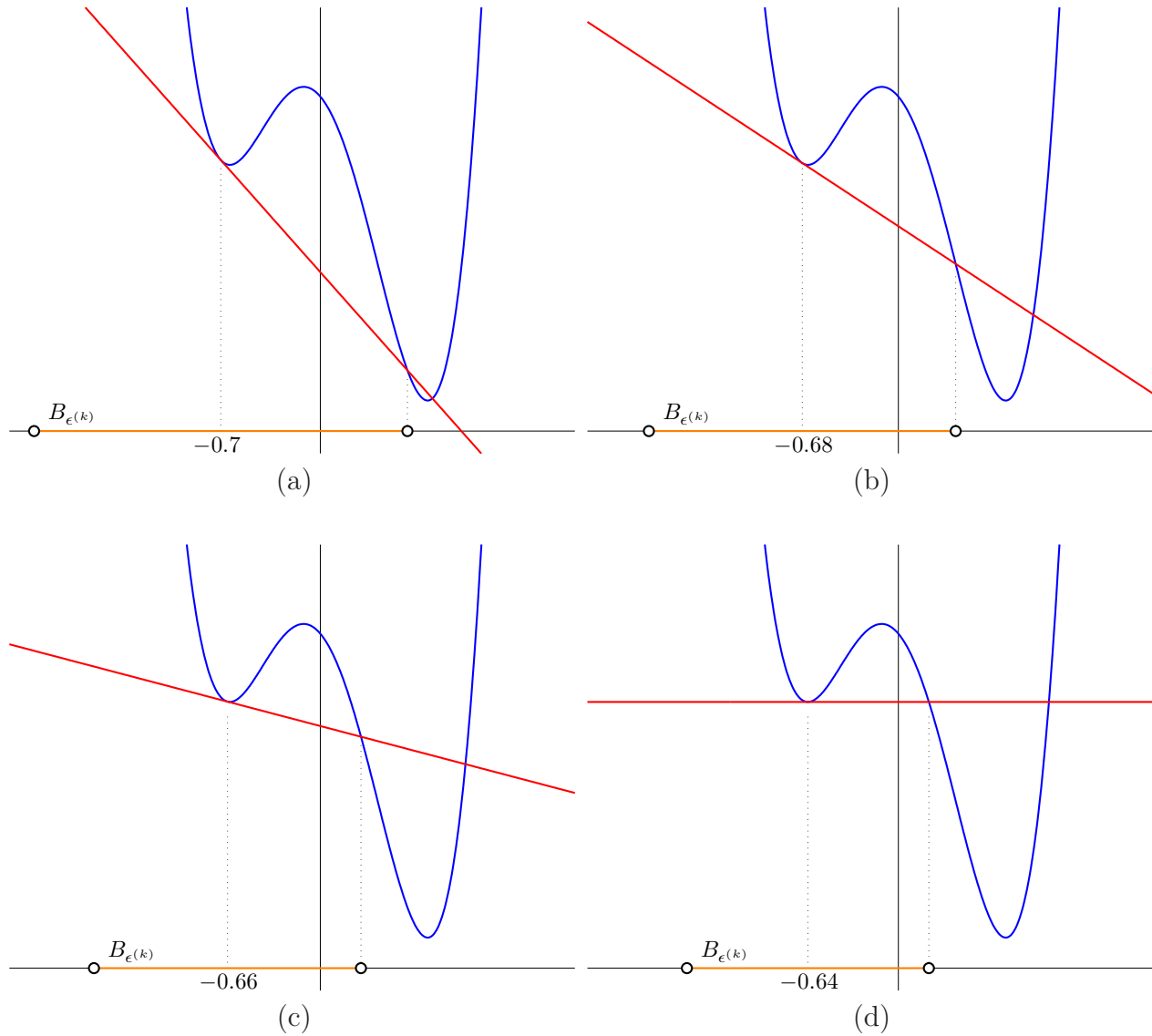


Figura 1.5: Conjunto viável do problema aumentado $PA(c^{(k)})$ e uma curva de nível da função objetivo para diferentes valores de $c^{(k)}$:
(a) $c^{(k)} = 0.7$; (b) $c^{(k)} = 1.2$; (c) $c^{(k)} = 3$ e (d) $c^{(k)} = 10^6$.

Para completar a caracterização das relações entre pontos estacionários de (PO) e de (PA), vale ressaltar que se o problema (PO) possuir conjunto viável qualificado ou se as condições suficientes de segunda ordem para minimizadores locais forem satisfeitas para o problema (PO) então existe $c^{(k)}$ finito para o qual o problema $\text{PA}(c^{(k)})$ possuirá ponto KKT com as variáveis y_i identicamente nulas.

Na continuação do texto, vamos considerar uma outra formulação para o problema aumentado (1.2):

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f_0(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \tfrac{1}{2} d_i y_i^2) \\ \text{sujeito a} \quad & f_i(x) - y_i \leq 0, & i = 1, \dots, m, \\ & x_j^{\min} \leq x_j \leq x_j^{\max}, & j = 1, \dots, n, \\ & y_i \geq 0, & i = 1, \dots, m, \end{aligned} \tag{1.18}$$

em que c_i e d_i são números reais tais que $c_i \geq 0$, $d_i \geq 0$ e $c_i + d_i > 0$ para $i = 1, \dots, m$. Note que o problema (1.2) é um caso particular desta formulação, pois pode ser obtido a partir de (1.18) tomando $d_i = 0$ para $i = 1, \dots, m$ e que todos os resultados obtidos para o problema (1.2) continuam valendo para o problema (1.18), a menos de pequenos ajustes.

Os termos com as variáveis artificiais y_i elevadas ao quadrado, introduzidos na função objetivo por meio das parcelas $\frac{1}{2} d_i y_i^2$, terão papel importante na abordagem dual apresentada na Seção 3.2. Assim, esta é a formulação que será empregada na sequência do texto, inclusive nos testes numéricos.

1.2 A classe de métodos CCSA

Um método da classe CCSA, quando usado para resolver problemas de programação não-linear com restrições de desigualdade e canalização da forma (1.18), realiza iterações externas e internas. A k -ésima iteração externa inicia com um iterando corrente $x^{(k)}$ e finaliza com um novo iterando $x^{(k+1)}$. Em cada iteração interna, dentro de uma iteração externa k dada, um subproblema convexo é gerado e resolvido. Neste subproblema, a função objetivo original e as funções que definem as restrições de desigualdade são substituídas por modelos separáveis e convexos, que aproximam as funções originais em torno de $x^{(k)}$. A solução ótima do subproblema pode ser aceita ou rejeitada: se for aceita, é atribuída a $x^{(k+1)}$ e a k -ésima iteração externa se completa; se rejeitada, uma nova iteração interna é realizada, na qual um novo subproblema é gerado e resolvido. As iterações internas são repetidas até que os valores das aproximações da função objetivo e das restrições se tornem maiores ou iguais do que os valores das funções originais, quando avaliadas na solução ótima do subproblema. Quando isso acontece, dizemos que as aproximações são *conservadoras*. Na sequência, mostraremos

que a exigência de que as aproximações sejam conservadoras fornece redução estrita no valor da função objetivo e iterandos viáveis em relação ao problema aumentado. Por fim, vale observar que, em cada iteração externa, é necessário calcular os valores das funções envolvidas e de suas derivadas parciais de primeira ordem no iterando corrente $x^{(k)}$. Já nas iterações internas, apenas os valores das funções são calculados na solução ótima do subproblema.

1.2.1 Descrição de um método CCSA

Um método da classe CCSA, para resolver problemas da forma (1.18), possui iterações externas e internas. Os índices k e ℓ são usados para denotar o número da iteração externa e interna, respectivamente. Dentro de cada iteração externa pode haver nenhuma, uma ou várias iterações internas. O índice duplo (k, ℓ) é usado para denotar a ℓ -ésima iteração interna dentro da k -ésima iteração externa.

Primeiramente, escolhemos $x^{(1)} \in X$, e então calculamos $y^{(1)}$ como na Proposição 1. Desta maneira obtemos a estimativa inicial $(x^{(1)}, y^{(1)})$ viável para o problema (1.18). Na sequência vamos descrever como se dá a iteração externa que inicia com a k -ésima estimativa $(x^{(k)}, y^{(k)})$ e finaliza com a $(k+1)$ -ésima estimativa $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})$.

Dado $(x^{(k)}, y^{(k)})$, um subproblema aproximado é gerado e resolvido. Este subproblema é obtido de (1.18) substituindo as funções f_i por funções separáveis estritamente convexas $g_i^{(k,0)}$ e substituindo a caixa original X por uma caixa reduzida $X^{(k)}$, definida em torno da estimativa corrente $x^{(k)}$. A solução ótima deste subproblema é denotada por $(\hat{x}^{(k,0)}, \hat{y}^{(k,0)})$.

Se $g_i^{(k,0)}(\hat{x}^{(k,0)}) \geq f_i(\hat{x}^{(k,0)})$, $\forall i \in \{0, 1, \dots, m\}$, isto é, se todas as aproximações são conservadoras em $\hat{x}^{(k,0)}$ em relação às funções originais, então definimos $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) = (\hat{x}^{(k,0)}, \hat{y}^{(k,0)})$, e a k -ésima iteração externa se completa sem que nenhuma iteração interna seja realizada.

Caso contrário, se $g_i^{(k,0)}(\hat{x}^{(k,0)}) < f_i(\hat{x}^{(k,0)})$ para pelo menos um índice $i \in \{0, 1, \dots, m\}$, uma nova iteração interna é realizada, na qual o modelo da função f_i se mantém para i tal que a aproximação é conservadora em $\hat{x}^{(k,0)}$, isto é, $g_i^{(k,0)}(x) = g_i^{(k,1)}(x)$. Para os índices em que a aproximação $g_i^{(k,0)}$ não é conservadora em $\hat{x}^{(k,0)}$, o modelo é modificado de tal forma a favorecer que a nova aproximação $g_i^{(k,1)}$ seja conservadora em $\hat{x}^{(k,1)}$.

As iterações internas são repetidas até que a condição conservadora seja satisfeita em $\hat{x}^{(k,\ell)}$, isto é,

$$g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) \geq f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}), \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, m\}. \quad (1.19)$$

Então $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) = (\hat{x}^{(k,\ell)}, \hat{y}^{(k,\ell)})$, e a k -ésima iteração externa se completa (sendo necessárias ℓ iterações internas).

Observe que a exigência de que a condição conservadora seja verificada para que a solução de um subproblema seja aceita como o próximo iterando externo implica, para o problema aumentado (1.18), na redução estrita do valor da função objetivo, isto é,

$$\begin{aligned}
& f_0(x^{(k+1)}) + \sum_{i=1}^m \left(c_i y_i^{(k+1)} + \frac{1}{2} d_i (y_i^{(k+1)})^2 \right) \\
& \leq g_0^{(k,\ell)}(x^{(k+1)}) + \sum_{i=1}^m \left(c_i y_i^{(k+1)} + \frac{1}{2} d_i (y_i^{(k+1)})^2 \right) \\
& < g_0^{(k,\ell)}(x^{(k)}) + \sum_{i=1}^m \left(c_i y_i^{(k)} + \frac{1}{2} d_i (y_i^{(k)})^2 \right) \\
& = f_0(x^{(k)}) + \sum_{i=1}^m \left(c_i y_i^{(k)} + \frac{1}{2} d_i (y_i^{(k)})^2 \right),
\end{aligned} \tag{1.20}$$

e em iterandos viáveis, ou seja, para $i = 1, \dots, m$,

$$f_i(x^{(k+1)}) - y_i^{(k+1)} \leq g_i^{(k,\ell)}(x^{(k+1)}) - y_i^{(k+1)} \leq 0. \tag{1.21}$$

Note que a primeira desigualdade da relação (1.20) vale pela condição conservadora. A desigualdade estrita é verdadeira pois o par $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})$ é a solução de um subproblema convexo, gerado em torno de $x^{(k)}$, com função objetivo estritamente convexa; e se $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) = (x^{(k)}, y^{(k)})$ então $(x^{(k)}, y^{(k)})$ é um ponto KKT do problema (1.18). Ainda, a igualdade presente em (1.20) vale pois, na estimativa corrente $x^{(k)}$, a função original e sua aproximação têm o mesmo valor, como veremos a seguir. Já para a relação (1.21), a primeira desigualdade vale pela condição conservadora e a segunda pela viabilidade do subproblema.

1.2.2 Aproximações das funções originais

Um subproblema CCSA tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \text{minimizar} && g_0^{(k,\ell)}(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2) \\
& \text{sujeito a} && g_i^{(k,\ell)}(x) - y_i \leq 0, && i = 1, \dots, m, \\
& && x \in X^{(k)}, y \geq 0,
\end{aligned} \tag{1.22}$$

para $k \in \{1, 2, 3, \dots\}$ e $\ell \in \{0, 1, 2, \dots\}$, onde a caixa $X^{(k)}$ é escolhida como $X^{(k)} =$

$X(x^{(k)}, \sigma^{(k)})$, em que $\sigma^{(k)} = (\sigma_1^{(k)}, \dots, \sigma_n^{(k)})^T$ é um vetor de parâmetros estritamente positivos e $X(\xi, \sigma)$ é um subconjunto de X definido por

$$X(\xi, \sigma) = \{x \in X \mid x_j \in [\xi_j - 0.9\sigma_j, \xi_j + 0.9\sigma_j], j = 1, \dots, n\}. \quad (1.23)$$

Então

$$X^{(k)} = \left\{x \in X \mid x_j \in [x_j^{(k)} - 0.9\sigma_j^{(k)}, x_j^{(k)} + 0.9\sigma_j^{(k)}], j = 1, \dots, n\right\}. \quad (1.24)$$

A escolha inicial e atualização dos parâmetros $\sigma_j^{(k)}$ serão discutidas mais adiante. Por enquanto é suficiente saber que cada vetor $\sigma^{(k)}$ pertence a um conjunto compacto S da forma

$$S = \{\sigma \in \mathbb{R}^n \mid \sigma_j^{\min} \leq \sigma_j \leq \sigma_j^{\max}, j = 1, \dots, n\}, \quad (1.25)$$

em que σ_j^{\min} e σ_j^{\max} são números reais dados tais que $0 < \sigma_j^{\min} < \sigma_j^{\max} < \infty$.

As aproximações $g_i^{(k, \ell)}$ do subproblema CCSA são escolhidas como:

$$g_i^{(k, \ell)}(x) = v_i(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) + \rho_i^{(k, \ell)} w(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)}), \quad i = 0, 1, \dots, m, \quad (1.26)$$

em que $v_i(x, \xi, \sigma)$ e $w(x, \xi, \sigma)$ são funções reais definidas no conjunto D dado por

$$D = \{(x, \xi, \sigma) \mid \xi \in X, \sigma \in S, x \in X(\xi, \sigma)\}. \quad (1.27)$$

Segundo Svanberg [45], para garantir que as funções $g_i^{(k, \ell)}$ tenham boas propriedades, devemos exigir que as seguintes condições sejam satisfeitas, para $i = 0, 1, \dots, m$:

- v_i e w são funções contínuas em D ,
- $\nabla_x v_i = \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial v_i}{\partial x_n}\right)$ existe e é contínuo em D ,
- $\nabla_x w = \left(\frac{\partial w}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial w}{\partial x_n}\right)$ existe e é contínuo em D ,
- a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 v_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$ existe e é contínua em D ,
- a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 w \in \mathbb{R}^{n \times n}$ existe e é contínua em D ,
- $v_i(x, \xi, \sigma) = f_i(x)$ se $x = \xi \in X$,
- $w(x, \xi, \sigma) = 0$ se $x = \xi \in X$,

- $\nabla_x v_i(x, \xi, \sigma) = \nabla f_i(x)$ se $x = \xi \in X$,
- $\nabla_x w(x, \xi, \sigma) = (0, \dots, 0)^T$ se $x = \xi \in X$,
- $\nabla_{xx}^2 v_i(x, \xi, \sigma) \geq 0$, $\forall (x, \xi, \sigma) \in D$,
- $\nabla_{xx}^2 w(x, \xi, \sigma) > 0$, $\forall (x, \xi, \sigma) \in D$.

Embora em [45] Svanberg trabalhe com funções w_i , $i = 0, 1, \dots, m$ na expressão (1.26), notamos que tais funções independem de i . Por isso, eliminamos este índice no nosso texto. Além disso, após analisar as propriedades acima, podemos concluir que:

$$w(x, \xi, \sigma) > 0, \quad \forall (x, \xi, \sigma) \in D \text{ tal que } x \neq \xi. \quad (1.28)$$

Esta expressão está de acordo com (1.19) e (1.26), pois os parâmetros $\rho_i^{(k, \ell)}$ presentes em (1.26) são estritamente positivos e, dentro de uma iteração externa k , a única diferença entre duas iterações internas são os valores destes parâmetros. Também, quanto maior o valor de $\rho_i^{(k, \ell)}$, mais conservadora a aproximação será. Deste modo, por (1.26) e (1.28), temos que ao aumentar o valor do parâmetro $\rho_i^{(k, \ell)}$ estamos aumentando o valor da aproximação $g_i^{(k, \ell)}$, e assim, buscando verificar a condição conservadora (1.19).

Observe que as funções $g_i^{(k, \ell)}$ são aproximações de primeira ordem das funções originais f_i na estimativa corrente, isto é,

$$g_i^{(k, \ell)}(x^{(k)}) = f_i(x^{(k)}) \quad \text{e} \quad \nabla g_i^{(k, \ell)}(x^{(k)}) = \nabla f_i(x^{(k)}). \quad (1.29)$$

Ainda, as aproximações $g_i^{(k, \ell)}$ são estritamente convexas pois, como $\rho_i^{(k, \ell)} > 0$, a matriz $\nabla^2 g_i^{(k, \ell)}$ é definida positiva. Portanto, todo subproblema CCSA possui um único ótimo global. Uma outra condição que exigimos das aproximações das funções originais é que elas sejam separáveis, ou seja,

$$g_i^{(k, \ell)}(x) = g_{i0}^{(k, \ell)} + \sum_{j=1}^n g_{ij}^{(k, \ell)}(x_j).$$

Esta propriedade não é usada na análise da convergência global, mas é essencial na prática pois nos permite trabalhar com problemas com um grande número de variáveis, mesmo se as matrizes Hessianas das funções envolvidas no problema original forem densas.

1.2.3 Exemplos de aproximações das funções originais

Um exemplo de funções v_i e w pode ser dado pelo método das assíntotas móveis MMA, bastante empregado [10, 11, 31, 32, 51, 52, 53, 54] pelos pesquisadores da área de otimização

estrutural, no qual as aproximações das funções originais são dadas por (cf. [45]):

$$g_i^{(k,\ell)}(x) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}^{(k,\ell)}}{u_j^{(k)} - x_j} + \frac{q_{ij}^{(k,\ell)}}{x_j - l_j^{(k)}} \right) + r_i^{(k,\ell)}, \quad (1.30)$$

as assíntotas móveis $l_j^{(k)}$ e $u_j^{(k)}$ são dadas por

$$l_j^{(k)} = x_j^{(k)} - \sigma_j^{(k)} \quad \text{e} \quad u_j^{(k)} = x_j^{(k)} + \sigma_j^{(k)},$$

e os coeficientes $p_{ij}^{(k,\ell)}$, $q_{ij}^{(k,\ell)}$ e $r_i^{(k,\ell)}$ são dados por

$$p_{ij}^{(k,\ell)} = (\sigma_j^{(k)})^2 \max \left\{ 0, \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \frac{\rho_i^{(k,\ell)} \sigma_j^{(k)}}{4}, \quad (1.31)$$

$$q_{ij}^{(k,\ell)} = (\sigma_j^{(k)})^2 \max \left\{ 0, -\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \frac{\rho_i^{(k,\ell)} \sigma_j^{(k)}}{4}, \quad (1.32)$$

$$r_i^{(k,\ell)} = f_i(x^{(k)}) - \sum_{j=1}^n \frac{p_{ij}^{(k,\ell)} + q_{ij}^{(k,\ell)}}{\sigma_j^{(k)}}. \quad (1.33)$$

Como o MMA é o método considerado neste trabalho, na sequência do texto vamos nos referir ao problema (1.22) como subproblema MMA. Ainda, ao longo do texto, usaremos a equação (1.30) para as aproximações do MMA, por ser de fácil interpretação. No entanto, podemos escrever estas aproximações na forma (1.26), para vermos o MMA como um método da classe CCSA. Neste caso, as funções v_i e w são dadas por:

$$v_i(x, \xi, \sigma) = f_i(\xi) + \sum_{j=1}^n \frac{\sigma_j^2 \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\xi)(x_j - \xi_j) + \sigma_j \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\xi) \right| (x_j - \xi_j)^2}{\sigma_j^2 - (x_j - \xi_j)^2}, \quad (1.34)$$

$$w(x, \xi, \sigma) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \frac{(x_j - \xi_j)^2}{\sigma_j^2 - (x_j - \xi_j)^2}. \quad (1.35)$$

A Figura 1.6(a) ilustra as funções v_i e w do método das assíntotas móveis, expressas em (1.34) e (1.35), respectivamente, em um exemplo onde a função original f_i é o polinômio de raízes 1, 2 e 3, e foram tomados $\xi = x^{(k)} = 3$ e $\sigma = \sigma^{(k)} = 2$. Todas as condições citadas anteriormente que devem ser satisfeitas pelas funções v_i e w podem ser observadas neste exemplo. A Figura 1.6(b) mostra a função original $f_i(x)$ e a sua aproximação MMA $g_i^{(k,\ell)}(x) = v_i(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) + w(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)})$, escrita aqui como em (1.26) com $\rho_i^{(k,\ell)} = 1$.

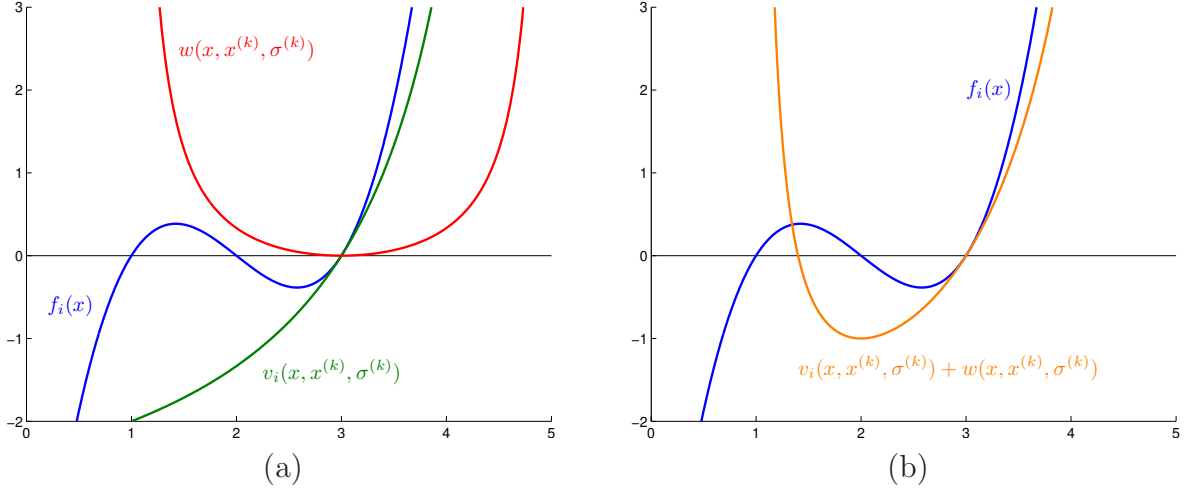


Figura 1.6: Exemplo das funções v_i e w dadas em (1.34) e (1.35), respectivamente, e da aproximação MMA com $\rho_i^{(k,\ell)} = 1$.

Para completar a exposição, outros exemplos de funções v_i e w , sugeridas em [45], são dados a seguir, apesar de não serem usados neste trabalho:

- Aproximações linear e quadrática separável:

$$\begin{aligned} v_i(x, \xi, \sigma) &= f_i(\xi) + \nabla f_i(\xi)(x - \xi), \\ w(x, \xi, \sigma) &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(\frac{x_j - \xi_j}{\sigma_j} \right)^2, \end{aligned}$$

de modo que

$$g_i^{(k,\ell)}(x) = f_i(x^{(k)}) + \nabla f_i(x^{(k)})(x - x^{(k)}) + \frac{\rho_i^{(k,\ell)}}{2} \sum_{j=1}^n \left(\frac{x_j - x_j^{(k)}}{\sigma_j^{(k)}} \right)^2.$$

- Aproximações linear e logarítmica separável:

$$\begin{aligned} v_i(x, \xi, \sigma) &= f_i(\xi) + \nabla f_i(\xi)(x - \xi), \\ w(x, \xi, \sigma) &= -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \ln(1 - (x_j - \xi_j)^2 / \sigma_j^2), \end{aligned}$$

de modo que

$$g_i^{(k,\ell)}(x) = f_i(x^{(k)}) + \nabla f_i(x^{(k)})(x - x^{(k)}) - \frac{\rho_i^{(k,\ell)}}{2} \sum_{j=1}^n \ln(1 - (x_j - x_j^{(k)})^2 / (\sigma_j^{(k)})^2).$$

- Aproximações linear e usando raiz quadrada separável:

$$\begin{aligned} v_i(x, \xi, \sigma) &= f_i(\xi) + \nabla f_i(\xi)(x - \xi), \\ w(x, \xi, \sigma) &= \sum_{j=1}^n \left(1 - \sqrt{1 - (x_j - \xi_j)^2 / \sigma_j^2} \right), \end{aligned}$$

de modo que

$$g_i^{(k, \ell)}(x) = f_i(x^{(k)}) + \nabla f_i(x^{(k)})(x - x^{(k)}) + \rho_i^{(k, \ell)} \sum_{j=1}^n \left(1 - \sqrt{1 - (x_j - x_j^{(k)})^2 / (\sigma_j^{(k)})^2} \right).$$

1.2.4 Atualização dos parâmetros $\rho_i^{(k, \ell)}$ e $\sigma_j^{(k)}$

As atualizações dos parâmetros $\rho_i^{(k, \ell)}$ e $\sigma_j^{(k)}$ apresentadas aqui são sugeridas por Svanberg em [45], mas existem várias outras alternativas (ver, por exemplo, [42, 44, 46]).

Em relação à atualização do parâmetro $\rho_i^{(k, \ell)}$, para $\ell = 0$, os seguintes valores são usados:

$$\rho_i^{(1, 0)} = 1, \quad (1.37a)$$

$$\rho_i^{(k+1, 0)} = \max\{0.1 \rho_i^{(k, \hat{\ell}(k))}, \rho_i^{min}\}, \quad (1.37b)$$

em que $\hat{\ell}(k)$ é o número de iterações necessárias dentro da k -ésima iteração externa e ρ_i^{min} é um número fixo estritamente positivo, como por exemplo, 10^{-5} .

Em cada iteração interna, a atualização de $\rho_i^{(k, \ell)}$ é baseada na solução do subproblema mais recente. Se $g_i^{(k, \ell)}(\hat{x}^{(k, \ell)}) < f_i(\hat{x}^{(k, \ell)})$ escolhemos $\rho_i^{(k, \ell+1)}$ de maneira que

$$g_i^{(k, \ell+1)}(\hat{x}^{(k, \ell)}) = f_i(\hat{x}^{(k, \ell)}),$$

que fornece $\rho_i^{(k, \ell+1)} = \rho_i^{(k, \ell)} + \delta_i^{(k, \ell)}$ onde

$$\delta_i^{(k, \ell)} = \frac{f_i(\hat{x}^{(k, \ell)}) - g_i^{(k, \ell)}(\hat{x}^{(k, \ell)})}{w(\hat{x}^{(k, \ell)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)})}, \quad (1.38)$$

ou seja, o novo valor $\rho_i^{(k, \ell+1)}$ é a soma do antigo $\rho_i^{(k, \ell)}$ com o quanto faltou para que a aproximação fosse conservadora na iteração (k, ℓ) . Assim, obtemos:

$$\begin{aligned} \rho_i^{(k, \ell+1)} &= \min\{10 \rho_i^{(k, \ell)}, 1.1 (\rho_i^{(k, \ell)} + \delta_i^{(k, \ell)})\} & \text{se } \delta_i^{(k, \ell)} > 0, \\ \rho_i^{(k, \ell+1)} &= \rho_i^{(k, \ell)} & \text{se } \delta_i^{(k, \ell)} \leq 0. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Note que no início de cada iteração interna, os parâmetros ρ_i são aumentados ou permanecem inalterados, mas nunca são reduzidos. Desta maneira, é importante que eles sejam reduzidos no início de cada iteração externa, conforme (1.37b), pois caso contrário o método seria muito conservador podendo eventualmente produzir passos pequenos.

Em relação aos parâmetros $\sigma_j^{(k)}$, a atualização depende das funções v_i e w . No caso das aproximações MMA, a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 w(x, \xi, \sigma)$ é diagonal com $\frac{\partial^2 w}{\partial x_j^2}(x, \xi, \sigma) \geq \frac{1}{\sigma_j^2}$ para todo j e todo $(x, \xi, \sigma) \in D$, valendo a igualdade se $x_j = \xi_j$. Isto significa que a curvatura da função w na direção x_j aumenta conforme o valor de σ_j decresce. Portanto, se uma certa variável x_j está oscilando, como no exemplo da Figura 1.7, um valor pequeno de σ_j aproximará as assíntotas da j -ésima componente da estimativa corrente, estabilizando esta variável. Agora, se a variável x_j está crescendo ou decrescendo monotonamente, como no exemplo da Figura 1.8, um valor grande de σ_j reduzirá a curvatura da aproximação, permitindo passos maiores para esta variável.

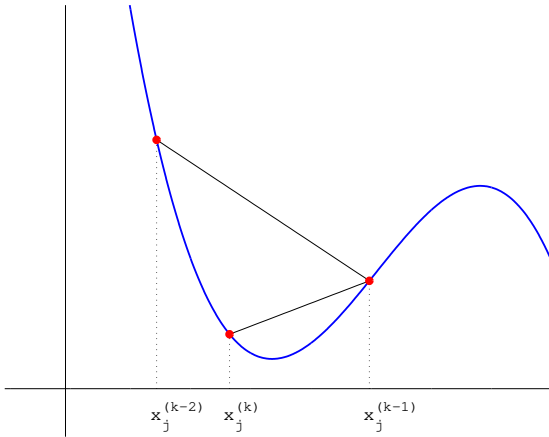


Figura 1.7: Variável x_j oscilando.

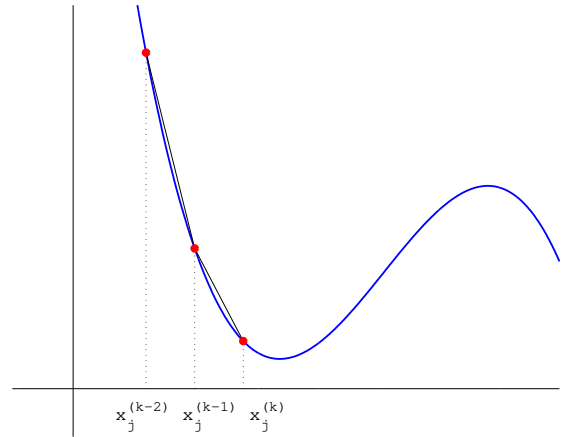


Figura 1.8: Variável x_j crescendo.

A maneira proposta por Svanberg em [45] para implementar esta regra é a seguinte: nas primeiras duas iterações, quando $k = 1$ e $k = 2$ temos

$$\sigma_j^{(k)} = 0.5(x_j^{max} - x_j^{min}); \quad (1.40)$$

e quando $k \geq 3$ temos

$$\sigma_j^{(k)} = \gamma_j^{(k)} \sigma_j^{(k-1)}, \quad (1.41)$$

em que

$$\gamma_j^{(k)} = \begin{cases} 0.7 & \text{se } (x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)})(x_j^{(k-1)} - x_j^{(k-2)}) < 0, \\ 1.2 & \text{se } (x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)})(x_j^{(k-1)} - x_j^{(k-2)}) > 0, \\ 1 & \text{se } (x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)})(x_j^{(k-1)} - x_j^{(k-2)}) = 0, \end{cases} \quad (1.42)$$

desde que estes valores satisfaçam

$$\sigma_j^{min} \leq \sigma_j^{(k)} \leq \sigma_j^{max}.$$

Se algum destes limitantes inferiores ou superiores é violado, o valor correspondente de $\sigma_j^{(k)}$ é tomado como o do limitante violado. Uma escolha possível para os valores destes limitantes usados para definir o conjunto S em (1.25) é $\sigma_j^{min} = 0.01(x_j^{max} - x_j^{min})$ e $\sigma_j^{max} = 10(x_j^{max} - x_j^{min})$ para cada $j = 1, \dots, n$.

1.3 Revisão bibliográfica

Esta seção traz uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos estudados. São detalhadas algumas maneiras de aproximar funções e portanto, definir um subproblema aproximado; assim como alguns trabalhos que antecederam o método das assíntotas móveis, várias versões do MMA propostas por Svanberg [40, 41, 42, 44, 45], e diversos estudos realizados pela comunidade de otimização estrutural baseados no MMA [11, 23, 27, 35, 48, 50, 52, 53].

As aproximações locais mais comuns para funções objetivo e funções que definem restrições são baseadas no valor da função e de suas derivadas de primeira ordem em um único ponto. A aproximação mais simples é a *aproximação linear* baseada na expansão em série de Taylor. Dada uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, a aproximação linear g_L em torno do ponto $x^{(k)}$ é dada por

$$g_L(x) = f(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^n (x_j - x_j^{(k)}) \left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right). \quad (1.43)$$

Para muitas aplicações a aproximação linear é imprecisa mesmo para pontos próximos de $x^{(k)}$. A precisão pode ser aumentada conservando termos adicionais da expansão em série de Taylor. No entanto, isto exige o alto custo do cálculo de derivadas de ordem superior. Uma alternativa é tentar obter outras aproximações que usem apenas derivadas de primeira ordem mas que possam ser mais precisas do que a aproximação linear. Uma maneira de fazer isso é definindo variáveis de intervenção

$$z_i = z_i(x),$$

em que z_i são funções das variáveis originais x (ou de projeto, na nomenclatura da otimização estrutural). Desta forma, a aproximação linear g_I dada em termos das variáveis de intervenção é

$$g_I(z) = \bar{f}(z^{(k)}) + \sum_i (z_i - z_i^{(k)}) \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial z_i}(z^{(k)}) \right),$$

em que $z_i^{(k)} = z_i(x^{(k)})$, $\bar{f}(z) = f(x)$ e as derivadas parciais da função \bar{f} em relação a z_i podem ser calculadas a partir das derivadas parciais da função f em relação a x_j .

Em muitas aplicações as variáveis de intervenção são funções de uma única variável de projeto, isto é,

$$z_j = z_j(x_j), \quad j = 1, \dots, n.$$

Nestes casos, é conveniente escrever a aproximação g_I em termos das variáveis originais, ou seja,

$$g_I(x) = f(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \left(z_j(x_j) - z_j(x_j^{(k)}) \right) \left(\frac{\partial f}{\partial z_j} \right)_{x^{(k)}}.$$

Note que g_I é uma função linear em relação a z_j , mas é, em geral, uma função não linear em relação a x_j .

Uma das variáveis de intervenção mais usadas é o recíproco de x_j , dado por

$$z_j = \frac{1}{x_j}, \quad j = 1, \dots, n, \quad (1.44)$$

de modo que, neste caso, a *aproximação recíproca* pode ser escrita em termos das variáveis de projeto originais da seguinte maneira

$$g_R(x) = f(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^n (x_j - x_j^{(k)}) \left(\frac{x_j^{(k)}}{x_j} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} (x^{(k)}) \right). \quad (1.45)$$

O uso das variáveis recíprocas (1.44) se justifica pelo estudo de estruturas que consistem de treliças ou de elementos em estado plano de tensões². As variáveis de projeto nestes casos são, por exemplo, as áreas das seções transversais dos elementos das treliças e as espessuras dos elementos em estado plano de tensões [1, 39]. Para estruturas estaticamente determinadas³, restrições de tensão e deslocamentos são funções lineares dos recíprocos destas variáveis de projeto. Mesmo para estruturas estaticamente indeterminadas, o uso dos recíprocos das variáveis de projeto é uma maneira útil de obter restrições lineares nas novas variáveis.

Na década de 70, tornou-se comum aproximar as restrições do problema a ser resolvido por funções das variáveis de projeto, obtendo assim uma redução considerável no número de análises (avaliações das funções e gradientes) necessárias para determinar o ótimo do

²Um estado plano de tensões ocorre em um objeto tridimensional quando as forças atuantes em uma dada dimensão são desprezíveis em relação às forças que atuam nas outras duas dimensões. Neste caso, o objeto pode ser analisado como bidimensional.

³Quando o sistema de equações de equilíbrio possuir uma única solução, ou seja, quando o número de incógnitas é igual ao número de equações linearmente independentes, sob quaisquer ações externas, temos uma estrutura estaticamente determinada. Quando o número de incógnitas for superior ao das equações de equilíbrio linearmente independentes, temos uma estrutura estaticamente indeterminada.

problema. Em [27], ao realizar os cálculos referentes a alguns exemplos, Haftka e Starnes concluíram que tanto a aproximação linear (1.43) quanto a aproximação recíproca (1.45) poderiam causar erros maiores quando usadas para aproximar restrições de deformação do que quando usadas para aproximar restrições de tensão e deslocamentos. Concluíram então que é mais importante usar uma aproximação conservadora para aproximar as restrições de deformação do que para aproximar as restrições de tensão e deslocamento. Para determinar qual aproximação é a mais conservadora, eles compararam as duas aproximações, observando que como as restrições estão sendo expressas como $f(x) \leq 0$, então g_L é *mais conservadora do que* g_R quando $g_R < g_L$. Analisando a diferença entre as aproximações linear e recíproca

$$g_L(x) - g_R(x) = \sum_{j=1}^n \frac{(x_j - x_j^{(k)})^2}{x_j} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right),$$

observamos que o sinal de cada termo no somatório é determinado pelo sinal da razão $\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) / x_j$, que é também o sinal do produto $x_j \left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right)$. Variáveis que tornam este produto negativo contribuem para fazer a aproximação recíproca maior (menos negativa) do que a aproximação linear, e vice-versa. Assim, uma *aproximação híbrida* g_H foi criada, selecionando para cada variável a mais conservadora das aproximações acima consideradas, isto é,

$$g_H(x) = f(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \gamma_j (x_j - x_j^{(k)}) \left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right), \quad (1.46)$$

em que

$$\gamma_j = \begin{cases} 1, & \text{se } x_j^{(k)} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) \geq 0, \\ x_j^{(k)} / x_j, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (1.47)$$

Note que $\gamma_j = 1$ corresponde à aproximação linear e $\gamma_j = x_j^{(k)} / x_j$ corresponde à aproximação recíproca em x_j , de modo que com esta aproximação híbrida, uma restrição pode ter uma aproximação linear em relação a uma variável de projeto e uma aproximação recíproca em relação a outra variável de projeto.

