

FABIANA RODRIGUES DE OLIVEIRA

**ESTUDO DE ALGUNS MÉTODOS
CLÁSSICOS DE OTIMIZAÇÃO RESTRITA
NÃO LINEAR**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE MATEMÁTICA
2012

FABIANA RODRIGUES DE OLIVEIRA

ESTUDO DE ALGUNS MÉTODOS CLÁSSICOS DE OTIMIZAÇÃO RESTRITA NÃO LINEAR

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para obtenção do título de **MESTRE EM MATEMÁTICA**.

Área de Concentração: Matemática.

Linha de Pesquisa: Análise Numérica e Otimização.

Orientadora: Profa. Dra. Sezimária de Fátima Pereira Saramago.

UBERLÂNDIA - MG
2012

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU , MG, Brasil

-
- O48e
2012 Oliveira, Fabiana Rodrigues de, 1986-
 Estudo de alguns métodos clássicos de otimização restrita
 não linear / Fabiana Rodrigues de Oliveira. - 2012.
 120 f. : il.
- Orientadora: Sezimária de Fátima Pereira Saramago.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-Graduação em Matemática.
Inclui bibliografia.
1. Matemática - Teses. 2. Otimização matemática - Teses. I.
Saramago, Sezimária de Fátima Pereira. II. Universidade Federal
de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Matemática. III.
Título.

CDU: 51



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA
Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1F, Sala 1F 152
Campus Santa Mônica, Uberlândia - MG, CEP 38400-902

ALUNA: Fabiana Rodrigues de Oliveira.

NÚMERO DE MATRÍCULA: 11012MAT005.

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Matemática.

LINHA DE PESQUISA: Análise Numérica e Otimização.

PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA: Nível Mestrado.

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Estudo de alguns métodos clássicos de otimização restrita não linear.

ORIENTADORA: Profa. Dra. Sezimária de Fátima Pereira Saramago.

Esta dissertação foi **APROVADA** em reunião pública realizada na Sala Multiuso da Faculdade de Matemática, Bloco 1F, Campus Santa Mônica, em 24 de fevereiro de 2012, às 14:00 horas, pela seguinte Banca Examinadora:

NOME

ASSINATURA

Profa. Dra. Sezimária de Fátima Pereira Saramago
UFU - Universidade Federal de Uberlândia

Prof. Dr. Valeriano Antunes de Oliveira
Unesp - Universidade Estadual Paulista - S. J. Rio Preto

Prof. Dr. César Guilherme de Almeida
UFU - Universidade Federal de Uberlândia

Uberlândia-MG, 24 de fevereiro de 2012.

Dedicatória

Dedico este trabalho a Deus e a todas as pessoas que contribuíram para que eu concluísse mais esta etapa da minha vida. Em especial aos meus pais Fernando e Dilourdes, aos meus irmãos Fernando e Fabrícia, ao professor Edson Agustini e à minha orientadora Sezimária.

Agradecimentos

A Deus por mais este sonho realizado, por me dar saúde e sabedoria e pela oportunidade de conviver com as pessoas abaixo mencionadas.

Aos meus pais, Fernando e Dilourdes, pelo amor, por tanto apoio, pela confiança em mim depositada, pelos conselhos e compreensão.

Aos meus irmãos Fernando e Fabrícia, pelo companheirismo, pelo carinho e por todas as palavras incentivadoras.

À minha orientadora Sezimária, para mim grande exemplo de docente, pesquisadora e acima de tudo ser humano. Meus sinceros agradecimentos pelos ensinamentos, pela confiança, pela paciência e disponibilidade em esclarecer minhas dúvidas, pela dedicação contagiante em todas reuniões e por ter me aceito como orientanda.

À todos os docentes e funcionários do Programa de Mestrado - FAMAT que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho e para minha formação, em especial, ao professor Edson Agustini, por sua generosidade e cordialidade, pelo incentivo e por não medir esforços em conseguir recursos financeiros para a realização deste projeto, a ele sou eternamente grata. Ao professor Antônio Carlos Nogueira pelas valiosas contribuições.

Aos professores Paulo Roberto Bergamaschi e Porfírio Azevedo dos Santos Júnior da UFG - CAC por acreditarem em minha capacidade.

Aos professores Valeriano e César por terem aceito o convite para participarem da banca examinadora e, de mesma forma, agradeço aos professores suplentes Cleonice Fátima Bracciali e Antônio Carlos Nogueira.

À todos os amigos do mestrado, Adenilce, Edir, Franciele, Giselle e Thiago, pelo companheirismo, pelos momentos de estudo e de descontração.

À CAPES, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, pelo apoio financeiro.

OLIVEIRA, F. R. *Estudo de alguns métodos clássicos de otimização restrita não linear* 2012. 106 p. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG.

Resumo

Neste trabalho são estudados alguns métodos clássicos de otimização restrita não linear. São abordadas a formulação matemática para o problema de otimização com restrições de igualdade e desigualdade, propriedades de convergência e algoritmos. Além disso, são relatadas as condições de otimalidade de primeira ordem (condições de Karush-Kuhn-Tucker) e de segunda ordem. Estas condições são essenciais para a demonstração de muitos resultados. Dentre os métodos estudados, algumas técnicas transformam o problema original em um problema irrestrito (Métodos de Penalidade, Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado). Em outros métodos, o problema original é modelado como um ou uma sequência de subproblemas quadráticos sujeito à restrições lineares (Método de Programação Quadrática, Método de Programação Quadrática Sequencial). A fim de ilustrar e comparar o desempenho dos métodos estudados são considerados dois problemas de otimização não linear: um problema bidimensional e o problema de minimização da massa de uma mola helicoidal. Os resultados obtidos são examinados e confrontados entre si.

Palavras-chave: Otimização restrita, programação não linear, condições de Karush-Kuhn-Tucker, simulação numérica, convergência.

OLIVEIRA, F. R. *Study of some classic methods for constrained nonlinear optimization* 2012. 106 p. M. Sc. Dissertation, Federal University of Uberlândia, Uberlândia-MG.

Abstract

In this work some classical methods for constrained nonlinear optimization are studied. The mathematical formulations for the optimization problem with equality and inequality constrained, convergence properties and algorithms are presented. Furthermore, optimality conditions of first order (Karush-Kuhn-Tucker conditions) and of second order. These conditions are essential for the demonstration of many results. Among the methods studied, some techniques transform the original problem into an unconstrained problem (Penalty Methods, Augmented Lagrange Multipliers Method). In others methods, the original problem is modeled as one or as a sequence of quadratic subproblems subject to linear constraints (Quadratic Programming Method, Sequential Quadratic Programming Method). In order to illustrate and compare the performance of the methods studied, two nonlinear optimization problems are considered: a bi-dimensional problem and a problem of mass minimization of a coil spring. The obtained results are analyzed and confronted with each other.

Keywords: Constrained optimization, nonlinear programming, Karush-Kuhn-Tucker conditions, numerical simulations, convergence.

Lista de Figuras

1.1	Representação de mínimos locais e global	5
1.2	Representação da direção de descida máxima	8
1.3	Gráfico e curvas de nível da função $f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$	19
2.1	Região viável do \mathbb{R}^2 , descritas pelas inequações (2.4)	24
2.2	Representação da região viável do Exemplo 2.1	25
2.3	Representação da região viável do Exemplo 2.2	26
2.4	Dois pontos viáveis onde a restrição é ativa e inativa	27
2.5	Representação das regiões \mathcal{R}_1 e \mathcal{R}_2	27
2.6	Representação da região viável do Exemplo 2.3	28
2.7	O cone tangente em relação ao conjunto Ω no ponto $x^* \in \Omega$	30
2.8	Restrições de desigualdade do Exemplo 2.4	31
2.9	Lema de Farkas: quando $g \in K$ (esquerda) ou existe um hiperplano que o separa do cone (direita)	35
2.10	Representação do problema (2.83), mostrando $\mathcal{F}(x^*)$ e $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$	38
3.1	Gráfico, curvas de nível e restrições do problema (3.24)	48
3.2	Superfície, curvas de nível e região viável do Exemplo Ilustrativo 1	57
4.1	Curvas de nível da função (4.4): a) adotando $\mu = 0, 1$; b) adotando $\mu = 40$	62
4.2	Progresso do Método de Penalidade Quadrática aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1	67
4.3	Função de penalidade do problema (4.31) considerando: a) $\mu < 1$; b) $\mu > 1$	68
4.4	Curvas de nível da função (4.35) considerando $\mu = 8$	69
4.5	Progresso do Método de Penalidade ℓ_1 aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1	71
5.1	Curvas de nível da função $\mathcal{L}_A(x, -0, 9; 0, 1)$	74
5.2	Progresso do Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1	82
6.1	Progresso do Método de Programação Quadrática Sequencial aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1	95
7.1	Representação de uma mola helicoidal	96
7.2	Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo Método de Penalidade Quadrática	99
7.3	Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo Método de Penalidade Quadrática ℓ_1	100
7.4	Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo MLMA	101
7.5	Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo método de SQP	102

Lista de Tabelas

1.1	Método da Descida Máxima aplicado à função de Rosenbrock bidimensional . . .	20
1.2	Método de Newton aplicado à função de Rosenbrock bidimensional	20
1.3	Método Quase-Newton (DFP) aplicado à função de Rosenbrock bidimensional .	21
1.4	Método Quase-Newton (BFGS) aplicado à função de Rosenbrock bidimensional .	21
1.5	Método dos Gradientes Conjugados aplicado à função de Rosenbrock bidimensional	22
4.1	Método de Penalidade Quadrática aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1	67
4.2	Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1	70
5.1	Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado aplicado ao Exemplo Ilus- trativo 1	82
6.1	Método de Programação Quadrática Sequencial aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1	94
7.1	Método de Penalidade Quadrática aplicado ao problema da mola	99
7.2	Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 aplicado ao problema da mola	100
7.3	Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado aplicado ao problema da mola	101
7.4	Método de Programação Quadrática Sequencial aplicado ao problema da mola .	102
8.1	Resultados ótimos encontrados para o Exemplo Ilustrativo 1	103
8.2	Resultados ótimos encontrados para o Problema da Mola	103

Lista de Símbolos

A	Matriz dos coeficientes de um sistema linear
$\mathcal{A}(x)$	Conjunto dos índices das restrições ativas
$c_i(x)$	Função de restrição
$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$	Cone Crítico
D	Conjunto de índices das restrições de desigualdade
d^1, \dots, d^n	Direções de busca conjugadas
$f(x)$	Função objetivo
$\mathcal{F}(x^*)$	Conjunto das direções viáveis linearizadas
G^k	Aproximação para a inversa da Hessiana
Q_H^k	Aproximação da Matriz Hessiana
I	Conjunto de índices das restrições de igualdade
\mathcal{I}	Matriz identidade
$J(x^*)$	Matriz Jacobiana das restrições ativas no ponto ótimo
$\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu)$	Função Lagrangeana Aumentada
m_k	Função modelo na k -ésima iteração
M_d	Matriz das direções conjugadas
M	Matriz Karush-Kuhn-Tucker
$\mathcal{N}(J(x^*))$	Espaço nulo da matriz $J(x^*)$
p^k	Direção de busca na k -ésima iteração
$q(x)$	Função Quadrática
$Q(x; \mu)$	Função de penalidade quadrática
r	Vetor resíduo
S	Matriz simétrica positiva definida
s_i	Variáveis de folga
$T_\Omega(x^*)$	Conjunto de todas as direções tangentes a Ω por x^*
v^k	Varição do vetor variáveis de projeto entre duas iterações consecutivas
\mathcal{W}_k	Conjunto de Trabalho
x	Vetor variáveis de projeto
x^*	Mínimo global de uma função
x^0	Ponto inicial para as variáveis de projeto
$\{x^k\}$	Sequência de aproximações do vetor das variáveis de projeto
y^k	Varição do gradiente aplicado as variáveis de projeto entre duas iterações consecutivas
$\{z^k\}$	Sequência viável
α_k	Comprimento do passo na direção de busca p^k
θ	Ângulo entre p^k e $\nabla f(x^k)$
ϑ_i	Autovalores
λ	Vetor dos multiplicadores de Lagrange
λ_i	Multiplicador de Lagrange associado a restrição c_i
μ	Fator de Penalidade
τ	Tolerância para o critério de parada

$\phi_1(x; \mu)$	Função de penalidade ℓ_1
Ω	Conjunto dos pontos que satisfazem as restrições
$\nabla f(x)$	Vetor gradiente da função $f(x)$
$\nabla^2 f(x)$	Matriz Hessiana da função $f(x)$
$\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda)$	Gradiente da função Lagrangeana
$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda)$	Matriz Hessiana da função Lagrangeana
$\mathbb{R}^{ \mathcal{A}(x^*) }$	Cardinalidade dos números reais em relação ao conjunto ativo
$\ \cdot\ $	Qualquer uma das normas abaixo
$\ \cdot\ _1$	Norma da soma
$\ \cdot\ _2$	Norma Euclidiana
$\ \cdot\ _\infty$	Norma do máximo

Sumário

Resumo	vii
Abstract	viii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	x
Lista de Símbolos	xi
Introdução	1
1 Revisão: Otimização Irrestrita	4
1.1 Formulação matemática e resultados importantes	4
1.2 Método da Descida Máxima	8
1.2.1 Convergência do Método	9
1.3 Método de Newton	12
1.4 Métodos Quase-Newton	13
1.4.1 Os Métodos BFGS e DFP	13
1.5 Método dos Gradientes Conjugados	15
1.5.1 Obtenção dos vetores conjugados (d^j)	17
1.5.2 Método do Gradiente Conjugado Não Linear (Fletcher-Reeves)	18
1.6 Simulações Numéricas	19
2 Fundamentos da Otimização Restrita	23
2.1 Análises preliminares sobre problemas restritos	24
2.2 Condições de otimalidade de primeira ordem	30
2.3 Condições de otimalidade de segunda ordem	37
2.4 O problema dual	43
3 Programação Quadrática	44
3.1 Eliminação de variáveis	44
3.2 Programação Quadrática para restrições de igualdade	46
3.2.1 Método Complementar de Schur	49
3.2.2 Método do Espaço Nulo	51
3.3 Programação Quadrática para restrições de desigualdade	51
3.4 Método do Conjunto Ativo	53
4 Métodos de Penalidade	61
4.1 O Método de Penalidade Quadrática	61
4.1.1 Convergência do Método de Penalidade Quadrática	63
4.1.2 Comportamento da matriz Hessiana do Método de Penalidade Quadrática	66

4.1.3	Aplicação do Método	66
4.2	A Função de Penalidade Exata ℓ_1	67
5	Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado	72
5.1	Problemas com restrições de igualdade	72
5.1.1	Propriedades da função Lagrangeana Aumentada	74
5.2	Problemas com restrições de desigualdade	80
6	Programação Quadrática Sequencial	83
6.1	Formulação do subproblema quadrático	83
6.2	Algoritmo para programação quadrática sequencial com matriz Hessiana aproximada	86
6.2.1	Atualização com correção de Powell	86
6.3	Função de Mérito	87
6.4	Convergência do Método	88
6.4.1	Método de Programação Quadrática Sequencial com busca linear	91
7	Minimização da massa de uma mola helicoidal	96
7.1	Formulação do problema	96
7.2	Aplicação dos Métodos	99
8	Discussões e Conclusões	103
	Referências Bibliográficas	105

Introdução

A essência da otimização é melhorar algo em um conjunto de alternativas disponíveis. Trata-se de uma ferramenta de grande aplicabilidade que se constitui numa vasta e atraente área do conhecimento, sendo de grande importância para as ciências exatas, biológicas e tecnológicas.

A otimização não é uma área isolada, pois está diretamente ligada com a matemática e computação. Antes de otimizar um problema é necessário elaborar um modelo, sendo que este pode ser considerado o passo principal da otimização. O modelo não pode ser muito simples nem muito complexo, visto que, se muito simples poderá não representar o problema real e se muito complexo, dificultará a busca pela solução. A solução corresponde àquela na qual o valor da função objetivo atinge um valor extremo, isto é, um máximo ou mínimo. Em muitos casos este valor não é encontrado de forma analítica. Assim, é necessário usar um algoritmo numérico, ou seja, procedimentos iterativos de cálculos, que a cada passo procuram melhorar a solução atual, até que o ótimo seja encontrado ou que algum critério seja satisfeito. A construção de bons algoritmos, que resolvam problemas de otimização independentemente da dimensão e dos parâmetros envolvidos também representa um passo importante no processo.

Existem diversos métodos de otimização que dependem de alguns fatores, como a natureza da função objetivo (linear, não linear, convexa, contínua, multimodal), o número de variáveis de projeto (grande ou pequeno), a suavidade das funções objetivo e restrições (diferenciável ou não diferenciável), a presença ou não de limitações (restrito ou irrestrito), a quantidade de funções objetivo (mono-objetivo ou multiobjetivo).

Apesar desta diversidade, os métodos de otimização podem ser classificados em dois grandes grupos, os métodos baseados no cálculo (*Deterministic Optimization*) e os métodos naturais (*Random Strategies*). Pertencentes ao último grupo pode-se mencionar: os métodos evolutivos (por exemplo, Algoritmos Genéticos e Evolução Diferencial), Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*), Busca Tabu, etc.

Na dissertação de Brandão (2010) são estudados alguns métodos clássicos de busca linear para otimização irrestrita. Dentre os métodos estudados, alguns minimizam uma função de várias variáveis sem o uso de derivadas (Coordenadas Cíclicas, Hooke e Jeeves com busca linear e com passos discretos e Rosenbrock). Outros necessitam, para o cálculo da direção de busca, das derivadas da função objetivo (Descida Máxima, Newton, Davidon-Fletcher-Powell, Broyden-Flotcher-Goldfarb-Shanno e Gradientes Conjugados).

As técnicas de otimização aparecem com frequência em diversas áreas do conhecimento e as pesquisas desenvolvidas são diversificadas. A seguir serão citados alguns trabalhos nesta área.

Um trabalho interessante na área da agronomia é o de Lima (2009). Na sua tese é feita uma investigação e uso de técnicas de otimização para o processo de coleta do palhicho da cana-de-açúcar, minimizando o custo de recolhimento deste material e maximizando o balanço de energia envolvido no processo. Para isto, é proposto um modelo de otimização multiobjetivo visando escolher as variedades de cana-de-açúcar a serem plantadas de forma a minimizar o custo de combustível e maximizar o balanço de energia do processo de recolhimento do palhicho do campo e sua transferência para o centro de processamento para fins energéticos.

Outro trabalho interessante aplicado na engenharia civil é o de Rosal (2007). Na sua dissertação é proposto a construção de um modelo de otimização para as redes hidráulicas de

pequeno e grande porte. O modelo é composto por uma função objetivo e um conjunto de restrições. A função principal do modelo é otimizar os diâmetros da rede em estudo, sujeitos a restrições que possibilitem que a demanda necessária chegue aos pontos solicitados atendendo aos requisitos de pressão mínima, entre outros.

É por exemplos como estes que a otimização tem despertado o interesse de muitos estudiosos. Muitos dos quais procuram aperfeiçoar as técnicas já existentes ou até mesmo elaborar novos métodos com boas propriedades de convergência. Em Zhou *et al.* (2011) são apresentados três novos métodos híbridos do tipo Gradiente Conjugado não linear, os quais geram direções de busca suficientes em cada iteração. Esta propriedade é independente de qualquer busca linear ou da convexidade da função objetivo utilizada. Em condições adequadas, é provado que os métodos propostos convergem globalmente para funções não convexas. Os resultados numéricos mostram que estes três novos métodos híbridos são eficientes para problemas específicos.

Huang *et al.* (2011) provam a convergência global do pouco conhecido método de Perry-Shanno Quase-Newton (PSMQN) com uma nova busca linear inexata quando aplicado a problemas de otimização irrestrita não convexa. Os resultados numéricos mostram que o PSMQN com as condições particulares de busca linear são muito promissores.

O avanço das pesquisas não se limita apenas aos métodos irrestritos. Existe grande interesse pelos métodos restritos, uma vez que os problemas práticos contém uma ou várias restrições. Pedroso (2009) na sua tese propõe um algoritmo Lagrangeano Aumentado sem derivadas para o problema geral de otimização. Em seu trabalho utiliza o método introduzido por Andreani, Birgin, Martínez e Schuverdt (Schuverdt, 2006), eliminando os cálculos de derivadas inerentes ao algoritmo através de modificações adequadas no critério de parada. Verifica-se que os bons resultados teóricos do método, como convergência sob a condição de qualificação CPLD (Condição de Dependência Linear Positiva Constante) e a limitação do parâmetro de penalidade, são preservados.

Na tese de Ribeiro (2005) é discutida uma classe de métodos para programação não linear. Tais métodos, conhecidos como *métodos de filtro* foram introduzidos por Fletcher e Leyffer com o objetivo de evitar o uso de funções de mérito, uma ferramenta comum na maioria dos algoritmos para otimização com restrições. São apresentados o algoritmo geral de filtro e uma forma de calcular o passo usando a Programação Quadrática Sequencial. Também são discutidos aspectos de convergência local, como o uso da correção de segunda ordem para evitar o *efeito Maratos*, um sério problema que pode comprometer a eficiência do algoritmo.

Existem vários outros trabalhos interessantes em otimização e a importância desta área é avaliada por revistas importantes, como SIAM Journal on Optimization (SIOPT), Journal of Global Optimization, Structural and Multidisciplinary Optimization, Mathematical Programming Society, Optimization dentre outras.

Neste estudo são abordados vários aspectos inerentes à teoria da otimização restrita; contudo, mais informações podem ser encontradas em Bazarra *et al.* (1979), Bertsekas (1982), Bertsekas (1999), Izmailov e Solodov (2007), Fletcher (1987).

O objetivo deste trabalho é estudar alguns métodos clássicos de otimização restrita não linear e analisar mediante dois problemas, um teórico e outro prático, a eficiência dos mesmos. Vale ressaltar que este trabalho foi baseado em Nocedal e Wright (2000).

Esta dissertação está dividida em oito capítulos estruturados da seguinte maneira:

Capítulo 1: Revisão de alguns métodos determinísticos de otimização irrestrita, que necessitam, para o cálculo da direção de busca, das derivadas da função objetivo, à saber, Método da Descida Máxima, Método de Newton, Método dos Gradientes Conjugados e Métodos Quase-Newton: Método DFP (Davidon-Fletcher-Powell) e Método BFGS (Broyden-Flotcher-Goldfarb-Shanno). Por fim, para ilustrar o comportamento dos métodos é feita uma simulação numérica com a função de Rosenbrock bidimensional.

Capítulo 2: São relatados alguns conceitos fundamentais da otimização restrita. Sendo apresentados, formulação geral do problema, definições importantes, exemplos numéricos de problemas com restrições de igualdade e desigualdade, assim como as condições de otimalidade de primeira e segunda ordem.

Nos próximos capítulos, são estudados alguns métodos clássicos de otimização restrita, seus algoritmos e propriedades de convergência. Os resultados obtidos são expostos em tabelas e gráficos.

Capítulo 3: Estudo dos métodos baseados em Programação Quadrática: Método Complementar de Schur, Método do Espaço Nulo e Método do Conjunto Ativo para QP convexa. A atenção é voltada ao último método, uma vez que, trata-se de uma técnica geral utilizada para solucionar problemas com restrições de igualdade e desigualdade. Mostra-se que, condicionado a certas propriedades, o ponto ótimo x^* será uma solução global (ou única solução global) para o problema geral de Programação Quadrática.

Capítulo 4: São considerados dois Métodos de Penalidade: Método de Penalidade Quadrática e Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 . Para cada uma destas técnicas é apresentado um algoritmo computacional.

Capítulo 5: Estudo do Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado, destacando-se as propriedades da função Lagrangeana Aumentada. Mostra-se que se o multiplicador de Lagrange λ^k está suficientemente próximo do multiplicador ótimo λ^* ou se o fator de penalidade μ_k é suficientemente grande então x^k e λ^{k+1} estarão suficientemente próximos de x^* e λ^* . Assim o método fornece duas maneiras de melhorar a aproximação x^k .

Capítulo 6: Estudo do Método de Programação Quadrática Sequencial, sendo apresentadas a formulação do subproblema quadrático, uma técnica de aproximação para a Hessiana da função Lagrangeana e para tornar o método globalmente convergente, o mesmo é inserido na estratégia de busca linear.

Capítulo 7: Aplicação dos métodos de otimização restrita na resolução de um problema prático.

Capítulo 8: São feitas comparações entre os métodos estudados e apresentadas algumas conclusões relacionadas a este trabalho.

Fabiana Rodrigues de Oliveira
Uberlândia-MG, 24 de fevereiro de 2012.

Capítulo 1

Revisão: Otimização Irrestrita

Normalmente em um problema de otimização pode-se ter a presença de uma ou várias restrições. No entanto, muitos dos métodos de otimização restrita transformam um problema complexo em um problema irrestrito, de solução mais fácil. Assim, neste capítulo será feita uma breve abordagem das principais ideias da otimização irrestrita e alguns métodos que posteriormente são aplicados na resolução de um problema teórico.

Para um estudo mais detalhado desta teoria pode-se consultar Brandão (2010).

1.1 Formulação matemática e resultados importantes

Uma formulação matemática geral para um problema de otimização pode ser escrita como:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in I \\ c_i(x) \geq 0, & i \in D \end{cases}, \quad (1.1)$$

onde,

- f é a função objetivo e c_i são funções de restrição. Estas funções são suaves (diferenciáveis) e assumem valores reais;
- I e D são dois conjuntos de índices das restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente;
- x representa os parâmetros do projeto.

Quando $I = D = \emptyset$, diz-se que o problema de otimização é *irrestrito*, isto é, independe de restrições. Se ou $I \neq \emptyset$ ou $D \neq \emptyset$, o problema de otimização é dito *restrito*, são aqueles onde são incluídas restrições explícitas sobre as variáveis. Estas restrições podem ser lineares, laterais, não lineares, ou então combinação destas.

Considere um problema de otimização que independe de restrições:

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (1.2)$$

Em geral, antes de resolver o problema (1.2) não sabemos sequer se o ponto de mínimo existe. O Teorema de Weierstrass, enunciado a seguir garante a existência de um mínimo global quando certas condições são satisfeitas.

Teorema 1.1 (Teorema de Weierstrass para existência de mínimos) *Se $f : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua em um conjunto não vazio $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$ que é fechado e limitado, então $f(x)$ tem um mínimo global em \mathcal{S} .*

Para a demonstração desse teorema veja Izmailov e Solodov (2007) (volume 1).

Observação 1.1 Note que, quando as condições do Teorema 1.1 são satisfeitas, a existência de um mínimo global é garantida. No entanto é importante mencionar que, quando elas não são satisfeitas, um mínimo global ainda pode existir. O teorema não exclui essa possibilidade. A diferença é que não podemos garantir a sua existência. Note também que, o teorema não fornece um método para encontrar um mínimo global, mesmo quando suas condições são satisfeitas, é apenas um teorema de existência.

Assim o ponto ótimo do problema (1.2), se existir, será o ponto no qual o valor de f é o menor possível, ou seja, um mínimo global.

Definição 1.1 Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é mínimo global se $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$ ou pelo menos no domínio de interesse.

O mínimo global pode ser difícil de ser encontrado, pois normalmente tem-se apenas o conhecimento local de $f(x)$. A maioria dos algoritmos são capazes de encontrar mínimos locais, isto é, pontos de menor valor de f em relação a uma vizinhança. Formalizando tem-se:

Definição 1.2 Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é mínimo local (ou mínimo local fraco) se existe uma vizinhança \mathcal{V} de x^* tal que $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in \mathcal{V}$.

Já o mínimo local estrito é definido como:

Definição 1.3 Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é mínimo local estrito (ou mínimo local forte) se existe uma vizinhança \mathcal{V} de x^* tal que $f(x^*) < f(x)$ para todo $x \in \mathcal{V}$, com $x \neq x^*$.

Nas definições acima, uma vizinhança \mathcal{V} de x^* é simplesmente um conjunto aberto que contém x^* .

Como pode ser visto na Figura 1.1 dentre todos os mínimos, o mínimo global é o menor valor assumido pela função.

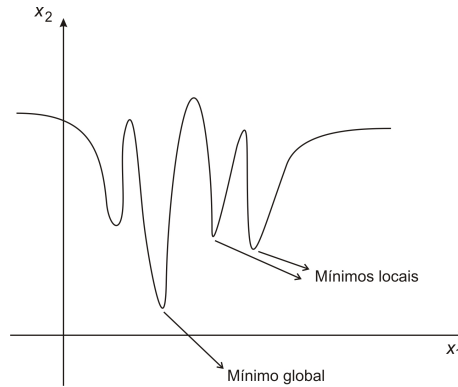


Figura 1.1: Representação de mínimos locais e global

Definição 1.4 Uma matriz C é positiva definida se $p^T C p > 0$, para qualquer $p \in \mathbb{R}^n$ e $p \neq 0$. É positiva semidefinida se $p^T C p \geq 0$, para qualquer $p \in \mathbb{R}^n$.

Outro conceito muito importante em otimização é a convexidade. Os problemas que apresentam esta propriedade são mais fáceis de serem solucionados.

Definição 1.5 Um conjunto $U \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo se o segmento de reta unindo dois pontos de U estiver inteiramente contido em U . Ou seja, para quaisquer dois pontos $x \in U$ e $y \in U$, tem-se que

$$ax + (1 - a)y \in U \text{ para todo } a \in [0, 1]. \quad (1.3)$$

Definição 1.6 Se $U \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo, diz-se que a função $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em U se para quaisquer dois pontos x e $y \in U$ a seguinte condição é satisfeita

$$f(ax + (1 - a)y) \leq af(x) + (1 - a)f(y), \text{ para todo } a \in [0, 1]. \quad (1.4)$$

Definição 1.7 Uma direção $p^k \in \mathbb{R}^n$ é uma direção de descida da função f em x , se existe $\varepsilon > 0$, tal que

$$f(x + tp^k) < f(x), \text{ para qualquer } t \in (0, \varepsilon]. \quad (1.5)$$

As condições necessárias de otimalidade (*optimality conditions*) são obtidas assumindo que x^* é mínimo local e que são conhecidos o gradiente da função $\nabla f(x^*)$ e sua matriz Hessiana $\nabla^2 f(x^*)$. As condições suficientes, se satisfeitas por um ponto x^* , garantem que este ponto é um mínimo local de f .

Teorema 1.2 (Condição necessária de 1ª ordem) Se x^* é um mínimo local e f é continuamente diferenciável em uma vizinhança aberta de x^* , então $\nabla f(x^*) = 0$.

Um ponto x^* é dito *estacionário* de f se $\nabla f(x^*) = 0$. Assim, pelo Teorema 1.2, todo mínimo local é um ponto estacionário.

Teorema 1.3 (Condição necessária de 2ª ordem) Se x^* é um mínimo local de f e $\nabla^2 f(x^*)$ existe e é contínua em uma vizinhança aberta de x^* , então $\nabla f(x^*) = 0$ e $\nabla^2 f(x^*)$ é positiva semidefinida.

Teorema 1.4 (Condição suficiente de 2ª ordem) Suponha que $\nabla^2 f(x^*)$ é contínua em uma vizinhança aberta de x^* e que $\nabla f(x^*) = 0$ e $\nabla^2 f(x^*)$ é positiva definida. Então x^* é um mínimo local estrito de f .

Estes teoremas, baseados em cálculo elementar são a base para os algoritmos de otimização irrestrita e suas demonstrações podem ser encontradas facilmente na literatura especializada, sugerimos ver Brandão (2010).

Um resultado muito utilizado no estudo dos métodos determinísticos de otimização é a aproximação de funções continuamente diferenciáveis por série de Taylor.

Teorema 1.5 (Teorema de Taylor) Suponha que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é continuamente diferenciável e que $p \in \mathbb{R}^n$. Sejam $\nabla f(x)$ e $\nabla^2 f(x)$ o gradiente e a matriz Hessiana desta função, respectivamente. Então

$$f(x + p) = f(x) + \nabla f(x + tp)^T p, \quad (1.6)$$

para algum $t \in (0, 1)$. Mais ainda, se f é duas vezes diferenciável tem-se que

$$\nabla f(x + p) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x + tp) p \, dt, \quad (1.7)$$

e

$$f(x + p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x + tp) p, \quad (1.8)$$

para algum $t \in (0, 1)$.

A demonstração deste teorema (que é a junção do Teorema do Valor Médio com uma variação do Teorema Fundamental do Cálculo) pode ser encontrada em vários textos da literatura, por exemplo, Lima (2006).

A seguir são apresentadas as ideias principais de alguns métodos determinísticos de otimização irrestrita, os quais dependem da direção de busca. Todos os algoritmos necessitam de um ponto inicial x^0 , fornecido pelo usuário e a partir desse ponto é gerada uma sequência de aproximações $\{x^k\}_{k=0}^{\infty}$ que converge para o ponto ótimo. O processo termina quando o algoritmo não consegue prosseguir ou quando a aproximação $\{x^k\}$ satisfaz algum critério estabelecido.

Normalmente, esses critérios são baseados em informações obtidas no ponto x^k , e talvez, alguns pontos anteriores. Por exemplo, para um escalar fixo pequeno $\tau > 0$, o método para se

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \tau. \quad (1.9)$$

Ou seja, quando o passo do método fica pequeno e acredita-se não ser possível melhorar a aproximação a uma solução ótima de maneira significativa. Outro critério de parada, que é análogo ao mencionado anteriormente, é

$$|f(x^{k+1}) - f(x^k)| \leq \tau. \quad (1.10)$$

No caso de um problema irrestrito com função objetivo f diferenciável, um critério de parada utilizado com frequência é dado por

$$\|\nabla f(x^{k+1})\| \leq \tau. \quad (1.11)$$

Apesar de não serem muito confiáveis, esses critérios de parada são típicos em métodos computacionais, uma vez que não existem alternativas melhores. Mesmo que não satisfaça nenhum dos critérios mencionados, o método deve ser parado mesmo assim, e o número máximo de iterações a ser realizado é um critério implícito que pode ser adotado. Naturalmente, nesses casos a aproximação obtida pode não ter nada a ver com a solução do problema, mas é o melhor que se pode fazer com as ferramentas disponíveis.

Em todos os métodos revisados a nova aproximação x^{k+1} é obtida a partir de x^k por:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad (1.12)$$

onde k representa o número da iteração, p^k a direção de busca e α_k um escalar positivo denominado *tamanho do passo* ou *comprimento do passo*, determinado de modo a garantir um decréscimo no valor de f .

A escolha de α_k que resulte em uma redução satisfatória de f , pode custar muito em termos de tempo. A escolha ideal é um mínimo global do problema unidimensional definido por:

$$\min f(x^k + \alpha p^k), \quad \alpha > 0. \quad (1.13)$$

Os métodos se diferem pela maneira como são calculados a direção de busca e o passo, que influenciam no sucesso do método.

Para simplificar a notação, denotemos

$$\begin{cases} f(x^k) = f_k \\ \nabla f(x^k) = \nabla f^k \\ \nabla^2 f(x^k) = \nabla^2 f^k \end{cases}. \quad (1.14)$$

Observação 1.2 Nas demonstrações de alguns resultados são utilizadas as condições de decréscimo suficiente e de curvatura, conhecidas como condições de Wolfe, dadas por:

$$f(x^k + \alpha_k p^k) \leq f(x^k) + \eta_1 \alpha_k (\nabla f^k)^T p^k \quad (1.15)$$

e

$$\nabla f(x^k + \alpha_k p^k)^T p^k \geq \eta_2 (\nabla f^k)^T p^k \quad (1.16)$$

para $0 < \eta_1 < \eta_2$, onde $\eta_1 \in (0, 1)$ e $\eta_2 \in (\eta_1, 1)$.

1.2 Método da Descida Máxima

O Método da Descida Máxima é um método de busca linear (ou seja, o algoritmo escolhe uma direção de busca p^k e partindo de x^k ao longo desta direção busca x^{k+1} , de forma a obter um decréscimo da função) e que se move ao longo da direção oposta ao gradiente

$$p^k = -\nabla f^k. \quad (1.17)$$

É um dos métodos mais antigos para minimizar uma função e foi proposto inicialmente por Cauchy. Apesar de sua simplicidade, tem desempenhado um papel importante no desenvolvimento da teoria da otimização.

Para encontrar uma direção que produz um decréscimo da função, utiliza-se o Teorema de Taylor, Equação (1.8), segundo o qual dada uma direção de busca p e um comprimento de passo α , tem-se

$$f(x^k + \alpha p) = f(x^k) + \alpha p^T \nabla f^k + \frac{1}{2} \alpha^2 p^T \nabla^2 f(x^k + tp) p, \quad t \in (0, \alpha). \quad (1.18)$$

O coeficiente de α , isto é, $p^T \nabla f^k$ representa a razão com que a função muda ao longo da direção p . Assim, a direção unitária p de decréscimo mais rápido é obtida solucionando o problema

$$\min_p p^T \nabla f^k \quad \text{sujeito a } \|p\| = 1. \quad (1.19)$$

Como $p^T \nabla f^k = \|p\| \|\nabla f^k\| \cos \theta$, onde θ é o ângulo entre p e ∇f^k , é fácil ver que a minimização ocorre para $\cos \theta = -1$ e que

$$p = -\frac{\nabla f^k}{\|\nabla f^k\|}. \quad (1.20)$$

Como pode ser visto na Figura 1.2, a direção de busca é oposta ao gradiente e ortogonal às curvas de nível da função. Estas curvas representam o conjunto dos pontos para os quais $f(x)$ assume valor constante.

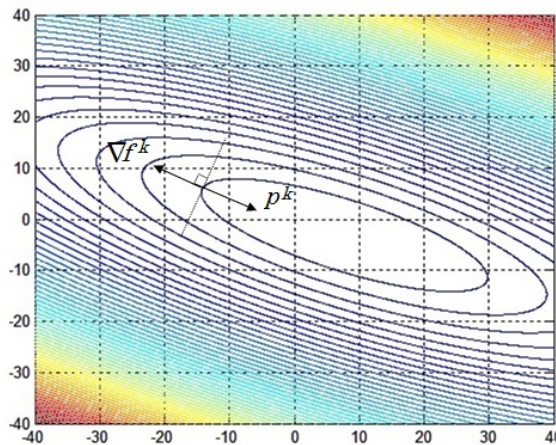


Figura 1.2: Representação da direção de descida máxima

Uma das vantagens deste método é o fato de requerer apenas o cálculo do gradiente ∇f^k , sendo de fácil aplicação. No entanto, apesar de possuir uma taxa de convergência elevada nas primeiras iterações, torna-se muito lento ao se aproximar do ponto ótimo, sendo assim pouco utilizado em problemas práticos.

1.2.1 Convergência do Método

Para obter convergência global do Método da Descida Máxima, além de uma boa escolha para o comprimento do passo α_k , deve-se também encontrar uma boa direção de busca. Um dos requisitos para a escolha dessa direção está relacionado ao ângulo θ_k entre a direção p^k e $-\nabla f^k$, definido por:

$$\cos \theta_k = -\frac{(\nabla f^k)^T p^k}{\|\nabla f^k\| \|p^k\|}. \quad (1.21)$$

O Teorema de Zoutendijk apresentado a seguir, quantifica o efeito de uma escolha apropriada do comprimento do passo α_k e mostra que o método da descida máxima é globalmente convergente. Para outros algoritmos, ele descreve o quanto p^k pode se desviar de ∇f^k e ainda gerar uma direção globalmente convergente.

Teorema 1.6 (Zoutendijk) *Considere uma aproximação da forma $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k$ onde p^k é a direção de descida e α_k satisfaz as condições de Wolfe (1.15) e (1.16). Suponha que f é limitada em \mathbb{R}^n e que f é continuamente diferenciável em um conjunto aberto V contendo o conjunto de nível $L := \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x^0)\}$, onde x^0 é o ponto inicial da iteração. Assuma também que o gradiente ∇f é Lipschitz contínuo em V , isto é, existe uma constante $L > 0$, tal que*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(\tilde{x})\| \leq L\|x - \tilde{x}\| \quad (1.22)$$

para todo $x, \tilde{x} \in V$. Então

$$\sum_{k \geq 0} \cos^2 \theta_k \|\nabla f^k\|^2 < \infty. \quad (1.23)$$

Demonstração: Da condição de curvatura de Wolfe (1.16), tem-se que:

$$(\nabla f^{k+1})^T p^k \geq \eta_2 (\nabla f^k)^T p^k, \quad (1.24)$$

subtraindo $(\nabla f^k)^T p^k$ de ambos os lados da desigualdade segue:

$$(\nabla f^{k+1} - \nabla f^k)^T p^k \geq (\eta_2 - 1) (\nabla f^k)^T p^k. \quad (1.25)$$

Da condição Lipschitz (1.22) e sabendo que $x^{k+1} - x^k = \alpha_k p^k$, tem-se

$$(\nabla f^{k+1} - \nabla f^k)^T p^k \leq \alpha_k L \|p^k\|^2. \quad (1.26)$$

Comparando (1.25) e (1.26), pode-se escrever:

$$-\alpha_k \leq \frac{(1 - \eta_2)}{L} \frac{(\nabla f^k)^T p^k}{\|p^k\|^2}. \quad (1.27)$$

Da condição de decrescimento de Wolfe (1.15), tem-se

$$f_{k+1} \leq f_k - \eta_1 (-\alpha_k) (\nabla f^k)^T p^k. \quad (1.28)$$

Substituindo (1.27) em (1.28), resulta:

$$f_{k+1} \leq f_k - \eta \frac{[(\nabla f^k)^T p^k]^2}{\|p^k\|^2} \frac{\|\nabla f^k\|^2}{\|\nabla f^k\|^2}, \quad (1.29)$$

onde $\eta = \eta_1(1 - \eta_2)/L$. Assim da Equação (1.21) a relação acima pode ser escrita como:

$$f_{k+1} \leq f_k - \eta \cos^2 \theta_k \|\nabla f^k\|^2. \quad (1.30)$$

Assumindo que esta expressão é válida para todos os índices menores ou iguais a k , segue que

$$f_{k+1} \leq f_0 - \eta \sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|\nabla f^j\|^2. \quad (1.31)$$

Como f é limitada, tem-se que $f_0 - f_{k+1}$ é menor que alguma constante positiva, para todo k . Então, considerando o limite em (1.31), obtém-se

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f^k\|^2 < \infty, \quad (1.32)$$

o que conclui a demonstração. ■

Observação 1.3 A desigualdade (1.23), conhecida como condição de Zoutendijk, implica que

$$\cos^2 \theta_k \|\nabla f^k\|^2 \rightarrow 0, \quad (1.33)$$

este limite pode ser usado para obter o resultado de convergência global dos algoritmos de busca linear. De (1.33) segue que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f^k\| = 0. \quad (1.34)$$

Isto significa que se pode garantir que a norma do gradiente converge para zero se a direção de busca nunca esteja muito próxima da ortogonalidade com o gradiente. Como no Método da Descida Máxima, a direção de busca é paralela à direção oposta ao gradiente, segue que a sequência de gradientes converge para zero, provando que a busca linear satisfaz as condições de Wolfe.

