

ELIZABETH WEGNER KARAS

**EXEMPLOS DE TRAJETÓRIA CENTRAL
MAL COMPORTADA EM OTIMIZAÇÃO CONVEXA
E UM ALGORITMO DE FILTROS
PARA PROGRAMAÇÃO NÃO LINEAR**

Tese submetida ao programa de Pós-graduação em Engenharia de Produção da
Universidade Federal de Santa Catarina e à Universidade de Paris I -
Panthéon-Sorbonne, em co-tutela de tese, para obtenção do grau de Doutor.

**Orientadores : Prof. Clóvis Caesar Gonzaga, Dr.
Prof. Jean Charles Gilbert, Dr.**

Florianópolis

2002

*sossegue coração
ainda não é agora
a confusão prossegue
sonhos a fora
calma calma
logo mais a gente goza
perto do osso
a carne é mais gostosa*

Paulo Leminski

Para
Edilton e Eduardo.

Agradecimentos

Durante o doutoramento, dei à luz o Eduardo. Hoje ele está com 3 anos de idade e fica fascinado quando faz algo que antes não conseguia. E aí diz “eu cresci” e “eu vou crescer mais”. É com este mesmo sentimento que concluo este trabalho que é apenas o início de uma nova fase.

Mas concluir uma fase é um bom momento para fazer o balanço, somar o que aprendemos, diminuir o que sofremos, e perceber que valeu à pena.

Trabalhar com o Professor Clóvis Caesar Gonzaga durante os anos de doutoramento foi muito prazeroso, porque ele realmente dedica o melhor de si aos seus orientandos. Com ele aprendi não só Matemática, mas gastronomia, literatura, cultura geral, valores, sobre a vida enfim.

O ano de doutoramento sanduíche na França foi muito importante na minha formação. Agradeço ao Professor Jean Charles Gilbert que me orientou durante este período e que tornou realidade o processo de co-tutela com a Universidade Paris I - Panthéon Sorbonne.

Agradeço ao Professor Jean Bernard Baillon por ter aceitado dar seu parecer a este trabalho e vir ao Brasil participar da banca.

Ao Professor José Mario Martínez agradeço seu parecer, sua participação na banca, suas críticas e sugestões que em muito melhoraram este texto.

Desde o início de meu doutoramento sanduíche pude contar com o apoio da Professora Cláudia Alejandra Sagastizabal, a quem agradeço não só o capricho com que leu este texto como sua participação na banca.

Ao longo de meus anos de existência tive a felicidade de encontrar pessoas que souberam me apoiar e desafiar na hora e medida certa. Em 1979, no Colégio Estadual do Paraná, a Professora Arlete Mendes Brand estranhou minhas calças remendadas, que para mim significavam “rebeldia”. Tornamo-nos amigas. Três anos mais tarde, no momento de ingressar na Universidade, Arlete me desafiou a fazer dois cursos de graduação em paralelo: Engenharia Cartográfica na UFPR e Matemática na PUCPR, e financiou o primeiro ano deste curso até que a PUCPR concedeu-me uma bolsa de estudos.

Numa noite fria de 1987, já lecionando na PUCPR, enquanto aguardava o

ônibus para voltar para casa, conheci Professor Celso Penteado Serra. Alguns meses depois, fui sua aluna num curso de linguagem de programação e, ao final do curso, ele me convidou para "fazer pesquisa" no extinto LACIN - Laboratório Acadêmico de Informática da PUCPR. Foi meu primeiro contato com a pesquisa.

Em 1992, iniciei o curso de Mestrado no IME-USP e logo percebi que minha formação tinha muitas deficiências. Os Professores Waldyr Muniz Oliva e Manuel Valentim de Pera Garcia me encorajaram a superá-las. Conclui o mestrado em 1994 sob orientação do Professor Edson de Faria.

Foi também no IME-USP que conheci o Professor Carlos Humes Junior, que em 1997 reencontrei na UFSC. Ele me convidou para um café e a conversa que seguiu-se mudou completamente o rumo do meu doutoramento e possivelmente da minha carreira. Foi graças a esta conversa que comecei a trabalhar com o Professor Clóvis Caesar Gonzaga. Agradeço ao Professor Antonio Carlos Novaes, meu então orientador no Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção, que entendeu e apoiou minha decisão.

Durante estes anos de estudo também contei com a companhia e amizade de Márcia, Luiz Carlos, Rafael, Laurent, Xavier, Cynara, Debora, Deise. À família Matioli e aos casais Bracarense e Vanti agradeço a hospitalidade com que me receberam em seus lares. A Laurent Chauvier agradeço a boa vontade e competência com que corrigiu a versão francesa da minha tese.

Agradeço também à algumas instituições: Departamento de Matemática da UFPR, que concedeu-me licença para cursar o doutoramento, Departamento de Matemática da UFSC onde desenvolvi grande parte da minha tese, ao INRIA - Institut National de Recherche en Automatique et en Informatique onde passei o ano de doutoramento sanduíche, à CAPES e CNPq que financiaram estes anos de estudo.

Aos meus pais Ronald e Ernestina, exemplos de perseverança, retribuo seu amor e dedicação. Agradeço o apoio de meus irmãos Ronald e Robert, minhas avós Irene e Alice, minha sogra Maria Terezinha, cunhadas Mirian, Liene, Maria Luiza e Nailor, cunhados Eloi e Clóvis, sobrinhos Ronald Neto, Jéssica, Pedro, Ana Luiza, Fernanda e Juliana, tios José Carlos, Rosali, Odilon, Pedro e Isabel.

Agradeço ao Edilton e ao Eduardo pelo apoio incondicional. A eles dedico este trabalho.

Resumo

Neste trabalho apresentamos alguns exemplos de trajetória central mal comportada em otimização convexa. Nós trabalhamos numa região extremamente simples de \mathbb{R}^2 e construímos funções objetivo com grau de complexidade crescente. Primeiro exibimos uma função convexa contínua com uma trajetória central parecida com uma antena de TV, contendo uma infinidade de segmentos horizontais de comprimento constante. O segundo exemplo é obtido perturbando suavemente o anterior, o que resulta numa trajetória em forma de ziguezague com variação infinita. Posteriormente suavizamos ambas as funções e obtivemos os mesmos comportamentos, não só para funções objetivo diferenciáveis como até para funções C^∞ .

Apresentamos também, nesta tese, um algoritmo de filtro para programação não linear e provamos sua convergência global para pontos estacionários. Cada iteração é composta de uma fase de restauração, que reduz uma medida de inviabilidade, e uma fase de otimalidade, que reduz a função objetivo numa aproximação tangencial do conjunto viável. Essas duas fases são totalmente independentes, e o único acoplamento entre elas é estabelecido pelo filtro. O método é independente dos algoritmos internos usados em cada iteração, desde que esses algoritmos satisfaçam hipóteses razoáveis sobre sua eficiência. O algoritmo principal não usa regiões de confiança e nenhuma propriedade dos modelos lineares. Sob hipóteses padrões, nós mostramos dois resultados: para o filtro com um tamanho mínimo, o algoritmo gera um ponto de acumulação estacionário; para um filtro levemente maior, todos os pontos de acumulação são estacionários.

Abstract

We present some examples of ill-behaved central paths in convex optimization. We work with an extremely simple region in \mathbb{R}^2 and construct increasingly complex objective functions. First, we exhibit a continuous convex function giving rise to an “antenna-like” central path, containing an infinite number of horizontal segments of constant length. The second example is obtained by slightly perturbing the first one and results in a zig-zagging central path with infinite variation. We proceed by smoothing both functions, and produce the same behaviors as before for a differentiable objective function, and finally for a C^∞ function.

In this work we present also a filter algorithm for nonlinear programming and prove its global convergence to stationary points. Each iteration is composed of a restoration phase, which reduces a measure of infeasibility, and an optimality phase, which reduces the objective function in a tangential approximation of the feasible set. These two phases are totally independent, and the only coupling between them is provided by the filter. The method is independent of the internal algorithms used in each iteration, as long as these algorithms satisfy reasonable assumptions on their efficiency. The main algorithm uses no trust regions, and no properties of the linear models. Under standard hypotheses, we show two results: for a filter with minimum size, the algorithm generates a stationary accumulation point; for a slightly larger filter, all accumulation points are stationary.

Sumário

Introdução	1
1 Revisão de conceitos	9
1.1 Método de região de confiança	13
1.1.1 Propriedades do algoritmo	16
1.1.2 Ponto de Cauchy	18
1.2 Pontos interiores e PNL	21
1.2.1 Condições de Karush-Kuhn-Tucker	22
1.2.2 Redução do parâmetro de barreira	24
1.3 Resolução do problema barreira	25
1.3.1 Método de programação quadrática sequencial	25
1.3.2 Método de Newton	29
1.3.3 Equivalência entre o método PQS e Newton	32
2 Exemplos de trajetória central mal comportada	34
2.1 Introdução	35
2.2 Problema	37
2.3 Exemplos com funções objetivo contínuas	38
2.4 Suavização do máximo de duas funções	47
2.4.1 Exemplos de funções de suavização	50
2.5 Exemplos continuamente diferenciáveis	52
2.5.1 Um exemplo de classe C^1	52
2.5.2 Um exemplo de classe C^q com $q > 1$	57
2.6 Um exemplo de classe C^∞	59
2.7 Consequências algorítmicas	70

3 Um algoritmo de filtros baseado em restauração	76
3.1 Introdução	77
3.2 O algoritmo	83
3.3 Algoritmos internos	92
3.3.1 Algoritmo do passo de otimalidade	92
3.4 Melhoramentos	100
3.4.1 Convergência dos valores da função objetivo	101
3.4.2 O algoritmo modificado	105
3.4.3 O passo tangencial simplificado	106
3.5 Um exemplo gráfico	108
Conclusões	112
Apêndice	116
Referências Bibliográficas	119

Introdução

Neste trabalho apresentamos dois resultados inéditos. O primeiro deles consiste de alguns exemplos de trajetórias centrais com comportamentos indesejáveis em otimização convexa. Foi motivado por discussões que se iniciaram em agosto de 1999 quando meus orientadores, Clóvis Caesar Gonzaga e Jean Charles Gilbert, e eu, nos encontrávamos na França, no “Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique” (INRIA) e estudávamos os trabalhos de McLinden [56] e de Monteiro e Zhou [60]. McLinden mostra, entre outras coisas, que quando o problema tem complementaridade estrita, os pontos limites de qualquer sequência convergente de pontos centrais são centros analíticos do conjunto ótimo. Monteiro e Zhou garantem que se as funções envolvidas na definição do problema são analíticas, além de outras hipóteses razoáveis, então a trajetória central primal é uma curva que converge para um único ponto no conjunto ótimo. Tentando entender a necessidade de uma hipótese forte como analiticidade, construímos exemplos, numa região bastante simples do \mathbb{R}^2 , de problemas convexos em que todos os pontos do conjunto ótimo são pontos de acumulação da trajetória central primal. Estes exemplos são apresentados no Capítulo 2, que é praticamente a tradução do nosso trabalho [35], publicado inicialmente como “Rapport de Recherche” do INRIA e submetido posteriormente à revista “Mathematical Programming”.