É importante notar que a aproximação híbrida (1.46)-(1.47) não é conservadora de uma maneira absoluta, ou seja, não temos a garantia de que a aproximação é conservadora em relação à função original pois não podemos assegurar que $g_H(x) \geq f(x)$, $\forall x \in X$. A aproximação híbrida que descrevemos é apenas conservadora em relação às aproximações linear e recíproca. Mais detalhes sobre a aproximação híbrida podem ser encontrados em [28, p. 214].

A aproximação híbrida possui a vantagem de ser convexa, desde que x_j tenha o mesmo sinal de $x_j^{(k)}$. De fato, a expressão da derivada parcial de segunda ordem da aproximação

híbrida é dada por:

$$\frac{\partial^2 g_H}{\partial x_j^2}(x) = -2 \left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) \frac{(x_j^{(k)})^2}{x_j^3}, \quad \text{em que} \quad x_j^{(k)} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) < 0.$$

Haftka e Starnes propuseram usar a aproximação híbrida para aproximar certos tipos de restrições. Agora, observe que se a função objetivo e todas as restrições são aproximadas pela aproximação híbrida, o problema de otimização aproximado é convexo. Sabemos que problemas convexos possuem solução ótima global [29]. Fleury e Braibant introduziram o termo *linearização convexa* para o processo de usar funções convexas e conservadoras para aproximar não apenas as restrições de deformação, mas também a função objetivo e todas as outras restrições, como veremos a seguir, e sugeriram usar a convexidade do problema aproximado para resolvê-lo usando métodos duais.

O método de linearização convexa (CONLIN), proposto em 1986 por Fleury e Braibant [23] para resolver problemas de otimização estrutural, usa variáveis diretas x_j e recíprocas $1/x_j$ no processo de linearização, dependendo do sinal das derivadas de primeira ordem da função que está sendo aproximada, calculadas na estimativa corrente $x^{(k)}$. Neste método, as aproximações da função objetivo f_0 e das restrições f_i , $i = 1, \dots, m$ são convexas e separáveis de primeira ordem, e têm a seguinte forma:

$$g_i^{CONLIN}(x) = \sum_{+} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) x_j - \sum_{-} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) \frac{(x_j^{(k)})^2}{x_j} + c \quad (1.48)$$

para cada $i = 0, 1, \dots, m$ com

$$c = f_i(x^{(k)}) - \sum_j \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right| x_j^{(k)},$$

em que os símbolos \sum_{+} e \sum_{-} denotam os somatórios sobre os termos que têm derivadas de primeira ordem positiva e negativa, respectivamente. O método CONLIN aplica este esquema de linearização convexa à função objetivo f_0 e a todas as funções f_i que definem as restrições, gerando uma sequência de subproblemas aproximados. Cada subproblema é convexo e possui aproximações separáveis, de modo que pode ser resolvido eficientemente por uma formulação dual. Como as aproximações geradas pelo processo de linearização convexa são localmente conservadoras, elas tendem a sobreestimar os valores das funções originais. Ou seja, a região viável de um subproblema geralmente está contida na região viável original.

As derivadas de segunda ordem da aproximação CONLIN são dadas pelos termos recí-

procos, da seguinte maneira:

$$\frac{\partial^2 g_i^{CONLIN}}{\partial x_j^2}(x) = -2 \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) \frac{(x_j^{(k)})^2}{x_j^3}, \quad \text{em que} \quad \frac{\partial f}{\partial x_j}(x^{(k)}) < 0. \quad (1.49)$$

Em um problema de otimização estrutural, as variáveis de projeto são, em geral, positivas, pois representam, por exemplo, a altura de um elemento de uma viga ou a área da seção transversal de uma barra em um sistema de treliças. Desta maneira, fisicamente, a derivada parcial de segunda ordem (1.49) da aproximação g_i^{CONLIN} é sempre não negativa. Entretanto, analisando a expressão (1.49) matematicamente, vemos que esta derivada segunda pode assumir valores negativos, fornecendo uma aproximação côncava para a função original, como observamos na Figura 1.9.

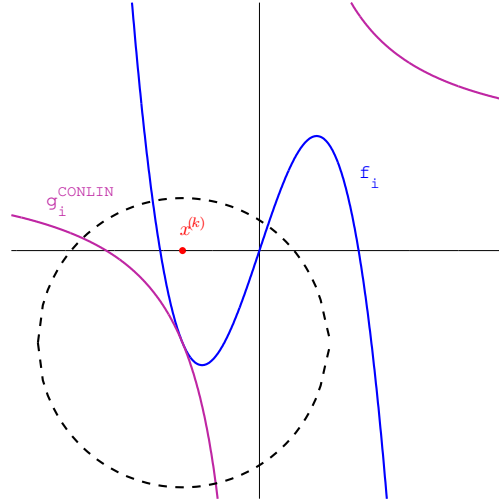


Figura 1.9: Exemplo em que a aproximação g_i^{CONLIN} é côncava em uma vizinhança do ponto $x^{(k)}$.

Podemos fazer algumas observações sobre a aproximação CONLIN (1.48):

- a aproximação da função original possui uma assíntota na origem;
- quando a derivada da função original avaliada na estimativa corrente é positiva, ou seja, $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) > 0$, a aproximação CONLIN é apenas linear;
- a aproximação nem sempre é convexa (conforme podemos observar na Figura 1.9), e é sempre monótona.

Em 1987, Svanberg [40] apresentou o método das assíntotas móveis, que pode ser interpretado como uma generalização do método CONLIN, em que cada aproximação $g_i^{(k)}$ é obtida

por uma linearização das funções originais f_i em variáveis do tipo $1/(x_j - l_j)$ ou $1/(u_j - x_j)$, dependendo do sinal das derivadas de f_i em $x^{(k)}$, em que os valores das assíntotas móveis l_j e u_j são atualizados entre as iterações.

Com efeito, analisar separadamente as linearizações de f_i nas variáveis $1/(x_j - l_j)$ e $1/(u_j - x_j)$ dadas, respectivamente, por:

$$g_i^l(x) = - \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) \frac{(x_j^{(k)} - l_j)^2}{x_j - l_j} + f_i(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) (x_j^{(k)} - l_j)$$

e

$$g_i^u(x) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) \frac{(u_j - x_j^{(k)})^2}{u_j - x_j} + f_i(x^{(k)}) - \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right) (u_j - x_j^{(k)})$$

torna mais simples entender a aproximação MMA proposta por Svanberg, dada por:

$$\begin{aligned} g_i^{(k)}(x) &= \sum_{+} \frac{(u_j^{(k)} - x_j^{(k)})^2 \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)})}{u_j^{(k)} - x_j} - \sum_{-} \frac{(x_j^{(k)} - l_j^{(k)})^2 \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)})}{x_j - l_j^{(k)}} + r_i^{(k)} \\ &= \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}^{(k)}}{u_j^{(k)} - x_j} + \frac{q_{ij}^{(k)}}{x_j - l_j^{(k)}} \right) + r_i^{(k)} \end{aligned} \quad (1.50)$$

em que

$$p_{ij}^{(k)} = (u_j^{(k)} - x_j^{(k)})^2 \max \left\{ 0, \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\},$$

$$q_{ij}^{(k)} = (x_j^{(k)} - l_j^{(k)})^2 \max \left\{ 0, -\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\},$$

$$r_i^{(k)} = f_i(x^{(k)}) - \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}^{(k)}}{u_j^{(k)} - x_j^{(k)}} + \frac{q_{ij}^{(k)}}{x_j^{(k)} - l_j^{(k)}} \right).$$

Na versão original do MMA, os valores das assíntotas móveis $l_j^{(k)}$ e $u_j^{(k)}$ são atualizados usando a seguinte regra heurística: se o processo está oscilando, então ele deve ser estabilizado. Esta estabilização pode ser obtida aproximando as assíntotas da estimativa corrente. Se, caso contrário, o processo é monótono e lento, ele deve ser relaxado, o que pode ser obtido afastando as assíntotas da estimativa corrente. A implementação dada em [40] para esta regra, em que $s < 1$ é um número real dado, por exemplo, $s = 0.7$, é: para $k = 1$ e $k = 2$ tome

$$l_j^{(k)} = x_j^{(k)} - (x_j^{max} - x_j^{min}) \quad \text{e} \quad u_j^{(k)} = x_j^{(k)} + (x_j^{max} - x_j^{min}),$$

e para $k \geq 3$, se os sinais de $x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}$ e $x_j^{(k-1)} - x_j^{(k-2)}$ são distintos, indicando uma oscilação na variável x_j , então tome

$$\begin{aligned} l_j^{(k)} &= x_j^{(k)} - s(x_j^{(k-1)} - l_j^{(k-1)}), \\ u_j^{(k)} &= x_j^{(k)} + s(u_j^{(k-1)} - x_j^{(k-1)}). \end{aligned}$$

Se os sinais de $x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}$ e $x_j^{(k-1)} - x_j^{(k-2)}$ são iguais, indicando que as assíntotas estão retardando a convergência na variável x_j , então tome

$$\begin{aligned} l_j^{(k)} &= x_j^{(k)} - (x_j^{(k-1)} - l_j^{(k-1)})/s, \\ u_j^{(k)} &= x_j^{(k)} + (u_j^{(k-1)} - x_j^{(k-1)})/s. \end{aligned}$$

Permitir que as assíntotas se movam de maneira adequada entre as iterações faz do MMA um método mais poderoso e flexível do que o método CONLIN. Note que o método CONLIN é um caso particular do MMA pois pode ser obtido tomando $l_j = 0$ e $u_j = +\infty$, $j = 1, \dots, n$. Também, os modelos $g_i^{(k)}$ são aproximações de primeira ordem das funções f_i em $x^{(k)}$ e a caixa do subproblema é dada por

$$X^{(k)} = \left\{ x \in X \mid x_j \in [0.9l_j^{(k)} + 0.1x_j^{(k)}, 0.9u_j^{(k)} + 0.1x_j^{(k)}], j = 1, \dots, n \right\}.$$

Esta versão original do MMA usa a seguinte abordagem para resolver problemas da forma (1.1): em cada iteração k , uma estimativa corrente $x^{(k)}$ é dada. Então um subproblema aproximado convexo é gerado, no qual as funções $f_i, i = 0, 1, \dots, m$ são substituídas por aproximações separáveis $g_i^{(k)}$ dadas por (1.50). O subproblema é resolvido, e a única solução ótima se torna a próxima estimativa $x^{(k+1)}$. Então um novo subproblema é gerado em torno da nova estimativa corrente, e o processo é interrompido quando algum critério de convergência é satisfeito. Para evitar uma possível inviabilidade de um subproblema, é sugerido já em [40] que se usem variáveis artificiais.

As derivadas parciais de segunda ordem não-mistas da aproximação $g_i^{(k)}$ são dadas por:

$$\frac{\partial^2 g_i^{(k)}}{\partial x_j^2}(x) = \frac{2p_{ij}^{(k)}}{(u_j^{(k)} - x_j)^3} + \frac{2q_{ij}^{(k)}}{(x_j - l_j^{(k)})^3}$$

de modo que se $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) > 0$ então

$$\frac{\partial^2 g_i^{(k)}}{\partial x_j^2}(x) = \frac{2(u_j^{(k)} - x_j^{(k)})^2 \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right)}{(u_j^{(k)} - x_j)^3},$$

e se $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) < 0$ então

$$\frac{\partial^2 g_i^{(k)}}{\partial x_j^2}(x) = \frac{-2(x_j^{(k)} - l_j^{(k)})^2 \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right)}{(x_j - l_j^{(k)})^3}.$$

Note que, como as aproximações $g_i^{(k)}$ são funções separáveis, as derivadas parciais de segunda ordem mistas são nulas. Também, se $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) = 0$ então $\frac{\partial^2 g_i^{(k)}}{\partial x_j^2}(x) = 0$.

Em relação à aproximação $g_i^{(k)}$, apresentada por Svanberg em 1987, podemos fazer as seguintes observações: a aproximação é uma função racional, convexa para qualquer ponto x tal que $l_j^{(k)} < x_j < u_j^{(k)}$ (não é necessário que as variáveis sejam não-negativas), com assíntota em $l_j^{(k)}$ ou em $u_j^{(k)}$; é uma função monótona (crescente se $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) > 0$ e decrescente se $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) < 0$). Ainda, apesar desta versão original do MMA ser considerada confiável, ela não é globalmente convergente: é possível construir problemas para os quais o método não converge (ver, por exemplo, [42]).

Observe que, além de a versão original do MMA não ser globalmente convergente, outras dificuldades podem surgir em relação à função objetivo: como a aproximação objetivo é uma função racional monótona com assíntota em $l_j^{(k)}$ ou em $u_j^{(k)}$, no conjunto viável (convexo) a aproximação pode assemelhar-se a uma função linear ou quase linear, e ao minimizá-la a solução estará na fronteira do conjunto.

Tentando resolver estas dificuldades, Svanberg [41] propôs, em 1993, uma pequena mudança nos coeficientes $p_{0j}^{(k)}$ e $q_{0j}^{(k)}$ usados na construção do modelo $g_0^{(k)}$ que aproxima a função objetivo original f_0 :

$$\begin{aligned} p_{0j}^{(k)} &= (u_j^{(k)} - x_j^{(k)})^2 \left(\max \left\{ 0, \frac{\partial f_0}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \frac{\varepsilon_0}{u_j^{(k)} - l_j^{(k)}} \right), \\ q_{0j}^{(k)} &= (x_j^{(k)} - l_j^{(k)})^2 \left(\max \left\{ 0, -\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \frac{\varepsilon_0}{u_j^{(k)} - l_j^{(k)}} \right), \end{aligned}$$

em que $\varepsilon_0 > 0$ é um número razoavelmente pequeno. Desta maneira, $p_{0j}^{(k)} > 0$ e $q_{0j}^{(k)} > 0$ para todo j (mesmo se $f_0(x) \equiv 0$) pois ε_0 é estritamente positivo. Portanto, todas as funções restrições do k -ésimo subproblema MMA são convexas enquanto a função objetivo é estritamente convexa, e então cada subproblema possui uma única solução.

Em 1995, Svanberg apresentou uma versão globalmente convergente do MMA [42]. As idéias básicas do MMA original foram mantidas, a única modificação feita no método está

nos coeficientes $p_{ij}^{(k)}$ e $q_{ij}^{(k)}$, dados então por:

$$p_{ij}^{(k)} = (u_j^{(k)} - x_j^{(k)})^2 \left(\max \left\{ 0, \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \left(\frac{\rho_i^{(k)}}{2} \right) (u_j^{(k)} - l_j^{(k)}) \right), \quad (1.51)$$

$$q_{ij}^{(k)} = (x_j^{(k)} - l_j^{(k)})^2 \left(\max \left\{ 0, -\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \left(\frac{\rho_i^{(k)}}{2} \right) (u_j^{(k)} - l_j^{(k)}) \right). \quad (1.52)$$

De fato, a introdução dos parâmetros $\rho_i^{(k)}$ é a única diferença entre esta versão globalmente convergente do MMA e a versão original do método. O cálculo do coeficiente $r_i^{(k)}$ e a construção das aproximações $g_i^{(k)}$ e da caixa do subproblema $X^{(k)}$ foram mantidos. A heurística proposta por Svanberg em [40] para a atualização das assíntotas foi formalizada, de modo que nas duas primeiras iterações

$$l_j^{(k)} = x_j^{(k)} - 0.5(x_j^{max} - x_j^{min}) \quad \text{e} \quad u_j^{(k)} = x_j^{(k)} + 0.5(x_j^{max} - x_j^{min}),$$

enquanto que nas iterações posteriores a atualização se dá de acordo com:

$$l_j^{(k+1)} = x_j^{(k+1)} - C_j^{(k)}(x_j^{(k)} - l_j^{(k)}) \quad \text{e} \quad u_j^{(k)} = x_j^{(k+1)} + C_j^{(k)}(u_j^{(k)} - x_j^{(k)}),$$

onde

$$C_j^{(k)} = \begin{cases} 0.7 & \text{se } (x_j^{(k+1)} - x_j^{(k)})(x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}) < 0, \\ 1.2 & \text{se } (x_j^{(k+1)} - x_j^{(k)})(x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}) > 0, \\ 1 & \text{se } (x_j^{(k+1)} - x_j^{(k)})(x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}) = 0. \end{cases}$$

Os parâmetros $\rho_i^{(k)}$ devem ser atualizados da seguinte maneira, para $i = 0, 1, \dots, m$:

$$\begin{aligned} \rho_i^{(k+1)} &= 2\rho_i^{(k)} & \text{se } g_i^{(k)}(x^{(k+1)}) < f_i(x^{(k+1)}), \\ \rho_i^{(k+1)} &= \rho_i^{(k)} & \text{se } g_i^{(k)}(x^{(k+1)}) \geq f_i(x^{(k+1)}). \end{aligned}$$

Ainda, se $g_i^{(k)}(x^{(k+1)}) \geq f_i(x^{(k+1)})$ para todo $i = 0, 1, \dots, m$, então as assíntotas devem ser atualizadas fazendo:

$$l_j^{(k+1)} = x_j^{(k+1)} - (x_j^{(k)} - l_j^{(k)}) \quad \text{e} \quad u_j^{(k)} = x_j^{(k+1)} + (u_j^{(k)} - x_j^{(k)})$$

e os valores iniciais $\rho_i^{(0)}$ devem ser tais que $\rho_i^{(0)} > 0$ para todo $i = 0, 1, \dots, m$, sendo uma escolha razoável

$$\rho_i^{(0)} = \frac{1}{5n} \sum_{j=1}^n \frac{\left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(1)}) \right|}{x_j^{max} - x_j^{min}}.$$

Apesar desta versão do método ser globalmente convergente, ela ficou muito lenta na prática. Isto provavelmente se deve ao fato de que os parâmetros $\rho_i^{(k)}$ permanecem inalterados ou são aumentados, mas nunca diminuídos, fazendo com que o método possa gerar passos muito pequenos.

Em 1999, Svanberg apresentou uma nova versão globalmente convergente do MMA [44], que possui iterações externas e internas e aparenta ser mais eficiente na prática do que as versões anteriores. O processo do método é idêntico ao da versão MMA de 2002, que foi resumido na Seção 1.2; as aproximações $g_i^{(k,\ell)}(x)$ são construídas da mesma forma que as aproximações (1.50) da versão original do método, ou também como em (1.30), mas os coeficientes $p_{ij}^{(k,\ell)}$ e $q_{ij}^{(k,\ell)}$ são dados por

$$\begin{aligned} p_{ij}^{(k,\ell)} &= (u_j^{(k)} - x_j^{(k)})^2 \left(\max \left\{ 0, \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \rho_i^{(k,\ell)}(x_j^{max} - x_j^{min}) \right) \\ q_{ij}^{(k,\ell)} &= (x_j^{(k)} - l_j^{(k)})^2 \left(\max \left\{ 0, -\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\} + \rho_i^{(k,\ell)}(x_j^{max} - x_j^{min}) \right) \end{aligned}$$

e os valores de $r_i^{(k,\ell)}$ e das assíntotas móveis $l_j^{(k)}$ e $u_j^{(k)}$ são dados como anteriormente. Já os parâmetros $\rho_i^{(k,\ell)}$ (estritamente positivos e tais que dentro de uma iteração externa, a única diferença entre duas iterações internas é o valor destes parâmetros) são atualizados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \rho_i^{(1,0)} &= 10^{-4} + \frac{0.1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{\left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(1)}) \right|}{x_j^{max} - x_j^{min}}, \\ \rho_i^{(k+1,0)} &= \max\{0.1\rho_i^{(k,\hat{\ell}(k))}, 10^{-7}\}, \end{aligned}$$

onde $\hat{\ell}(k)$ é o número de iterações internas efetuadas dentro da k -ésima iteração externa, de modo que $\rho_i^{(k,\hat{\ell}(k))}$ é o último valor de $\rho_i^{(k,\ell)}$. Em cada iteração interna, a atualização de $\rho_i^{(k,\ell)}$ é baseada na solução do subproblema mais recente. Note que $g_i^{(k,\ell)}$ pode ser escrita na forma (1.26) em que as funções $v_i^{(k)}(x) \equiv v_i(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)})$ e $w^{(k)}(x) \equiv w(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)})$ não dependem de $\rho_i^{(k,\ell)}$ e

$$w^{(k)}(x) = \sum_{j=1}^n \frac{(x_j^{max} - x_j^{min})(u_j^{(k)} - l_j^{(k)})}{(u_j^{(k)} - x_j)(x_j - l_j^{(k)})} (x_j - x_j^{(k)})^2.$$

Considerando os valores das medidas $\delta_i^{(k,\ell)}$ dados pela expressão (1.38), temos que $v_i^{(k)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) + (\rho_i^{(k,\ell)} + \delta_i^{(k,\ell)}) w^{(k)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) = f_i(\hat{x}^{(k,\ell)})$, o que mostra que $\rho_i^{(k,\ell)} + \delta_i^{(k,\ell)}$ seria um valor natural de $\rho_i^{(k,\ell+1)}$. Para obter um método globalmente convergente, este valor é modificado conforme (1.39).

Então, em 2002, Svanberg apresentou uma nova versão do MMA, na qual as aproximações $g_i^{(k,\ell)}(x)$ são construídas da mesma forma que as aproximações (1.30) ou (1.50), os coeficientes $p_{ij}^{(k,\ell)}$, $q_{ij}^{(k,\ell)}$ e $r_i^{(k,\ell)}$ são como em (1.31), (1.32) e (1.33), respectivamente, como foi visto na Seção 1.2, juntamente com a descrição do método. Vale lembrar que os parâmetros $\sigma_j^{(k)}$, $j = 1, \dots, n$, são estritamente positivos, usados para definir uma vizinhança em torno da estimativa corrente $x^{(k)}$, enquanto o parâmetro $\rho_i^{(k,\ell)}$, $i = 0, 1, \dots, m$, também estritamente positivo, é usado para controlar a convexidade da aproximação.

Observe que a versão original do MMA pode ser considerada como um caso particular desta versão de 2002 fazendo $\rho_i^{(k,\ell)} = 0$, $\forall i$. Consequentemente, nenhuma iteração interna era realizada na versão de 1987, e a convergência global não podia ser provada.

Alguns trabalhos de Svanberg sobre o MMA não estão descritos nesta revisão bibliográfica, como por exemplo o estudo [46] que traz detalhes adicionais sobre a implementação do método proposto em [45]. Já a parte do relatório [43] que propõe um método de pontos interiores para a resolução dos subproblemas é apresentada na Seção 3.2.

Em 1993, antes de Svanberg propor sua primeira versão globalmente convergente do MMA, Zillober [52] combinou o MMA com uma estratégia de busca-linear, obtendo um método de programação convexa sequencial globalmente convergente. Apenas tomar a solução do subproblema MMA como o próximo iterando não fornece um método globalmente convergente, de modo que, baseado nas versões anteriores do método (1987 e 1993), após obter a solução de cada subproblema MMA, Zillober usou a condição de Armijo para a função de mérito Lagrangiano Aumentado associada ao problema original (1.1) dada por:

$$\mathcal{L}_A(x, \lambda, \mu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^M \psi(f_i(x), \lambda_i, \mu)$$

em que

$$\psi(f, \lambda, \mu) = \begin{cases} \lambda f + \frac{1}{2\mu} f^2 & \text{se } f + \mu\lambda \geq 0, \\ -\frac{\mu}{2} \lambda^2 & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

e $M = m + 2n$ pois as restrições de caixa são escritas na forma $f_i(x) \leq 0$. Como os pontos estacionários do problema (1.1) e da função de mérito Lagrangiano Aumentado estão associados, a aceitação da solução de um subproblema MMA como próximo iterando externo se dá pelo decréscimo obtido pela função \mathcal{L}_A .

Em 2001, Zillober [53] estendeu a sua versão globalmente convergente de programação convexa sequencial para o caso que inclui restrições de igualdade. Agora, o problema a ser resolvido (1.1) é substituído por uma sequência de subproblemas mais fáceis de serem resolvidos, nos quais a função objetivo é aproximada por um modelo estritamente convexo, as restrições de desigualdade são aproximadas por modelos convexos (como em [52]) enquanto

as restrições de igualdade são aproximadas por modelos lineares. Também, em vez de usar o mesmo parâmetro de penalidade para todas as restrições, cada restrição possui seu próprio parâmetro, assim como é proposto um esquema melhorado para a atualização destes.

Em 2003, Ni [35] propôs um algoritmo globalmente convergente que combina o método das assíntotas móveis com uma técnica de região de confiança, com o objetivo de resolver o seguinte problema de otimização com restrições de caixa (sem restrições de igualdade ou desigualdade)

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && f(x) \\ & \text{sujeito a} && x^{\min} \leq x \leq x^{\max}. \end{aligned}$$

A cada iteração, o seguinte subproblema separável e convexo é resolvido

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{d \in \mathbb{R}^n} && m(x, d) = f(x) + \sum_{j=1}^n \phi_j(d_j) \\ & \text{sujeito a} && d_j^{\min} \leq d_j \leq d_j^{\max}, \quad j = 1, \dots, n, \end{aligned} \tag{1.53}$$

onde

$$d_j^{\min} = \max\{-\Delta_j, x_j^{\min} - x_j\}, \quad d_j^{\max} = \min\{\Delta_j, x_j^{\max} - x_j\},$$

e Δ é o raio da região de confiança, ou seja, a região viável do subproblema é a intersecção da caixa original com a região de confiança. Ainda

$$\phi_j(d_j) = \begin{cases} \frac{g_j d_j (u_j - x_j)}{u_j - x_j - d_j} + \frac{\varepsilon_j d_j^2}{(u_j - x_j - d_j)(x_j - l_j + d_j)}, & j \in I^+ \\ \frac{g_j d_j (x_j - l_j)}{x_j - l_j + d_j} + \frac{\varepsilon_j d_j^2}{(u_j - x_j - d_j)(x_j - l_j + d_j)}, & j \in I^- \end{cases}$$

onde $I^+ = \{j/g_j \geq 0\}$, $I^- = \{j/g_j < 0\}$, $\nabla f(x) = (g_1, \dots, g_n)^T$, ε_j , l_j e u_j são parâmetros tais que

$$l_j < x_j < u_j, \quad \varepsilon_j > 0, \quad u_j - x_j - d_j > 0, \quad x_j - l_j + d_j > 0,$$

para $d_j \in [d_j^{\min}, d_j^{\max}]$, $j = 1, \dots, n$. É verdade que $\phi_j(d_j) > 0$, portanto o problema (1.53) é separável e convexo. Assim, ele é equivalente a n subproblemas unidimensionais

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{d_j} && \phi_j(d_j) \\ & \text{sujeito a} && d_j^{\min} \leq d_j \leq d_j^{\max}, \end{aligned}$$

sendo que este último subproblema possui uma única solução ótima, que pode ser obtida

resolvendo $\phi'_j(d_j) = 0$. Ainda neste estudo, Ni usa o raio da região de confiança na atualização das assíntotas, obtendo assim a convergência global do algoritmo.

Em 2008, Wang e Ni [48] apresentaram um novo trabalho sobre o método das assíntotas móveis, projetado para resolver problemas irrestritos $\min f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$. Este novo estudo usa regiões de confiança, de modo que as restrições presentes nos subproblemas são do tipo $|d_j| \leq \Delta_j$, $j = 1, \dots, n$. Ainda, uma técnica de busca-linear é utilizada caso o passo de região de confiança fracasse.

Em 1997, Zhang e Fleury [50] expuseram um método das assíntotas móveis generalizado (GMMA), no qual as aproximações $g_i^{(k)}$ são dadas por

$$g_i^{(k)}(x) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}^{(k)}}{u_{ij}^{(k)} - x_j} + \frac{q_{ij}^{(k)}}{x_j - l_{ij}^{(k)}} \right) + r_i^{(k)}, \quad (1.54)$$

em que

$$\begin{aligned} p_{ij}^{(k)} &= (u_{ij}^{(k)} - x_j^{(k)})^2 \max \left\{ 0, \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\}, \\ q_{ij}^{(k)} &= (x_j^{(k)} - l_{ij}^{(k)})^2 \max \left\{ 0, -\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right\}, \\ r_i^{(k)} &= f_i(x^{(k)}) - \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}^{(k)}}{u_{ij}^{(k)} - x_j^{(k)}} + \frac{q_{ij}^{(k)}}{x_j^{(k)} - l_{ij}^{(k)}} \right). \end{aligned}$$

A única diferença entre o GMMA e a versão original do MMA é que cada variável x_j em cada função f_i possui a sua própria assíntota l_{ij} ou u_{ij} . Esta generalização torna possível caracterizar cada aproximação de forma independente.

Neste caso, as assíntotas são calculadas por

$$l_{ij}^{(k)} = x_j^{(k)} - s_i(x_j^{(k-1)} - l_{ij}^{(k-1)}), \quad (1.55a)$$

$$u_{ij}^{(k)} = x_j^{(k)} + s_i(u_{ij}^{(k-1)} - x_j^{(k-1)}), \quad (1.55b)$$

onde o fator s_i é ajustado para que a função original e sua aproximação concordem quando avaliadas no ponto anterior, ou seja, $f_i(x^{(k-1)}) = g_i^{(k)}(x^{(k-1)})$. De fato, ao substituir as expressões (1.55) na aproximação GMMA (1.54) avaliada em $x^{(k-1)}$, uma função unidimensional $\tilde{g}_i(s_i)$ é obtida, de modo que s_i corresponde à solução do sistema não-linear

$$\tilde{g}_i(s_i) = f_i(x^{(k-1)}).$$

Em 2002, Bruyneel, Duysinx e Fleury [11] propuseram uma versão do MMA que utiliza os gradientes calculados em dois pontos consecutivos, tentando assim melhorar a qualidade das aproximações. A proposta é baseada na versão de 1995 do MMA, mas em vez de usar as expressões (1.51) e (1.52) para os coeficientes $p_{ij}^{(k)}$ e $q_{ij}^{(k)}$, respectivamente, estes são determinados igualando as derivadas de primeira ordem das funções originais $f_i, i = 0, 1, \dots, m$, na estimativa corrente $x^{(k)}$ e na anterior $x^{(k-1)}$. Ou seja, os valores de $p_{ij}^{(k)}$ e $q_{ij}^{(k)}$ são extraídos dos seguintes conjuntos de equações:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) &= \frac{p_{ij}^{(k)}}{(u_j^{(k)} - x_j^{(k)})^2} - \frac{q_{ij}^{(k)}}{(x_j^{(k)} - l_j^{(k)})^2}, \\ \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k-1)}) &= \frac{p_{ij}^{(k)}}{(u_j^{(k)} - x_j^{(k-1)})^2} - \frac{q_{ij}^{(k)}}{(x_j^{(k-1)} - l_j^{(k)})^2},\end{aligned}$$

evitando assim o uso dos parâmetros não-monotônicos $\rho_i^{(k)}$. Além disso, esta proposta foi também considerada associando um par de assíntotas $l_{ij}^{(k)}$ e $u_{ij}^{(k)}$ para cada variável x_j e cada função f_i , como feito em (1.54) e (1.55).

Capítulo 2

Duas modificações globalmente convergentes para o MMA: atualização espectral e condição conservadora relaxada

Neste capítulo, propomos modificações no MMA, baseadas no parâmetro espectral para a atualização de um importante parâmetro das aproximações das funções originais e na relaxação da condição conservadora. A informação de segunda ordem presente no parâmetro espectral é incluída nas funções que definem as aproximações racionais da função objetivo e das restrições não-lineares no início de cada iteração, de modo a melhorar a qualidade das aproximações. Esta proposta resultou no artigo [26]. A condição conservadora é relaxada por meio de uma sequência forçante controlada somável, de maneira que a convergência global é mantida. O algoritmo que reúne estas duas idéias é apresentado, assim como as propriedades de convergência do método modificado. Por fim, os resultados dos testes computacionais realizados introduzindo no MMA a atualização espectral e a condição conservadora relaxada são descritos.

2.1 Informação de segunda ordem e o parâmetro espectral

Avaliando as derivadas parciais de segunda ordem não-mistas das aproximações $g_i^{(k,\ell)}$ dadas em (1.30) na estimativa corrente $x^{(k)}$, obtemos a seguinte expressão:

$$\frac{\partial^2 g_i^{(k,\ell)}}{\partial x_j^2}(x^{(k)}) = \frac{2 \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right|}{\sigma_j^{(k)}} + \frac{\rho_i^{(k,\ell)}}{(\sigma_j^{(k)})^2}. \quad (2.1)$$

Lembrando que as funções $g_i^{(k,\ell)}$ são aproximações de primeira ordem das funções originais f_i na estimativa corrente $x^{(k)}$, como vimos em (1.29), o modelo será ainda melhor se também exigirmos que

$$\frac{\partial^2 g_i^{(k,\ell)}}{\partial x_j^2}(x^{(k)}) = \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j^2}(x^{(k)}), \quad (2.2)$$

para todo $j = 1, \dots, n$. Se aproximarmos de alguma maneira as derivadas parciais de segunda ordem não-mistas das funções f_i , e usarmos a relação (2.1), podemos conseguir uma nova estratégia para atualizar os parâmetros ρ_i . Nossa escolha para aproximar estas derivadas é baseada no parâmetro espectral, que detalharemos a seguir.

Sabemos pelo Teorema do Valor Médio do Cálculo Integral (ver [36, p.15]) que, dada uma função continuamente diferenciável $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, temos que

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x + \alpha(y - x))^T (y - x),$$

para algum $\alpha \in (0, 1)$. Ainda, se f é duas vezes continuamente diferenciável, então

$$\nabla f(y) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x + \alpha(y - x)) d\alpha (y - x).$$

Tomando $s = y - x$, o escalar

$$\eta = \frac{s^T t}{s^T s}, \quad (2.3)$$

onde $t = \nabla f(y) - \nabla f(x)$, ou ainda pelo Teorema do Valor Médio do Cálculo Integral

$$t = \left(\int_0^1 \nabla^2 f(x + \alpha s) d\alpha \right) s,$$

define um quociente de Rayleigh relativo à matriz Hessiana média $(\int_0^1 \nabla^2 f(x + \alpha s) d\alpha)$. O valor deste quociente está entre o menor e o maior autovalor da matriz Hessiana média, o

que motiva a denominação *parâmetro espectral* para o parâmetro (2.3). Então, se exigirmos que as matrizes Hessianas das funções f_i sejam aproximadas por matrizes escalares, podemos considerar que ηI é a matriz escalar que melhor aproxima a matriz Hessiana média. Para mais detalhes sobre o parâmetro espectral veja [9, 16] e suas referências.

No contexto do MMA, a idéia é usar o parâmetro espectral (2.3) como uma aproximação para as derivadas parciais de segunda ordem não-mistas das funções f_i , isto é,

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j^2}(x) \approx \eta_i, \forall j. \quad (2.4)$$

Tal aproximação será usada no início de cada iteração externa para obter $\rho_i^{(k,0)}$, melhorando assim a qualidade das aproximações das funções originais.

Os pontos usados para calcular a direção s são a estimativa corrente e a anterior, ou seja, $s^{(k)} = x^{(k)} - x^{(k-1)}$. Também é necessário calcular os vetores $t_i^{(k)} = \nabla f_i(x^{(k)}) - \nabla f_i(x^{(k-1)})$, de modo que para $i = 0, 1, \dots, m$ temos

$$\eta_i^{(k)} = \frac{(s^{(k)})^T t_i^{(k)}}{(s^{(k)})^T s^{(k)}}. \quad (2.5)$$

A motivação para usar o parâmetro espectral no MMA vem da necessidade de evitar o cálculo das derivadas de segunda ordem das funções originais f_i , $i = 0, 1, \dots, m$, devido ao custo envolvido. Portanto, uma maneira de usar informação de segunda ordem é aproximar as matrizes Hessianas destas funções por matrizes que possuam uma estrutura simples e tenham um custo computacional baixo, matrizes escalares neste caso.

Combinando (2.1), (2.2) e (2.4) para $\ell = 0$ obtemos

$$\eta_i^{(k)} \approx \frac{2 \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right|}{\sigma_j^{(k)}} + \frac{\rho_i^{(k,0)}}{(\sigma_j^{(k)})^2}, \forall j = 1, \dots, n.$$

Agora, $\rho_i^{(k,0)}$ pode ser calculado através da solução do seguinte problema de quadrados mínimos:

$$\underset{\rho_i}{\text{minimizar}} \quad \sum_{j=1}^n \left(\rho_i + b_{ij} - \eta_i^{(k)} (\sigma_j^{(k)})^2 \right)^2, \quad (2.6)$$

onde

$$b_{ij} = 2 \sigma_j^{(k)} \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)}) \right|. \quad (2.7)$$

Como a função objetivo do problema (2.6) é uma quadrática estritamente convexa em ρ_i ,

segue que seu minimizador ρ_i^* é dado por

$$\rho_i^* = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(\eta_i^{(k)} (\sigma_j^{(k)})^2 - b_{ij} \right), \quad (2.8)$$

e será convenientemente usado em nosso algoritmo.

2.2 Relaxando a condição conservadora

Ao realizar alguns experimentos numéricos, notamos que a condição conservadora estrita, imposta por Svanberg [45] e definida em (1.19), exige muitas vezes a construção e resolução de subproblemas adicionais, sem obter progresso significativo, principalmente nas iterações iniciais. Para contornar esta dificuldade, optamos por relaxar a condição conservadora da seguinte maneira. Diremos que um iterando $\hat{x}^{(k,\ell)}$ satisfaz a *condição conservadora relaxada* se

$$f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) \leq g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \mu_k \max \left\{ 1, \left| g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) \right| \right\}, \quad (2.9)$$

para todo $i \in \{0, 1, \dots, m\}$, onde

$$\sum_{k=1}^{\infty} \mu_k \leq \mu < \infty. \quad (2.10)$$

Assim, a sequência $\{\mu_k\}_{k=1}^{\infty}$ tende a zero quando as iterações externas avançam, de modo que a condição conservadora (1.19) é relaxada no início e atingida no final. Naturalmente, a condição conservadora original é obtida se $\mu_k \equiv 0, \forall k$. A Figura 2.1 ilustra uma situação em que a condição conservadora original (1.19) é violada, e para μ_k suficientemente grande a condição conservadora relaxada (2.9) é verificada.