Para estudar a taxa de convergência do método, será feita uma aplicação de um caso ideal, no qual a função objetivo é uma função quadrática. Suponha que

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Sx - b^T x, \quad (1.35)$$

onde S é uma matriz simétrica positiva definida. O gradiente desta função e sua matriz Hessiana são dados por:

$$\nabla f(x) = Sx - b, \quad \nabla^2 f(x) = S \quad (1.36)$$

e o mínimo x^* é a solução única do sistema linear:

$$Sx = b. \quad (1.37)$$

Seja $r = b - Sx = -\nabla f(x)$ o resíduo. Para calcular o comprimento do passo que minimiza $f(x^k - \alpha_k \nabla f^k)$ considere, da série de Taylor de 1ª ordem, a equação

$$f(x^k + \alpha_k r^k) = f(x^k) - \alpha_k (r^k)^T r^k + \frac{1}{2} \alpha_k^2 (r^k)^T S r^k, \quad (1.38)$$

onde $x^{k+1} - x^k = \alpha_k r^k$, $\nabla f^k = -r^k$ e $\nabla^2 f^k = S$.

Diferenciando (1.38) em relação a α_k , e fazendo a derivada igual a zero, obtém-se

$$\frac{\partial f(x^k + \alpha_k r^k)}{\partial \alpha_k} = -(r^k)^T r^k + \alpha_k (r^k)^T S r^k = 0 \Rightarrow \alpha_k = \frac{(\nabla f^k)^T \nabla f^k}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k}. \quad (1.39)$$

Para quantificar a taxa de convergência considere a norma definida por $\|x\|_S^2 = x^T S x$. Utilizando o fato que $Sx^* = b$, mostra-se que

$$\frac{1}{2} \|x - x^*\|_S^2 = f(x) - f(x^*), \quad (1.40)$$

como pode ser visto em Brandão (2010).

Deseja-se, agora, obter uma expressão que descreve o decréscimo de $f(x)$. Com esta finalidade, utilizando a definição da norma acima e considerando que $x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f^k$, segue que:

$$\begin{aligned} \|x^k - x^*\|_S^2 - \|x^{k+1} - x^*\|_S^2 &= \\ &= (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) - (x^{k+1} - x^*)^T S (x^{k+1} - x^*) \\ &= (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) - (x^k - \alpha_k \nabla f^k - x^*)^T S (x^k - \alpha_k \nabla f^k - x^*) \\ &= (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) - [(x^k - x^*) - \alpha_k \nabla f^k]^T S [(x^k - x^*) - \alpha_k \nabla f^k] \\ &= (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) + [-(x^k - x^*)^T + (\alpha_k \nabla f^k)^T] S [(x^k - x^*) - \alpha_k \nabla f^k] \\ &= (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) - (x^k - x^*)^T S [(x^k - x^*) - \alpha_k \nabla f^k] + \\ &\quad + \alpha_k (\nabla f^k)^T S [(x^k - x^*) - \alpha_k \nabla f^k] \\ &= (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) - (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) + (x^k - x^*)^T S \alpha_k \nabla f^k + \\ &\quad + \alpha_k (\nabla f^k)^T S (x^k - x^*) - \alpha_k^2 (\nabla f^k)^T S \nabla f^k \\ &= (x^k - x^*)^T S \alpha_k \nabla f^k + \alpha_k (\nabla f^k)^T S (x^k - x^*) - \alpha_k^2 (\nabla f^k)^T S \nabla f^k \\ &= 2\alpha_k (\nabla f^k)^T S (x^k - x^*) - \alpha_k^2 (\nabla f^k)^T S \nabla f^k. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Pela Equação (1.36) pode-se observar que $\nabla f^k = Sx^k - b$. Mas $b = Sx^*$, assim

$$\nabla f^k = S(x^k - x^*). \quad (1.42)$$

Substituindo o comprimento do passo, dado pela Equação (1.39) e usando a Equação (1.42) tem-se

$$\begin{aligned} \|x^k - x^*\|_S^2 - \|x^{k+1} - x^*\|_S^2 &= \\ &= 2 \frac{(\nabla f^k)^T \nabla f^k}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k} (\nabla f^k)^T S (x^k - x^*) - \left(\frac{(\nabla f^k)^T \nabla f^k}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k} \right)^2 (\nabla f^k)^T S \nabla f^k \\ &= 2 \frac{(\nabla f^k)^T \nabla f^k}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k} (\nabla f^k)^T \nabla f^k - \frac{[(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k} \\ &= \frac{2 [(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2 - [(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k} \\ &= \frac{[(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k}. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Dividindo ambos os lados da igualdade acima por $\|x^k - x^*\|_S^2$, resulta:

$$\frac{\|x^k - x^*\|_S^2 - \|x^{k+1} - x^*\|_S^2}{\|x^k - x^*\|_S^2} = \frac{[(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2}{(\nabla f^k)^T S (\nabla f^k) (x^k - x^*)^T S (x^k - x^*)}. \quad (1.44)$$

Já que S é invertível,

$$S^{-1} \nabla f^k = S^{-1} S (x^k - x^*) \Rightarrow S^{-1} \nabla f^k = (x^k - x^*). \quad (1.45)$$

Mais ainda,

$$(x^k - x^*)^T S (x^k - x^*) = (\nabla f^k)^T S^{-1} \nabla f^k. \quad (1.46)$$

Substituindo (1.46) em (1.44) segue que

$$\frac{\|x^k - x^*\|_S^2 - \|x^{k+1} - x^*\|_S^2}{\|x^k - x^*\|_S^2} = \frac{[(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k (\nabla f^k)^T S^{-1} \nabla f^k}, \quad (1.47)$$

donde,

$$\|x^k - x^*\|_S^2 - \|x^{k+1} - x^*\|_S^2 = \left(\frac{[(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k (\nabla f^k)^T S^{-1} \nabla f^k} \right) \|x^k - x^*\|_S^2. \quad (1.48)$$

Logo,

$$\|x^{k+1} - x^*\|_S^2 = \left\{ 1 - \frac{[(\nabla f^k)^T \nabla f^k]^2}{(\nabla f^k)^T S \nabla f^k (\nabla f^k)^T S^{-1} \nabla f^k} \right\} \|x^k - x^*\|_S^2. \quad (1.49)$$

Esta expressão descreve o decréscimo exato de f para cada iteração. O termo entre chaves é difícil de ser interpretado, assim para analisar a convergência pode-se usar uma relação mais simples dada por Nocedal e Wright (2000):

$$\|x^{k+1} - x^*\|_S^2 \leq \left(\frac{\vartheta_n - \vartheta_1}{\vartheta_n + \vartheta_1} \right)^2 \|x^k - x^*\|_S^2, \quad (1.50)$$

onde $0 < \vartheta_1 \leq \vartheta_2 \leq \dots \leq \vartheta_n$ são os autovalores de S .

Observação 1.4 Se todos os autovalores na desigualdade (1.50) são iguais ($\vartheta_1 = \vartheta_n$), a matriz S é múltipla da matriz identidade e a convergência é obtida na primeira iteração, visto que, $\|x^{k+1} - x^*\|_S^2 \leq 0$.

1.3 Método de Newton

A direção de busca dos Métodos de Newton é muito importante, sendo obtida da aproximação de $f(x^k + p)$ por uma série de Taylor de 2ª ordem, ou seja:

$$f(x^k + p) \approx f_k + p^T \nabla f^k + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f^k p := m_k(p). \quad (1.51)$$

Considerando que a matriz $\nabla^2 f^k$ seja positiva definida, a direção de Newton é obtida encontrando o vetor p que minimiza $m_k(p)$. Assim, fazendo com que a derivada de $m_k(p)$ seja nula tem-se:

$$0 = \frac{\partial m_k(p)}{\partial p} = \nabla f^k + \nabla^2 f^k p^k. \quad (1.52)$$

Logo, quando a diferença entre $f(x^k + p)$ e $m_k(p)$ não é muito grande, a direção de busca é dada por

$$p^k = -(\nabla^2 f^k)^{-1} \nabla f^k. \quad (1.53)$$

Diferentemente do método da Descida Máxima, o comprimento do passo α pode ser associando a 1 na direção de Newton. Assim, em muitas implementações do método de Newton para busca linear adota-se $\alpha = 1$. O valor de α é ajustado apenas nos casos em que não ocorre uma redução satisfatória de f .

Métodos que usam a direção de Newton possuem uma taxa de convergência rápida, tipicamente quadrática. Após ser encontrada a vizinhança da solução a convergência ocorre com alta precisão em poucas iterações.

O Teorema 1.7 enunciado a seguir aborda a taxa de convergência do método de Newton. A demonstração pode ser vista em Brandão (2010).

Teorema 1.7 *Suponha que a função f seja duas vezes diferenciável e que a matriz Hessiana $\nabla^2 f(x)$ seja Lipschitz contínua. Considere a aproximação $x^{k+1} = x^k + p^k$, sendo p^k dado pela Equação (1.53). Se na vizinhança da solução x^* as condições suficientes de 2ª ordem definidas no Teorema 1.3 são satisfeitas, então:*

1. *se o ponto inicial x^0 está suficientemente próximo de x^* , a sequência de iterações x^k converge para x^* ;*
2. *a razão de convergência de $\{x^k\}$ é quadrática;*
3. *a sequência de normas do gradiente $\{\|\nabla f^k\|\}$ converge quadraticamente para zero.*

Uma desvantagem do Método de Newton é que a matriz Hessiana $\nabla^2 f^k$ nem sempre é positiva definida e a direção p^k nem sempre será uma direção de descida. Além disso, a necessidade de se calcular a inversa da matriz Hessiana $\nabla^2 f(x)$ pode gerar erros e alto custo computacional.

1.4 Métodos Quase-Newton

Assim como o método da Descida Máxima os métodos Quase-Newton fazem uso apenas do gradiente da função objetivo, sendo fornecido a cada iteração. Como as segundas derivadas não são necessárias, os métodos Quase-Newton em alguns casos tornam-se mais eficientes do que o método de Newton.

A direção de busca dos métodos Quase-Newton é dada por

$$p^k = -(Q_H^k)^{-1} \nabla f^k, \quad (1.54)$$

sendo Q_H^k uma aproximação da matriz Hessiana, que é atualizada após cada passo. Esta direção de busca é considerada uma alternativa atrativa para o método de Newton, visto que Q_H^k é atualizada de maneira simples levando em consideração informações da curvatura do modelo m_k que aproxima f_k nas duas últimas iterações.

1.4.1 Os Métodos BFGS e DFP

O primeiro método Quase-Newton a utilizar a aproximação numérica para a inversa da matriz Hessiana foi DFP (Davidon - Fletcher - Powell), mas posteriormente modificado por BFGS (Broyden - Fletcher - Goldfarb - Shanno), sendo considerado o mais popular dos métodos Quase-Newton.

Para entender como foram desenvolvidos os métodos DFP e BFGS, considere inicialmente o seguinte modelo quadrático para a função objetivo no ponto x^k

$$m_k(p) = f_k + (\nabla f^k)^T p + \frac{1}{2} p^T Q_H^k p, \quad (1.55)$$

onde Q_H^k é uma matriz $n \times n$ simétrica positiva definida que deve ser atualizada a cada iteração. O minimizador p^k deste modelo quadrático dado por

$$p^k = -(Q_H^k)^{-1} \nabla f^k, \quad (1.56)$$

é usado como direção de busca. E a nova aproximação é dada por

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad (1.57)$$

onde α_k é escolhido de forma a satisfazer as condições de Wolfe.

Este processo é semelhante ao método de Newton, a principal diferença é que a aproximação Q_H^k é utilizada no lugar da verdadeira matriz Hessiana $\nabla^2 f^k$.

Supondo que fora calculada a aproximação x^{k+1} o novo modelo quadrático é definido por

$$m_{k+1}(p) = f_{k+1} + (\nabla f^{k+1})^T p + \frac{1}{2} p^T Q_H^{k+1} p. \quad (1.58)$$

Assumindo que o gradiente do novo modelo m_{k+1} coincide com gradiente da função objetivo nas duas últimas iterações x^k e x^{k+1} , ou seja, $\nabla m_{k+1} = \nabla f^{k+1}$ e $\nabla m_{k+1} = \nabla f^k$, chega-se que (Nocedal e Wright (2000))

$$Q_H^{k+1} v^k = y^k \quad (1.59)$$

sendo,

$$v^k = x^{k+1} - x^k \text{ e } y^k = \nabla f^{k+1} - \nabla f^k. \quad (1.60)$$

A Equação (1.59) é conhecida como *Equação da Secante*. Assim, dados v^k (deslocamento) e y^k (variação do gradiente), esta equação requer que y^k seja uma aplicação da matriz simétrica positiva definida Q_H^{k+1} em v^k . Mas isto acontece se v^k e y^k satisfazem a condição de curvatura

$$(v^k)^T y^k > 0, \quad (1.61)$$

o que pode ser comprovado multiplicando (1.59) por $(v^k)^T$.

Quando a condição de curvatura (1.61) é satisfeita a Equação (1.59) sempre possui solução. Para encontrar uma solução única Q_H^{k+1} , basta resolver o problema

$$\min_{Q_H} \|Q_H - Q_H^k\| \quad \text{sujeito a } Q_H = Q_H^T, \quad Q_H v^k = y^k, \quad (1.62)$$

com Q_H^k simétrica positiva definida e $(v^k)^T y^k > 0$.

Para o método DFP, a solução única do problema (1.62) é dada por:

$$Q_H^{k+1} = (\mathcal{I} - \rho_k y^k (v^k)^T) Q_H^k (\mathcal{I} - \rho_k v^k (y^k)^T) + \rho_k y^k (y^k)^T, \quad (1.63)$$

sendo

$$\rho_k = \frac{1}{(y^k)^T v^k}. \quad (1.64)$$

No método BFGS a aproximação da inversa da Hessiana G^k , deve ser simétrica positiva definida e obedecer a Equação da Secante (1.59), agora dada por

$$G^{k+1}y^k = v^k. \quad (1.65)$$

A solução mais próxima de G^k é definida de forma análoga a (1.62), ou seja

$$\min_G \|G - G^k\| \quad \text{sujeito a } G = G^T, \quad Gy^k = v^k. \quad (1.66)$$

Sendo a solução única G^{k+1} desse problema, dada por:

$$G^{k+1} = (\mathcal{I} - \rho_k v^k (y^k)^T) G^k (\mathcal{I} - \rho_k y^k (v^k)^T) + \rho_k v^k (v^k)^T, \quad (1.67)$$

com ρ_k definido pela Equação (1.64).

Uma expressão geral que resume os métodos DFP e BFGS pode ser dada como:

$$G^{k+1} = G^k + \left[\frac{(v^k)^T + \theta((y^k)^T G^k y^k)}{((v^k)^T y^k)^2} \right] v^k (v^k)^T + \frac{(\theta - 1)}{(y^k)^T G^k y^k} G^k y^k (G^k y^k)^T - \frac{\theta}{(v^k)^T y^k} [G^k y^k (v^k)^T + v^k (G^k y^k)^T],$$

sendo,

$$y^k = \nabla f^{k+1} - \nabla f^k, \quad v^k = x^{k+1} - x^k, \quad G^0 = \mathcal{I}, \quad G \cong (\nabla^2 f^k)^{-1}, \quad x^{k+1} = x^k + \alpha(-G^k \nabla f^k).$$

Para $\theta = 0$, tem-se o método DFP e para $\theta = 1$ tem-se o método BFGS.

Observação 1.5 A aproximação inicial G^0 é usualmente escolhida como sendo a matriz identidade.

Como nos métodos Quase-Newton não se utiliza a matriz Hessiana e sim uma aproximação desta, eles podem ser aplicados a uma variedade maior de problemas, principalmente, aqueles que possuem a matriz Hessiana $\nabla^2 f(x)$ mal condicionada.

1.5 Método dos Gradientes Conjugados

O método dos Gradientes Conjugados foi proposto por Hestenes e Stiefel (1952), como um método iterativo para a solução de sistemas particulares de equações lineares, da forma:

$$Ax = b, \quad (1.68)$$

sendo A uma matriz simétrica positiva definida, x o vetor procurado e b um vetor conhecido. Inicialmente era utilizado para resolver problemas quadráticos:

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x, \quad (1.69)$$

mas logo foi estendido para os casos mais gerais. É fácil ver que minimizar (1.69) é equivalente a obter a solução de (1.68), visto que

$$0 = \nabla f(x) = Ax - b. \quad (1.70)$$

Seja $r = -\nabla f(x)$ o resíduo do sistema linear e note que para uma matriz A positiva definida, o ponto de mínimo da função (1.69) corresponde ao resíduo nulo.

Considere o processo iterativo dado pela Equação (1.12), onde a direção de busca $p^k = r^k = -\nabla f^k$, e α_k é uma solução ótima do problema dado por:

$$\min f(x^k + \alpha r^k) \quad \text{sujeito a } \alpha \in \mathbb{R}. \quad (1.71)$$

Substituindo o termo $x^{k+1} = x^k + \alpha_k r^k$ na função quadrática, Equação (1.69), resulta

$$f(x^k + \alpha_k r^k) = f(x^k) - \alpha_k (r^k)^T r^k + \frac{1}{2} \alpha_k^2 (r^k)^T A r^k. \quad (1.72)$$

Para obter α_k que minimiza a função (1.72), é necessário calcular a derivada de $f(x^{k+1})$ em relação a α_k e igualar a zero, isto é

$$0 = \frac{df_{k+1}}{d\alpha_k} = -(r^k)^T r^k + \alpha_k (r^k)^T A r^k \quad (1.73)$$

$$\Rightarrow \alpha_k = \frac{(r^k)^T r^k}{(r^k)^T A r^k}. \quad (1.74)$$

Com o propósito de melhorar a taxa de convergência do processo descrito acima, considere a aproximação

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k, \quad (1.75)$$

sendo a direção de busca d^k distinta do vetor resíduo, isto é, $d^k \neq r^k = b - Ax^k$.

A ideia é encontrar, em cada iteração, um vetor direção d^k , que seja linearmente independente dos vetores anteriores (d^0, d^1, \dots, d^{k-1}) e que faça com que x^{k+1} minimize $f(x)$ no espaço gerado pelo vetor d já definido. Assim,

$$x^{k+1} = \min f(x^k + M_d \bar{w}), \quad (1.76)$$

onde M_d é a matriz cujas colunas são os vetores d^0, d^1, \dots, d^k e \bar{w} é o vetor de pesos em cada iteração.

Para obter uma expressão para o método, considere:

$$x^{k+1} = x^k + M_d \bar{w}, \quad (1.77)$$

substituindo x^{k+1} na função quadrática (1.69), encontra-se uma expressão similar à Equação (1.72), ou seja:

$$f(x^{k+1}) = f(x^k) - (r^k)^T M_d \bar{w} + \frac{1}{2} \bar{w}^T (M_d)^T A M_d \bar{w}. \quad (1.78)$$

Derivando $f(x^{k+1})$ em relação a \bar{w} e igualando a zero, obtém-se o ponto de mínimo, dado por:

$$-(r^k)^T M_d + \bar{w} (M_d)^T A M_d = 0 \quad (1.79)$$

$$\Rightarrow \bar{w} = [(M_d)^T A M_d]^{-1} (M_d)^T r^k. \quad (1.80)$$

Desta forma, a aproximação x^{k+1} para o método dos Gradientes Conjugados é dada por:

$$x^{k+1} = x^k + M_d [(M_d)^T A M_d]^{-1} (M_d)^T r^k. \quad (1.81)$$

1.5.1 Obtenção dos vetores conjugados (d^j)

Primeiro note que r^{k+1} é ortogonal aos vetores d^j (colunas da matriz M_d), de fato,

$$\begin{aligned}
 (M_d)^T r^{k+1} &= (M_d)^T (b - Ax^{k+1}) \\
 &= (M_d)^T b - (M_d)^T Ax^{k+1} \\
 &= (M_d)^T b - (M_d)^T A(x^k + M_d [(M_d)^T AM_d]^{-1} (M_d)^T r^k) \\
 &= (M_d)^T b - (M_d)^T Ax^k - (M_d)^T AM_d [(M_d)^T AM_d]^{-1} (M_d)^T r^k \\
 &= (M_d)^T (b - Ax^k) - (M_d)^T r^k \\
 &= (M_d)^T r^k - (M_d)^T r^k \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{1.82}$$

logo, r^{k+1} é ortogonal aos vetores colunas d^j que formam M_d , isto é, $(d^j)^T r^{k+1} = 0$, para $j = 1, 2, \dots, k$.

Se nas iterações anteriores, os valores de x^j , $j = 1, \dots, k$, também forem obtidos de modo a

$$\text{minimizar } f(x^{j-1} + M_d \bar{w}_{j-1}), \tag{1.83}$$

concluimos, por indução, que $(d^j)^T r^i = 0$ para $j < i$. Substituindo este termo na expressão de x^{k+1} , Equação (1.81), resulta:

$$x^{k+1} = x^k + ((d^k)^T r^k) M_d [(M_d)^T AM_d]^{-1} e^k, \tag{1.84}$$

onde e^k corresponde à k -ésima coluna da matriz identidade de ordem k , utilizada para tornar as dimensões compatíveis.

Visando simplificar e facilitar os cálculos, é possível fazer com que a matriz $(M_d)^T AM_d$ seja diagonal. Para isto, basta exigir que os vetores d^j sejam A-conjugados, ou seja

$$(d^i)^T A d^j = 0, \text{ para } i \neq j. \tag{1.85}$$

Considerando que o processo iterativo é dado por $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$, pode-se obter as direções A-conjugadas, fazendo:

- Escolha $d^0 = r^0$ (aplicando o método da Descida Máxima);
- Defina r^k como uma combinação linear das direções d^0, d^1, \dots, d^k de modo que:

$$d^k = r^k + \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{kj} d^j. \tag{1.86}$$

Multiplicando a Equação (1.86) por $(d^i)^T A$ para $i = 1, \dots, k-1$, e sabendo que as direções são A-conjugadas, tem-se:

$$\begin{aligned}
 (d^i)^T A d^k &= (d^i)^T A r^k + \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{kj} (d^i)^T A d^j = 0 \\
 (d^i)^T A r^k + \beta_{ki} (d^i)^T A d^i &= 0,
 \end{aligned}$$

assim,

$$\beta_{ki} = \frac{-(d^i)^T A r^k}{(d^i)^T A d^i}. \tag{1.87}$$

Agora, observe que:

$$\begin{aligned}
 (r^k)^T r^{i+1} &= (r^k)^T (r^i - \alpha_i \text{Ad}^i) \\
 &= (r^k)^T r^i - \alpha_i (r^k)^T \text{Ad}^i \\
 \Rightarrow (r^k)^T \text{Ad}^i &= \frac{(r^k)^T r^i - (r^k)^T r^{i+1}}{\alpha_i}.
 \end{aligned} \tag{1.88}$$

Como $(r^i)^T r^j$ são ortogonais segue que, $(r^i)^T r^j = 0$, para $i \neq j$ e de (1.88) resulta

$$(r^k)^T \text{Ad}^i = 0. \tag{1.89}$$

Substituindo (1.89) em (1.87), segue que, $\beta_{ki} = 0$ para $i = 1, 2, \dots, k-2$, ou seja, apenas $\beta_{k,k-1} \neq 0$. Assim, da Equação (1.86) resulta

$$d^k = r^k + \beta_{k,k-1} d^{k-1}, \tag{1.90}$$

fazendo $\beta_{k,k-1} = \beta_k$ segue que,

$$d^k = r^k + \beta_k d^{k-1}. \tag{1.91}$$

Da Equação (1.87) e sabendo que $(r^k)^T \text{Ad}^{k-1} = -(r^k)^T r^k / \alpha_{k-1}$, obtém-se

$$\beta_k = \left(\frac{(r^k)^T r^k}{\alpha_{k-1}} \right) \frac{1}{(d^{k-1})^T \text{Ad}^{k-1}}, \tag{1.92}$$

mas, da Equação (1.74) vem que

$$\alpha_{k-1} = \frac{(d^{k-1})^T r^{k-1}}{(d^{k-1})^T \text{Ad}^{k-1}}. \tag{1.93}$$

Assim, substituindo (1.93) em (1.92) e sabendo que $(d^{k-1})^T r^{k-1} = (r^{k-1})^T r^{k-1}$, resulta

$$\beta_k = \frac{\|r^k\|^2}{\|r^{k-1}\|^2}. \tag{1.94}$$

1.5.2 Método do Gradiente Conjugado Não Linear (Fletcher-Reeves)

O método de Fletcher-Reeves é um caso particular dos gradientes conjugados e pode ser utilizado para minimizar funções convexas ou mesmo problemas não lineares. Com esta finalidade são necessárias algumas mudanças simples, em relação às ideias apresentadas acima.

Primeiro deve-se realizar uma busca unidimensional para obter o ponto α_k que minimiza a função objetivo ao longo da direção d^k . Assim, a aproximação x^{k+1} é dada por

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k, \tag{1.95}$$

sendo $\alpha_k = \min f(x^k + \alpha d^k)$ para $\alpha \in \mathbb{R}$. O resíduo r^k deve ser substituído pelo gradiente da função objetivo e a Equação (1.91) será reescrita como:

$$d^k = -\nabla f(x^k) + \beta_k d^{k-1}. \tag{1.96}$$

O escalar β_k garante que as direções d^k e d^{k-1} são conjugadas. No método de Fletcher-Reeves este valor é obtido por uma simples adaptação da Equação (1.94), isto é

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\|\nabla f(x^{k-1})\|}. \tag{1.97}$$

Observação 1.6 Existem outros métodos particulares de gradientes conjugados que se diferenciam pela escolha de β_k . Dentre eles, pode-se citar, o método de Hestenes e Stiefel usado quando f é não linear ou quadrática e o método de Polak e Ribiere utilizado quando são realizadas buscas lineares exatas. Os valores de β_k para os métodos são dados respectivamente por:

$$\beta_k^{HS} = \frac{\alpha_k \nabla f(x^{k+1})^T l^k}{(p^k)^T l^k} \quad \beta_k^{PR} = \frac{\nabla f(x^{k+1})^T l^k}{\|\nabla f(x^k)\|^2}, \quad (1.98)$$

sendo

$$p^k = x^{k+1} - x^k; \quad l^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k). \quad (1.99)$$

1.6 Simulações Numéricas

Para compreender melhor os métodos revisados, será feita uma aplicação. Considere a função conhecida como função Rosenbrock de dimensão 2, dada por:

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2. \quad (1.100)$$

Observe que, a solução ótima deste problema é $x^* = [1 \ 1]^T$ com valor ótimo $f(x^*) = 0$. A Figura 1.3 mostra seu gráfico, suas curvas de nível e a solução ótima.

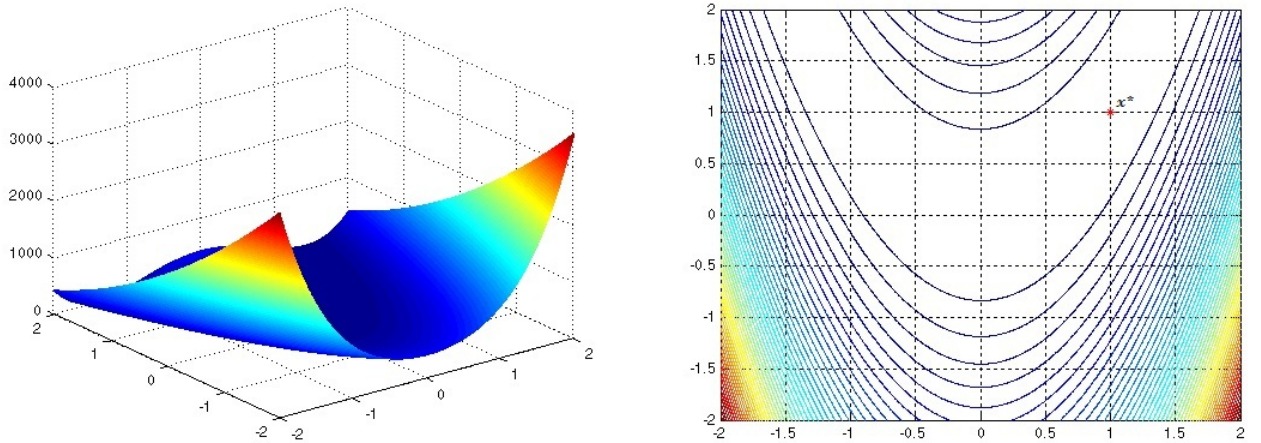


Figura 1.3: Gráfico e curvas de nível da função $f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$

Os cálculos para cada método foram desenvolvidos através de códigos computacionais implementados em Matlab[®]. A busca unidimensional foi realizada usando o Toolbox *fminunc* do Matlab[®]. Em todos os algoritmos será adotado $x^0 = [-0,5 \ 1,5]^T$ como ponto inicial e $\|\nabla f(x^k)\| < 0,001$ como critério de parada.

Os problemas utilizados em todas as simulações numéricas são muito simples sendo o tempo de execução de ordem milissegundos, portanto este não é um fator importante para a comparação dos diferentes métodos. Assim, não será computada na apresentação dos resultados.

Método da Descida Máxima

Considerando o problema definido por (1.100), deseja-se minimizar a função f utilizando o Método da Descida Máxima. A direção de descida para esta função é dada por:

$$p^k = -\nabla f(x) = \begin{bmatrix} 400x_1x_2 - 400x_1^3 - 2x_1 + 2 \\ -200x_2 + 200x_1^2 \end{bmatrix}. \quad (1.101)$$

A Tabela 1.1, apresenta os cálculos para minimizar o problema. Observe que o processo foi interrompido na 477ª iteração, visto que, $\|\nabla f(x^{477})\| = 0,0007 < 0,001$. Assim, o ponto $x^{477} = [0,9993 \ 0,9995]^T$ é escolhido como uma boa aproximação para x^* . O grande número de iterações mostra que, para este problema, o algoritmo se tornou muito lento. Esta é uma característica própria do método, após algumas iterações ele se torna muito lento.

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	α_k	$(p^k)^T$	$\ \nabla f(x^k)\ $
0	[-0,5 1,5]	158,5	0,0020	[-247 -250]	351,4385
1	[-0,9958 0,9982]	3,9875	0,7571	[1,3417 -1,3305]	1,8896
2	[0,0200 -0,0091]	0,9694	0,5075	[1,8841 1,8952]	2,6724
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
476	[0,9990 0,9986]	$0,5089 \times 10^{-4}$	0,4998	[0,2841 -0,1412]	0,3173
477	[0,9993 0,9995]	$0,5589 \times 10^{-6}$	0,0001	[0,0030 0,0060]	0,0007

Tabela 1.1: Método da Descida Máxima aplicado à função de Rosenbrock bidimensional

Método de Newton

Agora deseja-se minimizar f usando o método de Newton. A direção de busca é dada por

$$p^k = - \begin{bmatrix} -400x_2 + 1200x_1^2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -400x_1x_2 + 400x_1^3 + 2x_1 - 2 \\ 200x_2 - 200x_1^2 \end{bmatrix}. \quad (1.102)$$

A Tabela 1.2 resume os cálculos do método. Pode-se notar que o processo foi interrompido na 16ª iteração, visto que, $\|\nabla f(x^{16})\| = 0,0009 < 0,001$ obtendo $x^{16} = [1,00001 \ 1,00002]^T$ como aproximação ótima na qual a função objetivo vale $0,6032 \times 10^{-9}$.

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	α_k	$(p^k)^T$	$\ \nabla f(x^k)\ $
1	[-0,5 1,5]	158,5	0,9999	[-0,0060 -1,2440]	351,4385
2	[-0,5060 0,2561]	2,2681	0,1228	[1,5282 -1,5467]	2,9974
3	[-0,3184 0,0663]	1,8617	1,4521	[0,1643 -0,0695]	9,9965
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
15	[1,00002 1,00004]	$0,2414 \times 10^{-8}$	0,5	$[-0,2000 \ -0,4449] \times 10^{-4}$	0,0020
16	[1,00001 1,00002]	$0,6032 \times 10^{-9}$	0,5	$[-0,0999 \ -0,2222] \times 10^{-4}$	0,0009

Tabela 1.2: Método de Newton aplicado à função de Rosenbrock bidimensional

Métodos Quase-Newton

Novamente, considerando o problema definido em (1.100), a função f será minimizada pelos métodos Quase-Newton. Primeiro será aplicado o método DFP e em seguida o método BFGS. A Tabela 1.3 resume os cálculos do método DFP no qual o processo foi interrompido na 21ª iteração, já que $\|\nabla f(x^{21})\| = 0,0006 < 0,001$. A aproximação ótima encontrada é $x^{21} = [0,99995 \ 0,99991]^T$ onde a função objetivo vale $0,2335 \times 10^{-8}$.

A Tabela 1.4 resume os cálculos do método BFGS. Agora o algoritmo foi interrompido na 24ª iteração, visto que, $\|\nabla f(x^{24})\| = 0,0009 < 0,001$. Como aproximação ótima obteve-se o ponto $x^{24} = [0,99999 \ 0,99999]^T$ onde a função objetivo vale $0,5055 \times 10^{-9}$.

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	α_k	$(p^k)^T$	$\ \nabla f(x^k)\ $
1	[-0,5 1,5]	158,5	0,0020	[-247 -250]	351,4385
2	[-0,9958 0,9982]	3,9875	0,7546	[1,3370 -1,3353]	1,8896
3	[0,0132 -0,0094]	0,9830	3,4895	[0,0101 -0,0033]	2,7182
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
20	[0,99991 0,99981]	$0,9310 \times 10^{-8}$	0,5	$[0,0912 0,1854] \times 10^{-3}$	0,0012
21	[0,99995 0,99991]	$0,2335 \times 10^{-8}$	0,5	$[0,4567 0,9290] \times 10^{-4}$	0,0006

Tabela 1.3: Método Quase-Newton (DFP) aplicado à função de Rosenbrock bidimensional

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	α_k	$(p^k)^T$	$\ \nabla f(x^k)\ $
1	[-0,5 1,5]	158,5	0,0020	[-247 -250]	351,4385
2	[-0,9958 0,9982]	3,9875	0,7546	[1,3371 -1,3353]	1,8896
3	[0,0132 -0,0094]	0,9830	3,4861	[0,0110 -0,0033]	2,7182
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
23	[0,99999 0,99997]	$0,1967 \times 10^{-8}$	0,5	$[0,1427 0,3270] \times 10^{-4}$	0,0019
24	[0,99999 0,99999]	$0,5055 \times 10^{-9}$	0,5	$[0,0553 0,1323] \times 10^{-4}$	0,0009

Tabela 1.4: Método Quase-Newton (BFGS) aplicado à função de Rosenbrock bidimensional

Método dos Gradientes Conjugados

A função f definida em (1.100) será minimizada pelo método dos Gradientes Conjugados. Um resumo computacional do método utilizando o β_k dado por Fletcher e Reeves é dado na Tabela 1.5. Em cada iteração, d^1 e d^2 são dados respectivamente por $-\nabla f(x^1)$ e $-\nabla f(x^2) + \beta_1 d^1$, sendo que $\beta_1 = \|\nabla f(x^2)\|^2 / \|\nabla f(x^1)\|^2$.

O processo foi interrompido na 33ª iteração, visto que, $\|\nabla f(x^{33})\| = 0,0002 < 0,001$. Assim, o ponto $x^{33} = [0,99996 \ 0,99992]^T$ é considerado uma boa aproximação para o ótimo.

Considerando os quesitos iterações e proximidade com relação ao ótimo para o problema (1.100), o Método de Newton se mostrou o método mais eficaz dentre as técnicas aqui revisadas. Entretanto, é bom lembrar que em outras aplicações os métodos podem ter um comportamento diverso e o Método de Newton pode não ser convergente devido ao mal condicionamento da matriz Hessiana.

Iteração k	$(x^k)^T$ $f(x^k)$	$[\nabla f(x^k)]^T$	$\ \nabla f(x^k)\ $	β_k	$(d^k)^T$	α_k	$(x^{k+1})^T$
1	$[-0,5 \quad 1,5]$ 158,5	$[247 \quad 250]$	351,4385	—	$[-247 \quad -250]$	-0,0101	$[2,0090 \quad 4,0395]$
2	$[2,0090 \quad 4,0395]$ 1,0192	$[-0,6912 \quad 0,6742]$	0,9656	$0,7550 \times 10^{-5}$	$[0,6894 \quad -0,6762]$	$0,3941 \times 10^{-3}$	$[2,0093 \quad 4,0392]$
3	$[2,0093 \quad 4,0392]$ 1,0190	$[0,4005 \quad 0,4026]$	0,5679	0,3459	$[-0,1620 \quad -0,6365]$	1,3123	$[1,7966 \quad 3,2039]$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
32	$[1,00004 \quad 1,00004]$ $0,2418 \times 10^{-6}$	$[0,0197 \quad -0,0098]$	0,0220	0,1207	$[-0,0871 \quad -0,1230]$	$0,9438 \times 10^{-3}$	$[0,99996 \quad 0,99992]$
33	$[0,99996 \quad 0,99992]$ $0,1492 \times 10^{-8}$	$[0,1682 \quad -0,1222] \times 10^{-3}$	0,0002				

Tabela 1.5: Método dos Gradientes Conjugados aplicado à função de Rosenbrock bidimensional

Capítulo 2

Fundamentos da Otimização Restrita

Uma formulação matemática para um problema de otimização na presença de restrições, é dada por:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in I \\ c_i(x) \geq 0, & i \in D \end{cases}, \quad (2.1)$$

onde f , c_i , D e I são definidos como em (1.1).

O conjunto dos pontos x que satisfazem as restrições é denominado *conjunto viável* e será denotado por

$$\Omega = \{x \mid c_i(x) = 0, i \in I; c_i(x) \geq 0, i \in D\}, \quad (2.2)$$

assim o problema (2.1) pode ser reescrito de forma compacta, como

$$\min_{x \in \Omega} f(x). \quad (2.3)$$

Para os problemas restritos as condições de otimalidade são relações entre as derivadas da função objetivo e as derivadas das funções que definem as restrições. Estas condições são de dois tipos:

- *Condições Necessárias*: são as condições que devem ser satisfeitas por qualquer solução.
- *Condições Suficientes*: são aquelas que, se satisfeitas para um certo ponto x^* , garante que x^* é de fato uma solução.

No Capítulo 1, viu-se que quando se deseja encontrar o ótimo de uma função, na verdade a busca é pelo ponto de mínimo global. Será que para os problemas restritos esta busca torna-se mais fácil? De modo geral, encontrar o mínimo global não é uma tarefa fácil, visto que, um problema pode conter vários mínimos locais e isto dificulta a convergência do algoritmo. Entretanto, segundo Nocedal e Wright (2000) quando são adicionadas restrições esta situação pode ser melhorada, visto que, o conjunto viável exclui muitos mínimos locais.

Considere, agora, as seguintes definições.

Definição 2.1 Um ponto x^* é uma solução local do problema (2.3) se $x^* \in \Omega$ e existir uma vizinhança \mathcal{V} de x^* , tal que, $f(x) \geq f(x^*)$ para $x \in \mathcal{V} \cap \Omega$.

Definição 2.2 Um ponto x^* é uma solução local estrita (ou solução local forte) se $x^* \in \Omega$ e existir uma vizinhança \mathcal{V} de x^* , tal que, $f(x) > f(x^*)$ para todo $x \in \mathcal{V} \cap \Omega$ com $x \neq x^*$.

Definição 2.3 Um ponto x^* é uma solução local isolada se $x^* \in \Omega$ e existir uma vizinhança \mathcal{V} de x^* , tal que, x^* é a única solução local em $\mathcal{V} \cap \Omega$.

2.1 Análises preliminares sobre problemas restritos

Para introduzir as noções básicas da otimização restrita são dadas algumas definições importantes e considerados três exemplos. As ideias são apresentadas de maneira informal, para que depois sejam introduzidos os conceitos de forma rigorosa.

Observação 2.1 (Suavidade das funções) *A suavidade da função objetivo e das restrições são importantes na obtenção das soluções. Esta propriedade garante que a função objetivo e todas as restrições possuam um comportamento razoavelmente previsível, o que possibilita aos algoritmos realizarem boas escolhas para as direções de busca.*

O gráfico das funções não suaves possuem “bicos ou saltos” enquanto que as suaves não possuem. Ao representar graficamente a região viável de um problema restrito, pode-se observar vários bicos. Mas, isto significa que as funções de restrição que descrevem estas regiões não são suaves? A resposta frequentemente é *não*, porque bordas não suaves podem ser descritas por um conjunto de funções suaves. Por exemplo, a Figura 2.1 representa uma região viável do \mathbb{R}^2 , descrita pelas restrições suaves:

$$x_1 + x_2 \leq 1; \quad x_1 - x_2 \leq 1; \quad -x_1 + x_2 \leq 1; \quad -x_1 - x_2 \leq 1. \quad (2.4)$$

Note que, cada uma das quatro restrições representa um lado da região viável. Esta região apresenta bicos, no entanto, todas as restrições são suaves.

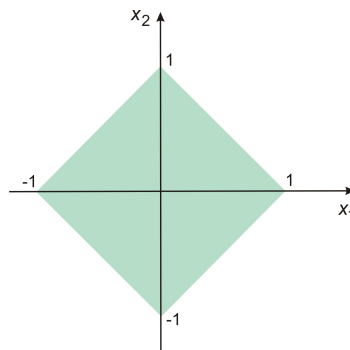


Figura 2.1: Região viável do \mathbb{R}^2 , descritas pelas inequações (2.4)

Observação 2.2 *Geralmente um problema irrestrito não suave pode ser reformulado como um problema restrito suave. Por exemplo, considere o problema:*

$$f(x) = \max(x^2, x). \quad (2.5)$$

Uma formulação restrita suave para este problema, é obtida adicionando uma variável artificial t e escrevendo

$$\min t \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} t \geq x \\ t \geq x^2 \end{cases}. \quad (2.6)$$

Definição 2.4 (Restrições Ativas) *Um conjunto ativo para um ponto viável consiste da reunião dos índices das restrições de igualdade $i \in I$ e dos índices das restrições de desigualdade $i \in D$ para o qual $c_i(x) = 0$, isto é,*

$$\mathcal{A}(x) = I \cup \{i \in D \mid c_i(x) = 0\}. \quad (2.7)$$

Em um ponto viável x , a restrição de desigualdade $i \in D$ é dita ser ativa se $c_i(x) = 0$ e inativa se a desigualdade estrita $c_i(x) > 0$ for satisfeita.

Veja agora alguns exemplos de problemas que apresentam restrições.