O segundo resultado consiste de um algoritmo de filtros globalmente convergente para programação não linear. Interessados em propor um algoritmo para resolver problemas não lineares, estudamos vários trabalhos. Byrd, Gilbert e Nocedal [9] e Byrd, Hribar e Nocedal [10] propõem um algoritmo de pontos interiores para programação não linear. A resolução de cada problema de barreira é baseada nas técnicas de programação quadrática sequencial (PQS) com região de confiança. Cada iteração de resolução de um subproblema quadrático decompõe o passo em duas componentes: normal e tangencial, seguindo a estratégia de Byrd [8] e Omo-

jokun [66]. O passo normal ou de restauração está relacionado com a redução da inviabilidade, e o passo tangencial com a melhora da otimalidade. Em problemas de programação não linear com restrições geralmente nos deparamos com estes dois objetivos conflitantes: otimalidade e viabilidade. Estas fases tornam-se mais independentes, mas não totalmente, nos métodos de restauração inexata propostos por Martínez [51], Martínez e Pilotta [52, 53], os quais, na fase de otimalidade, centram a região de confiança no ponto intermediário obtido depois da fase de restauração. Em julho de 2001, Clóvis Gonzaga retornou da Itália, onde havia participado de alguns congressos na área, muito entusiasmado com as idéias dos algoritmos de filtro introduzidos por Fletcher e Leyffer [29]. Foi quando então surgiram as idéias norteadoras do algoritmo proposto nesta tese: um algoritmo de filtro em que cada iteração é decomposta em duas fases, de restauração e de otimalidade, totalmente independentes. O algoritmo é apresentado no Capítulo 3, que é praticamente a tradução do trabalho [40], escrito originalmente em inglês por Clóvis Gonzaga, Márcia Vanti e eu.

Feita esta breve introdução, explicaremos um pouco mais o nosso trabalho, inserindo-o no contexto das pesquisas desenvolvidas na área.

Métodos de pontos interiores e PL. O método simplex desenvolvido por Dantzig [21] há 50 anos é, ainda, o algoritmo mais amplamente utilizado para resolver problemas de programação linear (PL). O método simplex é eficiente e elegante, mas possui complexidade exponencial. Na verdade, um problema elaborado por Klee e Minty [45] força o método simplex a executar um número de operações aritméticas que cresce exponencialmente com o número de variáveis do problema, conferindo ao método uma complexidade exponencial no pior caso.

O primeiro algoritmo polinomial para programação linear foi publicado por Khachiyan [44] em 1978, e tinha um limite de complexidade de $O(n^4L)$ operações aritméticas, onde n é a dimensão do espaço, e L é o comprimento em bits dos dados de entrada. Esse limite foi baixado por Karmarkar [43] em 1984, num paper que tornou-se um marco, pois abriu um novo campo de pesquisa conhecido hoje como “métodos de pontos interiores”.

Em 1986, Renegar [70] descreveu um algoritmo com a mesma complexidade de Karmarkar mas baseado em métodos de centros e seguiu pela primeira vez a trajetória central (que descreveremos adiante). Em 1987, Gonzaga [38] e Vaidya [79] obtiveram, simultaneamente, algoritmos com complexidade de $O(n^3L)$ operações.

O algoritmo de Gonzaga baseia-se na função barreira logarítmica, enquanto que o de Vaidya é uma extensão dos resultados de Renegar. A complexidade atual de $O(n^3/\ln n - L)$ operações é devida a Anstreicher [3].

A partir de então vários algoritmos foram desenvolvidos. Inicialmente, algoritmos primais fundamentados nas três linhas mencionadas acima: métodos de redução potencial que usam a função potencial de Karmarkar, métodos de centros abordados por Renegar e métodos que seguem a trajetória primal baseados na função barreira.

A partir de 1987, com um artigo de Kojima, Mizuno e Yoshise [47], os algoritmos primais-duais roubam a cena. Esses métodos são elegantes, eficientes e facilmente estendidos para uma classe grande de problemas de complementaridade linear e programação quadrática.

A evolução deste campo é descrita por Todd [77], Gonzaga [39], den Hertog [23] e, em [73], por Roos, Terlaky e Vial.

Métodos de pontos interiores e PNL. As abordagens de penalização foram centrais na evolução das técnicas de otimização. Problemas com restrições são frequentemente resolvidos por uma sequência de problemas penalizados, que dependem de um único parâmetro de penalização μ . Os otimizadores associados com cada valor de μ definem uma “trajetória de otimizadores”, que deve ser bem comportada e conduzir a uma solução do problema original.

O primeiro estudo profundo de trajetória de otimizadores, hoje conhecida como “trajetória central”, é devido a Bayer e Lagarias [5] e a Megiddo [57], que dão uma caracterização definitiva da trajetória primal-dual.

Os métodos de penalidade interna, também conhecidos como métodos de barreira, tiveram um desenvolvimento explosivo nos últimos 15 anos, devido ao sucesso dos métodos de pontos interiores para problemas lineares e de complementaridade linear (veja [22, 42, 46, 64, 73, 76, 86]).

A função barreira logarítmica foi utilizada pela primeira vez em otimização por Frisch [33]. O método de função penalizada barreira logarítmica é estudado extensamente no clássico livro de Fiacco e McCormick [26]. Na verdade, eles descrevem, de modo geral, métodos de penalidade externa, interna e mista para programação não linear.

Todos os métodos de pontos interiores seguem a trajetória central, ou pelo menos geram pontos em alguma vizinhança, possivelmente grande, da trajetória. O

sucesso desses métodos em programação linear despertou o interesse em estender tais abordagens para o caso não linear (PNL).

Usualmente, as restrições de desigualdade não lineares são transformadas em igualdades pela inclusão de variáveis de folga. Os métodos de pontos interiores em cada passo devem resolver um problema de centralização, minimizando uma função penalizada, normalmente com barreira logarítmica sobre as folgas. Para tanto, usa-se um algoritmo de programação não linear. Estudam-se estratégias de globalização para a resolução desses problemas de centralização. As estratégias de globalização visam garantir convergência global do algoritmo, ou seja, convergência mesmo a partir de pontos iniciais distantes da solução ótima. Há basicamente duas formas de globalização: métodos de região de confiança e de busca linear.

Yamashita, Yabe e Tanabe [88] usam um método de região de confiança com derivadas segundas exatas. As restrições de igualdade são tratadas por uma penalidade ℓ_1 . Por outro lado, Forsgren e Gill [32] adotam uma busca linear que usa para manipular, respectivamente, as restrições de igualdade e desigualdade, uma penalidade quadrática clássica e a barreira logarítmica, aumentadas por termos que medem a proximidade à trajetória central. El-Bakry, Tapia, Tsuchiya e Zhang [25] usam uma busca linear e manipulam as desigualdades com variáveis de folga. Os resultados computacionais são apresentados com uma função de mérito que é a norma ℓ_2 dos resíduos para as condições necessárias de primeira ordem. Com este procedimento, há uma tendência de convergência para pontos críticos que não são minimizadores. Por causa disto, Vanderbei e Shanno [80] preferem usar uma função de mérito que manipula as restrições de igualdade como penalidades quadráticas e as folgas com termos barreira. Seu contexto também é de busca linear e as hessianas indefinidas são modificadas através de perturbações da diagonal. Gay, Overton e Wright [34] encaixam-se neste mesmo contexto. A função de mérito é uma função barreira clássica com um lagrangeano aumentado para manipular as restrições de igualdade. Finalmente, Byrd, Hribar e Nocedal [10] e Byrd, Gilbert e Nocedal [9] usam, como discutimos anteriormente, programação quadrática sequencial com região de confiança e uma função barreira. Essencialmente, as restrições de desigualdade são transformadas em igualdades que são manipuladas explicitamente e as variáveis de folga são incorporadas à função de mérito como termos da barreira logarítmica. Eles retomam os trabalhos de Byrd [8] e Omojokun [66]. Todos os trabalhos que citamos acima usam uma função de mérito para avaliar cada passo.

Recentemente, Ulbrich, Ulbrich e Vicente [78] e Wächter e Biegler [82] propuseram métodos de pontos interiores para programação não linear que utilizam a técnica de filtros em substituição à função de mérito. Em [78], o algoritmo decompõe o passo primal-dual obtido das condições de KKT perturbadas em um passo normal e um tangencial, cujos tamanhos são controlados por um parâmetro tipo região de confiança. Em [82], o algoritmo proposto usa busca linear na direção de Newton obtida a partir das condições de KKT do problema. Além de provar convergência global, o que ambos os trabalhos fazem, [82] mostra também convergência local.