Para simplificar a notação, na sequência do texto tomaremos

$$\bar{\mu}_{k,i} = \mu_k \max \left\{ 1, \left| g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) \right| \right\}. \quad (2.11)$$

Uma maneira simples de relaxar a condição conservadora é fazer $f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) \leq g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \mu_k g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) = (1 + \mu_k) g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)})$. Porém, se $g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)})$ é nulo ou negativo, a condição conservadora não é relaxada. Assim, o termo $\bar{\mu}_{k,i}$ garante que haja uma relaxação, independentemente do valor ou do sinal da aproximação $g_i^{(k,\ell)}$ no ponto $\hat{x}^{(k,\ell)}$. O módulo presente em (2.11) é necessário para o caso em que o valor $g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)})$ é negativo, enquanto o máximo é essencial para o caso em que $g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)})$ vale zero. O valor escolhido 1 não afeta a magnitude da relaxação, uma vez que se $|g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)})|$ for menor que 1 nas iterações iniciais, onde μ_k

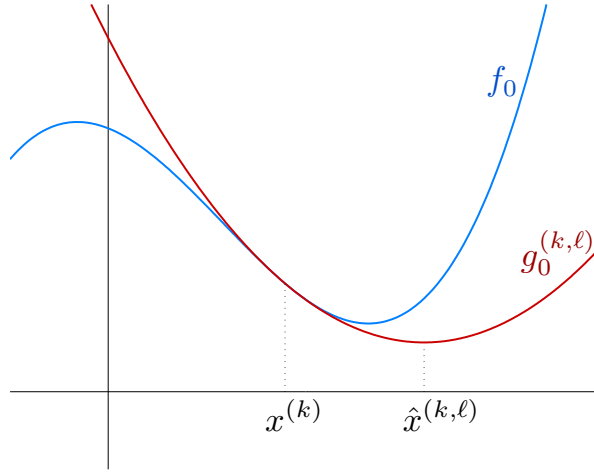


Figura 2.1: Exemplo em que a condição conservadora original é violada e a condição conservadora relaxada é verificada se μ_k for grande o suficiente.

ainda pode ser grande, teremos uma relaxação grande, o que é desejado; e se $|g_i^{(k, \ell)}(\hat{x}^{(k, \ell)})|$ for menor que 1 nas iterações finais, o valor de μ_k será pequeno, de maneira que a relaxação será pequena.

Vimos em (1.20) e (1.21) que a condição conservadora (1.19) fornece redução estrita do valor da função objetivo e iterandos viáveis para o problema (1.18). Portanto, ao relaxá-la, os iterandos externos do problema (1.18) podem ser inviáveis, principalmente nas iterações iniciais, e o valor da função objetivo pode aumentar, mas de uma maneira controlada.

Em relação à análise da convergência global, vale mencionar que em [45], como a sequência $\{F_0(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$, em que $F_0(x, y) = f_0(x) + \sum (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2)$, é monotonicamente decrescente e limitada inferiormente, é convergente. Ao relaxar a condição (1.19), apesar de perdermos o comportamento monotônico de $F_0(x^{(k)}, y^{(k)})$, sua convergência ainda vale devido à hipótese (2.10) de a sequência $\{\mu_k\}_{k=1}^{\infty}$ ser somável. Os outros resultados de convergência presentes em [45] continuam valendo usando o fato de $\mu_k \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$, como veremos na Seção 2.4. A escolha adotada para a sequência $\{\mu_k\}_{k=1}^{\infty}$ é dada na Seção 2.5, junto com a descrição dos resultados numéricos.

2.3 O Algoritmo

O seguinte algoritmo descreve todo o processo, dada uma estimativa inicial $x^{(1)} \in X$. Neste algoritmo, cometemos um abuso de notação, para simplificar a leitura. Omitimos a variável artificial $y \in \mathbb{R}^m$, e apresentamos toda a idéia apenas com as variáveis originais $x \in \mathbb{R}^n$. Também, nossas modificações para o MMA estão destacadas; removendo-as obtemos exatamente o algoritmo original de Svanberg.

Algoritmo 1: Método das Assíntotas Móveis com atualização espectral e condição conservadora relaxada

Passo 1. *Inicialização*

Defina $\rho_i^{(1,0)} = 1$, como em (1.37a), para $i = 0, 1, \dots, m$.

Tome $k = 1$.

Passo 2. *Critério de parada*

Se $x^{(k)}$ satisfaz as condições de KKT do problema (1.18),

pare e tome $x^{(k)}$ como solução.

Passo 3. *Cálculo dos parâmetros $\rho_i^{(k,0)}$ e $\sigma_j^{(k)}$ e das assíntotas $l_j^{(k)}$ e $u_j^{(k)}$*

Tome $\ell = 0$.

Se $k > 1$, calcule

$$s^{(k)} = x^{(k)} - x^{(k-1)},$$

$$t_i^{(k)} = \nabla f_i(x^{(k)}) - \nabla f_i(x^{(k-1)}) \text{ para } i = 0, 1, \dots, m,$$

$$\eta_i^{(k)} = \min \left\{ \eta_i^{max}, \max \left\{ \eta_i^{min}, \frac{(s^{(k)})^T t_i^{(k)}}{(s^{(k)})^T s^{(k)}} \right\} \right\} \text{ para } i = 0, 1, \dots, m,$$

$$b_{ij} \text{ como em (2.7) para } i = 0, 1, \dots, m \text{ e } j = 1, \dots, n,$$

$$\rho_i^* \text{ como em (2.8) para } i = 0, 1, \dots, m.$$

$$\text{Para cada } i = 0, 1, \dots, m, \text{ se } \rho_i^* > 0, \text{ tome } \rho_i^{(k,0)} = \rho_i^*.$$

$$\text{Caso contrário, calcule } \rho_i^{(k,0)} \text{ como em (1.37b).}$$

$$\text{Calcule } \sigma_j^{(k)} \text{ para } j = 1, \dots, n \text{ como em (1.40)-(1.42).}$$

$$\text{Calcule } l_j^{(k)} = x_j^{(k)} - \sigma_j^{(k)} \text{ e } u_j^{(k)} = x_j^{(k)} + \sigma_j^{(k)}, \text{ para } j = 1, \dots, n.$$

Passo 4. *Geração e resolução do subproblema*

Calcule os coeficientes $p_{ij}^{(k,\ell)}$, $q_{ij}^{(k,\ell)}$ e $r_i^{(k,\ell)}$, para $i = 0, 1, \dots, m$ e $j = 1, \dots, n$ como em (1.31), (1.32) e (1.33), respectivamente.

Defina as aproximações $g_i^{(k,\ell)}$, para $i = 0, 1, \dots, m$ como em (1.30).

Resolva o subproblema (1.22), obtendo $\hat{x}^{(k,\ell)}$.

Passo 5. *Teste da condição conservadora relaxada*

Calcule μ_k de modo que $\{\mu_k\}_{k=1}^{\infty}$ satisfaça (2.10).

Se a condição conservadora relaxada (2.9) não é satisfeita para algum índice $i \in \{0, 1, \dots, m\}$ então, para tal índice

Atualize os parâmetros $\rho_i^{(k,\ell)}$ como em (1.39), tome $\ell = \ell + 1$ e vá para o **Passo 4**.

Caso contrário, tome $x^{(k+1)} = \hat{x}^{(k,\ell)}$, $k = k + 1$ e vá para o **Passo 2**.

As principais diferenças entre nossa abordagem e a versão do MMA de 2002 é a maneira em que os parâmetros $\rho_i^{(k,0)}$ são calculados no início de cada iteração externa e a condição conservadora relaxada do Passo 5. Note que a condição conservadora relaxada é usada no teste de aceitação da iteração interna para definir o próximo iterando externo, de modo que a convergência global é mantida desde que a sequência forçante seja escolhida satisfazendo (2.10).

Os parâmetros espectrais $\eta_i^{(k)}$, $i = 0, \dots, m$, usados no Passo 3 são as projeções de (2.5) no intervalo $[\eta_i^{\min}, \eta_i^{\max}]$, com $0 < \eta_i^{\min} < \eta_i^{\max} < +\infty$. Esta salva-guarda é feita para prevenir valores de $\eta_i^{(k)}$ negativos e positivos mas muito pequenos, ou muito grandes.

2.4 Análise teórica da convergência global

Os resultados desta seção mostram propriedades do método e da sua convergência quando adotamos a atualização espectral e a condição conservadora relaxada.

Nesta seção, consideramos como ponto KKT do problema (1.18) apenas o par $(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ que satisfaz as condições KKT deste problema junto com multiplicadores de Lagrange correspondentes, sem a menção a tais multiplicadores.

Seja Ω o conjunto de pontos KKT do problema aumentado (1.18). Sabemos que Ω é não-vazio pelas Proposições 3 e 4, com pequenas adaptações para contemplar o termo quadrático em y . Denotaremos por $\|\Omega - (x^{(k)}, y^{(k)})\|$ a distância Euclidiana do ponto $(x^{(k)}, y^{(k)})$ ao conjunto Ω , ou seja,

$$\|\Omega - (x^{(k)}, y^{(k)})\| = \inf_{(x,y) \in \Omega} \{\|(x, y) - (x^{(k)}, y^{(k)})\|\}.$$

Teorema 1. *Se o Algoritmo 1 é aplicado a um problema na forma ampliada (1.18), então $\|\Omega - (x^{(k)}, y^{(k)})\| \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$.*

Em outras palavras, todo ponto limite da sequência gerada pelo Algoritmo 1 é um ponto KKT do problema (1.18). Para demonstrar este teorema, provaremos uma série de lemas

auxiliares. No primeiro deles mostramos que o algoritmo está bem definido, pois é necessário apenas um número finito de iterações internas para que a condição conservadora relaxada seja satisfeita.

Lema 1. *Em cada iteração externa k , apenas um número finito ℓ de iterações internas são necessárias até que se cumpra $f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) \leq g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \bar{\mu}_{k,i}$ para todo i , onde $\bar{\mu}_{k,i}$ é dado por (2.11).*

Demonstração: Pelo Teorema de Taylor temos que

$$g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) = g_i^{(k,\ell)}(x^{(k)}) + \nabla g_i^{(k,\ell)}(x^{(k)})^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 g_i^{(k,\ell)}(x^{(k)} + t_1 p) p$$

e

$$f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) = f_i(x^{(k)}) + \nabla f_i(x^{(k)})^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_i(x^{(k)} + t_2 p) p$$

para algum $t_1 \in (0, 1)$, algum $t_2 \in (0, 1)$ e $p = \hat{x}^{(k,\ell)} - x^{(k)}$. De (1.26) temos que

$$\nabla^2 g_i^{(k,\ell)}(x) = \nabla_{xx}^2 v_i(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) + \rho_i^{(k,\ell)} \nabla_{xx}^2 w(x, x^{(k)}, \sigma^{(k)})$$

e usando (1.29) obtemos:

$$\begin{aligned} g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) - f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \bar{\mu}_{k,i} &= \frac{1}{2} p^T \nabla^2 g_i^{(k,\ell)}(x^{(k)} + t_1 p) p - \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_i(x^{(k)} + t_2 p) p + \bar{\mu}_{k,i} \\ &= \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 v_i(x^{(k)} + t_1 p, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) p \\ &\quad + \frac{\rho_i^{(k,\ell)}}{2} p^T \nabla_{xx}^2 w(x^{(k)} + t_1 p, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) p \\ &\quad - \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_i(x^{(k)} + t_2 p) p + \bar{\mu}_{k,i}. \end{aligned}$$

Mas $\nabla_{xx}^2 v_i(x, \xi, \sigma) \geq 0$, $\forall (x, \xi, \sigma) \in D$, logo

$$\begin{aligned} g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) - f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \bar{\mu}_{k,i} &\geq \frac{\rho_i^{(k,\ell)}}{2} p^T \nabla_{xx}^2 w(x^{(k)} + t_1 p, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) p \\ &\quad - \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_i(x^{(k)} + t_2 p) p + \bar{\mu}_{k,i}. \end{aligned}$$

Dividindo os dois lados por $\|p\|^2$ obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\|p\|^2} \left(g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) - f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \bar{\mu}_{k,i} \right) &\geq \frac{\rho_i^{(k,\ell)}}{2\|p\|^2} p^T \nabla_{xx}^2 w(x^{(k)} + t_1 p, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) p \\ &\quad - \frac{1}{2\|p\|^2} p^T \nabla^2 f_i(x^{(k)} + t_2 p) p + \frac{\bar{\mu}_{k,i}}{\|p\|^2}. \end{aligned}$$

Definindo

$$\delta(X) \equiv \sup_{x,y \in X} \|x - y\|,$$

temos que $\|p\| \leq \delta(X)$ e então

$$\begin{aligned} \frac{1}{\|p\|^2} \left(g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) - f_i(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \bar{\mu}_{k,i} \right) &\geq \frac{\rho_i^{(k,\ell)}}{2\|p\|^2} p^T \nabla_{xx}^2 w(x^{(k)} + t_1 p, x^{(k)}, \sigma^{(k)}) p \\ &\quad - \frac{1}{2\|p\|^2} p^T \nabla^2 f_i(x^{(k)} + t_2 p) p + \frac{\bar{\mu}_{k,i}}{\delta(X)^2}. \end{aligned}$$

Considerando agora o pior caso para que a condição conservadora relaxada seja satisfeita, definimos os escalares τ e κ_i como sendo

$$\tau = \min_{x,\xi,\sigma,h} \{ h^T \nabla_{xx}^2 w(x, \xi, \sigma) h \mid (x, \xi, \sigma) \in D, h \in \mathbb{R}^n, h^T h = 1 \}, \quad (2.12)$$

$$\kappa_i = \max_{x,h} \{ h^T \nabla^2 f_i(x) h \mid x \in X, h \in \mathbb{R}^n, h^T h = 1 \}, \quad (2.13)$$

onde o conjunto D foi definido em (1.27). Note que como todos os conjuntos considerados são compactos, os valores mínimo e máximo estão bem definidos em (2.12) e (2.13), respectivamente. O escalar κ_i é finito pois a matriz Hessiana $\nabla^2 f_i(x)$ é contínua em X . O escalar τ é finito e estritamente positivo pois a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 w(x, \xi, \sigma)$ é definida positiva e contínua em todos os seus argumentos. Portanto, uma condição suficiente para que a desigualdade $g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \bar{\mu}_{k,i} \geq f_i(\hat{x}^{(k,\ell)})$ seja válida é que

$$\rho_i^{(k,\ell)} \tau + \frac{2\bar{\mu}_{k,i}}{\delta(X)^2} \geq \kappa_i.$$

Mas cada vez que $g_i^{(k,\ell)}(\hat{x}^{(k,\ell)}) + \bar{\mu}_{k,i} < f_i(\hat{x}^{(k,\ell)})$, o valor de $\rho_i^{(k,\ell)}$ correspondente é aumentado em pelo menos um fator de 1.1 (veja (1.39)). Isto pode ser feito apenas um número finito de vezes, para cada i , antes que $\rho_i^{(k,\ell)} \tau + 2\bar{\mu}_{k,i}/\delta(X)^2 \geq \kappa_i$ seja satisfeito. (Note que, para um k fixo, $\rho_i^{(k,\ell)}$ é não-decrescente em ℓ). ■

Uma consequência do Lema 1 é que podemos considerar apenas as iterações externas na análise da convergência global. Portanto, introduzimos a seguinte notação:

$$\begin{aligned} \hat{\ell}(k) &= \text{o número de iterações internas necessárias dentro da } k\text{-ésima iteração externa,} \\ \rho_i^{(k)} &= \rho_i^{(k, \hat{\ell}(k))} \quad \text{e} \quad g_i^{(k)}(x) = g_i^{(k, \hat{\ell}(k))}(x). \end{aligned}$$

Desta forma, o subproblema gerado na k -ésima iteração externa que fornecerá a próxima

estimativa (ou seja, cuja solução ótima satisfará a condição conservadora relaxada) é:

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & g_0^{(k)}(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2) \\ \text{sujeito a} \quad & g_i^{(k)}(x) - y_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ & x \in X^{(k)}, \quad y \geq 0, \end{aligned} \tag{2.14}$$

com $X^{(k)}$ dado em (1.24). A solução ótima do subproblema (2.14) é o novo iterando $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})$. Note que $f_i(x^{(k)}) = g_i^{(k)}(x^{(k)})$ e $f_i(x^{(k+1)}) \leq g_i^{(k)}(x^{(k+1)}) + \bar{\mu}_{k,i}$ para todo $i = 0, 1, \dots, m$.

O lema seguinte fornece uma cota superior para os parâmetros $\rho_i^{(k)}$, $i = 0, 1, \dots, m$, e o parâmetro espectral é usado em sua demonstração.

Lema 2. *Para cada $i = 0, 1, \dots, m$, existe um número finito ρ_i^{max} tal que $\rho_i^{(k)} \leq \rho_i^{max}$ para todas as iterações externas k .*

Demonstração: Pela demonstração do Lema 1, se $\rho_i^{(k,0)}\tau + 2\bar{\mu}_{k,i}/\delta(X)^2 \geq \kappa_i$ para todo k , então a condição conservadora relaxada sempre é verificada. Neste caso, para as iterações externas k em que os valores de $\rho_i^{(k,0)}$ gerados pelo Algoritmo 1 são calculados a partir de (1.37b), uma cota superior para $\rho_i^{(k)}$ é $\rho_i^{max} = \rho_i^{(1,0)} = 1$. Para as iterações externas k em que os valores de $\rho_i^{(k,0)}$ gerados pelo Algoritmo 1 são calculados pela expressão (2.8) com o uso do parâmetro espectral, como $\eta_i^{min} \leq \eta_i^{(k)} \leq \eta_i^{max}$, $\sigma_j^{min} \leq \sigma_j^{(k)} \leq \sigma_j^{max}$ e $b_{ij} \geq 0$ para cada $i = 0, 1, \dots, m$ e $j = 1, \dots, n$, uma cota superior para $\rho_i^{(k)}$ é $\rho_i^{max} = \max\{1, \eta_i^{max}\hat{\sigma}^2\}$ onde $\hat{\sigma} = \max_j \{\sigma_j^{max}\}$.

Agora, como $\hat{\ell}(k)$ é o número de iterações internas realizadas dentro da k -ésima iteração externa, o parâmetro $\rho_i^{(k, \hat{\ell}(k))}$ fez com que a condição conservadora relaxada fosse verificada. Já o parâmetro $\rho_i^{(k, \hat{\ell}(k)-1)}$ não verificou a condição conservadora relaxada, logo

$$\rho_i^{(k, \hat{\ell}(k)-1)}\tau + 2\bar{\mu}_{k,i}/\delta(X)^2 < \kappa_i.$$

De (1.39) concluímos que $\rho_i^{(k, \ell+1)} \leq 10\rho_i^{(k, \ell)}$ para cada iteração interna ℓ dentro da iteração externa k , assim:

$$\rho_i^{(k)} = \rho_i^{(k, \hat{\ell}(k))} \leq 10\rho_i^{(k, \hat{\ell}(k)-1)} < 10\left(\frac{\kappa_i}{\tau} - \frac{2\bar{\mu}_{k,i}}{\tau\delta(X)^2}\right) < 10\frac{\kappa_i}{\tau}. \tag{2.15}$$

Portanto, a cota superior efetiva para $\rho_i^{(k)}$ é

$$\rho_i^{max} = \max\left\{1, \eta_i^{max}\hat{\sigma}^2, 10\frac{\kappa_i}{\tau}\right\}. \quad \blacksquare$$

É interessante notar que a cota superior para $\rho_i^{(k)}$ obtida em (2.15) é a mesma que aquela encontrada por Svanberg em [45]. Embora ao relaxar a condição conservadora a cota superior para $\rho_i^{(k)}$ não diminui, em termos práticos, como $\bar{\mu}_{k,i} > 0, \forall k$ e $\tau > 0$, valores menores de $\rho_i^{(k)}$ são usados em cada iteração externa k .

Seja o conjunto Q dado por

$$Q = \{\rho \in \mathbb{R}^{m+1} \mid 0 < \rho_i^{min} \leq \rho_i \leq \rho_i^{max}, i = 0, 1, \dots, m\}.$$

É importante observar que a cota inferior ρ_i^{min} para o parâmetro ρ_i deve ser estritamente positiva pois é a não-negatividade destes parâmetros que fornece coeficientes p_{ij} e q_{ij} estritamente positivos simultaneamente, fazendo com que ambas as assíntotas l_j e u_j tenham um papel ativo na aproximação MMA.

Sejam as funções F_i , para $x \in X$ e $y \in \mathbb{R}^m$, dadas por

$$\begin{aligned} F_0(x, y) &= f_0(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2), \\ F_i(x, y) &= f_i(x) - y_i, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Assim, o problema aumentado (1.18) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && F_0(x, y) \\ &\text{sujeito a} && F_i(x, y) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ &&& x \in X, y \geq 0. \end{aligned} \tag{2.16}$$

Sejam as funções G_i , para $(x, \xi, \sigma) \in D, \rho \in Q$ e $y \in \mathbb{R}^m$, dadas por

$$\begin{aligned} G_0(x, y, \xi, \sigma, \rho) &= v_0(x, \xi, \sigma) + \rho_0 w(x, \xi, \sigma) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2), \\ G_i(x, y, \xi, \sigma, \rho) &= v_i(x, \xi, \sigma) + \rho_i w(x, \xi, \sigma) - y_i, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Note que cada função G_i é contínua no conjunto no qual está definida.

Para $(\xi, \sigma, \rho) \in X \times S \times Q$ dados, seja $\text{PSUB}(\xi, \sigma, \rho)$ o seguinte problema nas variáveis (x, y) :

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && G_0(x, y, \xi, \sigma, \rho) \\ &\text{sujeito a} && G_i(x, y, \xi, \sigma, \rho) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ &&& x \in X(\xi, \sigma), y \geq 0, \end{aligned} \tag{2.17}$$

com $X(\xi, \sigma)$ definido em (1.23). Então, o subproblema (2.14) é equivalente ao problema $\text{PSUB}(x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)})$.

Os dois lemas a seguir estão apresentados exatamente como em [45], pois dizem respeito à solução do problema $PSUB(\xi, \sigma, \rho)$ indicado em (2.17), e assim a condição conservadora relaxada não é empregada em suas demonstrações.

Lema 3. *Para cada $\xi \in X, \sigma \in S$ e $\rho \in Q$ dados, existe uma única solução ótima de $PSUB(\xi, \sigma, \rho)$. Esta solução é também o único ponto KKT de $PSUB(\xi, \sigma, \rho)$.*

Demonstração: A existência de uma solução ótima segue por argumentos similares aos da demonstração da Proposição 3. A unicidade segue do problema obtido eliminando y ser estritamente convexo em x . Considere agora a condição de qualificação de Slater (ver [5, p.331]): seja x^* um minimizador local do problema

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && f(x) \\ & \text{sujeito a} && g_1(x) \leq 0, \dots, g_m(x) \leq 0, \end{aligned} \tag{2.18}$$

em que f e g_i são funções continuamente diferenciáveis de \mathbb{R}^n em \mathbb{R} . Suponha que as funções g_i são convexas e que existe um vetor viável \bar{x} tal que

$$g_i(\bar{x}) < 0, \quad \forall i \in A(x^*)$$

onde $A(x)$ define o conjunto das restrições ativas de (2.18) em x , para qualquer ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Então existem multiplicadores de Lagrange que, junto com x^* , satisfazem as condições KKT do problema.

Agora, é verdade que dado um vetor d tal que $\nabla g_i(x^*)^T d < 0, \forall i \in A(x^*)$ então existe um vetor \bar{x} tal que $g_i(\bar{x}) < 0, \forall i \in A(x^*)$. Logo, tomando o vetor d de maneira análoga à demonstração da Proposição 4, a condição de qualificação de Slater é satisfeita para o problema convexo $PSUB(\xi, \sigma, \rho)$. Portanto, as condições de KKT são necessárias e suficientes para um ótimo global. ■

Para que a única solução ótima de $PSUB(\xi, \sigma, \rho)$ fosse também o único ponto KKT de $PSUB(\xi, \sigma, \rho)$, bastaria que esta solução verificasse alguma condição de qualificação, por exemplo, a condição de qualificação de Arrow, Hurwicz e Uzawa (usada na Proposição 4). No entanto, a condição de qualificação de Slater é a mais adequada neste caso pois as funções $G_i, i = 1, \dots, m$ são convexas. Assim, $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})$ é o único ponto KKT de $PSUB(x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)})$.

Lema 4. *Sejam dados $\sigma \in S$ e $\rho \in Q$. Um ponto (\hat{x}, \hat{y}) dado é um ponto KKT do problema aumentado (1.18) se e somente se (\hat{x}, \hat{y}) é um ponto KKT do subproblema $PSUB(\hat{x}, \sigma, \rho)$.*

Demonstração: Dado $\hat{x} \in X$, seja $B(\hat{x}, \epsilon) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - \hat{x}\| < \epsilon\}$, e note que existe um $\epsilon > 0$ tal que $X \cap B(\hat{x}, \epsilon) = X(\hat{x}, \sigma) \cap B(\hat{x}, \epsilon)$. Isto implica que (\hat{x}, \hat{y}) é a solução ótima

do problema (estritamente convexo) $\text{PSUB}(\hat{x}, \sigma, \rho)$ se e somente se (\hat{x}, \hat{y}) é a solução ótima de $\text{PSUB}(\hat{x}, \sigma, \rho)$ com as restrições $x \in X(\hat{x}, \sigma)$ substituídas pelas restrições (mais fracas) $x \in X$. Além disso, vale para $i = 0, 1, \dots, m$:

$$\begin{aligned} G_i(\hat{x}, \hat{y}, \hat{x}, \sigma, \rho) &= F_i(\hat{x}, \hat{y}), \\ \frac{\partial G_i}{\partial x_j}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{x}, \sigma, \rho) &= \frac{\partial F_i}{\partial x_j}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \frac{\partial G_i}{\partial y_i}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{x}, \sigma, \rho) &= \frac{\partial F_i}{\partial y_i}(\hat{x}, \hat{y}). \end{aligned}$$

Estas observações implicam que (\hat{x}, \hat{y}) é um ponto KKT do subproblema $\text{PSUB}(\hat{x}, \sigma, \rho)$ se e somente se (\hat{x}, \hat{y}) é um ponto KKT do problema (2.16). ■

Em particular, se $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) = (x^{(k)}, y^{(k)})$, então $(x^{(k)}, y^{(k)})$ é um ponto KKT do problema aumentado (1.18), e então o algoritmo deve parar. De agora em diante, assumiremos portanto que $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \neq (x^{(k)}, y^{(k)})$ para todo k .

Vimos em (1.20) e (1.21) que a condição conservadora (1.19) fornece redução estrita no valor da função objetivo F_0 e iterandos viáveis para o problema (2.16). No lema seguinte vamos mostrar que, considerando a condição conservadora relaxada (2.9), os iterandos externos do problema (2.16) podem ser inviáveis e os valores de F_0 podem aumentar, mas de uma forma controlada.

Lema 5. *Cada iterando gerado é uma solução controladamente inviável do problema (2.16), isto é, $F_i(x^{(k)}, y^{(k)}) \leq \bar{\mu}_{k-1,i}$ para $i \geq 1$ e $k \geq 2$. Além disso, $F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) < F_0(x^{(k)}, y^{(k)}) + \bar{\mu}_{k,0}$ para $k \geq 1$.*

Demonstração: A estimativa inicial $(x^{(1)}, y^{(1)})$ é viável por construção. Logo, para $i \geq 1$ temos

$$F_i(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \leq G_i(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) + \bar{\mu}_{k,i} \leq \bar{\mu}_{k,i},$$

em que a primeira desigualdade se dá pela condição conservadora relaxada e a segunda pela viabilidade do problema $\text{PSUB}(x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)})$. Além disso,

$$\begin{aligned} F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) &\leq G_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) + \bar{\mu}_{k,0} \\ &< G_0(x^{(k)}, y^{(k)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) + \bar{\mu}_{k,0} \\ &= F_0(x^{(k)}, y^{(k)}) + \bar{\mu}_{k,0}, \end{aligned}$$

em que a primeira desigualdade vem da condição conservadora relaxada; a segunda desigualdade se dá pelo Lema 3 e pela suposição de que $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \neq (x^{(k)}, y^{(k)})$ para todo k ;

e a igualdade vem do fato que os modelos são aproximações de primeira ordem das funções originais na estimativa corrente. ■

O Lema 5 difere do Lema 7.6 de [45] pois, ao relaxar a condição conservadora, perdemos a viabilidade dos iterandos externos do problema original aumentado e a redução estrita do valor da função objetivo, também do problema (2.16). De fato, pelas expressões apresentadas no Lema 5 notamos que a perda destas propriedades acontece por causa dos valores $\bar{\mu}_{k,i}$. No entanto, como $\bar{\mu}_{k,i} \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$, estas propriedades são satisfeitas assintoticamente.

Lema 6. *Todos os iterandos $(x^{(k)}, y^{(k)})$ permanecem em um conjunto compacto.*

Demonstração: Cada iterando satisfaz $x^{(k)} \in X$, que é um conjunto compacto. Agora, sejam as funções \tilde{g}_i , para $(x, \xi, \sigma) \in D$ e $\rho \in Q$, dadas por

$$\tilde{g}_i(x, \xi, \sigma, \rho) = v_i(x, \xi, \sigma) + \rho_i w(x, \xi, \sigma).$$

Cada função \tilde{g}_i é contínua no conjunto compacto no qual está definida.

Se aplicarmos a idéia da Proposição 1 ao subproblema (2.14), tomando $x^{(k+1)} \in X^{(k)}$ fixo, obtemos $y_i^{(k+1)} = \max\{0, g_i^{(k)}(x^{(k+1)})\}$. Logo,

$$\begin{aligned} 0 \leq y_i^{(k+1)} &\leq g_i^{(k)}(x^{(k+1)}) = \tilde{g}_i(x^{(k+1)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) \\ &\leq \max\{\tilde{g}_i(x, \xi, \sigma, \rho) \mid (x, \xi, \sigma) \in D, \rho \in Q\}. \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Uma consequência do Lema 6 é que a sequência $\{(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$ possui pelo menos uma subsequência convergente. Portanto, existe um ponto (x^*, y^*) e um subconjunto infinito \mathcal{K} de inteiros positivos tal que $\{(x^{(k)}, y^{(k)})\} \rightarrow (x^*, y^*)$ quando $k \in \mathcal{K}$ e $k \rightarrow \infty$.

Ainda, como a sequência $\{(\sigma^{(k)}, \rho^{(k)})\}_{k \in \mathcal{K}}$ permanece no conjunto compacto $S \times Q$, existem um ponto $(\sigma^*, \rho^*) \in S \times Q$ e um subconjunto infinito $\tilde{\mathcal{K}} \subseteq \mathcal{K}$ tais que $(\sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) \rightarrow (\sigma^*, \rho^*)$ quando $k \in \tilde{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$.

Novamente pelo Lema 6, a sequência $\{(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})\}_{k \in \tilde{\mathcal{K}}}$ também possui pelo menos uma subsequência convergente. Portanto, existe um ponto (\bar{x}, \bar{y}) e um subconjunto infinito $\bar{\mathcal{K}} \subseteq \tilde{\mathcal{K}} \subseteq \mathcal{K}$ tal que $\{(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})\} \rightarrow (\bar{x}, \bar{y})$ quando $k \in \bar{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$.

O próximo resultado estabelece a convergência da sequência dos valores da função objetivo do problema (1.18). Em [45], a sequência $\{F_0(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$ é convergente por ser monotonicamente decrescente e limitada inferiormente. Como estamos usando a condição conservadora relaxada, perdemos a redução estrita do valor da função objetivo do problema (1.18), como vimos no Lema 5. Assim, precisamos do lema a seguir para obter a convergência da sequência $\{F_0(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$, e sua demonstração é apresentada aqui para completude do texto.

Lema 7. A sequência $\{F_0(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$ é convergente.

Demonstração: Vimos no Lema 5 que $F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) < F_0(x^{(k)}, y^{(k)}) + \bar{\mu}_{k,0}$. Logo, temos $F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) - F_0(x^{(k)}, y^{(k)}) < \bar{\mu}_{k,0}$. Como \mathbb{R} é completo, temos que toda sequência de Cauchy é convergente. Vamos mostrar que a sequência $\{F_0(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$ é de Cauchy.

Dado $\epsilon > 0$, da definição da sequência $\{\mu_k\}_{k=1}^{\infty}$ temos que existe k_j tal que

$$\sum_{k=k_j}^{\infty} \mu_k < \frac{\epsilon}{M},$$

onde $M = \max_{\tilde{n} \leq k \leq \tilde{m}-1} \left\{ \max \left\{ 1, \left| g_0^{(k)}(x^{(k+1)}) \right| \right\} \right\}$ com \tilde{m} e \tilde{n} tais que $\tilde{m} > \tilde{n} > k_j$. Então

$$\begin{aligned} |F_0(x^{(\tilde{m})}, y^{(\tilde{m})}) - F_0(x^{(\tilde{n})}, y^{(\tilde{n})})| &= \left| \sum_{k=\tilde{n}}^{\tilde{m}-1} (F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) - F_0(x^{(k)}, y^{(k)})) \right| \leq \\ &\leq \sum_{k=\tilde{n}}^{\tilde{m}-1} |F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) - F_0(x^{(k)}, y^{(k)})| \leq \sum_{k=\tilde{n}}^{\tilde{m}-1} \bar{\mu}_{k,0} = \sum_{k=\tilde{n}}^{\tilde{m}-1} \mu_k \max \left\{ 1, \left| g_0^{(k)}(x^{(k+1)}) \right| \right\} \leq \\ &\leq M \sum_{k=\tilde{n}}^{\tilde{m}-1} \mu_k \leq M \sum_{k=\tilde{n}}^{\infty} \mu_k < \epsilon. \end{aligned}$$

Assim, $\{F_0(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$ é uma sequência de Cauchy e portanto convergente. ■

Nos lemas a seguir vemos que o valor da função objetivo nos pontos limite coincidem.

Lema 8. $F_0(x^{(k)}, y^{(k)}) \rightarrow F_0(x^*, y^*)$ quando $k \rightarrow \infty$ (não apenas para $k \in \mathcal{K}$).

Demonstração: Vimos no Lema 7 que a sequência $\{F_0(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k=1}^{\infty}$ é convergente, ou seja, $F_0(x^{(k)}, y^{(k)}) \rightarrow F_0^*$ quando $k \rightarrow \infty$, para algum número real F_0^* . Mas como $F_0(x^{(k)}, y^{(k)}) \rightarrow F_0(x^*, y^*)$ quando $k \in \mathcal{K}$ e $k \rightarrow \infty$, segue que $F_0^* = F_0(x^*, y^*)$. ■

Lema 9. $F_0(\bar{x}, \bar{y}) = F_0(x^*, y^*)$.

Demonstração: Do Lema 8 segue que $F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \rightarrow F_0(x^*, y^*)$ quando $k \in \bar{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$. Mas como $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \rightarrow (\bar{x}, \bar{y})$ quando $k \in \bar{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$, pela continuidade de F_0 também vale que $F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \rightarrow F_0(\bar{x}, \bar{y})$ quando $k \in \bar{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$. ■

O próximo lema estabelece que o problema estritamente convexo (2.17) com parâmetros $(\xi, \sigma, \rho) = (x^*, \sigma^*, \rho^*)$ possui solução única dada pelo ponto limite (\bar{x}, \bar{y}) .

Lema 10. (\bar{x}, \bar{y}) é a única solução ótima de $PSUB(x^*, \sigma^*, \rho^*)$.

Demonstração: Como $x^{(k+1)} \in X(x^{(k)}, \sigma^{(k)})$, $G_i(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) \leq \bar{\mu}_{k,i}$ e pelo fato que $\{\bar{\mu}_{k,i}\} \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$, segue, fazendo $k \in \bar{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$, que $\bar{x} \in X(x^*, \sigma^*)$ e $G_i(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*) \leq 0$ para $i \geq 1$. Portanto, (\bar{x}, \bar{y}) é uma solução viável de $\text{PSUB}(x^*, \sigma^*, \rho^*)$. Seja (\bar{x}, \bar{y}) uma solução viável arbitrária de $\text{PSUB}(x^*, \sigma^*, \rho^*)$, então $\bar{x} \in X(x^*, \sigma^*)$ e $G_i(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*) \leq 0$ para $i \geq 1$. Vamos mostrar que $G_0(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*) \leq G_0(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*)$.

Para $\tau = 1, 2, 3, \dots$, sejam

$$\bar{x}^{(\tau)} = \bar{x} + \alpha^{(\tau)}(x^* - \bar{x}), \quad (2.19a)$$

$$\bar{y}^{(\tau)} = \bar{y} + \frac{1}{\tau}(1, \dots, 1)^T. \quad (2.19b)$$

Se $\alpha^{(\tau)} = 0$ então para $i \geq 1$

$$\begin{aligned} G_i(\bar{x}^{(\tau)}, \bar{y}^{(\tau)}, x^*, \sigma^*, \rho^*) &= v_i(\bar{x}^{(\tau)}, x^*, \sigma^*) + \rho^* w(\bar{x}^{(\tau)}, x^*, \sigma^*) - \bar{y}_i^{(\tau)} \\ &= G_i(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*) - \frac{1}{\tau} \leq -\frac{1}{\tau}. \end{aligned}$$

Portanto é possível escolher o escalar $\alpha^{(\tau)}$ tal que $0 < \alpha^{(\tau)} < 1/\tau$ e

$$G_i(\bar{x}^{(\tau)}, \bar{y}^{(\tau)}, x^*, \sigma^*, \rho^*) \leq -\frac{1}{2\tau}$$

para $i \geq 1$. Então $(\bar{x}^{(\tau)}, \bar{y}^{(\tau)})$ está no interior do conjunto viável de $\text{PSUB}(x^*, \sigma^*, \rho^*)$. Em particular, $\bar{x}^{(\tau)}$ está no interior de $X(x^*, \sigma^*)$. Isto implica que para cada τ , existe um inteiro $K(\tau)$ tal que, para todo $k \in \bar{\mathcal{K}}$ com $k > K(\tau)$, $\bar{x}^{(\tau)} \in X(x^{(k)}, \sigma^{(k)})$ e $G_i(\bar{x}^{(\tau)}, \bar{y}^{(\tau)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) \leq 0$ para $i \geq 1$. Para todos estes índices $k \in \bar{\mathcal{K}}$ com $k > K(\tau)$ vale que $G_0(\bar{x}^{(\tau)}, \bar{y}^{(\tau)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) \geq G_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)})$, pois $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})$ é a solução ótima de $\text{PSUB}(x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)})$.