Exemplo 2.1 (Uma restrição de igualdade) Considere o seguinte problema

$$\min (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \quad \text{sujeito a } x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1 = 0. \quad (2.8)$$

De acordo com a formulação (2.1), tem-se que $f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$, $D = \{\emptyset\}$, $I = \{1\}$ e $c_1(x) = x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1$. A região viável para este problema é o círculo de raio 1 e centro $(0, 1)$ e a solução ótima $x^* = [1 \ 1]^T$, como pode ser visto na Figura 2.2¹. Note que, a região viável é a fronteira do círculo e não o seu interior.

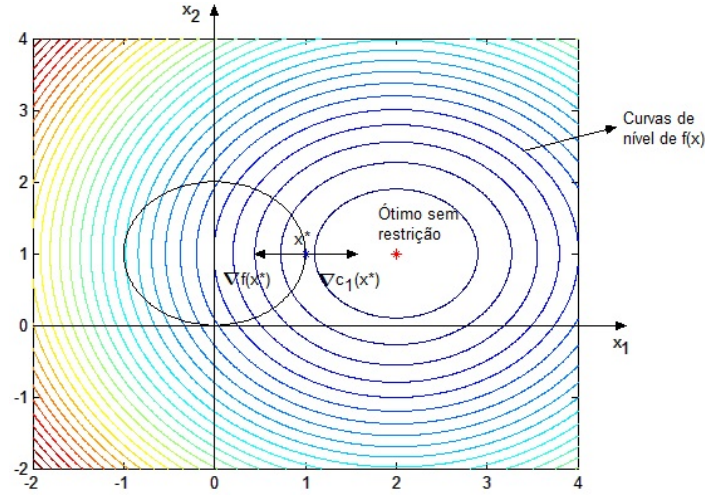


Figura 2.2: Representação da região viável do Exemplo 2.1

Por cálculos elementares ,

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 4 \\ 2x_2 - 2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \nabla c_1(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 - 2 \end{bmatrix}. \quad (2.9)$$

No ponto $x^* = [1 \ 1]^T$

$$\nabla f(x^*) = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.10)$$

Assim, existe um escalar $\lambda_1^* = -1$, tal que:

$$\nabla f(x^*) = \lambda_1^* \nabla c_1(x^*). \quad (2.11)$$

Como $\lambda_1^* \neq 0$, os vetores $\nabla f(x^*)$ e $\nabla c_1(x^*)$ são paralelos.

A Equação (2.11) pode ser obtida analisando a aproximação em série de Taylor de 1ª ordem para as funções objetivo e restrição. Para manter a viabilidade da função $c_1(x) = 0$ em torno do ponto x , impõe-se que exista um vetor \bar{u} (não nulo) tal que $c_1(x + \bar{u}) = 0$;

$$0 = c_1(x + \bar{u}) \approx c_1(x) + \nabla c_1(x)^T \bar{u} = \nabla c_1(x)^T \bar{u}. \quad (2.12)$$

Assim, o vetor \bar{u} continua viável em relação a $c_1(x)$, em uma análise de 1ª ordem, quando:

$$\nabla c_1(x)^T \bar{u} = 0. \quad (2.13)$$

¹Os vetores $\nabla f(x^*)$ e $\nabla c_1(x^*)$ tem comprimento 2, na figura só foi representada a direção de ambos vetores e não o comprimento real.

Deseja-se também que \bar{u} produza um decréscimo em f , para isto deve-se ter:

$$0 > f(x + \bar{u}) - f(x) \approx \nabla f(x)^T \bar{u}, \quad (2.14)$$

donde

$$\nabla f(x)^T \bar{u} < 0. \quad (2.15)$$

A existência de um vetor de comprimento pequeno \bar{u} que satisfaça a igualdade (2.13) e a desigualdade (2.15) sugere a existência de uma direção d (de comprimento não pequeno) com as mesmas propriedades, a saber,

$$\nabla c_1(x)^T d = 0 \text{ e } \nabla f(x)^T d < 0. \quad (2.16)$$

Se por acaso, não existir uma direção d satisfazendo (2.16), então x^* será considerado um mínimo local. A única maneira disto acontecer é quando a condição $\nabla f(x) = \lambda_1 \nabla c_1(x)$ for satisfeita para algum escalar λ_1 .

A função Lagrangeana,

$$\mathcal{L}(x, \lambda_1) = f(x) - \lambda_1 c_1(x), \quad (2.17)$$

é muito utilizada no estudo dos problemas de otimização restrita.

Observe que, $\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda_1) = \nabla f(x) - \lambda_1 \nabla c_1(x)$; assim, para que a solução ótima x^* satisfaça a Equação (2.11), deverá existir um escalar λ_1^* , tal que, $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda_1^*) = 0$. Isto significa que é possível obter a solução do problema (2.8) procurando os pontos críticos da função Lagrangeana. O escalar λ_1 é denominado *multiplicador de Lagrange* para a restrição $c_1(x) = 0$.

Exemplo 2.2 (Uma restrição de desigualdade) Considere uma simples modificação na restrição do problema (2.8), isto é,

$$\min (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \quad \text{sujeito a } 1 - x_1^2 - (x_2 - 1)^2 \geq 0. \quad (2.18)$$

A região viável é formada pela fronteira do círculo e seu interior como representado na Figura 2.3. A solução ótima ainda continua sendo $x^* = [1 \ 1]^T$ e a Equação (2.11) é válida para $\lambda_1^* = 1$.

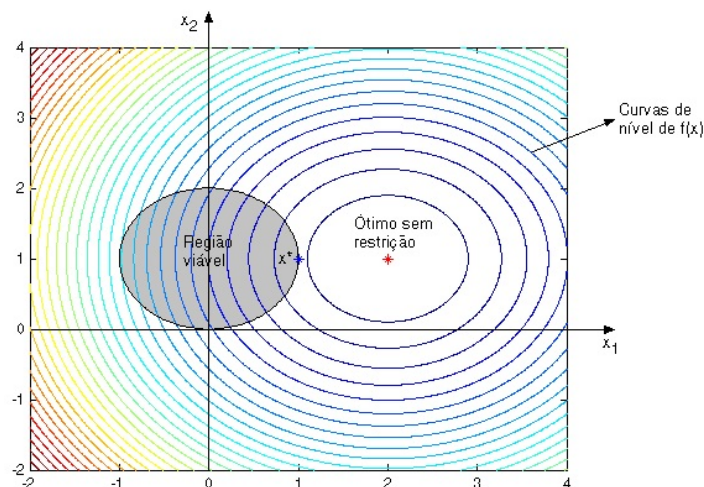


Figura 2.3: Representação da região viável do Exemplo 2.2

Como no Exemplo 2.1, dado um ponto x na região viável (não ótimo) é possível encontrar um vetor de comprimento pequeno \bar{u} , de modo que, x permaneça na região viável. Como antes, o vetor \bar{u} provocará um decréscimo em f se $\nabla f(x)^T \bar{u} < 0$. Entretanto, \bar{u} pertence a região viável se:

$$0 \leq c_1(x + \bar{u}) \approx c_1(x) + \nabla c_1(x)^T \bar{u}, \quad (2.19)$$

assim, para a análise de 1ª ordem, a viabilidade é obedecida quando:

$$c_1(x) + \nabla c_1(x)^T \bar{u} \geq 0. \quad (2.20)$$

Se existir um vetor \bar{u} que satisfaça ambas Inequações (2.15) e (2.20), tem-se dois casos a considerar, ilustrados na Figura 2.4.

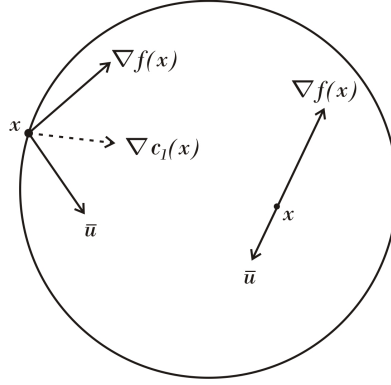


Figura 2.4: Dois pontos viáveis onde a restrição é ativa e inativa

Caso 1: Considere x no interior do círculo, assim $c_1(x) > 0$. Neste caso, qualquer vetor \bar{u} satisfaz (2.20), desde que, seu comprimento seja suficientemente pequeno. Na verdade, sempre que $\nabla f(x) \neq 0$, pode-se obter um vetor \bar{u} que satisfaça ambas Inequações (2.15) e (2.20), basta tomar $\bar{u} = -\alpha \nabla f(x)$, para qualquer escalar positivo α suficientemente pequeno. Entretanto, não é possível obter um vetor \bar{u} com estas características quando

$$\nabla f(x) = 0. \quad (2.21)$$

Caso 2: Considere agora o caso em que x está na fronteira do círculo, logo $c_1(x) = 0$.

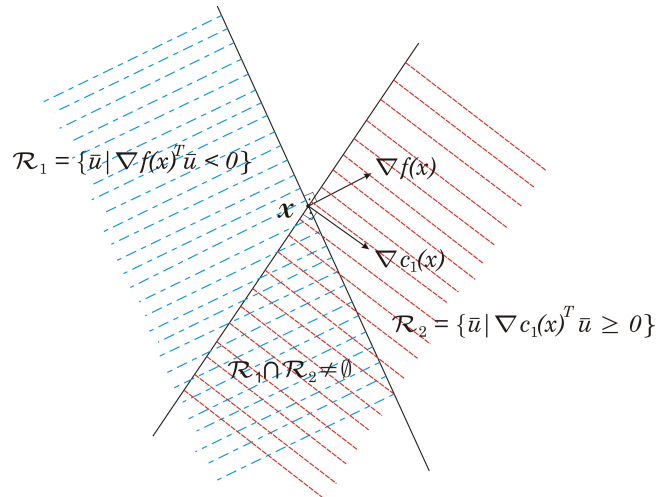


Figura 2.5: Representação das regiões \mathcal{R}_1 e \mathcal{R}_2

Das Inequações (2.15) e (2.20), obtém-se que

$$\nabla f(x)^T \bar{u} < 0 \text{ e } \nabla c_1(x)^T \bar{u} \geq 0. \quad (2.22)$$

A primeira condição descrita em (2.22) define um meio espaço aberto, enquanto a segunda condição define um meio espaço fechado, como ilustrado na Figura 2.5. Pela mesma figura é fácil verificar que a intersecção das duas regiões $\mathcal{R}_1 = \{\bar{u} \mid \nabla f(x)^T \bar{u} < 0\}$ e $\mathcal{R}_2 = \{\bar{u} \mid \nabla c_1(x)^T \bar{u} \geq 0\}$ é vazia apenas quando $\nabla f(x)$ e $\nabla c_1(x)$ possuem a mesma direção e mesmo sentido no ponto, ou seja,

$$\nabla f(x) = \lambda_1 \nabla c_1(x), \text{ para algum } \lambda_1 \geq 0. \quad (2.23)$$

Observe que o sinal do multiplicador de Lagrange desempenha um papel importante. Se a Equação (2.11) é satisfeita para um valor negativo de λ_1 , então $\nabla f(x)$ e $\nabla c_1(x)$ possuiriam sentidos opostos no ponto.

As condições necessárias de otimalidade (*optimality conditions*) para ambos os Casos 1 e 2 podem ser expressas de uma forma simplificada, usando a função Lagrangeana, Equação (2.17), de modo que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda_1^*) = 0, \text{ para algum } \lambda_1^* \geq 0 \text{ e} \quad (2.24)$$

$$\lambda_1^* c_1(x^*) = 0. \quad (2.25)$$

A Equação (2.25) é conhecida como *condição de complementaridade*, e indica que o multiplicador de Lagrange λ_1 pode ser estritamente positivo apenas quando a restrição c_1 é ativa. Condições deste tipo são fundamentais na otimização restrita. Para o Caso 1, tem-se que $c_1(x^*) > 0$, assim as condições (2.25) e (2.24) reduzem a $\lambda_1^* = 0$ e $\nabla f(x^*) = 0$, como exigido em (2.21). Para o Caso 2, λ_1^* pode assumir qualquer valor não negativo uma vez que, $c_1(x^*) = 0$, portanto (2.24) torna-se equivalente a (2.23).

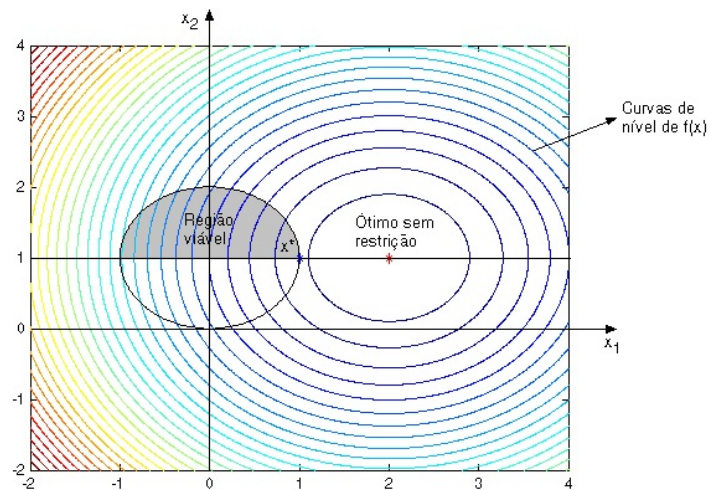


Figura 2.6: Representação da região viável do Exemplo 2.3

Exemplo 2.3 (Duas restrições de desigualdade) Considere agora o problema

$$\min (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} 1 - x_1^2 - (x_2 - 1)^2 \geq 0 \\ x_2 - 1 \geq 0 \end{cases}. \quad (2.26)$$

A região viável é metade do disco, como pode ser visto na Figura 2.6. É fácil ver que a solução é $x^* = [1 \ 1]^T$ e que neste ponto ambas restrições são ativas.

Repetindo os mesmos argumentos dos exemplos anteriores para um ponto x pertencente a região viável, a direção d deve satisfazer as seguintes condições:

$$\nabla c_i(x)^T d \geq 0, \quad i \in D = \{1, 2\} \quad \text{e} \quad \nabla f(x)^T d < 0. \quad (2.27)$$

No entanto, para $x^* = [1 \ 1]^T$ não existe uma direção d que satisfaz as condições (2.27) simultaneamente. Logo $x^* = [1 \ 1]^T$ não é uma solução ótima.

Considere agora a função Lagrangeana e sua derivada (para cada restrição adicionada é incluído um termo adicional $\lambda_i c_i$). Assim

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda_1 c_1(x) - \lambda_2 c_2(x), \quad (2.28)$$

onde $\lambda = [\lambda_1 \ \lambda_2]^T$ é o vetor dos multiplicadores de Lagrange. Generalizando a Equação (2.24) para este exemplo, tem-se que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0, \quad \text{para algum } \lambda^* \geq 0. \quad (2.29)$$

A desigualdade $\lambda^* \geq 0$ indica que todas as componentes de λ^* não são negativas. Aplicando a condição de complementaridade (2.25) para ambas restrições de desigualdade, obtém-se:

$$\lambda_1^* c_1(x^*) = 0 \quad \text{e} \quad \lambda_2^* c_2(x^*) = 0, \quad (2.30)$$

para $x^* = [1 \ 1]^T$, resulta que

$$\nabla f(x^*) = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_2(x^*) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (2.31)$$

assim,

$$\begin{aligned} \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0 &\Rightarrow \nabla f(x^*) - \lambda_1 \nabla c_1(x^*) - \lambda_2 \nabla c_2(x^*) = 0 \\ &\Rightarrow \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix} - \lambda_1 \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix} - \lambda_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Resultando no sistema,

$$\begin{cases} -2 + 2\lambda_1 = 0 \\ -\lambda_2 = 0 \end{cases}. \quad (2.33)$$

Logo, $\lambda^* = [1 \ 0]^T$. Este vetor de multiplicadores satisfaz (2.29), pois ambas as componentes são não negativas.

Para o estudo das condições de otimalidade, é necessário analisar o comportamento da função objetivo numa vizinhança de uma solução, assim como a estrutura do conjunto viável nessa vizinhança. Neste contexto, as noções de direções tangentes e direções viáveis linearizadas são muito importantes.

Definição 2.5 *O vetor d é dito ser uma direção tangente (ou vetor tangente) a Ω por um ponto x se existir uma sequência viável $\{z^k\}$ aproximando x , isto é, $\|z^k - x\| < \varepsilon$ para $\varepsilon > 0$ e uma sequência de escalares positivos $\{t_k\}$ com $t_k \rightarrow 0$, tal que*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{z^k - x}{t_k} = d. \quad (2.34)$$

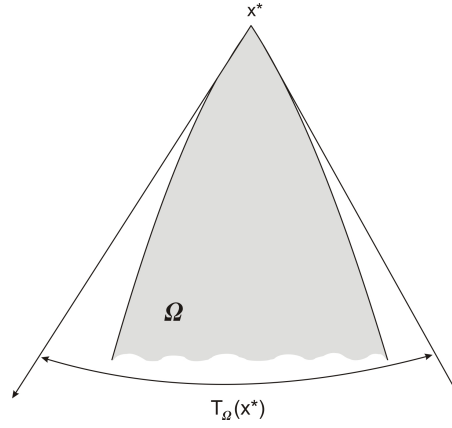


Figura 2.7: O cone tangente em relação ao conjunto Ω no ponto $x^* \in \Omega$

O conjunto de todas as direções tangentes a Ω por x^* é um cone denominado *cone tangente* e será denotado por $T_\Omega(x^*)$. Por se tratar de um cone, possui a seguinte propriedade:

$$w \in T_\Omega(x^*) \Rightarrow \tilde{\alpha}w \in T_\Omega(x^*) \text{ para algum } \tilde{\alpha} \geq 0. \quad (2.35)$$

A Figura 2.7 representa um cone tangente típico, quando o ponto x^* está na fronteira do conjunto Ω .

Definição 2.6 Dado um ponto viável x e o conjunto dos índices das restrições ativas $\mathcal{A}(x)$ da Definição 2.4, o conjunto das direções viáveis linearizadas $\mathcal{F}(x)$ é dado por

$$\mathcal{F}(x) = \left\{ d \mid \begin{array}{l} d^T \nabla c_i(x) = 0, \text{ para todo } i \in I, \\ d^T \nabla c_i(x) \geq 0, \text{ para todo } i \in \mathcal{A}(x) \cap D \end{array} \right\}. \quad (2.36)$$

Para compreender melhor esta definição, posteriormente será visto um exemplo.

2.2 Condições de otimalidade de primeira ordem

Nesta seção são abordadas as condições necessárias de otimalidade de primeira ordem e através de um exemplo será mostrado como estas condições são satisfeitas.

Antes disso, considere a função Lagrangeana (geral) definida para o problema restrito (2.1):

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i \in I \cup D} \lambda_i c_i(x). \quad (2.37)$$

As condições necessárias definidas no teorema a seguir são denominadas condições de primeira ordem porque elas são baseadas nas propriedades do gradiente da função objetivo e do gradiente das funções de restrição. Estas condições são a base para muitos algoritmos da otimização restrita.

Teorema 2.1 (Condição necessária de 1ª ordem) Suponha que x^* seja uma solução local do problema (2.1), que as funções f e c_i sejam continuamente diferenciáveis e que o conjunto dos gradientes das restrições ativas $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)\}$ em x^* seja linearmente independente. Então, existe um vetor de multiplicadores de Lagrange, com componentes λ_i^* , $i \in I \cup D$, tais

que as seguintes condições são satisfeitas em (x^*, λ^*) :

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0, \quad (2.38)$$

$$c_i(x^*) = 0, \text{ para todo } i \in I, \quad (2.39)$$

$$c_i(x^*) \geq 0, \text{ para todo } i \in D, \quad (2.40)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \text{ para todo } i \in D, \quad (2.41)$$

$$\lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \text{ para todo } i \in D \cup I. \quad (2.42)$$

As condições (2.38 a 2.42) são conhecidas como as condições de Karush-Kuhn-Tucker, ou simplesmente condições KKT. As condições (2.42), como já mencionado, são denominadas condições de complementaridade, e indicam que ou a restrição c_i é ativa ou $\lambda_i^* = 0$, ou possivelmente ambos. Em particular, os multiplicadores das *restrições de desigualdade inativas* são nulos, podendo ser omitidos da Equação (2.38) os termos para os quais $i \notin \mathcal{A}(x^*)$. Assim, esta condição pode ser reescrita como

$$0 = \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*). \quad (2.43)$$

Observação 2.3 A condição de independência linear dos gradientes das restrições ativas, imposta como hipótese do Teorema 2.1 é uma condição de qualificação. Uma **condição de qualificação** é uma propriedade sobre os pontos do conjunto viável Ω que, quando satisfeitas por um minimizador local, garante que as condições KKT são satisfeitas neste ponto.

A demonstração do Teorema 2.1 será feita posteriormente. Primeiramente são vistos alguns resultados importantes para a demonstração.

Definição 2.7 (Condição de complementaridade estrita) Dada uma solução local x^* do problema (2.1) e um vetor λ^* satisfazendo (2.38 a 2.42), diz-se que a condição de complementaridade estrita é satisfeita se, para cada $i \in D$, $\lambda_i^* = 0$ ou $c_i(x^*) = 0$, mas não ambos. Em outras palavras, tem-se que $\lambda_i^* > 0$ para cada $i \in D \cap \mathcal{A}(x^*)$.

Quando esta condição é satisfeita fica fácil para o algoritmo determinar o conjunto ativo $\mathcal{A}(x^*)$ e convergir rapidamente para a solução ótima x^* . Veja um exemplo ilustrativo para as condições KKT.

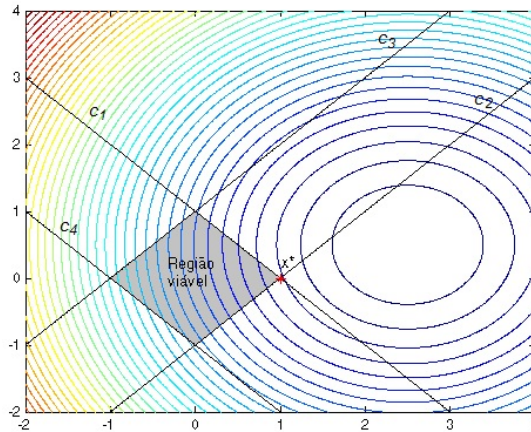


Figura 2.8: Restrições de desigualdade do Exemplo 2.4

Exemplo 2.4 Considere o problema

$$\min_x \left(x_1 - \frac{5}{2} \right)^2 + \left(x_2 - \frac{1}{2} \right)^2 \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} c_1(x) = 1 - x_1 - x_2 \geq 0 \\ c_2(x) = 1 - x_1 + x_2 \geq 0 \\ c_3(x) = 1 + x_1 - x_2 \geq 0 \\ c_4(x) = 1 + x_1 + x_2 \geq 0 \end{cases} . \quad (2.44)$$

Pela Figura 2.8, vê-se que a solução ótima é $x^* = [1 \ 0]^T$. Neste ponto as restrições c_1 e c_2 são ativas, visto que, $c_1(x^*) = c_2(x^*) = 0$ e as restrições c_3 e c_4 são inativas, já que, $c_3(x^*) = c_4(x^*) = 2$.

Tem-se que, $\nabla f(x^*) = [-3 \ -1]^T$, $\nabla c_1(x^*) = [-1 \ -1]^T$ e $\nabla c_2(x^*) = [-1 \ 1]^T$. Assim, fazendo a substituição, em (2.43), resulta:

$$\begin{bmatrix} -3 \\ -1 \end{bmatrix} - \lambda_1 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} - \lambda_2 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} . \quad (2.45)$$

Daí segue que,

$$\begin{cases} -3 + \lambda_1 + \lambda_2 = 0 \\ -1 + \lambda_1 - \lambda_2 = 0 \end{cases} . \quad (2.46)$$

Donde, $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 1$. Logo, todas as condições (2.38 a 2.42) são satisfeitas para $\lambda^* = [2 \ 1 \ 0 \ 0]^T$ e $x^* = [1 \ 0]^T$.

Nas demonstrações seguintes e em resultados posteriores, a notação $J(x^*)$ será utilizada para representar a matriz cujas linhas são os gradientes das restrições ativas no ponto ótimo, isto é,

$$J(x^*)^T = [\nabla c_i(x^*)]_{i \in \mathcal{A}(x^*)} , \quad (2.47)$$

sendo $\mathcal{A}(x^*)$ definido pela Equação (2.7).

Lema 2.1 *Se x^* é um ponto viável. As seguintes afirmações são verdadeiras.*

- (i) $T_\Omega(x^*) \subset \mathcal{F}(x^*)$,
- (ii) *Se o conjunto dos gradientes das restrições ativas $\{\nabla c_i(x), \ i \in \mathcal{A}(x)\}$ é linearmente independente em x^* , então $\mathcal{F}(x^*) = T_\Omega(x^*)$.*

Demonstração: Sem perda de generalidade, suponha que todas as restrições $c_i(\cdot)$, $i = 1, 2, \dots, m$, são ativas em x^* . Para provar (i), sejam $\{z^k\}$ e $\{t_k\}$ subsequências que satisfazem a Equação (2.34), ou seja

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{z^k - x^*}{t_k} = d. \quad (2.48)$$

Desta definição, tem-se que

$$z^k = x^* + t_k d + \mathcal{O}(t_k). \quad (2.49)$$

Sendo $\mathcal{O}(t_k)$ a ordem de aproximação. Na demonstração de muitos resultados, frequentemente é necessário indicar de forma quantitativa a qualidade da aproximação efetuada. Uma

maneira de fazer isso é indicar, para os termos desprezados na aproximação, a ordem de aproximação denotada por, $\mathcal{O}(\cdot)$.

Considerando $i \in I$ e usando o Teorema de Taylor, segue

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{t_k} c_i(z^k) \\ &= \frac{1}{t_k} [c_i(x^*) + t_k \nabla c_i(x^*)^T d + \mathcal{O}(t_k)] \\ &= \nabla c_i(x^*)^T d + \frac{\mathcal{O}(t_k)}{t_k}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Fazendo o limite com $k \rightarrow \infty$, o último termo da expressão acima desaparece, e assim, $\nabla c_i(x^*)^T d = 0$. Para as restrições de desigualdade ativas $i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D$, tem-se que

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{1}{t_k} c_i(z^k) &= \frac{1}{t_k} [c_i(x^*) + t_k \nabla c_i(x^*)^T d + \mathcal{O}(t_k)] \\ &= \nabla c_i(x^*)^T d + \frac{\mathcal{O}(t_k)}{t_k}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Usando o mesmo raciocínio visto anteriormente, tem-se que $\nabla c_i(x^*)^T d \geq 0$. Portanto, $T_\Omega(x^*) \subset \mathcal{F}(x^*)$.

De (i) tem-se que $T_\Omega(x^*) \subset \mathcal{F}(x^*)$, assim para provar (ii) basta mostrar que $\mathcal{F}(x^*) \subset T_\Omega(x^*)$. Para isto será utilizado o teorema da função implícita (ver Nocedal e Wright (2000)). Como o conjunto $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)\}$ é linearmente independente, a matriz $m \times n$ dos gradientes das restrições ativas ($J(x^*)$) tem posto m . Seja Z uma matriz, cujas colunas constituem uma base para o espaço nulo de J , isto é:

$$J(x^*)Z = 0; \quad Z \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}, \quad Z \text{ tem posto máximo.} \quad (2.52)$$

Quando $J(x^*)$ é quadrada ($n \times n$) e não singular, tem-se que $Z = \{0\}$.

Tome $d \in \mathcal{F}(x^*)$ arbitrariamente, e suponha que $\{t_k\}_{k=0}^\infty$ é uma sequência de escalares positivos, tais que, $\lim_{k \rightarrow \infty} t_k = 0$. Seja $c : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ o vetor de restrições, isto é, $c(\cdot) = (c_1(\cdot), \dots, c_m(\cdot))^T$ e defina o sistema de equações parametrizadas $R : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ por

$$R(z, t) = \begin{bmatrix} c(z) - tJ(x^*)d \\ Z^T(z - x^* - td) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.53)$$

Observe que as soluções $z = z^k$ deste sistema, para $t = t_k > 0$ suficientemente pequeno, fornecem uma sequência viável que se aproxima de x^* e satisfaz a Equação (2.34).

Fazendo $t = 0$, em (2.53) segue que

$$R(z, 0) = \begin{bmatrix} c(z) \\ Z^T(z - x^*) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.54)$$

O Jacobiano de R é dado por:

$$J[R(z, 0)] = \begin{bmatrix} \nabla c(z) \\ Z^T \end{bmatrix}. \quad (2.55)$$

Em $z = x^*$, tem-se que

$$J[R(x^*, 0)] = \begin{bmatrix} J(x^*) \\ Z^T \end{bmatrix}, \quad (2.56)$$

que é não singular pela construção de Z . Assim, de acordo com o teorema da função implícita o sistema (2.53) tem uma única solução z^k para todos os valores de t_k suficientemente pequenos. Além disso, de (2.53) e da Definição 2.6 segue que

$$i \in I \Rightarrow c_i(z^k) = t_k \nabla c_i(x^*)^T d = 0, \quad (2.57)$$

$$i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D \Rightarrow c_i(z^k) = t_k \nabla c_i(x^*)^T d \geq 0, \quad (2.58)$$

logo z^k é de fato viável.

Resta verificar se a Equação (2.34) é válida para esta escolha de $\{z^k\}$. Para isto, considere que $R(z^k, t_k) = 0$ para todo k , isto é

$$0 = R(z^k, t_k) = \begin{bmatrix} c(z^k) - t_k J(x^*)d \\ Z^T(z^k - x^* - t_k d) \end{bmatrix}. \quad (2.59)$$

Expandindo $c_i(z^k)$ em série de Taylor,

$$c_i(z^k) = c_i(x^*) + \nabla c_i(x^*)^T (z^k - x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|). \quad (2.60)$$

Assim,

$$c(z^k) = J(x^*)(z^k - x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|). \quad (2.61)$$

Substituindo (2.61) em (2.59), resulta

$$\begin{aligned} R(z^k, t_k) &= \begin{bmatrix} J(x^*)(z^k - x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|) - t_k J(x^*)d \\ Z^T(z^k - x^* - t_k d) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} J(x^*) \\ Z^T \end{bmatrix} (z^k - x^* - t_k d) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Dividindo esta expressão por t_k e usando a não singularidade dos coeficientes da matriz no primeiro termo, obtém-se

$$\frac{z^k - x^*}{t_k} = d + \mathcal{O}\left(\frac{\|z^k - x^*\|}{t_k}\right), \quad (2.63)$$

de onde segue que a Equação (2.34) é satisfeita para $x = x^*$. Portanto, $d \in T_\Omega(x^*)$ para um $d \in \mathcal{F}(x^*)$ arbitrário, o que completa a demonstração de (ii). \blacksquare

O próximo resultado mostra que se existe uma sequência viável $\{z^k\}$, tal que $f(z^k) \geq f(x^*)$, para todo k suficientemente grande, então o produto entre as direções limitadas d e o gradiente da função objetivo é não negativo.

Teorema 2.2 *Se x^* é uma solução local do problema (2.1), então*

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0 \text{ para todo } d \in T_\Omega(x^*). \quad (2.64)$$

Demonstração: Suponha por contradição que exista um d , tal que, $\nabla f(x^*)^T d < 0$. Sejam $\{z^k\}$ e $\{t_k\}$ sequências satisfazendo a Definição 2.5 para este d . Tem-se que

$$\begin{aligned} f(z^k) &= f(x^*) + (z^k - x^*)^T \nabla f(x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|) \\ &= f(x^*) + t_k d^T \nabla f(x^*) + \mathcal{O}(t_k), \end{aligned} \quad (2.65)$$

onde a segunda igualdade segue da Equação (2.49). Como $d^T \nabla f(x^*) < 0$, o termo que permanece é dominado pelo termo de primeira ordem, isto é,

$$f(z^k) - f(x^*) = \frac{1}{2} t_k d^T \nabla f(x^*) < 0. \quad (2.66)$$

Assim, $f(z^k) < f(x^*)$ para todo k suficientemente grande.

Logo, dada uma vizinhança aberta de x^* , pode-se escolher k suficientemente grande tal que z^k continua no interior desta vizinhança e reduz o valor da função objetivo f . Portanto, x^* não é uma solução local. O que contradiz a hipótese. ■

Um resultado clássico conhecido como Lema de Farkas será utilizado para demonstrar o Teorema 2.1.

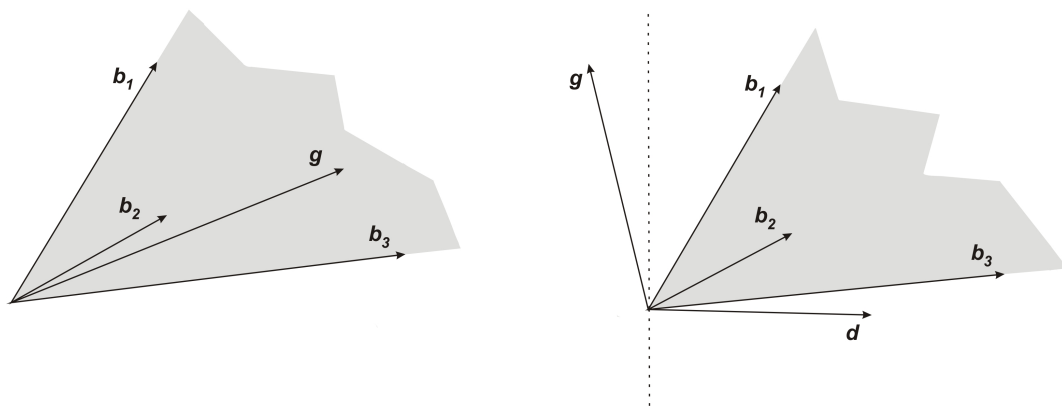


Figura 2.9: Lema de Farkas: quando $g \in K$ (esquerda) ou existe um hiperplano que o separa do cone (direita)

Lema 2.2 (Farkas) *Seja K um cone definido por $K = \{By + Cw \mid y \geq 0\}$, onde B e C são matrizes de dimensões $n \times m$ e $n \times p$, respectivamente, e y e w são vetores de dimensões apropriadas. Dado algum vetor $g \in \mathbb{R}^n$, tem-se que, ou $g \in K$ ou existe um vetor $d \in \mathbb{R}^n$ satisfazendo*

$$g^T d < 0, \quad B^T d \geq 0, \quad C^T d = 0, \quad (2.67)$$

mas não ambos.

Observação 2.4 *Os dois casos são ilustrados na Figura 2.9, para B com três colunas, C nula e $n = 2$. Note que, no segundo caso, um hiperplano, que é uma generalização de plano no \mathbb{R}^n , separa o vetor g do cone K .*

Demonstração: Primeiro demonstra-se que as duas alternativas não podem ser satisfeitas simultaneamente. Se $g \in K$, existem vetores $y \geq 0$ e w tais que $g = By + Cw$. Se também existir um vetor d satisfazendo a propriedade (2.67), tem-se:

$$0 > d^T g = d^T By + d^T Cw = (B^T d)^T y + (C^T d)^T w \geq 0, \quad (2.68)$$

onde a última desigualdade segue de $C^T d = 0$, $B^T d \geq 0$, e $y \geq 0$. Mas isto é um absurdo, portanto, ambas alternativas não podem ser satisfeitas simultaneamente.

Veja agora como construir um vetor d satisfazendo a propriedade (2.67) para o caso em que $g \notin K$. Para isto, será utilizada a propriedade de K ser um conjunto fechado. Considere \hat{s} um vetor em K mais próximo de g com relação à norma Euclidiana.

Para um vetor $x \in \mathbb{R}^n$, a norma Euclidiana é definida por:

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} = (x^T x)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.69)$$

Uma vez que K é fechado, \hat{s} está bem definido e é obtido solucionando o seguinte problema de otimização:

$$\min \|\bar{s} - g\|_2^2 \quad \text{sujeito a } \bar{s} \in K. \quad (2.70)$$

Como $\hat{s} \in K$, segue que $\alpha\hat{s} \in K$, para todo escalar $\alpha \geq 0$. Já que $\|\alpha\hat{s} - g\|_2^2$ é minimizado para $\alpha = 1$, tem-se:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{d\alpha} \|\alpha\hat{s} - g\|_2^2 \right|_{\alpha=1} &= 0 \\ (-2\hat{s}^T g + 2\alpha\hat{s}^T \hat{s})|_{\alpha=1} &= 0 \\ \hat{s}^T (\hat{s} - g) &= 0. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Agora seja \bar{s} outro vetor em K . Como K é convexo, tem-se pela propriedade minimizante de \hat{s} que

$$\|\hat{s} + \bar{\theta}(\bar{s} - \hat{s}) - g\|_2^2 \geq \|\hat{s} - g\|_2^2 \quad \text{para todo } \bar{\theta} \in [0, 1], \quad (2.72)$$

e daí,

$$\begin{aligned} \bar{\theta}^2(\bar{s} - \hat{s})^T(\bar{s} - \hat{s}) + 2\bar{\theta}(\bar{s} - \hat{s})^T(\hat{s} - g) + (\hat{s} - g)^T(\hat{s} - g) &\geq (\hat{s} - g)^T(\hat{s} - g) \\ \bar{\theta}^2\|\bar{s} - \hat{s}\|_2^2 + 2\bar{\theta}(\bar{s} - \hat{s})^T(\hat{s} - g) + \|\hat{s} - g\|_2^2 &\geq \|\hat{s} - g\|_2^2 \\ 2\bar{\theta}(\bar{s} - \hat{s})^T(\hat{s} - g) + \bar{\theta}^2\|\bar{s} - \hat{s}\|_2^2 &\geq 0. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Dividindo esta expressão por $\bar{\theta}$ e fazendo o limite com $\bar{\theta} \rightarrow 0$, tem-se que $(\bar{s} - \hat{s})^T(\hat{s} - g) \geq 0$. Da Equação (2.71),

$$\bar{s}^T(\hat{s} - g) \geq 0, \quad \text{para todo } \bar{s} \in K. \quad (2.74)$$

O vetor, $d = \hat{s} - g$ satisfaz a propriedade (2.67). De fato, note que $d \neq 0$, pois, $g \notin K$. Assim da Equação (2.71) resulta que

$$d^T g = d^T(\hat{s} - d) = (\hat{s} - g)^T \hat{s} - d^T d = -\|d\|_2^2 < 0, \quad (2.75)$$

logo, d satisfaz a primeira propriedade dada em (2.67). De (2.74), tem-se que $d^T \bar{s} \geq 0$ para todo $\bar{s} \in K$, assim

$$d^T(By + Cw) \geq 0 \quad \text{para todo } y \geq 0 \text{ e todo } w. \quad (2.76)$$

Fixando $y = 0$, tem-se $(C^T d)^T w \geq 0$ para todo w . Esta desigualdade somente será válida para todo w quando $C^T d = 0$. Fazendo $w = 0$, segue que $(B^T d)^T y \geq 0$ para todo $y \geq 0$, logo $B^T d \geq 0$. Portanto, d também satisfaz a segunda e terceira propriedade dadas em (2.67). ■

Observação 2.5 Aplicando o Lema 2.2 para o cone N definido por

$$N = \left\{ \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i \nabla c_i(x^*), \lambda_i \geq 0 \text{ para } i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D \right\}, \quad (2.77)$$

e fazendo $g = \nabla f(x^*)$, tem-se que

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i \nabla c_i(x^*) = J(x^*)^T \lambda^*, \lambda_i \geq 0 \text{ para } i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D, \quad (2.78)$$

ou existe uma direção d tal que $d^T \nabla f(x^*) < 0$, $d \in \mathcal{F}(x^*)$.

Demonstração do Teorema 2.1

Suponha que $x^* \in \mathbb{R}^n$ é um ponto viável e que o conjunto $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)\}$ é linearmente independente. O teorema diz que se x^* é uma solução local para o problema (2.1), então existe um vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ que satisfaz as condições (2.38 a 2.42).

Primeiro será mostrado que existem multiplicadores de Lagrange $\lambda_i, i \in \mathcal{A}(x^*)$, satisfazendo a Equação (2.78). No Teorema 2.2 viu-se que, $d^T \nabla f(x^*) \geq 0$ para todo $d \in T_\Omega(x^*)$. Sabendo que $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)\}$ é linearmente independente, do Lema 2.1 segue que, $T_\Omega(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$. Portanto, $d^T \nabla f(x^*) \geq 0$ para todo $d \in \mathcal{F}(x^*)$. Assim, pelo Lema 2.2, existe um vetor λ que satisfaz (2.78).

Seja λ^* definido por

$$\lambda_i^* = \begin{cases} \lambda_i, & i \in \mathcal{A}(x^*) \\ 0, & i \in D \setminus \mathcal{A}(x^*) \end{cases}. \quad (2.79)$$

O objetivo agora é mostrar que esta escolha de λ^* , e a solução local x^* , satisfazem as condições (2.38 a 2.42). De fato,

- A condição (2.38) segue diretamente de (2.78) e das Equações (2.37) e (2.79), respectivas definições da função Lagrangeana e do vetor λ^* .
- Como x^* é viável, as condições (2.39) e (2.40) são satisfeitas.
- Tem-se de (2.78) que $\lambda_i^* \geq 0$ para $i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D$, enquanto de (2.79), $\lambda_i^* = 0$ para $i \in D \setminus \mathcal{A}(x^*)$. Logo, $\lambda_i^* \geq 0$ para $i \in D$ e assim a condição (2.41) é satisfeita.
- Para $i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D$ tem-se que $c_i(x^*) = 0$, enquanto para $i \in D \setminus \mathcal{A}(x^*)$, $\lambda_i^* = 0$. Assim, $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0$ para $i \in D$ e a condição (2.42) também é satisfeita. ■

2.3 Condições de otimalidade de segunda ordem

Nesta seção são vistas as condições de otimalidade de segunda ordem. Será necessário examinar as segundas derivadas de f e c_i na expansão em série de Taylor para verificar se estas informações adicionais garantem o decréscimo da função objetivo f . As condições de segunda ordem dizem respeito à curvatura da função Lagrangeana nas direções $w \in \mathcal{F}(x^*)$ para as quais $w^T \nabla f(x^*) = 0$. Com este propósito, vamos supor que as funções f e $c_i, i \in I \cup D$, são duas vezes diferenciáveis.

Dado o vetor de multiplicadores de Lagrange λ^* satisfazendo as condições de KKT (2.38 a 2.42), o cone crítico $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ é definido como:

$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \{w \in \mathcal{F}(x^*) \mid \nabla c_i(x^*)^T w = 0, \text{ para todo } i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D \text{ com } \lambda_i^* > 0\}.$$

Equivalentemente

$$w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*) \Leftrightarrow \begin{cases} \nabla c_i(x^*)^T w = 0, & \text{para todo } i \in I, \\ \nabla c_i(x^*)^T w = 0, & \text{para todo } i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D \text{ com } \lambda_i^* > 0, \\ \nabla c_i(x^*)^T w \geq 0, & \text{para todo } i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D \text{ com } \lambda_i^* = 0. \end{cases} \quad (2.80)$$

Da definição (2.80) e como $\lambda_i^* = 0$ para todos os termos inativos $i \in D \setminus \mathcal{A}(x^*)$, segue diretamente que:

$$w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*) \Rightarrow \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T w = 0, \text{ para todo } i \in I \cup D. \quad (2.81)$$

Assim, da primeira condição KKT, Equação (2.38), e da definição da função Lagrangeana dada pela Equação (2.37), tem-se:

$$w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*) \Rightarrow w^T \nabla f(x^*) = \sum_{i \in I \cup D} \lambda_i^* w^T \nabla c_i(x^*) = 0. \quad (2.82)$$

Para compreender melhor as ideias apresentadas acima veja um exemplo.