Trajétoria central. Sabemos que, para programação linear, a trajetória é bem definida, infinitamente diferenciável e tem um comprimento limitado, associado com a complexidade dos métodos de trajetória central. O comportamento limite das derivadas da trajetória é descrito por Monteiro e Adler [59], que mostram que a trajetória se aproxima da face ótima com uma inclinação bem definida. Resultados similares são obtidos para problemas convexos por McLinden [56]: ele mostra que sob hipóteses razoáveis, que incluem complementaridade estrita, a trajetória central converge para o centro analítico do conjunto ótimo do problema. Vavasis e Ye [81] mostram que, para programação linear em \mathbb{R}^n , a trajetória central é composta de uma sequência de no máximo n^2 curvas alternadas de setores “quase-retos”. A partir destes resultados, é razoável esperar conjuntos de otimizadores calmos e suaves em problemas convexos. Neste trabalho, mais especificamente no Capítulo 2, entretanto, mostramos que isto não é necessariamente verdade. Nós exibimos exemplos de problemas convexos para os quais a trajetória associada com qualquer função penalidade tem um comportamento indesejável.

Trabalhamos numa região extremamente simples de \mathbb{R}^2 e construímos funções objetivos de grau crescente de complexidade. Primeiro, exibimos uma função convexa que dá origem a uma trajetória central em forma de antena de TV, contendo um número infinito de segmentos horizontais de comprimento constante. O segundo exemplo é obtido perturbando suavemente a primeira função, o que resulta numa trajetória em forma de ziguezague com variação infinita.

Nós, então, suavizamos ambas as funções objetivo sem modificar o *layout* das trajetórias, obtendo os mesmos comportamentos, não só para funções diferenciáveis como até para funções de classe C^∞ . Usamos, para tanto, uma técnica de suavização inspirada nos trabalhos de Chen e Mangasarian [15, 16]. Cabe observar, no entanto, que não é possível construir trajetórias em forma de antena de TV ou ziguezague

com funções analíticas. Monteiro e Zhou [60] garantem que se as funções envolvidas na definição do problema são analíticas, juntamente com outras hipóteses razoáveis, então a trajetória primal é uma curva que converge para um único ponto no conjunto ótimo (resultados relacionados são dados por Cominetti [19] e Champion [14]). É surpreendente, portanto, que suavização C^∞ ainda nos permita construir trajetórias centrais com comportamento indesejável.

Mostramos com estes exemplos que convexidade, mesmo que aliada à diferenciabilidade em qualquer grau, não é suficiente para impedir formas patológicas da trajetória central.

Métodos que usam função de mérito. Ao resolver um problema de programação não linear, é necessário, simultaneamente, reduzir uma função objetivo e obter viabilidade. Esses dois objetivos são conflitantes, e o balanceamento dos esforços em viabilização e otimização são, normalmente, a maior dificuldade nos algoritmos. Uma maneira de fazer isto é através de funções de mérito. De modo geral, a função de mérito é uma combinação convexa de uma medida de otimalidade e de uma medida de inviabilidade. Os métodos discutidos por Byrd, Gilbert e Nocedal [9], Byrd, Hribar e Nocedal [10], Gomes, Maciel e Martínez [36], que são algoritmos de programação quadrática sequencial (PQS) com região de confiança, usam uma função de mérito para avaliar o passo a ser dado em cada iteração. A estratégia para o cálculo do passo tentativo é inspirada em Byrd [8] e Omojokun [66]. O passo é decomposto em duas componentes: normal e tangencial. O passo normal é obtido minimizando-se a norma da aproximação linear das restrições na região de confiança. O passo tangencial, por sua vez, é calculado minimizando a aproximação quadrática do lagrangeano no espaço nulo da Jacobiana das restrições e sujeito ainda à região de confiança. Se o passo tentativo produz um decréscimo suficiente numa função de mérito, então o passo é aceito. Caso contrário, o raio da região de confiança é reduzido e o passo recalculado, repetindo-se todo o processo. Em geral, a direção do passo muda quando o tamanho da região é alterado.

Os algoritmos de restauração inexata propostos por Martínez [51] e Martínez e Pilotta [52, 53] também usam uma função de mérito para avaliar o ponto tentativo. Cada iteração é decomposta em duas fases: a primeira, dita fase de restauração, procura reduzir a inviabilidade e a segunda procura reduzir a otimalidade. Na fase de otimalidade, os algoritmos de restauração inexata usam um método de região de confiança, porém a região de confiança é centrada no ponto intermediário obtido na

fase de restauração, e não no ponto corrente. O ponto obtido na fase de otimalidade é o ponto tentativo que é avaliado através de uma função de mérito. Se ele não for aceito, a região de confiança é reduzida e recalcula-se um novo ponto tentativo. Assim, apenas a fase de otimalidade é repetida após uma redução da região. Esta é uma diferença importante em relação aos métodos de PQS com região de confiança, acima expostos.

Por outro lado, os métodos apresentados em [25, 34, 75, 80] aplicam o método de Newton às condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) do problema, e fazem uma busca linear, tipo Armijo, na direção assim calculada para obter uma redução suficiente numa função de mérito.

Não há consenso nas medidas de otimalidade e inviabilidade a serem usadas na função de mérito. Mas o ponto ainda mais crítico é a atualização do parâmetro de penalidade, ou em outras palavras, do cálculo da combinação dessas medidas. Dependendo da escolha do parâmetro de penalidade, o algoritmo pode ficar bastante lento ou pode, por outro lado, recusar uma solução ótima.

Métodos de filtro. Recentemente, Fletcher e Leyffer [29] propuseram métodos de filtro, oferecendo assim uma alternativa às funções de mérito como ferramenta para garantir convergência global para programação não linear. Com este trabalho, Fletcher e Leyffer estabeleceram uma nova classe de métodos.

O primeiro resultado de convergência para essa classe de métodos foi proposto por Fletcher, Leyffer e Toint [30], em que a função objetivo é localmente aproximada por uma função linear, conduzindo, em cada iteração, à solução (exata) de um problema linear. Ou seja, este algoritmo é uma mistura do uso de filtro com programação linear sequencial (PLS). Esta abordagem foi generalizada por Fletcher, Leyffer e Toint [31] e Fletcher et. al. [28], nos quais a função objetivo é aproximada por um modelo quadrático, que resulta na técnica de PQS com região de confiança. Em cada iteração o passo é decomposto em duas componentes: normal e tangencial, como sugerido por Byrd [8] e Omojokun [66] e utilizado em [9, 10, 36]. Uma fase de restauração da viabilidade é requerida quando o problema de PQS com região de confiança não satisfaz uma certa condição de compatibilidade, que depende do raio da região de confiança e do modelo linear das restrições.

Algoritmo proposto. Nós propomos neste trabalho, mais especificamente no Capítulo 3, um método de filtro para programação não linear em que a fase de restauração é naturalmente incorporada ao algoritmo. Cada iteração é composta

de uma fase de restauração, que reduz uma medida de inviabilidade, e uma fase de otimalidade, que melhora o valor da função objetivo numa aproximação tangencial do conjunto viável. Essas duas fases são totalmente independentes, e o único acoplamento entre elas é estabelecido pelo filtro. O método é independente dos algoritmos internos usados em cada iteração, desde que esses algoritmos satisfaçam hipóteses razoáveis sobre sua eficiência. O algoritmo principal não usa regiões de confiança e nenhuma propriedade de compatibilidade dos modelos. Sob hipóteses padrões, mostramos dois resultados: para o filtro com um tamanho mínimo, o algoritmo gera um ponto de acumulação estacionário; para um filtro levemente maior, todos os pontos de acumulação são estacionários.

Organização dos capítulos. Durante os anos de doutoramento fizemos vários seminários (e foram muitos, o que foi realmente ótimo). No Capítulo 1 aproveitamos para apresentar uma coleção de frutos colhidos em alguns destes seminários. Fazemos uma revisão de conhecimentos direta ou indiretamente relacionados com este trabalho. No Capítulo 2 construímos alguns exemplos de trajetórias centrais mal comportadas em otimização convexa. No Capítulo 3 propomos um novo algoritmo de filtros para otimização não linear e provamos sua convergência global. Ao final apresentamos algumas conclusões gerais e estabelecemos perspectivas de trabalhos futuros. No apêndice provamos algumas propriedades de convergência de transformações ponto-conjunto que usamos no Capítulo 3.

Capítulo 1

Revisão de conceitos

Durante os anos de doutoramento fizemos vários seminários, o que foi bastante enriquecedor, pois acredito que é quando expressamos nossos conhecimentos aos outros que eles tornam-se mais claros para nós mesmos. Aproveito para apresentar neste capítulo uma coleção de frutos colhidos nestes seminários, fazendo uma revisão de conceitos básicos que pode ser posta de lado por um leitor mais experiente. De qualquer forma, peço desculpas se me excedi nos detalhes, mas fiz deste texto, antes de tudo, um guia de referências para mim. Inicialmente, fixamos a notação e estabelecemos alguns conceitos básicos.

Notação. Nós trabalhamos com vetores colunas e matrizes denotados, respectivamente, por letras minúsculas e maiúsculas. Vetores diferentes são denotados por superíndices. Subíndices denotam as componentes de um vetor. Denotamos a transposta de uma matriz A por A^T e o produto escalar de dois vetores $u, v \in \mathbb{R}^n$ por $u^T v$. Para economizar espaço, frequentemente, escrevemos o vetor de componentes u e v como

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = (u, v).$$

Para um vetor u , a letra maiúscula correspondente U denota a matriz diagonal formada pelas componentes daquele vetor. As operações componente a componente de vetores são denotadas pelas notações usuais para números reais. Assim, por exemplo, uv denota o vetor de componentes $u_i v_i$. Note que $uv \equiv Uv$ e, se A é uma matriz, então $Auv \equiv AUv$, mas em geral $Auv \neq (Au)v$. Dado um vetor $u \in \mathbb{R}^n$ de componentes não nulas, a notação u^{-1} é usada para o vetor de componentes u_i^{-1} , $i = 1, \dots, n$. A letra e denota o vetor de uns, $e = [1 \cdots 1]^T$, cuja dimensão é indicada

pelo contexto.