Agora, para cada τ , tome $k(\tau) \in \bar{\mathcal{K}}$ tal que $k(\tau) > \max\{\tau, K(\tau)\}$ e faça $\tau \rightarrow \infty$. Então, pela construção (2.19), temos $(\bar{x}^{(\tau)}, \bar{y}^{(\tau)}) \rightarrow (\bar{x}, \bar{y})$ e pela subsequência tomada temos $(x^{(k(\tau)+1)}, y^{(k(\tau)+1)}) \rightarrow (\bar{x}, \bar{y})$ e $(x^{(k(\tau))}, \sigma^{(k(\tau))}, \rho^{(k(\tau))}) \rightarrow (x^*, \sigma^*, \rho^*)$. Portanto, $G_0(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*) \leq G_0(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*)$. ■

O lema a seguir relaciona os pontos limite das subsequências $\{(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k \in \mathcal{K}}$ e $\{(x^{(k+1)}, y^{(k+1)})\}_{k \in \bar{\mathcal{K}}}$, com $\bar{\mathcal{K}} \subset \mathcal{K}$.

Lema 11. $(\bar{x}, \bar{y}) = (x^*, y^*)$.

Demonstração: De $G_i(x^{(k)}, y^{(k)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) = F_i(x^{(k)}, y^{(k)}) \leq \bar{\mu}_{k-1,i}$ para $i \geq 1$ e $k \geq 2$, segue que $G_i(x^*, y^*, x^*, \sigma^*, \rho^*) \leq 0$ para $i \geq 1$, fazendo $k \in \bar{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$. Além disso, por definição, $x^* \in X(x^*, \sigma^*)$. Portanto, (x^*, y^*) é uma solução viável de $\text{PSUB}(x^*, \sigma^*, \rho^*)$.

De $F_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \leq G_0(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, x^{(k)}, \sigma^{(k)}, \rho^{(k)}) + \bar{\mu}_{k,0}$, segue que $F_0(\bar{x}, \bar{y}) \leq G_0(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*)$, novamente fazendo $k \in \bar{\mathcal{K}}$ e $k \rightarrow \infty$.

Por definição, $F_0(x^*, y^*) = G_0(x^*, y^*, x^*, \sigma^*, \rho^*)$. Do Lema 9 segue então que $G_0(x^*, y^*, x^*, \sigma^*, \rho^*) \leq G_0(\bar{x}, \bar{y}, x^*, \sigma^*, \rho^*)$. Mas como (\bar{x}, \bar{y}) é a única solução ótima global do $\text{PSUB}(x^*, \sigma^*, \rho^*)$, segue que $(x^*, y^*) = (\bar{x}, \bar{y})$. ■

Combinando os resultados anteriores, o próximo lema caracteriza a estacionariedade do ponto limite gerado pelo Algoritmo 1.

Lema 12. (x^*, y^*) é um ponto KKT do problema (2.16).

Demonstração: Segue dos Lemas 3, 4, 10 e 11. ■

Finalmente, provamos a seguir o resultado de convergência global do Algoritmo 1.

Demonstração do Teorema 1: Suponha por absurdo que a afirmação do Teorema 1 é falsa. Então existe um $\epsilon > 0$ e um subconjunto infinito \mathcal{K}_0 de inteiros tal que

$$\|(x, y) - (x^{(k)}, y^{(k)})\| \geq \epsilon \text{ para todo } (x, y) \in \Omega \text{ e todo } k \in \mathcal{K}_0. \quad (2.20)$$

Então, como uma consequência do Lema 6, a sequência $\{(x^{(k)}, y^{(k)})\}_{k \in \mathcal{K}_0}$ possui pelo menos uma subsequência convergente. Logo, existem um ponto (\hat{x}, \hat{y}) e um subconjunto infinito $\bar{\mathcal{K}}_0 \subseteq \mathcal{K}_0$ tais que $(x^{(k)}, y^{(k)}) \rightarrow (\hat{x}, \hat{y})$ quando $k \in \bar{\mathcal{K}}_0$ e $k \rightarrow \infty$.

Mas então, usando (\hat{x}, \hat{y}) no lugar de (x^*, y^*) nos lemas anteriores, em particular no Lema 12, segue que (\hat{x}, \hat{y}) é um ponto KKT do problema (2.16) e portanto um ponto KKT do problema original aumentado (1.18). Logo, $(\hat{x}, \hat{y}) \in \Omega$. Fazendo $(x, y) = (\hat{x}, \hat{y})$ em (2.20), se estabelece uma contradição. Portanto, a afirmação do Teorema 1 é verdadeira. ■

2.5 Resultados numéricos

Esta seção contém a descrição dos testes computacionais realizados introduzindo no MMA a atualização espectral e a condição conservadora relaxada. Foram considerados quatro problemas: dois problemas acadêmicos parametrizados pelo número de variáveis $n > 1$, propostos em [45], o problema das duas barras e o problema da viga em balanço, ambos propostos em [40] e também resolvidos em [10].

Os experimentos foram implementados em **Matlab** e executados em um microcomputador Mac Pro com dois processadores Xeon E5462 de 2.8 Ghz e 12 GB de memória RAM (sem usar multiprocessamento).

Todos os problemas apresentados nesta seção estão formulados como em (1.1), de modo que inicialmente eles foram levados à forma (1.18) com $d_i = 1$ e $c_i = 1000$, para $i = 1, \dots, m$. Estas escolhas produziram $y \equiv 0$ em cada iterando externo. Também, os valores η_i^{min} e η_i^{max} foram tomados como $\eta_i^{min} = 10^{-3}$ e $\eta_i^{max} = 10^3$ para cada $i = 0, 1, \dots, m$.

Em relação ao critério de parada usado, note que as condições KKT do problema (1.18) podem ser escritas da seguinte maneira, usando as notações $a^+ = \max\{0, a\}$ e $a^- = \max\{0, -a\}$:

$$(x_j^{min} - x_j) \left(\frac{\partial f_0}{\partial x_j}(x) + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial x_j}(x) + \dots + \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial x_j}(x) \right)^+ = 0, \quad j = 1, \dots, n, \quad (2.21a)$$

$$(x_j - x_j^{max}) \left(\frac{\partial f_0}{\partial x_j}(x) + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial x_j}(x) + \dots + \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial x_j}(x) \right)^- = 0, \quad j = 1, \dots, n, \quad (2.21b)$$

$$(f_i(x) - y_i)^+ = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.21c)$$

$$\lambda_i (f_i(x) - y_i)^- = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.21d)$$

$$y_i (c_i + d_i y_i - \lambda_i)^+ = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.21e)$$

$$\lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.21f)$$

$$y_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.21g)$$

$$x_j^{min} \leq x_j \leq x_j^{max}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (2.21h)$$

As equações (2.21a)-(2.21e) podem ser escritas mais sucintamente como $r_\varphi(x, y, \lambda) = 0$, $\varphi = 1, \dots, 2n+3m$. Uma consequência das estratégias empregadas para resolver os problemas é que as desigualdades (2.21f)-(2.21h) são sempre satisfeitas pelas variáveis primais x_j e y_i , e pelas variáveis duais λ_i . As iterações externas terminam quando os valores de x , y e λ satisfazem

$$\frac{1}{n} \sum_{\varphi=1}^{2n+3m} (r_\varphi(x, y, \lambda))^2 \leq 10^{-10}.$$

Os subproblemas foram resolvidos usando um método de pontos interiores primal-dual, sugerido em [43], que será cuidadosamente detalhado no próximo capítulo.

A sequência $\{\mu_k\}_{k=1}^\infty$, usada em (2.9) para relaxar a condição conservadora, foi escolhida de duas maneiras distintas. Na primeira, tomamos

$$\mu_k = \frac{N_k}{(k+1)^{1.1}},$$

onde

$$N_1 = \|r_\varphi^{(1)}\|_2, \quad N_2 = \min\{\|r_\varphi^{(1)}\|_2, \|r_\varphi^{(2)}\|_2\}, \quad (2.22)$$

e para $k \geq 3$

$$N_k = \min \{ \|r_\varphi^{(k-2)}\|_2, \|r_\varphi^{(k-1)}\|_2, \|r_\varphi^{(k)}\|_2 \}, \quad (2.23)$$

em que $r_\varphi^{(k)} \equiv r_\varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, \lambda^{(k)})$ é o resíduo das condições KKT do problema (1.18) na k -ésima iteração externa. Para garantir que a sequência N_k seja limitada, tomamos $N_k = \min\{N_k, N_{max}\}$. No entanto, o valor N_{max} , fixado em 10^{12} nos nossos testes, nunca foi atingido. A segunda escolha para relaxar a condição conservadora difere da primeira apenas por tomar

$$N_k = N_1, \forall k. \quad (2.24)$$

Naturalmente, cada escolha adotada satisfaz a hipótese teórica (2.10) de ser somável.

Para cada problema, o método das assíntotas móveis, implementado exatamente como em [45], é comparado com três abordagens distintas. Na primeira abordagem, que denominamos **Estratégia 1**, usamos o parâmetro espectral, conforme descrito na Seção 2.1, na atualização dos parâmetros ρ_i no início de cada iteração externa.

Na segunda abordagem, usamos a condição conservadora relaxada (2.9) como critério de aceitação da solução do subproblema MMA como o próximo iterando externo. Para a realização dos experimentos numéricos, a condição conservadora foi relaxada de duas maneiras distintas, resultando na **Estratégia 2**, onde N_k foi tomado conforme (2.22) e (2.23), e na **Estratégia 4**, onde usamos a expressão (2.24) para calcular N_k .

A terceira abordagem combina a atualização espectral com a condição conservadora relaxada, conforme o Algoritmo 1, de modo que a **Estratégia 3** é a combinação das Estratégias 1 e 2, e a **Estratégia 5** é a união das Estratégias 1 e 4.

Para cada problema, três tabelas são apresentadas. Na primeira tabela de cada problema, a primeira coluna contém o número de variáveis n . Nas outras colunas, uma tripla é dada para cada estratégia, com o número correspondente de iterações externas realizadas, o número de iterações internas adicionais, entre parênteses, seguido pelo tempo de CPU utilizado, dado em segundos. O número total de subproblemas resolvidos é a soma das iterações externas e internas adicionais. O tempo apresentado em cada tabela é a média dos tempos obtidos em 10 execuções do algoritmo, para os problemas acadêmicos, e em 1000 execuções do algoritmo, para os problemas das duas barras e da viga em balanço. Quando o método atinge o número máximo de iterações externas fornecido, fixado em 1000 nos nossos testes, denotamos este fato por NumItMax.

Na segunda tabela de cada problema, é fornecida a porcentagem relativa à estratégia de Svanberg obtida com cada estratégia proposta, considerando o número de subproblemas resolvidos e o tempo de CPU total utilizado.

Finalmente, no último teste realizado, geramos 10 pontos iniciais, para os problemas acadêmicos, e 1000 pontos iniciais, para os problemas das duas barras e da viga em balanço, aleatoriamente distribuídos na caixa de cada problema. Cada estratégia foi usada para resolver estes casos, e os resultados obtidos estão apresentados na terceira tabela de cada problema. Nestas tabelas, quatro dados são apresentados para cada estratégia: os valores mínimo, médio e máximo de subproblemas resolvidos, entre parênteses, seguidos pela média dos tempos, dada em segundos.

Ainda neste último teste, para analisar o desempenho das estratégias propostas utilizamos a ferramenta perfil de desempenho, proposta em 2002 por Dolan e Moré [17]. Um breve resumo desta ferramenta é descrito a seguir.

Os perfis de desempenho têm como objetivo comparar a eficiência e robustez entre diferentes algoritmos que são aplicados aos mesmos problemas, sob as mesmas condições. Considerando S e P o conjunto de todos os algoritmos e problemas, respectivamente, e escolhida uma medida de desempenho, por exemplo, tempo ou iterações, devemos determinar o desempenho do algoritmo s relativamente aos demais algoritmos de S na resolução de cada problema p de P .

Para cada algoritmo s e problema p temos uma medida de desempenho que denotaremos por $m_{s,p}$, por exemplo, o número de iterações necessárias para a convergência. Para cada algoritmo s , a taxa de desempenho relativo no problema p é definida por:

$$r_{s,p} = \begin{cases} \frac{m_{s,p}}{\min\{m_{s,p}, \forall s \in S\}}, & \text{se o algoritmo } s \text{ resolveu o problema } p, \\ r_M, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

onde r_M é um parâmetro pré-definido e suficientemente grande.

Agora, para cada algoritmo s , construímos uma função acumulativa $\rho_s : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$, que representa a taxa de desempenho de s para os problemas de P . Denotando a cardinalidade de P por $\#(P)$, a função ρ_s é definida como:

$$\rho_s(\tau) = \frac{\#\{p \in P \mid r_{s,p} \leq \tau\}}{\#(P)}.$$

Está claro que ρ_s é não-decrescente e constante por partes. Além disso τ deve ser maior ou igual a 1. A eficiência do algoritmo s pode ser analisada pelo valor dado por $\rho_s(1)$. Se ρ_s tem o maior valor em 1 então s é o algoritmo mais eficiente, pois teve a menor medida de desempenho em mais problemas. Para analisar a robustez devemos notar para qual valor de τ teremos $\rho_s(\tau) = 1$. Quanto menor for esse valor τ , mais robusto é o algoritmo, pois $\rho_s(\tau) = 1$ para $\tau < r_M$ significa que s resolveu todos os problemas, e quanto menor o τ , menor é a

diferença de s com relação aos demais algoritmos. Observe que se ao menos um problema não obtiver convergência para o algoritmo s , teremos $\rho_s(\tau) = 1$ somente para $\tau = r_M$.

O maior benefício adquirido com o uso dessa ferramenta é a visualização simultânea do comportamento relativo de diferentes algoritmos. Isto nos permite compará-los de forma simples, nas questões da eficiência e robustez, para os problemas tratados.

2.5.1 Problemas acadêmicos

Nesta subseção, apresentamos dois problemas acadêmicos parametrizados pelo número de variáveis $n > 1$, propostos em [45]. A estrutura geral destes problemas assemelha-se à estrutura de problemas de otimização topológica: problemas não-convexos com um grande número de variáveis, cotas inferiores e superiores em todas as variáveis e um número relativamente pequeno de restrições de desigualdade.

Antes de apresentar os dois problemas, vamos definir três matrizes simétricas definidas positivas S , P e Q , de dimensão $n \times n$, que são usadas nestes problemas. Os elementos destas matrizes são dados por

$$S_{ij} = \frac{2 + \sin(4\pi\alpha_{ij})}{(1 + |i - j|) \ln n}, \quad P_{ij} = \frac{1 + 2\alpha_{ij}}{(1 + |i - j|) \ln n}, \quad Q_{ij} = \frac{3 - 2\alpha_{ij}}{(1 + |i - j|) \ln n},$$

em que $\alpha_{ij} = \frac{i+j-2}{2n-2} \in [0, 1]$ para todo i e j .

No primeiro problema, a função objetivo é estritamente convexa, mas as funções que definem as restrições não-lineares são estritamente côncavas, de modo que o conjunto viável é não-convexo. A formulação do problema é dada na sequência e a estimativa inicial usada é $x^{(1)} = (0.5, 0.5, \dots, 0.5)^T \in \mathbb{R}^n$.

Problema Acadêmico 1:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f_0(x) = x^T S x \\ &\text{sujeito a} && f_1(x) = \frac{n}{2} - x^T P x \leq 0, \\ &&& f_2(x) = \frac{n}{2} - x^T Q x \leq 0, \\ &&& -1 \leq x_j \leq 1, \quad j = 1, \dots, n. \end{aligned} \tag{2.25}$$

No segundo problema, as funções que definem as restrições não-lineares são estritamente convexas, mas a função objetivo é estritamente côncava. A formulação do problema é dada na sequência e a estimativa inicial usada é $x^{(1)} = (0.25, 0.25, \dots, 0.25)^T \in \mathbb{R}^n$.

Problema Acadêmico 2:

$$\begin{aligned}
&\text{minimizar} && f_0(x) = -x^T S x \\
&\text{sujeito a} && f_1(x) = x^T P x - \frac{n}{2} \leq 0, \\
&&& f_2(x) = x^T Q x - \frac{n}{2} \leq 0, \\
&&& -1 \leq x_j \leq 1, \quad j = 1, \dots, n.
\end{aligned} \tag{2.26}$$

O número de variáveis escolhido para os testes foi $n = 100, 500, 1000$ e 2000 para ambos os problemas. As soluções ótimas obtidas para o caso $n = 1000$ estão representadas graficamente na Figura 2.2, assim como em [45], com o índice j no eixo horizontal e x_j no eixo vertical.

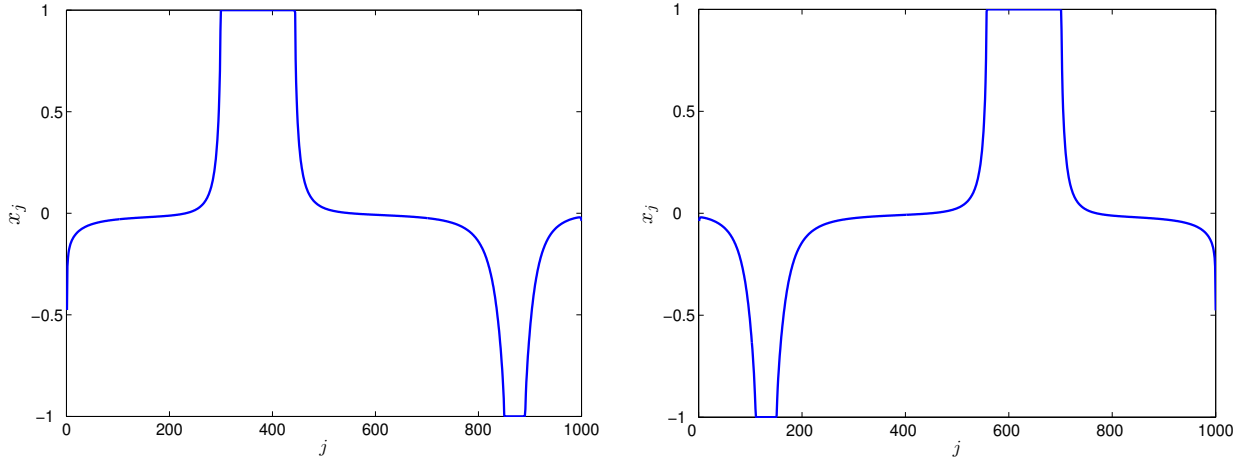


Figura 2.2: Soluções ótimas obtidas com $n = 1000$ para o Problema 1 (esq.) e para o Problema 2 (dir.).

Os resultados numéricos referentes aos Problemas Acadêmicos 1 e 2 são dados nas Tabelas 2.1 e 2.2, respectivamente. Cada entrada da tabela é dada por:

Iterações Externas (Iterações Internas adicionais); tempo de CPU.

Estes resultados estão apresentados graficamente nas Figuras 2.3 e 2.4 para o Problema 1 e nas Figuras 2.5 e 2.6 para o Problema 2.

Analisando as Tabelas 2.1 e 2.2, observamos que, para atingir a convergência, a Estratégia 1 realiza, na maioria dos casos, poucas iterações externas a mais do que Svanberg. O número de iterações internas adicionais, no entanto, é significativamente menor. Portanto, para ambos os problemas, o número total de subproblemas resolvidos é menor na estratégia espectral do que na estratégia de Svanberg.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3	Estratégia 4	Estratégia 5
100	104(135); 4.1267	108(101); 3.8254	132(59); 3.8818	97(11); 2.1315	175(0); 3.9114	103(0); 2.1291
500	147(185); 49.666	153(138); 45.977	158(36); 36.454	115(0); 23.287	287(0); 60.590	115(0); 23.325
1000	174(222); 214.74	179(162); 197.36	223(40); 184.98	128(0); 96.354	NumItMax	128(0); 96.384
2000	185(229); 868.98	189(185); 819.99	368(82); 1206.3	138(0); 404.32	NumItMax	138(0); 404.08

Tabela 2.1: Resultados numéricos para o Problema 1.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3	Estratégia 4	Estratégia 5
100	218(265); 11.553	222(198); 12.949	189(158); 6.9761	199(60); 6.3205	122(61); 4.5701	172(0); 7.4921
500	392(415); 130.99	392(317); 121.86	353(280); 105.12	357(97); 86.954	238(126); 65.672	330(0); 69.555
1000	438(437); 566.14	443(337); 475.37	416(350); 459.24	418(142); 378.66	300(177); 298.39	384(0); 295.77
2000	479(503); 2208.1	477(379); 2084.9	442(423); 1947.3	452(185); 1678.3	254(177); 1008.6	421(0); 1244.2

Tabela 2.2: Resultados numéricos para o Problema 2.

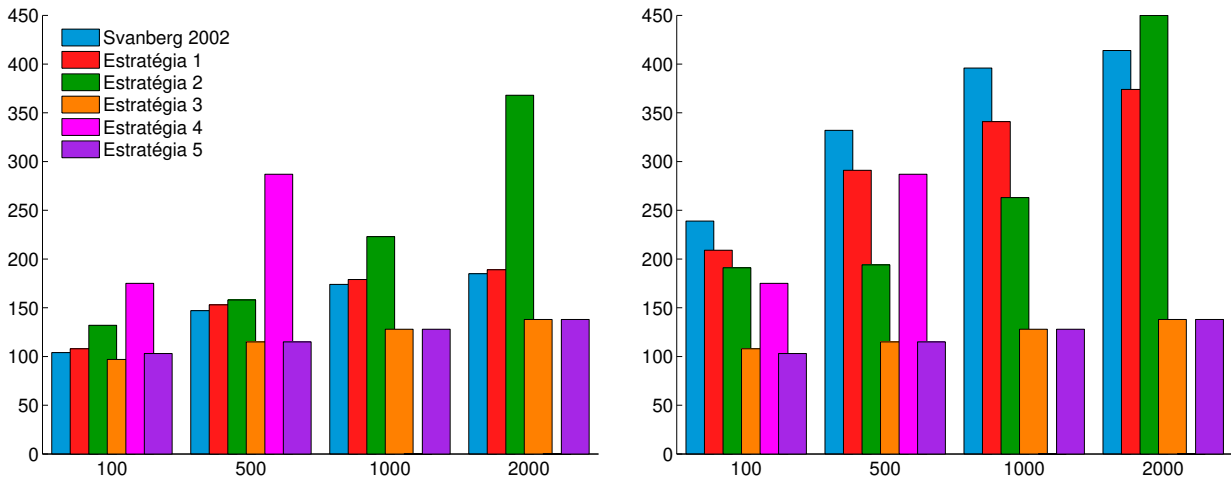


Figura 2.3: Dimensão \times Iterações externas (esq.) e Dimensão \times Iterações internas (dir.), para o Problema 1.

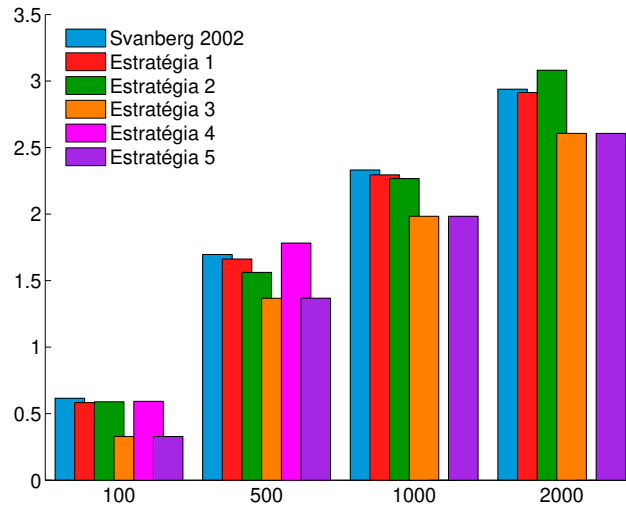


Figura 2.4: Dimensão \times $\log_{10}(\text{tempo de CPU})$, para o Problema 1.

Considerando a Estratégia 2, para o Problema 1, observamos que apesar do aumento no número de iterações externas, o número de iterações internas adicionais realizadas é tão pequeno que, na maioria dos casos, o número total de subproblemas resolvidos é ainda menor do que na Estratégia 1. Para o Problema 2, apesar de o número de iterações internas adicionais realizadas não ser tão pequeno, o número de iterações externas e o número de iterações internas adicionais são menores do que os números obtidos tanto na estratégia de Svanberg quanto, na maioria dos casos, na Estratégia 1.

Combinando a atualização espectral com a condição conservadora relaxada, na Estratégia 3, obtemos resultados expressivos. Não apenas o número de iterações externas diminuiu, mas também o número de iterações internas é drasticamente reduzido.

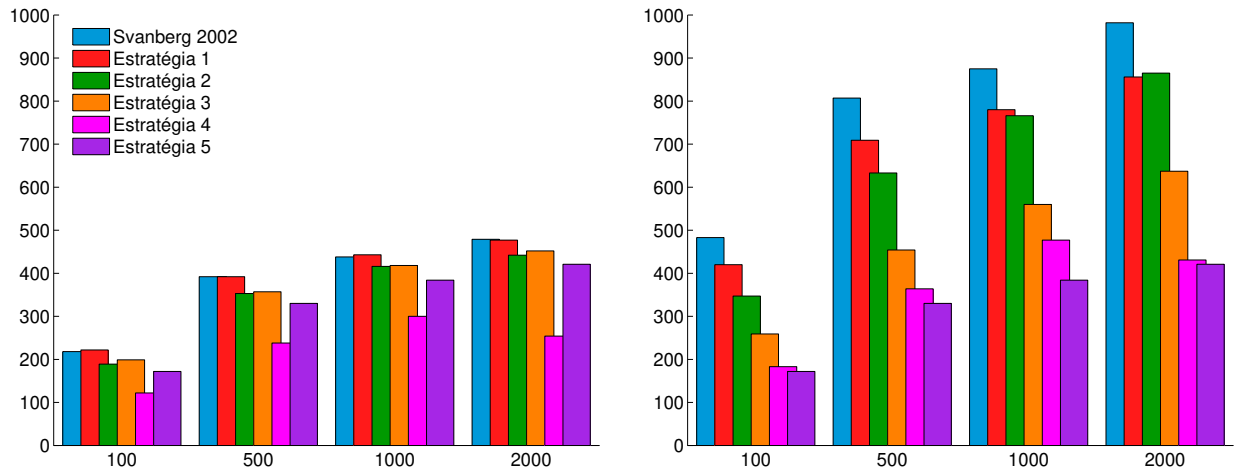


Figura 2.5: Dimensão × Iterações externas (esq.) e Dimensão × Iterações internas (dir.), para o Problema 2.

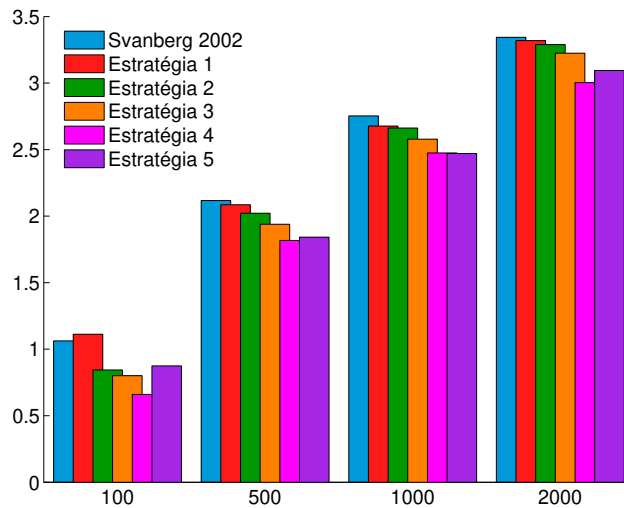


Figura 2.6: Dimensão × $\log_{10}(\text{tempo de CPU})$, para o Problema 2.

Em relação à Estratégia 4, embora o número máximo de iterações ter sido atingido para as dimensões 1000 e 2000 do Problema 1, para o Problema 2 os resultados obtidos foram significativamente superiores aos resultados da Estratégia 2.

Finalmente, combinando as Estratégias 1 e 4, na Estratégia 5, apesar de os resultados obtidos terem sido praticamente os mesmos da Estratégia 3 para o Problema 1, no Problema 2, além de o número de iterações externas ter sido reduzido em relação à Estratégia 3, nenhuma iteração interna adicional foi necessária, assim como no Problema 1. Esta redução do número de iterações internas deve-se ao fato de a relaxação da condição conservadora considerada nas Estratégias 4 e 5 ser maior que a considerada nas Estratégias 2 e 3. Todos estes resultados a respeito do número de iterações e subproblemas resolvidos são refletidos

no tempo de processamento.

A partir destes resultados notamos que os valores ótimos ρ_i^* baseados no parâmetro espectral se encarregam de verificar a condição conservadora relaxada após poucas tentativas. Tal padrão ocorre para ambos os problemas, sendo que para o Problema 1 nenhuma iteração interna é realizada para as dimensões 500, 1000 e 2000 na Estratégia 3 e em todas as dimensões na Estratégia 5. Já o Problema 2 exige mais esforço para ser resolvido, porém o número de iterações internas adicionais é menor que ao menos a metade do número de iterações externas na Estratégia 3, e novamente nenhuma iteração interna adicional é realizada na Estratégia 5.

Em termos relativos, denotando por sub_{Svan} e sub_{EstJ} , respectivamente, o número total de subproblemas resolvidos pelo algoritmo de Svanberg e pela Estratégia J ($J = 1, 2, 3, 4, 5$), definimos

$$\text{Sub} = \text{sub}_{\text{EstJ}} / \text{sub}_{\text{Svan}}. \quad (2.27)$$

Da mesma forma, denotando por cpu_{Svan} e cpu_{EstJ} , respectivamente, o tempo de CPU total usado pelo algoritmo de Svanberg e pela Estratégia J ($J = 1, 2, 3, 4, 5$), temos

$$\text{CPU} = \text{cpu}_{\text{EstJ}} / \text{cpu}_{\text{Svan}}. \quad (2.28)$$

As medidas relativas (2.27) e (2.28) foram calculadas para os dados presentes nas Tabelas 2.1 e 2.2, exceto para os casos em que o número máximo de iterações foi atingido. Os resultados estão apresentados nas Tabelas 2.3 e 2.4, onde o impacto de combinar a atualização espectral com a condição conservadora relaxada é evidente. A melhora relativa das Estratégias 3 e 5 é muito significativa, tanto no número de subproblemas resolvidos quanto no tempo de CPU total usado.

n	Estratégia 1		Estratégia 2		Estratégia 3		Estratégia 4		Estratégia 5	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
100	87%	93%	80%	94%	45%	52%	73%	95%	43%	52%
500	88%	93%	58%	76%	35%	47%	86%	122%	35%	47%
1000	86%	92%	66%	86%	32%	45%	—	—	32%	45%
2000	90%	94%	109%	139%	33%	47%	—	—	33%	47%

Tabela 2.3: Medidas relativas para o Problema 1.

Para obter os resultados presentes nas Tabelas 2.5 e 2.6, geramos 10 pontos iniciais aleatoriamente distribuídos na caixa do problema. Cada estratégia foi usada para resolver estes 10 casos, e os três valores entre parênteses são os valores mínimo, médio e máximo de subproblemas resolvidos, respectivamente, seguidos pela média dos tempos, dada em segundos. Estes valores validam os resultados anteriores: mesmo quando outros pontos iniciais são usados, o número de subproblemas resolvidos e a média do tempo melhoram

n	Estratégia 1		Estratégia 2		Estratégia 3		Estratégia 4		Estratégia 5	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
100	87%	112%	72%	60%	54%	55%	38%	40%	36%	65%
500	88%	93%	78%	80%	56%	66%	45%	50%	41%	53%
1000	89%	84%	88%	81%	64%	67%	55%	53%	44%	52%
2000	87%	94%	88%	88%	65%	76%	44%	46%	43%	56%

Tabela 2.4: Medidas relativas para o Problema 2.

a cada estratégia, exceto para a Estratégia 4 no Problema 1, onde o número máximo de iterações foi atingido para alguns pontos iniciais. Para a dimensão 500, a Estratégia 4 não convergiu no número máximo de iterações para 2 dos 10 pontos iniciais. Já para a dimensão 1000, a convergência foi obtida para apenas 1 dos 10 pontos iniciais, enquanto na dimensão 2000 a convergência não foi obtida para nenhum ponto inicial testado.

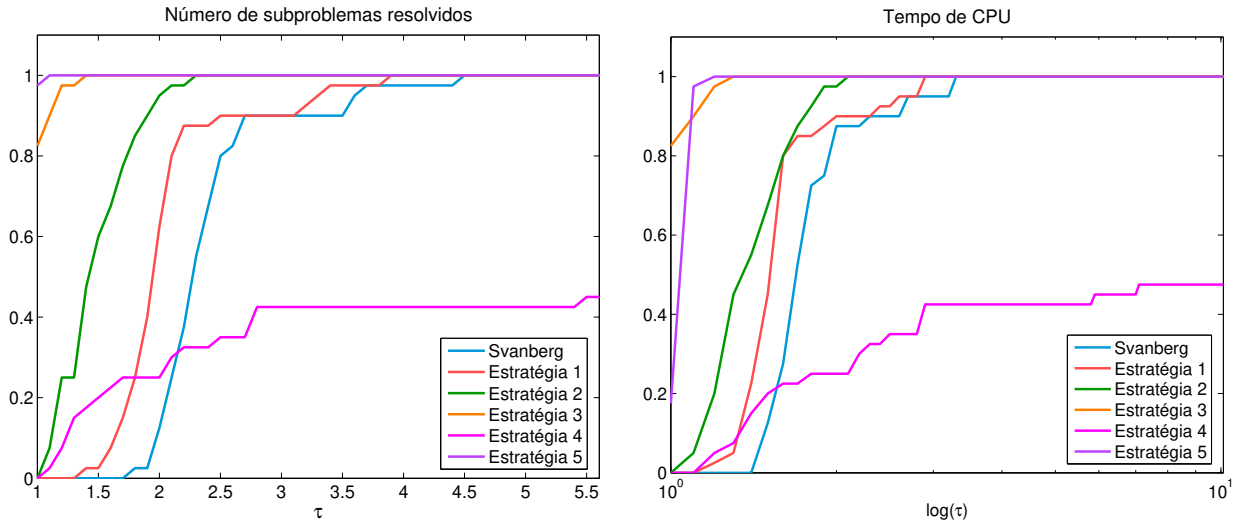


Figura 2.7: Perfil de desempenho para o Problema 1. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

As Figuras 2.7 e 2.8 mostram os gráficos de desempenho associados aos Problemas 1 e 2, respectivamente. Para cada figura, o gráfico da esquerda refere-se ao número de subproblemas resolvidos e o gráfico da direita refere-se ao tempo de CPU. Na Figura 2.7 observamos que as Estratégias 3 e 5, que são as combinações da estratégia espectral com as relaxações, são mais eficientes tanto em relação ao número de subproblemas resolvidos quanto ao tempo de CPU. Apenas a Estratégia 4 não resolveu todos os problemas, convergindo somente em 47.5% dos casos. Embora a Estratégia 4 apresente dificuldades de convergência, quando combinada com a Estratégia 1 (espectral), resulta na Estratégia 5 que é robusta e eficiente. Com exceção da Estratégia 4, todas as demais propostas apresentaram resultados superiores à estratégia de Svanberg.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3
100	(231, 279.2, 413); 5.1826	(161, 228.6, 368); 4.3418	(123, 147.9, 183); 3.3030	(111, 130.1, 161); 2.8220
500	(326, 446.5, 1226); 67.241	(274, 382.4, 1053); 60.529	(192, 232.2, 370); 44.728	(145, 174.9, 274); 36.003
1000	(370, 507, 1422); 279.46	(316, 445.6, 1305); 255.54	(237, 332.1, 736); 226.88	(165, 231.9, 717); 171.81
2000	(437, 583.8, 1271); 1233.5	(372, 511, 1116); 1124.1	(336, 387.5, 478); 1058.2	(188, 222.7, 346); 653.87
			Estratégia 4	Estratégia 5
			(136, 208.8, 631); 5.0924	(111, 125.1, 174); 2.7349
			—	(145, 173.8, 274); 36.123
			—	(165, 212.7, 532); 163.90
			—	(188, 222.7, 346); 656.05

Tabela 2.5: Outros resultados para o Problema 1.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3
100	(309, 426.2, 889); 15.254	(260, 360.6, 837); 16.674	(175, 271.9, 630); 7.0938	(120, 199.7, 457); 7.1492
500	(486, 648.4, 892); 103.42	(372, 535.3, 779); 90.732	(327, 481, 736); 81.545	(235, 355.1, 578); 68.591
1000	(634, 950, 2109); 557.76	(513, 792.2, 1862); 498.71	(483, 743.5, 1470); 455.17	(316, 567.3, 1098); 389.21
2000	(716, 880.8, 1045); 1918.1	(613, 731.1, 899); 1703.4	(564, 712.9, 884); 1649.3	(407, 539.3, 744); 1396.0
			Estratégia 4	Estratégia 5
			(134, 181.9, 272); 4.1362	(123, 165.1, 284); 5.1934
			(253, 371.5, 575); 66.728	(205, 283.8, 364); 59.773
			(363, 542, 819); 348.99	(289, 439.1, 691); 327.29
			(431, 561.6, 725); 1368.1	(311, 435.4, 584); 1220.7

Tabela 2.6: Outros resultados para o Problema 2.

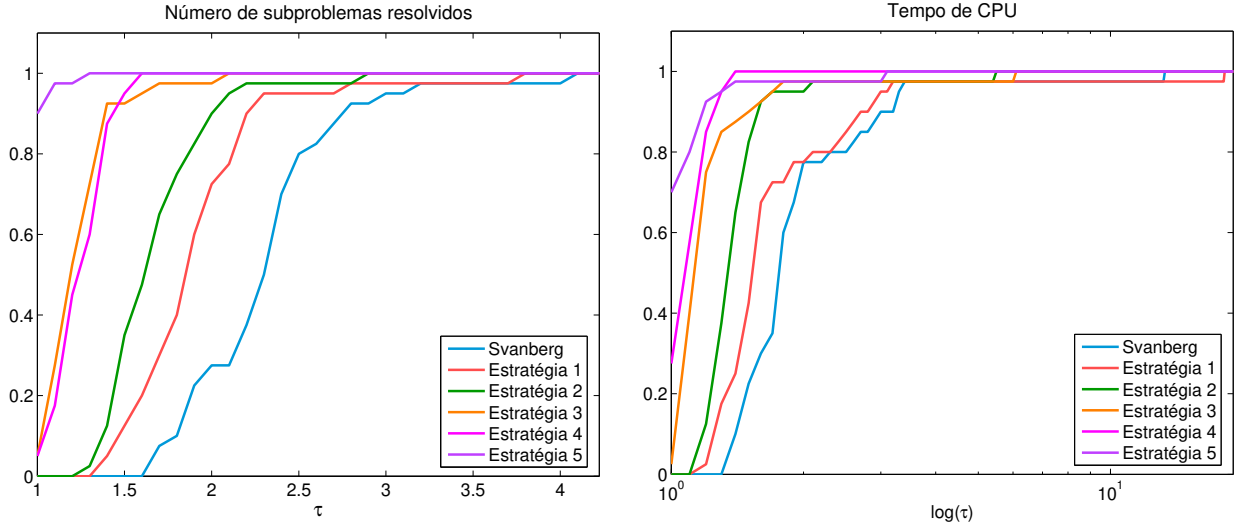


Figura 2.8: Perfil de desempenho para o Problema 2. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

Na Figura 2.8 podemos observar que o desempenho das estratégias para o Problema 2 é similar aos resultados obtidos para o Problema 1: a Estratégia 5 é a mais eficiente e todas as propostas apresentaram resultados superiores à estratégia de Svanberg. A principal diferença é que a Estratégia 4 conseguiu resolver todos os problemas. A Figura 2.9 acumula os resultados dos Problemas 1 e 2.