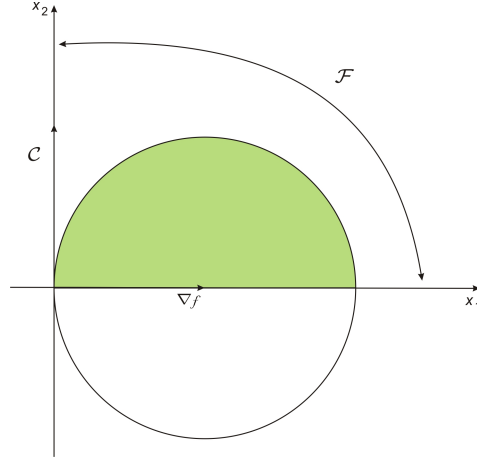


Figura 2.10: Representação do problema (2.83), mostrando $\mathcal{F}(x^*)$ e $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$

Exemplo 2.5 Considere o problema

$$\min x_1 \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} x_2 \geq 0 \\ 1 - (x_1 - 1)^2 - x_2^2 \geq 0 \end{cases}, \quad (2.83)$$

ilustrado na Figura 2.10.

A solução ótima é $x^* = [0 \ 0]^T$, sendo $\mathcal{A}(x^*) = \{1, 2\}$ o conjunto ativo. Pela Equação (2.43), tem-se que

$$\begin{aligned} 0 = \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) &= \nabla f(x^*) - \lambda_1^* \nabla c_1(x^*) - \lambda_2^* \nabla c_2(x^*) \\ \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - \lambda_1^* \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} - \lambda_2^* \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Donde segue,

$$\begin{cases} -\lambda_1^* = 0 \\ -2\lambda_2^* + 1 = 0 \end{cases}. \quad (2.85)$$

Resolvendo o sistema obtém-se que $\lambda_1^* = 0$ e $\lambda_2^* = 0, 5$.

Como os gradientes das restrições ativas em x^* são respectivamente $[0 \ 1]^T$ e $[2 \ 0]^T$, segue que o conjunto $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)\}$ é linearmente independente, logo o multiplicador ótimo é único e dado por $\lambda^* = [0 \ 0, 5]^T$. Pela Definição 2.6, $d = [d_1 \ d_2]^T \in \mathcal{F}(x^*)$ se

$$0 \leq d^T \nabla c_1(x^*) = [d_1 \ d_2] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = d_2 \Rightarrow d_2 \geq 0, \quad (2.86)$$

$$0 \leq d^T \nabla c_2(x^*) = [d_1 \ d_2] \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} = 2d_1 \Rightarrow d_1 \geq 0. \quad (2.87)$$

Portanto,

$$\mathcal{F}(x^*) = \{d \mid d \geq 0\}. \quad (2.88)$$

Agora pela definição (2.80), tem-se que $w = [w_1 \ w_2]^T \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ se:

$$0 \leq \nabla c_1(x^*)^T w = [0 \ 1] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = w_2 \Rightarrow w_2 \geq 0, \quad (2.89)$$

$$0 = \nabla c_2(x^*)^T w = [2 \ 0] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = 2w_1 \Rightarrow w_1 = 0. \quad (2.90)$$

Portanto,

$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \{[0 \ w_2]^T \mid w_2 \geq 0\}. \quad (2.91)$$

O Teorema 2.3, define uma condição necessária baseada na segunda derivada, ou seja, se x^* é uma solução local, então a matriz Hessiana da função Lagrangeana tem curvatura não negativa ao longo da direção crítica (isto é, as direções em $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$).

Teorema 2.3 (Condição necessária de 2ª ordem) *Suponha que x^* é uma solução local do problema (2.1), que o conjunto $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)\}$ é linearmente independente e que as condições KKT (2.38 a 2.42) são satisfeitas. Então*

$$w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w \geq 0, \text{ para todo } w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*). \quad (2.92)$$

Demonstração: Como x^* é uma solução local, todas as sequências viáveis $\{z^k\}$ que se aproximam de x^* devem satisfazer $f(z^k) \geq f(x^*)$ para todo k suficientemente grande. A estratégia da demonstração é construir uma sequência viável cuja direção limitada é w e mostrar que a propriedade $f(z^k) \geq f(x^*)$ implica na validade da Inequação (2.92).

Como $w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*) \subset \mathcal{F}(x^*)$ é possível escolher uma sequência de escalares positivos $\{t_k\}$ e construir uma sequência viável $\{z^k\}$ aproximando de x^* , tal que,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{z^k - x^*}{t_k} = w, \quad (2.93)$$

ou

$$z^k - x^* = t_k w + \mathcal{O}(t_k). \quad (2.94)$$

Então de (2.57) e (2.58)

$$c_i(z^k) = t_k \nabla c_i(x^*)^T w, \text{ para todo } i \in \mathcal{A}(x^*). \quad (2.95)$$

De (2.37), (2.95) e (2.81), resulta

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(z^k, \lambda^*) &= f(z^k) - \sum_{i \in D \cup I} \lambda_i^* c_i(z^k) \\ &= f(z^k) - t_k \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T w \\ &= f(z^k). \end{aligned} \quad (2.96)$$

Considere a expansão em série de Taylor para obter uma estimativa da função Lagrangeana $\mathcal{L}(z^k, \lambda^*)$ próxima de x^* . Usando o Teorema de Taylor, Equação (1.8), e da continuidade das matrizes $\nabla^2 f(x)$ e $\nabla^2 c_i(x)$, $i \in I \cup D$, obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(z^k, \lambda^*) &= \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + (z^k - x^*)^T \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \\ &\quad + \frac{1}{2} (z^k - x^*)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) (z^k - x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|^2). \end{aligned} \quad (2.97)$$

Pela condição de complementaridade (2.42), tem-se $\mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = f(x^*)$. De (2.38) o segundo termo do lado direito da Equação (2.97) é nulo. Assim, usando (2.94) pode-se reescrever (2.97) como

$$\mathcal{L}(z^k, \lambda^*) = f(x^*) + \frac{1}{2} t_k^2 w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w + \mathcal{O}(t_k^2). \quad (2.98)$$

Substituindo (2.96) em (2.98) resulta

$$f(z^k) = f(x^*) + \frac{1}{2} t_k^2 w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w + \mathcal{O}(t_k^2). \quad (2.99)$$

Se $w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w < 0$, então (2.99) implicaria que $f(z^k) < f(x^*)$ para todo k suficiente grande, contradizendo o fato de x^* ser uma solução local. Portanto, $w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w \geq 0$. ■

As condições suficientes, estudadas a seguir, são condições sobre f e c_i , $i \in I \cup D$, que garantem que x^* é uma solução local do problema (2.1). O próximo teorema é semelhante ao Teorema 2.3, eles se diferem pelo fato de que agora não é necessário ter o conjunto $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)\}$ linearmente independente, e a desigualdade (2.92) é substituída por uma desigualdade estrita.

Teorema 2.4 (Condição suficiente de 2ª ordem) *Suponha que para algum ponto viável $x^* \in \mathbb{R}^n$ existe um vetor de multiplicadores de Lagrange λ^* , tal que, as condições KKT (2.38 a 2.42) são satisfeitas. Suponha também que*

$$w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w > 0, \text{ para todo } w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*), \text{ } w \neq 0. \quad (2.100)$$

Então x^ é uma solução local estrita para o problema (2.1).*

Demonstração: Primeiro observe que $\bar{\mathcal{C}} = \{d \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*) \mid \|d\| = 1\}$ é um subconjunto compacto (fechado e limitado) de $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$, assim por (2.100) o mínimo de $d^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) d$ sobre este conjunto é um número estritamente positivo, e será denotado por σ . Como $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ é um cone, tem-se que $(w/\|w\|) \in \bar{\mathcal{C}}$ se e somente se $w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$, $w \neq 0$. Portanto, pela Inequação (2.100)

$$w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w \geq \sigma \|w\|^2 \text{ para todo } w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*), \quad (2.101)$$

para $\sigma > 0$ definido acima. (Observe que, esta desigualdade é trivialmente válida para $w = 0$).

Para mostrar o teorema será provado que cada sequência viável $\{z^k\}$ aproximando x^* satisfaz a relação $f(z^k) \geq f(x^*) + (\sigma/4)\|z^k - x^*\|^2$, para todo k suficientemente grande. Suponha por contradição que este não seja o caso, ou seja, existe uma sequência $\{z^k\}$ aproximando x^* , tal que

$$f(z^k) < f(x^*) + \frac{\sigma}{4}\|z^k - x^*\|^2, \text{ para todo } k \text{ suficientemente grande.} \quad (2.102)$$

A sequência $(z^k - x^*)/\|z^k - x^*\|$ é limitada, pois

$$\left\| \frac{z^k - x^*}{\|z^k - x^*\|} \right\| = \frac{\|z^k - x^*\|}{\|z^k - x^*\|} = 1. \quad (2.103)$$

Assim, pelo Teorema de Bolzano-Weierstrass, veja Lima (2006), existe uma subsequência de $(z^k - x^*)/\|z^k - x^*\|$ convergindo para algum d com $\|d\| = 1$. Sem perda de generalidade podemos assumir que a sequência $(z^k - x^*)/\|z^k - x^*\|$ converge para d , ou seja,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{z^k - x^*}{\|z^k - x^*\|} = d. \quad (2.104)$$

Do Lema 2.1 (i) e Definição 2.6 tem-se que $d \in \mathcal{F}(x^*)$. Da Equação (2.37) e sabendo que $\lambda_i^* \geq 0$, $c_i(z^k) \geq 0$ para $i \in D$ e $c_i(z^k) = 0$ para $i \in I$, tem-se que

$$\mathcal{L}(z^k, \lambda^*) = f(z^k) - \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* c_i(z^k) \leq f(z^k), \quad (2.105)$$

e a aproximação em série de Taylor Equação (2.98) do Teorema 2.3 continua válida.

Se d não está em $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$, existem alguns índices $j \in \mathcal{A}(x^*) \cap D$ tal que a condição positiva estrita

$$\lambda_j^* \nabla c_j(x^*)^T d > 0 \quad (2.106)$$

é satisfeita, enquanto para os índices restantes $i \in \mathcal{A}(x^*)$, tem-se

$$\lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T d \geq 0. \quad (2.107)$$

Do Teorema de Taylor e da Equação (2.104), tem-se para este valor particular de j que

$$\begin{aligned} \lambda_j^* c_j(z^k) &= \lambda_j^* c_j(x^*) + \lambda_j^* \nabla c_j(x^*)^T (z^k - x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|) \\ &= \|z^k - x^*\| \lambda_j^* \nabla c_j(x^*)^T d + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|). \end{aligned} \quad (2.108)$$

Assim, de (2.105), resulta

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(z^k, \lambda^*) &= f(z^k) - \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* c_i(z^k) \\ &\leq f(z^k) - \lambda_j^* c_j(z^k) \\ &\leq f(z^k) - \|z^k - x^*\| \lambda_j^* \nabla c_j(x^*)^T d + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|). \end{aligned} \quad (2.109)$$

Da série de Taylor estimada, Equação (2.98), tem-se entretanto que

$$\mathcal{L}(z^k, \lambda^*) = f(x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|^2), \quad (2.110)$$

combinando (2.110) e (2.109), obtém-se:

$$f(z^k) \geq f(x^*) + \|z^k - x^*\| \lambda_j^* \nabla c_j(x^*)^T d + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|). \quad (2.111)$$

Da Inequação (2.106), esta desigualdade contradiz (2.102). Logo $d \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$, e assim $d^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) d \geq \sigma$.

Combinando a Equação (2.98) com a Inequação (2.105) e usando (2.104), resulta

$$\begin{aligned} f(z^k) &\geq f(x^*) + \frac{1}{2} (z^k - x^*)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) (z^k - x^*) + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|^2) \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2} d^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) d \|z^k - x^*\|^2 + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|^2) \\ &\geq f(x^*) + \left(\frac{\sigma}{2}\right) \|z^k - x^*\|^2 + \mathcal{O}(\|z^k - x^*\|^2). \end{aligned} \quad (2.112)$$

Esta desigualdade contradiz (2.102). Portanto, cada sequência viável $\{z^k\}$ aproximando x^* deve satisfazer $f(z^k) \geq f(x^*) + (\sigma/4) \|z^k - x^*\|^2$, para k suficientemente grande, assim x^* é uma solução local estrita. ■

Exemplo 2.6 Considere o problema

$$\min (x_1 - 2)^2 + x_2^2 \quad \text{sujeito a } 1 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0. \quad (2.113)$$

A função Lagrangeana é dada por

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = (x_1 - 2)^2 + x_2^2 - \lambda_1(1 - x_1^2 - x_2^2). \quad (2.114)$$

É fácil ver que o gradiente e a matriz Hessiana da função Lagrangeana são

$$\nabla \mathcal{L}(x, \lambda) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 4 + 2\lambda_1 x_1 \\ 2x_2 + 2\lambda_1 x_2 \end{bmatrix}, \quad (2.115)$$

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) = \begin{bmatrix} 2 + 2\lambda_1 & 0 \\ 0 & 2 + 2\lambda_1 \end{bmatrix}. \quad (2.116)$$

O ponto $x^* = [1 \ 0]^T$ e o multiplicador $\lambda_1^* = 1$ satisfazem as condições KKT. Para verificar se as condições suficientes de 2ª ordem são satisfeitas neste ponto, observe que

$$\nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.117)$$

assim o conjunto $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ definido em (2.80) é

$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \{[0 \ w_2]^T \mid w_2 \in \mathbb{R}\}. \quad (2.118)$$

Substituindo x^* e λ^* em (2.116) tem-se para algum $w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$, com $w \neq 0$, que $w_2 \neq 0$ e por consequência

$$w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w = \begin{bmatrix} 0 \\ w_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ w_2 \end{bmatrix} = 4w_2^2 > 0. \quad (2.119)$$

Assim, a condição suficiente de segunda ordem é satisfeita e portanto, pelo Teorema 2.4, $x^* = [1 \ 0]^T$ é uma solução local estrita para o problema (2.113).

2.4 O problema dual

A dualidade, por sua vez, permite construir um problema alternativo a partir de um problema original. O problema “dual” está relacionado ao problema original (também conhecido como “primal”) e em alguns casos é mais fácil de ser resolvido computacionalmente do que o problema primal. Em outros casos, o problema dual pode ser usado facilmente para obter um limite inferior do valor ótimo da função objetivo do problema primal.

Para formalizar a teoria da dualidade, nesta seção será considerado um problema simplificado que não apresenta restrições de igualdade e cujas funções objetivo e restrições são funções convexas. Assim assumindo que existem m restrições de desigualdade, o problema (2.1) pode ser reescrito como

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a } c_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (2.120)$$

considerando que as restrições são dadas pelo vetor

$$c(x) \stackrel{\text{def}}{=} (c_1(x), c_2(x), \dots, c_m(x))^T, \quad (2.121)$$

o problema primal pode ser reescrito como

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a } c(x) \geq 0, \quad (2.122)$$

para o qual a função Lagrangeana é

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T c(x).$$

A função dual $\tilde{q} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é definida como

$$\tilde{q}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_x \mathcal{L}(x, \lambda). \quad (2.123)$$

Em muitos problemas este ínfimo é $-\infty$ para alguns valores de λ . O domínio de \tilde{q} é definido como o conjunto dos valores λ para os quais \tilde{q} é finito, isto é,

$$D_{\tilde{q}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\lambda \mid \tilde{q}(\lambda) > -\infty\}. \quad (2.124)$$

Note que, calcular o ínfimo em (2.123) é equivalente a encontrar o mínimo global da função $\mathcal{L}(\cdot, \lambda)$ para um dado λ , que na prática pode não ser uma tarefa fácil. Entretanto, quando $f(x)$ e $c_i(x)$ são funções convexas e $\lambda \geq 0$, a função $\mathcal{L}(\cdot, \lambda)$ também é convexa (Nocedal e Wright (2000)). Neste caso todos os mínimos locais são mínimos globais, assim o cálculo de $\tilde{q}(\lambda)$ torna-se mais prático.

Logo o problema dual para o problema (2.122) pode ser formalmente escrito como

$$\max_{\lambda \in \mathbb{R}^n} \tilde{q}(\lambda) \quad \text{sujeito a } \lambda \geq 0. \quad (2.125)$$

Nos próximos capítulos são estudados os aspectos teóricos e práticos de alguns métodos clássicos da otimização restrita.

Capítulo 3

Programação Quadrática

A Programação Quadrática (*Quadratic Programming - QP*) representa uma classe especial de programação, na qual, a função objetivo é quadrática e as restrições são lineares. Os problemas de programação quadrática são importantes, principalmente porque aparecem como subproblemas para vários métodos gerais de otimização restrita não linear como, por exemplo, os Métodos de Programação Quadrática Sequencial. Naturalmente, a eficiência dos métodos deste tipo depende da eficiência de resolução dos problemas quadráticos.

O problema geral de Programação Quadrática é expresso como:

$$\min_x q(x) = \frac{1}{2}x^T Hx + x^T h \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} a_i^T x = b_i, & i \in I \\ a_i^T x \geq b_i, & i \in D \end{cases}, \quad (3.1)$$

sendo H uma matriz simétrica de ordem $n \times n$, e $h, x, b_i, a_i, i \in I \cup D$, vetores em \mathbb{R}^n .

Problemas deste tipo podem ser resolvidos em um número finito de iterações, entretanto, o esforço necessário para encontrar uma solução depende fortemente das características da função objetivo e do número de restrições de desigualdade. Se a matriz Hessiana H é positiva semidefinida, diz-se que o problema quadrático (3.1) é *convexo*. Se H é positiva definida o problema quadrático (3.1) é *estritamente convexo*.

Neste capítulo são considerados os problemas quadráticos convexos. Antes de introduzir a teoria da QP, é apresentada uma breve exposição sobre como eliminar as variáveis de um problema com restrições lineares.

3.1 Eliminação de variáveis

Considere o problema de minimizar uma função não linear, sujeita ao conjunto de restrições de igualdade lineares, ou seja,

$$\min f(x) \quad \text{sujeito a} \quad Jx = b, \quad (3.2)$$

sendo J uma matriz de ordem $m \times n$ com $m \leq n$ (m representa o número de restrições de igualdade e n o número de variáveis). Suponha que J tenha posto máximo (se esse não for o caso, diz-se que o problema é inconsistente ou que algumas das restrições são redundantes e podem ser omitidas, sem afetar a solução do problema).

Partindo deste pressuposto, é possível encontrar um subconjunto com m colunas de J que seja linearmente independente. Reuna estas colunas na matriz \hat{B} e defina a matriz de permutação P de ordem $n \times n$, satisfazendo

$$JP = [\hat{B} \quad \hat{N}], \quad (3.3)$$

onde \hat{N} é a matriz formada pelas $n - m$ colunas restantes de J . Os subvetores $x_{\hat{B}} \in \mathbb{R}^m$ e $x_{\hat{N}} \in \mathbb{R}^{n-m}$ são definidos como

$$\begin{bmatrix} x_{\hat{B}} \\ x_{\hat{N}} \end{bmatrix} = P^T x, \quad (3.4)$$

$x_{\hat{B}}$ é denominado subvetor das *variáveis básicas* e \hat{B} a *matriz básica*. Observando que $PP^T = \mathcal{I}$, é possível reescrever a restrição $Jx = b$ de outra forma, ou seja,

$$b = Jx = JP(P^T x) = JP \begin{bmatrix} x_{\hat{B}} \\ x_{\hat{N}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{B} & \hat{N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{\hat{B}} \\ x_{\hat{N}} \end{bmatrix} = \hat{B}x_{\hat{B}} + \hat{N}x_{\hat{N}}. \quad (3.5)$$

Desta expressão, as variáveis básicas podem ser representadas por

$$x_{\hat{B}} = \hat{B}^{-1}b - \hat{B}^{-1}\hat{N}x_{\hat{N}}. \quad (3.6)$$

Portanto, o ponto viável para as restrições $Jx = b$ pode ser obtido fazendo qualquer escolha para $x_{\hat{N}}$ e definindo $x_{\hat{B}}$ de acordo com a Equação (3.6). Assim, o problema (3.2) torna-se equivalente ao problema irrestrito.

$$\min_{x_{\hat{N}}} \hat{h}(x_{\hat{N}}) \stackrel{\text{def}}{=} f \left(P \begin{bmatrix} \hat{B}^{-1}b - \hat{B}^{-1}\hat{N}x_{\hat{N}} \\ x_{\hat{N}} \end{bmatrix} \right). \quad (3.7)$$

Isto mostra que do ponto de vista matemático, um problema de otimização não linear com restrições de igualdade lineares é equivalente a um problema irrestrito.

Para compreender os conceitos vistos até o momento, vejamos um exemplo:

Exemplo 3.1 Considere o problema

$$\min e^{(x_1+x_2)} + x_3^3 + x_4^2 + \cos(x_5) + \frac{x_6}{3} \quad (3.8)$$

$$\text{sujeito a } \begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 + 8x_4 + 3x_5 = 2 \\ 2x_1 + 9x_2 - 2x_4 + 4x_5 + 6x_6 = -8 \end{cases}. \quad (3.9)$$

Note que, o problema possui duas restrições de igualdade e seis variáveis de projeto. Considerando as variáveis x_3 e x_6 na base, a matriz JP é dada por:

$$JP = \begin{bmatrix} \hat{B} & \hat{N} \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{cc|cccc} -1 & 0 & 1 & 2 & 8 & 3 \\ 0 & 6 & 2 & 9 & -2 & 4 \end{array} \right]. \quad (3.10)$$

A matriz \hat{B} é diagonal, logo fácil de ser invertida. Por cálculos elementares, obtém-se:

$$\hat{B}^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1/6 \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

Da Equação (3.6), resulta que,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x_3 \\ x_6 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1/6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1/6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 8 & 3 \\ 2 & 9 & -2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -2 \\ -4/3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_1 + 2x_2 + 8x_4 + 3x_5 \\ -(1/3)x_1 - (3/2)x_2 + (1/3)x_4 - (2/3)x_5 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Substituindo x_3 e x_6 em (3.8), obtemos o seguinte problema irrestrito:

$$\min_{x_1, x_2, x_4, x_5} e^{(x_1+x_2)} + (-2 + x_1 + 2x_2 + 8x_4 + 3x_5)^3 + x_4^2 + \cos(x_5) - \frac{4}{9} - \frac{1}{9}x_1 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{9}x_4 - \frac{2}{9}x_5. \quad (3.13)$$

É bom ressaltar que quaisquer duas variáveis poderiam ser escolhidas como base, entretanto, nestes casos a matriz $\hat{B}^{-1}\hat{N}$ poderia não ser tão simples.

Existe uma interpretação interessante para a teoria da eliminação de variáveis. Para simplificar a notação, a partir de agora considere $P = \mathcal{I}$.

Das Equações (3.4) e (3.6) segue que qualquer ponto viável x para as restrições lineares descritas em (3.2) pode ser escrito como

$$x = \begin{bmatrix} x_{\hat{B}} \\ x_{\hat{N}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{B}^{-1}b - \hat{B}^{-1}\hat{N}x_{\hat{N}} \\ x_{\hat{N}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{B}^{-1} \\ 0 \end{bmatrix} b + \begin{bmatrix} -\hat{B}^{-1}\hat{N} \\ \mathcal{I} \end{bmatrix} x_{\hat{N}} = Yb + Zx_{\hat{N}}. \quad (3.14)$$

Neste caso Z tem $n - m$ colunas linearmente independentes (por causa da matriz identidade no bloco inferior) e além disso satisfaz $JZ = 0$. Logo Z é uma base para o espaço nulo da matriz J . Observe também das Equações (3.14) e (3.3) que Yb é uma solução particular que satisfaz a restrição linear $Jx = b$, visto que,

$$J(Yb) = \begin{bmatrix} \hat{B} & \hat{N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{B}^{-1}b \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{B}\hat{B}^{-1}b + 0 = \mathcal{I}b + 0 = b. \quad (3.15)$$

Da Equação (3.14) conclui-se que, esta técnica de eliminação expressa o ponto viável como soma de uma solução particular de $Jx = b$ (ou seja, Yb) com um deslocamento ao longo do espaço nulo das restrições (ou seja, $Zx_{\hat{N}}$).

3.2 Programação Quadrática para restrições de igualdade

Nesta seção são estudados os métodos de Programação Quadrática considerando o caso em que estão presentes apenas restrições de igualdade. Por simplicidade, as restrições de igualdade são escritas na forma matricial como segue:

$$\min_x q(x) = \frac{1}{2}x^T Hx + x^T h \quad \text{sujeito a } Jx = b, \quad (3.16)$$

onde $J \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é a matriz Jacobiana das restrições, cujas linhas são a_i^T , $i \in I$ (com $m \leq n$) e b é o vetor em \mathbb{R}^m cujas coordenadas são b_i , $i \in I$. Será assumido que J tem posto máximo, ou seja, posto m .

Das condições necessárias de primeira ordem (KKT), x^* é uma solução do problema (3.16) se existir um vetor λ^* , satisfazendo o seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} H & -J^T \\ J & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^* \\ \lambda^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -h \\ b \end{bmatrix}. \quad (3.17)$$

Estas condições são consequências gerais do Teorema 2.1. Assim como no Capítulo 2, λ^* é o vetor dos multiplicadores de Lagrange. O sistema (3.17) pode ser reescrito de outra forma,

mais favorável aos cálculos. Fazendo $x^* = x + p$, onde x é uma estimativa da solução e p a direção desejada, resulta que, $p = x^* - x$. Sejam,

$$r = Jx - b \text{ e } g = h + Hx. \quad (3.18)$$

Considerando o resíduo r e introduzindo estas notações no sistema (3.17), obtém-se:

$$\begin{bmatrix} H & J^T \\ J & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -p \\ \lambda^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g \\ r \end{bmatrix}. \quad (3.19)$$

De fato,

$$\begin{aligned} Hx^* - J^T \lambda^* = -h &\Rightarrow -H(x^* - x) + J^T \lambda^* = h + Hx \\ &\Rightarrow -Hp + J^T \lambda^* = g; \end{aligned}$$

$$Jx^* = b \Rightarrow -J(x^* - x) = Jx - b \Rightarrow -Jp = r.$$

A matriz definida no sistema (3.19) é denominada *matriz Karush-Kuhn-Tucker*, e o próximo resultado fornece condições sob as quais ela é não singular.

Lema 3.1 *Se J tem posto máximo e a matriz Hessiana reduzida $Z^T H Z$ é positiva definida. Então a matriz KKT*

$$M = \begin{bmatrix} H & J^T \\ J & 0 \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

é não singular, e portanto, existe um único par de vetores (x^, λ^*) satisfazendo o sistema (3.17).*

Demonstração: Seja Z uma matriz $n \times (n - m)$ cujas colunas formam uma base para o espaço nulo de J , isto é, $JZ = 0$, como definido no Capítulo 2. Suponha que existam vetores w e v , satisfazendo

$$\begin{bmatrix} H & J^T \\ J & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} = 0. \quad (3.21)$$

Já que $Jw = 0$, tem-se de (3.21) que

$$0 = \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} H & J^T \\ J & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} = w^T H w. \quad (3.22)$$

Como w está no espaço nulo de J , existe um vetor $u \in \mathbb{R}^{n-m}$, tal que, $w = Zu$. Logo,

$$0 = w^T H w = u^T Z^T H Z u. \quad (3.23)$$

Por hipótese $Z^T H Z$ é positiva definida, assim $u = 0$. Logo, $w = 0$, e por (3.21), $J^T v = 0$. Como J tem posto máximo, $v = 0$. Assim, o sistema (3.21) é satisfeito apenas se $w = 0$ e $v = 0$, logo a matriz M é não singular. ■

No exemplo seguinte deseja-se encontrar λ^* usando o sistema (3.17).

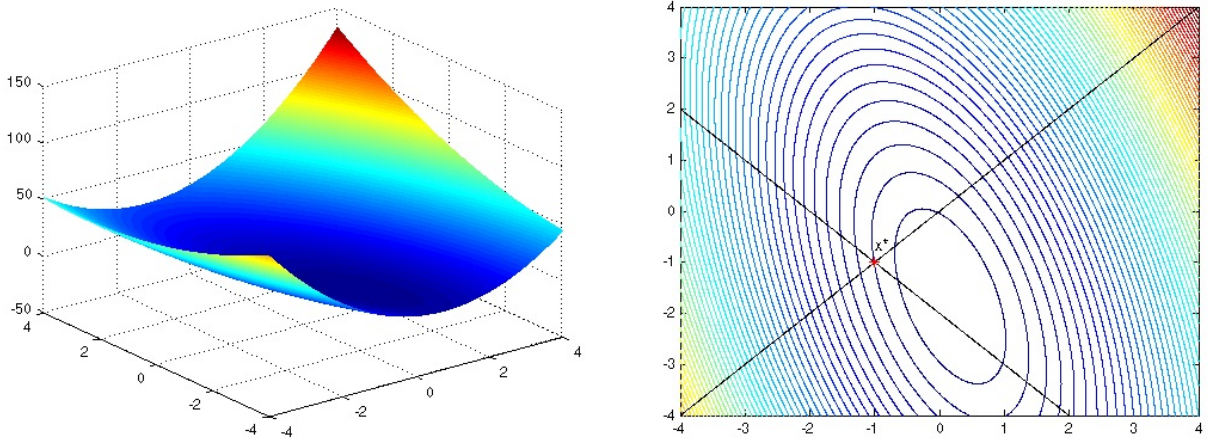


Figura 3.1: Gráfico, curvas de nível e restrições do problema (3.24)

Exemplo 3.2 Considere o problema de programação quadrática

$$\min_x q(x) = 2x_1 + 3x_2 + 4x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} x_1 - x_2 = 0 \\ x_1 + x_2 = -2 \end{cases} . \quad (3.24)$$

Para este problema tem-se que

$$H = \begin{bmatrix} 8 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}, \quad h = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad J = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \end{bmatrix}. \quad (3.25)$$

A solução ótima é $x^* = [-1 \ -1]^T$, conforme pode ser observado na Figura 3.1. Substituindo (3.25) no sistema (3.17) resulta:

$$\begin{bmatrix} 8 & 2 & -1 & -1 \\ 2 & 2 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -3 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}. \quad (3.26)$$

De onde obtém-se o sistema

$$\begin{cases} -\lambda_1 - \lambda_2 = 8 \\ \lambda_1 - \lambda_2 = 1 \end{cases}. \quad (3.27)$$

Resolvendo este sistema encontra-se que $\lambda^* = \begin{bmatrix} -7 \\ -9 \end{bmatrix}^T$.

Viu-se que, quando as condições do Lema 3.1 são satisfeitas, existe um único par de vetor (x^*, λ^*) que satisfaz as condições necessárias de primeira ordem para o problema (3.16). Na verdade, a condição suficiente de segunda ordem (Teorema 2.4) também é satisfeita em (x^*, λ^*) , assim x^* é uma solução local estrita do problema (3.16). Para mostrar que x^* é uma solução global do mesmo problema é possível usar um argumento direto.

Teorema 3.1 *Se J tem posto máximo e a matriz Hessiana reduzida $Z^T H Z$ é positiva definida, então o vetor x^* que satisfaz o sistema (3.17) é a única solução global do problema (3.16).*

Demonstração: Seja x outro ponto viável e considere $p = x^* - x$. Como, x^* e x são viáveis, $Jx^* - b = 0$ e $Jx - b = 0$, fazendo a diferença entre estas equações, tem-se que, $Jp = 0$. Substituindo o valor de x na função objetivo definida em (3.16), resulta:

$$\begin{aligned}
q(x) &= \frac{1}{2}(x^* - p)^T H(x^* - p) + h^T(x^* - p) \\
&= \frac{1}{2}[(x^{*T}H - p^TH)(x^* - p)] + h^T(x^* - p) \\
&= \frac{1}{2}[x^{*T}Hx^* - x^{*T}Hp - p^THx^* + p^THp] + h^Tx^* - h^Tp \\
&= \frac{1}{2}x^{*T}Hx^* - x^{*T}Hp + \frac{1}{2}p^THp + h^Tx^* - h^Tp \\
&= \frac{1}{2}p^THp - x^{*T}Hp - h^Tp + \frac{1}{2}x^{*T}Hx^* + h^Tx^* \\
&= \frac{1}{2}p^THp - p^THx^* - h^Tp + q(x^*).
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Do sistema (3.17) tem-se que $Hx^* = -h + J^T\lambda^*$ e como $Jp = 0$,

$$p^THx^* = p^T(-h + J^T\lambda^*) = -p^Th. \tag{3.29}$$

Substituindo esta relação na Equação (3.28), obtém-se:

$$q(x) = \frac{1}{2}p^THp + q(x^*). \tag{3.30}$$

Como p está no espaço nulo de J , existe um vetor $u \in \mathbb{R}^{n-m}$, tal que, $p = Zu$, logo

$$q(x) = \frac{1}{2}u^TZ^THZu + q(x^*). \tag{3.31}$$

Por hipótese Z^THZ é positiva definida assim $q(x) > q(x^*)$ exceto quando $u = 0$, isto é, quando $x = x^*$. Portanto, x^* é a única solução global do problema (3.16). ■

Observação 3.1 Quando a matriz Hessiana reduzida Z^THZ é positiva semidefinida com autovalores nulos, o vetor x^* que satisfaz o sistema (3.17) é uma solução local, mas não solução local estrita. Se a matriz Hessiana reduzida possui autovalores negativos, então x^* é apenas um ponto estacionário, não uma solução local.

São apresentados a seguir o princípio básico de duas técnicas utilizadas para resolver problemas quadráticos que apresentam restrições de igualdade.

3.2.1 Método Complementar de Schur

De (3.19), tem-se o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} -Hp + J^T\lambda^* = g \\ -Jp = r \end{cases}. \tag{3.32}$$

Assumindo que H é positiva definida, é possível obter um sistema linear em função do vetor λ^* . De fato, multiplicando a primeira equação do sistema (3.32) por JH^{-1} (produto da matriz J pela inversa da matriz Hessiana H) tem-se

$$\begin{cases} -Jp + JH^{-1}J^T\lambda^* = JH^{-1}g \\ -Jp = r \end{cases}. \tag{3.33}$$

Fazendo a diferença entre as equações do sistema (3.33), resulta

$$\begin{aligned} -Jp + JH^{-1}J^T\lambda^* + Jp &= JH^{-1}g - r \\ JH^{-1}J^T\lambda^* &= JH^{-1}g - r. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Multiplicando ambos os lados da igualdade por $[JH^{-1}]^{-1}$ e sabendo que $-Jp = r$, segue

$$\begin{aligned} [JH^{-1}]^{-1} JH^{-1}J^T\lambda^* &= [JH^{-1}]^{-1} JH^{-1}g - [JH^{-1}]^{-1}r \\ HJ^{-1}JH^{-1}J^T\lambda^* &= HJ^{-1}JH^{-1}g - HJ^{-1}r \\ J^T\lambda^* &= g - HJ^{-1}r \\ &= g - HJ^{-1}(-Jp) \\ &= g + HJ^{-1}Jp \\ &= g + Hp \\ \Rightarrow Hp &= J^T\lambda^* - g. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Pode-se notar que no cálculo destas expressões são realizadas operações com a matriz H^{-1} , bem como $JH^{-1}J^T$. Portanto, é interessante quando:

- H está bem condicionada e fácil de ser invertida (por exemplo, quando H é diagonal ou diagonal em bloco); ou
- H^{-1} é conhecida explicitamente através de uma fórmula de atualização Quase-Newton; ou
- o número de restrições de igualdade m é pequeno, assim o número de soluções necessárias para formar a matriz $JH^{-1}J^T$ também não será grande.

O nome “Método Complementar de Schur” deriva do fato de que, ao aplicar a eliminação Gaussiana em bloco para a matriz (3.20) usando H como pivô, obtém-se o sistema triangular superior

$$\begin{bmatrix} H & J^T \\ 0 & -JH^{-1}J^T \end{bmatrix}. \quad (3.36)$$

Na terminologia da álgebra linear, a matriz $JH^{-1}J^T$ é denominada *Complementar de Schur* da matriz H descrita em (3.20).

É possível determinar uma fórmula explícita para a inversa da matriz M , Equação (3.20). Por cálculos elementares resulta que

$$\begin{bmatrix} H & J^T \\ J & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} O & E \\ E^T & F \end{bmatrix}, \quad (3.37)$$

onde

$$\begin{aligned} O &= H^{-1} - H^{-1}J^T [JH^{-1}J^T]^{-1} JH^{-1}, \\ E &= H^{-1}J^T [JH^{-1}J^T]^{-1}, \\ F &= -[JH^{-1}J^T]^{-1}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

A solução do sistema (3.19) pode ser obtida multiplicando ambos os lados da igualdade pela matriz inversa, Equação (3.37). Agrupando as expressões comuns e os termos de forma conveniente, chega-se às Equações (3.34) e (3.35).

3.2.2 Método do Espaço Nulo

No Método do Espaço Nulo não é necessário que H seja não singular e, por esta razão, tem mais aplicabilidade que o Método Complementar de Schur. É assumido apenas que as condições do Lema 3.1 sejam satisfeitas, a saber, que J tenha posto máximo e que $Z^T H Z$ seja positiva definida. Entretanto, requer o conhecimento da matriz Z que forma uma base para o espaço nulo de J . Semelhante ao Método Complementar de Schur, ele explora a estrutura em bloco do sistema KKT para decompor o sistema (3.19) em dois pequenos sistemas.

Suponha que o vetor p no sistema (3.19) seja decomposto em dois termos, isto é

$$p = Y p^Y + Z p^Z, \quad (3.39)$$

onde Z é a matriz $n \times (n - m)$ do espaço nulo, Y é qualquer matriz $n \times m$, tal que, a matriz estendida $[Y \ Z]$ seja não singular, p^Y é um vetor coluna ($m \times 1$) e p^Z é um vetor coluna ($(n - m) \times 1$). Substituindo p na segunda equação do sistema (3.32) e lembrando que $JZ = 0$, obtém-se

$$(JY)p^Y = -r. \quad (3.40)$$

Como J tem posto m e $[Y \ Z]$ é não singular de dimensão $n \times n$, o produto $J[Y \ Z] = [JY \ 0]$ tem posto m . Além disso, JY é uma matriz $m \times m$ não singular e p^Y está bem definido pela Equação (3.40). Logo, pode-se substituir o valor de p dado pela Equação (3.39) na primeira equação do sistema (3.32)

$$-HY p^Y - HZ p^Z + J^T \lambda^* = g, \quad (3.41)$$

e multiplicando ambos os lados da igualdade por Z^T , resulta que:

$$(Z^T H Z)p^Z = -Z^T H Y p^Y - Z^T g. \quad (3.42)$$

A solução deste sistema pode ser encontrada fatorando (fatoração de Cholesky) a matriz Hessiana reduzida $Z^T H Z$, para determinar p^Z . Assim, é possível encontrar a direção total $p = Y p^Y + Z p^Z$. Para obter o multiplicador de Lagrange, multiplica-se a primeira equação do sistema (3.32) por Y^T resultando no sistema linear

$$(JY)^T \lambda^* = Y^T (g + H p), \quad (3.43)$$

cujas soluções podem ser obtidas em função de λ^* .

O propósito das subseções 3.2.1 e 3.2.2 foi o de mostrar a ideia central dos métodos, destacando-se as condições necessárias de primeira ordem. A aplicação será feita para um método geral denominado Método do Conjunto Ativo para QP convexa que é utilizado para solucionar problemas com restrições de igualdade e desigualdade.

3.3 Programação Quadrática para restrições de desigualdade

Esta seção inicia-se com uma revisão das condições de otimalidade para a Programação Quadrática com restrições de desigualdade. O Teorema 2.1 pode ser aplicado ao problema (3.1) observando que, neste caso, a função Lagrangeana é definida por:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = \frac{1}{2} x^T H x + x^T h - \sum_{i \in I \cup D} \lambda_i (a_i^T x - b_i). \quad (3.44)$$

Como na Definição 2.4, o conjunto ativo $\mathcal{A}(x^*)$ consiste dos índices das restrições para os quais a igualdade é satisfeita em x^* , ou seja

$$\mathcal{A}(x^*) = \{i \in I \cup D \mid a_i^T x^* = b_i\}. \quad (3.45)$$

Adaptando as condições KKT, Equações (2.38 a 2.42) para este problema, encontra-se que qualquer solução x^* do problema (3.1) deve satisfazer as seguintes condições, para alguns multiplicadores de Lagrange λ_i^* , $i \in \mathcal{A}(x^*)$:

$$Hx^* + h - \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* a_i = 0, \quad (3.46)$$

$$a_i^T x^* = b_i, \text{ para todo } i \in \mathcal{A}(x^*), \quad (3.47)$$

$$a_i^T x^* \geq b_i, \text{ para todo } i \in D \setminus \mathcal{A}(x^*), \quad (3.48)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \text{ para todo } i \in D \cap \mathcal{A}(x^*). \quad (3.49)$$

Observação 3.2 No Teorema 2.1 o conjunto dos gradientes das restrições ativas $\{\nabla c_i(x); i \in \mathcal{A}(x)\}$ em x^* deve ser linearmente independente. Entretanto, para as condições de otimalidade da Programação Quadrática mencionadas acima, esta propriedade não é necessária. Isto acontece porque a condição de independência linear dos gradientes das restrições ativas é muito restrita, isto é, pode não ser satisfeita para alguns problemas mais simples. Assim é comum impor outras condições de qualificações mais fracas, como por exemplo, Condições de Qualificação de Mangasarian-Fromovitz (MFCQ), Condição de Qualificação de Posto Constante (CRCQ), Condição de Dependência Linear Positiva Constante (CPLD). Para um estudo mais detalhado destas condições recomendamos Nunes (2009) e Schuverdt (2006).

Na QP convexa, se H é positiva semidefinida, as condições (3.46 a 3.49) são na realidade suficientes para x^* ser uma solução global, como será visto no Teorema 3.2.

Teorema 3.2 Se x^* satisfaz as condições (3.46 a 3.49) para alguns λ_i^* , $i \in \mathcal{A}(x^*)$, e H é positiva semidefinida, então x^* é uma solução global do problema (3.1).