Usaremos a seguinte notação para o primeiro octante e para os vetores de \mathbb{R}^n estritamente positivos:

$$\mathbb{R}_+^n = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \geq 0\},$$

$$\mathbb{R}_{++}^n = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x > 0\}.$$

Normas. A um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ podemos associar uma infinidade de normas distintas. No entanto, duas normas quaisquer $|\cdot|$ e $\|\cdot\|$ em \mathbb{R}^n são sempre equivalentes [27, pág. 30], ou seja, existem $\alpha > 0$ e $\beta > 0$ tais que, para todo $x \in \mathbb{R}^n$

$$\alpha|x| \leq \|x\| \leq \beta|x|. \quad (1.1)$$

Usaremos com frequência a norma euclidiana ou ℓ_2 ,

$$\|x\|_2 = \sqrt{x^T x} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{1/2},$$

a norma do supremo, norma infinito ou ℓ_∞ ,

$$\|x\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} |x_i|,$$

e, eventualmente, usaremos a norma ℓ_1 ,

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|.$$

As seguintes relações entre essas normas são importantes:

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1 \quad \text{e}$$

$$\frac{\|x\|_1}{\sqrt{n}} \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n} \|x\|_\infty.$$

Uma norma arbitrária será denotada simplesmente por $\|\cdot\|$. Usando as relações

anteriores e a equivalência de normas (1.1) temos que

$$\|x\|_2 \geq \alpha \|x\|, \quad (1.2)$$

onde $\alpha = 1$ se $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana ou a infinito, e $\alpha = 1/\sqrt{n}$ se $\|\cdot\|$ é a norma ℓ_1 .

A Figura 1.1 mostra os pontos de \mathbb{R}^2 com normas ℓ_1 , euclidiana e infinito iguais a 1.

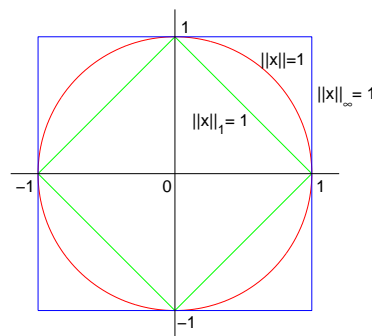


Figura 1.1: Vetores de \mathbb{R}^2 com normas iguais a 1.

Transformação linear. Uma transformação linear $\mathcal{A}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, definida em \mathbb{R}^n com valores em \mathbb{R}^m , é representada por uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Com este fato bem entendido, pode-se confundir a notação e falar de uma “transformação $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ”. A uma transformação $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ associam-se dois espaços importantes, o *espaço imagem de A*, definido por

$$\mathcal{R}(A) = \{y \in \mathbb{R}^m \mid y = Ax, x \in \mathbb{R}^n\},$$

e o *espaço nulo de A*,

$$\mathcal{N}(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\},$$

o conjunto dos pontos de \mathbb{R}^n que são mapeados na origem. O espaço nulo e o espaço imagem de uma transformação $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ estão, respectivamente, em \mathbb{R}^n e \mathbb{R}^m . Cabe observar, porém, que o espaço nulo de A , $\mathcal{N}(A)$, e o espaço imagem da transposta de A , $\mathcal{R}(A^T)$, são subespaços ortogonais de \mathbb{R}^n e geram o espaço todo. Qualquer vetor $d \in \mathbb{R}^n$ pode ser decomposto, de forma única, como $d = d_P + \tilde{d}_P$, onde $d_P \in \mathcal{N}(A)$ e $\tilde{d}_P \in \mathcal{R}(A^T)$. As componentes d_P e \tilde{d}_P são, respectivamente, a

projeção de d sobre $\mathcal{N}(A)$ e seu complemento ortogonal $\mathcal{R}(A^T)$. Como o operador projeção é linear, ele pode ser representado por uma matriz P_A , tal que $d_p = P_A d$. O complemento ortogonal será $\tilde{d}_p = \tilde{P}_A d$, onde $\tilde{P}_A = I - P_A$. Se A é uma matriz de posto completo, então existe uma fórmula explícita para a matriz projeção:

$$P_A = I - A^T(AA^T)^{-1}A.$$

A projeção de d sobre $\mathcal{N}(A)$ é o ponto em $\mathcal{N}(A)$ com a mínima distância a d . Esta é de fato a definição usual de projeção:

$$d_P = \arg \min\{\|x - d\| \mid x \in \mathcal{N}(A)\}.$$

Ordem. Dadas duas funções positivas $g_1, g_2 : X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, dizemos que:

- $g_1(x) = O(g_2(x))$ em $\Gamma \subseteq X$ se existe $M > 0$ tal que para todo $x \in \Gamma$, $g_1(x) \leq M g_2(x)$.
- $g_1(x) = \Omega(g_2(x))$ em $\Gamma \subseteq X$ se existe $N > 0$ tal que para todo $x \in \Gamma$, $g_1(x) \geq N g_2(x)$.
- $g_1(x) = o(g_2(x))$ em $\Gamma \subseteq X$ se $\lim_{g_2(x) \rightarrow 0^+} \frac{g_1(x)}{g_2(x)} = 0$.
- $g_1(x) = O(g_2(x))$ ($g_1(x) = \Omega(g_2(x))$) perto $\bar{x} \in X$ se existe uma vizinhança V de \bar{x} , na qual $g_1(x) = O(g_2(x))$ ($g_1(x) = \Omega(g_2(x))$).

Note que, em geral, para $x \in \Gamma$:

$$g_1(x) = O(g_2(x)) \iff g_2(x) = \Omega(g_1(x)),$$

$$\Omega(g_1(x)) + O(g_1(x)) = \Omega(g_1(x)),$$

$$O(g_1(x)) + o(g_1(x)) = O(g_1(x)).$$

Perto de um ponto $\bar{x} \in X$, tal que $g_1(\bar{x}) = 0$, temos que:

$$\Omega(g_1(x)) + o(g_1(x)) = \Omega(g_1(x)).$$

1.1 Método de região de confiança

O desenvolvimento dos métodos de região de confiança remonta aos trabalhos de Levenberg [48] e Marquardt [50] para problemas não lineares de mínimos quadrados. Powell [67, 68] foi o primeiro a estabelecer convergência dos métodos de região de confiança para otimização irrestrita. Moré [61, 62] faz um tratado sobre o desenvolvimento dos métodos de região de confiança. Para um tratamento mais moderno sobre o assunto, veja, por exemplo, [65].

Um método de região de confiança é um processo iterativo que computa, em cada iteração, um passo tentativo minimizando um modelo da função objetivo numa região em que confiamos no modelo. A direção e o comprimento do passo são obtidos simultaneamente. Se o ponto tentativo não é aceito, então reduzimos o tamanho da região e encontramos um novo minimizador. Em geral, a direção do passo muda quando o tamanho da região é alterado.

Aplicaremos o método de região de confiança ao problema irrestrito

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } f(x) \\ &x \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \tag{1.3}$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é duplamente continuamente diferenciável.

Considere $k \in \mathbb{N}$ e $x^k \in \mathbb{R}^n$ um ponto corrente. O índice $k \in \mathbb{N}$ será útil mais adiante. Considere um modelo quadrático de f em torno do ponto corrente x^k ,

$$m_k(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T(x - x^k) + \frac{1}{2}(x - x^k)^T B_k(x - x^k), \tag{1.4}$$

onde B_k é uma matriz $n \times n$ simétrica. Esta matriz pode ser uma aproximação da hessiana $\nabla^2 f(x^k)$, ou qualquer outra matriz simétrica que satisfaça

$$\|B_k\| \leq \beta, \tag{1.5}$$

para algum $\beta > 0$, independente de k .

Como o modelo quadrático (1.4) deixa de ser representativo à medida que x se afasta de x^k , podemos confiar em aproximar $f(\cdot)$ por $m_k(\cdot)$ numa vizinhança de x^k , ou seja, no conjunto:

$$\{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^k\| \leq \Delta\}, \tag{1.6}$$

onde $\Delta > 0$ é dito raio da região de confiança e $\|\cdot\|$ é uma norma qualquer em \mathbb{R}^n . Dessa forma, uma solução $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ para o problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } m_k(x) \\ &\text{sujeito a } \|x - x^k\| \leq \Delta \end{aligned} \quad (1.7)$$

seria uma boa aproximação para o minimizador de f na região (1.6). O passo de região de confiança $d = \bar{x} - x^k$ depende do raio Δ da região e será denotado por $d(x^k, \Delta)$ para evidenciar esta dependência. A direção do passo muda quando o raio da região é alterado. Definimos a *redução predita* produzida pelo passo $d(x^k, \Delta)$ como

$$pred(x^k, \Delta) = m_k(x^k) - m_k(x^k + d(x^k, \Delta)), \quad (1.8)$$

e a *redução verdadeira* como

$$ared(x^k, \Delta) = f(x^k) - f(x^k + d(x^k, \Delta)). \quad (1.9)$$

Note que, como o ponto $\bar{x} = x^k + d(x^k, \Delta)$ é obtido minimizando-se o modelo m_k sobre uma região que inclui o ponto x^k , a redução predita será sempre não negativa.

Um passo $d(x^k, \Delta)$ somente é aceito se a condição de decréscimo suficiente é satisfeita:

$$ared(x^k, \Delta) \geq \eta pred(x^k, \Delta), \quad (1.10)$$

para um dado $\eta \in (0, 1)$. Se o passo $d(x^k, \Delta)$ não é aceito, ou seja, se a condição acima não é verificada, então reduzimos o raio Δ e definimos um novo subproblema da forma (1.7) com o domínio menor. O raio inicial em cada iteração é sempre maior ou igual a um raio fixo Δ_{\min} . Isto representa a necessidade de, pelo menos na primeira tentativa, sermos suficientemente arrojados para não ficarmos com passos muito curtos. Mais ainda, o requisito $\Delta \geq \Delta_{\min}$ facilita as provas de convergência, mas não é essencial na metodologia de regiões de confiança.