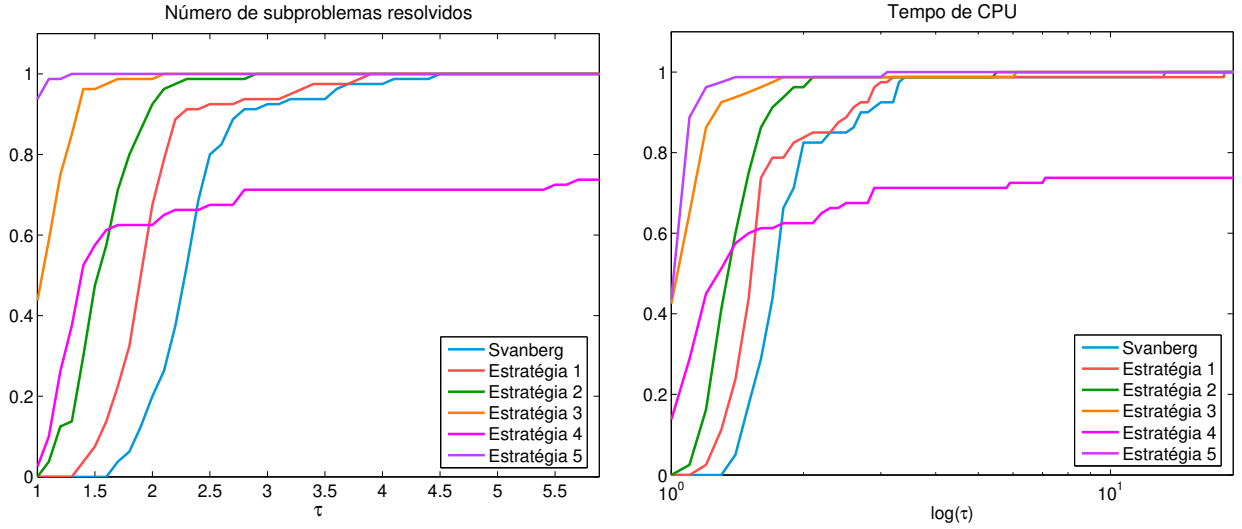


Figura 2.9: Perfil de desempenho para os Problemas 1 e 2. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

2.5.2 Sistema de duas barras (*2-bar truss*)

Considere o sistema de duas barras, ilustrado na Figura 2.10, e a força externa $F = (F_x, F_y)$ agindo sobre o nó 3, em que $F_x = 24.8 \text{ kN}$ e $F_y = 198.4 \text{ kN}$ ($F_y = 8F_x$ e $|F| = 200 \text{ kN}$).

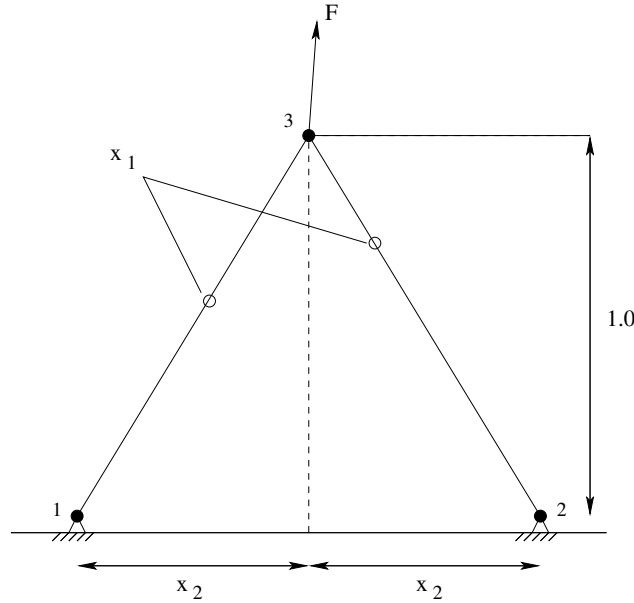


Figura 2.10: Sistema de duas barras.

Este problema possui duas variáveis:

- x_1 , a área (em cm^2) da seção transversal das barras,
- x_2 , a semi-distância (em m) entre os nós 1 e 2 (nós fixos).

As cotas inferiores das variáveis são 0.2 cm^2 e 0.1 m , respectivamente, enquanto as cotas superiores das variáveis são 4.0 cm^2 e 1.6 m . Nenhuma destas quatro cotas torna-se ativa na solução ótima.

A função objetivo, a ser minimizada, é o peso das barras. As restrições estipulam que a tensão não deve ser maior do que $\sigma_{max} = 100 \text{ kN/cm}^2$ em cada uma das barras, considerando a força dada.

Para obtermos a função objetivo, multiplicamos a densidade da barra pelo volume. Como o volume da barra é o produto da área da seção transversal pelo comprimento, dado portanto por $V = x_1 \sqrt{1 + x_2^2}$, temos que o peso é

$$w(x_1, x_2) = C_1 x_1 \sqrt{1 + x_2^2}$$

Para obtermos as funções restrições, vamos analisar o equilíbrio do nó 3. Analisando a Figura 2.11, observamos que

$$\begin{aligned} F_x &= F_1 \cos \theta - F_2 \cos \alpha, \\ F_y &= F_1 \sin \alpha + F_2 \sin \theta. \end{aligned}$$

Usando

$$\sin \alpha = \cos \theta = \frac{x_2}{\sqrt{1+x_2^2}} \quad \text{e} \quad \cos \alpha = \sin \theta = \frac{1}{\sqrt{1+x_2^2}},$$

e $F_y = 8F_x$ temos que

$$F_1 = \frac{\sqrt{1+x_2^2}}{2} \left(\frac{F_x}{x_2} + 8F_x \right) \quad \text{e} \quad F_2 = \frac{\sqrt{1+x_2^2}}{2} \left(-\frac{F_x}{x_2} + 8F_x \right).$$

Sabendo que a tensão σ é dada pela razão entre a força e a área da seção transversal, obtemos as restrições

$$\sigma_1 = \frac{F_1}{x_1} \leq \sigma_{max} \quad \text{e} \quad \sigma_2 = \frac{F_2}{x_1} \leq \sigma_{max}.$$

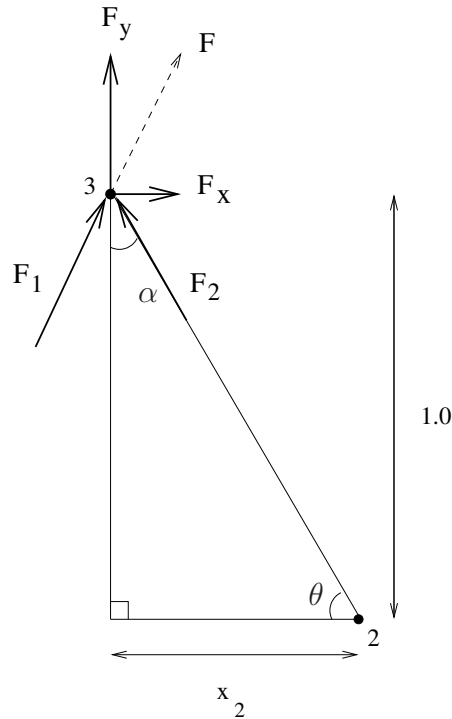


Figura 2.11: Equilíbrio no Nó 3.

Desta forma, este problema pode ser formulado analiticamente da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
& \text{minimizar} \quad w(x_1, x_2) = C_1 x_1 \sqrt{1 + x_2^2} \\
& \text{sujeito a} \quad \sigma_1(x_1, x_2) = C_2 \sqrt{1 + x_2^2} \left(\frac{8}{x_1} + \frac{1}{x_1 x_2} \right) \leq 1 \\
& \quad \sigma_2(x_1, x_2) = C_2 \sqrt{1 + x_2^2} \left(\frac{8}{x_1} - \frac{1}{x_1 x_2} \right) \leq 1 \\
& \quad 0.2 \leq x_1 \leq 4 \\
& \quad 0.1 \leq x_2 \leq 1.6
\end{aligned} \tag{2.29}$$

em que $C_1 = 1.0$ e $C_2 = 0.124$. A escolha $\sigma_{max} = 100 \text{ kN/cm}^2$ é uma correção de Bletzinger feita em [10], que está compatível com o valor da $C_2 = 0.124$. Se tomássemos $\sigma_{max} = 100 \text{ N/mm}^2 = 10 \text{ kN/cm}^2$ como é feito em [40], C_2 teria que valer 1.24.

A Tabela 2.7 apresenta o desempenho das estratégias na resolução do problema das duas barras. O ponto inicial viável usado foi $x^{(1)} = (1.5, 0.5)^T$ e a solução obtida em todas as estratégias foi $x^* = (1.412, 0.377)^T$, com valor ótimo de função objetivo igual a 1.5087.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3	Estratégia 4	Estratégia 5
2	10(9); 0.1297	7(3); 0.0686	11(0); 0.0866	6(0); 0.0423	11(0); 0.0867	6(0); 0.0425

Tabela 2.7: Resultados numéricos para o problema das duas barras.

É interessante notar que, provavelmente devido à estrutura deste problema, a Estratégia 1 e as Estratégias 2 e 4 já fornecem resultados muito bons, e o impacto da suas combinações é ainda mais significativo, como confirmam as medidas relativas (2.27) e (2.28) apresentadas na Tabela 2.8.

n	Estratégia 1		Estratégia 2		Estratégia 3		Estratégia 4		Estratégia 5	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
2	53%	53%	58%	67%	32%	33%	58%	67%	32%	33%

Tabela 2.8: Medidas relativas para o problema das duas barras.

A Tabela 2.9 segue o padrão de valores mínimo, médio e máximo de subproblemas resolvidos, seguidos pela média dos tempos, dada em segundos. Para obter estes resultados, foram gerados 1000 pontos iniciais aleatoriamente distribuídos na caixa do problema. Cada estratégia foi usada para resolver estes 1000 casos.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3
2	(9, 23.2, 35); 0.3372	(7, 26.6, 43); 0.3658	(7, 13.6, 26); 0.0995	(5, 23.5, 46); 0.1716
			Estratégia 4	Estratégia 5
			(7, 12.7, 23); 0.0925	(6, 21.4, 45); 0.2257

Tabela 2.9: Outros resultados para o problema das duas barras.

A Figura 2.12 avalia o desempenho das seis estratégias para o problema das duas barras nos 1000 pontos iniciais distintos. Podemos observar que as Estratégias 2 e 4, que relaxam a condição conservadora, apresentaram os melhores desempenhos. As Estratégias 1, 3 e 5, que usam o parâmetro espectral, são competitivas em relação à estratégia de Svanberg. Em relação ao número de subproblemas resolvidos, a estratégia de Svanberg é menos eficiente, porém consegue resolver todos os problemas considerados com menos esforço do que as Estratégias 1, 3 e 5. Em relação ao tempo de CPU, as Estratégias 3 e 5, que combinam a atualização espectral com a relaxação da condição conservadora, são ligeiramente mais eficientes do que a estratégia de Svanberg e conseguem resolver a totalidade dos problemas antes desta.

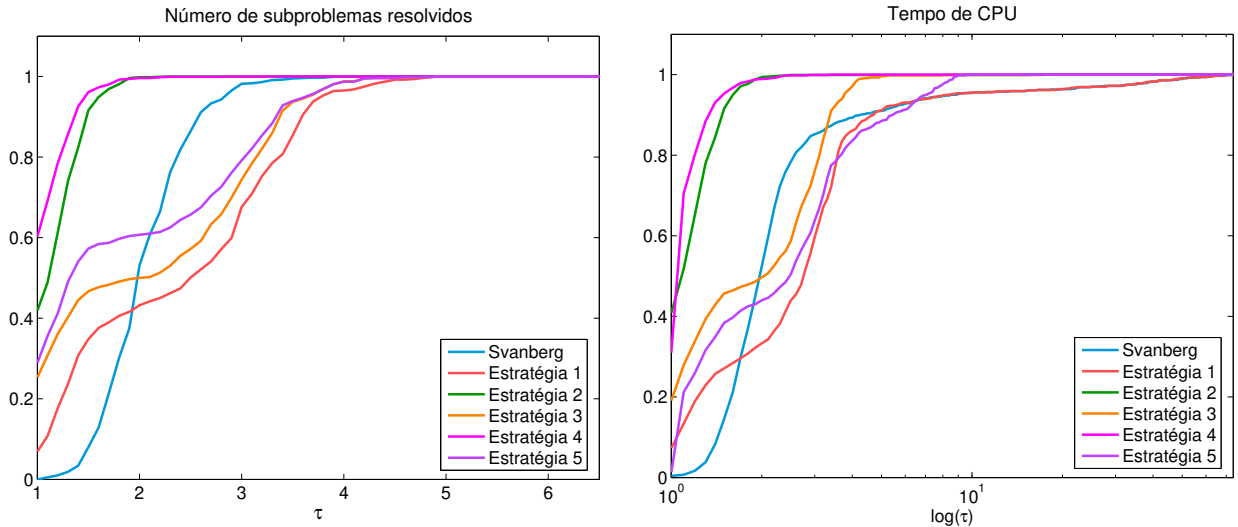


Figura 2.12: Perfil de desempenho para o problema das duas barras. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

2.5.3 Viga em balanço (*cantilever beam*)

A viga em balanço é uma construção sustentada apenas em uma das extremidades, isto é, apoiada em um só ponto, podendo receber também o nome de *viga engastada e livre* ou simplesmente *viga engastada*. Uma tradução do termo em inglês *cantilever*, ainda que

inexata, seria *apoiado pelo canto*. Pontes, asas de avião e varandas em edifícios são exemplos deste tipo de construção, assim como a prancha das histórias de piratas.

Para visualizar, imagine um guindaste: para ter o braço livre para erguer e mover as cargas, ele precisa ser pesado o suficiente para não virar, combinando também uma largura de base conveniente. Assim, apenas uma ponta do braço é apoiada e a outra fica livre.

Considere uma viga em balanço, construída com 5 elementos de viga, em que cada elemento possui um corte transversal oco quadrado, conforme mostra a Figura 2.13. A viga está rigidamente apoiada no nó 1, e existe uma força vertical agindo no nó 6.

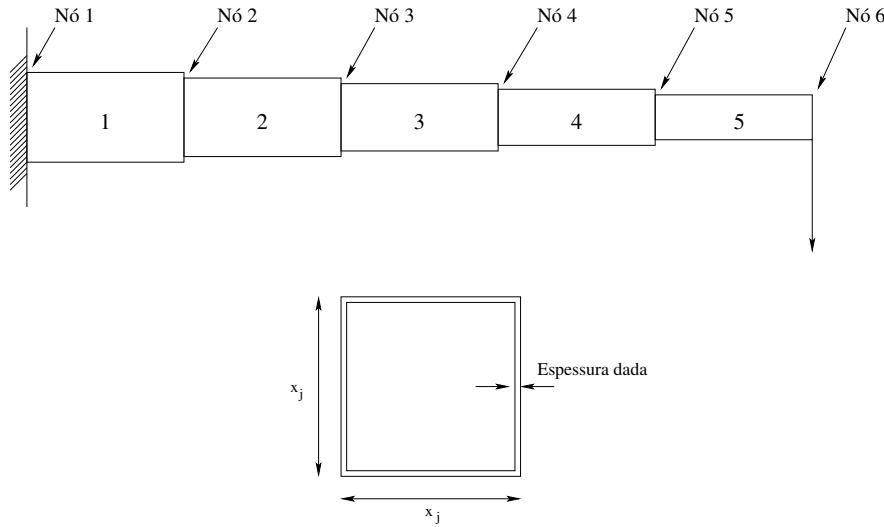


Figura 2.13: Viga em balanço e detalhe de um elemento.

As variáveis do problema são as alturas x_j dos diferentes elementos da viga, enquanto as espessuras são mantidas fixas. A função objetivo, a ser minimizada, é o peso da viga; e existe apenas uma função restrição, o deslocamento vertical no nó 6 (onde uma carga dada está agindo).

As cotas inferiores $x_j^{min} > 0$ das variáveis são escolhidas tão pequenas, e as cotas superiores x_j^{max} tão grandes, que elas nunca se tornam ativas neste problema.

Usando a teoria clássica de vigas, este problema pode ser formulado analiticamente da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
 &\text{minimizar} \quad C_1(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5) \\
 &\text{sujeito a} \quad \frac{61}{x_1^3} + \frac{37}{x_2^3} + \frac{19}{x_3^3} + \frac{7}{x_4^3} + \frac{1}{x_5^3} \leq C_2 \\
 &\quad \quad \quad x_j^{min} \leq x_j \leq x_j^{max}, \quad j = 1, \dots, 5,
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

em que C_1 e C_2 são constantes cujos valores dependem de propriedades materiais, da mag-

nitidade da carga dada, etc. No nosso caso, vamos usar $C_1 = 0.0624$ e $C_2 = 1.0$. Note que a função objetivo é linear e a restrição é uma função cúbica das variáveis recíprocas.

Adotando a estimativa viável $x_j^{(1)} = 5, \forall j$ como ponto inicial, o MMA e as outras três estratégias atingiram a solução ótima

$$x_1 = 6.016, x_2 = 5.309, x_3 = 4.494, x_4 = 3.502, x_5 = 2.153$$

com valor ótimo de função objetivo correspondente 1.3400. Os resultados estão apresentados na Tabela 2.10.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3	Estratégia 4	Estratégia 5
5	13(18); 0.2190	13(7); 0.1423	9(0); 0.0635	16(0); 0.1139	9(0); 0.0638	16(0); 0.1144

Tabela 2.10: Resultados numéricos para o problema da viga em balanço.

Todas as estratégias propostas obtiveram melhores resultados do que a estratégia de Svanberg, como pode ser visto na Tabela 2.11. Apesar do aumento no número de iterações externas nas Estratégias 3 e 5, nenhuma iteração interna adicional foi necessária, de modo que o tempo total de CPU foi reduzido.

n	Estratégia 1		Estratégia 2		Estratégia 3		Estratégia 4		Estratégia 5	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
5	65%	65%	29%	29%	52%	52%	29%	29%	52%	52%

Tabela 2.11: Medidas relativas para o problema da viga em balanço.

A Tabela 2.12 segue o padrão de valores mínimo, médio e máximo de subproblemas resolvidos, seguidos pela média dos tempos, dada em segundos. Para obter estes resultados, foram gerados 1000 pontos iniciais aleatoriamente distribuídos na caixa do problema. Cada estratégia foi usada para resolver estes 1000 casos. Pelos resultados apresentados nesta tabela, fica claro que o tempo utilizado melhora a cada estratégia para a primeira maneira (2.22)-(2.23) de relaxar a condição conservadora. Para a segunda maneira (2.24), esta melhora só acontece na combinação com a atualização espectral.

n	Svanberg	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3
5	(25, 47.4, 115); 6.2580	(16, 37.2, 90); 5.5982	(9, 21.8, 72); 1.0706	(8, 26, 64); 0.8832
			Estratégia 4	Estratégia 5
			(9, 26.4, 75); 5.7251	(8, 22.4, 45); 0.7848

Tabela 2.12: Outros resultados para o problema da viga em balanço.

A Figura 2.14 avalia o desempenho das seis estratégias para o problema da viga em balanço nos 1000 pontos iniciais aleatórios. Podemos observar que em relação ao número de subproblemas resolvidos, todas as estratégias propostas apresentaram desempenho superior à estratégia de Svanberg. Em relação ao tempo de CPU, as Estratégias 2, 3 e 5 foram as mais eficientes e resolveram todos os problemas antes das Estratégias 1 e 4, que tiveram desempenhos similares ao da estratégia de Svanberg.

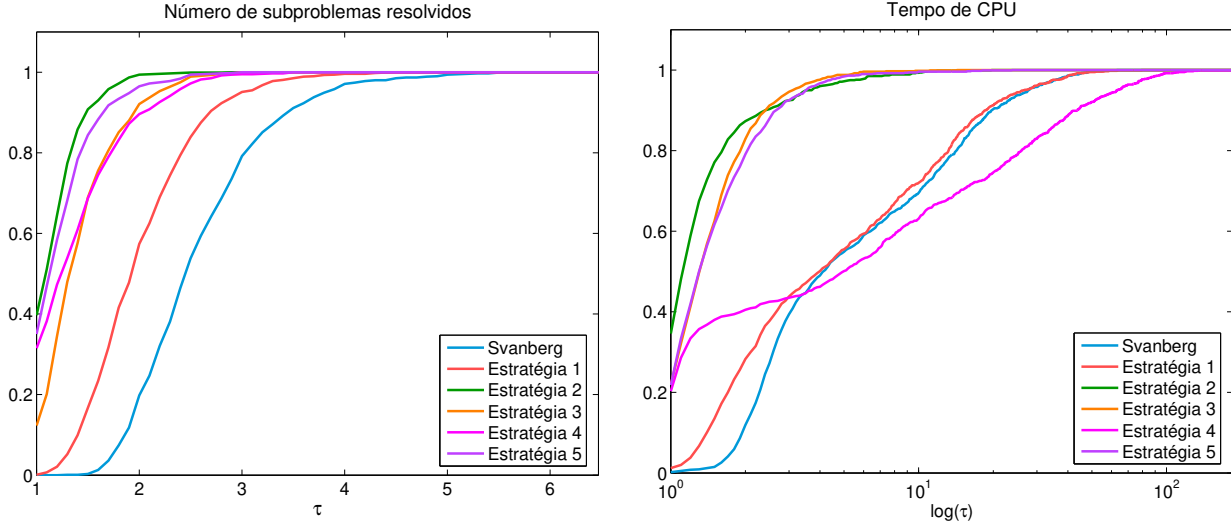


Figura 2.14: Perfil de desempenho para o problema da viga em balanço. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

2.5.4 Conclusões dos resultados numéricos

Dentre todas as estratégias testadas, aquelas que combinaram a atualização espectral com a relaxação da condição conservadora apresentaram os melhores resultados para os problemas tratados. De forma geral, a relaxação da condição conservadora aumentou a eficiência dos algoritmos. Entretanto, uma relaxação excessiva pode afetar a robustez do algoritmo, como constatamos para as dimensões $n = 500, 1000$ e 2000 do Problema 1. Por estes motivos, elegemos a Estratégia 3 como a melhor para resolver os problemas apresentados e, portanto, será adotada na sequência do trabalho. Embora as Estratégias 3 e 5 sejam bastante comparáveis, a Estratégia 5 está associada com a Estratégia 4, que não foi robusta, não conseguindo resolver alguns dos problemas no número máximo de iterações permitido. É importante observar que o fato da Estratégia 4 não ter resolvido alguns dos problemas, não significa que esta não é globalmente convergente, apenas seriam necessárias mais iterações. Assim, nos experimentos numéricos do próximo capítulo, utilizaremos apenas as Estratégias 1, 2 e 3, combinadas com a abordagem dual com região de confiança para a resolução dos subproblemas MMA. É importante observar que, para cada ponto inicial e para cada dimensão considerada, todas as estratégias atingiram a mesma solução ótima.

Capítulo 3

Solução dos subproblemas MMA: pontos interiores versus regiões de confiança

Existem pelo menos duas abordagens para a resolução dos subproblemas (1.22) no MMA: a abordagem dual e a abordagem de pontos interiores primal-dual. A abordagem dual foi implementada por Svanberg em **Fortran** [47] usando uma estratégia de busca linear. Já na abordagem primal-dual, implementada por Svanberg em **Matlab** [47], uma sequência de condições KKT relaxadas é resolvida pelo método de Newton. A descrição desta última abordagem, realizada em [43], é apresentada no início deste capítulo.

Em seguida apresentamos uma nova estratégia para resolver os subproblemas MMA por meio do problema dual, usando uma técnica de região de confiança. Mostramos que, fixado $\lambda \geq 0 \in \mathbb{R}^m$, o Lagrangiano $\mathcal{L}(x, y, \lambda)$ correspondente ao subproblema MMA pode ser facilmente minimizado em relação a $x \in X^{(k)}$ e $y \geq 0$. Se todas as constantes d_i forem não-negativas, esta minimização fornece um único ponto $(x(\lambda), y(\lambda))$. A função objetivo dual $\mathcal{W}(\lambda) = \mathcal{L}(x(\lambda), y(\lambda))$ pode ser escrita explicitamente e o problema de maximizar $\mathcal{W}(\lambda)$ sujeito a $\lambda \geq 0$ é resolvido com uma técnica de região de confiança que fornece a solução ótima $\hat{\lambda}$. Por fim, $(x(\hat{\lambda}), y(\hat{\lambda}))$ é a única solução ótima do subproblema (primal) MMA.

Nos experimentos numéricos, comparamos os resultados obtidos na abordagem de pontos interiores primal-dual de Svanberg com a nossa abordagem dual com região de confiança. Também, apresentamos os resultados dos testes obtidos quando incorporamos na abordagem dual a atualização espectral e a condição conservadora relaxada, descritas nas Seções 2.1 e 2.2, respectivamente.

Para simplificar a notação, omitimos os índices k e ℓ das iterações externas e internas, respectivamente. Também, denotamos a caixa do subproblema por meio dos valores α_j e β_j

de modo que, para $j = 1, \dots, n$,

$$\alpha_j = \max \{ x_j^{\min}, x_j^{(k)} - 0.9\sigma_j^{(k)} \} \quad \text{e} \quad \beta_j = \min \{ x_j^{\max}, x_j^{(k)} + 0.9\sigma_j^{(k)} \}.$$

Assim, o subproblema MMA pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & g_0(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \tfrac{1}{2} d_i y_i^2) \\ \text{sujeito a} \quad & g_i(x) - y_i \leq 0, & i = 1, \dots, m, \\ & \alpha_j \leq x_j \leq \beta_j, & j = 1, \dots, n, \\ & y_i \geq 0, & i = 1, \dots, m, \end{aligned} \tag{3.1}$$

em que

$$g_i(x) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}}{u_j - x_j} + \frac{q_{ij}}{x_j - l_j} \right) + r_i, \quad i = 0, 1, \dots, m,$$

com $p_{ij} > 0$, $q_{ij} > 0$, $l_j < \alpha_j < \beta_j < u_j$, $c_i \geq 0$ e $d_i > 0$ para $i = 1, \dots, m$ e $j = 1, \dots, n$.

3.1 Um método de pontos interiores para resolver os subproblemas MMA

Nesta seção, descrevemos um método de pontos interiores primal-dual para resolver problemas da forma (3.1). A descrição do método foi feita por Svanberg em [43] para uma formulação mais geral, que abrange problemas do tipo quadrados mínimos e minimax, de modo que a apresentação realizada aqui foi reescrita para a formulação (1.18), que inclui apenas as variáveis artificiais y_i , $i = 1, \dots, m$.

Condições de otimalidade para o subproblema

Como o subproblema MMA (3.1) é um problema estritamente convexo para o qual a condição de qualificação de Slater (ver [5, p.331]) é satisfeita, as condições KKT são necessárias e suficientes para uma solução ótima de (3.1). Para declarar estas condições, primeiramente enunciamos a função de Lagrange correspondente ao problema (3.1):

$$L(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu) = g_0(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \tfrac{1}{2} d_i y_i^2) +$$

$$+ \sum_{i=1}^m \lambda_i (g_i(x) - y_i) + \sum_{j=1}^n (\nu_j(\alpha_j - x_j) + \zeta_j(x_j - \beta_j)) - \sum_{i=1}^m \mu_i y_i,$$

onde $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$, $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_n)^T$, $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_n)^T$ e $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_m)^T$ são multiplicadores de Lagrange não-negativos para as diferentes restrições de (3.1). Seja

$$\psi(x, \lambda) = g_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_j(\lambda)}{u_j - x_j} + \frac{q_j(\lambda)}{x_j - l_j} \right) + r_0 + \lambda^T r,$$

onde $p_j(\lambda) = p_{0j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i p_{ij}$, $q_j(\lambda) = q_{0j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i q_{ij}$ e $\lambda^T r = \sum_{i=1}^m \lambda_i r_i$. Então a função de Lagrange pode ser escrita como:

$$L(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu) = \psi(x, \lambda) + \sum_{j=1}^n (\nu_j(\alpha_j - x_j) + \zeta_j(x_j - \beta_j)) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2 - \lambda_i y_i - \mu_i y_i),$$

e as condições KKT para o subproblema (3.1) são:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_j}(x, \lambda) - \nu_j + \zeta_j = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\partial L / \partial x_j = 0) \quad (3.2a)$$

$$c_i + d_i y_i - \lambda_i - \mu_i = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\partial L / \partial y_i = 0) \quad (3.2b)$$

$$g_i(x) - y_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade primal}) \quad (3.2c)$$

$$\lambda_i (g_i(x) - y_i) = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{complementaridade}) \quad (3.2d)$$

$$\nu_j(\alpha_j - x_j) = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{complementaridade}) \quad (3.2e)$$

$$\zeta_j(x_j - \beta_j) = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{complementaridade}) \quad (3.2f)$$

$$-\mu_i y_i = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{complementaridade}) \quad (3.2g)$$

$$\alpha_j - x_j \leq 0 \quad \text{e} \quad x_j - \beta_j \leq 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{viabilidade primal}) \quad (3.2h)$$

$$-y_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade primal}) \quad (3.2i)$$

$$\nu_j \geq 0 \quad \text{e} \quad \zeta_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{viabilidade dual}) \quad (3.2j)$$

$$\mu_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade dual}) \quad (3.2k)$$

$$\lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{viabilidade dual}) \quad (3.2l)$$

onde

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_j}(x, \lambda) = \frac{p_j(\lambda)}{(u_j - x_j)^2} - \frac{q_j(\lambda)}{(x_j - l_j)^2}.$$

Condições de otimalidade “ ε -relaxadas” para o subproblema

Quando um método de pontos interiores primal-dual é usado para resolver o subproblema (3.1), os zeros no lado direito das condições de complementaridade (3.2d)-(3.2g) são substituídos por um parâmetro pequeno $\varepsilon > 0$. Também, variáveis de folga s_i são introduzidas para as restrições (3.2c). Assim, as condições de otimalidade “ ε -relaxadas” são

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_j}(x, \lambda) - \nu_j + \zeta_j = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (3.3a)$$

$$c_i + d_i y_i - \lambda_i - \mu_i = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.3b)$$

$$g_i(x) - y_i + s_i = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.3c)$$

$$\nu_j(x_j - \alpha_j) - \varepsilon = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (3.3d)$$

$$\zeta_j(\beta_j - x_j) - \varepsilon = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (3.3e)$$

$$\mu_i y_i - \varepsilon = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.3f)$$

$$\lambda_i s_i - \varepsilon = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.3g)$$

$$x_j - \alpha_j > 0 \quad \text{e} \quad \nu_j > 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (3.3h)$$

$$\beta_j - x_j > 0 \quad \text{e} \quad \zeta_j > 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (3.3i)$$

$$y_i > 0 \quad \text{e} \quad \mu_i > 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.3j)$$

$$s_i > 0 \quad \text{e} \quad \lambda_i > 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.3k)$$

Para cada $\varepsilon > 0$, existe uma única solução $(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu, s)$ destas condições. De fato, as condições (3.3) são equivalentes às condições KKT do seguinte problema estritamente convexo nas variáveis x , y e s :

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & g_0(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2) \\ & + \sum_{j=1}^n (-\varepsilon \log(x_j - \alpha_j) - \varepsilon \log(\beta_j - x_j)) + \\ & + \sum_{i=1}^m (-\varepsilon \log y_i - \varepsilon \log s_i) \\ \text{sujeito a} \quad & g_i(x) - y_i + s_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & (\alpha_j < x_j < \beta_j, \quad y_i > 0, \quad s_i > 0) \end{aligned}$$

onde as desigualdades estritas são automaticamente satisfeitas por causa dos termos logarítmicos na função objetivo.

Uma direção de Newton para as condições de otimalidade (3.3)

Seja $(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu, s)$ um ponto tal que as expressões (3.3h)-(3.3k) são satisfeitas. Se, iniciando deste ponto, aplicarmos o método de Newton ao sistema de equações não-lineares (3.3a)-(3.3g), o seguinte sistema de equações lineares é gerado e deve ser resolvido a cada iteração:

$$\begin{pmatrix} \Psi & 0 & G^T & -I & I & 0 & 0 \\ 0 & \langle d \rangle & -I & 0 & 0 & -I & 0 \\ G & -I & 0 & 0 & 0 & 0 & I \\ \langle \nu \rangle & 0 & 0 & \langle x - \alpha \rangle & 0 & 0 & 0 \\ -\langle \zeta \rangle & 0 & 0 & 0 & \langle \beta - x \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle \mu \rangle & 0 & 0 & 0 & \langle y \rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle s \rangle & 0 & 0 & 0 & \langle \lambda \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta \lambda \\ \Delta \nu \\ \Delta \zeta \\ \Delta \mu \\ \Delta s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\delta_1 \\ -\delta_2 \\ -\delta_3 \\ -\delta_4 \\ -\delta_5 \\ -\delta_6 \\ -\delta_7 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

onde $\delta_1, \dots, \delta_7$ são definidos pelos lados esquerdos de (3.3a)-(3.3g), $\Psi \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz diagonal com

$$(\Psi)_{jj} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j^2}(x, \lambda) = \frac{2p_j(\lambda)}{(u_j - x_j)^3} + \frac{2q_j(\lambda)}{(x_j - l_j)^3},$$

$G \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é uma matriz com componentes

$$(G)_{ij} = \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) = \frac{p_{ij}}{(u_j - x_j)^2} - \frac{q_{ij}}{(x_j - l_j)^2},$$

I é a matriz identidade com dimensão adequada, $\langle d \rangle$ é uma matriz diagonal com o vetor $d = (d_1, \dots, d_m)^T$ na diagonal, $\langle x - \alpha \rangle$ é uma matriz diagonal com o vetor $x - \alpha$ na diagonal, etc.

No sistema de Newton (3.4), as variáveis $\Delta \nu$, $\Delta \zeta$, $\Delta \mu$ e Δs podem ser eliminadas por

$$\begin{aligned} \Delta \nu &= -\langle x - \alpha \rangle^{-1} \langle \nu \rangle \Delta x - \nu + \varepsilon \langle x - \alpha \rangle^{-1} e, \\ \Delta \zeta &= \langle \beta - x \rangle^{-1} \langle \zeta \rangle \Delta x - \zeta + \varepsilon \langle \beta - x \rangle^{-1} e, \\ \Delta \mu &= -\langle y \rangle^{-1} \langle \mu \rangle \Delta y - \mu + \varepsilon \langle y \rangle^{-1} e, \\ \Delta s &= -\langle \lambda \rangle^{-1} \langle s \rangle \Delta \lambda - s + \varepsilon \langle \lambda \rangle^{-1} e, \end{aligned}$$

onde $e = (1, \dots, 1)^T$, com dimensão adequada. Então, o seguinte sistema parcialmente

reduzido em $(\Delta x, \Delta y, \Delta \lambda)$ é obtido:

$$\begin{pmatrix} D_x & 0 & G^T \\ 0 & D_y & -I \\ G & -I & D_\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\delta_x \\ -\delta_y \\ -\delta_\lambda \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

onde

$$\begin{aligned} D_x &= \Psi + \langle x - \alpha \rangle^{-1} \langle \nu \rangle + \langle \beta - x \rangle^{-1} \langle \zeta \rangle, \\ D_y &= \langle d \rangle + \langle y \rangle^{-1} \langle \mu \rangle, \\ D_\lambda &= -\langle \lambda \rangle^{-1} \langle s \rangle, \\ \delta_x &= \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, \lambda) - \varepsilon \langle x - \alpha \rangle^{-1} e + \varepsilon \langle \beta - x \rangle^{-1} e, \\ \delta_y &= c + \langle d \rangle y - \lambda - \varepsilon \langle y \rangle^{-1} e, \\ \delta_\lambda &= g(x) - y + \varepsilon \langle \lambda \rangle^{-1} e. \end{aligned}$$

No sistema (3.5), a variável Δy pode ser eliminada por

$$\Delta y = D_y^{-1} \Delta \lambda - D_y^{-1} \delta_y,$$

de modo que o seguinte sistema parcialmente reduzido em Δx e $\Delta \lambda$ é obtido:

$$\begin{pmatrix} D_x & G^T \\ G & D_\lambda - D_y^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\delta_x \\ -(\delta_\lambda + D_y^{-1} \delta_y) \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Agora, dependendo do número de variáveis originais n e do número de restrições de desigualdade m do problema a ser resolvido, a melhor maneira de resolver o sistema (3.6) é escolhida. Se $m < n$ então Δx é eliminado e um novo sistema em $\Delta \lambda$ é finalmente resolvido. Caso contrário, se $m \geq n$ então $\Delta \lambda$ é eliminado e um novo sistema na variável Δx é resolvido. Cada um destes processos é descrito a seguir.

Caso $m < n$: no sistema (3.6) a variável Δx pode ser eliminada por

$$\Delta x = -D_x^{-1} G^T \Delta \lambda - D_x^{-1} \delta_x,$$

de modo que o seguinte sistema na variável $\Delta \lambda$ é obtido:

$$(GD_x^{-1}G^T - (D_\lambda - D_y^{-1})) \Delta \lambda = \delta_\lambda + D_y^{-1} \delta_y - GD_x^{-1} \delta_x. \quad (3.7)$$

Caso $m \geq n$: no sistema (3.6) a variável $\Delta\lambda$ pode ser eliminada por

$$\Delta\lambda = -(D_\lambda - D_y^{-1})^{-1}G\Delta x - (D_\lambda - D_y^{-1})^{-1}(\delta_\lambda + D_y^{-1}\delta_y),$$

de modo que o seguinte sistema na variável Δx é obtido:

$$(D_x - G^T(D_\lambda - D_y^{-1})^{-1}G) \Delta x = -(\delta_x - G^T(D_\lambda - D_y^{-1})^{-1}(\delta_\lambda + D_y^{-1}\delta_y)). \quad (3.8)$$

Note que as matrizes $GD_x^{-1}G^T - (D_\lambda - D_y^{-1})^{-1}$ e $D_x - G^T(D_\lambda - D_y^{-1})^{-1}G$ são simétricas e definidas positivas pois as matrizes D_x , D_y e $-D_\lambda$ também são.