Demonstração: Se x é outro ponto viável para o problema (3.1), tem-se que, $a_i^T x = b_i$ para todo $i \in I$ e $a_i^T x \geq b_i$ para todo $i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D$. Usando estas relações, a Equação (3.46) e a desigualdade (3.49), resulta:

$$(x - x^*)^T (Hx^* + h) = \sum_{i \in I} \lambda_i^* a_i^T (x - x^*) + \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*) \cap D} \lambda_i^* a_i^T (x - x^*) \geq 0. \quad (3.50)$$

Além disso,

$$\begin{aligned} q(x) &= q(x^*) + (x - x^*)^T (Hx^* + h) + \frac{1}{2} (x - x^*)^T H (x - x^*) \\ &\geq q(x^*) + \frac{1}{2} (x - x^*)^T H (x - x^*) \\ &\geq q(x^*), \end{aligned} \quad (3.51)$$

a primeira desigualdade segue de (3.50) e a segunda desigualdade decorre da hipótese de H ser positiva semidefinida. Portanto, $q(x) \geq q(x^*)$ para qualquer x viável e assim x^* é uma solução global. ■

Também é possível aplicar a teoria da seção 2.3 para deduzir as condições de otimalidade de segunda ordem para o problema (3.1). As condições suficientes de segunda ordem para x^*

ser uma solução local são satisfeitas se $Z^T H Z$ é positiva definida. Neste caso, de acordo com o Teorema 2.4, x^* é uma solução local estrita.

Quando H não é positiva definida, o problema geral (3.1) pode ter mais de uma solução estrita. Tais problemas são denominados “QP não convexa” ou “QP indeterminada”, e geram algumas complicações aos algoritmos.

Outra propriedade que gera dificuldades para alguns algoritmos é a *degeneração*. Este termo se refere a situações em que:

- (i) os gradientes das restrições ativas a_i , $i \in \mathcal{A}(x^*)$ são linearmente dependentes na solução x^* , e/ou
- (ii) a condição de complementaridade estrita, Definição 2.7 não é válida, isto é, existe algum índice $i \in \mathcal{A}(x^*)$, tal que, para todo multiplicador de Lagrange satisfazendo (3.46 a 3.49) tem-se que $\lambda_i^* = 0$ (tais restrições são ditas *pouco ativas*).

A degeneração pode causar problemas aos algoritmos por duas razões principais. Primeiro, a dependência linear do gradiente das restrições ativas pode gerar dificuldades no cálculo numérico do passo. Segundo, quando o problema contém restrições pouco ativas, é difícil para o algoritmo determinar se essas restrições são ativas na solução.

3.4 Método do Conjunto Ativo

Agora apresenta-se o Método do Conjunto Ativo para programação quadrática convexa (*Active-Set Method For Convex QP*) utilizado para solucionar problemas quadráticos contendo restrições de igualdade e desigualdade. São considerados apenas o caso convexo, no qual, a matriz Hessiana H do problema (3.1) é positiva semidefinida.

Se o conjunto ativo descrito pela Equação (3.45) já for conhecido, pode-se encontrar a solução x^* aplicando uma das técnicas de QP descritas na seção 3.2 para problemas contendo apenas restrições de igualdade, isto é

$$\min_x q(x) = \frac{1}{2}x^T H x + x^T h \quad \text{sujeito a} \quad a_i^T x = b_i, \quad i \in \mathcal{A}(x^*). \quad (3.52)$$

É claro que, normalmente, não se tem o conhecimento prévio de $\mathcal{A}(x^*)$. Como será visto a seguir a determinação deste conjunto é o principal desafio para os algoritmos de QP com restrições de desigualdade.

O Método do Conjunto Ativo pode ser implementado de três formas: primal, dual e primal-dual. Este estudo é restrito ao método primal, que gera aproximações viáveis para o problema original (3.1) e garante o decréscimo da função objetivo $q(x)$.

A essência do Método do Conjunto Ativo primal é encontrar uma direção a cada iteração resolvendo um subproblema quadrático. Neste subproblema todas as restrições descritas em (3.1) são tratadas como restrições de igualdade. O subconjunto formado pelas restrições ativas é conhecido como *conjunto de trabalho* e será denotado na k -ésima iteração por \mathcal{W}_k . Uma propriedade importante que se impõem a \mathcal{W}_k é que os gradientes das restrições a_i no conjunto de trabalho sejam linearmente independentes.

Dada a aproximação x^k e o conjunto de trabalho \mathcal{W}_k , primeiro é verificado se x^k minimiza a função quadrática q no subespaço definido pelo conjunto de trabalho \mathcal{W}_k . Se não, é calculada uma direção p , solucionando um subproblema quadrático com restrição de igualdade, no qual as restrições pertencentes ao conjunto de trabalho \mathcal{W}_k são de igualdade e todas as outras restrições são temporariamente ignoradas. Para expressar este subproblema em função da direção p , defina

$$p = x - x^k \quad \text{e} \quad g^k = H x^k + h. \quad (3.53)$$

Substituindo x na função objetivo do problema (3.1), encontra-se que:

$$q(x) = q(x^k + p) = \frac{1}{2}p^T H p + p^T g^k + \rho_k, \quad (3.54)$$

onde $\rho_k = 0,5(x^k)^T H x^k + (x^k)^T h$ e não depende de p . Então, pode-se desprezar ρ_k da função objetivo sem alterar a solução do problema. Assim, o subproblema quadrático pode ser escrito formalmente como

$$\min_p \frac{1}{2}p^T H p + (g^k)^T p \quad \text{sujeito a} \quad a_i^T p = 0, \quad i \in \mathcal{W}_k. \quad (3.55)$$

Como H é positiva definida, a solução p^k do subproblema (3.55) pode ser obtida por algumas das técnicas descritas na seção 3.2. Supondo que o p^k ótimo do problema (3.55) é não nulo, precisa-se decidir o quanto se mover ao longo desta direção. Se $x^k + p^k$ é viável com relação a todas as restrições, então $x^{k+1} = x^k + p^k$. Caso contrário,

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad (3.56)$$

sendo α_k , o comprimento do passo escolhido como o maior valor no intervalo $[0, 1]$ para o qual todas as restrições são satisfeitas. É possível definir uma fórmula explícita para α_k considerando o que acontece com as restrições $i \notin \mathcal{W}_k$, já que as restrições $i \in \mathcal{W}_k$ certamente são satisfeitas, independente da escolha de α_k .

Se $a_i^T p^k \geq 0$ para algum $i \notin \mathcal{W}_k$, então para todo $\alpha_k \geq 0$, tem-se que $a_i^T(x^k + \alpha_k p^k) \geq a_i^T x^k \geq b_i$. Portanto, a restrição será satisfeita para toda escolha não negativa do comprimento do passo. Se $a_i^T p^k < 0$ para algum $i \notin \mathcal{W}_k$, tem-se que $a_i^T(x^k + \alpha_k p^k) \geq b_i$ apenas quando

$$\alpha_k \leq \frac{b_i - a_i^T x^k}{a_i^T p^k}. \quad (3.57)$$

Para maximizar o decrescimento da função q , deseja-se obter α_k tão grande quanto possível em $[0, 1]$ obedecendo a região viável, assim, por definição:

$$\alpha_k = \min \left(1, \min_{i \notin \mathcal{W}_k, a_i^T p^k < 0} \frac{b_i - a_i^T x^k}{a_i^T p^k} \right). \quad (3.58)$$

As restrições i para as quais $\alpha_k = \min(b_i - a_i^T x^k)/a_i^T p^k$, com $i \notin \mathcal{W}_k$, $a_i^T p^k < 0$, são denominadas *restrições de bloqueio* (se $\alpha_k = 1$ e nenhuma das restrições são ativas em $x^k + \alpha_k p^k$, então não existe restrição de bloqueio nesta iteração). Note que α_k pode ser nulo, visto que é possível ter $a_i^T p^k < 0$ para alguma restrição $i \notin \mathcal{W}_k$ que é ativa no ponto x^k .

Se $\alpha_k < 1$, ou seja, o passo ao longo de p^k for bloqueado por alguma restrição $i \notin \mathcal{W}_k$, o novo conjunto de trabalho \mathcal{W}_{k+1} é construído adicionando-se uma restrição de bloqueio a \mathcal{W}_k .

O processo iterativo continua, com a adição de restrições ao conjunto de trabalho até que se encontre um ponto \hat{x} que minimiza a função objetivo quadrática sob o conjunto de trabalho $\hat{\mathcal{W}}$. É fácil identificar tal ponto, pois o subproblema (3.55) terá uma solução $p = 0$. Uma vez que $p = 0$ satisfaz as condições de otimalidade descritas pelo sistema (3.19), tem-se que

$$\sum_{i \in \hat{\mathcal{W}}} a_i \hat{\lambda}_i = g = H\hat{x} + h, \quad (3.59)$$

para alguns multiplicadores de Lagrange $\hat{\lambda}_i$, $i \in \hat{\mathcal{W}}$. Como \hat{x} e $\hat{\lambda}$ satisfazem a primeira condição KKT, Equação (3.46), os multiplicadores de Lagrange correspondentes às restrições de desigualdade que não estão no conjunto de trabalho, são nulos. O controle imposto no comprimento

do passo garante que \hat{x} também é viável com relação a todas as restrições, assim a Equação (3.47) e a Inequação (3.48) também são satisfeitas neste ponto.

Agora apresenta-se algumas considerações sobre os sinais dos multiplicadores de Lagrange, correspondentes às restrições de desigualdade no conjunto de trabalho, ou seja, os índices $i \in \hat{\mathcal{W}} \cap D$. Se estes multiplicadores são todos não negativos, a quarta condição KKT, desigualdade (3.49) é satisfeita e \hat{x} é um ponto KKT para o problema original (3.1). Na verdade, como H é positiva semidefinida, pelo Teorema 3.2 segue que, \hat{x} é uma solução global do problema (3.1).

Por outro lado, se um ou mais multiplicadores $\hat{\lambda}_j$, $j \in \hat{\mathcal{W}} \cap D$, são negativos, a condição (3.49) não é satisfeita e a função objetivo $q(\cdot)$ pode decrescer com a retirada de uma destas restrições do conjunto $\hat{\mathcal{W}}$. Neste caso, é removido do conjunto de trabalho um índice j correspondente a um dos multiplicadores negativos e resolve-se o novo subproblema (3.55) para a nova direção. O Teorema 3.3, a seguir, mostra que esta estratégia produz uma direção p para a próxima aproximação que é viável para a restrição retirada.

Antes de enunciar e demonstrar o Teorema 3.3, veja algumas ideias relevantes para a demonstração.

As condições de segunda ordem descritas no Capítulo 2 às vezes são expostas de outra forma, o que facilita a verificação das Inequações (2.92) e (2.100). Esta forma é baseada na projeção da matriz Hessiana Lagrangeana $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)$ no subspaço definido por $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$. O caso mais simples é obtido quando o vetor de multiplicador λ^* que satisfaz as condições KKT (2.38 a 2.42) é único, como acontece por exemplo, quando o conjunto dos gradientes das restrições ativas é linearmente independente e a condição de complementaridade estrita é satisfeita. Neste caso, a definição (2.80) de $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ se reduz a

$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \mathcal{N} [\nabla c_i(x^*)^T]_{i \in \mathcal{A}(x^*)} = \mathcal{N}(J(x^*)) = \{w \mid J(x^*)w = 0\}, \quad (3.60)$$

onde $J(x^*)$ é definida pela Equação (2.47) e $\mathcal{N}(J(x^*))$ denota o espaço nulo da matriz $J(x^*)$. Assim, da igualdade (3.60), o cone $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ é o espaço nulo da matriz $J(x^*)$. Como em (2.52), é possível definir uma matriz Z com posto máximo cujas colunas geram o espaço $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$; isto é,

$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \{Zu \mid u \in \mathbb{R}^{|\mathcal{A}(x^*)|}\}, \quad (3.61)$$

sendo, $|\mathcal{A}(x^*)|$ a cardinalidade dos números reais em relação ao conjunto ativo.

Assim, a condição (2.92) no Teorema 2.3, pode ser reescrita como

$$u^T Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) Z u \geq 0 \text{ para todo } u, \quad (3.62)$$

em outras palavras, $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) Z$ é positiva semidefinida. De modo análogo, da condição (2.100) no Teorema 2.4 tem-se que $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) Z$ é positiva definida.

Teorema 3.3 *Suponha que o ponto \hat{x} satisfaz as condições de primeira ordem para o subproblema com restrição de igualdade com conjunto de trabalho $\hat{\mathcal{W}}$; isto é, a Equação (3.59) é satisfeita com $a_i^T \hat{x} = b_i$ para todo $i \in \hat{\mathcal{W}}$. Suponha também que os gradientes das restrições a_i , $i \in \hat{\mathcal{W}}$, sejam linearmente independentes e que existe um índice $j \in \hat{\mathcal{W}}$, tal que, $\hat{\lambda}_j < 0$. Se p for uma solução do subproblema com a retirada da restrição j , isto é,*

$$\min_p \frac{1}{2} p^T H p + (H \hat{x} + h)^T p \quad \text{sujeito a } a_i^T p = 0, \text{ para todo } i \in \hat{\mathcal{W}} \text{ com } i \neq j, \quad (3.63)$$

então p será uma direção viável para a restrição j , isto é, $a_j^T p \geq 0$. Além disso, se p satisfizer a condição suficiente de segunda ordem para o problema (3.63), então $a_j^T p > 0$ e p será uma direção de descida para $q(\cdot)$.

Demonstração: Como p é solução do problema (3.63), tem-se dos resultados da seção 3.2, que existem multiplicadores $\tilde{\lambda}_i$, tais que, para todo $i \in \hat{\mathcal{W}}$ com $i \neq j$,

$$\sum_{i \in \hat{\mathcal{W}}, i \neq j} \tilde{\lambda}_i a_i = Hp + (H\hat{x} + h). \quad (3.64)$$

Além disso, pelas condições necessárias de segunda ordem (descritas anteriormente) tem-se que se Z é uma base para o espaço nulo da matriz

$$[a_i^T]_{i \in \hat{\mathcal{W}}, i \neq j}, \quad (3.65)$$

então $Z^T H Z$ é positiva semidefinida. Claramente, p tem a forma $p = Zp^Z$ para algum vetor p^Z , assim $p^T H p \geq 0$.

Por hipótese \hat{x} e $\hat{\mathcal{W}}$ satisfazem a Equação (3.59). Subtraindo (3.59) de (3.64) obtém-se:

$$\sum_{i \in \hat{\mathcal{W}}, i \neq j} (\tilde{\lambda}_i - \hat{\lambda}_i) a_i - \hat{\lambda}_j a_j = Hp. \quad (3.66)$$

Multiplicando ambos os lados da igualdade por p^T e usando a hipótese que $a_i^T p = p^T a_i = 0$, para todo $i \in \hat{\mathcal{W}}$ com $i \neq j$, tem-se que

$$-\hat{\lambda}_j p^T a_j = -\hat{\lambda}_j a_j^T p = p^T H p. \quad (3.67)$$

Como $p^T H p \geq 0$ e $\hat{\lambda}_j < 0$, segue que $a_j^T p \geq 0$. Se a condição suficiente de segunda ordem da seção 2.3 é satisfeita, tem-se que $Z^T H Z$ é positiva definida. Da Equação (3.67), $a_j^T p = 0$ apenas se $p^T H p = (p^Z)^T Z^T H Z p^Z = 0$, isto é se $p^Z = 0$ e portanto $p = 0$. Mas se $p = 0$, da Equação (3.66) e usando a independência linear de a_i para $i \in \hat{\mathcal{W}}$, deve-se ter que $\hat{\lambda}_j = 0$, o que contradiz a hipótese. Logo, na Equação (3.67), $p^T H p > 0$ e assim $a_j^T p > 0$.

A afirmação de que p é uma direção de descida para $q(\cdot)$ será provada no Teorema 3.4. ■

O Teorema 3.4 mostra que se a solução p^k do problema (3.63) é não nula e satisfaz a condição suficiente de segunda ordem para o conjunto de trabalho atual, então é uma direção de descida estrita para $q(\cdot)$.

Teorema 3.4 *Suponha que a solução p^k do problema (3.55) é não nula e satisfaz a condição suficiente de segunda ordem para este problema de otimização. Então a função $q(\cdot)$ é estritamente decrescente ao longo da direção p^k .*

Demonstração: Por hipótese p^k satisfaz a condição suficiente de segunda ordem, assim $Z^T H Z$ é positiva definida para uma matriz Z , cujas colunas formam uma base para o espaço nulo das restrições descritas em (3.55). Aplicando o Teorema 3.1 para o problema (3.55) segue que p^k é a única solução global. Como $p = 0$ também é um ponto viável para o problema (3.55), o valor da função objetivo neste ponto deve ser maior do que o valor da função objetivo aplicada em p^k , ou seja

$$\frac{1}{2}(p^k)^T H p^k + (g^k)^T p^k < 0. \quad (3.68)$$

Como $(p^k)^T H p^k \geq 0$ por convexidade, a desigualdade (3.68) implica que $(g^k)^T p^k < 0$. Aplicando o ponto $x^k + \alpha p^k$ na função objetivo do problema (3.52) e usando (3.68) tem-se que

$$q(x^{k+1}) = q(x^k + \alpha p^k) = q(x^k) + \alpha(g^k)^T p^k + \frac{1}{2}\alpha^2(p^k)^T H p^k < q(x^k), \quad (3.69)$$

para todo $\alpha > 0$ suficientemente pequeno. O que conclui a demonstração. ■

Observação 3.3 Quando H é positiva definida - o caso estritamente convexo - a condição suficiente de segunda ordem é satisfeita para todo subproblema viável do problema (3.55). Assim, segue do resultado acima que o decrescimento estrito de $q(\cdot)$ é obtido sempre que $p^k \neq 0$.

Após a fundamentação teórica do Método do Conjunto Ativo para QP convexa veja agora uma especificação formal do algoritmo. Será assumido que a função objetivo q é limitada no conjunto viável descrito pelas restrições do problema (3.1).

Dados Iniciais: Entre com o ponto inicial viável x^0 . Seja \mathcal{W}_0 o subconjunto das restrições ativas em x^0 .

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

Resolva o problema (3.55) e obtenha o valor de p^k ;

Se $p^k = 0$

Calcule os multiplicadores de Lagrange $\hat{\lambda}_i$ que satisfazem a Equação (3.59),
e faça $\hat{\mathcal{W}} = \mathcal{W}_k$;

Se $\hat{\lambda}_i \geq 0$ para todo $i \in \mathcal{W}_k \cap D$

Pare a solução ótima é $x^* = x^k$;

Senão $j = \text{índice } i, \text{ tal que, } \hat{\lambda}_i \text{ seja mínimo, sendo } i \in \mathcal{W}_k \cap D,$

$x^{k+1} = x^k$ e $\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \setminus \{j\}$;

Senão ($p^k \neq 0$)

Calcule α_k usando a Equação (3.58);

e faça $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k$;

Se existir restrição de bloqueio,

obtenha o conjunto \mathcal{W}_{k+1} adicionando a restrição de bloqueio a \mathcal{W}_k

Senão

faça $\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k$.

Fim.

Para mostrar a performance de todos os métodos de otimização restrita estudados nesta dissertação são considerados dois exemplos. Sendo um problema teórico estudado no final de cada capítulo e um problema prático, estudado separadamente no Capítulo 7. Vale lembrar que todos os algoritmos foram implementados em Matlab®.

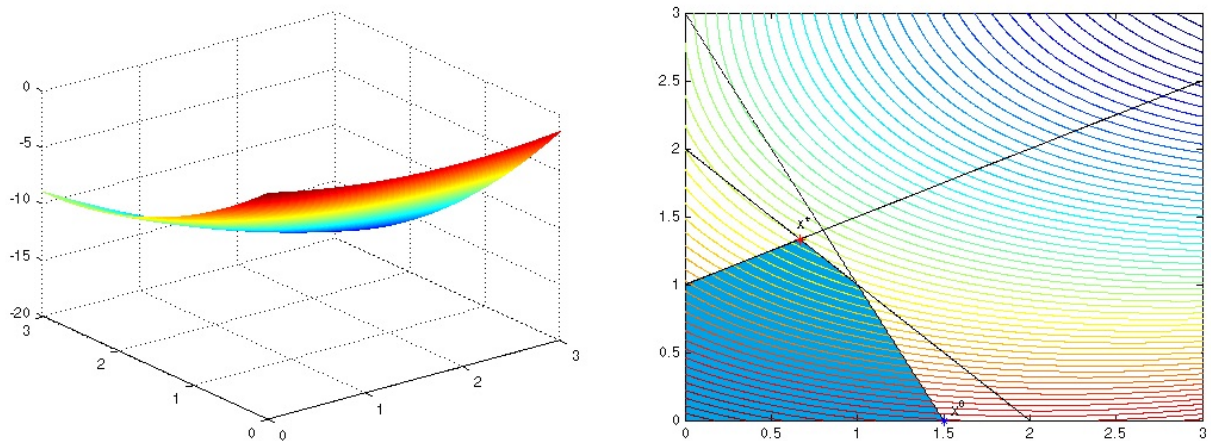


Figura 3.2: Superfície, curvas de nível e região viável do Exemplo Ilustrativo 1

Exemplo Ilustrativo 1: Considere o problema bidimensional.

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - 2x_1 - 6x_2 \quad (3.70)$$

$$\text{sujeito a } \begin{cases} -x_1 - x_2 + 2 \geq 0, \\ x_1 - 2x_2 + 2 \geq 0, \\ -2x_1 - x_2 + 3 \geq 0, \\ x_1 \geq 0, \\ x_2 \geq 0. \end{cases} \quad (3.71)$$

A Figura 3.2 ilustra o ponto ótimo, a região viável e o gráfico da superfície do problema (3.70) sujeito às restrições (3.71).

Deseja-se resolver este problema, usando o Método do Conjunto Ativo para QP convexa. Como o procedimento é um pouco complexo, para este exemplo, os cálculos são feitos passo a passo sem o auxílio do Matlab.

Tem-se que,

$$h = \begin{bmatrix} -2 \\ -6 \end{bmatrix}, \quad \nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad J = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -2 \\ -2 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \\ -3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.72)$$

Por simplicidade as restrições descritas em (3.71) são enumeradas, nesta ordem, pelos índices (1 a 5). Considere $x^0 = [1, 5 \ 0]^T$ o ponto inicial. Note que, as restrições {3} e {5} são ativas neste ponto, assim $\mathcal{W}_0 = \{3, 5\}$ (pode-se escolher $\mathcal{W}_0 = \{5\}$ ou $\mathcal{W}_0 = \{3\}$ ou $\mathcal{W}_0 = \{\emptyset\}$, cada uma destas escolhas faz com que o algoritmo se comporte de maneira diferente).

Iteração $k = 0$:

Como x^0 encontra-se em um vértice da região viável, é claramente uma solução para a função objetivo f com relação ao conjunto de trabalho \mathcal{W}_0 , ou seja, a solução do problema (3.55) na iteração $k = 0$ é $p^0 = [0 \ 0]^T$. Pela Equação (3.59) obtém-se os multiplicadores $\hat{\lambda}_3$ e $\hat{\lambda}_5$ associados às restrições ativas {3} e {5}, sendo $a_i = i$ -ésima linha da matriz J ,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \end{bmatrix} \hat{\lambda}_3 + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \hat{\lambda}_5 &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1, 5 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -2 \\ -6 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1, 5 \\ -1, 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -2 \\ -6 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Resultando no sistema,

$$\begin{cases} -\hat{\lambda}_3 + \hat{\lambda}_5 = -7, 5 \\ -2\hat{\lambda}_3 = -0, 5 \end{cases},$$

resolvendo o sistema, segue que, $[\hat{\lambda}_3 \ \hat{\lambda}_5] = [0, 25 \ -7, 25]$. A restrição {5} deve ser removida do conjunto de trabalho \mathcal{W}_0 , uma vez que o multiplicador de Lagrange associado a esta restrição é negativo.

Iteração $k = 1$:

Para esta iteração, $x^1 = x^0$ e $\mathcal{W}_1 = \{3\}$. A próxima etapa é obter a solução do problema (3.55), para isto considere $p^1 = [u_1 \ u_2]^T$. Assim,

$$a_3^T p^1 = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} -2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow -2u_1 - u_2 = 0 \Rightarrow u_2 = -2u_1;$$

$$\frac{1}{2}(p^1)^T \nabla^2 f(x^1) p^1 + (\nabla^2 f(x^1) x^1 + h)^T p^1 = \frac{13}{2} u_1^2 + 14,5 u_1. \quad (3.73)$$

Derivando a Equação (3.73) em relação a u_1 e igualando a zero, tem-se:

$$u_1 \cong -1,12.$$

Logo, $p^1 = [-1,12 \ 2,24]^T$. Como $p^1 \neq [0 \ 0]^T$, deve-se calcular o comprimento do passo através da Equação (3.58). As restrições que não pertencem a \mathcal{W}_1 são: $\{1\}$, $\{2\}$, $\{4\}$ e $\{5\}$. Devemos verificar quais destas restrições satisfazem a condição: $a_i^T p^1 < 0$ para $i \notin \mathcal{W}_1$.

$$a_1^T p^1 = \begin{bmatrix} -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1,12 \\ -2,24 \end{bmatrix} = 1,12 - 2,24 = -1,12 < 0;$$

$$a_2^T p^1 = \begin{bmatrix} 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1,12 \\ -2,24 \end{bmatrix} = -1,12 - 4,48 = -5,6 < 0;$$

$$a_4^T p^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1,12 \\ -2,24 \end{bmatrix} = -1,12 < 0;$$

$$a_5^T p^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1,12 \\ -2,24 \end{bmatrix} = 2,24 > 0.$$

Calculemos os valores de $\frac{b_i - a_i^T x^1}{a_i^T p^1}$, para $i = \{1, 2, 4\}$, sendo $b_i = i$ -ésima linha da matriz b ,

$$\frac{b_1 - a_1^T x^1}{a_1^T p^1} = \frac{-2 - \begin{bmatrix} -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1,5 \\ 0 \end{bmatrix}}{-1,12} = \frac{-2 - (-1,5)}{-1,12} \cong 0,446;$$

$$\frac{b_2 - a_2^T x^1}{a_2^T p^1} = \frac{-2 - \begin{bmatrix} 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1,5 \\ 0 \end{bmatrix}}{-5,6} = \frac{-2 - 1,5}{-5,6} \cong 0,625;$$

$$\frac{b_4 - a_4^T x^1}{a_4^T p^1} = \frac{0 - \begin{bmatrix} 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1,5 \\ 0 \end{bmatrix}}{-1,12} = \frac{-1,5}{-1,12} \cong 1,339.$$

Da Equação (3.58), segue que,

$$\alpha_1 = \min(1, \min\{0,446; 0,625; 1,339\}) = \min\{1; 0,446\} = 0,446,$$

e assim

$$x^2 = x^1 + \alpha_1 p^1 = \begin{bmatrix} 1,5 \\ 0 \end{bmatrix} + 0,446 \begin{bmatrix} -1,12 \\ 2,24 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,5 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0,49952 \\ 0,99904 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,00048 \\ 0,99904 \end{bmatrix}.$$

Como $\alpha_1 < 1$, existe uma restrição de bloqueio (restrição $\{1\}$), então $\mathcal{W}_2 = \{1,3\}$. O processo é repetido até que se encontre $\lambda_i \geq 0$ para todo $i \in \mathcal{W}_k$. Como o procedimento a ser utilizado é análogo ao feito para as iterações 0 e 1, as próximas iterações são descritas de forma simplificada.

Iteração k = 2:

Para esta iteração $x^2 = [1,00048 \ 0,99904]^T$, $\mathcal{W}_2 = \{1,3\}$ e a solução do problema (3.55) é $p^2 = [0 \ 0]^T$. Da Equação (3.59) encontramos os multiplicadores de Lagrange, $\hat{\lambda}_1 = 8,00494$ e $\hat{\lambda}_3 = -3,00254$.

Como $\hat{\lambda}_3 < 0$, retira-se a restrição $\{3\}$ do espaço de trabalho \mathcal{W}_2 e obtém-se $\mathcal{W}_3 = \{1\}$, $x^3 = x^2$.

Iteração k = 3:

Para esta iteração $x^3 = [1,00048 \ 0,99904]^T$, $\mathcal{W}_3 = \{1\}$ e a solução do problema (3.55) é $p^3 = [-0,60077 \ 0,60077]^T$. Da Equação (3.58), tem-se $\alpha_3 = \min(1, \min\{0,5563; 1,6647\}) = 0,5563$ e $x^4 = [0,6663 \ 1,3332]^T$.

Como $\alpha_3 < 1$, tem-se uma restrição de bloqueio (restrição $\{2\}$), então $\mathcal{W}_4 = \{1,2\}$.

Iteração k = 4:

Para esta iteração $x^4 = [0,6663 \ 1,3332]^T$, $\mathcal{W}_4 = \{1,2\}$ e a solução do problema (3.55) é $p^4 = [0 \ 0]^T$. Da Equação (3.59), segue que, $\hat{\lambda}_1 = 3,1112$ e $\hat{\lambda}_2 = 0,4445$. Como os multiplicadores de Lagrange associados as restrições $\{1\}$ e $\{2\}$ são positivos, obtém-se que $x^* = x^4 = [0,6663 \ 1,3332]^T$.

O processo foi interrompido na 4ª iteração, sendo $x^4 = [0,6663 \ 1,3332]^T$ a aproximação ótima encontrada pelo método. Neste ponto, $c_1(x^4) = 0,0005$, $c_2(x^4) = -0,0001$, $c_3(x^4) = 3,0001$, $c_4(x^4) = 0,6663$, $c_5(x^4) = 1,3332$ e $f(x^4) = -8,2229$. Note que, o ponto não é viável pois não satisfaz a restrição c_2 . Para o vetor dos multiplicadores de Lagrange obteve-se $\lambda^4 = [3,1112 \ 0,4445 \ 0 \ 0]^T$.

Capítulo 4

Métodos de Penalidade

O princípio básico dos métodos de penalidade é converter o problema restrito original em uma sequência de subproblemas irrestritos, acrescentando um termo de penalidade à função objetivo. Este termo penaliza, ou seja, aumenta o valor da função objetivo quando as restrições forem violadas. A ideia é combinar a função objetivo e as restrições em uma nova função, denominada *função de penalidade* e, a partir de então, obter soluções aproximadas para o problema original. Este capítulo tem como prioridade estudar duas abordagens deste tipo. O *Método de Penalidade Quadrática*, o qual adiciona-se à função objetivo o quadrado das restrições violadas. O *Método de Penalidade Exata Não Suave*, onde um único problema irrestrito (ao invés de uma sequência) toma o lugar do problema restrito original. O método mais popular deste tipo trabalha com a função de penalidade ℓ_1 . Um tipo diferente de penalidade exata é o Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado, tema do próximo capítulo.

4.1 O Método de Penalidade Quadrática

No Método de Penalidade Quadrática o problema restrito é substituído por uma função de penalidade, que consiste, da função objetivo do problema original acrescida de um termo de penalidade. Este termo de penalidade, referente a cada restrição, é positivo quando a solução atual viola a restrição, ou nulo, caso contrário.

Além disso, os termos de penalidade das restrições violadas, são multiplicados por algum coeficiente positivo μ , denominado fator de penalidade. Quando este valor é elevado, a penalização é mais severa, forçando o mínimo da função de penalidade ficar também cada vez mais próximo da região viável do problema restrito original. Entretanto, é necessário cuidado, pois há um aumento da não suavidade da função de penalidade. É bom ressaltar que frequentemente os mínimos são inviáveis e a viabilidade só pode ser obtida para valores elevados do fator de penalidade.

A função de penalidade mais simples deste tipo é a *função de penalidade quadrática*, onde os termos de penalidade são os quadrados das restrições violadas. A primeira abordagem é descrita considerando um problema com restrição de igualdade, isto é,

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a } c_i(x) = 0, \quad i \in I, \quad (4.1)$$

que é um caso particular do problema (2.1). A função de penalidade quadrática $Q(x; \mu)$ é definida como

$$Q(x; \mu) = f(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in I} [c_i(x)]^2, \quad (4.2)$$

sendo $\mu > 0$ o fator de penalidade. Observe que, $Q(\cdot; \mu) \equiv f(\cdot)$ no conjunto viável, e que em

qualquer ponto fora deste conjunto, o termo de penalidade cresce (sem limite) com o aumento do fator μ . Assim o problema irrestrito (4.2) é uma aproximação para o problema original (4.1).

Para obter o mínimo do problema penalizado (4.2), primeiro considera-se uma sequência de valores $\{\mu_k\}$ com μ_k crescendo à medida que $k \rightarrow \infty$ (por simplicidade será utilizada a notação $\mu_k \uparrow \infty$) e a partir de então obtém-se um mínimo aproximado x^k de $Q(x; \mu_k)$ para cada k . Como os termos de penalidade na função (4.2) são diferenciáveis, é possível usar técnicas de otimização irrestrita para encontrar o valor de x^k .

Exemplo 4.1 Considere novamente o problema (2.8) do Capítulo 2.

$$\min (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \quad \text{sujeito a } x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1 = 0. \quad (4.3)$$

Como já foi visto, no Capítulo 2 este problema possui um ponto de mínimo em $[1 \ 1]^T$. A função de penalidade quadrática é dada por

$$Q(x; \mu) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 + \frac{\mu}{2} [x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1]^2. \quad (4.4)$$

A Figura 4.1 representa as curvas de nível desta função para dois valores de μ . Na Figura 4.1 a) adotou-se $\mu = 0, 1$, sendo o minimizador de Q aproximadamente $[1,6879 \ 1]^T$. Na Figura 4.1 b) adotou-se $\mu = 40$, e o minimizador de Q é aproximadamente $[1,0121 \ 1,0001]^T$. Para obter os mínimos da função irrestrita (4.4) foi utilizado o Toolbox *fminunc* do Matlab[®].

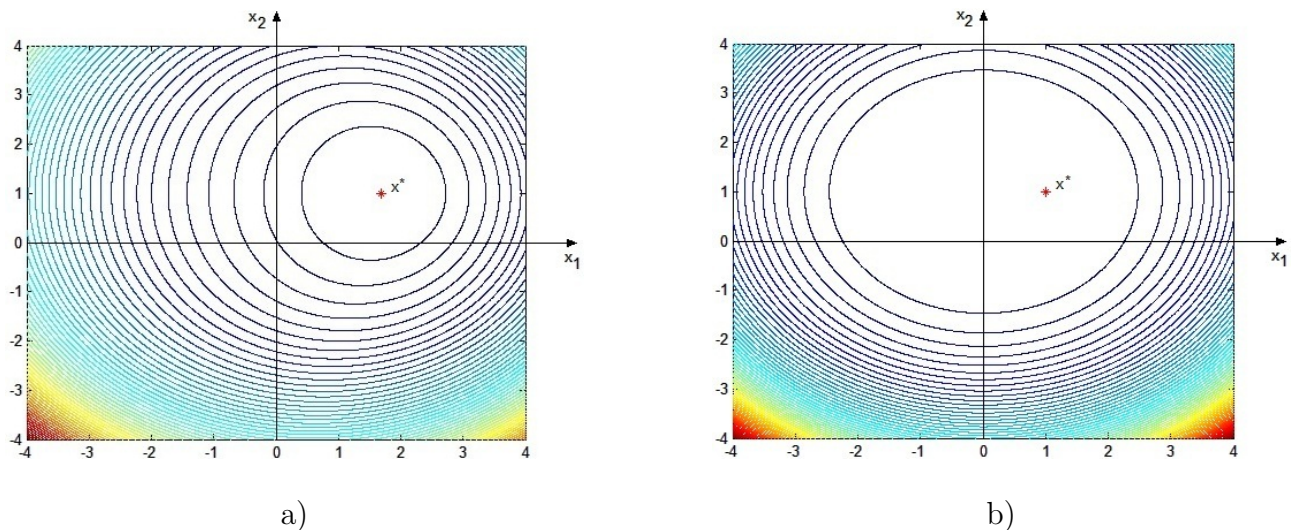


Figura 4.1: Curvas de nível da função (4.4): a) adotando $\mu = 0, 1$; b) adotando $\mu = 40$

Note que, quanto maior o valor de μ , maior será a penalidade aplicada aos pontos que não estão sobre o círculo viável definido por $x_1^2 + (x_2 - 1)^2 = 1$. Maior também a proximidade entre o mínimo do problema penalizado (4.4) com o mínimo do problema original (4.3).

Para o problema geral de otimização, que apresenta restrições de igualdade e desigualdade, a função de penalidade quadrática é definida como:

$$Q(x; \mu) = f(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in I} [c_i(x)]^2 + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in D} [\max\{-c_i(x), 0\}]^2. \quad (4.5)$$

Neste caso Q pode ser menos suave que as funções objetivo e restrições do problema original.

A estrutura geral do algoritmo baseado na função de penalidade quadrática (4.2) é especificado a seguir:

Algoritmo 4.1 (Método de Penalidade Quadrática)

Dados $\mu_0 > 0$, um ponto inicial x^0 e uma tolerância τ para o critério de parada suficientemente pequena;

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

Encontre um minimizador aproximado x^k de $Q(\cdot; \mu_k)$ e pare quando $\|\nabla_x Q(x; \mu_k)\| \leq \tau$;

Se o critério de parada é satisfeito

Pare x^k é a solução aproximada;

Senão

Escolha o novo fator de penalidade $\mu_{k+1} > \mu_k$;

Escolha o novo ponto inicial x^{k+1} ;

Fim

Fim.

O fator μ_k pode ser escolhido com base na minimização de $Q(x; \mu_k)$. Se a minimização se tornar computacionalmente cara pode-se escolher μ_{k+1} levemente superior a μ_k (por exemplo, $\mu_{k+1} = 1,5\mu_k$). Caso contrário, pode-se tentar um aumento mais ambicioso (por exemplo, $\mu_{k+1} = 10\mu_k$).

Não há garantias que o critério de parada $\|\nabla_x Q(x; \mu_k)\| \leq \tau$ seja satisfeito, pois as iterações podem mover a solução para fora da região viável quando o fator de penalidade não é suficiente.

Quando existem apenas restrições de igualdade, $Q(x; \mu_k)$ é diferenciável e a solução pode ser aproximada. A minimização de $Q(x; \mu_k)$ torna-se mais difícil à medida que μ_k aumenta, visto que a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 Q(x; \mu_k)$ torna-se arbitrariamente mal condicionada próximo do ponto de mínimo.

4.1.1 Convergência do Método de Penalidade Quadrática

São descritas algumas propriedades de convergência do Método de Penalidade Quadrática em dois teoremas. Será considerado apenas o problema com restrição de igualdade (4.1), para o qual a função de penalidade quadrática é definida pela Equação (4.2).

Para o primeiro teorema será assumido que a função de penalidade $Q(x; \mu_k)$ tem um ponto de mínimo para cada valor de μ_k .

Teorema 4.1 *Suponha que cada x^k é exatamente o mínimo global de $Q(x; \mu_k)$ definida pela Equação (4.2), e que $\mu_k \uparrow \infty$. Então todo ponto limite x^* da sequência $\{x^k\}$ é uma solução global do problema (4.1).*

Demonstração: Seja \bar{x} a solução global do problema (4.1), isto é,

$$f(\bar{x}) \leq f(x) \text{ para todo } x \text{ com } c_i(x) = 0, \quad i \in I. \quad (4.6)$$

Como x^k minimiza $Q(\cdot; \mu_k)$ para cada k , tem-se que $Q(x^k; \mu_k) \leq Q(\bar{x}; \mu_k)$, donde segue a desigualdade

$$f(x^k) + \frac{\mu_k}{2} \sum_{i \in I} [c_i(x^k)]^2 \leq f(\bar{x}) + \frac{\mu_k}{2} \sum_{i \in I} [c_i(\bar{x})]^2 = f(\bar{x}). \quad (4.7)$$

Reorganizando esta expressão, obtém-se

$$\sum_{i \in I} [c_i(x^k)]^2 \leq \frac{2}{\mu_k} [f(\bar{x}) - f(x^k)]. \quad (4.8)$$

Suponha que x^* é o limite da sequência $\{x^k\}$, então existem infinitas subsequências \mathcal{K} , tais que

$$\lim_{k \in \mathcal{K}} x^k = x^*. \quad (4.9)$$

Fazendo o limite com $k \rightarrow \infty$, $k \in \mathcal{K}$, de ambos os lados da Inequação (4.8) resulta

$$\sum_{i \in I} [c_i(x^*)]^2 = \lim_{k \in \mathcal{K}} \sum_{i \in I} [c_i(x^k)]^2 \leq \lim_{k \in \mathcal{K}} \frac{2}{\mu_k} [f(\bar{x}) - f(x^k)] = 0, \quad (4.10)$$

onde a última igualdade segue da hipótese $\mu_k \uparrow \infty$. Portanto, tem-se que $c_i(x^*) = 0$ para todo $i \in I$, assim x^* é viável. Além disso, considerando o limite $k \rightarrow \infty$ para $k \in \mathcal{K}$ na Inequação (4.7) tem-se da não negatividade de μ_k que

$$f(x^*) \leq f(x^*) + \lim_{k \in \mathcal{K}} \frac{\mu_k}{2} \sum_{i \in I} [c_i(x^k)]^2 \leq f(\bar{x}). \quad (4.11)$$

Como x^* é um ponto viável cujo valor da função objetivo não é maior que o valor da função objetivo na solução global \bar{x} , conclui-se que x^* também é uma solução global. ■

O próximo resultado aborda a propriedade da convergência da sequência, quando são permitidas minimizações inexatas (mas cada vez mais precisas) de $Q(\cdot; \mu_k)$. Em contraste com o Teorema 4.1, demonstra-se que a sequência $\{x^k\}$ pode ser atraída para pontos inviáveis, ou para qualquer ponto KKT (isto é, um ponto satisfazendo as condições necessárias de primeira ordem, Equações 2.38 a 2.42), em vez de um minimizador. Também observa-se que, em certas circunstâncias os termos $\mu_k c_i(x^k)$ podem ser usados como estimativas para os multiplicadores de Lagrange λ_i^* . Esta observação é importante para a futura análise do Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado.

Teorema 4.2 *Suponha que as tolerâncias e os fatores de penalidade no Algoritmo 4.1 satisfazem $\tau_k \rightarrow 0$ e $\mu_k \uparrow \infty$. Então se um ponto limite x^* da sequência $\{x^k\}$ é inviável, ele é, um ponto estacionário da função $\|c(x)\|^2$, sendo $c(x)$ o vetor das restrições. Por outro lado, se um ponto limite é viável e o gradiente das restrições $\nabla c_i(x^*)$ são linearmente independentes, então x^* é um ponto KKT para o problema (4.1). Para tais pontos, para qualquer subsequência \mathcal{K} tal que $\lim_{k \in \mathcal{K}} x^k = x^*$, tem-se que*

$$\lim_{k \in \mathcal{K}} -\mu_k c_i(x^k) = \lambda_i^*, \text{ para todo } i \in I, \quad (4.12)$$

sendo λ^* o vetor dos multiplicadores que satisfaz as condições KKT (2.38 a 2.42) para o problema com restrição de igualdade (4.1).