Em cada iteração basta resolvermos *aproximadamente* o problema (1.7). Consideramos que $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ é uma solução aproximada de (1.7) se $\|\bar{x} - x^k\| \leq \Delta$ e

$$m_k(x^k) - m_k(\bar{x}) \geq \frac{\xi}{2} \|\nabla f(x^k)\| \min \left\{ \Delta, \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\|B_k\|} \right\}, \quad (1.11)$$

para alguma constante $\xi \in (0, 1]$ que depende da norma utilizada. A importância desta estimativa se tornará clara na Seção 1.1.2.

Agora estamos aptos para escrever o algoritmo de região de confiança para resolver o problema (1.3).

Algoritmo 1.1 *Região de confiança.*

Dados: $\eta \in (0, 1)$, $\Delta_{min} > 0$, $x^0 \in \mathbb{R}^n$.

$k = 0$

REPITA

Escolha $\Delta \geq \Delta_{min}$

REPITA

Calcule $d = d(x^k, \Delta)$ tal que $\|d\| \leq \Delta$ e

$$pred(x^k, \Delta) \geq \frac{\xi}{2} \|\nabla f(x^k)\| \min \left\{ \Delta, \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\|B_k\|} \right\}.$$

Calcule $ared(x^k, \Delta) = f(x^k) - f(x^k + d)$.

Se $ared(x^k, \Delta) \geq \eta pred(x^k, \Delta)$, então pare com sucesso,
senão $\Delta = \Delta/2$.

faça $x^{k+1} = x^k + d$, $\Delta_k = \Delta$, $k = k + 1$.

A Figura 1.2 mostra uma iteração do algoritmo de região de confiança. As curvas de nível da função do problema original estão representadas por linhas tracejadas. As linhas cheias representam as curvas de nível do modelo em x^k . O ponto x^{k+1} é a minimização do modelo na região de confiança centrada em x^k .

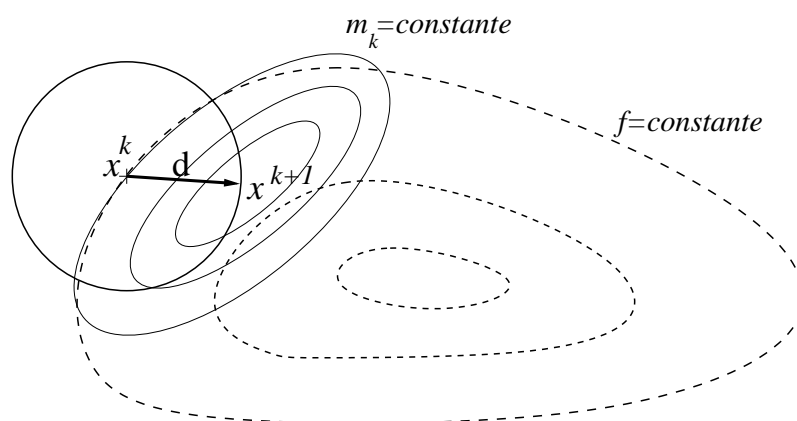


Figura 1.2: Um passo de região de confiança.

1.1.1 Propriedades do algoritmo

Discutiremos agora algumas propriedades do algoritmo acima. O próximo lema estabelece uma relação entre a redução predita e a verdadeira.

Lema 1.2 *Considere $x^k \in \mathbb{R}^n$ e $d(x^k, \Delta) \in \mathbb{R}^n$ gerados pelo Algoritmo 1.1 numa iteração k . Então*

$$ared(x^k, \Delta) = pred(x^k, \Delta) + o(x^k, \Delta), \quad (1.12)$$

onde

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0^+} \frac{o(x^k, \Delta)}{\Delta} = 0$$

uniformemente em $x^k \in \mathbb{R}^n$.

Prova. De (1.8)

$$\begin{aligned} -pred(x^k, \Delta) &= \nabla f(x^k)^T d(x^k, \Delta) + \frac{1}{2} d(x^k, \Delta)^T B_k d(x^k, \Delta) \\ &= \nabla f(x^k)^T d(x^k, \Delta) + O(\Delta^2), \end{aligned}$$

pois $\|d(x^k, \Delta)\| \leq \Delta$ e $\|B_k\| \leq \beta$. Por (1.9)

$$-ared(x^k, \Delta) = \nabla f(x^k)^T d(x^k, \Delta) + o(x^k, \Delta),$$

onde $\lim_{\Delta \rightarrow 0^+} \frac{o(x^k, \Delta)}{\Delta} = 0$. Este limite é uniforme em $x^k \in \mathbb{R}^n$ pois $\nabla f(\cdot)$ é contínua em \mathbb{R}^n . Então

$$ared(x^k, \Delta) = pred(x^k, \Delta) + O(\Delta^2) - o(x^k, \Delta),$$

completando a prova. □

Lema 1.3 *Considere $\Delta_k > 0$ gerado pelo Algoritmo 1.1 numa iteração k . Então*

$$(i) \quad ared(x^k, \Delta_k) \geq \eta pred(x^k, \Delta_k).$$

$$(ii) \quad \Delta_k \geq \Delta_{min} \quad \text{ou} \quad \text{o passo } d(x^k, 2\Delta_k) \text{ foi rejeitado pelo algoritmo.}$$

Prova.

(i) Imediato da condição de aceitação do passo.

(ii) Imediato da condição de redução do raio da região de confiança e do fato de que o Algoritmo 1.1 inicia com $\Delta \geq \Delta_{min}$. □

Região de confiança e busca de Armijo. Discutiremos agora uma interessante relação entre um passo de região de confiança e a busca unidirecional de Armijo.

A busca de Armijo é uma busca linear inexata bastante popular que estipula que o tamanho do passo $\Delta > 0$, a partir de $x^k \in \mathbb{R}^n$, na direção unitária $h \in \mathbb{R}^n$, é qualquer valor positivo que satisfaça uma condição de decréscimo suficiente na função objetivo f , medido pela seguinte desigualdade:

$$f(x^k + \Delta h) \leq f(x^k) + \eta \Delta \nabla f(x^k)^T h, \quad (1.13)$$

para alguma constante $\eta \in (0, 1)$. Para detalhes, veja por exemplo [65].

A desigualdade acima é chamada “condição de Armijo” e é ilustrada na Figura 1.3. O tamanho do passo $\Delta_a > 0$ satisfaz a igualdade em (1.13). Assim, qualquer $\Delta \leq \Delta_a$ satisfaz a condição de Armijo.

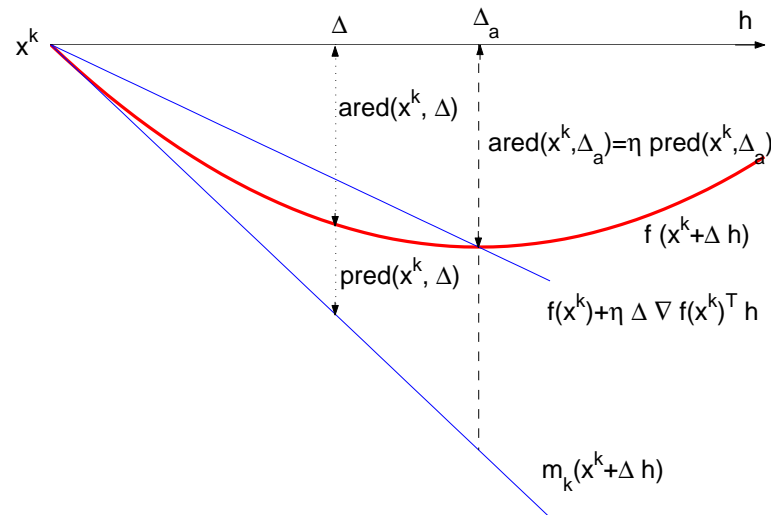


Figura 1.3: Método de Armijo

Por outro lado, observe que se o modelo m_k definido em (1.4) é linear, ou seja, $B_k = 0$, então um passo de região de confiança coincide com a busca de Armijo numa direção fixada.

Então vejamos, dado $x^k \in \mathbb{R}^n$ e $B_k = 0$, o modelo m_k em torno do ponto x^k reduz-se a

$$m_k(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k).$$

Neste caso, a direção de minimização do modelo linear não altera quando diminuimos o raio da região de confiança. Fixando a direção de busca $h \in \mathbb{R}^n$, com $\|h\| =$

1, tal que $\nabla f(x^k)^T h \leq 0$ (por exemplo, a direção oposta ao gradiente $h = -\nabla f(x^k)/\|\nabla f(x^k)\|$), temos que

$$\bar{x} = \arg \min\{m_k(x) \mid \|x - x^k\| \leq \Delta\} = x^k + \Delta h,$$

ou equivalentemente $d(x^k, \Delta) = \Delta h$. Tendo em vista as definições (1.8) e (1.9), a condição de aceitação do passo $ared(x^k, \Delta) \geq \eta \text{pred}(x^k, \Delta)$ pode ser reescrita como

$$f(x^k + \Delta h) \leq f(x^k) + \eta \Delta \nabla f(x^k)^T h,$$

que é exatamente a condição de Armijo (1.13).

1.1.2 Ponto de Cauchy

Definimos o *ponto de Cauchy*, denotado por x_c^k , como o minimizador de $m_k(\cdot)$ ao longo da direção oposta ao gradiente $-\nabla f(x^k)$, na região de confiança $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^k\| \leq \Delta\}$, ou seja,

$$x_c^k = \arg \min\{m_k(x) \mid \|x - x^k\| \leq \Delta, x = x^k - \lambda \nabla f(x^k), \lambda \in (0, 1]\}. \quad (1.14)$$

Sabemos que o método de região de confiança (veja por exemplo [65]) é convergente se, em toda iteração k , o ponto $x^{k+1} = x^k + d(x^k, \Delta_k)$ é pelo menos tão bom quanto o ponto de Cauchy x_c^k , no sentido de que

$$\text{pred}(x^k, \Delta_k) \geq (m_k(x^k) - m_k(x_c^k)). \quad (1.15)$$

A Figura 1.4 mostra o ponto de Cauchy numa iteração k . As elipses representam as curvas de nível do modelo $m_k(\cdot)$. A área hachurada corresponde ao conjunto de pontos que satisfazem (1.15).