Busca-linear na direção de Newton

Uma vez determinada a direção de Newton $(\Delta x, \Delta y, \Delta\lambda, \Delta\nu, \Delta\zeta, \Delta\mu, \Delta s)$, é preciso verificar se esta pode, ou não, ser utilizada com passo completo para assegurar a viabilidade do próximo iterando. Deste modo, inicialmente toma-se θ como sendo o maior número tal que $\theta \leq 1$ e

$$\begin{aligned} x_j + \theta\Delta x_j - \alpha_j &\geq 0.01(x_j - \alpha_j), \\ \beta_j - (x_j + \theta\Delta x_j) &\geq 0.01(\beta_j - x_j), \\ y_i + \theta\Delta y_i &\geq 0.01y_i, \\ \lambda_i + \theta\Delta\lambda_i &\geq 0.01\lambda_i, \\ \nu_j + \theta\Delta\nu_j &\geq 0.01\nu_j, \\ \zeta_j + \theta\Delta\zeta_j &\geq 0.01\zeta_j, \\ \mu_i + \theta\Delta\mu_i &\geq 0.01\mu_i, \\ s_i + \theta\Delta s_i &\geq 0.01s_i \end{aligned}$$

para todo i e j . Assim, se um passo de tamanho θ na direção de Newton é tomado, o ponto resultante tem todas as variáveis estritamente positivas. Mas para garantir convergência, o novo ponto também deve melhorar o resíduo das condições de otimalidade “ ε -relaxadas” (3.3a)-(3.3g), em relação ao ponto anterior. Portanto, toma-se τ como o maior número da sequência $\theta, \theta/2, \theta/4, \theta/8, \dots$ tal que

$$\left\| \delta\left((x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu, s) + \tau(\Delta x, \Delta y, \Delta\lambda, \Delta\nu, \Delta\zeta, \Delta\mu, \Delta s)\right) \right\| < \|\delta(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu, s)\|,$$

onde $\delta(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu, s)$ é o vetor resíduo definido pelos lados esquerdos das condições KKT “ ε -relaxadas” (3.3a)-(3.3g). Note que sempre é possível obter este tamanho de passo τ pois

a direção de Newton é uma direção de descida para $||\delta(x, y, \lambda, \nu, \zeta, \mu, s)||$.

Algoritmo para resolver o subproblema MMA

Escolha um valor inicial para $\varepsilon^{(1)}$ e uma estimativa inicial $(x^{(1)}, y^{(1)}, \lambda^{(1)}, \nu^{(1)}, \zeta^{(1)}, \mu^{(1)}, s^{(1)})$ que satisfaça (3.3h)-(3.3k). Por exemplo,

$$\varepsilon^{(1)} = 1, \quad x_j^{(1)} = \frac{1}{2}(\alpha_j + \beta_j), \quad y_i^{(1)} = 1, \quad \lambda_i^{(1)} = 1,$$

$$\nu_j^{(1)} = 1/(x_j^{(1)} - \alpha_j), \quad \zeta_j^{(1)} = 1/(\beta_j - x_j^{(1)}), \quad \mu_i^{(1)} = 1, \quad s_i^{(1)} = 1.$$

Calcule o resíduo $\delta^{(1)} = \delta(x^{(1)}, y^{(1)}, \lambda^{(1)}, \nu^{(1)}, \zeta^{(1)}, \mu^{(1)}, s^{(1)})$.

Para $\kappa = 1, 2, \dots$

Calcule a direção $(\Delta x^{(\kappa)}, \Delta y^{(\kappa)}, \Delta \lambda^{(\kappa)}, \Delta \nu^{(\kappa)}, \Delta \zeta^{(\kappa)}, \Delta \mu^{(\kappa)}, \Delta s^{(\kappa)})$ resolvendo o sistema de equações lineares reduzido (3.7) ou (3.8) e realizando as substituições correspondentes.

Realize a busca linear, calculando o tamanho do passo $\tau^{(\kappa)}$.

Calcule o novo ponto $(x^{(\kappa+1)}, y^{(\kappa+1)}, \lambda^{(\kappa+1)}, \nu^{(\kappa+1)}, \zeta^{(\kappa+1)}, \mu^{(\kappa+1)}, s^{(\kappa+1)}) = (x^{(\kappa)}, y^{(\kappa)}, \lambda^{(\kappa)}, \nu^{(\kappa)}, \zeta^{(\kappa)}, \mu^{(\kappa)}, s^{(\kappa)}) + \tau^{(\kappa)}(\Delta x^{(\kappa)}, \Delta y^{(\kappa)}, \Delta \lambda^{(\kappa)}, \Delta \nu^{(\kappa)}, \Delta \zeta^{(\kappa)}, \Delta \mu^{(\kappa)}, \Delta s^{(\kappa)})$.

Calcule o novo resíduo $\delta^{(\kappa+1)} = \delta(x^{(\kappa+1)}, y^{(\kappa+1)}, \lambda^{(\kappa+1)}, \nu^{(\kappa+1)}, \zeta^{(\kappa+1)}, \mu^{(\kappa+1)}, s^{(\kappa+1)})$.

Se $||\delta^{(\kappa+1)}|| < \varepsilon^{(\kappa)}$

$$\varepsilon^{(\kappa+1)} = \varepsilon^{(\kappa)} / 10$$

senão

$$\varepsilon^{(\kappa+1)} = \varepsilon^{(\kappa)}.$$

Fim

Fim

O processo termina quando $\varepsilon^{(\kappa)}$ se torna suficientemente pequeno.

3.2 Uma abordagem dual para resolver os subproblemas MMA

Nesta seção apresentamos uma nova estratégia para resolver os subproblemas MMA por meio do problema dual, usando uma técnica de região de confiança. Inicialmente, mostramos como obter uma expressão explícita para a função objetivo dual, obtendo assim o problema dual correspondente ao subproblema MMA. Estabelecemos diversas propriedades associadas

à função objetivo dual. Depois, propomos um método de região de confiança e apresentamos o algoritmo.

3.2.1 O dual do subproblema MMA

Considerando apenas as restrições principais, uma vez que as restrições simples de canalização e não-negatividade são incorporadas no processo de minimização, o Lagrangiano correspondente ao subproblema (3.1) é dado por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(x, y, \lambda) &= g_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2) - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i \\
&= \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{0j}}{u_j - x_j} + \frac{q_{0j}}{x_j - l_j} \right) + r_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i \left(\sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}}{u_j - x_j} + \frac{q_{ij}}{x_j - l_j} \right) + r_i \right) \\
&\quad + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2) - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i \\
&= \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{0j} + \lambda^T p_j}{u_j - x_j} + \frac{q_{0j} + \lambda^T q_j}{x_j - l_j} \right) + r_0 + \lambda^T r + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2 - \lambda_i y_i) \\
&= \sum_{j=1}^n \mathcal{L}_j(x_j, \lambda) + r_0 + \lambda^T r + \sum_{i=1}^m (c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2 - \lambda_i y_i)
\end{aligned}$$

onde $r = (r_1, \dots, r_m)^T$, $p_j = (p_{1j}, \dots, p_{mj})^T$, $q_j = (q_{1j}, \dots, q_{mj})^T$,

$$\mathcal{L}_j(x_j, \lambda) = \frac{p_{0j} + \lambda^T p_j}{u_j - x_j} + \frac{q_{0j} + \lambda^T q_j}{x_j - l_j},$$

e $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange.

A função objetivo dual \mathcal{W} é definida, para $\lambda \geq 0$, da seguinte maneira:

$$\mathcal{W}(\lambda) = \min_{x, y} \{ \mathcal{L}(x, y, \lambda); \alpha_j \leq x_j \leq \beta_j, y_i \geq 0, \forall i, \forall j \} \quad (3.9)$$

$$= r_0 + \lambda^T r + \sum_{j=1}^n \widehat{\mathcal{W}}_j(\lambda) + \sum_{i=1}^m \widetilde{\mathcal{W}}_i(\lambda)$$

onde

$$\widehat{\mathcal{W}}_j(\lambda) = \min_{x_j} \{\mathcal{L}_j(x_j, \lambda); \alpha_j \leq x_j \leq \beta_j\}, \quad j = 1, \dots, n, \quad (3.10)$$

$$\widehat{\mathcal{W}}_i(\lambda) = \min_{y_i} \{c_i y_i + \frac{1}{2} d_i y_i^2 - \lambda_i y_i; y_i \geq 0\}, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.11)$$

Observe que é a separabilidade do subproblema primal (3.1) que permite que a função Lagrangiana $\mathcal{L}(x, y, \lambda)$ possa ser escrita como a soma de $n + m$ funções individuais, e portanto, o problema de minimização $(n + m)$ -dimensional (3.9) possa ser dividido nos $n + m$ problemas de minimização (3.10) e (3.11). Além disso, a convexidade das funções envolvidas assegura a existência dos minimizadores de (3.10) e (3.11). Essa existência justifica o uso do mínimo no lugar do ínfimo em (3.9)-(3.11). Na sequência, vamos obter a expressão dos minimizadores de (3.10) e (3.11), que denotaremos por $x_j(\lambda)$ e $y_i(\lambda_i)$, respectivamente, pois dependem de λ .

A derivada parcial de $\mathcal{L}_j(x_j, \lambda)$ em relação a x_j é dada por:

$$\frac{\partial \mathcal{L}_j}{\partial x_j}(x_j, \lambda) = \frac{p_{0j} + \lambda^T p_j}{(u_j - x_j)^2} - \frac{q_{0j} + \lambda^T q_j}{(x_j - l_j)^2},$$

e a derivada parcial de segunda ordem não-mista de $\mathcal{L}_j(x_j, \lambda)$ em relação a x_j é dada por:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}_j}{\partial x_j^2}(x_j, \lambda) = \frac{2(p_{0j} + \lambda^T p_j)}{(u_j - x_j)^3} + \frac{2(q_{0j} + \lambda^T q_j)}{(x_j - l_j)^3},$$

para cada $j = 1, \dots, n$. Note que como $\lambda \geq 0, p_{ij} > 0$ e $q_{ij} > 0$ temos $p_{0j} + \lambda^T p_j > 0$ e $q_{0j} + \lambda^T q_j > 0$. Portanto, $\mathcal{L}_j(x_j, \lambda)$ é uma função estritamente convexa de x_j . Também, como $\partial^2 \mathcal{L}_j / \partial x_j^2(x_j, \lambda)$ é estritamente positiva, a derivada $\partial \mathcal{L}_j / \partial x_j(x_j, \lambda)$ é estritamente crescente em x_j , de modo que podemos concluir sobre o minimizador $x_j(\lambda)$ de (3.10) que:

Caso 1: se $\partial \mathcal{L}_j / \partial x_j(\alpha_j, \lambda) \geq 0$ então $x_j(\lambda) = \alpha_j$;

Caso 2: se $\partial \mathcal{L}_j / \partial x_j(\beta_j, \lambda) \leq 0$ então $x_j(\lambda) = \beta_j$;

Caso 3: se $\partial \mathcal{L}_j / \partial x_j(\alpha_j, \lambda) < 0$ e $\partial \mathcal{L}_j / \partial x_j(\beta_j, \lambda) > 0$ então $x_j(\lambda)$ é a única solução da equação $\partial \mathcal{L}_j / \partial x_j(x_j, \lambda) = 0$, ou seja,

$$x_j^*(\lambda) = \frac{(p_{0j} + \lambda^T p_j)^{1/2} l_j + (q_{0j} + \lambda^T q_j)^{1/2} u_j}{(p_{0j} + \lambda^T p_j)^{1/2} + (q_{0j} + \lambda^T q_j)^{1/2}}.$$

Desta forma, combinando os três casos, obtemos para cada $j = 1, \dots, n$:

$$x_j(\lambda) = \max \left\{ \alpha_j, \min \left\{ \beta_j, \frac{(p_{0j} + \lambda^T p_j)^{1/2} l_j + (q_{0j} + \lambda^T q_j)^{1/2} u_j}{(p_{0j} + \lambda^T p_j)^{1/2} + (q_{0j} + \lambda^T q_j)^{1/2}} \right\} \right\}. \quad (3.12)$$

Analogamente, obtemos a expressão de $y_i(\lambda_i)$, que é dado por:

$$y_i(\lambda_i) = \max \left\{ 0, \frac{\lambda_i - c_i}{d_i} \right\}, \text{ para cada } i = 1, \dots, m. \quad (3.13)$$

Observe que $x_j : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ e $y_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ são funções contínuas de λ , mas não são diferenciáveis nos pontos λ tais que $x_j(\lambda) = \alpha_j$ e $x_j(\lambda) = \beta_j$, para todo $j = 1, \dots, n$, e $\lambda_i = c_i$, para todo $i = 1, \dots, m$, respectivamente. A Figura 3.1 ilustra o comportamento da função $x_j(\lambda)$, em exemplos onde $\lambda \in \mathbb{R}$. Observe que não existe um padrão para a curvatura de $x_j(\lambda)$, ambos os casos apresentados na Figura 3.1 podem ocorrer. A Figura 3.2 ilustra os gráficos da função $y_i(\lambda_i)$ e de sua derivada. Note que d_i é sempre positivo e que a derivada $y'_i(\lambda_i)$ não está definida em $\lambda_i = c_i$.

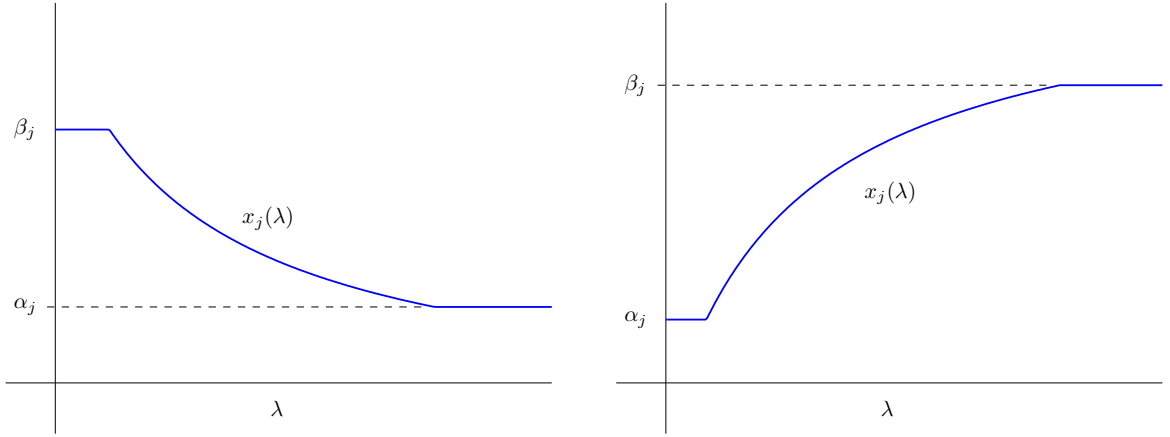


Figura 3.1: Comportamento da função $x_j(\lambda)$, para $\lambda \in \mathbb{R}$.

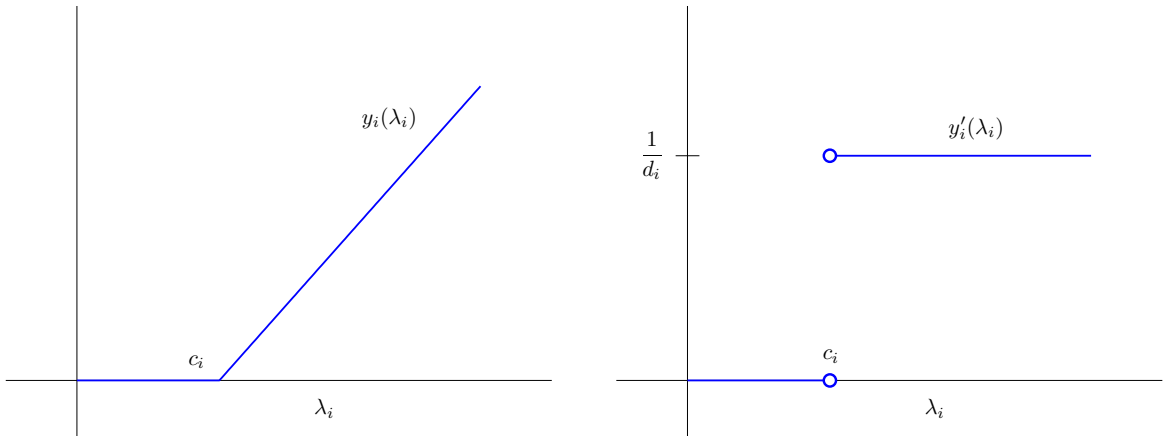


Figura 3.2: Funções $y_i(\lambda_i)$ e $y'_i(\lambda_i)$.

Como existem expressões explícitas para os minimizadores $x_j(\lambda)$ de (3.10) e $y_i(\lambda_i)$ de (3.11),

existe também uma expressão explícita para a função objetivo dual (3.9), que é a seguinte:

$$\begin{aligned}\mathcal{W}(\lambda) = & r_0 + \lambda^T r + \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{0j} + \lambda^T p_j}{u_j - x_j(\lambda)} + \frac{q_{0j} + \lambda^T q_j}{x_j(\lambda) - l_j} \right) \\ & + \sum_{i=1}^m \left(c_i y_i(\lambda_i) + \frac{1}{2} d_i y_i^2(\lambda_i) - \lambda_i y_i(\lambda_i) \right).\end{aligned}$$

Desta maneira, o problema dual correspondente ao subproblema MMA (3.1) é dado por

$$\begin{aligned}\text{maximizar } & \mathcal{W}(\lambda) \\ \text{sujeito a } & \lambda \geq 0.\end{aligned}\tag{3.14}$$

Uma vez resolvido o problema dual (3.14), a solução ótima do subproblema (primal) MMA (3.1) é obtida substituindo a solução dual ótima nas expressões de $x_j(\lambda)$ e $y_i(\lambda_i)$.

3.2.2 Propriedades da função objetivo dual

Antes de propor nossa abordagem de resolução do problema dual (3.14) correspondente ao subproblema MMA (3.1), vamos estabelecer algumas propriedades associadas à função objetivo dual \mathcal{W} .

Observe primeiramente que a função $\mathcal{W} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua pois $x_j(\lambda)$ e $y_i(\lambda_i)$ dependem continuamente de λ e $l_j < \alpha_j \leq x_j(\lambda) \leq \beta_j < u_j$. Mais do que isso, a função \mathcal{W} é continuamente diferenciável e suas derivadas parciais de primeira ordem em relação às variáveis duais λ_i são dadas pelas restrições do subproblema primal avaliadas em $x_j(\lambda)$ e $y_i(\lambda_i)$. Embora $\frac{\partial x_j}{\partial \lambda_i}(\lambda)$ não esteja definida para todo $\lambda \geq 0$, com um abuso de notação, esta derivada será utilizada no cálculo de $\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \lambda_i}(\lambda)$ a seguir:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \lambda_i}(\lambda) &= r_i + c_i y_i'(\lambda_i) + d_i y_i(\lambda_i) y_i'(\lambda_i) - y_i(\lambda_i) - \lambda_i y_i'(\lambda_i) \\ &+ \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}(u_j - x_j(\lambda)) + (p_{0j} + \lambda^T p_j) \left(\frac{\partial x_j}{\partial \lambda_i}(\lambda) \right)}{(u_j - x_j(\lambda))^2} + \frac{q_{ij}(x_j(\lambda) - l_j) - (q_{0j} + \lambda^T q_j) \left(\frac{\partial x_j}{\partial \lambda_i}(\lambda) \right)}{(x_j(\lambda) - l_j)^2} \right) \\ &= r_i - y_i(\lambda_i) + [d_i y_i(\lambda_i) - (\lambda_i - c_i)] y_i'(\lambda_i) \\ &+ \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}}{u_j - x_j(\lambda)} + \frac{q_{ij}}{x_j(\lambda) - l_j} \right) + \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{0j} + \lambda^T p_j}{(u_j - x_j(\lambda))^2} - \frac{q_{0j} + \lambda^T q_j}{(x_j(\lambda) - l_j)^2} \right) \left(\frac{\partial x_j}{\partial \lambda_i}(\lambda) \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= r_i - y_i(\lambda_i) + [d_i y_i(\lambda) - (\lambda_i - c_i)] y'_i(\lambda_i) \\
&+ \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}}{u_j - x_j(\lambda)} + \frac{q_{ij}}{x_j(\lambda) - l_j} \right) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial \mathcal{L}_j}{\partial x_j}(x_j(\lambda), \lambda) \left(\frac{\partial x_j}{\partial \lambda_i}(\lambda) \right).
\end{aligned}$$

Note que se acontecer a situação do Caso 3 então $\partial \mathcal{L}_j / \partial x_j(x_j(\lambda), \lambda) = 0$, e se acontecer a situação do Caso 1 ou do Caso 2 então $\partial x_j / \partial \lambda_i(\lambda) = 0$. Ainda, se $\lambda_i < c_i$ então $y_i(\lambda_i) = 0$ e daí $y'_i(\lambda_i) = 0$; e se $\lambda_i > c_i$ então $[d_i y_i(\lambda_i) - (\lambda_i - c_i)] = 0$, logo

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \lambda_i}(\lambda) = g_i(x(\lambda)) - y_i(\lambda) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{ij}}{u_j - x_j(\lambda)} + \frac{q_{ij}}{x_j(\lambda) - l_j} \right) + r_i - y_i(\lambda_i), \quad (3.15)$$

para todo $i = 1, \dots, m$ e $\lambda \in \mathbb{R}_+^m$, tais que

$$\alpha_j < x_j(\lambda) < \beta_j, \forall j = 1, \dots, n \text{ ou } \lambda_i \neq c_i, \forall i = 1, \dots, m. \quad (3.16)$$

Para os pontos $\lambda \in \mathbb{R}_+^m$ em que (3.16) não acontece, isto é, para λ tal que $x_j(\lambda) = \alpha_j$ ou $x_j(\lambda) = \beta_j$ ou ainda $\lambda_i = c_i$, a equação (3.15) também vale pela Proposição 6.1.1 de [5]. Note que apesar de y não estar em um conjunto compacto, a existência do minimizador (3.13) justifica o uso de tal proposição. Embora pudéssemos ter simplesmente utilizado a Proposição 6.1.1 de [5] para obter (3.15), optamos por manter o desenvolvimento acima por ser simples e construtivo.

Além disso, pelo fato de o problema dual poder ser escrito explicitamente, e por causa de o problema primal associado exibir uma forma algébrica relativamente simples, as derivadas parciais de segunda ordem da função dual podem ser escritas em uma fórmula fechada, com o mesmo abuso de notação anterior com relação a $\frac{\partial x_j}{\partial \lambda_i}(\lambda)$:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{W}}{\partial \lambda_i \partial \lambda_k}(\lambda) = -y'_i(\lambda_i) + \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{p_{ij}}{(u_j - x_j(\lambda))^2} - \frac{q_{ij}}{(x_j(\lambda) - l_j)^2} \right) \left(\frac{\partial x_j}{\partial \lambda_k}(\lambda) \right) \right].$$

O valor da derivada $\partial x_j / \partial \lambda_k(\lambda)$ assumido por uma variável $x_j(\lambda)$ livre ($\alpha_j < x_j(\lambda) < \beta_j$) pode ser diferente do valor desta derivada quando a variável $x_j(\lambda)$ é fixa ($x_j(\lambda) = \alpha_j$ ou $x_j(\lambda) = \beta_j$), que é obviamente zero. Isto significa que as derivadas de segunda ordem da função dual são descontínuas sempre que uma variável primal livre se torna fixa, ou vice-versa. Pela expressão primal-dual (3.12), vemos que o espaço dual é particionado em várias regiões separadas por hiper-curvas de descontinuidade de segunda ordem. Estas curvas são

definidas por:

$$x_j^*(\lambda) = \alpha_j \quad \text{e} \quad x_j^*(\lambda) = \beta_j$$

e estão apresentadas nas Figuras 3.3 e 3.4 em dois exemplos onde $\lambda \in \mathbb{R}^2$, juntamente com o gráfico da função $x_j^*(\lambda)$.

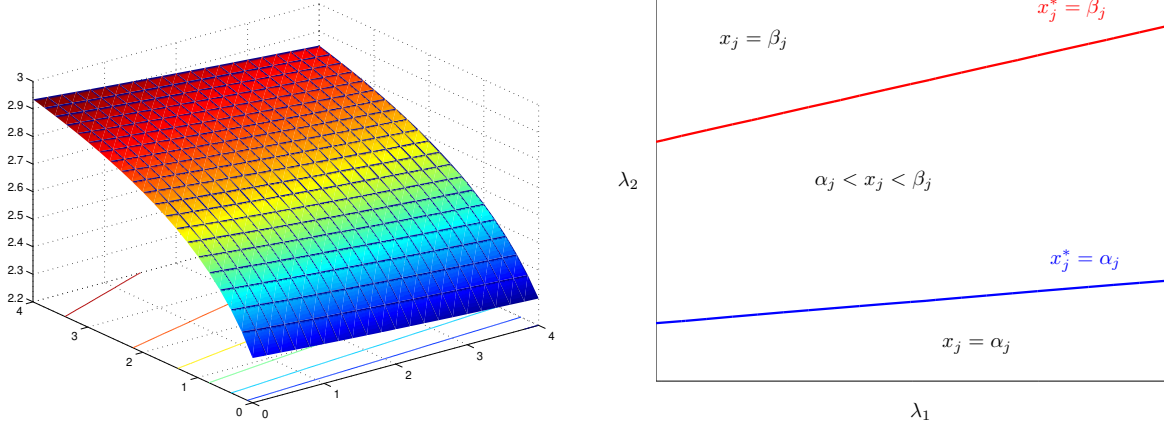


Figura 3.3: Primeiro exemplo da função $x_j^*(\lambda)$ e suas curvas de descontinuidade de segunda ordem.

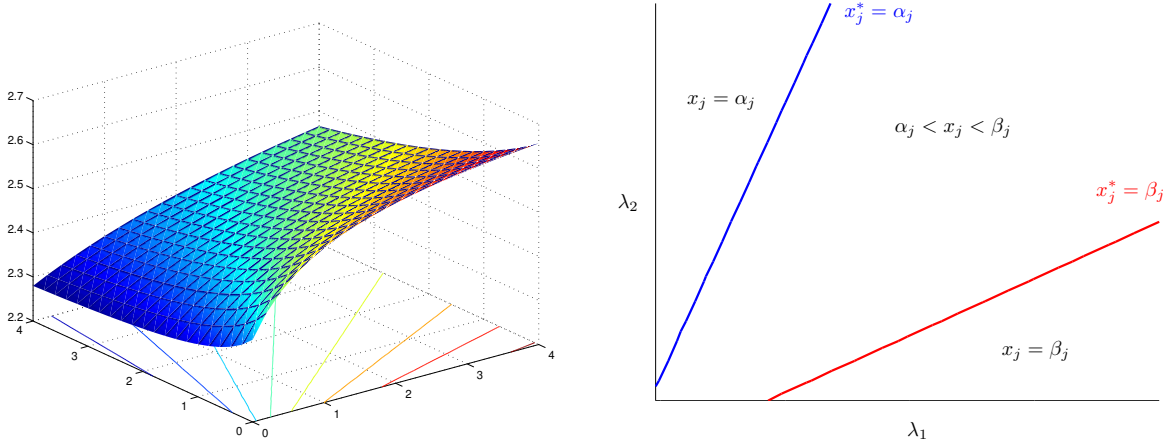


Figura 3.4: Segundo exemplo da função $x_j^*(\lambda)$ e suas curvas de descontinuidade de segunda ordem.

A dificuldade fundamental de usar um método do tipo Newton para resolver o problema dual reside nestas descontinuidades inerentes da matriz Hessiana. No entanto, baseados nos conceitos de planos de descontinuidade de segunda ordem, vários algoritmos foram idealizados para resolver o problema dual [18, 19, 20, 21, 22].

A função \mathcal{W} é côncava, pois é o mínimo, ponto a ponto, de uma coleção de funções que são lineares em λ . Este fato pode ser formalizado:

Proposição 6. (cf. [5, Prop. 5.1.2])

A função dual \mathcal{W} é côncava em seu domínio efetivo $D = \{\lambda \mid \mathcal{W}(\lambda) > -\infty\}$ e o conjunto D é convexo.

Demonstração: Para quaisquer $x, y, \lambda, \bar{\lambda}$ e $\theta \in [0, 1]$ temos

$$\mathcal{L}(x, y, \theta\lambda + (1 - \theta)\bar{\lambda}) = \theta\mathcal{L}(x, y, \lambda) + (1 - \theta)\mathcal{L}(x, y, \bar{\lambda}).$$

Tomando o ínfimo para $x \in X, y \geq 0$ vem

$$\inf_{x \in X, y \geq 0} \mathcal{L}(x, y, \theta\lambda + (1 - \theta)\bar{\lambda}) \geq \theta \inf_{x \in X, y \geq 0} \mathcal{L}(x, y, \lambda) + (1 - \theta) \inf_{x \in X, y \geq 0} \mathcal{L}(x, y, \bar{\lambda}),$$

ou seja,

$$\mathcal{W}(\theta\lambda + (1 - \theta)\bar{\lambda}) \geq \theta\mathcal{W}(\lambda) + (1 - \theta)\mathcal{W}(\bar{\lambda}). \quad (3.17)$$

Assim, de (3.17) vemos que se λ e $\bar{\lambda} \in D$ então $\theta\lambda + (1 - \theta)\bar{\lambda} \in D$, ou seja, D é convexo. Além disso, (3.17) implica que \mathcal{W} é côncava. ■

Para ilustrar a concavidade da função dual, considere o seguinte problema bidimensional, no qual a função objetivo é cúbica e a restrição é linear:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && 6x_1^3 + x_2^3 \\ &\text{sujeito a} && 5x_1 + 4x_2 \geq 20 \\ &&& 0 \leq x_1, x_2 \leq 4. \end{aligned} \quad (3.18)$$

A Figura 3.5 mostra, na caixa do problema, as curvas de nível da função objetivo $f_0(x) = 6x_1^3 + x_2^3$, a curva de nível de valor zero da função restrição $f_1(x) = 20 - 5x_1 - 4x_2$, a estimativa inicial $x^{(1)} = (4, 2)^T$ e a solução ótima $x^* \approx (1.4531, 3.1836)^T$.

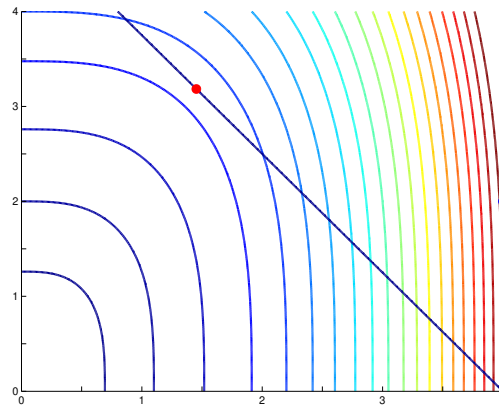


Figura 3.5: Gráfico do problema bidimensional (3.18).

Para construir o subproblema (primal) da iteração externa $k = 1$ e iteração interna $\ell = 0$, calculamos inicialmente os parâmetros σ_j , as assíntotas l_j e u_j , para $j = 1, 2$. Calculamos então os coeficientes p_{ij} , q_{ij} e r_i , para $i = 0, 1$ e $j = 1, 2$, com os quais construímos as aproximações g_0 e g_1 . Por fim, calculamos os valores α_j e β_j , para $j = 1, 2$, que definem a caixa do subproblema. Assim, obtemos o seguinte subproblema:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} \quad \frac{1152.5}{6 - x_1} + \frac{0.5}{x_1 - 2} + \frac{48.5}{4 - x_2} + \frac{0.5}{x_2} - 209 \\ &\text{sujeito a} \quad \frac{0.5}{6 - x_1} + \frac{20.5}{x_1 - 2} + \frac{0.5}{4 - x_2} + \frac{16.5}{x_2} - 27 \leq 0 \\ &\quad 2.2 \leq x_1 \leq 4, \quad 0.2 \leq x_2 \leq 3.8. \end{aligned}$$

A Figura 3.6 exhibe, na caixa do subproblema da iteração externa $k = 1$ e iteração interna $\ell = 0$, as curvas de nível da aproximação racional g_0 , a curva de nível de valor zero da aproximação racional g_1 , a estimativa corrente $x^{(1)} = (4, 2)^T$ e ainda a solução do subproblema $\hat{x}^{(1,0)} \approx (3.0441, 2.3966)^T$.

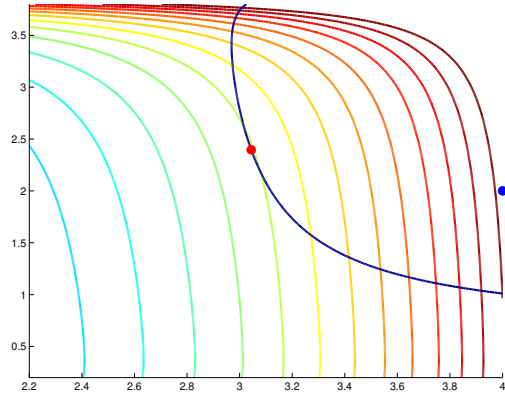


Figura 3.6: Gráfico do subproblema primal na iteração $k = 1$ e $\ell = 0$.

Para construir o subproblema dual, devemos obter a função objetivo dual \mathcal{W} dada por

$$\mathcal{W}(\lambda) = r_0 + \lambda r_1 + \widehat{\mathcal{W}}_1(\lambda) + \widehat{\mathcal{W}}_2(\lambda),$$

onde, para $j = 1, 2$,

$$\widehat{\mathcal{W}}_j(\lambda) = \min_{x_j} \{ \mathcal{L}_j(x_j, \lambda); \alpha_j \leq x_j \leq \beta_j \}$$

com

$$\mathcal{L}_j(x_j, \lambda) = \frac{p_{0j} + \lambda p_{1j}}{u_j - x_j} + \frac{q_{0j} + \lambda q_{1j}}{x_j - l_j}.$$

Neste caso temos as funções

$$\mathcal{L}_1(x_1, \lambda) = \frac{1152.5 + 0.5\lambda}{6 - x_1} + \frac{0.5 + 20.5\lambda}{x_1 - 2} \quad \text{e} \quad \mathcal{L}_2(x_2, \lambda) = \frac{48.5 + 0.5\lambda}{4 - x_2} + \frac{0.5 + 16.5\lambda}{x_2}$$

e as soluções são dadas por

$$x_1(\lambda) = \max \left\{ 2.2, \min \left\{ 4, \frac{(1152.5 + 0.5\lambda)^{1/2} 2 + (0.5 + 20.5\lambda)^{1/2} 6}{(1152.5 + 0.5\lambda)^{1/2} + (0.5 + 20.5\lambda)^{1/2}} \right\} \right\}$$

e

$$x_2(\lambda) = \max \left\{ 0.2, \min \left\{ 3.8, \frac{(0.5 + 16.5\lambda)^{1/2} 4}{(48.5 + 0.5\lambda)^{1/2} + (0.5 + 16.5\lambda)^{1/2}} \right\} \right\}.$$

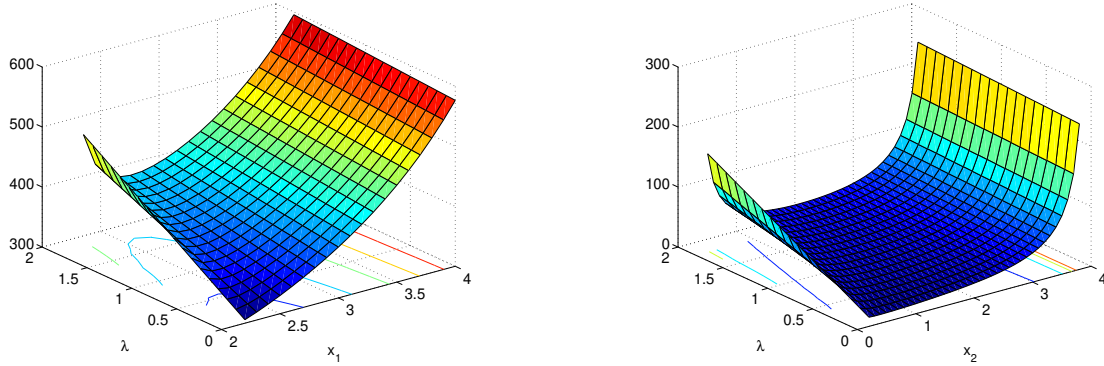


Figura 3.7: Funções $\mathcal{L}_1(x_1, \lambda)$ e $\mathcal{L}_2(x_2, \lambda)$.

A Figura 3.7 fornece os gráficos de $\mathcal{L}_1(x_1, \lambda)$ e $\mathcal{L}_2(x_2, \lambda)$. Já a Figura 3.8 mostra, calculados $x_1(\lambda)$ e $x_2(\lambda)$, para valores não-negativos de λ , os gráficos das funções $\mathcal{L}_1(x_1(\lambda), \lambda)$, $\mathcal{L}_2(x_2(\lambda), \lambda)$ e da função côncava $\mathcal{W}(\lambda)$.

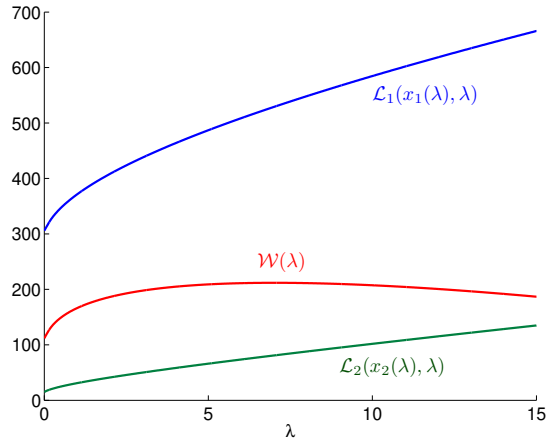


Figura 3.8: Funções $\mathcal{L}_1(x_1(\lambda), \lambda)$, $\mathcal{L}_2(x_2(\lambda), \lambda)$ e função objetivo dual côncava $\mathcal{W}(\lambda)$.

3.2.3 Método de região de confiança

Para resolver o subproblema dual, vamos usar uma estratégia de região de confiança. Na abordagem clássica de região de confiança [36], minimizamos uma função objetivo f sem restrições. Os métodos de região de confiança geram uma sequência $\{x_k\}_{k \in N}$ baseada em um modelo quadrático m_k da função objetivo. Tais métodos definem uma região em torno da estimativa corrente de modo que dentro desta região podemos confiar que o modelo seja uma representação adequada da função objetivo e então minimiza-se o modelo nesta região. Se o minimizador obtido é aceitável, aumentamos a região de confiança ou a deixamos inalterada e prosseguimos com a minimização a partir da nova estimativa. Se a solução obtida não é aceitável reduzimos o tamanho da região e encontramos um novo minimizador.