Demonstração: Derivando $Q(x; \mu_k)$ definida pela Equação (4.2), obtém-se:

$$\nabla_x Q(x^k; \mu_k) = \nabla f(x^k) + \sum_{i \in I} \mu_k c_i(x^k) \nabla c_i(x^k), \quad (4.13)$$

pelo critério de parada do Algoritmo 4.1 resulta que:

$$\left\| \nabla f(x^k) + \sum_{i \in I} \mu_k c_i(x^k) \nabla c_i(x^k) \right\| \leq \tau_k. \quad (4.14)$$

Utilizando a desigualdade $\|\tilde{a}\| - \|\tilde{b}\| \leq \|\tilde{a} + \tilde{b}\|$, segue que

$$\left\| \sum_{i \in I} c_i(x^k) \nabla c_i(x^k) \right\| \leq \frac{1}{\mu_k} [\tau_k + \|\nabla f(x^k)\|]. \quad (4.15)$$

Seja x^* o limite da sequência $\{x^k\}$. Então existe uma subsequência \mathcal{K} tal que $\lim_{k \in \mathcal{K}} x^k = x^*$. Fazendo o limite com $k \rightarrow \infty$, para $k \in \mathcal{K}$ o termo entre colchetes no lado direito da desigualdade aproxima de $\|\nabla f(x^*)\|$. Como $\mu_k \uparrow \infty$, o lado direito aproxima de zero. Considerando o mesmo limite, no lado esquerdo, obtém-se:

$$\sum_{i \in I} c_i(x^*) \nabla c_i(x^*) = 0 \Leftrightarrow c_i(x^*) \nabla c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in I. \quad (4.16)$$

Assim, $c_i(x^*) \neq 0$ se o gradiente das restrições $\nabla c_i(x^*)$ são linearmente dependentes. Neste caso a igualdade (4.16), implica que x^* é um ponto estacionário da função $\|c(x)\|^2$.

Se por outro lado, o gradiente das restrições $\nabla c_i(x^*)$ são linearmente independente, da igualdade (4.16), resulta que $c_i(x^*) = 0$ para todo $i \in I$, neste caso x^* é viável. Logo, a segunda condição necessária de primeira ordem, Equação (2.39) é satisfeita. É necessário verificar também a veracidade da condição (2.38), e mostrar que o limite (4.12) é satisfeito.

Relembrando que $J(x)$ denota a matriz dos gradientes das restrições (também conhecida como Jacobiana), isto é,

$$J(x)^T = [\nabla c_i(x)]_{i \in I}, \quad (4.17)$$

e usando λ^k para denotar o vetor $-\mu_k c(x^k)$, tem-se, como em (4.14), que

$$J(x)^T \lambda^k = \nabla f(x^k) - \nabla_x Q(x^k; \mu_k), \quad \|\nabla_x Q(x^k; \mu_k)\| \leq \tau_k. \quad (4.18)$$

Para todo $k \in \mathcal{K}$ suficientemente grande, a matriz $J(x^k)$ tem posto máximo, assim $J(x^k)J(x^k)^T$ é não singular. Multiplicando (4.18) por $J(x^k)$ e reorganizando, tem-se:

$$\lambda^k = [J(x^k)J(x^k)^T]^{-1} J(x^k) [\nabla f(x^k) - \nabla_x Q(x^k; \mu_k)]. \quad (4.19)$$

Daí, tomando o limite $k \rightarrow \infty$, $k \in \mathcal{K}$, encontra-se que

$$\lim_{k \in \mathcal{K}} \lambda^k = \lambda^* = [J(x^*)J(x^*)^T]^{-1} J(x^*) \nabla f(x^*). \quad (4.20)$$

Fazendo o limite em (4.14) conclui-se que

$$\nabla_x Q(x^*; \mu_k) = \nabla f(x^*) - J(x^*)^T \lambda^* = 0, \quad (4.21)$$

assim λ^* satisfaz a primeira condição KKT (2.38) para o problema (4.1). Portanto, x^* é um ponto KKT para o problema (4.1), com único vetor dos multiplicadores de Lagrange λ^* . ■

O Teorema 4.2 garante que, se um ponto limite x^* não é viável, é pelo menos, um ponto estacionário para a função $\|c(x)\|^2$. No caso em que o problema de programação não linear (4.1) é inviável, o método de penalidade quadrática frequentemente converge para pontos estacionários ou minimizadores de $\|c(x)\|^2$.

4.1.2 Comportamento da matriz Hessiana do Método de Penalidade Quadrática

Normalmente a convergência do método está relacionada ao comportamento da matriz Hessiana da função objetivo próximo à solução. Um dos problemas encontrados pelos algoritmos ocorre quando esta matriz é mal condicionada.

É fácil ver que a matriz Hessiana da função de penalidade quadrática é dada por:

$$\nabla_{xx}^2 Q(x; \mu_k) = \nabla^2 f(x) + \sum_{i \in I} \mu_k c_i(x) \nabla^2 c_i(x) + \mu_k J(x)^T J(x), \quad (4.22)$$

sendo $J(x)$ definida pela Equação (4.17). Quando x está próximo do mínimo de $Q(\cdot; \mu_k)$ e as condições do Teorema 4.2 são satisfeitas, tem-se do limite (4.12) que a soma dos dois primeiros termos no lado direito da Equação (4.22) é aproximadamente igual a matriz Hessiana da função Lagrangeana definida pela Equação (2.37). Isto é,

$$\begin{aligned} \nabla_{xx}^2 Q(x; \mu_k) &\approx \nabla^2 f(x) - \sum_{i \in I} \lambda_i^* \nabla^2 c_i(x) + \mu_k J(x)^T J(x) \\ &\approx \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda^*) + \mu_k J(x)^T J(x), \end{aligned} \quad (4.23)$$

quando x está próximo do minimizador de $Q(\cdot; \mu_k)$.

Uma consequência do mal condicionamento são possíveis imprecisões ao se aplicar o método de Newton para encontrar a direção de busca. Para o método de Penalidade Quadrática, esta direção é obtida solucionando o seguinte sistema

$$\nabla_{xx}^2 Q(x; \mu_k) p = -\nabla_x Q(x; \mu_k). \quad (4.24)$$

Em geral, o mal condicionamento da matriz Hessiana pode gerar erros significativos no cálculo do valor de p , independente da técnica computacional utilizada para encontrar a solução do sistema (4.24).

4.1.3 Aplicação do Método

Exemplo Ilustrativo 1: O Método de Penalidade Quadrática foi aplicado à função (3.70) sujeita às restrições (3.71). A Tabela 4.1 resume os cálculos para o método. O processo inicia-se em $x^0 = [1, 5 \ 0]^T$, e deve ser encerrado quando o critério de parada $CP = \|\nabla_x Q(x^k; \mu_k)\| \leq 0,0001$ for satisfeito. Para este exemplo,

$$\begin{aligned} \nabla_x Q(x; \mu) &= \\ &= \begin{bmatrix} x_1 - x_2 - 2 + \mu \max\{x_1 + x_2 - 2, 0\} - \mu \max\{-x_1 + 2x_2 - 2, 0\} + \\ \quad + 2\mu \max\{2x_1 + x_2 - 3, 0\} - \mu \max\{-x_1, 0\} \\ 2x_2 - x_1 - 6 + \mu \max\{x_1 + x_2 - 2, 0\} + 2\mu \max\{-x_1 + 2x_2 - 2, 0\} + \\ \quad + \mu \max\{2x_1 + x_2 - 3, 0\} - \mu \max\{-x_2, 0\} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Foi adotado $\mu_0 = 1,5$ como fator de penalidade inicial e para as próximas iterações a atualização $\mu_{k+1} = 2\mu_k$. A partir da 17ª iteração os valores de x^k não se alteram, e o critério de parada não é satisfeito. Entretanto, a solução encontrada $x^{17} = [0,6667 \ 1,3333]^T$ satisfaz todas as restrições sendo assim uma boa aproximação para o ótimo. A Figura 4.2 representa o progresso do método.

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	$c_1(x^k)$	$c_2(x^k)$	$c_3(x^k)$	$c_4(x^k)$	$c_5(x^k)$	CP
0	[1,5 0]	-1,8750	0,5	3,5	0	1,5	0	7,5166
1	[1,0137 1,7267]	-10,6424	-0,7403	-0,4396	-0,7540	1,0137	1,7267	4,4762
2	[0,8883 1,5612]	-9,6986	-0,4495	-0,2340	-0,3378	0,8883	1,5612	4,6181
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
5	[0,7461 1,3824]	-8,6287	-0,1285	-0,0187	0,1253	0,7461	1,3824	4,7750
10	[0,6692 1,3349]	-8,2351	-0,0040	-0,0006	0,3268	0,6692	1,3349	4,8064
17	[0,6667 1,3333]	-8,2222	0	0	0,3333	0,6667	1,3333	4,7920

Tabela 4.1: Método de Penalidade Quadrática aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

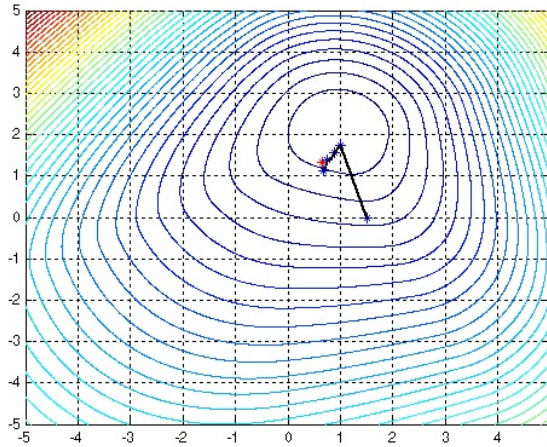


Figura 4.2: Progresso do Método de Penalidade Quadrática aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

4.2 A Função de Penalidade Exata ℓ_1

Algumas funções de penalidade são exatas, isto é, para certas escolhas dos fatores de penalidade, uma única minimização em relação a x pode gerar a solução exata do problema de programação não linear. Esta propriedade é desejável, pois faz com que o desempenho dos métodos de penalidade sejam menos dependentes da estratégia de atualização do fator de penalidade. A função de penalidade quadrática da seção 4.1 não é exata, pois o minimizador geralmente não é o mesmo que a solução do problema não linear para qualquer valor positivo de μ .

Uma função de penalidade não diferenciável muito utilizada para solucionar o problema restrito (2.1) é a função de penalidade ℓ_1 , definida por:

$$\phi_1(x; \mu) = f(x) + \mu \sum_{i \in I} |c_i(x)| + \mu \sum_{i \in D} [\max\{-c_i(x), 0\}]. \quad (4.25)$$

O nome deriva do fato de que o termo de penalidade é μ vezes a norma ℓ_1 da restrição violada. Note que, $\phi_1(x; \mu)$ não é diferenciável em algum x , mesmo quando $c_i(x)$, $i \in I \cup D$ são diferenciáveis. Isto se deve à presença do valor absoluto e das funções $\max\{-c_i(x), 0\}$.

Observação 4.1 A norma da soma $\|\cdot\|_1$ também é conhecida como norma ℓ_1 .

O próximo resultado estabelece a precisão da função de penalidade ℓ_1 .

Teorema 4.3 Suponha que x^* é uma solução local estrita do problema não linear (2.1) para a qual as condições necessárias de primeira ordem do Teorema 2.1 são satisfeitas, com multiplicadores de Lagrange λ_i^* , $i \in I \cup D$. Então x^* é um mínimo local de $\phi_1(x; \mu)$ para todo $\mu > \mu^*$, onde

$$\mu^* = \|\lambda^*\|_\infty = \max |\lambda_i^*| \text{ para } i \in I \cup D. \quad (4.26)$$

Demonstração: Como x^* é uma solução local estrita, existe uma vizinhança \mathcal{V} de x^* , tal que, $f(x^*) < f(x)$ para todo $x \in \mathcal{V}$, com $x \neq x^*$.

Suponha por contradição que x^* não seja um mínimo local da $\phi_1(x; \mu)$, para todo $\mu > \mu^*$. Então, para toda vizinhança \mathcal{V} de x^* , tem-se que

$$\phi_1(x^*; \mu) > \phi_1(x; \mu), \text{ para algum } x \in \mathcal{V}. \quad (4.27)$$

Assim,

$$\begin{aligned} f(x^*) + \mu \sum_{i \in I} |c_i(x^*)| + \mu \sum_{i \in D} [\max\{-c_i(x^*), 0\}] &> \\ > f(x) + \mu \sum_{i \in I} |c_i(x)| + \mu \sum_{i \in D} [\max\{-c_i(x), 0\}]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Das condições do Teorema 2.1, resulta

$$f(x^*) > f(x) + \mu \sum_{i \in I} |c_i(x)| + \mu \sum_{i \in D} [\max\{-c_i(x), 0\}] \geq f(x). \quad (4.29)$$

Donde segue

$$f(x^*) > f(x). \quad (4.30)$$

Mas isto é um absurdo, pois x^* é uma solução local estrita para o problema (2.1). Portanto, x^* é um mínimo local da $\phi_1(x; \mu)$ para todo $\mu > \mu^*$. ■

Observação 4.2 Se a condição suficiente de segunda ordem do Teorema 2.4 também for satisfeita, x^* será um mínimo local estrito da $\phi_1(x; \mu)$.

Em outras palavras, uma solução do problema não linear x^* , que se move fora da região viável é fortemente penalizada, o suficiente para produzir um aumento na função de penalidade que seja superior a $\phi_1(x^*; \mu) = f(x^*)$, forçando assim o minimizador de $\phi_1(\cdot; \mu)$ permanecer próximo a x^* .

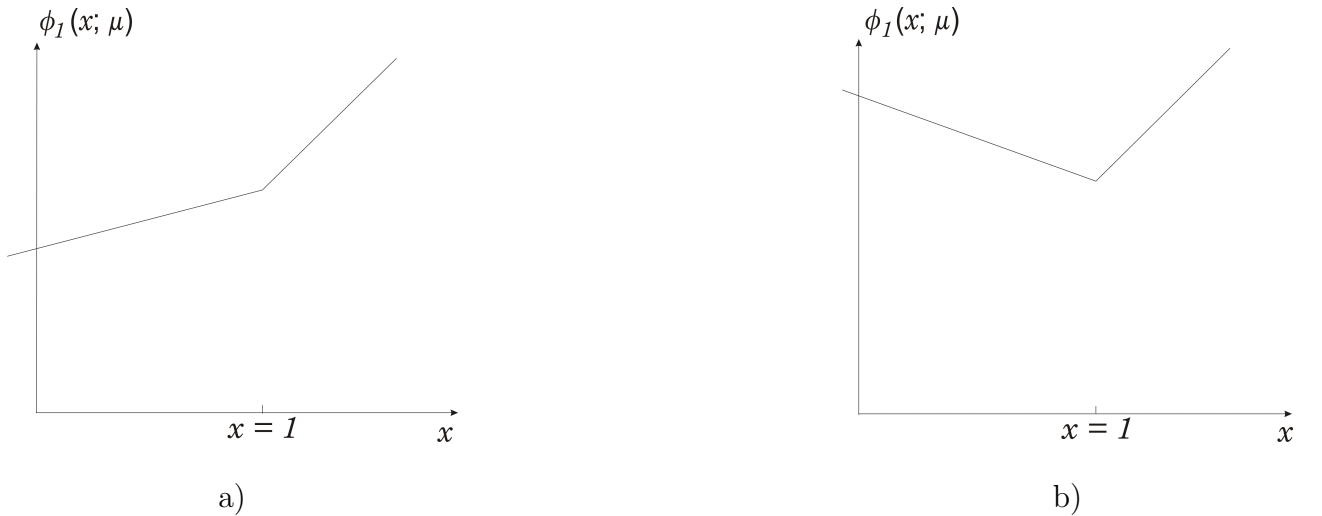


Figura 4.3: Função de penalidade do problema (4.31) considerando: a) $\mu < 1$; b) $\mu > 1$

Exemplo 4.2 Considere o seguinte problema de uma variável

$$\min x \quad \text{sujeito a } x \geq 1, \quad (4.31)$$

cuja solução é $x^* = 1$. Tem-se que

$$\phi_1(x; \mu) = x + \mu \max\{-(x-1), 0\} = \begin{cases} (1-\mu)x + \mu & \text{se } x < 1 \\ x & \text{se } x \geq 1 \end{cases}. \quad (4.32)$$

Como pode ser visto na Figura 4.3, a função de penalidade tem como minimizador $x^* = 1$, quando $\mu > 1$, mas é uma função monótona crescente quando $\mu < 1$.

Como os métodos de penalidade visam minimizar a função de penalidade, é necessário caracterizar os pontos estacionários desta função. Apesar de ϕ_1 não ser diferenciável, possui derivada direcional ao longo de qualquer direção p , denotada por $\mathcal{D}(\phi_1(x; \mu); p)$. A derivada direcional de uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ na direção p é definida por:

$$\mathcal{D}(f(x); p) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \epsilon p) - f(x)}{\epsilon}. \quad (4.33)$$

Definição 4.1 Um ponto $\hat{x} \in \mathbb{R}$ é um ponto estacionário para a função de penalidade $\phi_1(x; \mu)$ se

$$\mathcal{D}(\phi_1(\hat{x}; \mu); p) \geq 0, \quad (4.34)$$

para todo $p \in \mathbb{R}^n$.

Exemplo 4.3 Considere novamente o problema (4.3), no qual a função de penalidade ℓ_1 é

$$\phi_1(x; \mu) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 + \mu |x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1|. \quad (4.35)$$

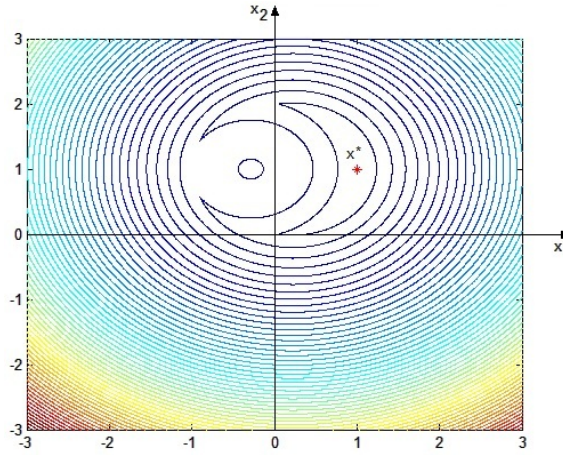


Figura 4.4: Curvas de nível da função (4.35) considerando $\mu = 8$

A Figura 4.4 representa as curvas de nível da função $\phi_1(x; 8)$. A busca pelo mínimo da função irrestrita (4.35) foi realizada usando o Toolbox *fminunc* do Matlab®. O mínimo encontrado $x^* = [1 \ 1]^T$ é exatamente a solução do problema original (4.3). Isto porque, de acordo com o Teorema 4.3, para todo $\mu > |\lambda^*| = 1$, o mínimo da função $\phi_1(x; \mu)$ coincide com o mínimo obtido para o problema original. Observe que, nas curvas de nível existem cantos pontiagudos, estes que por sua vez caracterizam a não suavidade da função $\phi_1(x; 8)$ ao longo do círculo definido pela expressão $x_1^2 + (x_2 - 1)^2 = 1$.

Este exemplo fornece uma motivação para o algoritmo baseado na função de penalidade ℓ_1 .

Algoritmo 4.2 (Método de Penalidade ℓ_1)

Dados $\mu_0 > 0$, tolerância $\tau > 0$ e um ponto inicial x^0 ;

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

Encontre um minimizador aproximado x^k da função $\phi_1(x; \mu_k)$;

Se $|\phi_1(x^{k+1}; \mu_{k+1}) - \phi_1(x^k; \mu_k)| \leq \tau$

Pare x^k é a solução aproximada;

Senão

Escolha o novo fator de penalidade $\mu_{k+1} > \mu_k$;

Escolha o novo ponto inicial x^{k+1} ;

Fim

Fim.

O critério de parada adotado no Algoritmo 4.2 não garante mínimos, mas encontra uma vizinhança do ponto ótimo onde a função quase não sofre modificações. Como a função ϕ_1 não é diferenciável, dentre os critérios de parada vistos no Capítulo 1, este é considerado o mais razoável.

A estratégia para escolha e atualização do fator de penalidade μ_k é crucial para o sucesso prático do Método de Penalidade ℓ_1 . Se o fator de penalidade inicial μ_0 é pequeno, muitos ciclos do Algoritmo 4.2 podem ser necessários para se determinar um valor aproximado. Além disso, a aproximação pode afastar-se da solução x^* nos ciclos iniciais, neste caso o processo de minimizar $\phi_1(x; \mu_k)$ deve ser encerrado, e x^k será redefinido pela aproximação anterior x^{k-1} . Se, por outro lado, μ_k é excessivamente grande, a função de penalidade será de difícil minimização, sendo necessário um número elevado de iterações.

O mais simples (mas nem sempre eficaz) processo de atualizar o fator de penalidade μ_k é fixar um valor inicial e aumentá-lo gradativamente pela multiplicação de uma constante até que a viabilidade seja alcançada.

Exemplo Ilustrativo 1: O Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 foi aplicado à função (3.70) sujeita às restrições (3.71). A Tabela 4.2 resume os cálculos do método partindo de $x^0 = [1, 5 \ 0]^T$. Note que, o processo foi interrompido na 5ª iteração, visto que o critério de parada $CP = |\phi_1(x^5; \mu_5) - \phi_1(x^4; \mu_4)| = 0 < 0,0001$. Assim, $x^5 = [0,6667 \ 1,3333]^T$ é uma boa aproximação para x^* e $f(x^5) = -8,2222$. A Figura 4.5 expressa o progresso do método.

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	$c_1(x^k)$	$c_2(x^k)$	$c_3(x^k)$	$c_4(x^k)$	$c_5(x^k)$	CP
0	[1,5 0]	-1,8750	0,5	3,5	0	1,5	0	—
1	[0,8 1,4]	-8,8400	-0,2	0	0	0,8	1,4	6,6650
2	[0,7999 1,3999]	-8,8400	-0,2	0	0	0,8	1,4	0,3
3	[0,6672 1,3336]	-8,2249	-0,0009	0	0,3319	0,6672	1,3336	0,0203
4	[0,6667 1,3333]	-8,2222	0	0	0,3333	0,6667	1,3333	0,0025
5	[0,6667 1,3333]	-8,2222	0	0	0,3333	0,6667	1,3333	0

Tabela 4.2: Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

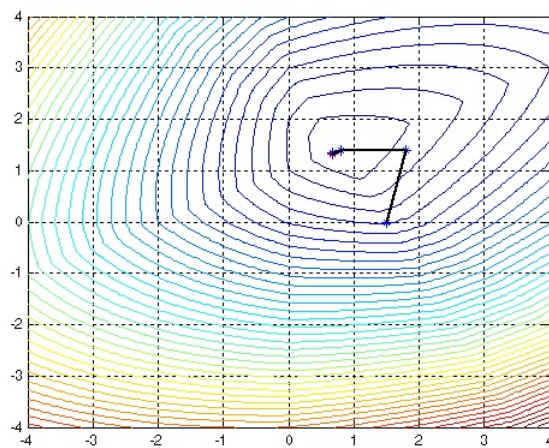


Figura 4.5: Progresso do Método de Penalidade ℓ_1 aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

Capítulo 5

Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado

O Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado (*Method of Lagrange Multipliers Augmented* - *MLMA*) foi proposto por Hestenes (1969) e Powell (1969). Esta técnica deriva do Método de Penalidade Quadrática, mas, considera a inclusão de estimativas dos multiplicadores de Lagrange para evitar o mal condicionamento, comum na função de penalidade quadrática.

No MLMA a *função Lagrangeana Aumentada* é uma combinação dos conceitos das funções Lagrangeana, Equação (2.37) e de penalidade quadrática, Equação (4.2). Em contradição com a função de penalidade quadrática, observa-se que a função Lagrangeana Aumentada, na grande maioria dos casos, preserva a suavidade. Assim, o método normalmente pode ser implementado por algoritmos clássicos de otimização irrestrita, como os discutidos no Capítulo 1.

Nesta seção o estudo do método é apresentado em duas etapas: inicia-se considerando problemas com restrições de igualdade e depois estende-se para o caso com restrições de desigualdade.

5.1 Problemas com restrições de igualdade

Considere um problema com restrições de igualdade

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a } c_i(x) = 0; \quad i \in I. \quad (5.1)$$

Para tais problemas a função Lagrangeana Aumentada é definida por:

$$\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) = f(x) - \sum_{i \in I} \lambda_i c_i(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in I} [c_i(x)]^2, \quad (5.2)$$

sendo μ o fator de penalidade e λ_i os multiplicadores de Lagrange associados às restrições c_i . Observe que, a função (5.2) difere da função Lagrangeana padrão (2.37) pela presença do termo quadrático, por isso, na denominação do método utiliza-se o termo “Aumentado”. E difere da função de penalidade quadrática (4.2) pelo termo que considera os multiplicadores de Lagrange.

Pela condição necessária de otimalidade vista no Capítulo 1 (Teorema 1.2), tem-se que

$$\begin{aligned} 0 = \nabla_x \mathcal{L}_A(x^k, \lambda^k; \mu_k) &= \nabla f(x^k) - \sum_{i \in I} \lambda_i^k \nabla c_i(x^k) + \mu_k \sum_{i \in I} c_i(x^k) \nabla c_i(x^k) \\ &= \nabla f(x^k) - \sum_{i \in I} [\lambda_i^k - \mu_k c_i(x^k)] \nabla c_i(x^k). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Comparando a Equação (5.3) com a condição de otimalidade, Equação (4.21), pode-se deduzir que o multiplicador ótimo será dado por

$$\lambda_i^* \approx \lambda_i^k - \mu_k c_i(x^k), \text{ para todo } i \in I. \quad (5.4)$$

Reescrevendo esta expressão, tem-se

$$c_i(x^k) \approx -\frac{1}{\mu_k}(\lambda_i^* - \lambda_i^k), \text{ para todo } i \in I, \quad (5.5)$$

e sabendo que na região viável $c_i(x^k) = 0$, conclui-se que λ^k deve estar muito próximo do multiplicador ótimo λ^* , o que torna o problema independente do fator de penalidade μ_k . A Equação (5.4) sugere uma fórmula para melhorar a estimativa do vetor dos multiplicadores de Lagrange λ^k , que depende da solução aproximada x^k :

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \mu_k c_i(x^k), \text{ para todo } i \in I. \quad (5.6)$$

Uma descrição formal da versão original do MLMA (Hestenes (1969), Powell (1969)) é dada a seguir:

Dado um vetor de multiplicadores λ^k e um fator de penalidade μ_k , deseja-se minimizar a função $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda^k; \mu_k)$ e conseqüentemente obter uma solução aproximada x^k . Com a solução encontrada, atualiza-se o vetor de multiplicadores usando a Equação (5.6) e escolhe-se um novo fator de penalidade $\mu_{k+1} \geq \mu_k$. O procedimento é repetido até que a solução para o problema original seja encontrada.

Estas ideias motivam o seguinte algoritmo:

Algoritmo 5.1 (MLMA - restrições de igualdade)

Dados $\mu_0 > 0$, uma tolerância $\tau > 0$, um ponto inicial x^0 e λ^0 ;

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

Encontre o mínimo aproximado x^k da função $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda^k; \mu_k)$ e pare quando

$\|\nabla_x \mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k)\| \leq \tau$;

Se o critério de parada é satisfeito

Pare x^k é a solução aproximada;

Senão

Atualize os multiplicadores de Lagrange usando a Equação (5.6);

Escolha o novo fator de penalidade $\mu_{k+1} \geq \mu_k$;

Considere para a próxima iteração o ponto $x^{k+1} = x^k$;

Fim

Fim.

A convergência deste método pode ser obtida independente do aumento do fator μ . O mal condicionamento é portanto um problema menor, se comparado com o Algoritmo 4.1. A tolerância τ pode ser escolhida com base na medida de inviabilidade $\sum_{i \in I} |c(x^k)|$. O vetor de multiplicadores inicial λ^0 é escolhido arbitrariamente, e a sequência $\{\mu_k\}$ pode ser pré-selecionada ou determinada com base nos resultados obtidos durante o processo.

Exemplo 5.1 Considere novamente o problema (4.3). Deseja-se encontrar o mínimo aproximado do problema usando o MLMA. A função Lagrangeana Aumentada é dada por:

$$\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 - \lambda [x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1] + \frac{\mu}{2} [x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1]^2. \quad (5.7)$$

A solução do problema (4.3) é $[1 \ 1]^T$ e o multiplicador de Lagrange ótimo $\lambda^* = -1$. Na k -ésima iteração, considere $\mu_k = 0,1$ (Como na Figura 4.1 a)) e a estimativa do multiplicador $\lambda^k = -0,9$. A Figura 5.1 representa as curvas de nível da função $\mathcal{L}_A(x, -0,9; 0,1)$. Note que os espaços entre as curvas indicam que as condições deste problema é semelhante à função de penalidade quadrática $Q(x; 0,1)$ ilustrada na Figura 4.1 a). Entretanto, o mínimo $x^* \approx [1,0473 \ 1]^T$ está mais próximo da solução $[1 \ 1]^T$ do que o valor aproximado para o mínimo $[1,6879 \ 1]^T$ obtido utilizando a função $Q(x; 0,1)$.

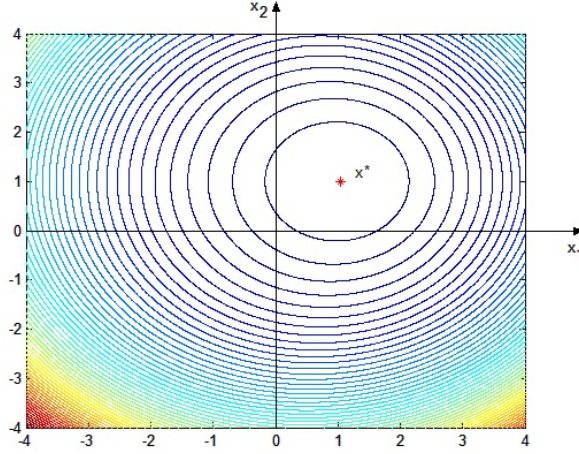


Figura 5.1: Curvas de nível da função $\mathcal{L}_A(x, -0,9; 0,1)$

Este exemplo mostra que a inclusão do termo que envolve o multiplicador de Lagrange na função $\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu)$ pode provocar melhorias significativas para a solução aproximada, se comparado ao Método de Penalidade Quadrática. Sendo assim, esta é uma boa maneira de reformular o problema restrito (5.1).

5.1.1 Propriedades da função Lagrangeana Aumentada

Nesta seção apresenta-se dois resultados que justificam o uso da função Lagrangeana Aumentada e o método dos multiplicadores para solucionar problemas com restrições de igualdade.

O primeiro resultado valida o Algoritmo 5.1 mostrando que ao se ter conhecimento exato do vetor dos multiplicadores de Lagrange λ^* , a solução x^* do problema (5.1) é um mínimo estrito da função $\mathcal{L}_A(x, \lambda^*; \mu)$ para todo μ suficientemente grande. Apesar de na prática não se conhecer o valor exato de λ^* , o Teorema 5.1 sugere que é possível obter uma boa estimativa para o mínimo de $\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu)$, mesmo quando μ não é suficientemente grande, provando que λ é uma boa estimativa para λ^* .

Teorema 5.1 *Se x^* é uma solução local do problema (5.1) na qual o conjunto dos gradientes das restrições $\{\nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{A}(x^*)\}$ é linearmente independente, e a condição suficiente de segunda ordem especificada no Teorema 2.4 é satisfeita para $\lambda = \lambda^*$, então existe uma estimativa para $\bar{\mu}$, tal que, para todo $\mu \geq \bar{\mu}$, x^* é um mínimo local estrito de $\mathcal{L}_A(x, \lambda^*; \mu)$.*

Demonstração: A demonstração deste resultado é baseada no Teorema 1.3. Assim mostra-se que, para todo μ suficientemente grande,

$$\nabla_x \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu) = 0 \text{ e } \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu) \text{ é positiva definida.} \quad (5.8)$$

Como x^* é uma solução local do problema (5.1) e os gradientes das restrições são vetores linearmente independentes, pode-se aplicar o Teorema 2.1 para deduzir que $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0$ e

$c_i(x^*) = 0$ para todo $i \in I$, assim

$$\begin{aligned}
\nabla_x \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu) &= \nabla f(x^*) - \sum_{i \in I} [\lambda_i^* - \mu c_i(x^*)] \nabla c_i(x^*) \\
&= \nabla f(x^*) - \sum_{i \in I} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) \\
&= \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Logo $\nabla_x \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu) = 0$, independente do valor de μ .

Para mostrar a segunda afirmação em (5.8) seja $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu)$ a matriz Hessiana de $\mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu)$ e considere J a matriz dos gradientes das restrições em x^* , Equação (4.17). Tem-se que

$$\begin{aligned}
\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu) &= \nabla_{xx}^2 f(x^*) - \sum_{i \in I} \lambda_i \nabla_{xx}^2 c_i(x^*) + \mu \sum_{i \in I} \nabla c_i(x^*) \nabla c_i(x^*)^T \\
&= \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \mu \sum_{i \in I} \nabla c_i(x^*) \nabla c_i(x^*)^T \\
&= \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \mu J^T J.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Suponha por contradição que $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu)$ não é positiva definida para $\mu \geq \bar{\mu}$. Então dado $\mu_k = k$ para algum inteiro $k \geq 1$, existe um vetor w^k com $\|w^k\| = 1$, tal que

$$0 \geq (w^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; k) w^k = (w^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w^k + k \|Jw^k\|_2^2. \tag{5.11}$$

Os vetores $\{w^k\}$ estão em um conjunto compacto (a superfície da esfera unitária), assim possuem um ponto de acumulação, a saber w . A medida que $k \rightarrow \infty$, o termo $(w^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w^k$ aproxima-se de uma constante, $w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w$. Logo,

$$\|Jw^k\|_2^2 \leq -\left(\frac{1}{k}\right) (w^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w^k \rightarrow 0, \text{ com } k \rightarrow \infty. \tag{5.12}$$

O limite (5.12) implica que $Jw = 0$. Por outro lado, reorganizando a expressão (5.11), segue que

$$(w^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w^k \leq -k \|Jw^k\|_2^2 \leq 0, \tag{5.13}$$

e aplicando o limite obtém-se $w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w \leq 0$. Mas isto contradiz a condição suficiente de segunda ordem do Teorema 2.4. Logo $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \mu)$ é positiva definida para todo μ suficientemente grande. Portanto pelo Teorema 1.3, x^* é um mínimo local estrito da função $\mathcal{L}_A(x, \lambda^*; \mu)$ para todo $\mu \geq \bar{\mu}$. ■

O segundo resultado (Teorema 5.3), dado por Bertsekas (1982), descreve uma situação mais realista, ou seja, $\lambda \neq \lambda^*$. Este teorema fornece condições sob as quais existe um minimizador de $\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu)$ que aproxima-se de x^* .

Na demonstração do Teorema 5.3 utiliza-se o Segundo Teorema da Função Implícita enunciado a seguir.

Teorema 5.2 (Segundo Teorema da Função Implícita) *Seja $f : \bar{U} \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função de classe C^p ($p \geq 1$) definida no aberto $\bar{U} \subset \mathbb{R}^{m+n}$ e \bar{X} um subconjunto compacto de \mathbb{R}^m . Se um ponto $(\bar{x}, \bar{y}) \in \bar{U}$ é tal que $f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ e a matriz $\nabla_y f(\bar{x}, \bar{y})$ é não singular, então existem escalares $\epsilon > 0$, $\delta > 0$, e uma função $\varphi : B(\bar{X}; \epsilon) \rightarrow B(\bar{Y}; \delta)$ de classe C^p tal que, $\bar{y} = \varphi(\bar{x})$ para todo $\bar{x} \in \bar{X}$ e $f(x, \varphi(x)) = 0$ para todo $x \in B(\bar{X}; \epsilon)$. Sendo $B(\bar{X}; \epsilon) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - a\| < \epsilon, a \in \bar{X}\}$. A função φ é única no sentido que se $x \in B(\bar{X}; \epsilon)$, $y \in B(\bar{Y}; \delta)$ e $f(x, y) = 0$, então $y = \varphi(x)$.*

A demonstração deste teorema pode ser encontrada em Hestenes (1966).

Lema 5.1 *Sejam x^* o mínimo local do problema com restrição de igualdade e λ^* o multiplicador de Lagrange associado, tais que, a condição suficiente de segunda ordem (Teorema 2.4) é satisfeita. Considere o escalar $\bar{\mu}$ como no Teorema 5.1, tal que*

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*; \bar{\mu}) > 0. \quad (5.14)$$

Então, para todo $\gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$ e $i \in I$ a matriz

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) & -\nabla c_i(x^*) \\ \nabla c_i(x^*)^T & \gamma \mathcal{I} \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

é não singular. Sendo \mathcal{I} a matriz identidade.

Demonstração: Seja $\gamma = 0$. Suponha por contradição que a matriz (5.15) seja singular, então existem vetores não nulos $y \in \mathbb{R}^n$ e $z \in \mathbb{R}^m$ tais que

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) & -\nabla c_i(x^*) \\ \nabla c_i(x^*)^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = 0, \quad (5.16)$$

ou equivalentemente

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)y - \nabla c_i(x^*)z = 0, \quad (5.17)$$

$$\nabla c_i(x^*)^T y = 0. \quad (5.18)$$

Multiplicando (5.17) por y^T e usando (5.18), obtém-se

$$y^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)y = 0. \quad (5.19)$$

Logo, pelo Teorema 2.4 deve ocorrer $y = 0$. Como os gradientes das restrições são linearmente independentes, da Equação (5.17) resulta que $z = 0$, o que contradiz o fato de que $y \neq 0$ e $z \neq 0$. Portanto a matriz (5.15) é não singular.

Seja $\gamma \in (0, 1/\bar{\mu}]$ e $i \in I$. Como antes, suponha que existam vetores $y \in \mathbb{R}^n$ e $z \in \mathbb{R}^m$, tais que

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) & -\nabla c_i(x^*) \\ \nabla c_i(x^*)^T & \gamma \mathcal{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = 0 \quad (5.20)$$

ou

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)y - \nabla c_i(x^*)z = 0, \quad (5.21)$$

$$\nabla c_i(x^*)^T y + \gamma z = 0. \quad (5.22)$$

Substituindo o valor de z obtido pela Equação (5.22) em (5.21), segue

$$\left[\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \frac{1}{\gamma} \nabla c_i(x^*) \nabla c_i(x^*)^T \right] y = 0. \quad (5.23)$$

Para $\gamma = 1/\mu_k$ obtém-se que $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*, \mu_k)y = 0$. Por hipótese, $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^*, \lambda^*, \mu_k) > 0$ para $\mu_k \geq \bar{\mu}$, assim $y = 0$. Da Equação (5.22), segue que $z = 0$, o que contradiz o fato de que $y \neq 0$ e $z \neq 0$. Portanto, a matriz (5.15) é não singular para todo $\gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$. ■

Teorema 5.3 *Suponha que as hipóteses do Teorema 5.1 são satisfeitas para x^* e λ^* e que $\bar{\mu}$ é escolhido de acordo com o mesmo teorema. Então existem escalares positivos δ , ϵ e M tais que as seguintes afirmações são válidas:*

(i) *Para todo λ^k e μ_k satisfazendo*

$$\|\lambda^k - \lambda^*\| \leq \mu_k \delta, \quad \mu_k \geq \bar{\mu}, \quad (5.24)$$

o problema

$$\min_x \mathcal{L}_A(x, \lambda^k; \mu_k) \quad \text{sujeito a } \|x - x^*\| \leq \epsilon \quad (5.25)$$

tem uma única solução x^k . Além disso

$$\|x^k - x^*\| \leq M \frac{\|\lambda^k - \lambda^*\|}{\mu_k}. \quad (5.26)$$

(ii) *Para todo λ^k e μ_k satisfazendo (5.24), tem-se*

$$\|\lambda^{k+1} - \lambda^*\| \leq M \frac{\|\lambda^k - \lambda^*\|}{\mu_k}, \quad (5.27)$$

sendo λ^{k+1} definido pela Equação (5.6).

(iii) *Para todo λ^k e μ_k satisfazendo (5.24), a matriz $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^k, \lambda^k; \mu_k)$ é positiva definida e os gradientes das restrições $\nabla c_i(x^k)$, $i \in I$, são linearmente independentes.*

Demonstração: Para $\mu_k > 0$, considere o sistema de equações nas variáveis $(x, \lambda^{k+1}, \lambda^k, \mu_k)$

$$\nabla f(x) - \nabla c_i(x) \lambda^{k+1} = 0, \quad c_i(x) - \frac{(\lambda^k - \lambda^{k+1})}{\mu_k} = 0, \quad \text{com } i \in I. \quad (5.28)$$

Considerando as novas variáveis $\bar{t} \in \mathbb{R}^m$, $\gamma \in \mathbb{R}$ definidas por:

$$\bar{t} = \frac{(\lambda^k - \lambda^*)}{\mu_k}, \quad \gamma = \frac{1}{\mu_k}, \quad (5.29)$$

é possível escrever o sistema (5.28) como

$$\nabla f(x) - \nabla c_i(x) \lambda^{k+1} = 0, \quad c_i(x) - \bar{t} - \gamma \lambda^* + \gamma \lambda^{k+1} = 0. \quad (5.30)$$

Para $\bar{t} = 0$ (vetor nulo) e $\gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$, o sistema (5.30) tem solução $x = x^*$ e $\lambda^{k+1} = \lambda^*$. A matriz Jacobiana do sistema (5.30) com relação a (x, λ^{k+1}) nesta solução é

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) & -\nabla c_i(x^*) \\ \nabla c_i(x^*)^T & \gamma \mathcal{I} \end{bmatrix}. \quad (5.31)$$

Pelo Lema 5.1 a matriz Jacobiana (5.31) é invertível para todo $\gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$. Logo é possível aplicar o Segundo Teorema da Função Implícita para o sistema (5.30), considerando $\mathcal{T} = \{(0, \gamma) \mid \gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]\}$ o conjunto compacto. Então, existem escalares $\epsilon > 0$ e $\delta > 0$ e únicas funções continuamente diferenciáveis

$$\hat{x}(\bar{t}, \gamma), \quad \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma), \quad (5.32)$$

definidas sobre $B(\mathcal{T}; \delta) = \{(\bar{t}, \gamma) \mid \|(\bar{t}, \gamma) - k\| < \delta, \text{ para qualquer } k \in \mathcal{T}\}$, satisfazendo

$$\left(\|\hat{x}(\bar{t}, \gamma) - x^*\|^2 + \|\hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) - \lambda^*\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} < \epsilon, \quad (5.33)$$

para todo $(\bar{t}, \gamma) \in B(\mathcal{T}; \delta)$ e o sistema

$$\nabla f(\hat{x}(\bar{t}, \gamma)) - \nabla c_i(\hat{x}(\bar{t}, \gamma)) \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) = 0, \quad c_i(\hat{x}(\bar{t}, \gamma)) - \bar{t} - \gamma \lambda^* + \gamma \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) = 0. \quad (5.34)$$

Além disso, δ e ϵ podem ser escolhidos tais que o conjunto $\{\nabla c_i(\hat{x}(\bar{t}, \gamma)), i \in I\}$ seja linearmente independente e

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(\hat{x}(\bar{t}, \gamma), \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma)) + \mu_k \nabla c_i(\hat{x}(\bar{t}, \gamma)) \nabla c_i(\hat{x}(\bar{t}, \gamma))^T > 0, \quad (5.35)$$

para $(\bar{t}, \gamma) \in B(\mathcal{T}; \delta)$, $\mu_k \geq \bar{\mu}$. Sabendo que $\|\lambda^k - \lambda^*\| \leq \mu_k \delta$, $\mu_k \geq \bar{\mu}$, defina

$$x^k = \hat{x}(\bar{t}, \gamma) = \hat{x} \left(\frac{\lambda^k - \lambda^*}{\mu_k}, \frac{1}{\mu_k} \right), \quad \lambda^{k+1} = \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) = \hat{\lambda} \left(\frac{\lambda^k - \lambda^*}{\mu_k}, \frac{1}{\mu_k} \right). \quad (5.36)$$

Da Inequação (5.35), obtém-se, para λ^k e μ_k , satisfazendo $\|\lambda^k - \lambda^*\| \leq \mu_k \delta$, que

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^k, \lambda^k; \mu_k) = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^{k+1}) + \mu_k \nabla c_i(x^k) \nabla c_i(x^k)^T > 0. \quad (5.37)$$

Portanto, $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x^k, \lambda^k; \mu_k)$ é positiva definida.