A partir da condição acima pretendemos clarear a necessidade da imposição da condição (1.11) no cálculo de cada passo no Algoritmo 1.1. Portanto, estamos interessados agora em obter um limitante inferior para a redução no modelo conseguida pelo ponto de Cauchy, ou seja, um limitante para o lado direito da expressão acima. Será útil, para tanto, o lema seguinte que é um resultado devido a Powell [68].

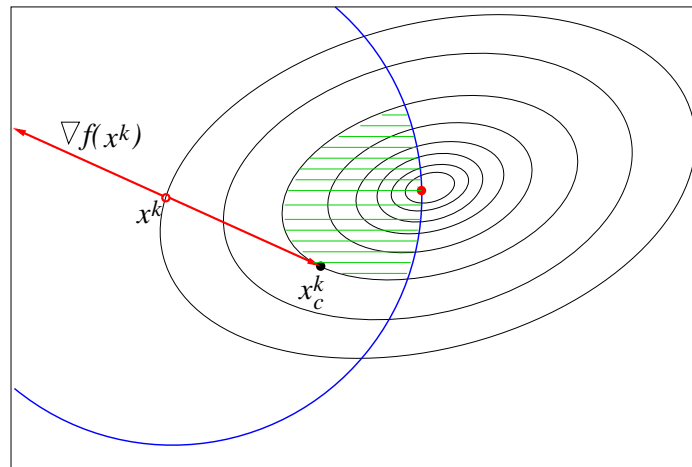


Figura 1.4: Ponto de Cauchy

Lema 1.4 *Considere o problema unidimensional*

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } \psi(z) \equiv \frac{1}{2}az^2 - bz \\ &\text{sujeito a } z \leq t, \end{aligned}$$

onde $b \geq 0$ e $t > 0$. Então o valor ótimo ψ^* satisfaz

$$\psi^* \leq -\frac{b}{2} \min \left\{ t, \frac{b}{|a|} \right\}.$$

Prova. Considere primeiro o caso em que $a > 0$. Então $b/a \geq 0$ é o minimizador irrestrito de ψ . Se $b/a \leq t$, então o minimizador irrestrito resolve o problema e

$$\psi^* = \psi \left(\frac{b}{a} \right) = -\frac{b^2}{2a}.$$

Por outro lado, se $b/a > t$, como ψ é decrescente em $[0, b/a]$ e $at < b$,

$$\psi^* = \psi(t) = \frac{1}{2}at^2 - bt < -\frac{bt}{2}.$$

No caso em que $a \leq 0$, ψ é côncava e

$$\psi^* = \psi(t) = \frac{1}{2}at^2 - bt \leq -bt \leq -\frac{bt}{2},$$

completando a prova. □

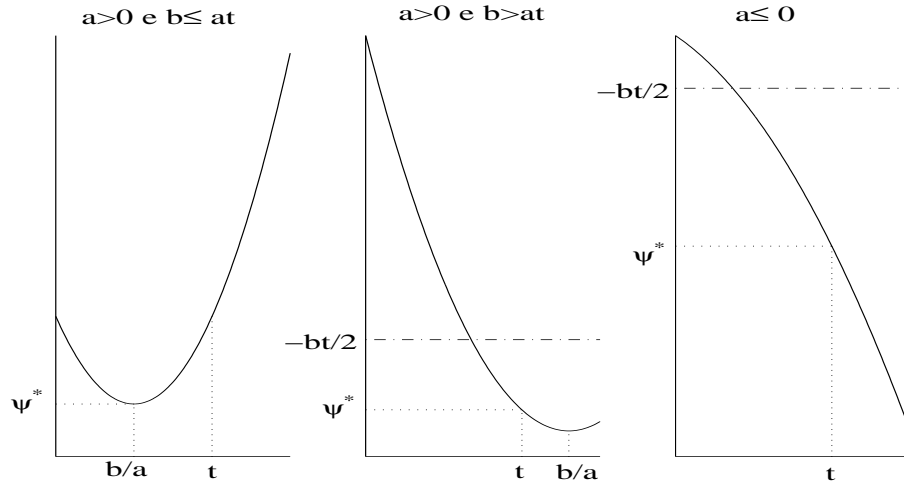


Figura 1.5: Ilustração do Lema 1.4

O próximo lema estabelece o limitante que desejamos.

Lema 1.5 *Considere $k \in \mathbb{N}$. O ponto de Cauchy $x_c^k \in \mathbb{R}^n$, definido em 1.14, satisfaz*

$$m_k(x^k) - m_k(x_c^k) \geq \frac{\xi}{2} \|\nabla f(x^k)\| \min \left\{ \Delta, \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\|B_k\|} \right\},$$

onde $\xi > 0$ depende da norma usada na definição da região de confiança. Se a norma usada é a norma euclidiana ou infinito, então $\xi = 1$, e se é a norma 1, então $\xi = 1/n$.

Prova. Pela definição de ponto de Cauchy,

$$x_c^k = x^k - \bar{\lambda} \nabla f(x^k),$$

onde $\bar{\lambda} > 0$ resolve o problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && -\lambda \|\nabla f(x^k)\|_2^2 + \frac{1}{2} \lambda^2 \nabla f(x^k)^T B_k \nabla f(x^k) \\ &\text{sujeito a} && \lambda \leq \frac{\Delta}{\|\nabla f(x^k)\|}. \end{aligned} \tag{1.16}$$

Observe também que, por (1.4)

$$m_k(x^k) - m_k(x_c^k) = \bar{\lambda} \nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k) - \frac{1}{2} \bar{\lambda}^2 \nabla f(x^k)^T B_k \nabla f(x^k),$$

que é o oposto do valor ótimo do problema acima.

Aplicando o Lema 1.4 ao problema (1.16), temos que

$$\begin{aligned} m_k(x^k) - m_k(x_c^k) &\geq \frac{\|\nabla f(x^k)\|_2^2}{2} \min \left\{ \frac{\Delta}{\|\nabla f(x^k)\|}, \frac{\|\nabla f(x^k)\|_2^2}{|\nabla f(x^k)^T B_k \nabla f(x^k)|} \right\} \\ &\geq \frac{\|\nabla f(x^k)\|_2^2}{2} \min \left\{ \frac{\Delta}{\|\nabla f(x^k)\|}, \frac{1}{\|B_k\|} \right\}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

onde usamos que $|\nabla f(x^k)^T B_k \nabla f(x^k)| \leq \|\nabla f(x^k)^T\|_2^2 \|B_k\|$. Na expressão acima configuram duas normas: a norma euclidiana e uma norma arbitrária $\|\cdot\|$ usada na definição da região de confiança. Por (1.2), existe $\alpha > 0$ tal que,

$$\|\nabla f(x^k)\|_2 \geq \alpha \|\nabla f(x^k)\|,$$

onde $\alpha = 1$ se $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana ou a infinito, e $\alpha = 1/\sqrt{n}$ se $\|\cdot\|$ é a norma 1. Usando isto em (1.17), temos o resultado com $\xi = \alpha^2$. \square

Substituindo o resultado do lema anterior em (1.15), temos a condição (1.11) que impusemos para a solução aproximada do problema de região de confiança.

1.2 Pontos interiores e PNL

Considere o problema de programação não linear com restrições de desigualdade

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f_0(x) \\ &\text{sujeito a} && f_i(x) \leq 0 \\ &&& x \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (1.18)$$

onde $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ para $i = 0, \dots, m$ são funções duplamente continuamente diferenciáveis.

Os métodos de pontos interiores que discutiremos introduzem inicialmente variáveis de folga s_i a cada uma das restrições do problema (1.18) reformulando-o como

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f_0(x) \\ &\text{sujeito a} && f(x) + s = 0 \\ &&& s \geq 0, \end{aligned} \quad (1.19)$$

onde $f(x)$ e s representam os vetores de \mathbb{R}^m com componentes $f_i(x)$ e s_i , respecti-

vamente.

Dado $\mu > 0$, considere o problema de barreira associado a (1.19)

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f_0(x) - \mu \sum_{i=1}^m \log s_i \\ \text{sujeito a} \quad & f(x) + s = 0 \\ & s > 0. \end{aligned} \tag{1.20}$$

O algoritmo dos métodos de pontos interiores que discutiremos para resolver o problema (1.18) é apresentado a seguir.

Algoritmo 1.6 *Pontos interiores.*

Dado $\mu > 0$.

REPITA

Resolva aproximadamente o problema (1.20).

Reduza μ .

Até convergência.

Para a solução do problema penalizado (1.20) podem ser empregados diferentes métodos de programação não linear. Discutiremos basicamente dois métodos: programação quadrática sequencial com região de confiança [9, 10, 17, 18, 20] e aplicação do método de Newton às condições de KKT do problema (1.20) [25, 75, 80]. Nos referimos às iterações utilizadas internamente nestes algoritmos como *internas*, enquanto que a cada vez que diminuimos o valor do parâmetro de barreira μ contamos uma iteração externa.

1.2.1 Condições de Karush-Kuhn-Tucker

Para que fique clara a relação existente entre os problemas (1.18), (1.19) e (1.20), apresentamos a seguir as condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) de cada um deles.

Dado $x \in \mathbb{R}^n$, considere $A(x) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ a matriz jacobiana da função f , calculada em x . Isto é, $A(x)^T = [\nabla f_1(x), \nabla f_2(x), \dots, \nabla f_m(x)]$. Consideraremos que a matriz A é de posto completo.