O tamanho da região de confiança é fundamental para a eficácia de cada passo. Se a região for muito pequena, o algoritmo perde a oportunidade de dar um passo substancial que permita uma aproximação do minimizador da função objetivo. Se for muito grande, o minimizador do modelo pode estar muito longe do minimizador da função objetivo na região, daí temos que reduzir o tamanho da região de confiança e tentar novamente. Na prática, escolhemos o tamanho da região de acordo com o desempenho do algoritmo nas iterações anteriores. Se o modelo está produzindo bons passos e prevendo com exatidão o comportamento da função objetivo ao longo desses passos, o tamanho da região de confiança é constantemente aumentado para permitir passos mais longos e audaciosos. Por outro lado, um passo fracassado indica que o modelo não é uma representação adequada da função objetivo dentro da região de confiança corrente, e então reduzimos o tamanho da região e tentamos novamente.

O modelo quadrático m_k é calculado a cada iteração usando a matriz Hessiana ou uma aproximação desta. As estratégias para aceitação do minimizador do modelo na região como próximo iterando e para a atualização do raio da região de confiança são baseadas na concordância entre o modelo e a função objetivo nas iterações anteriores. Definindo $ared$ como sendo a diferença entre os valores da função f na estimativa corrente e no minimizador do modelo, e $pred$ como a diferença entre os valores do modelo m_k nestes mesmos pontos (note que $pred$ é sempre não-negativo), se o valor da razão $ared/pred$ for negativo ou nulo, então o minimizador deve ser rejeitado pois o valor da função objetivo não diminuiu. Por outro lado, se o valor da razão $ared/pred$ é próximo de 1, existe uma boa concordância entre o modelo e a função, e então é seguro expandir a região de confiança na próxima iteração. Já se o valor da razão $ared/pred$ é positivo, mas não próximo de 1, não alteramos a região de confiança, e se é próximo de zero ou negativo, diminuímos a região de confiança. Consideremos então o dual do subproblema MMA como o problema de minimizar a função $W(\lambda)$ sujeito à restrição

de não-negatividade das variáveis duais, ou seja,

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && W(\lambda) \\ & \text{sujeito a} && \lambda \geq 0, \end{aligned} \tag{3.19}$$

em que

$$\begin{aligned} W(\lambda) = -\mathcal{W}(\lambda) = & - \left[r_0 + \lambda^T r + \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_{0j} + \lambda^T p_j}{u_j - x_j(\lambda)} + \frac{q_{0j} + \lambda^T q_j}{x_j(\lambda) - l_j} \right) \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^m \left(c_i y_i(\lambda_i) + \frac{1}{2} d_i y_i^2(\lambda_i) - \lambda_i y_i(\lambda_i) \right) \right], \end{aligned}$$

com $x_j(\lambda)$ e $y_i(\lambda_i)$ dados por (3.12) e (3.13), respectivamente. Inicialmente consideramos um modelo linear para aproximar a função W , mas os resultados obtidos não foram satisfatórios. Introduzimos então, informações sobre a curvatura de W , de modo a obter um modelo quadrático para a função objetivo W , adotado em cada iteração \bar{k} do algoritmo de região de confiança:

$$m_{\bar{k}}(\lambda) = W(\lambda^{(\bar{k})}) + \nabla W(\lambda^{(\bar{k})})^T (\lambda - \lambda^{(\bar{k})}) + \frac{1}{2} \eta^{(\bar{k})} \|\lambda - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2, \tag{3.20}$$

onde $\eta^{(\bar{k})}$ é o parâmetro espectral associado à função W , ou seja,

$$\eta^{(\bar{k})} = \frac{(s^{(\bar{k})})^T t^{(\bar{k})}}{(s^{(\bar{k})})^T s^{(\bar{k})}}$$

com

$$s^{(\bar{k})} = \lambda^{(\bar{k})} - \lambda^{(\bar{k}-1)} \quad \text{e} \quad t^{(\bar{k})} = \nabla W(\lambda^{(\bar{k})}) - \nabla W(\lambda^{(\bar{k}-1)}).$$

O termo de segunda ordem presente no modelo quadrático $m_{\bar{k}}$ pode ser visto como um termo de regularização quadrática de um modelo linear da função W , e o parâmetro espectral $\eta^{(\bar{k})}$ ganha um sentido de um parâmetro de regularização adaptativo [13, 34, 49]. Esta interpretação justifica o termo de segunda ordem do modelo, uma vez que a matriz Hessiana $\nabla^2 W$ é descontínua. Também, modelos semelhantes a (3.20) tem sido considerados, como em [3] onde o termo quadrático do modelo inclui o parâmetro espectral com o objetivo de acelerar um procedimento baseado em gradiente projetado.

Então, em cada iteração \bar{k} , devemos encontrar o ponto $\hat{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ que minimiza o modelo $m_{\bar{k}}$ sujeito à região de confiança e à não-negatividade das variáveis duais, ou seja, $\hat{\lambda}$ é solução

do seguinte problema

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && m_{\bar{k}}(\lambda) \\ & \text{sujeito a} && \lambda \geq 0, \|\lambda - \lambda^{(\bar{k})}\|_{\infty} \leq \Delta^{(\bar{k})}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

em que $\Delta^{(\bar{k})} > 0$ é o raio da região de confiança. Qualquer norma poderia ser usada para definir a região de confiança, mas como o conjunto viável do problema (3.19) é um ortante, a escolha $\|\cdot\|_{\infty}$ é a mais adequada pois a intersecção de $\lambda \geq 0$ com $\|\lambda - \lambda^{(\bar{k})}\|_{\infty} \leq \Delta^{(\bar{k})}$ é uma caixa.

Assim, o problema (3.21) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} & \text{minimizar} && m_{\bar{k}}(\lambda) \\ & \text{sujeito a} && \underline{\lambda}^{(\bar{k})} \leq \lambda \leq \bar{\lambda}^{(\bar{k})}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde $\underline{\lambda}_i^{(\bar{k})} = \max\{0, \lambda_i^{(\bar{k})} - \Delta^{(\bar{k})}\}$, $\bar{\lambda}_i^{(\bar{k})} = \lambda_i^{(\bar{k})} + \Delta^{(\bar{k})}$ e a sua solução $\hat{\lambda}$ é dada pela fórmula fechada:

$$\hat{\lambda} = \min \left\{ \bar{\lambda}^{(\bar{k})}, \max \left\{ \underline{\lambda}^{(\bar{k})}, \lambda^{(\bar{k})} - \frac{1}{\eta^{(\bar{k})}} \nabla W(\lambda^{(\bar{k})}) \right\} \right\}. \quad (3.23)$$

Algoritmo 2: Método de região de confiança para o dual do subproblema MMA

Dados $\lambda^{(1)}$, $\Delta^{(1)}$, $0 < v < \omega < 1$, $0 < \gamma_0 < 1 \leq \gamma_2$.

Passo 1. Inicialização:

Tome $\bar{k} = 1$.

Calcule $W_{\bar{k}} \equiv W(\lambda^{(\bar{k})})$, $\nabla W_{\bar{k}} \equiv \nabla W(\lambda^{(\bar{k})})$ e $\eta^{(\bar{k})}$.

Passo 2. Critério de parada:

Se $\lambda^{(\bar{k})}$ é ótimo para o problema (3.19),
pare e tome $\lambda^{(\bar{k})}$ como solução.

Passo 3. Resolução do problema (3.22):

Calcule $\underline{\lambda}_i^{(\bar{k})} = \max\{0, \lambda_i^{(\bar{k})} - \Delta^{(\bar{k})}\}$, $\bar{\lambda}_i^{(\bar{k})} = \lambda_i^{(\bar{k})} + \Delta^{(\bar{k})}$ e a solução $\hat{\lambda}$ como em (3.23).
Avalie $W(\hat{\lambda})$.

Passo 4. Teste de aceitação: para $\gamma_0^{(\bar{k})} \in [\gamma_0, 1)$ e $\gamma_2^{(\bar{k})} \in [1, \gamma_2]$, calcule

$$\theta_{\bar{k}} = \frac{W_{\bar{k}} - W(\hat{\lambda})}{m_{\bar{k}}(\lambda^{(\bar{k})}) - m_{\bar{k}}(\hat{\lambda})}.$$

Se $\theta_{\bar{k}} > v$

Se $\theta_{\bar{k}} < \omega$, mantenha o raio da região de confiança tomando

$$\Delta^{(\bar{k}+1)} = \Delta^{(\bar{k})},$$

senão, aumente o raio da região de confiança tomando

$$\Delta^{(\bar{k}+1)} = \gamma_2^{(\bar{k})} \Delta^{(\bar{k})},$$

Fim

Atualize $\lambda^{(\bar{k}+1)} = \hat{\lambda}$, $\bar{k} = \bar{k} + 1$ e vá para **Passo 2**.

Senão, diminua o raio da região de confiança tomando

$$\Delta^{(\bar{k})} = \gamma_0^{(\bar{k})} \Delta^{(\bar{k})} \text{ e vá para } \mathbf{Passo 3}.$$

Fim

Este é um resumo do algoritmo usado nos experimentos numéricos. Detalhes sobre o critério de parada, a atualização do raio da região de confiança, entre outros, estão descritos a seguir.

Observações:

1) A expressão definida por $\theta_{\bar{k}}$ no Passo 4 mede a concordância entre a função W e o modelo $m_{\bar{k}}$. Mais precisamente, é a razão entre a redução real da função e a redução prevista pelo modelo.

2) Na primeira iteração do Algoritmo 2, precisamos de uma estimativa $\lambda^{(0)}$ além da estimativa inicial $\lambda^{(1)}$, para calcular o parâmetro espectral $\eta^{(1)}$. Tal estimativa $\lambda^{(0)}$ é calculada realizando uma perturbação em $\lambda^{(1)}$, ou seja, $\lambda^{(0)} = \lambda^{(1)} + \varepsilon$. Para realizar os testes numéricos, usamos $\varepsilon = 10^{-3}$.

3) Para obter o ponto $\hat{\lambda}$ devemos dar um passo, a partir de $\lambda^{(\bar{k})}$, de tamanho $1/\eta^{(\bar{k})}$ na direção $-\nabla W_{\bar{k}}$. É verdade que o valor do parâmetro espectral $\eta^{(\bar{k})}$ nunca será negativo, pois a função objetivo W é convexa (já vimos que \mathcal{W} é côncava). No entanto, para evitar que $\eta^{(\bar{k})}$ assumam valores muito pequenos (positivos) ou muito grandes, usamos a projeção de $\eta^{(\bar{k})}$ no intervalo (η^{min}, η^{max}) , onde $0 < \eta^{min} < \eta^{max} < +\infty$. Os valores adotados foram $\eta^{min} = 10^{-3}$ e $\eta^{max} = 10^3$.

4) O critério de parada adotado na implementação do Algoritmo 2 foi baseado no gradiente projetado contínuo associado ao problema (3.19), dado por:

$$g_P(\lambda) = P_\Omega(\lambda - \nabla W(\lambda)) - \lambda,$$

onde $\Omega = \{\lambda \in \mathbb{R}^m \mid \lambda \geq 0\}$ e

$$P_\Omega(\lambda) = \begin{cases} \lambda_i, & \text{se } \lambda_i \geq 0, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Desta forma, quando $\|g_P(\lambda^{(\bar{k})})\|_\infty \leq \varepsilon_1$ o algoritmo é finalizado por ter encontrado a solução ótima do problema (3.19), dentro da precisão exigida. Um segundo critério de parada utilizado na implementação do Algoritmo 2 usa o gradiente projetado contínuo relativo de W em $\lambda^{(\bar{k})}$, ou seja, o algoritmo é finalizado quando a seguinte relação é satisfeita:

$$\max_{1 \leq i \leq m} \left\{ \left| \frac{(g_P(\lambda^{(\bar{k})}))_i \max\{|\lambda_i^{(\bar{k})}|, \text{tip}\lambda_i\}}{\max\{|W(\lambda^{(\bar{k})})|, \text{tip}W\}} \right| \right\} \leq \varepsilon_2,$$

onde $\text{tip}\lambda_i$ e $\text{tip}W$ são escalares positivos que estimam as magnitudes típicas de λ_i e W , respectivamente [15]. Caso estes valores característicos não estejam disponíveis, tomamos $\text{tip}\lambda_i = 1$ e $\text{tip}W = 1$.

Outros critérios também foram usados, baseados na falta de progresso em estimativas correntes sucessivas, ou seja, quando

$$\|\lambda^{(\bar{k})} - \lambda^{(\bar{k}-1)}\|_\infty \leq \varepsilon_3 \quad \text{ou} \quad \max_{1 \leq i \leq m} \left\{ \frac{|\lambda_i^{(\bar{k})} - \lambda_i^{(\bar{k}-1)}|}{\max\{|\lambda_i^{(\bar{k})}|, \text{tip}\lambda_i\}} \right\} \leq \varepsilon_4$$

é satisfeito, o algoritmo para. Outros dois critérios de parada do Algoritmo 2 dizem respeito ao algoritmo atingir o número máximo de iterações e não permitir que o raio da região de confiança se torne muito pequeno.

5) Na implementação do Algoritmo 2 utilizamos $\lambda^{(1)} = (0, \dots, 0)^T$, $\gamma_0 = 0.0625$, $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = 2$, $v = 0.1$, $\omega = 0.9$, $\varepsilon_1 = 10^{-6}$, $\varepsilon_2 = 10^{-7}$, $\varepsilon_3 = 10^{-10}$ e $\varepsilon_4 = 10^{-11}$. O raio inicial da região de confiança foi tomado como $\Delta^{(1)} = 0.1\|\nabla W(\lambda^{(1)})\|$.

6) No Algoritmo 2, se a estimativa corrente muda, tomamos $W_{\bar{k}+1} = W(\hat{\lambda})$, mas é necessário avaliar o gradiente no novo ponto. Já em relação à atualização do raio da região de confiança, existem várias maneiras de utilizar as fórmulas descritas no Algoritmo 2. A escolha adotada neste trabalho será detalhada a seguir.

Atualização do raio da região de confiança

Muitos métodos de região de confiança adotam simplesmente $\gamma_0^{(\bar{k})} = \gamma_0$ e $\gamma_2^{(\bar{k})} = \gamma_2$ para cada iteração \bar{k} nas fórmulas de atualização do raio da região de confiança exibida no Algoritmo 2. Porém, existem alguns refinamentos nesta atualização que podem ser bastante eficientes. Assim, veremos agora uma maneira de escolher os parâmetros $\gamma_0^{(\bar{k})}$ e $\gamma_2^{(\bar{k})}$, baseada no estudo de Conn, Gould e Toint [14].

Esta escolha para $\gamma_0^{(\bar{k})}$ e $\gamma_2^{(\bar{k})}$ é útil em várias situações. Por exemplo, se temos em uma determinada iteração $\theta_{\bar{k}} \geq \omega$, deveríamos aumentar o raio para a próxima iteração. Entretanto, o objetivo principal ao se aumentar o raio da região de confiança é dar a oportunidade

ao passo de crescer. Se $\lambda^{(\bar{k}+1)}$ é obtido no interior da região de confiança e não na fronteira, o aumento do raio poderá ser inútil, já que neste caso a região de confiança não influencia diretamente a minimização do modelo. Outro fato também é que, quando $\lambda^{(\bar{k}+1)}$ está no interior da região e o modelo representa bem a função neste ponto, nada podemos afirmar sobre a boa adequação do modelo na fronteira da região de confiança, um ponto mais distante de $\lambda^{(\bar{k})}$ para o qual o erro da aproximação será maior. Assim, sempre que $\theta_{\bar{k}} \geq \omega$, a escolha de $\gamma_2^{(\bar{k})}$ será feita da seguinte maneira:

$$\gamma_2^{(\bar{k})} = \max \left\{ 1, \gamma_2 \frac{\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\|}{\Delta^{(\bar{k})}} \right\}.$$

Note que se o minimizador $\lambda^{(\bar{k}+1)}$ do modelo quadrático estiver na fronteira da região, ou seja, $\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\| = \Delta^{(\bar{k})}$, então $\gamma_2^{(\bar{k})} = \max\{1, \gamma_2\} = \gamma_2$, aumentando o raio da região de confiança. Agora, se $\lambda^{(\bar{k}+1)}$ estiver no interior da região de confiança, temos duas possibilidades:

- $\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\|$ é muito menor que $\Delta^{(\bar{k})}$, estando longe da fronteira com $\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\| \leq \frac{\Delta^{(\bar{k})}}{\gamma_2}$. Neste caso $\gamma_2 \frac{\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\|}{\Delta^{(\bar{k})}} \leq 1$, o que nos fornece $\gamma_2^{(\bar{k})} = 1$, fazendo com que o raio da região de confiança seja mantido para a próxima iteração.
- $\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\|$ é menor que $\Delta^{(\bar{k})}$ mas está perto da fronteira da região de confiança com $\frac{\Delta^{(\bar{k})}}{\gamma_2} < \|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\| < \Delta^{(\bar{k})}$. Neste caso, $1 < \gamma_2 \frac{\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\|}{\Delta^{(\bar{k})}} < \gamma_2$, o que resulta em $\gamma_2^{(\bar{k})} = \gamma_2 \frac{\|\lambda^{(\bar{k}+1)} - \lambda^{(\bar{k})}\|}{\Delta^{(\bar{k})}}$. O raio da região de confiança é aumentado para a próxima iteração, mas é multiplicado por um fator menor que γ_2 .

Uma segunda alteração na escolha do tamanho do raio é feita quando obtemos $\theta_{\bar{k}} \leq v$. Neste caso o modelo não é uma boa representação para a função objetivo no ponto $\lambda^{(\bar{k}+1)}$, o que nos leva a permanecer com o mesmo ponto, ou seja, $\lambda^{(\bar{k}+1)} = \lambda^{(\bar{k})}$, e diminuir o raio da região de confiança para encontrar um novo minimizador para o modelo. Porém, se a diminuição do raio não for suficiente para excluir da região de confiança aquele ponto $\lambda^{(\bar{k}+1)}$, minimizador do modelo antes de diminuirmos o raio, não teremos progresso, obtendo novamente o mesmo minimizador $\lambda^{(\bar{k}+1)}$ e tendo que diminuir mais uma vez o raio da região de confiança. Para evitar diminuições no raio desnecessárias, escolhemos:

$$\gamma_0^{(\bar{k})} = \max \left\{ \gamma_0, \gamma_1 \frac{\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|}{\Delta^{(\bar{k})}} \right\}$$

com $\gamma_0 \leq \gamma_1 < 1$, sempre que $0 \leq \theta_{\bar{k}} \leq v$.

Uma terceira alteração é feita quando temos $\theta_{\bar{k}} < 0$. Neste caso, existe pouca concordância entre o modelo quadrático e a função e uma ação mais drástica é necessária. Para isso, calculamos o maior raio para o qual $\theta_{\bar{k}} \geq \omega$ se fixarmos a direção $\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}$ e aproximarmos W por uma quadrática diferente de $m_{\bar{k}}(\lambda)$ ao longo desta direção. Tomando a aproximação $W(\lambda^{(\bar{k})} + \delta(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})})) \approx q(\delta) = a + b\delta + c\delta^2$ e impondo $q(0) = W_{\bar{k}}$, $q(1) = W(\hat{\lambda})$ e $q'(0) = \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})})$ temos que:

$$a = W_{\bar{k}}, \quad b = \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}), \quad e \quad c = W(\hat{\lambda}) - W_{\bar{k}} - \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}).$$

Desejamos encontrar δ tal que

$$\begin{aligned} & \frac{W_{\bar{k}} - q(\delta)}{W_{\bar{k}} - m_{\bar{k}}(\delta(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}))} \geq \omega \\ \Rightarrow & \frac{-\delta \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) - (W(\hat{\lambda}) - W_{\bar{k}} - \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}))\delta^2}{-\delta \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) - \frac{1}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2\delta^2} \geq \omega \\ \Rightarrow & \frac{\nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) + (W(\hat{\lambda}) - W_{\bar{k}} - \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}))\delta}{\nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) + \frac{1}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2\delta} \geq \omega \end{aligned}$$

Agora, como $\nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) + \frac{1}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2\delta < 0$ temos

$$(1 - \omega)\nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) \leq \frac{\omega}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2\delta - (W(\hat{\lambda}) - W_{\bar{k}} - \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}))\delta.$$

Mas $W_{\bar{k}} - W(\hat{\lambda}) \leq 0$ e $\nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) + \frac{\omega}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2 < 0$, de modo que

$$\delta \leq \frac{(1 - \omega)\nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})})}{W_{\bar{k}} + \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) + \frac{\omega}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2 - W(\hat{\lambda})}$$

Mas como $m_{\bar{k}}(\hat{\lambda}) = W_{\bar{k}} + \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) + \frac{1}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2$ temos que

$$\frac{\omega}{2}\eta^{(\bar{k})}\|\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}\|_2^2 = \omega(m_{\bar{k}}(\hat{\lambda}) - W_{\bar{k}} - \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}))$$

e então

$$\delta \leq \frac{(1 - \omega)\nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})})}{(1 - \omega)(W_{\bar{k}} + \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})})) + \omega m_{\bar{k}}(\hat{\lambda}) - W(\hat{\lambda})}.$$

Assim para o caso em que $\theta_{\bar{k}} < 0$ escolhemos $\gamma_0^{(\bar{k})}$ como

$$\gamma_0^{(\bar{k})} = \max \left\{ \gamma_0, \frac{(1 - \omega) \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})})}{(1 - \omega)(W_{\bar{k}} + \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})})) + \omega m_{\bar{k}}(\hat{\lambda}) - W(\hat{\lambda})} \right\}.$$

Note que tal escolha satisfaz $\gamma_0^{(\bar{k})} \in [\gamma_0, 1)$ pois

$$(1 - \omega) \nabla W_{\bar{k}}^T(\hat{\lambda} - \lambda^{(\bar{k})}) < 0 \quad \text{e} \quad W_{\bar{k}} - W(\hat{\lambda}) + \omega(m_{\bar{k}}(\hat{\lambda}) - W_{\bar{k}}) < 0.$$

3.3 Resultados numéricos

Esta seção contém a descrição dos testes computacionais realizados usando nossa abordagem dual com região de confiança para resolver os subproblemas MMA. Também, a atualização espectral e a condição conservadora relaxada foram combinadas com a abordagem dual. Foram considerados os mesmos quatro problemas da Seção 2.5 e os testes foram executados no mesmo microcomputador e sob as mesmas condições daquela seção: implementação em **Matlab**, sem multiprocessamento, e com os mesmos parâmetros iniciais e critério de parada das iterações externas. As tabelas desta seção têm o mesmo padrão de apresentação dos resultados das tabelas da Seção 2.5.

Nesta seção são comparadas 8 estratégias distintas: a abordagem primal-dual de Svanberg, descrita na Seção 3.1, nossa abordagem dual com região de confiança, conforme o Algoritmo 2, e as combinações destas com cada uma das Estratégias 1, 2 e 3, já consideradas nos resultados numéricos do Capítulo 2. Os resultados das quatro estratégias que consideram a abordagem primal-dual de Svanberg são os obtidos na Seção 2.5 do capítulo anterior e são trazidos aqui apenas para facilitar a comparação com os novos resultados da abordagem dual com região de confiança.

3.3.1 Problemas Acadêmicos

Os resultados numéricos referentes aos Problemas Acadêmicos 1 e 2 são dados nas Tabelas 3.1 e 3.2, respectivamente. Estes resultados estão apresentados graficamente nas Figuras 3.9 e 3.10 para o Problema 1 e nas Figuras 3.11 e 3.12 para o Problema 2. Analisando estas tabelas, observamos que as estratégias que usam a abordagem dual com região de confiança são competitivas em relação ao número de iterações, quando comparadas com as que usam a abordagem primal-dual de Svanberg, e mais eficientes em relação ao tempo de CPU utilizado.

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
100	104(135); 4.1267	108(101); 3.8254	132(59); 3.8818	97(11); 2.1315
500	147(185); 49.666	153(138); 45.977	158(36); 36.454	115(0); 23.287
1000	174(222); 214.74	179(162); 197.36	223(40); 184.98	128(0); 96.354
2000	185(229); 868.98	189(185); 819.99	368(82); 1206.3	138(0); 404.32

n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
100	106(134); 2.0159	103(96); 1.7122	121(63); 1.9412	99(9); 1.1947
500	151(184); 45.821	156(147); 42.304	150(39); 32.617	105(0); 19.804
1000	177(214); 204.46	180(161); 186.98	223(28); 172.34	124(0); 90.175
2000	186(232); 857.63	190(186); 802.26	274(60); 866.71	123(0); 353.22

Tabela 3.1: Resultados numéricos para o Problema 1.

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
100	218(265); 11.553	222(198); 12.949	189(158); 6.9761	199(60); 6.3205
500	392(415); 130.99	392(317); 121.86	353(280); 105.12	357(97); 86.954
1000	438(437); 566.14	443(337); 475.37	416(350); 459.24	418(142); 378.66
2000	479(503); 2208.1	477(379); 2084.9	442(423); 1947.3	452(185); 1678.3

n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
100	223(268); 3.8960	224(204); 3.4818	189(154); 2.9401	201(89); 2.6735
500	389(430); 109.26	390(339); 100.49	355(284); 90.385	353(123); 74.973
1000	441(434); 469.01	445(379); 450.50	417(351); 423.04	410(153); 346.09
2000	481(505); 2081.4	487(450); 2008.4	445(422); 1861.9	443(241); 1603.6

Tabela 3.2: Resultados numéricos para o Problema 2.

Dentre as estratégias que usam a abordagem dual com região de confiança, podemos observar o mesmo comportamento dos resultados da Seção 2.5.1. A Estratégia 1 realiza, na maioria dos casos, poucas iterações externas a mais para atingir a convergência do que a estratégia dual com região de confiança. No entanto, há uma redução no número de iterações internas adicionais, dado entre parênteses. Portanto, para ambos os problemas, o número total de subproblemas resolvidos é menor na estratégia espectral do que na estratégia dual com região de confiança.

Considerando a Estratégia 2, para o Problema 1, observamos que apesar do aumento no número de iterações externas, o número de iterações internas adicionais realizadas é tão pequeno que o número total de subproblemas resolvidos é ainda menor do que na Estratégia 1. Para o Problema 2, apesar de o número de iterações internas adicionais realizadas não ser tão pequeno, o número de iterações externas e o número de iterações internas adicionais são menores do que os números obtidos tanto na estratégia dual com região de confiança quanto na Estratégia 1.

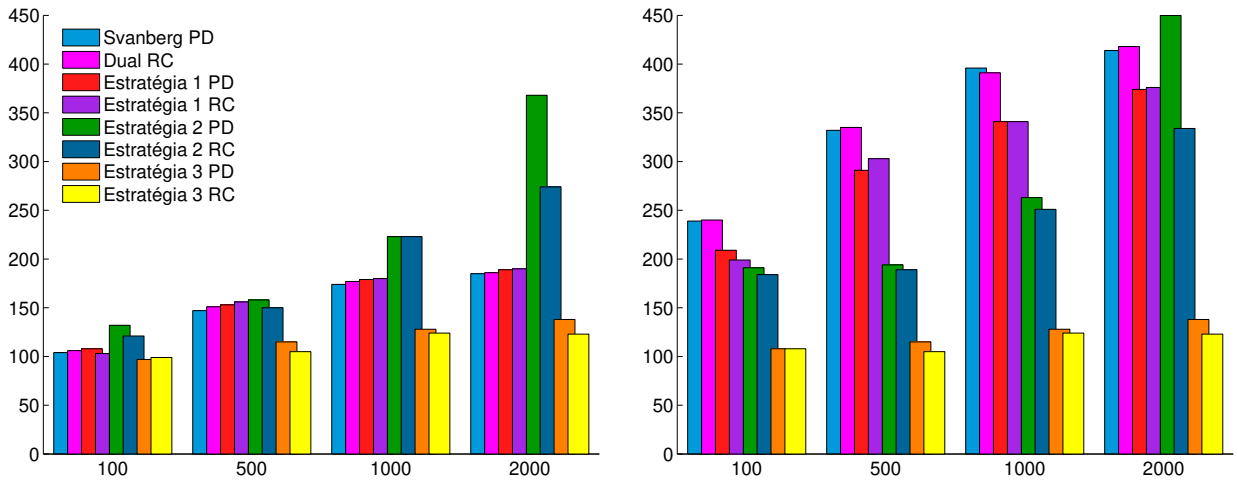


Figura 3.9: Dimensão \times Iterações externas (esq.) e Dimensão \times Iterações internas (dir.), para o Problema 1.

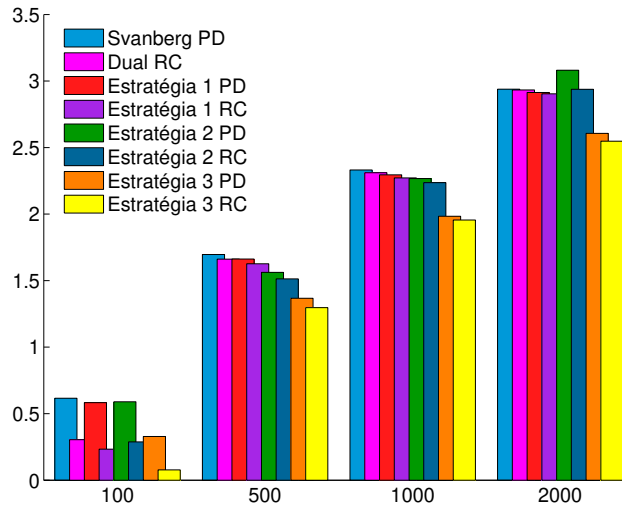


Figura 3.10: Dimensão $\times \log_{10}(\text{tempo de CPU})$, para o Problema 1.

Finalmente, a exemplo do que aconteceu para a abordagem primal-dual de Svanberg, a Estratégia 3 produziu excelentes resultados. Tanto o número de iterações externas quanto o de internas adicionais diminui, e o tempo de CPU utilizado é o melhor dentre as quatro estratégias que usam a abordagem dual com região de confiança.

As conclusões obtidas a partir das Tabelas 3.1 e 3.2 também podem ser observadas nas Tabelas 3.3 e 3.4, onde são fornecidas porcentagens relativas à estratégia de Svanberg obtidas com cada estratégia proposta, considerando o número de subproblemas resolvidos e o tempo de CPU total utilizado.

Para obter os resultados presentes nas Tabelas 3.5 e 3.6, geramos 10 pontos iniciais aleatoriamente distribuídos na caixa do problema. Cada estratégia foi usada para resolver

n	Estrat. 1 PD		Estrat. 2 PD		Estrat. 3 PD		Dual RC		Estrat. 1 RC		Estrat. 2 RC		Estrat. 3 RC	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
100	87%	93%	80%	94%	45%	52%	100%	49%	83%	41%	77%	47%	45%	29%
500	88%	93%	58%	76%	35%	47%	101%	92%	91%	85%	57%	66%	32%	40%
1000	86%	92%	66%	86%	32%	45%	99%	95%	86%	87%	63%	80%	31%	42%
2000	90%	94%	109%	139%	33%	47%	101%	99%	91%	92%	81%	100%	30%	41%

Tabela 3.3: Medidas relativas para o Problema 1.

n	Estrat. 1 PD		Estrat. 2 PD		Estrat. 3 PD		Dual RC		Estrat. 1 RC		Estrat. 2 RC		Estrat. 3 RC	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
100	87%	112%	72%	60%	54%	55%	102%	34%	89%	30%	71%	25%	60%	23%
500	88%	93%	78%	80%	56%	66%	101%	83%	90%	77%	79%	69%	59%	57%
1000	89%	84%	88%	81%	64%	67%	100%	83%	94%	80%	88%	75%	64%	61%
2000	87%	94%	88%	88%	65%	76%	100%	94%	95%	91%	88%	84%	70%	73%

Tabela 3.4: Medidas relativas para o Problema 2.

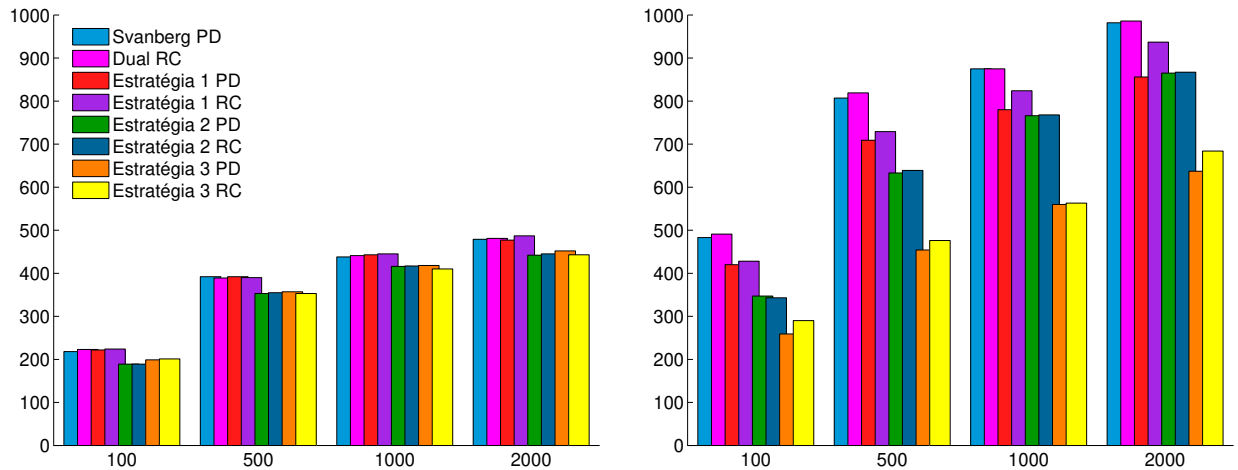


Figura 3.11: Dimensão \times Iterações externas (esq.) e Dimensão \times Iterações internas (dir.), para o Problema 2.

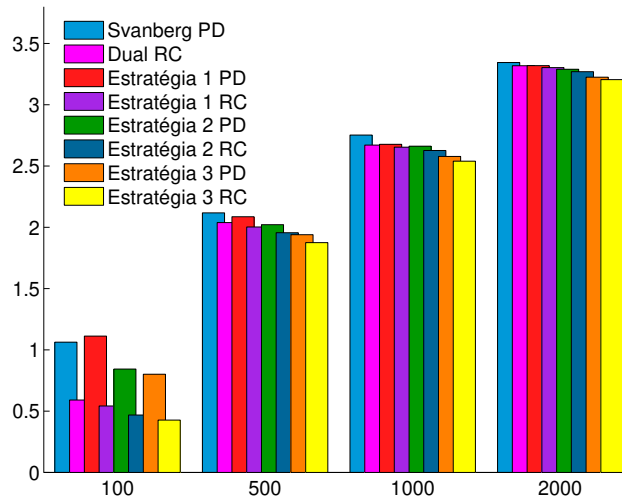


Figura 3.12: Dimensão $\times \log_{10}(\text{tempo de CPU})$, para o Problema 2.

estes 10 casos, e os três valores entre parênteses são os valores mínimo, médio e máximo de subproblemas resolvidos, respectivamente, seguidos pela média dos tempos, dada em segundos. Estes valores validam os resultados anteriores: quando comparadas as estratégias que usam a abordagem dual com região de confiança, mesmo quando outros pontos iniciais são usados, o número de subproblemas resolvidos e a média do tempo melhoram a cada estratégia. Quando comparadas as abordagens primal-dual de Svanberg e dual com região de confiança, estas se mostram competitivas.

As Figuras 3.13 e 3.14 mostram os gráficos de desempenho associados aos Problemas 1 e 2, respectivamente. Para cada figura, o gráfico da esquerda refere-se ao número de subproblemas resolvidos e o gráfico da direita refere-se ao tempo de CPU utilizado. Na Figura 3.13 observamos que as Estratégias 3 PD e 3 RC, que são as combinações da atualização espectral

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
100	(231, 279.2, 413); 5.1826	(161, 228.6, 368); 4.3418	(123, 147.9, 183); 3.3030	(111, 130.1, 161); 2.8220
500	(326, 446.5, 1226); 67.241	(274, 382.4, 1053); 60.529	(192, 232.2, 370); 44.728	(145, 174.9, 274); 36.003
1000	(370, 507, 1422); 279.46	(316, 445.6, 1305); 255.54	(237, 332.1, 736); 226.88	(165, 231.9, 717); 171.81
2000	(437, 583.8, 1271); 1233.5	(372, 511, 1116); 1124.1	(336, 387.5, 478); 1058.2	(188, 222.7, 346); 653.87

n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
100	(235, 293.4, 434); 2.3654	(172, 232.6, 397); 1.9872	(125, 158.9, 215); 1.6097	(96, 113.1, 139); 1.2376
500	(364, 475.2, 1113); 63.320	(278, 412.6, 1081); 57.844	(179, 216.8, 317); 37.463	(142, 171.1, 263); 31.956
1000	(388, 524.8, 1413); 275.56	(348, 479.4, 1423); 259.92	(246, 291.1, 372); 191.83	(168, 265.4, 987); 186.42
2000	(456, 701.2, 1296); 1445.0	(397, 620.2, 1250); 1324.6	(347, 407.2, 551); 1060.4	(193, 272.9, 450); 782.24

Tabela 3.5: Outros resultados para o Problema 1.

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
100	(309, 426.2, 889); 15.254	(260, 360.6, 837); 16.674	(175, 271.9, 630); 7.0938	(120, 199.7, 457); 7.1492
500	(486, 648.4, 892); 103.42	(372, 535.3, 779); 90.732	(327, 481, 736); 81.545	(235, 355.1, 578); 68.591
1000	(634, 950, 2109); 557.76	(513, 792.2, 1862); 498.71	(483, 743.5, 1470); 455.17	(316, 567.3, 1098); 389.21
2000	(716, 880.8, 1045); 1918.1	(613, 731.1, 899); 1703.4	(564, 712.9, 884); 1649.3	(407, 539.3, 744); 1396.0

n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
100	(332, 438.8, 884); 3.2094	(255, 370.1, 835); 2.8255	(175, 273.7, 652); 2.2557	(131, 214.6, 487); 1.9409
500	(506, 651.4, 882); 87.161	(410, 566.5, 788); 79.360	(337, 492.7, 749); 71.515	(266, 402, 629); 63.489
1000	(634, 1021.6, 2155); 537.43	(560, 879.2, 1911); 484.79	(503, 822, 1509); 459.16	(402, 682.4, 1312); 409.51
2000	(690, 941.8, 1196); 1984.1	(617, 828.6, 1016); 1822.4	(578, 831.7, 1425); 1828.0	(476, 683.1, 931); 1618.7

Tabela 3.6: Outros resultados para o Problema 2.