Agora resta mostrar as desigualdades (5.26) e (5.27). Para isto, derivando o sistema (5.34) em relação a \bar{t} e γ , resulta que

$$\begin{bmatrix} \nabla_{\bar{t}} \hat{x}(\bar{t}, \gamma)^T & \nabla_{\gamma} \hat{x}(\bar{t}, \gamma)^T \\ \nabla_{\bar{t}} \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma)^T & \nabla_{\gamma} \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma)^T \end{bmatrix} = \mathcal{U}(\bar{t}, \gamma) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \mathcal{I} & \lambda^* - \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) \end{bmatrix}, \quad (5.38)$$

sendo

$$\mathcal{U}(\bar{t}, \gamma) = \begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(\hat{x}(\bar{t}, \gamma), \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma)) & -\nabla c_i(\hat{x}(\bar{t}, \gamma)) \\ \nabla c_i(\hat{x}(\bar{t}, \gamma))^T & \gamma \mathcal{I} \end{bmatrix}^{-1}. \quad (5.39)$$

Em (5.38), multiplicando \bar{t} e γ por ξ , com $\xi \in [0, 1]$, vem:

$$\begin{bmatrix} \nabla_{\bar{t}} \hat{x}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T & \nabla_{\gamma} \hat{x}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \\ \nabla_{\bar{t}} \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T & \nabla_{\gamma} \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \end{bmatrix} = \mathcal{U}(\xi \bar{t}, \xi \gamma) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \mathcal{I} & \lambda^* - \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma) \end{bmatrix}. \quad (5.40)$$

Assim, para todo (\bar{t}, γ) , tais que $\|\bar{t}\| < \delta$ e $\gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$ tem-se

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \nabla_{\bar{t}} \hat{x}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T & \nabla_{\gamma} \hat{x}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \\ \nabla_{\bar{t}} \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T & \nabla_{\gamma} \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{t} \\ \gamma \end{bmatrix} &= \mathcal{U}(\xi \bar{t}, \xi \gamma) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \mathcal{I} & \lambda^* - \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{t} \\ \gamma \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \nabla_{\bar{t}} \hat{x}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \bar{t} + \nabla_{\gamma} \hat{x}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \gamma \\ \nabla_{\bar{t}} \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \bar{t} + \nabla_{\gamma} \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma)^T \gamma \end{bmatrix} &= \mathcal{U}(\xi \bar{t}, \xi \gamma) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \mathcal{I} & \lambda^* - \hat{\lambda}(\xi \bar{t}, \xi \gamma) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{t} \\ \gamma \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Considere $\mathcal{G} : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^n$ definida por $\mathcal{G}(\xi) = \hat{x}(\xi\bar{t}, \xi\gamma)$. Então a derivada de \mathcal{G} em relação a ξ é dada por

$$\mathcal{G}'(\xi) = \nabla_{\bar{t}}\hat{x}(\xi\bar{t}, \xi\gamma)^T \bar{t} + \nabla_{\gamma}\hat{x}(\xi\bar{t}, \xi\gamma)^T \gamma. \quad (5.42)$$

Integrando (5.41) em relação a ξ ,

$$\begin{aligned} \int_0^1 \begin{bmatrix} \nabla_{\bar{t}}\hat{x}(\xi\bar{t}, \xi\gamma)^T \bar{t} + \nabla_{\gamma}\hat{x}(\xi\bar{t}, \xi\gamma)^T \gamma \\ \nabla_{\bar{t}}\hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma)^T \bar{t} + \nabla_{\gamma}\hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma)^T \gamma \end{bmatrix} d\xi &= \int_0^1 \mathcal{U}(\xi\bar{t}, \xi\gamma) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \mathcal{I} & \lambda^* - \hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{t} \\ \gamma \end{bmatrix} d\xi \\ \begin{bmatrix} \hat{x}(\bar{t}, \gamma) - \hat{x}(0, 0) \\ \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) - \hat{\lambda}(0, 0) \end{bmatrix} &= \int_0^1 \mathcal{U}(\xi\bar{t}, \xi\gamma) \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{t} + (\lambda^* - \hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma))\gamma \end{bmatrix} d\xi. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Para $\bar{t} = 0$ (vetor nulo) e $\gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$ o sistema (5.34) tem solução $\hat{x}(0, 0) = x^*$ e $\hat{\lambda}(0, 0) = \lambda^*$, assim

$$\begin{bmatrix} \hat{x}(\bar{t}, \gamma) - x^* \\ \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) - \lambda^* \end{bmatrix} = \int_0^1 \mathcal{U}(\xi\bar{t}, \xi\gamma) \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{t} + (\lambda^* - \hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma))\gamma \end{bmatrix} d\xi. \quad (5.44)$$

Como a matriz (5.31) é não singular para todo $\gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$, segue que, para δ suficientemente pequeno a matriz $\mathcal{U}(\bar{t}, \gamma)$ é uniformemente limitada sobre $\{(\bar{t}, \gamma) \mid \|\bar{t}\| < \delta, \gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]\}$. Seja então ρ tal que $\|\mathcal{U}(\bar{t}, \gamma)\| \leq \rho$, para todo $\|\bar{t}\| < \delta, \gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$, e se necessário, considere δ suficientemente pequeno tal que $\rho\delta < 1$. Então, de (5.44), segue que

$$\left(\|\hat{x}(\bar{t}, \gamma) - x^*\|^2 + \|\hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) - \lambda^*\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \rho \left(\|\bar{t}\| + \max_{0 \leq \xi \leq 1} \|\hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma) - \lambda^*\| \gamma \right). \quad (5.45)$$

Assim, para todo (\bar{t}, γ) com $\|\bar{t}\| < \delta, \gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$,

$$\|\hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) - \lambda^*\| \leq \rho\|\bar{t}\| + \rho\gamma \max_{0 \leq \xi \leq 1} \|\hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma) - \lambda^*\|. \quad (5.46)$$

No lado esquerdo da desigualdade (5.46) multiplicando \bar{t} e γ por ξ , com $\xi \in [0, 1]$, obtém-se que

$$\max_{0 \leq \xi \leq 1} \|\hat{\lambda}(\xi\bar{t}, \xi\gamma) - \lambda^*\| \leq \frac{\rho}{1 - \rho\gamma} \|\bar{t}\|. \quad (5.47)$$

Combinando as desigualdades (5.45) e (5.47), resulta que, para todo (\bar{t}, γ) com $\|\bar{t}\| < \delta, \gamma \in [0, 1/\bar{\mu}]$ e $\gamma \leq \delta$,

$$\left(\|\hat{x}(\bar{t}, \gamma) - x^*\|^2 + \|\hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) - \lambda^*\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\rho + \frac{\rho^2\gamma}{1 - \rho\gamma} \right) \|\bar{t}\| \leq \frac{\rho}{1 - \rho\delta} \|\bar{t}\|. \quad (5.48)$$

Tomando se necessário δ suficientemente pequeno, segue que

$$\left(\|\hat{x}(\bar{t}, \gamma) - x^*\|^2 + \|\hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma) - \lambda^*\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq M\|\bar{t}\|. \quad (5.49)$$

Usando (5.29) em (5.49) e escrevendo $x^k = \hat{x}(\bar{t}, \gamma)$ e $\lambda^{k+1} = \hat{\lambda}(\bar{t}, \gamma)$, tem-se que, para todo λ^k e μ_k com $\|\lambda^k - \lambda^*\| \leq \mu_k\delta$ as desigualdades são satisfeitas

$$\|x^k - x^*\| \leq M \frac{\|\lambda^k - \lambda^*\|}{\mu_k}, \quad \|\lambda^{k+1} - \lambda^*\| \leq M \frac{\|\lambda^k - \lambda^*\|}{\mu_k}. \quad (5.50)$$

Assim as desigualdades (5.26) e (5.27) são válidas com $M = \rho/(1 - \rho\delta)$ para todo x^k e λ^k tal que $\|\lambda^k - \lambda^*\| \leq \mu_k \delta$. O que completa a demonstração. ■

Este teorema ilustra algumas propriedades interessantes da função Lagrangeana Aumentada. O limite (5.26) mostra que x^k estará próximo de x^* se λ^k for exatamente λ^* ou se o fator de penalidade μ_k for suficientemente grande. Assim, o MLMA fornece duas maneiras de melhorar a precisão de x^k , enquanto o método de Penalidade Quadrática, fornece apenas uma opção: aumentar o valor de μ_k . O limite (5.27) estabelece que, localmente, é possível garantir melhorias na precisão do multiplicador escolhendo para μ_k um valor suficientemente grande. A observação final do teorema mostra que a condição suficiente de segunda ordem para otimização irrestrita (Teorema 1.3) também é satisfeita, assim é possível obter bons resultados aplicando as técnicas de otimização irrestrita para minimizar a função Lagrangeana Aumentada.

5.2 Problemas com restrições de desigualdade

Nesta seção apresenta-se um estudo do procedimento prático do MLMA, para problemas com restrições de desigualdade. Para isto, considere o seguinte problema não linear:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a } c_i(x) \geq 0, i \in D. \quad (5.51)$$

O primeiro passo é converter o problema (5.51) em outro equivalente, que apresenta apenas restrições de igualdade. Uma maneira simples de fazer isto é introduzir variáveis de folga s_i , para cada restrição de desigualdade. Logo, a desigualdade geral $c_i(x) \geq 0$ é substituída por $c_i(x) - s_i^2 = 0$, para $i \in D$. E o problema (5.51) é reescrito como,

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeito a } c_i(x) - s_i^2 = 0, i \in D. \quad (5.52)$$

As restrições do problema (5.52) são de igualdade e pelo que foi visto na seção 5.1 a função Lagrangeana Aumentada será definida por:

$$\mathcal{L}_A(x, s, \lambda^k; \mu_k) = f(x) - \sum_{i \in D} \lambda_i [c_i(x) - s_i^2] + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in D} [c_i(x) - s_i^2]^2. \quad (5.53)$$

Claramente, a função (5.53) depende da variável $x \in \mathbb{R}^n$ e das variáveis de folga s_i para $i \in D$.

Durante o processo de otimização verifica-se que a inclusão de s_i aumenta muito o número de variáveis de projeto, tornando o processo muito lento na prática. Assim, será feita a dedução de outra função Lagrangeana Aumentada que independe das variáveis s_i .

Voltando ao Algoritmo 5.1, o primeiro passo do MLMA é encontrar o mínimo aproximado da função $\mathcal{L}_A(x, s, \lambda^k; \mu_k)$, isto é

$$\min \mathcal{L}_A(x, s, \lambda^k; \mu_k). \quad (5.54)$$

A função (5.53) é quadrática na variável s_i^2 para $i \in D$, logo a minimização (5.54) pode ser feita em cada s_i independentemente de x . Assim, minimizar $\mathcal{L}_A(x, s, \lambda^k; \mu_k)$ com relação às variáveis s_i é equivalente a

$$\min \left(\lambda_i [c_i(x) - s_i^2] + \frac{\mu}{2} [c_i(x) - s_i^2]^2 \right). \quad (5.55)$$

A função a ser minimizada é quadrática na variável s_i^2 e o candidato a minimizador global é o escalar s_i que anula a derivada, ou seja

$$\begin{aligned} -2\lambda_i s_i - 2s_i \mu [c_i(x) - s_i^2] &= 0 \\ \Rightarrow s_i [-\lambda_i - \mu c_i(x) + \mu s_i^2] &= 0. \end{aligned} \quad (5.56)$$

Logo,

$$s_i = 0 \text{ ou } s_i^2 = c_i(x) + \frac{\lambda_i}{\mu}. \quad (5.57)$$

Assim, a solução do problema (5.55) pode ser escrita como

$$s_i = \begin{cases} 0 & , \text{ se } c_i(x) + \lambda_i/\mu < 0 \\ \sqrt{c_i(x) + \lambda_i/\mu} & , \text{ caso contrário} \end{cases}, \text{ para } i \in D. \quad (5.58)$$

Observe que,

$$\begin{aligned} c_i(x) - s_i^2 &= c_i(x) - \max\{0, c_i(x) + \lambda_i/\mu\} \\ &= \max\{c_i(x), -\lambda_i/\mu\}. \end{aligned} \quad (5.59)$$

Das Equações (5.53) e (5.59) a função Lagrangeana Aumentada que independe das variáveis de folga s_i será definida como

$$\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) = f(x) - \sum_{i \in D} \lambda_i \psi_i + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in D} \psi_i^2, \quad (5.60)$$

onde $\psi_i = \max \left[c_i(x), -\frac{\lambda_i}{\mu} \right]$.

A atualização dos multiplicadores λ_i é baseada na Equação (5.6) e dada por:

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \mu_k \psi_i. \quad (5.61)$$

Fazendo a generalização da função Lagrangeana Aumentada para o problema (2.1) resulta que:

$$\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) = f(x) - \sum_{j \in I} \lambda_j c_j(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{j \in I} [c_j(x)]^2 - \sum_{i \in D} \lambda_i \psi_i + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in D} \psi_i^2, \quad (5.62)$$

onde λ_j e λ_i são respectivamente os multiplicadores de Lagrange associados às restrições de igualdade e desigualdade. A atualização dos mesmos é dada pelas Equações (5.6) e (5.61).

Exemplo Ilustrativo 1: O Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado foi aplicado à função (3.70) sujeita às restrições (3.71). A Tabela 5.1 resume os cálculos do método partindo de $x^0 = [1, 5 \ 0]^T$. Para este exemplo, considerou-se $\mu_0 = 0,2$ como fator de penalidade inicial, sendo atualizado por $\mu_{k+1} = 1,2\mu_k$. E $CP = |\mathcal{L}_A(x^{k+1}, \lambda^{k+1}; \mu_{k+1}) - \mathcal{L}_A(x^k, \lambda^k; \mu_k)| \leq 0,0001$ como critério de parada. Foi adotado este critério pois, para problemas que apresentam restrições de desigualdade a função (5.62) não é diferenciável.

O processo foi realizado considerando o número máximo de iteração igual a 200. A partir da 17ª iteração os valores de x^k não se alteram e o critério de parada não é satisfeito. Obteve-se $x^{17} = [0,6665 \ 1,3334]^T$ como aproximação da solução x^* sendo $f(x^{17}) = -6,4446$ o valor ótimo. A Figura 5.2 expressa o progresso do método.

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	$c_1(x^k)$	$c_2(x^k)$	$c_3(x^k)$	$c_4(x^k)$	$c_5(x^k)$	CP
0	[1,5 0]	-1,8750	0,5	3,5	0	1,5	0	—
1	[0,2560 1,3214]	-6,3233	0,4226	-0,3869	1,1667	0,2560	1,3214	2,8530
2	[0,5803 1,1791]	-5,9924	0,2405	0,2221	0,6602	0,5803	1,1791	0,6492
3	[0,6584 1,1660]	-5,9688	0,1756	0,3264	0,5173	0,6584	1,1660	0,5911
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
5	[0,6839 1,1812]	-6,0180	0,1350	0,3215	0,4511	0,6839	1,1812	0,8322
11	[0,6715 1,3361]	-6,4518	-0,0076	-0,0007	0,3210	0,6715	1,3361	547,5053
17	[0,6665 1,3334]	-6,4446	0,0001	-0,0003	0,3336	0,6665	1,3334	$0,7510 \times 10^6$

Tabela 5.1: Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

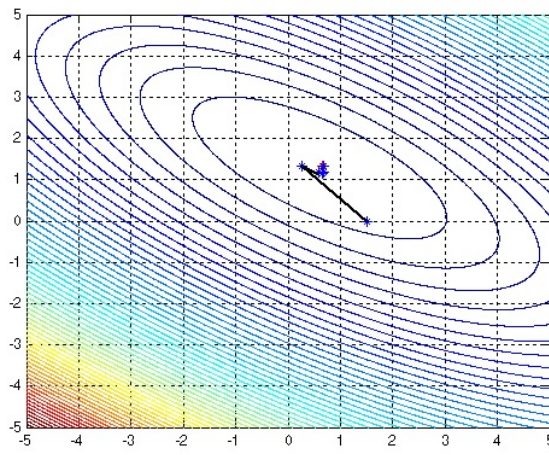


Figura 5.2: Progresso do Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

Capítulo 6

Programação Quadrática Sequencial

O Método de Programação Quadrática Sequencial (*Sequential Quadratic Programming - SQP*) é uma técnica de otimização sequencial, na qual a direção de busca é obtida resolvendo-se subproblemas de Programação Quadrática (QP). A função objetivo do problema original é substituída por uma aproximação quadrática e as restrições por equações ou inequações lineares.

Este método foi sugerido inicialmente por Wilson (1963) e se tornou popular por volta de 1970 com os estudos de Garcia-Palomares e Mangasarian (1976), Han (1976), Han (1977), Powell (1977), Powell (1978), dentre outros. São considerados um dos métodos mais eficientes para otimização não linear com restrições, sendo apropriados tanto para pequenos quanto grandes problemas.

Como se emprega o método de Newton para resolver as condições KKT do problema original, o método possui uma taxa de convergência local quadrática, mas não global. Para reverter esta situação é necessário utilizar uma estratégia de globalização, como *busca linear (line search)* ou *região de confiança (trust region)*. Este capítulo considera apenas a busca linear, cuja implementação no contexto da SQP é um pouco mais simples. A estratégia baseada na região de confiança pode ser consultada em Nocedal e Wright (2000).

O estudo do método de SQP é feito em duas etapas: apresentação do algoritmo local introduzindo o cálculo da direção de busca assim como uma técnica de aproximação da matriz Hessiana; apresentação do algoritmo global baseado na busca linear.

6.1 Formulação do subproblema quadrático

Considere inicialmente um problema com apenas restrições de igualdade,

$$\min f(x) \quad \text{sujeito a } c_i(x) = 0, \quad i \in I, \quad (6.1)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $c_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ são funções diferenciáveis. Problemas deste tipo não são muito comuns na prática, mas são importantes para a compreensão geral do método.

A ideia essencial do método de SQP é modelar o problema (6.1) na k -ésima iteração que aproxima x^k , por um subproblema de Programação Quadrática, e usar o minimizador deste subproblema para definir a nova aproximação x^{k+1} . O desafio é projetar um subproblema quadrático que gere boas direções para o algoritmo de SQP e que seja possível manter boas propriedades de convergência.

Dados x^k e λ^k , o algoritmo básico do método de SQP consiste em resolver a cada iteração o seguinte subproblema quadrático

$$\min_p f(x^k) + \nabla f(x^k)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) p \quad \text{sujeito a } J(x^k)p + c_i(x^k) = 0, \quad (6.2)$$

onde $\mathcal{L}(x^k, \lambda^k)$ é a função Lagrangeana (2.37) e $J(x^k)$ a matriz jacobiana das restrições (4.17). Para simplificar a notação, considere $f(x^k) = f_k$, $\mathcal{L}(x^k, \lambda^k) = \mathcal{L}_k$, $J(x^k) = J^k$ e $c_i(x^k) = c_i^k$.

Observe que a função objetivo do subproblema (6.2) é uma aproximação quadrática da função Lagrangeana e as restrições são aproximações lineares das restrições originais. O natural seria considerar $\nabla^2 f^k$ e não $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$, isto é, tomar como função objetivo do subproblema a aproximação de segunda ordem da função objetivo do problema original. Entretanto, esta não seria uma das melhores escolhas, visto que, ao tomar $\nabla^2 f^k$ toda informação referente à curvatura das restrições é ignorada. Para reverter esta situação a informação da curvatura das restrições é repassada ao subproblema quadrático de maneira natural, através da matriz $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$.

Assumindo que a matriz Jacobiana das restrições $J(x)$ tem posto máximo e que a matriz $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda)$ é positiva definida no espaço tangente das restrições, ou seja, $d^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) d > 0$ para todo $d \neq 0$ tal que $J(x)d = 0$, o subproblema (6.2) terá uma única solução (p^k, λ^{k+1}) que satisfaz o seguinte sistema de equações

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -(J^k)^T \\ J^k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p^k \\ \lambda^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f^k \\ -c_i^k \end{bmatrix}. \quad (6.3)$$

Determinada, a direção de busca p^k , obtém-se a nova aproximação $x^{k+1} = x^k + p^k$ e repete-se o processo para o novo subproblema quadrático.

O algoritmo básico do método de SQP, na sua forma mais simples, é dado a seguir.

Algoritmo 6.1 (Programação Quadrática Sequencial - restrições de igualdade)

Escolha o par inicial (x^0, λ^0) e faça $k = 0$;

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

Calcule f_k , ∇f^k , $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$, c_i^k e J^k ;

Resolva o problema (6.2) para obter p^k e λ^{k+1} ;

Faça $x^{k+1} = x^k + p^k$;

Se um critério de parada for satisfeito

Pare x^{k+1} e λ^{k+1} é uma solução aproximada

Fim

Fim.

Para ficar mais claro veja um exemplo.

Exemplo 6.1 Considere novamente o problema (2.8), isto é

$$\min (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \quad \text{sujeito a } x_1^2 + (x_2 - 1)^2 - 1 = 0. \quad (6.4)$$

Deseja-se aplicar o método de SQP para obter a solução deste problema. Observe que, obter a solução do subproblema quadrático é equivalente a obter a solução do sistema (6.27). Por cálculos elementares, tem-se que:

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) = \begin{bmatrix} 2 - 2\lambda & 0 \\ 0 & 2 - 2\lambda \end{bmatrix}, \quad \nabla f(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 4 \\ 2x_2 - 2 \end{bmatrix}, \quad J(x)^T = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 - 2 \end{bmatrix}. \quad (6.5)$$

Considere $p^k = [p_1 \ p_2]^T$.

1ª Iteração

Para $x^0 = [0,8 \ 0,8]^T$ e $\lambda^0 = -0,9$ tem-se

$$\begin{bmatrix} 3,8 & 0 & -1,6 \\ 0 & 3,8 & 0,4 \\ 1,6 & -0,4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \lambda^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2,4 \\ 0,4 \\ 0,32 \end{bmatrix}. \quad (6.6)$$

Resolvendo este sistema obtém-se $p_1 = 0,25$, $p_2 = 0,20$ e $\lambda^1 = -0,91$. E a nova aproximação

$$x^1 = \begin{bmatrix} 0,8 \\ 0,8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0,25 \\ 0,20 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,05 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

2ª Iteração

Para $x^1 = [1,05 \ 1]^T$ e $\lambda^1 = -0,91$ resulta que

$$\begin{bmatrix} 3,82 & 0 & -2,1 \\ 0 & 3,82 & 0 \\ 2,1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \lambda^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,9 \\ 0 \\ -0,10 \end{bmatrix}. \quad (6.7)$$

Resolvendo este sistema obtém-se $p_1 = -0,05$, $p_2 = 0$ e $\lambda^2 = -0,99$. E a nova aproximação

$$x^2 = \begin{bmatrix} 1,05 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0,05 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Note que, com duas iterações, a solução aproximada x^2 é exatamente a solução ótima x^* , uma vez que a função estudada (6.4) é quadrática.

O método de SQP pode ser facilmente estendido a um problema de programação não linear que apresenta restrições de igualdade e desigualdade,

$$\min_x f(x) \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in I \\ c_i(x) \geq 0, & i \in D \end{cases}. \quad (6.8)$$

Sendo o subproblema quadrático definido por

$$\min_p f_k + (\nabla f^k)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} \nabla c_i(x^k)^T p + c_i(x^k) = 0, & i \in I \\ \nabla c_i(x^k)^T p + c_i(x^k) \geq 0, & i \in D \end{cases}. \quad (6.9)$$

Para obter a solução deste subproblema pode-se usar um algoritmo de QP, como o Método do Conjunto Ativo, visto no Capítulo 3. O Algoritmo 6.1 também pode ser aplicado ao problema (6.8) sendo a direção de busca obtida solucionando (6.9). Pela condição necessária de primeira ordem (KKT), tem-se que o multiplicador λ^* associado a um minimizador p^* é tal que

$$\nabla f(p^*) - J(p^*)\lambda^* = 0, \quad (6.10)$$

ou seja,

$$\lambda^* = [J(p^*)J(p^*)^T]^{-1} J(p^*)\nabla f(p^*). \quad (6.11)$$

Assim, fica fácil entender porque uma boa estimativa para os multiplicadores λ^{k+1} associados ao minimizador p^k é dada por

$$\lambda^{k+1} = [J(p^k)J(p^k)^T]^{-1} J(p^k)\nabla f(p^k). \quad (6.12)$$

6.2 Algoritmo para programação quadrática sequencial com matriz Hessiana aproximada

A matriz Hessiana da função Lagrangeana ($\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$) é constituída pelas segundas derivadas das funções objetivo e restrições, o que em algumas aplicações, não é um cálculo fácil. Além disso, tal matriz pode não ser positiva definida no espaço nulo das restrições. Esta dificuldade pode ser amenizada, substituindo $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ por uma aproximação Quase-Newton. Como a aproximação Quase-Newton-BFGS é bem sucedida no contexto da otimização irrestrita, é possível empregá-la aqui também.

Uma versão do método BFGS trabalhando com a aproximação da Hessiana Q_H^k é dada por:

$$Q_H^{k+1} = Q_H^k - \frac{Q_H^k v^k (v^k)^T Q_H^k}{(v^k)^T Q_H^k v^k} + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T v^k}, \quad (6.13)$$

onde

$$v^k = x^{k+1} - x^k, \quad y^k = \nabla_x \mathcal{L}(x^{k+1}, \lambda^{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x^k, \lambda^{k+1}). \quad (6.14)$$

O processo de atualização pode ser visto como uma aplicação da atualização Quase-Newton para o caso em que a função objetivo é dada pela Lagrangeana $\mathcal{L}(x, \lambda)$ (com λ fixo). Esta aproximação possui pontos fortes e fracos.

Se $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda)$ é positiva definida na região onde a minimização ocorre, a atualização Quase-Newton-BFGS irá refletir algumas das informações da curvatura do problema, e o algoritmo irá convergir robusta e rapidamente, assim como no método irrestrito BFGS. Se, entretanto, $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda)$ possui autovalores negativos, a atualização por BFGS pode ser problemática.

Como visto no Capítulo 1, se Q_H^k é positiva definida a condição de curvatura $((v^k)^T y^k > 0)$ garante que Q_H^{k+1} é positiva definida. No entanto, pode ser que v^k e y^k definidos pela Equação (6.14) não satisfaçam esta condição, mesmo para pontos próximos da solução. Para superar esta dificuldade, o processo de atualização poderá ser ignorado se a condição

$$(v^k)^T y^k \geq \zeta (v^k)^T Q_H^k v^k, \quad (6.15)$$

não for satisfeita, onde ζ é um escalar positivo (por exemplo, 10^{-2}). Esta estratégia pode, em certas ocasiões, produzir um desempenho ruim ou até mesmo falho, por isso não pode ser considerada como adequada para algoritmos gerais.

Powell (1977) recomenda a fórmula de atualização de Boydton-Fletcher-Goldfarb-Shanno, um modo alternativo que tem se mostrado bastante eficaz. A ideia é alterar a definição de y^k .

6.2.1 Atualização com correção de Powell

Dada a matriz Q_H^k simétrica e positiva definida, defina v^k e y^k como em (6.14). O esquema de atualização com base na fórmula BFGS é dado por:

$$Q_H^{k+1} = Q_H^k - \frac{Q_H^k v^k (v^k)^T Q_H^k}{(v^k)^T Q_H^k v^k} + \frac{n^k (n^k)^T}{(v^k)^T n^k}, \quad (6.16)$$

onde,

$$n^k = \zeta_k y^k + (1 - \zeta_k) Q_H^k v^k \quad (6.17)$$

e ζ_k um escalar definido por

$$\zeta_k = \begin{cases} 1 & \text{se } (v^k)^T y^k \geq 0, 2(v^k)^T Q_H^k v^k \\ \frac{0,8(v^k)^T Q_H^k v^k}{(v^k)^T Q_H^k v^k - (v^k)^T y^k} & \text{se } (v^k)^T y^k < 0, 2(v^k)^T Q_H^k v^k \end{cases}. \quad (6.18)$$

As constantes 0,2 e 0,8 são um tanto arbitrárias e são escolhidas empiricamente. A nova matriz Q_H^{k+1} agora substitui $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ e o processo de otimização é repetido até que a convergência seja alcançada.

Esta fórmula de atualização garante que a matriz Q_H^{k+1} seja positiva definida, uma vez que, para $\zeta_k \neq 1$

$$(v^k)^T n^k = 0, 2(v^k)^T Q_H^k v^k > 0. \quad (6.19)$$

Quando $\zeta_k = 1$, da Equação (6.17) segue que $n^k = y^k$ e a fórmula de atualização (6.16) é a mesma fórmula de atualização (6.13). Para $\zeta_k = 0$, tem-se que $Q_H^{k+1} = Q_H^k$. O escalar $\zeta_k \in (0, 1)$ garante que a nova aproximação permanece suficientemente próxima da aproximação atual Q_H^k , e assim Q_H^{k+1} será positiva definida. Outra vantagem deste processo de atualização é a não necessidade de se calcular as segundas derivadas.

6.3 Função de Mérito

As funções de mérito são frequentemente usadas no método de SQP para avaliar a qualidade de uma direção de busca. Na otimização irrestrita, a própria função objetivo se encarrega desta avaliação, o que não ocorre no contexto da otimização restrita, visto que, deve-se também considerar a viabilidade. As funções de mérito procuram equilibrar os dois objetivos conflitantes: reduzir a função objetivo e obter viabilidade. A direção então será aceita somente se produzir um decréscimo suficiente dessa função.

Uma função de mérito muito utilizada em problemas de programação não linear (6.8) é a função de penalidade ℓ_1 ,

$$\phi_1(x; \mu) = f(x) + \mu \sum_{i \in I} |c_i(x)| + \mu \sum_{i \in D} \max \{-c_i(x), 0\}, \quad (6.20)$$

sendo μ o fator de penalidade.

Como foi visto no Capítulo 4, a função de mérito ϕ_1 não é diferenciável, entretanto possui derivada direcional e é uma função de penalidade exata. Isto é, existe um escalar positivo μ^* tal que toda solução do problema original é solução de $\phi_1(x; \mu)$, para todo $\mu > \mu^*$.

Na discussão que segue, são considerados problemas com apenas restrições de igualdade, uma vez que, as restrições de desigualdade podem ser convertidas em restrições de igualdade pela introdução de variáveis de folga. Neste caso, a função de mérito ϕ_1 é definida por:

$$\phi_1(x; \mu) = f(x) + \mu \|c(x)\|_1, \quad (6.21)$$

onde $\|c(x)\|_1 = \sum_{i \in I} |c_i(x)|$.

É comum em alguns algoritmos que se baseiam na função de mérito a ocorrência de um fenômeno indesejável, conhecido como *efeito Maratos*, recebeu este nome porque foi observado pela primeira vez por Maratos (1978). Este caracteriza-se pela rejeição de uma direção essencialmente boa, mesmo quando a aproximação x^k esteja arbitrariamente próxima de uma solução x^* . Uma situação em que isto ocorre é quando a direção provoca um aumento tanto da função objetivo quanto das restrições. Quando tal efeito ocorre, o método perde velocidade podendo, até mesmo, estacionar em um ponto que não satisfaz as condições necessárias de primeira ordem (KKT).

Existem algumas estratégias para evitar este efeito, dentre elas

- Usar uma função de mérito que não sofra do efeito Maratos, como por exemplo a função Lagrangeana Aumentada de Fletcher, definida por

$$\phi_F(x; \mu) = f(x) - \lambda(x)^T c(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in I} c_i(x)^2, \quad (6.22)$$

sendo

$$\lambda(x) = [J(x)J(x)^T]^{-1} J(x) \nabla f(x) \quad (6.23)$$

uma estimativa para os multiplicadores;

- Usar uma correção de segunda ordem (*second-order correction*), isto é, corrigir a direção p^k , quando esta não for aceita, por meio de uma outra direção \hat{p}^k de comprimento pequeno, a qual diminui a violação das restrições;
- Ou usar uma estratégia de busca linear não monótona (*nonmonotone strategy*), onde o valor da função objetivo não precisa, necessariamente, decrescer a cada iteração. Esta estratégia sempre considera direções regulares do algoritmo o que permite melhorar a viabilidade e o decréscimo da função objetivo.

Para um estudo mais detalhado das duas últimas técnicas pode-se consultar, Nocedal e Wright (2000), Nunes (2009), Ribeiro (2005).

6.4 Convergência do Método

Um tópico importante a se considerar é a convergência do método. Nesta seção é feito um estudo da convergência local, bem como global do método de SQP. Por simplicidade a discussão limita-se ao Algoritmo 6.1 para um problema de otimização com restrições de igualdade. Para garantir a convergência são necessárias algumas hipóteses, relatadas a seguir.

Hipótese 6.1: O ponto x^* é uma solução local do problema (6.1) na qual as seguintes condições são válidas.

- As funções f e c são duas vezes diferenciáveis em uma vizinhança de x^* com segundas derivadas Lipschitz contínuas.
- A matriz Jacobiana $J_F(x^k, \lambda^k)$ é Lipschitz contínua em uma vizinhança de (x^*, λ^*) .
- O conjunto dos gradientes das restrições em x^* é linearmente independente. Esta condição implica que as condições KKT (2.38 a 2.42) são satisfeitas para algum vetor de multiplicadores λ^* .
- A condição suficiente de segunda ordem (Teorema 2.4) é satisfeita em (x^*, λ^*) .

Tendo garantidas estas hipóteses o Teorema 6.1 mostra que o método de SQP é localmente convergente. E como $J_F(x^k, \lambda^k)$ é Lipschitz contínua numa vizinhança de (x^*, λ^*) , a taxa de convergência é quadrática.

Teorema 6.1 *Suponha que a Hipótese 6.1 é satisfeita. Então, se (x^0, λ^0) está suficientemente próximo de (x^*, λ^*) , o par (x^k, λ^k) obtido pelo Algoritmo 6.1 converge quadraticamente para (x^*, λ^*) .*

Demonstração: Deve-se mostrar que

$$\|(x^{k+1}, \lambda^{k+1}) - (x^*, \lambda^*)\| \leq \tilde{L} \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\|^2, \quad (6.24)$$

sendo \tilde{L} uma constante.

As condições necessárias de primeira ordem (KKT) para o problema com restrições de igualdade (6.1) podem ser expressas pelo sistema

$$F(x, \lambda) = \begin{bmatrix} \nabla f(x) - J(x)^T \lambda \\ c(x) \end{bmatrix} = 0. \quad (6.25)$$

Sendo a Jacobiana com relação a x e λ dada por

$$J_F(x, \lambda) = \begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) & -J(x)^T \\ J(x) & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.26)$$

Partindo de (x^k, λ^k) , a nova aproximação é dada por $(x^{k+1}, \lambda^{k+1}) = (x^k, \lambda^k) + (p_x^k, p_\lambda^k)$, onde (p_x^k, p_λ^k) é a solução do sistema linear,

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -(J^k)^T \\ J^k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x^k \\ p_\lambda^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f^k + (J^k)^T \lambda^k \\ -c^k \end{bmatrix}. \quad (6.27)$$

Considerando $p = (p_x, p_\lambda)$ e fazendo uma analogia ao Método de Newton para problemas irrestritos é possível definir um modelo linear $m_k(p)$ de $F((x^k, \lambda^k) + p)$ da seguinte forma

$$F((x^k, \lambda^k) + p) \approx F(x^k, \lambda^k) + J_F(x^k, \lambda^k)p = m_k(p). \quad (6.28)$$

A essência do Método de Newton é encontrar a direção p^k para a qual $m_k(p^k) = 0$, isto é

$$p^k = -J_F(x^k, \lambda^k)^{-1} F(x^k, \lambda^k). \quad (6.29)$$

Sabendo que $F(x^*, \lambda^*) = 0$, e usando a relação

$$F(x + p) = F(x) + \int_0^1 J_F(x + tp)p \, dt, \quad (6.30)$$

tem-se que

$$F(x^k, \lambda^k) = F(x^k, \lambda^k) - F(x^*, \lambda^*) = J_F(x^k, \lambda^k) [(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)] + \tilde{w}, \quad (6.31)$$

onde

$$\tilde{w} = \int_0^1 \{ J_F(x^k + t(x^* - x^k), \lambda^k + t(\lambda^* - \lambda^k)) - J_F(x^k, \lambda^k) \} [(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)] \, dt. \quad (6.32)$$

Como a norma da integral é menor ou igual a integral da norma e J_F é Lipschitz contínua existe uma constante L tal que,

$$\begin{aligned}
\|\tilde{w}\| &= \left\| \int_0^1 \{J_F(x^k + t(x^* - x^k), \lambda^k + t(\lambda^* - \lambda^k)) - J_F(x^k, \lambda^k)\} [(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)] dt \right\| \\
&\leq \int_0^1 \|J_F(x^k + t(x^* - x^k), \lambda^k + t(\lambda^* - \lambda^k)) - J_F(x^k, \lambda^k)\| \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\| dt \\
&\leq \int_0^1 L \|(x^k + t(x^* - x^k), \lambda^k + t(\lambda^* - \lambda^k)) - (x^k, \lambda^k)\| \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\| dt \\
&= \int_0^1 L \|(t(x^* - x^k), t(\lambda^* - \lambda^k))\| \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\| dt \\
&= \int_0^1 L t \|(x^*, \lambda^*) - (x^k, \lambda^k)\| \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\| dt \\
&= L \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\|^2 \int_0^1 t dt \\
&= \frac{1}{2} L \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\|^2.
\end{aligned} \tag{6.33}$$

Relembrando que $J(x)^T = [\nabla c_i(x)]$, para $i \in \mathcal{A}(x)$, segue do Lema 5.1 que $J_F(x^*, \lambda^*)$ é não singular. Então existe um raio $r > 0$ e uma constante β^* , tal que

$$\|J_F(x^k, \lambda^k)^{-1}\| \leq \beta^*, \tag{6.34}$$

para todo (x^k, λ^k) com $\|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\| \leq r$.

Multiplicando ambos os lados da Equação (6.31) por $J_F(x^k, \lambda^k)^{-1}$ e usando a igualdade (6.29) resulta que:

$$\begin{aligned}
J_F(x^k, \lambda^k)^{-1} F(x^k, \lambda^k) &= (x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*) + J_F(x^k, \lambda^k)^{-1} \tilde{w} \\
-p^k &= (x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*) + J_F(x^k, \lambda^k)^{-1} \tilde{w} \\
-p^k - [(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)] &= J_F(x^k, \lambda^k)^{-1} \tilde{w}.
\end{aligned} \tag{6.35}$$

Pela propriedade de norma tem-se que

$$\begin{aligned}
\|-p^k - [(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)]\| &= |-1| \|p^k + (x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\| \\
&= \|p^k + (x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\|.
\end{aligned} \tag{6.36}$$

Logo da Equação (6.35)

$$\begin{aligned}
\|(x^k, \lambda^k) + p^k - (x^*, \lambda^*)\| &= \|J_F(x^k, \lambda^k)^{-1} \tilde{w}\| \\
&\leq \|J_F(x^k, \lambda^k)^{-1}\| \|\tilde{w}\| \\
&\leq \beta^* \frac{1}{2} L \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\|^2 \\
&= \tilde{L} \|(x^k, \lambda^k) - (x^*, \lambda^*)\|^2.
\end{aligned} \tag{6.37}$$

Sendo $\tilde{L} = \frac{\beta^* L}{2}$. ■

Para ser prático, o algoritmo deve ser capaz de encontrar uma solução a partir de pontos iniciais distantes, ou seja, deve ser globalmente convergente. Este estudo de convergência tem sido valioso no melhoramento do projeto e implementação do algoritmo. A seguir apresenta-se uma maneira de modificar o algoritmo básico de SQP de modo a atender tal requisito. Este processo é denominado de *globalização* do algoritmo local.

6.4.1 Método de Programação Quadrática Sequencial com busca linear

Nos métodos com busca linear, as aproximação são geradas por

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad (6.38)$$

onde p^k é uma direção de busca, obtida resolvendo o sistema (6.27) e $\alpha_k > 0$ o comprimento do passo calculado por alguma técnica de busca linear de modo a satisfazer a condição suficiente de decrescimento

$$\phi_1(x^k + \alpha_k p^k; \mu) \leq \phi_1(x^k; \mu) + \eta \alpha_k \mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k), \quad \eta \in (0, 1), \quad (6.39)$$

sendo $\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k)$ a derivada direcional de ϕ_1 na direção p^k . Este raciocínio é análogo a *condição de Armijo* para otimização irrestrita, ver Brandão (2010), o que prova que p^k é uma direção de descida, isto é, $\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) < 0$. Tal condição é satisfeita se o fator de penalidade μ é suficientemente grande, como será mostrado no próximo resultado.

Teorema 6.2 *Se p^k e λ^{k+1} são obtidos pelo sistema (6.27), então a derivada direcional de ϕ_1 na direção p^k satisfaz*

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) = (\nabla f^k)^T p^k - \mu \|c^k\|_1. \quad (6.40)$$

Além disso,

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) \leq -(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k - (\mu - \|\lambda^{k+1}\|_\infty) \|c^k\|_1, \quad (6.41)$$

onde $\|\lambda^{k+1}\|_\infty = \max_{i \in I} |\lambda_i^{k+1}|$.