Problema	Condições de KKT
<p>(1.18)</p> <p>minimizar $f_0(x)$</p> <p>sujeito a $f(x) \leq 0$</p>	<p>Se x é uma solução para o problema (1.18) então existe $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tal que</p> $\begin{aligned} \nabla f_0(x) + A(x)^T \lambda &= 0 \\ \lambda f(x) &= 0 \\ f(x) &\leq 0 \\ \lambda &\geq 0 \end{aligned}$
<p>(1.19):</p> <p>minimizar $f_0(x)$</p> <p>sujeito a $f(x) + s = 0$</p> <p>$s \geq 0$</p>	<p>Se (x, s) é uma solução para o problema (1.19), então existe $(\lambda, w) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$ tal que</p> $\begin{aligned} \nabla f_0(x) + A(x)^T \lambda &= 0 \\ \lambda - w &= 0 \\ ws &= 0 \\ f(x) + s &= 0 \\ w &\geq 0 \\ s &\geq 0 \end{aligned}$
<p>(1.20):</p> <p>minimizar $f_0(x) - \mu \sum_{i=1}^m \log s_i$</p> <p>sujeito a $f(x) + s = 0$</p> <p>$s > 0$</p>	<p>Se (x, s) é uma solução para o problema (1.20), então existe $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tal que</p> $\begin{aligned} \nabla f_0(x) + A(x)^T \lambda &= 0 \\ -\mu s^{-1} + \lambda &= 0 \\ f(x) + s &= 0 \\ \lambda &\geq 0 \\ s &> 0 \end{aligned}$

O vetor λ é conhecido como o vetor dos multiplicadores de Lagrange. Observe que as condições de KKT de (1.18) e (1.19) são exatamente as mesmas. Para ver isto, basta fazer $s = -f(x)$ e $w = \lambda$ nas condições de (1.19).

Escrevendo $\lambda - \mu s^{-1} = 0$ como $s\lambda = \mu e$ nas condições de (1.20), temos a versão perturbada das condições de KKT do problema (1.18) com variáveis de folga,

$$\begin{aligned} \nabla f_0(x) + A(x)^T \lambda &= 0 \\ s\lambda &= \mu e \\ f(x) + s &= 0 \\ \lambda &\geq 0 \\ s &> 0. \end{aligned} \tag{1.21}$$

Discutiremos mais adiante o efeito de fazer tal transformação.

De modo geral, a primeira condição de KKT em (1.21) se refere à otimalidade, a segunda à complementaridade e a terceira à viabilidade.

1.2.2 Redução do parâmetro de barreira

Dada uma sequência $(\mu^k)_{k \in \mathbb{N}}$ de valores positivos convergente para zero, a sequência de soluções de (1.20) deve convergir para um ponto estacionário do problema original (1.18). A questão difícil é como obter essa sequência $(\mu^k)_{k \in \mathbb{N}}$, ou seja, decidir sobre a redução de μ em cada iteração externa do Algoritmo 1.6.

Em [9, 10], o parâmetro de barreira μ é atualizado de maneira linear de uma iteração externa para outra. Ou seja, dados $k \geq 0$, $\mu^k > 0$, o novo μ denotado por μ^{k+1} é dado por

$$\mu^{k+1} = \theta \mu^k,$$

onde $\theta \in (0, 1)$. Em [10], os autores sugerem $\theta = 0.2$. Eles usam, também, reduzir o valor da tolerância do problema de barreira do mesmo fator θ a cada vez que reduzem o valor de μ .

A escolha do parâmetro de barreira em [25, 34, 80] é baseada na complementaridade. Dado $s^k \in \mathbb{R}_{++}^m$ e $\lambda^k \in \mathbb{R}_+^m$, a escolha de μ^k é dada pela expressão

$$\mu^k = \sigma \frac{(s^k)^T \lambda^k}{m},$$

onde $\sigma \in (0, 1)$ pode variar em cada iteração externa. Em [25],

$$\sigma = \min(\eta_1, \eta_2 (s^k)^T \lambda^k),$$

onde $\eta_1 = 0.2$ e $\eta_2 = 100$. Em [34], a escolha de σ é semelhante à apresentada acima, mas os autores permitem que μ fique constante por até 10 iterações externas. Em [80],

$$\sigma = \gamma \min \left((1-r) \frac{1-\xi}{\xi}, 2 \right)^3,$$

onde $0 < r < 1$ denota o parâmetro de comprimento do passo, que os autores adotam 0.95, e γ é um fator de escala, adotado como sendo 0.1, e

$$\xi = \frac{\min_i s_i^k \lambda_i^k}{(s^k)^T \lambda^k / m}.$$

Claramente, $0 < \xi \leq 1$ e $\xi = 1$ se e somente se $s_i^k \lambda_i^k$ é constante sobre todos os valores de i . Observe que se $\gamma = 0.1$, pela escolha de [80] o valor de μ^k é no máximo 80% de $(s^k)^T \lambda^k / m$, enquanto que esta porcentagem cai para 20% na escolha apresentada em [25].

1.3 Resolução do problema barreira

Para a solução do problema penalizado (1.20) podem ser empregados diferentes métodos de programação não linear. Discutiremos basicamente dois métodos: programação quadrática sequencial com região de confiança [9, 10, 17, 18, 20] e aplicação do método de Newton às condições de KKT do problema (1.20) [25, 32, 34, 75, 80].

1.3.1 Método de programação quadrática sequencial

A idéia do método de programação quadrática sequencial (PQS), para resolver um problema com função objetivo e restrições geralmente não lineares, consiste em substituir, em cada passo, a função objetivo por uma aproximação quadrática e as restrições por equações ou inequações lineares. Dessa maneira, o subproblema a ser resolvido em cada iteração é um problema de programação quadrática que, em comparação ao problema original, pode ser considerado simples. Como trabalhamos

com modelos, associamos aos subproblemas uma região de confiança.

A primeira proposta de um método de PQS foi feita por Wilson em 1963, em sua tese de doutorado [84], para problemas convexos. A partir de então, vários pesquisadores têm se interessado pelo tema. Em [7], Boggs e Tolle fazem um estudo bastante detalhado sobre o assunto. Uma referência básica em português é [54].

Aplicaremos o método PQS ao problema (1.20). Para simplificar a notação denotemos:

$$\begin{aligned} z &= (x, s) \\ \hat{f}(z) &= f(x) + s \\ p_\mu(z) &= f_0(x) - \mu \sum_{i=1}^m \log s_i. \end{aligned}$$

Assim, para um dado $\mu > 0$, o problema de barreira (1.20) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } p_\mu(z) \\ &\text{sujeito a } \hat{f}(z) = 0 \\ & \quad s > 0. \end{aligned} \tag{1.22}$$

Modelo. Em cada iteração, construímos a aproximação quadrática do lagrangeano que definiremos a seguir. O lagrangeano associado ao problema (1.22) é definido por

$$(z, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}^m \times \mathbb{R}_+^m \mapsto l_\mu(z, \lambda) = p_\mu(z) + \lambda^T \hat{f}(z), \tag{1.23}$$

onde $\lambda \in \mathbb{R}_+^m$ é dito o vetor dos multiplicadores de Lagrange.

Dado $k \geq 0$ e tendo estimado o vetor $\lambda^k \in \mathbb{R}_+^m$, o modelo quadrático do lagrangeano no ponto corrente $z^k \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}^m$ é dado por

$$d \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}^m \mapsto \hat{l}_\mu^k(d) = l_\mu(z^k, \lambda^k) + (\nabla p_\mu^k)^T d + \lambda^T \hat{A}^k d + \frac{1}{2} d^T H^k d, \tag{1.24}$$

onde ∇p_μ^k é o gradiente da função barreira p_μ ,

$$\nabla p_\mu^k = \nabla p_\mu(z^k) = (\nabla f_0(x^k), -\mu(s^k)^{-1}), \tag{1.25}$$

a matriz \hat{A}^k de ordem $m \times (m + n)$ é formada pela matriz $A(x^k)$ jacobiana de f calculada em x^k e a matriz identidade I de ordem m ,

$$\hat{A}^k = \hat{A}(z^k) = [A(x^k) \ I] \tag{1.26}$$

e H^k é uma matriz quadrada de ordem $m + n$,

$$H^k = H(z^k, \lambda^k) = \begin{bmatrix} W^k & 0 \\ 0 & \Sigma^k \end{bmatrix}, \quad (1.27)$$

formada pelas matrizes W^k e Σ^k que são as hessianas do lagrangeano em relação a x e a s , calculadas em (z^k, λ^k) , ou aproximações disto, conforme discutiremos mais adiante.

De modo geral, o superíndice k refere-se aos índices das iterações e f^k denota $f(x^k)$, \hat{f}^k significa $\hat{f}(z^k)$, etc.

Passo. Tendo estimado os multiplicadores de Lagrange e estando no ponto $z^k \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}^m$, determinamos o passo $d = (dx, ds)$ utilizando as técnicas de programação quadrática sequencial e de região de confiança. Ou seja, obtemos d minimizando o modelo quadrático do lagrangeano (1.24) sujeito à aproximação linear das restrições

$$\hat{A}^k d + \hat{f}^k = 0 \quad (1.28)$$

e a uma região de confiança. Levando em consideração que, em (1.23), $l_\mu(z^k, \lambda^k)$ é constante e $\hat{A}^k d$ está fixado por (1.28), formalmente, o passo d é uma solução do problema

$$\begin{aligned} & \underset{d}{\text{minimizar}} && (\nabla p_\mu^k)^T d + \frac{1}{2} d^T H^k d \\ & \text{sujeito a} && \hat{A}^k d + \hat{f}^k = 0 \\ & && d \in T, \end{aligned} \quad (1.29)$$

onde T é um conjunto compacto que depende do ponto corrente z^k . Esse conjunto determina a região de confiança e deve acoplar dois objetivos. Primeiro, deve restringir o passo a uma região onde o modelo quadrático (1.24) é uma boa aproximação do lagrangeano (1.23) e onde a equação linear (1.28) é uma boa aproximação das restrições. O segundo objetivo do conjunto T é garantir que as variáveis de folga permaneçam positivas.