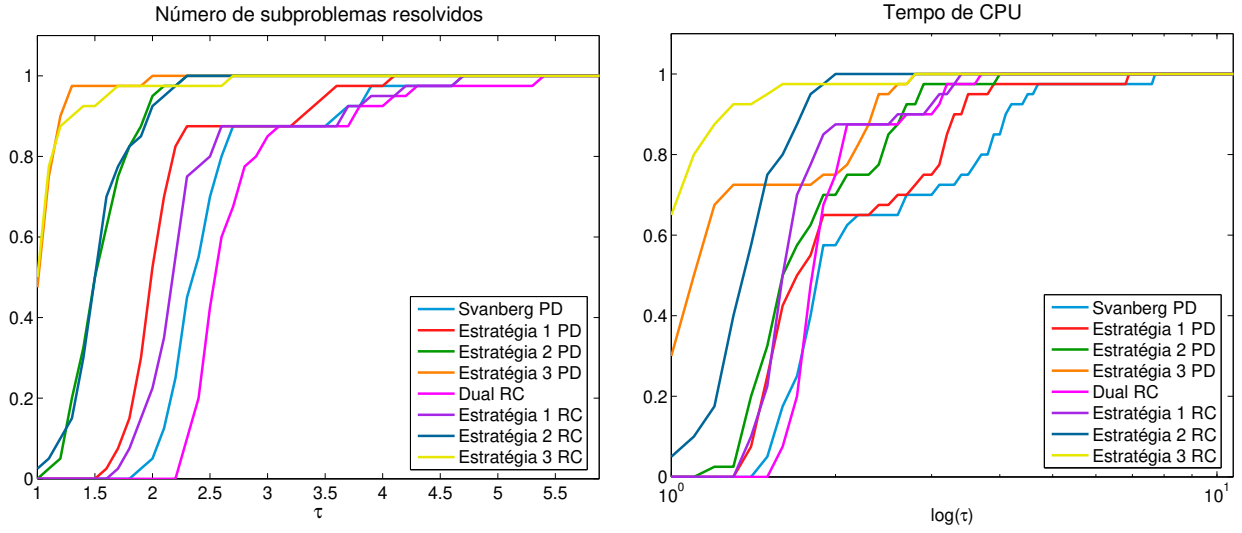


Figura 3.13: Perfil de desempenho para o Problema 1. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

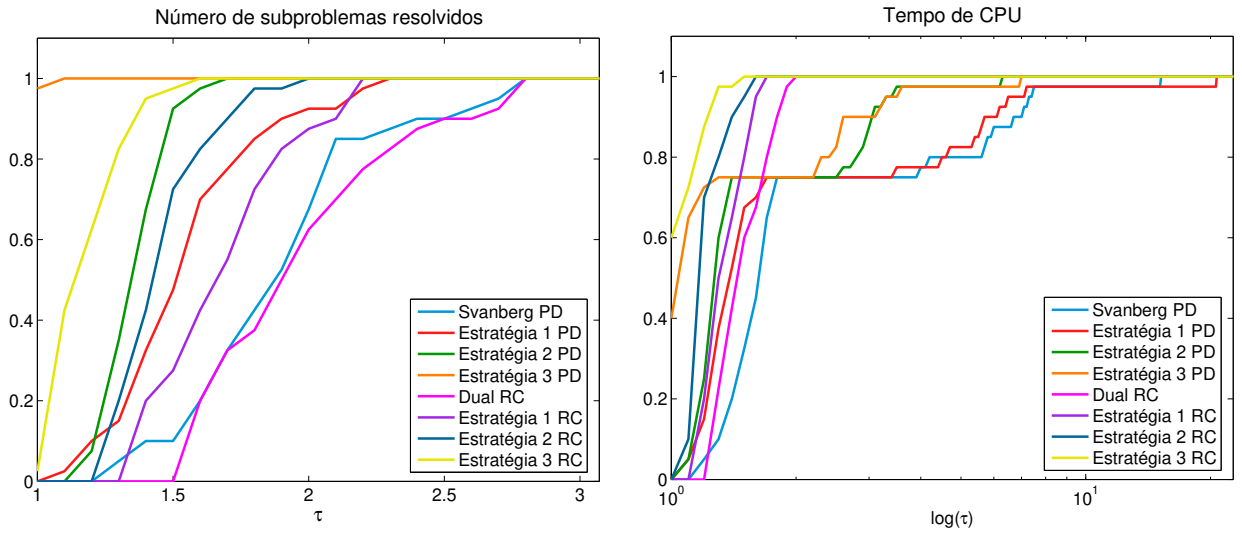


Figura 3.14: Perfil de desempenho para o Problema 2. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

e da relaxação da condição conservadora com cada uma das abordagens comparadas, são mais eficientes tanto em relação ao número de subproblemas resolvidos quanto ao tempo de CPU. Podemos observar também que para cada estratégia, as duas abordagens para solução dos subproblemas tiveram um desempenho semelhante. Na Figura 3.14 podemos observar que a abordagem primal-dual de Svanberg tem desempenho superior quando analisado o número de subproblemas resolvidos. Entretanto, em relação ao tempo de CPU utilizado, as estratégias baseadas na abordagem dual com região de confiança foram mais eficientes. A Figura 3.15 acumula os resultados dos Problemas 1 e 2.

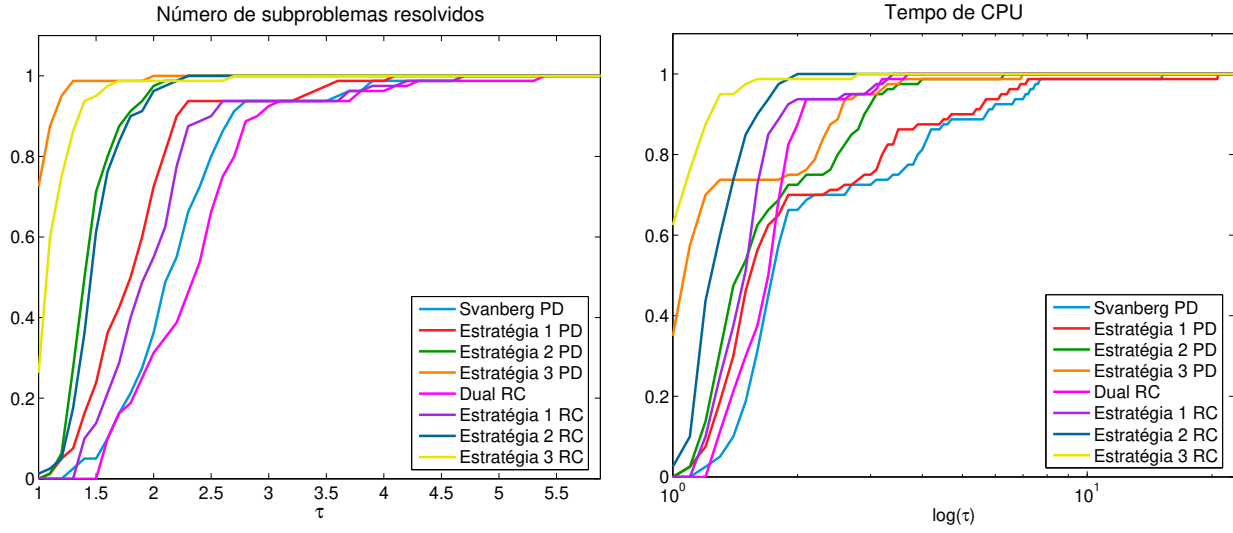


Figura 3.15: Perfil de desempenho para os Problemas 1 e 2. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

3.3.2 Sistema de duas barras (*2-bar truss*)

A Tabela 3.7 apresenta o desempenho das estratégias na resolução do problema das duas barras. Podemos notar que em cada estratégia, ambas as abordagens resolvem o problema no mesmo número de iterações externas e internas adicionais. Porém, em relação ao tempo de CPU utilizado, a abordagem dual com região confiança é pelo menos 6 vezes mais rápida do que a abordagem primal-dual de Svanberg.

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
2	10(9); 0.1297	7(3); 0.0686	11(0); 0.0866	6(0); 0.0423
n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
2	10(9); 0.0166	7 (3); 0.0101	11 (0); 0.0108	6 (0); 0.0068

Tabela 3.7: Resultados numéricos para o problema das duas barras.

As medidas relativas à estratégia de Svanberg, apresentadas na Tabela 3.8, mostram a superioridade da abordagem dual com região de confiança, assim como a melhora a cada estratégia proposta.

A Tabela 3.9 segue o padrão de valores mínimo, médio e máximo de subproblemas resolvidos, seguidos pela média dos tempos, dada em segundos. Para obter estes resultados, foram gerados 1000 pontos iniciais aleatoriamente distribuídos na caixa do problema. Cada estratégia foi usada para resolver estes 1000 casos. Podemos concluir da Tabela 3.9 que independentemente do ponto inicial, ambas as abordagens consideradas realizam praticamente o mesmo número de iterações para obter convergência. No entanto, as estratégias baseadas

n	Estrat. 1 PD		Estrat. 2 PD		Estrat. 3 PD		Dual RC		Estrat. 1 RC		Estrat. 2 RC		Estrat. 3 RC	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
2	53%	53%	58%	67%	32%	33%	100%	13%	53%	8%	58%	8%	32%	5%

Tabela 3.8: Medidas relativas para o problema das duas barras.

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
2	(9, 23.2, 35); 0.3372	(7, 26.6, 43); 0.3658	(7, 13.6, 26); 0.0995	(5, 23.5, 46); 0.1716
n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
2	(9, 23.1, 35); 0.0269	(7, 26.2, 44); 0.0302	(7, 13.6, 26); 0.0162	(6, 23.3, 45); 0.0245

Tabela 3.9: Outros resultados para o problema das duas barras.

na abordagem dual com região de confiança são bem mais rápidas. Este comportamento é refletido no perfil de desempenho de cada estratégia, apresentado na Figura 3.16.

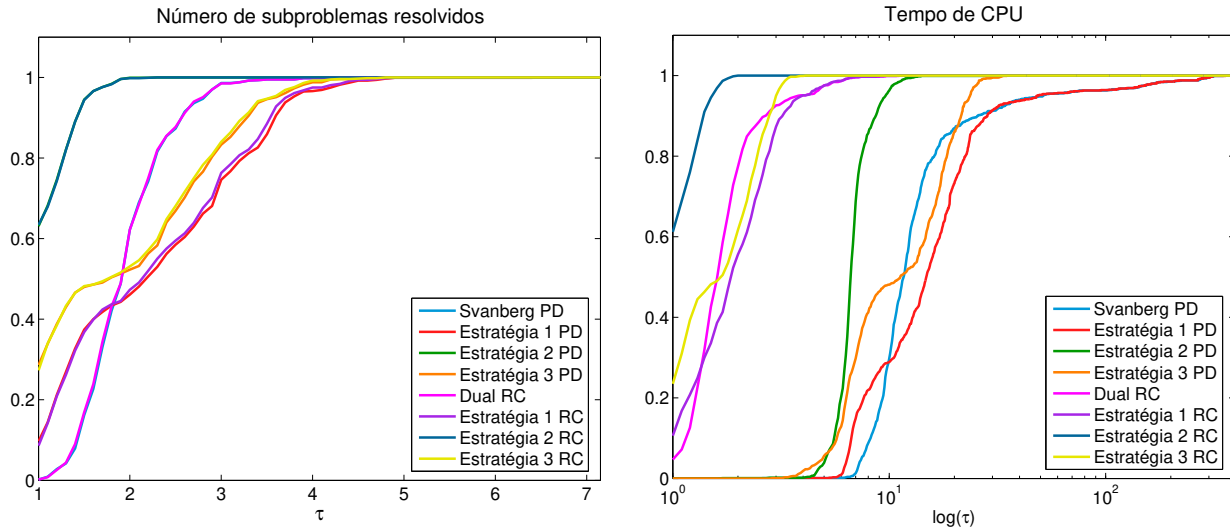


Figura 3.16: Perfil de desempenho para o problema das duas barras. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

3.3.3 Viga em balanço (*cantilever beam*)

A Tabela 3.10 apresenta o desempenho das estratégias na resolução do problema da viga em balanço. Como no problema das duas barras, ambas as abordagens resolvem o problema no mesmo número de iterações externas e internas adicionais e, em relação ao tempo de CPU utilizado, a abordagem dual com região confiança é mais rápida do que a abordagem primal-dual de Svanberg.

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
5	13(18); 0.2190	13(7); 0.1423	9(0); 0.0635	16(0); 0.1139
n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
5	13(18); 0.0333	13(7); 0.0247	9(0); 0.0111	16(0); 0.0190

Tabela 3.10: Resultados numéricos para o problema da viga em balanço.

As medidas relativas à estratégia de Svanberg, apresentadas na Tabela 3.11, confirmam superioridade da abordagem dual com região de confiança.

A Tabela 3.12 segue o padrão de valores mínimo, médio e máximo de subproblemas resolvidos, seguidos pela média dos tempos, dada em segundos. Estes resultados foram obtidos a partir de 1000 pontos iniciais aleatoriamente distribuídos na caixa do problema. Podemos concluir da Tabela 3.12 que o comportamento das estratégias obtido para o problema das

n	Estrat. 1 PD		Estrat. 2 PD		Estrat. 3 PD		Dual RC		Estrat. 1 RC		Estrat. 2 RC		Estrat. 3 RC	
	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU	Sub	CPU
5	65%	65%	29%	29%	52%	52%	100%	15%	65%	11%	29%	5%	52%	9%

Tabela 3.11: Medidas relativas para o problema da viga em balanço.

n	Svanberg PD	Estratégia 1 PD	Estratégia 2 PD	Estratégia 3 PD
5	(25, 47.4, 115); 6.2580	(16, 37.2, 90); 5.5982	(9, 21.8, 72); 1.0706	(8, 26, 64); 0.8832
n	Dual RC	Estratégia 1 RC	Estratégia 2 RC	Estratégia 3 RC
2	(25, 48.7, 131); 0.1118	(16, 38.8, 111); 0.1026	(9, 24.3, 116); 0.0577	(8, 27.9, 97); 0.0573

Tabela 3.12: Outros resultados para o problema da viga em balanço.

duas barras é repetido neste problema. Embora o número de subproblemas resolvidos não seja tão parecido, a cada estratégia, a abordagem dual com região de confiança tem grande vantagem em relação ao tempo de CPU utilizado. Novamente, este comportamento é refletido no perfil de desempenho de cada estratégia, apresentado na Figura 3.17.

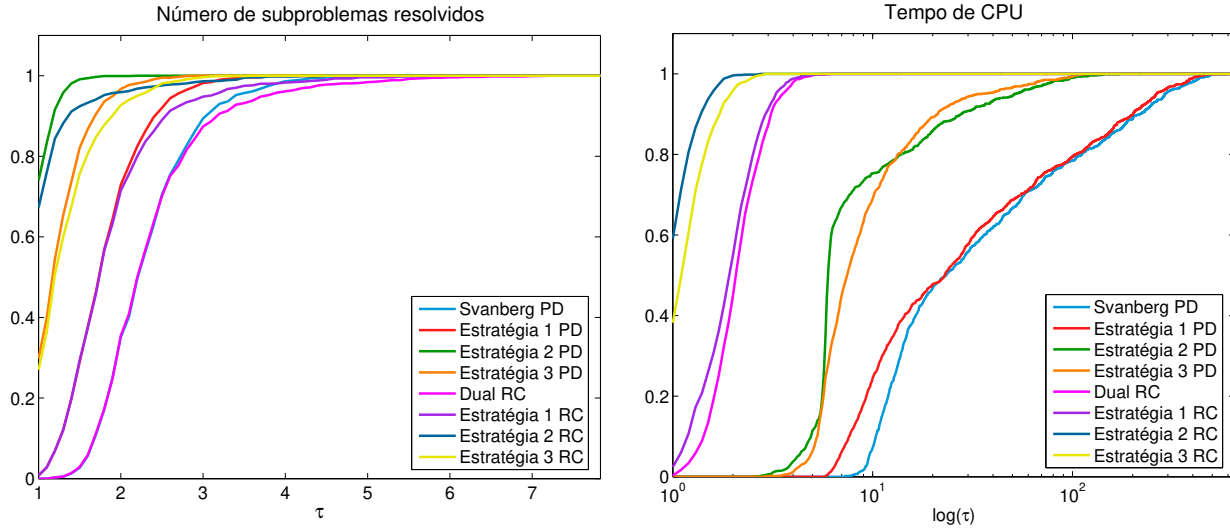


Figura 3.17: Perfil de desempenho para o problema da viga em balanço. Eixo vertical: $\rho_s(\tau)$

3.3.4 Conclusões dos resultados numéricos

A abordagem dual com região de confiança, proposta neste capítulo, apresentou um desempenho bastante semelhante à abordagem primal-dual de Svanberg, a cada estratégia comparada. De fato, para a maioria dos problemas testados, os resultados foram parecidos em relação tanto ao número de iterações quanto ao tempo de CPU utilizado. Para os problemas menores, a abordagem proposta mostrou-se consideravelmente vantajosa em relação ao tempo. Desta maneira, acreditamos que uma investigação mais profunda desta abordagem visando aperfeiçoar seu desempenho para os problemas maiores será relevante. Além das duas abordagens terem sido competitivas, a abordagem dual com região de confiança mostrou uma melhora a cada estratégia, a exemplo do que aconteceu na abordagem primal-dual, indicando assim a importância da atualização espectral, da relaxação da condição conservadora e da combinação destas duas modificações. Novamente, para cada ponto inicial e para cada dimensão considerada, todas as estratégias atingiram a mesma solução ótima.

Conclusões

Neste trabalho propusemos modificações para o Método das Assíntotas Móveis (MMA), baseadas no parâmetro espectral para a construção das aproximações das funções originais e na relaxação da condição conservadora. Propusemos também uma nova estratégia para resolver os subproblemas MMA por meio do problema dual, usando uma técnica de região de confiança. Finalmente, estabelecemos relações entre os pontos KKT do problema aumentado e os pontos correspondentes do problema original associado.

No início do trabalho, consideramos o problema padrão de programação não-linear com restrições de desigualdade e caixa e um problema aumentado relacionado, no qual variáveis artificiais são introduzidas com o objetivo de garantir a existência de um ponto estacionário, no caso em que o problema original tenha conjunto viável vazio ou não cumpra alguma condição de qualificação. O problema aumentado foi cuidadosamente caracterizado e foram estabelecidas relações entre os pontos KKT do problema aumentado e os pontos correspondentes do problema original associado. Assim, ao obter um ponto estacionário do problema aumentado, podemos determinar quais propriedades o ponto correspondente satisfaz em relação ao problema original. A principal vantagem de se trabalhar com o problema aumentado neste trabalho é assegurar a consistência dos subproblemas empregados pelo método.

Ainda no Capítulo 1, trouxemos uma descrição detalhada da classe de métodos CCSA, na qual a condição conservadora tem um importante papel na aceitação da solução de um subproblema como próximo iterando externo. Este capítulo foi finalizado com uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos estudados.

No Capítulo 2 propusemos duas modificações globalmente convergentes para o método das assíntotas móveis. Na primeira modificação, a informação de segunda ordem presente no parâmetro espectral foi incluída nas aproximações racionais da função objetivo e das restrições não-lineares no início de cada iteração externa. Isto foi realizado por meio da atualização de um importante parâmetro do método, melhorando a qualidade dos modelos e preservando a propriedade de convergência global da classe de métodos CCSA. Na segunda modificação, a condição conservadora foi relaxada por meio de uma sequência forçante controlada somável, de maneira que a convergência global foi mantida.

Em relação à análise teórica realizada para a versão modificada do MMA, foi obtida uma cota superior para os parâmetros $\rho_i^{(k,\ell)}$. É interessante notar que, apesar de a cota superior obtida relaxando a condição conservadora ter sido a mesma que aquela encontrada por Svanberg com a condição conservadora original, em termos práticos, valores menores de $\rho_i^{(k,\hat{\ell}(k))}$ foram usados em cada iteração externa k , pois a condição conservadora relaxada é verificada antes da condição conservadora original. O teorema da convergência global diz que todo ponto limite da sequência gerada pelo algoritmo é um ponto KKT do problema aumentado. Este e outros resultados foram obtidos usando o fato de que a sequência usada para relaxar a condição conservadora é somável, e portanto seu termo geral tende a zero conforme as iterações externas avançam.

Os resultados dos testes computacionais realizados introduzindo no MMA a atualização espectral e a condição conservadora relaxada comprovam a eficiência das estratégias propostas. Foram usadas duas maneiras distintas para relaxar a condição conservadora que aumentaram a eficiência do algoritmo. Entretanto, observamos que a estratégia que relaxou a condição conservadora excessivamente afetou a robustez do algoritmo, de modo que um estudo de uma relaxação ótima da condição conservadora, que equilibre eficiência e robustez, é uma das possibilidades de continuidades para o presente trabalho. De qualquer forma, os resultados das estratégias que combinaram ambas as modificações propostas indicaram que os valores ótimos do parâmetro cuja atualização foi baseada no parâmetro espectral se encarregaram de verificar a condição conservadora relaxada após poucas tentativas, de maneira que o algoritmo precisou realizar poucas iterações internas para obter convergência, reduzindo o número de subproblemas resolvidos e sendo muito eficiente em relação ao tempo.

Finalmente, no Capítulo 3, propusemos uma nova estratégia para resolver os subproblemas MMA por meio do problema dual, usando uma técnica de região de confiança. Nesta nova abordagem resolvemos o dual de um subproblema MMA, que é um problema de maximização de uma função objetivo côncava sujeito à não negatividade das variáveis duais. Para tanto, tiramos proveito das várias propriedades da função objetivo dual, como por exemplo a concavidade e outras relacionadas com continuidade e diferenciabilidade de primeira e segunda ordens, bem como a existência de uma fórmula fechada para a solução do subproblema considerado. Em relação aos experimentos numéricos realizados, nossa abordagem dual com região de confiança apresentou um desempenho bastante semelhante à abordagem primal-dual de Svanberg em relação ao número de iterações realizadas e foi superior em relação ao tempo de CPU utilizado, principalmente para os problemas menores. Assim, acreditamos que prosseguir investigando as características do problema dual seja possível propor uma estratégia mais eficiente para a resolução dos subproblemas MMA, melhorando o desempenho do algoritmo para problemas maiores.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Alves Filho, *Elementos Finitos: A Base da Tecnologia CAE*, Editora Érica, São Paulo, 4^a edição, 2006.
- [2] K. J. Arrow, L. Hurwicz, H. Uzawa (1961), *Constraint qualifications in maximization problems*, Naval Research Logistics Quarterly, Volume 8, pp. 175–191.
- [3] A. Auslender, P. J. S. Silva, M. Teboulle (2007), *Nonmonotone projected gradient methods based on barrier and Euclidean distances*, Computational Optimization and Applications, Volume 38, pp. 305–327.
- [4] J. Barzilai, J. M. Borwein (1988), *Two-point step size gradient methods*, IMA Journal of Numerical Analysis, Volume 8, pp. 141–148.
- [5] D. P. Bertsekas, *Nonlinear Programming: Second Edition*, Athena Scientific, Belmont, 2003. (Second Printing)
- [6] D. P. Bertsekas, *Nonlinear Programming: 2nd Edition - Solutions Chapter 5*, disponível em <http://www.athenasc.com/nonlinbook.html>, último acesso em 08/10/2010.
- [7] E. G. Birgin, J. M. Martínez, M. Raydan (2000), *Nonmonotone Spectral Projected Gradient methods on convex sets*, SIAM Journal on Optimization, Volume 10, pp. 1196–1211.
- [8] E. G. Birgin, J. M. Martínez, M. Raydan (2001), *Algorithm 813: SPG - Software for convex-constrained optimization*, ACM Transactions on Mathematical Software, Volume 27(3), pp. 340–349.
- [9] E. G. Birgin, J. M. Martínez, M. Raydan (2003), *Inexact Spectral Projected Gradient methods on convex sets*, IMA Journal on Numerical Analysis, Volume 23, pp. 539–559.
- [10] K. -U. Bletzinger (1993), *Extended Method of Moving Asymptotes based on second-order information*, Structural Optimization, Volume 5, pp. 175–183.

- [11] M. Bruyneel, P. Duysinx, C. Fleury (2002), *A family of MMA approximations for structural optimization*, Structural and Multidisciplinary Optimization, Volume 24, pp. 263–276.
- [12] R. H. Byrd, F. E. Curtis, J. Nocedal (2010), *Infeasibility detection and SQP methods for nonlinear optimization*, SIAM Journal on Optimization, Volume 20(5), pp. 2281–2299.
- [13] C. Cartis, N. I. M. Gould, Ph. L. Toint, *Adaptive cubic regularisation methods for unconstrained optimization. Part I: motivation, convergence and numerical results*, a aparecer em Mathematical Programming. <http://dx.doi.org/10.1007/s10107-009-0286-5>.
- [14] A. R. Conn, N. I. M. Gould, Ph. L. Toint, *LANCELOT: A Fortran Package for Large-Scale Nonlinear Optimization (Release A)*, Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1992.
- [15] J. E. Dennis, R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [16] M. A. Diniz-Ehrhardt, M. A. Gomes-Ruggiero, J. M. Martínez, S. A. Santos (2004), *Augmented Lagrangian algorithms based on the Spectral Projected Gradient method for solving nonlinear programming problems*, Journal of Optimization Theory and Applications, Volume 123(3), pp. 497–517.
- [17] E. D. Dolan, J. J. Moré (2002), *Benchmarking optimization software with performance profiles*, Mathematical Programming, Volume 91, pp. 201–213.
- [18] P. Duysinx, M. Bruyneel, C. Fleury, *Solution of large scale optimization problems with sequential convex programming*, disponível em <http://hdl.handle.net/2268/25613>, último acesso em 08/10/2010.
- [19] C. Fleury (1979), *Structural weight optimization by dual methods of convex programming*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Volume 14, pp. 1761–1783.
- [20] C. Fleury (1989), *CONLIN: an efficient dual optimizer based on convex approximation concepts*, Structural Optimization, Volume 1, pp. 81–89.
- [21] C. Fleury (1993), *Dual methods for convex separable problems*, In: Rozvany, G.I.N.(ed.) *Optimization of Large Structural Systems* (Proc. NATO ASI, Berchtesgaden, Germany, 1991), pp. 509–530. Dordrecht: Kluwer.

- [22] C. Fleury (2009), *Structural optimization methods for large scale problems: computational time issues*, In: WCSMO-8 - Eighth World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization, Lisboa. CD-Rom Proceedings, v. 1. pp. 1–14.
- [23] C. Fleury, V. Braibant (1986), *Structural optimization: a new dual method using mixed variables*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Volume 23, pp. 409–428.
- [24] J. Gauvin (1977), *A necessary and sufficient regularity condition to have bounded multipliers in nonconvex programming*, Mathematical Programming, Volume 12, pp. 136–138.
- [25] M. A. Gomes-Ruggiero, J. M. Martínez, S. A. Santos (2009), *Spectral Projected Gradient method with inexact restoration for minimization with nonconvex constraints*, SIAM Journal on Scientific Computing, Volume 31(3), pp. 1628–1652.
- [26] M. A. Gomes-Ruggiero, M. Sachine, S. A. Santos (2010), *A spectral updating for the Method of Moving Asymptotes*, Optimization Methods and Software, Volume 25(6), pp. 883–893.
- [27] R. T. Haftka, J.H. Starnes (1979), *Preliminary design of composite wings for buckling, stress and displacements constraints*, Journal of Aircraft, Volume 16, pp. 564–570.
- [28] R. T. Haftka, Z. Gürdal, *Elements of Structural Optimization - Third revised and expanded edition*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 1991.
- [29] A. Izmailov, M. Solodov, *Otimização - volume 1. Condições de Otimalidade, Elementos de Análise Convexa e de Dualidade*, Rio de Janeiro: IMPA, 2005.
- [30] J. H. Jung, D. P. O’Leary, A. L. Tits, *Adaptive constraint reduction for convex quadratic programming*, a aparecer em Computational Optimization and Applications. <http://dx.doi.org/10.1007/s10589-010-9324-8>.
- [31] T. Larsson, M. Rönqvist (1993), *A method for structural optimization which combines second-order approximations and dual techniques*, Structural Optimization, Volume 5, pp. 225–232.
- [32] P. Mahey, R. R. Saldanha, J. L. Coulomb (1995), *Moving asymptotes and active strategy for constrained optimization design in magnetostatic problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Volume 38(6), pp. 1021–1030.

- [33] O. L. Mangasarian, S. Fromovitz (1967), *The Fritz John necessary optimality conditions in the presence of equality and inequality constraints*, Journal of Mathematical Analysis and Applications, Volume 17, pp. 37–47.
- [34] Y. Nesterov, B. T. Polyak (2006), *Cubic regularization of Newton method and its global performance*, Mathematical Programming, Volume 108(1), pp. 177–205.
- [35] Q. Ni (2003), *A globally convergent Method of Moving Asymptotes with trust region technique*, Optimization Methods and Software, Volume 18(3), pp. 283–297.
- [36] J. Nocedal, S. J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer-Verlag, New York. (Springer Series in Operations Research), 1999.
- [37] M. Raydan (1997), *The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem*, SIAM Journal on Optimization, Volume 7(1), pp. 26–33.
- [38] M. Raydan, B. F. Svaiter (2002), *Relaxed steepest descent and Cauchy-Barzilai-Borwein method*, Computational Optimization and Applications, Volume 21, pp. 155–167.
- [39] H. L. Soriano, *Estática das Estruturas*, Editora Ciência Moderna, Rio de Janeiro, 2007.
- [40] K. Svanberg (1987), *The Method of Moving Asymptotes - a new method for structural optimization*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Volume 24, pp. 359–373.
- [41] K. Svanberg (1993), *The Method of Moving Asymptotes (MMA) with some extensions*, In: Rozvany, G.I.N.(ed.) *Optimization of Large Structural Systems* (Proc. NATO ASI, Berchtesgaden, Germany, 1991), pp. 555–566. Dordrecht: Kluwer.
- [42] K. Svanberg (1995), *A globally convergent version of MMA without linesearch*, In: Rozvany G.I.N., Olhoff N. (eds.) *Proceedings of the First World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization*, pp. 9–16. Oxford: Pergamon Press.
- [43] K. Svanberg *The Method of Moving Asymptotes - modelling aspects and solution schemes*, Lecture Notes for the DCAMM course Advanced Topics in Structural Optimization, 1998, 24p.
- [44] K. Svanberg (1999), *The MMA for modeling and solving optimization problems*, Proceedings of the Third World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization, pp. 17–21.

- [45] K. Svanberg (2002), *A class of globally convergent optimization methods based on conservative convex separable approximations*, SIAM Journal on Optimization, Volume 12, pp. 555–573.
- [46] K. Svanberg, *MMA and GCMMA, versions September 2007*, disponível em <http://www.math.kth.se/~krille/gcmma07.pdf>, último acesso em 08/10/2010.
- [47] K. Svanberg, MMA e GCMMA programas computacionais em Fortran e Matlab, disponíveis para uso acadêmico mediante solicitação ao autor.
- [48] H. Wang, Q. Ni (2008), *A new Method of Moving Asymptotes for large-scale unconstrained optimization*, Applied Mathematics and Computation, Volume 203, pp. 62–71.
- [49] M. Weiser, P. Deuffhard, B. Erdmann (2007), *Affine conjugate adaptive Newton methods for nonlinear elastomechanics*, Optimization Methods and Software, Volume 22(3), pp. 413–431.
- [50] W. H. Zhang, C. Fleury (1997), *A modification of convex approximation methods for structural optimization*, Computers & Structures, Volume 64, pp. 89–95.
- [51] W. H. Zhang, C. Fleury, P. Duysinx, V. H. Nguyen, I. Laschet (1996), *A Generalized Method of Moving Asymptotes (GMMMA) including equality constraints*, Structural Optimization, Volume 12, pp. 143–146.
- [52] Ch. Zillober (1993), *A globally convergent version of the Method of Moving Asymptotes*, Structural Optimization, Volume 6, pp. 166–174.
- [53] Ch. Zillober (2001), *Global convergence of a nonlinear programming method using convex approximations*, Numerical Algorithms, Volume 27, pp. 256–289.
- [54] K. T. Zuo, L. P. Chen, Y. Q. Zhang, J. Yang (2005), *A hybrid topology optimization algorithm for structural design*, Engineering Optimization, Volume 37(8), pp. 849–866.

Apêndice A

Limitante superior para os multiplicadores de Lagrange

Neste apêndice vamos mostrar como obter um limitante superior para os multiplicadores de Lagrange do problema (1.2). Para tanto, vamos usar o Exercício 5.3.1 de [5], apresentado aqui juntamente com sua resolução, que pode ser encontrada em [6].

Considere o problema não-linear com restrições

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && F_0(u) \\ &\text{sujeito a} && F_i(u) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ &&& u \in U. \end{aligned} \tag{A.1}$$

Vamos assumir que o problema (A.1) é viável e seu valor ótimo F_0^* é finito. Além disso, o conjunto U é um subconjunto convexo de \mathbb{R}^n e as funções $F_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $F_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ são convexas em U . Também, existe um vetor $\bar{u} \in U$ tal que

$$F_i(\bar{u}) < 0, \quad \forall i = 1, \dots, m. \tag{A.2}$$

A condição de ponto interior (A.2) é conhecida como a *condição de qualificação de Slater*. O resultado seguinte diz que o conjunto de multiplicadores de Lagrange do problema (A.1) é não-vazio.

Proposição A.1. (cf. [5, Prop. 5.3.1])

Se as hipóteses acima valem para o problema (A.1) então existe pelo menos um multiplicador de Lagrange. \square

Na sequência, vamos apresentar o Exercício 5.3.1 de [5] e sua resolução.

Exercício 5.3.1 de [5] - Limitação do Conjunto de Multiplicadores de Lagrange

Considere o problema (A.1) assumindo que U é convexo, F_0 e F_i são funções convexas em U e F_0^* é finito. Mostre que se existe um $\bar{u} \in U$ tal que $F_i(\bar{u}) < 0$ para todo i então o conjunto de multiplicadores de Lagrange é não-vazio e limitado.

Dica: Mostre que se $\bar{u} \in U$ tal que $F_i(\bar{u}) < 0$ para todo i , então para cada multiplicador de Lagrange λ , temos

$$\sum_{j=1}^m \lambda_j \leq \frac{F_0(\bar{u}) - F_0^*}{\min_{i=1, \dots, m} \{-F_i(\bar{u})\}}. \quad (\text{A.3})$$

Solução: Suponha que existe um $\bar{u} \in U$ tal que $F_i(\bar{u}) < 0$ para todo i . Pela Proposição A.1, o conjunto de multiplicadores de Lagrange é não-vazio. Seja λ um multiplicador de Lagrange qualquer. Por hipótese, $-\infty < F_0^*$, e da convexidade das funções envolvidas, temos

$$-\infty < F_0^* = \min_{u \in U} L(u, \lambda) \leq L(\bar{u}, \lambda) = F_0(\bar{u}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i F_i(\bar{u}),$$

ou

$$-\sum_{i=1}^m \lambda_i F_i(\bar{u}) \leq F_0(\bar{u}) - F_0^*.$$

Temos

$$\min_{k=1, \dots, m} \{-F_k(\bar{u})\} \leq -F_i(\bar{u}), \quad \forall i,$$

então combinando as duas últimas relações, obtemos

$$\left(\sum_{i=1}^m \lambda_i \right) \min_{k=1, \dots, m} \{-F_k(\bar{u})\} \leq F_0(\bar{u}) - F_0^*.$$

Como \bar{u} satisfaz $F_i(\bar{u}) < 0$ para todo i , temos

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i \leq \frac{F_0(\bar{u}) - F_0^*}{\min_{i=1, \dots, m} \{-F_i(\bar{u})\}}. \quad \square$$

Agora, com base em idéias apresentadas no Exercício 5.3.3 de [5] vamos exibir uma cota superior para os multiplicadores de Lagrange do nosso problema:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f_0(x) + \sum_{i=1}^m c_i y_i \\ &\text{sujeito a} && f_i(x) - y_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ &&& x \in X, \quad y_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde f_0, f_1, \dots, f_m são funções reais duas vezes continuamente diferenciáveis e os conjuntos $X \subset \mathbb{R}^n$ e $y \geq 0$ são convexos e fechados. Sejam (x^*, y^*) um minimizador local de (A.4) e M^* o conjunto de multiplicadores de Lagrange do problema (A.4). Note que $M^* \neq \emptyset$ pela Proposição 4 do Capítulo 1 e denote

$$F_i(x, y) = (\nabla f_i(x^*); -e_i)^T (x - x^*; y - y^*), \quad \forall i \in \{1, \dots, m\},$$

onde e_i é o i -ésimo vetor elementar de \mathbb{R}^n . Da Proposição 5.1.1 de [5], temos que $\lambda \in M^*$ se e somente se (x^*, y^*) é um minimizador global do problema convexo

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && F_0(x, y) \equiv \nabla f_0(x^*)^T (x - x^*) + c^T (y - y^*) \\ &\text{sujeito a} && F_i(x, y) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ &&& x \in X, y \geq 0, \end{aligned} \tag{A.5}$$

e λ é um multiplicador de Lagrange associado. As direções viáveis para o problema (A.5) a partir de (x^*, y^*) são os vetores da forma $d = (x - x^*, y - y^*)$ onde $x \in X$ e $y \geq 0$, de modo que a existência de uma direção viável d que satisfaz $(\nabla f_i(x^*); -e_i)^T d < 0$ é equivalente à existência de $\bar{x} \in X$ e $\bar{y} \geq 0$ tais que $F_i(\bar{x}, \bar{y}) < 0$ para todo i .

Tomando a direção $d = (d_x, d_y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ da seguinte maneira:

$$(d_x)_j = 0, \quad j = 1, \dots, n, \quad \text{e} \quad (d_y)_i = 1, \quad i = 1, \dots, m,$$

obtemos

$$\bar{x} = x^*, \bar{y}_i = y_i^* + 1, \quad i = 1, \dots, m \quad \text{e} \quad F_i(\bar{x}, \bar{y}) = -(\bar{y}_i - y_i^*) \equiv -1 < 0, \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}.$$

Assim, para aplicarmos ao problema (A.5) a expressão (A.3), precisamos também dos valores de:

$$F_0(x^*, y^*) = 0 \quad \text{e} \quad F_0(\bar{x}, \bar{y}) = c^T (\bar{y} - y^*) = \sum_{i=1}^m c_i.$$

Como $\min_{k=1, \dots, m} -F_k(\bar{x}, \bar{y}) = 1$ segue que

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i \leq \sum_{i=1}^m c_i$$

é a cota desejada.