Demonstração: Aplicando o Teorema de Taylor, Equação (1.4) para f e c_i , $i = 1, 2, \dots, m$ e considerando o limite superior γ para os termos de segunda ordem em f e c obtém-se

$$\begin{aligned} \phi_1(x^k + \alpha p; \mu) - \phi_1(x^k; \mu) &= f(x^k + \alpha p) - f^k + \mu \|c(x^k + \alpha p)\|_1 - \mu \|c^k\|_1 \\ &\leq \alpha (\nabla f^k)^T p + \frac{1}{2} \gamma \alpha^2 \|p\|^2 + \mu \|c^k + \alpha J^k p\|_1 + \frac{1}{2} \mu \gamma \alpha^2 \|p\|^2 - \mu \|c^k\|_1. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Se $p = p^k$ do sistema (6.27), $J^k p^k = -c^k$, assim para $0 < \alpha \leq 1$ segue que

$$\begin{aligned} \phi_1(x^k + \alpha p^k; \mu) - \phi_1(x^k; \mu) &\leq \\ &\leq \alpha (\nabla f^k)^T p^k + \frac{1}{2} \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 + \mu \|(1 - \alpha)c^k + \alpha(c^k + J^k p^k)\|_1 + \frac{1}{2} \mu \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 - \mu \|c^k\|_1 \\ &\leq \alpha (\nabla f^k)^T p^k + \frac{1}{2} \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 + \mu [(1 - \alpha)\|c^k\|_1 + \alpha\|c^k + J^k p^k\|_1] + \frac{1}{2} \mu \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 - \mu \|c^k\|_1 \\ &= \alpha (\nabla f^k)^T p^k - \alpha \mu \|c^k\|_1 + \frac{1}{2} \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 + \frac{1}{2} \mu \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 \\ &= \alpha [(\nabla f^k)^T p^k - \mu \|c^k\|_1] + \frac{1}{2} \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 + \frac{1}{2} \mu \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Dividindo por α de ambos os lados da desigualdade, resulta que

$$\frac{\phi_1(x^k + \alpha p^k; \mu) - \phi_1(x^k; \mu)}{\alpha} \leq (\nabla f^k)^T p^k - \mu \|c^k\|_1 + \frac{1}{2} \gamma \alpha \|p^k\|^2 + \frac{1}{2} \mu \gamma \alpha \|p^k\|^2. \quad (6.44)$$

Fazendo o limite com $\alpha \rightarrow 0$, obtém-se

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) \leq (\nabla f^k)^T p^k - \mu \|c^k\|_1. \quad (6.45)$$

De modo análogo, considerando o limite inferior $-\gamma$, verifica-se que

$$\phi_1(x^k + \alpha p^k; \mu) - \phi_1(x^k; \mu) \geq \alpha [(\nabla f^k)^T p^k - \mu \|c^k\|_1] - \frac{1}{2} \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2 - \frac{1}{2} \mu \gamma \alpha^2 \|p^k\|^2, \quad (6.46)$$

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) \geq (\nabla f^k)^T p^k - \mu \|c^k\|_1. \quad (6.47)$$

Das desigualdades (6.45) e (6.47) a derivada direcional de ϕ_1 na direção p^k é dada por

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) = (\nabla f^k)^T p^k - \mu \|c^k\|_1. \quad (6.48)$$

Como p^k satisfaz a primeira equação do sistema (6.27) resulta que

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) = -(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k + (p^k)^T (J^k)^T \lambda^{k+1} - \mu \|c^k\|_1. \quad (6.49)$$

Da segunda equação do sistema (6.27), pode-se substituir o termo $(p^k)^T (J^k)^T \lambda^{k+1}$ na igualdade acima por $-(c^k)^T \lambda^{k+1}$. Fazendo esta substituição e considerando a desigualdade

$$-(c^k)^T \lambda^{k+1} \leq \|c^k\|_1 \|\lambda^{k+1}\|_\infty, \quad (6.50)$$

obtém-se (6.41). O que completa a demonstração. ■

Da desigualdade (6.41), p^k será uma direção de descida para ϕ_1 se $p^k \neq 0$, $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ for positiva definida e

$$\mu > \|\lambda^{k+1}\|_\infty. \quad (6.51)$$

Uma estratégia para escolher o novo valor do fator de penalidade μ na função $\phi_1(x; \mu)$ em cada iteração é aumentá-lo gradativamente a partir do valor anterior, de forma a satisfazer a desigualdade (6.51), com alguma margem. Tem-se observado, no entanto, que esta estratégia pode selecionar valores impróprios de μ e frequentemente interfere no progresso da iteração.

A estratégia mais eficiente para escolher μ , considera o efeito da direção sobre o modelo quadrático da função de mérito ϕ_1 definido por

$$q_\mu(p) = f_k + (\nabla f^k)^T p + \frac{\sigma}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p + \mu m(p), \quad (6.52)$$

onde

$$m(p) = \|c^k + J^k p\|_1 \quad (6.53)$$

e

$$\sigma = \begin{cases} 1 & \text{se } (p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k > 0 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}. \quad (6.54)$$

A constante σ é usada para tratar o caso em que a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ não é positiva definida. Após calcular a direção p^k , escolhe-se o fator de penalidade μ suficientemente grande que satisfaz

$$q_\mu(0) - q_\mu(p^k) \geq \rho \mu [m(0) - m(p^k)], \quad (6.55)$$

para algum parâmetro $\rho \in (0, 1)$. Da Equação (6.52) e sabendo que $J^k p^k + c^k = 0$ a desigualdade (6.55) é satisfeita para

$$\mu \geq \frac{(\nabla f^k)^T p^k + (\sigma/2)(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k}{(1 - \rho)\|c^k\|_1}. \quad (6.56)$$

É fácil ver que, para μ satisfazendo a desigualdade (6.56), a escolha de σ garante que $\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) \leq -\rho\mu\|c^k\|_1$. De fato,

$$\begin{aligned} q_\mu(p^k) - q_\mu(0) &\leq -\rho\mu[m(0) - m(p^k)] \\ (\nabla f^k)^T p^k + \frac{\sigma}{2}(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k - \mu\|c^k\|_1 &\leq -\rho\mu\|c^k\|_1 \\ (\nabla f^k)^T p^k - \mu\|c^k\|_1 &\leq -\rho\mu\|c^k\|_1 - \frac{\sigma}{2}(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k \\ \mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) &\leq -\rho\mu\|c^k\|_1 - \frac{\sigma}{2}(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k. \end{aligned} \quad (6.57)$$

Assim, para $\sigma = 1$, tem-se

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) \leq -\rho\mu\|c^k\|_1 - \frac{1}{2}(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k \leq -\rho\mu\|c^k\|_1. \quad (6.58)$$

Para $\sigma = 0$,

$$\mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu); p^k) \leq -\rho\mu\|c^k\|_1. \quad (6.59)$$

Das desigualdades (6.58) e (6.59) segue que p^k é uma direção de descida para a função de mérito ϕ_1 . Entretanto, é importante destacar que nem sempre esta conclusão é válida, por exemplo, se $\sigma = 1$ e $(p^k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^k < 0$.

O uso da busca linear garante a convergência global do método de SQP, como pode ser visto em Izmailov e Solodov (2007) (volume 2). O algoritmo é dado por:

Algoritmo 6.2 (Programação Quadrática Sequencial com busca linear)

Dados: $\eta \in (0; 0, 5)$, $\tau \in (0, 1)$ e o par inicial (x^0, λ^0) ;

Calcule f_0 , ∇f^0 , c^0 , J^0 ;

Se uma aproximação Quase-Newton é usada, escolha uma matriz inicial simétrica H^0 como aproximação da matriz Hessiana positiva definida, caso contrário calcule $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_0$;

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

Resolva do problema (6.9) para obter p^k ; seja $\hat{\lambda}$ o multiplicador correspondente, dado por

$$\hat{\lambda} = [J(p^k)J(p^k)^T]^{-1} J(p^k) \nabla f(p^k).$$

Faça $p_\lambda = \hat{\lambda} - \lambda^k$;

Escolha μ_k satisfazendo (6.56) com $\sigma = 1$ e $\rho \in (0, 1)$;

Faça $\alpha_k = 1$;

Enquanto $\phi_1(x^k + \alpha_k p^k; \mu_k) > \phi_1(x^k; \mu_k) + \eta \alpha_k \mathcal{D}(\phi_1(x^k; \mu_k); p^k)$

Ajuste $\alpha_k = \tau_\alpha \alpha_k$ para algum $\tau_\alpha \in (0, \tau]$;

Fim

Faça $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k$ e $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \alpha_k p_\lambda$;

Se um critério de parada for satisfeito

Pare x^{k+1} e λ^{k+1} é uma solução aproximada

Fim

Calcule f_{k+1} , ∇f^{k+1} , c^{k+1} , J^{k+1} , (e possivelmente $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_{k+1}$)

Se a aproximação Quase-Newton é usada, faça

$$v^k = \alpha_k p^k \text{ e } y^k = \nabla_x \mathcal{L}(x^{k+1}, \lambda^{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x^k, \lambda^{k+1})$$

Calcule Q_H^{k+1} usando a Equação (6.16).

Fim.

Exemplo Ilustrativo 1: O Método de Programação Quadrática Sequencial com busca linear foi aplicado à função (3.70) sujeita às restrições (3.71). O processo inicia-se em $x^0 = [1, 5 \ 0]^T$, e deve ser interrompido quando o critério de parada $CP = \|\nabla f(x^k)\| \leq 0,0001$ for satisfeito. Para este exemplo é utilizada a matriz Hessiana e não uma aproximação Quase-Newton. Por cálculos elementares, tem-se que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x, \lambda) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - 2x_1 - 6x_2 - \lambda_1(-x_1 - x_2 + 2) - \lambda_2(x_1 - 2x_2 + 2) - \\ - \lambda_3(-2x_1 - x_2 + 3) - \lambda_4x_1 - \lambda_5x_2, \end{aligned} \quad (6.60)$$

$$\nabla f^k = \begin{bmatrix} x_1 - x_2 - 2 \\ 2x_2 - x_1 - 6 \end{bmatrix}, \quad (6.61)$$

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = \begin{bmatrix} x_1 - x_2 - 2 + \lambda_1 - \lambda_2 + 2\lambda_3 - \lambda_4 \\ 2x_2 - x_1 - 6 + \lambda_1 + 2\lambda_2 + \lambda_3 - \lambda_5 \end{bmatrix} \text{ e} \quad (6.62)$$

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (6.63)$$

A Tabela 6.1 resume os cálculos do método.

Iteração k	$(x^k)^T$	$f(x^k)$	$c_1(x^k)$	$c_2(x^k)$	$c_3(x^k)$	$c_4(x^k)$	$c_5(x^k)$	CP
0	[1,5 0]	-1,8750	0,5	3,5	0	1,5	0	7,5166
1	[0,6667 1,3333]	-8,2222	0	0	0,3333	0,6667	1,3333	4,8074

Tabela 6.1: Método de Programação Quadrática Sequencial aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

O processo foi realizado considerando o número máximo de iteração igual a 200. O critério de parada não foi satisfeito, visto que, $CP = \|\nabla f(x^1)\| = 4,8074 > 0,0001$, no entanto, verifica-se que a partir da 1ª iteração os valores de x^k não se alteram. Assim, $x^1 = [0,6667 \ 1,3333]^T$ é uma boa aproximação para a solução x^* , sendo o valor ótimo $f(x^1) = -8,2222$. O ponto x^1 é viável pois satisfaz todas as restrições. A Figura 6.1 expressa o progresso do método.

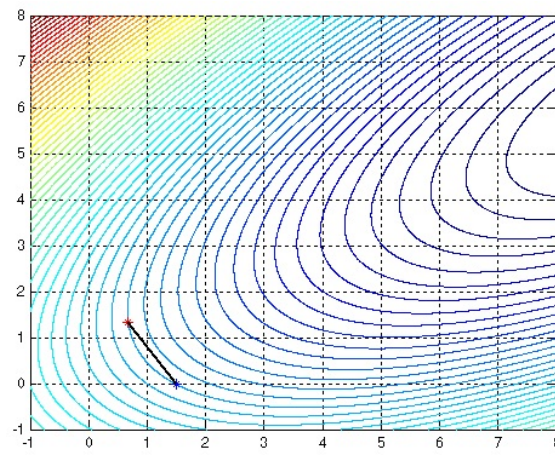


Figura 6.1: Progresso do Método de Programação Quadrática Sequencial aplicado ao Exemplo Ilustrativo 1

Capítulo 7

Minimização da massa de uma mola helicoidal

O propósito deste capítulo, é aplicar todos os métodos de otimização restrita vistos nesta dissertação a um exemplo prático. O problema consiste em obter a massa mínima para uma mola helicoidal, sujeita à tensão ou compressão, obedecendo alguns requisitos de desempenho (restrições).

Optou-se em trabalhar com este problema, pois as molas estão presentes em inúmeras aplicações práticas, desde as mais simples, como canetas, grampeador de papéis, pregador de roupas, até as mais complexas como, suspensão de veículos, componentes de máquinas, peças e equipamentos em geral.

Uma mola pode ser definida como um objeto elástico flexível usado para armazenar a energia mecânica. E podem ser classificadas de acordo com a sua forma e a finalidade a que são empregadas. Assim, existem as molas helicoidais, molas de lâminas, molas espirais, molas planas, molas de anel ou “Belleville”, molas pneumáticas etc.

Apesar da grande diversidade, as molas helicoidais são encontradas com maior frequência em aplicações mecânicas, em geral são feitas de barra de aço enrolada em forma de hélice cilíndricas ou cônicas. Este tipo de mola é formada por espiras e pode funcionar por compressão, tensão ou por torção.

7.1 Formulação do problema

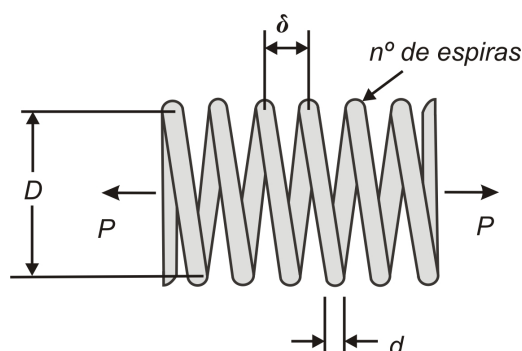


Figura 7.1: Representação de uma mola helicoidal

Deseja-se minimizar a massa de uma mola helicoidal, submetida à tensão ou compressão, conforme ilustrado na Figura 7.1, sujeita a restrições de deflexão, tensão de cisalhamento, frequência da onda, limites de diâmetro externo e variáveis de projeto. As três variáveis de projeto são d = diâmetro do fio, D = diâmetro médio da espira e N = número de espiras ativas.

Nesta figura, uma carga P é aplicada no sentido de esticar a mola de diâmetro médio. O ângulo δ representa a deflexão ao longo do eixo da mola.

Para formular o problema, são utilizados os seguintes dados e notações adotados em Arora (1989):

- Número de espiras inativas: $Q = 2$;
- Carga aplicada: $P = 10 \text{ lbs}$;
- Módulo de cisalhamento: $G = 1,15 \times 10^7 \text{ lb/in}^2$;
- Deflexão mínima da mola: $\Delta = 0,5 \text{ in}$;
- Densidade do peso do material da mola: $0,285 \text{ lb/in}^3$;
- Constante gravitacional: $g = 386 \text{ in/sec}^2$;
- Densidade da massa do material ($\rho = \gamma/g$): $\rho = 7,38342 \times 10^{-4} \text{ lb-sec}^2/\text{in}^4$;
- Tensão de cisalhamento admissível: $\tau_a = 8 \times 10^{-4} \text{ lb/in}^2$;
- Frequência das ondas: ω ;
- Limite inferior da frequência da onda: $\omega_0 = 100 \text{ Hz}$;
- Limite para o diâmetro externo: $\bar{D} = 1,5 \text{ in}$.

Sendo as unidades de medida, in - polegada, lb - libra, Hz - Hertz, sec^2 - segundos ao quadrado.

Para uma mola sob tensão ou compressão, experiências mostram que o fio pode sofrer torção, por isso a restrição da tensão de cisalhamento deve ser imposta. Na sequência é apresentada a modelagem matemática para o problema da mola:

$$\text{Equação de deflexão da carga: } P = K\delta; \quad (7.1)$$

$$\text{Constante da mola: } K = \frac{d^4 G}{8D^3 N}; \quad (7.2)$$

$$\text{Tensão de cisalhamento: } \tau = \frac{8kPD}{\pi d^3}; \quad (7.3)$$

$$\text{Fator da concentração de tensão Wahl: } k = \frac{(4D - d)}{(4D - 4d)} + \frac{0,615d}{D}; \quad (7.4)$$

$$\text{Frequência das ondas: } \omega = \frac{d}{2\pi D^2 N} \sqrt{\frac{G}{2\rho}}. \quad (7.5)$$

A expressão para o fator de concentração de tensão Wahl, dada pela Equação (7.4), é determinada experimentalmente visando superar as elevadas tensões em certos pontos da mola. Esta expressão pode ser usada como restrição para o problema. A formulação do problema de otimização é dada a seguir.

Função Custo: O problema pretende minimizar a massa da mola (volume \times densidade da massa), ou seja, a função custo dada por:

$$f = \frac{1}{4}(N + Q)\pi^2 D d^2 \rho. \quad (7.6)$$

A constante $\pi^2\rho/4$ na função custo será negligenciada, uma vez que não irá alterar a solução ótima final.

Restrição de deflexão: Muitas vezes é necessário que a deflexão sob uma carga P seja pelo menos Δ . Assim, a restrição de deflexão δ deve ser maior ou igual a Δ . Este tipo de restrição é muito comum no projeto da mola. Desta forma, este requisito de desempenho ($\delta \geq \Delta$) é obtido usando as Equações (7.12) e (7.2),

$$c_1 : \frac{8PD^3N}{d^4G} \geq \Delta. \quad (7.7)$$

Restrição da tensão de cisalhamento: Para evitar a sobrecarga do material, a tensão de cisalhamento no fio não deve ser superior a τ_a . Usando as Equações (7.3) e (7.4) a restrição é expressa por:

$$c_2 : \frac{8PD}{\pi d^3} \left[\frac{(4D-d)}{(4D-4d)} + \frac{0,615d}{D} \right] \leq \tau_a. \quad (7.8)$$

Restrição da frequência da onda: Deseja-se também evitar a ressonância em aplicações dinâmicas. A ressonância pode ser evitada fazendo com que a frequência das ondas (ao longo da mola) se afaste o máximo possível das primeiras frequências naturais. Assim para o problema será exigido que a frequência da onda para a mola seja de pelo menos ω_0 (Hertz). Usando a Equação (7.5), esta restrição ($\omega \geq \omega_0$) pode ser escrita como

$$c_3 : \frac{d}{2\pi D^2 N} \sqrt{\frac{G}{2\rho}} \geq \omega_0. \quad (7.9)$$

Vale ressaltar que as molas helicoidais são frequentemente utilizadas para absorver impactos e garantir o trabalho de amortecedores. Assim, é muito importante estabelecer a restrição c_3 que limita a frequência de vibração.

Restrição de diâmetro: O diâmetro externo da mola não deve ser maior que \bar{D} , assim

$$c_4 : D + d \leq \bar{D}. \quad (7.10)$$

Limites explícitos sobre as variáveis de projeto: Para evitar dificuldades práticas, são impostos limites inferiores e superiores para o diâmetro do fio, o diâmetro da espira e o número de espiras ativas:

$$0,05 \leq d \leq 0,20 \text{ in}; \quad 0,25 \leq D \leq 1,30 \text{ in}; \quad 2 \leq N \leq 15. \quad (7.11)$$

Assim, resumindo tem-se que:

$$\min f = (N+2)Dd^2 \quad (7.12)$$

$$\text{sujeito a } \begin{cases} c_1 = 1 - \frac{D^3N}{71875d^4} \leq 0 \\ c_2 = \frac{D(4D-d)}{12566,4d^3(D-d)} + \frac{2,46}{12566,4d^2} - 1 \leq 0 \\ c_3 = 1 - \frac{140,45d}{D^2N} \leq 0 \\ c_4 = \frac{D+d}{1,5} - 1 \leq 0 \end{cases}. \quad (7.13)$$

Sendo os limites para as variáveis:

$$0,05 \leq d \leq 0,20; \quad 0,25 \leq D \leq 1,30; \quad 2 \leq N \leq 15. \quad (7.14)$$

7.2 Aplicação dos Métodos

O ponto inicial adotado foi $x^0 = [0,2 \ 1,3 \ 2]^T$ e o critério de parada para cada método é mencionado no decorrer das aplicações.

Método do Conjunto Ativo para QP convexa

Como já foi visto o método é aplicável a um problema de otimização, com função objetivo quadrática e restrições lineares, o que não ocorre com o problema da mola, uma vez que as restrições não são lineares. Assim o método não pode ser aplicado a este problema. Esta pode ser considerada uma desvantagem do Método do Conjunto Ativo para QP convexa.

Método de Penalidade Quadrática

A Tabela 7.1 resume os cálculos do Método de Penalidade Quadrática aplicado ao problema da mola. Foi adotado como critério de parada (CP) que $|Q(x^{k+1}, \mu_{k+1}) - Q(x^k, \mu_k)| \leq 0,1 \times 10^{-6}$. Para o fator de penalidade inicial considerou-se $\mu_0 = 1,5$, sendo atualizado a cada iteração por $\mu_{k+1} = 2\mu_k$.

Iteração k	d	D	N	f	c_1	c_2	c_3	c_4	CP
0	0,2	1,3	2	0,2080	0,9618	-0,9363	-7,3107	0	—
1	0,0529	0,3933	9,1461	0,0122	0,0081	0,0165	-4,2468	-0,7025	0,8893
2	0,0532	0,3969	9,1462	0,0125	0,0036	0,0079	-4,1821	-0,7000	$0,1107 \times 10^{-3}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
9	0,0534	0,4001	9,1469	0,0127	0	0,0001	-4,1259	-0,6977	$0,8474 \times 10^{-6}$
11	0,0534	0,4001	9,1468	0,0127	0	0	-4,1257	-0,6977	$0,4953 \times 10^{-6}$
13	0,0534	0,4001	9,1470	0,0127	0	0	-4,1255	-0,6977	$0,1392 \times 10^{-7}$

Tabela 7.1: Método de Penalidade Quadrática aplicado ao problema da mola

Observe que, o processo foi interrompido na 13ª iteração, visto que, $CP = 0,1392 \times 10^{-7} < 0,1 \times 10^{-6}$. A aproximação ótima encontrada pelo método é $x^{13} = [0,0534 \ 0,4001 \ 9,1470]^T$, sendo $f(x^{13}) = 0,0127$. Note que, todas as restrições são satisfeitas, logo este ponto é viável. A Figura 7.2 apresenta o histórico das variáveis de projeto d , D e N no decorrer das iterações. Percebe-se que após a 1ª iteração as soluções variam pouco.

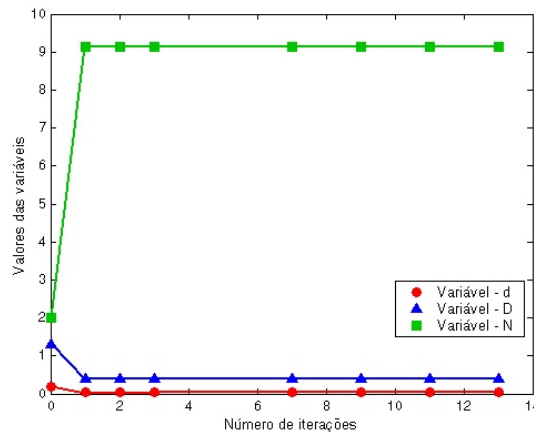


Figura 7.2: Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo Método de Penalidade Quadrática

Método de Penalidade Quadrática ℓ_1

A Tabela 7.2 resume os cálculos do Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 aplicado ao problema da mola. Para este método, foi adotado $\mu_0 = 1,4$, sendo atualizado a cada iteração por $\mu_{k+1} = 2\mu_k$ e $|\phi_1(x^{k+1}, \mu_{k+1}) - \phi_1(x^k, \mu_k)| \leq 0,1 \times 10^{-6}$ como critério de parada (CP). Note que, o processo foi interrompido na 4ª iteração, visto que, $CP = 0,1363 \times 10^{-9} < 0,1 \times 10^{-6}$. A aproximação ótima encontrada é $x^4 = [0,0666 \ 0,8313 \ 2,7676]^T$, sendo $f(x^4) = 0,0176$. Observe que, este ponto também é viável, pois todas as restrições são satisfeitas.

Iteração k	d	D	N	f	c_1	c_2	c_3	c_4	CP
0	0,2	1,3	2	0,2080	0,9618	-0,9363	-7,3107	0	—
1	0,0699	0,8862	2,7662	0,0206	-0,1247	-0,0794	-3,5162	-0,3626	1,5339
2	0,0679	0,8279	2,7671	0,0182	-0,0276	-0,0595	-4,0280	-0,4028	0,0024
3	0,0666	0,8313	2,7676	0,0176	-0,1268	0	-3,8884	-0,4015	$0,6410 \times 10^{-3}$
4	0,0666	0,8313	2,7676	0,0176	-0,1268	0	-3,8884	-0,4015	$0,1363 \times 10^{-9}$

Tabela 7.2: Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 aplicado ao problema da mola

A Figura 7.3 representa o histórico das variáveis de projeto d , D e N no decorrer das iterações. Também, neste caso, pode-se observar que após a 1ª iteração as soluções variam pouco.

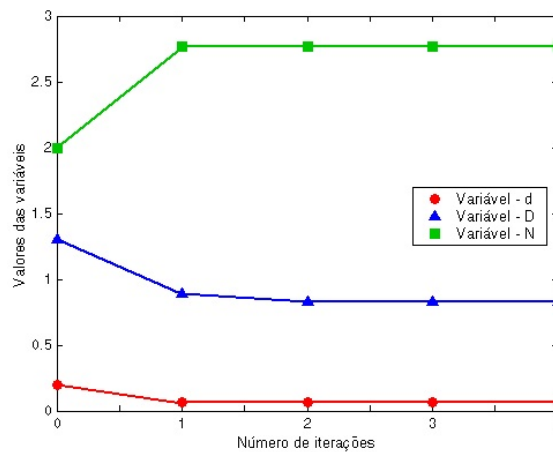


Figura 7.3: Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo Método de Penalidade Quadrática ℓ_1

Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado

A Tabela 7.3 resume os cálculos do Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado aplicado ao problema da mola. Para este método $\mu_0 = 1,5$ é o fator de penalidade inicial, sendo atualizado a cada iteração por $\mu_{k+1} = 1,9\mu_k$. O critério de parada (CP) adotado foi $|\mathcal{L}_A(x^{k+1}, \lambda^{k+1}, \mu_{k+1}) - \mathcal{L}_A(x^k, \lambda^k, \mu_k)| \leq 0,1 \times 10^{-6}$.

O processo foi realizado considerando o número máximo de iteração igual a 200. A partir da 22ª iteração os valores das aproximações x^k não se alteram e o critério de parada não é satisfeito. A solução ótima encontrada é $x^{22} = [0,0453 \ 0,2153 \ 11,6373]^T$ e o valor ótimo $f(x^{22}) = 0,0060$. Este ponto não é viável, o método apresenta dificuldades para obedecer a restrição de deflexão representada por c_1 .

Iteração k	d	D	N	f	c_1	c_2	c_3	c_4	CP
0	0,2	1,3	2	0,2080	0,9618	-0,9363	-7,3107	0	—
1	0,0773	1,9322	0,2540	0,0260	0,2856	0,4064	-10,4464	0,3397	1,4712
2	0,0914	1,4064	1,4319	0,0403	0,2062	-0,3599	-3,5330	-0,0015	5,3252
3	0,2357	-0,5182	1,4005	-0,0979	1,0009	-1,0061	-87,0218	-1,1883	5,4860
4	0,0436	0,2345	15,7775	0,0079	0,2197	0,1550	-6,0664	-0,8146	3,5173
5	0,0459	0,2337	14,8704	0,0083	0,4066	0,0017	-6,9449	-0,8136	25,5590
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
10	0,0544	0,2305	14,4655	0,0112	0,7187	-0,3728	-8,9427	-0,8101	919,7632
15	0,0749	0,8402	14,9753	0,0799	-2,9318	-0,2812	0,0052	-0,3900	$0,1983 \times 10^5$
20	0,0460	0,2363	11,6373	0,0068	0,5241	0,0037	-8,9502	-0,8118	$0,8198 \times 10^6$
22	0,0453	0,2153	11,6373	0,0060	0,6158	-0,0194	-10,7876	-0,8263	$0,6921 \times 10^7$

Tabela 7.3: Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado aplicado ao problema da mola

A Figura 7.4 expressa o histórico das variáveis de projeto no decorrer das iterações, onde pode-se notar que, para este método, há uma modificação maior nos valores das variáveis.

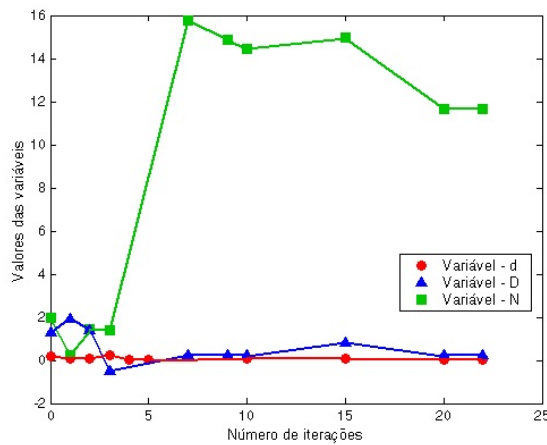


Figura 7.4: Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo MLMA

Método de Programação Quadrática Sequencial

A Tabela 7.4 resume os cálculos do Método de Programação Quadrática Sequencial aplicado ao problema da mola. O critério de parada (CP) adotado foi $|f(x^{k+1}) - f(x^k)| \leq 0,1 \times 10^{-6}$.

O processo foi realizado considerando o número máximo de iteração igual a 200. O critério de parada não foi satisfeito, no entanto, o ponto $x^{20} = [0,0516 \ 0,3330 \ 11,0275]^T$ é considerado uma boa aproximação para o ótimo, se comparado com as soluções obtidas pelos métodos anteriores. O valor da função custo para a solução aproximada é $f(x^{20}) = 0,0115$.

Observe que, o ponto x^{20} não é viável uma vez que não satisfaz a restrição c_1 . Assim, novamente, o problema de otimização tem dificuldades em obedecer a restrição de deflexão. A Figura 7.5 representa o histórico das variáveis de projeto no decorrer das iterações. Percebe-se que para este método as variáveis d e D variam pouco após a 5ª iteração, já a variável N sofre uma variação maior.

Iteração k	d	D	N	f	c_1	c_2	c_3	c_4	CP
0	0,2	1,3	2	0,2080	0,9618	-0,9363	-7,3107	0	—
1	-0,1445	1,4744	1,7305	0,1149	0,8231	-1,1357	6,3955	-0,1134	0,0931
2	0,0277	0,8622	2,1305	0,0027	-31,0870	12,4321	-1,4599	-0,4067	0,1121
3	0,0383	1,0817	2,5330	0,0072	-19,7552	5,4367	-0,8144	-0,2533	0,0044
4	0,0441	0,8205	4,7123	0,0107	-8,5359	2,2659	-0,9545	-0,4236	0,0035
5	0,0543	0,2500	14,6475	0,0123	0,6329	-0,3322	-7,3261	-0,7972	0,0015
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
10	0,0457	0,4024	3,7091	0,0048	0,2274	0,5672	-9,6818	-0,7013	0,0016
15	0,0581	0,6388	1,9957	0,0086	0,3650	0,1723	-9,0205	-0,5354	0,0019
20	0,0516	0,3330	11,0275	0,0115	0,1976	-0,0464	-4,9196	-0,7436	0,0046

Tabela 7.4: Método de Programação Quadrática Sequencial aplicado ao problema da mola

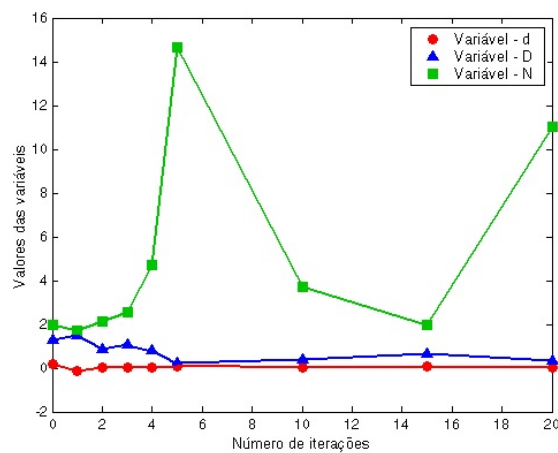


Figura 7.5: Histórico das variáveis do problema da mola obtido pelo método de SQP

Capítulo 8

Discussões e Conclusões

Para facilitar a comparação entre as cinco técnicas estudadas, as Tabelas 8.1 e 8.2 apresentam as soluções ótimas encontradas para o Exemplo Ilustrativo 1 e o Problema da Mola, respectivamente.

Observando a Tabela 8.1, pode-se concluir que, para o Exemplo Ilustrativo 1 os métodos convergiram rapidamente (exceto os métodos Penalidade Quadrática e Multiplicadores de Lagrange Aumentado, que exigiram um número maior de iterações). Considerando o desempenho quanto ao número de iterações, precisão com relação ao ótimo e a viabilidade, o Método SQP com busca linear se mostrou a técnica mais eficiente, o que correspondeu às expectativas. As soluções obtidas pelos Métodos de Penalidade Quadrática e Penalidade Quadrática ℓ_1 , são idênticas, no entanto, o número de iterações são muito diferentes. Isto mostra que, para este exemplo, quando se trabalha com a função ℓ_1 a velocidade de convergência aumenta de forma considerável.

Todos os métodos encontraram um ponto viável exceto o Método do Conjunto Ativo para QP convexa, uma vez que, o ótimo encontrado não satisfaz a restrição c_2 .

Método	nº Iter.	$(x^*)^T$	f	$c_1(x^*)$	$c_2(x^*)$	$c_3(x^*)$	$c_4(x^*)$	$c_5(x^*)$
Conjunto Ativo	4	[0,6663 1,3332]	-8,2229	0,0005	-0,0001	3,0001	0,6663	1,3332
Pen. Quadrática	17	[0,6667 1,3333]	-8,2222	0	0	0,3333	0,6667	1,3333
Pen. Quadrática ℓ_1	5	[0,6667 1,3333]	-8,2222	0	0	0,3333	0,6667	1,3333
MLMA	17	[0,6665 1,3334]	-6,4446	0,0001	-0,0003	0,3336	0,6665	1,3334
SQP	2	[0,6667 1,3333]	-8,2222	0	0	0,3333	0,6667	1,3333

Tabela 8.1: Resultados ótimos encontrados para o Exemplo Ilustrativo 1

Método	nº Iter.	$[d \ D \ N]$	f	c_1	c_2	c_3	c_4
Conjunto Ativo	—	—	—	—	—	—	—
Pen. Quadrática	13	[0,0534 0,4001 9,1470]	0,0127	0	0	-4,1255	-0,6977
Pen. Quadrática ℓ_1	4	[0,0666 0,8313 2,7676]	0,0176	-0,1268	0	-3,8884	-0,4015
MLMA	22	[0,0453 0,2153 11,6373]	0,0060	0,6158	-0,0194	-10,7876	-0,8263
SQP	20	[0,0516 0,3330 11,0275]	0,0115	0,1976	-0,0464	-4,9196	-0,7436

Tabela 8.2: Resultados ótimos encontrados para o Problema da Mola

No caso do Problema da Mola, conforme pode ser observado na Tabela 8.2, os métodos apresentaram maiores dificuldades para obter a solução ótima. Inicialmente, deve-se ressaltar que o Método do Conjunto Ativo para QP convexa não pode ser aplicado, uma vez que o problema possui restrições altamente não lineares. Esta é uma séria desvantagem para este

método, uma vez que a maioria dos problemas práticos contém uma ou várias restrições não lineares.

O Método dos Multiplicadores de Lagrange Aumentado e a Programação Quadrática Sequencial com busca linear não convergiram para uma solução ótima viável. Apesar de que, o Método SQP obteve uma solução muito próxima da aproximação obtida pelo Método de Penalidade Quadrática, que obteve o menor valor para a função objetivo obedecendo à todas as restrições. Para este exemplo, o Método de Penalidade Quadrática ℓ_1 converge rapidamente, em apenas 4 iterações, mas a solução foi pior se comparada com a obtida pelo método de Penalidade Quadrática.

Este problema, apesar de trabalhar apenas com 3 variáveis e 4 restrições, serviu para mostrar as dificuldades inerentes à solução de problemas de otimização restritos.

Além disso, as simulações numéricas permitiram o entendimento de como a performance dos métodos é influenciada pelo tipo de problema estudado. Desta forma, fica claro que não existe um algoritmo universal, a cada problema deve-se procurar qual método pode ser aplicado com maior eficiência para se obter a solução ótima.

Nesta dissertação foi desenvolvido o estudo de alguns métodos clássicos de otimização restrita, aplicando seus algoritmos em dois problemas de otimização e analisando os resultados obtidos. Também foram apresentados fundamentos teóricos, tais como, condições necessárias e suficientes de otimalidade, formulações matemáticas e principais aspectos relacionados à convergência dos métodos. Os algoritmos de cada método foram implementados computacionalmente, e as soluções obtidas foram ilustradas em gráficos os quais auxiliam a compreensão. Assim, entende-se que os objetivos pretendidos com este trabalho foram alcançados.

Referências Bibliográficas

- [1] ARORA, J. S., *Introduction to Optimum Design*, International Edition, McGraw-Hill, Singapore, pp. 450 - 462, 1989.
- [2] BAZARAA, S. M., SHERALI, H. D., SHETTY, C. M., *Nonlinear Programming Theory and Algorithms*, John Wiley & Sons, Atlanta, 2006.
- [3] BERTSEKAS, D. P., *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*, Academic Press, New York, 1982.
- [4] BESTSEKAS, D. P., *Nonlinear Programming*, Athena Scientific, Belmont, MA, second ed., 1999.
- [5] BRANDÃO, M. A. L., *Estudo de Alguns Métodos Determinísticos de Otimização Irrestrita*, Dissertação de Mestrado - Matemática, Universidade Federal de Uberlândia, 2010.
- [6] FLETCHER, R., *Practical Methods of Optimization*, John Wiley & Sons, MA, New York, second ed., 1987.
- [7] GARCIA - PALOMARES, U. M., MANGASARIAN, O. L., *Superlinearly Convergent Quasi-Newton Methods for Nonlinearly Constrained Optimization Problems*, Mathematical Programming, 11, pp. 1 - 13, 1976.
- [8] HAN, S. P., *A Globally Convergent Method for Nonlinear Programming*, Journal of Optimization Theory and Applications, 22, pp. 297 - 309, 1977.
- [9] HAN, S. P., *Superlinearly Convergent Variable Metric Algorithms for General Nonlinear Programming Problems*, Mathematical Programming, 11, pp. 263 - 282, 1976.
- [10] HESTENES, M. R., *Calculus of Variations and Optimal Control Theory*, Wiley, New York, 1966.
- [11] HESTENES, M. R., *Multiplier and Gradient Methods*, Journal of Optimization Theory and Applications, 4, pp. 303 - 320, 1969.
- [12] HESTENES, M. R., STIEFEL, E., *Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems*, J. Research National Bureau of Standards, 49, pp. 409 - 436, 1952.
- [13] HUANG, L., WU, Q., YUAN, G., *On the Global Convergence of the Perry-Shanno Method for Nonconvex Unconstrained Optimization Problems*, Applied Mathematics, 2, pp. 315 - 320, 2011.
- [14] IZMAILOV, A., SOLODOV, M., *Otimização volume 1 - Condições de Otimalidade, Elementos de Análise Convexa e de Dualidade*, Rio de Janeiro, IMPA, 2007.
- [15] IZMAILOV, A., SOLODOV, M., *Otimização volume 2 - Métodos Computacionais*, Rio de Janeiro, IMPA, 2007.

- [16] LIMA, A. D., *Otimização do Aproveitamento do Palhiço da Cana-de-áçucar*, Tese de Doutorado - Agronomia, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - Campus de Botucatu, 2009.
- [17] LIMA, E. L., *Curso de Análise vol. 2*, Rio de Janeiro, IMPA, 2006.
- [18] MARATOS, N., *Exact Penalty Function Algorithms for Finite Dimensional and Control Optimization Problems*, PhD Thesis, University of London, 1978.
- [19] NOCEDAL, J., WRIGHT, S. J., *Numerical Optimization*, Springer Series in Operations Research, second ed., 2000.
- [20] NUNES, F. T., *Programação Quadrática Sequencial e Condições de Qualificação*, Dissertação de Mestrado - Matemática Aplicada, Universidade Estadual de Campinas, 2009.
- [21] PEDROSO, L. G., *Programação Não Linear Sem Derivadas*, Tese de Doutorado - Matemática Aplicada, Universidade Estadual de Campinas, 2009.
- [22] POWELL, M. J. D., *A Fast Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization Calculations*, in Numerical Analysis Dundee 1977, Watson, G. A., ed., Springer Verlag, Berlin, pp. 144 - 157, 1977.
- [23] POWELL, M. J. D., *Algorithms for Nonlinear Constraints that use Lagrangian Functions*, Mathematical Programming, 14, pp. 224 - 248, 1978.
- [24] POWELL, M. J. D., *A Method for Nonlinear Constraints in Minimization Problems*, in Optimization, Fletcher R., ed., Academic Press, New York, pp. 283 - 298, 1969.
- [25] RIBEIRO, A. A., *Convergência Global dos Métodos de Filtro para Programação Não Linear*, Tese de Doutorado - Métodos Numéricos em Engenharia, Setores de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, 2005.
- [26] ROSAL, M. C. F., *Programação Não Linear Aplicada à Otimização de Redes Pressurizadas de Distribuição de Água*, Dissertação de Mestrado - Engenharia Civil, Universidade Federal de Pernambuco, 2007.
- [27] SCHUVERDT, M. L., *Métodos de Lagrangiano Aumentado com Convergência Utilizando a Condição de Dependência Linear Positiva Constante*, Tese de Doutorado - Matemática Aplicada, Universidade Estadual de Campinas, 2006.
- [28] WILSON, R. B., *A simplicial Algorithm for Concave Programming*, PhD Thesis, Graduate School of Administration, Harvard University, 1963.
- [29] ZHOU, A., ZHU, Z., FAN, H., QING, Q., *Three New Hybrid Conjugate Gradient Methods for Optimization*, Applied Mathematics, 2, pp. 303 - 308, 2011.