Dissemos que o passo d^k é *formalmente* uma solução do problema (1.29), pois suas restrições podem ser incompatíveis. O passo d que satisfaz a linearização das restrições pode estar fora da região de confiança. Ver Figura 1.6.

Encontramos na literatura várias propostas de modificações do problema (1.29) para tornar as restrições consistentes [8, 11, 13, 66, 69]. A estratégia de Byrd

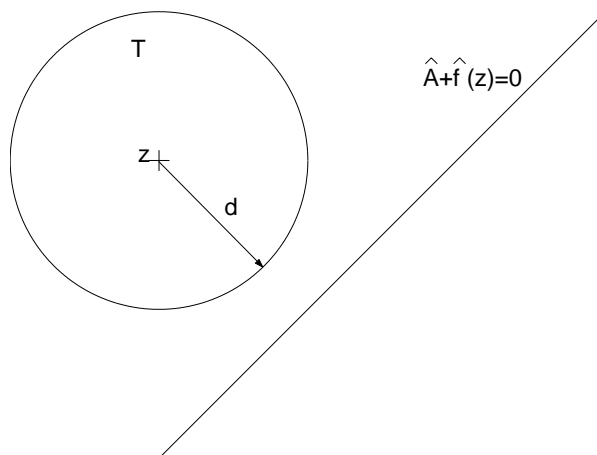


Figura 1.6: Problema (1.29) incompatível.

[8] e Omojokun [66] decompõe o passo em duas componentes: normal e tangencial. Calculamos o passo normal ignorando a função objetivo e investigando o quanto podemos satisfazer a linearização das restrições (1.28), permanecendo no interior da região de confiança T . O passo tangencial é calculado minimizando-se o modelo quadrático do lagrangeano no espaço nulo da jacobiana das restrições no ponto corrente e sujeito ainda à região de confiança.

Se o passo obtido como soma das duas componentes produz um decréscimo suficiente numa função de mérito, então aceitamos o passo. Caso contrário, reduzimos a região de confiança e o recalculamos.

Hessianas do lagrangeano. No modelo do lagrangeano (1.24) aparece a matriz

$$H^k = H(z^k, \lambda^k) = \begin{bmatrix} W^k & 0 \\ 0 & \Sigma^k \end{bmatrix},$$

onde W^k é a hessiana do lagrangeano em relação a x ,

$$W^k = \nabla_{xx}^2 l_\mu(z^k, \lambda^k) = \nabla^2 f_0(x^k) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^k \nabla^2 f_i(x^k)$$

e Σ^k é a hessiana do lagrangeano em relação a s , calculada em (z^k, λ^k) , ou uma aproximação disto.

A escolha da matriz Σ^k pode estabelecer características primais ou primais-

duais ao algoritmo, o que ficará claro a partir do lema 1.8. Em [9], os autores consideram a própria hessiana do lagrangeano em relação a s , ou seja,

$$\Sigma^k = \nabla_{ss}^2 l_\mu(s^k, \lambda^k) = \mu (S^k)^{-2}, \quad (1.30)$$

onde S^k é a matriz diagonal de ordem m formada pelo vetor de folgas s^k . Tal escolha para a matriz Σ^k determina características primais ao algoritmo. Em [10], os autores sugerem uma escolha alternativa que estabelece características primais-duais

$$\Sigma^k = (S^k)^{-1} \Lambda^k, \quad (1.31)$$

onde Λ^k é a matriz diagonal de ordem m cujos elementos diagonais são os multiplicadores de Lagrange λ_i^k . As duas escolhas estão obviamente relacionadas. Se fizermos $\lambda^k = \mu (s^k)^{-1}$ em (1.31), obtemos (1.30).

1.3.2 Método de Newton

Nosso foco de interesse é a resolução do problema de barreira (1.20), para um dado $\mu > 0$,

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f_0(x) - \mu \sum_{i=1}^m \log s_i \\ \text{sujeito a} \quad & f(x) + s = 0 \\ & s > 0. \end{aligned}$$

Nesta seção discutiremos uma outra classe de métodos com este propósito: aqueles que aplicam Newton às condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), discutidas na Seção 1.2.1.

Considere $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^q$ uma função continuamente diferenciável. O método de Newton aplicado ao sistema

$$F(x) = 0, \quad (1.32)$$

a partir de um ponto inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$, gera uma sequência de pontos definida por

$$x^{k+1} = x^k + dx,$$

onde dx é tal que

$$F'(x^k) dx = -F(x^k) \quad (1.33)$$

e $F'(x^k)$ é a matriz $q \times n$ jacobiana de F calculada em x^k . Sob algumas hipóteses, a sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ converge para uma das soluções de (1.32).

Características primais ou primais-duais. Vimos na Seção 1.2.1 que, se x e $s > 0$ são ótimos para (1.20), então existe $\lambda \geq 0$ tal que as condições de KKT são satisfeitas, ou seja,

$$F(x, s, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla f_0(x) + A(x)^T \lambda \\ -\mu s^{-1} + \lambda \\ f(x) + s \end{pmatrix} = 0. \quad (1.34)$$

Aplicando o método de Newton descrito acima para resolver (1.34), a partir de um ponto inicial (x^0, s^0, λ^0) com $s^0 > 0$ e $\lambda^0 > 0$, obtém-se uma sequência de pontos

$$(x^{k+1}, s^{k+1}, \lambda^{k+1}) = (x^k, s^k, \lambda^k) + (d_x, d_s, d_\lambda),$$

onde $d = (d_x, d_s, d_\lambda)$ satisfaz

$$\begin{pmatrix} W^k & 0 & (A^k)^T \\ 0 & \mu (S^k)^{-2} & I \\ A^k & I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x \\ d_s \\ d_\lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla f_0^k + (A^k)^T \lambda^k \\ -\mu (s^k)^{-1} + \lambda^k \\ f^k + s^k \end{pmatrix},$$

onde

$$W^k = \nabla^2 f_0(x^k) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^k \nabla^2 f_i(x^k), \quad (1.35)$$

conforme já visto na Seção 1.3.1. Como $d_\lambda = \lambda^{k+1} - \lambda^k$, o sistema acima pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} W^k & 0 & (A^k)^T \\ 0 & \mu (S^k)^{-2} & I \\ A^k & I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x \\ d_s \\ \lambda^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f_0^k \\ \mu (s^k)^{-1} \\ -(f^k + s^k) \end{pmatrix}. \quad (1.36)$$

Note que o valor corrente λ^k dos multiplicadores de Lagrange interferem no sistema acima somente no cálculo de W^k . Se o problema original é linear, ou seja, a função objetivo e as restrições são lineares, então $W \equiv 0$, e assim o passo d obtido por (1.36) não depende do valor corrente dos multiplicadores. Por esta razão, referimo-nos a um método baseado em (1.36) como método de ponto interior *primal*.

Equivalentemente, desenvolveremos abaixo um método de ponto interior *primal-dual*. Multiplicando a segunda linha de (1.34) por s , obtemos o sistema

$$\begin{pmatrix} \nabla f_0(x) + A^T \lambda \\ s \lambda - \mu \\ f(x) + s \end{pmatrix} = 0. \quad (1.37)$$

Aplicando o método de Newton ao sistema acima e considerando que $d_\lambda = \lambda^{k+1} - \lambda^k$, temos que

$$\begin{pmatrix} W^k & 0 & (A^k)^T \\ 0 & \Lambda^k & S^k \\ A^k & I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x \\ d_s \\ \lambda^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f_0^k \\ \mu \\ -(f^k + s^k) \end{pmatrix}.$$

Multiplicando o bloco referente à segunda linha do sistema acima por $(S^k)^{-1}$, obtemos

$$\begin{pmatrix} W^k & 0 & (A^k)^T \\ 0 & (S^k)^{-1} \Lambda^k & I \\ A^k & I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x \\ d_s \\ \lambda^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f_0^k \\ \mu (S^k)^{-1} \\ -(f^k + s^k) \end{pmatrix}. \quad (1.38)$$

Note que agora o valor corrente λ^k influencia o passo d , através das matrizes Λ^k e W^k . Referimo-nos ao sistema (1.38) como *primal-dual*.

Algoritmo. O algoritmo proposto em [25, 32, 34, 75, 80], para resolver o problema (1.18), determina basicamente a direção de Newton, resolvendo-se o sistema (1.36) ou (1.38), para um dado $\mu > 0$. O comprimento do passo nesta direção é obtido de forma a garantir que as folgas permaneçam positivas e tenha-se um decréscimo suficiente numa função de mérito. O parâmetro μ é atualizado a cada passo. O algoritmo geral é esquematizado abaixo.

Algoritmo 1.7 *Newton com busca.*

Dados: (x^0, s^0, λ^0) , com $s^0 > 0$, $\lambda^0 > 0$. $\mu > 0$

$k = 0$.

REPITA

Resolva o sistema (1.36) ou (1.38) com o dado μ e obtenha $d = (d_x, d_s, d_\lambda)$.

Calcule o comprimento do passo α .

Atualize o ponto:

$$(x^{k+1}, s^{k+1}, \lambda^{k+1}) = (x^k, s^k, \lambda^k) + \alpha d.$$

Diminua μ

$$k = k + 1.$$

Até convergência.

Os artigos que citamos variam entre si na forma de resolver o sistema, no cálculo do comprimento do passo, na escolha da função de mérito ou ainda na regra de atualização do parâmetro de barreira.

Em [75], os autores comentam que quando usamos métodos de pontos interiores para resolver problemas de programação linear, o maior trabalho computacional em cada iteração reside na formação e fatoração da matriz KKT, e métodos são usados na tentativa de usar cada fatoração mais que uma vez (veja, por exemplo [2, 12, 37, 58]). Em programação não linear, é de se esperar que os custos de formação e fatoração da matrix KKT sejam ainda maiores, pois a matriz contém derivadas segundas da função objetivo e derivadas de primeira e segunda ordem das restrições. Como utilizar essa fatoração o máximo possível é uma questão sobre eficiência do método e foge ao escopo desta discussão.

1.3.3 Equivalência entre o método PQS e Newton

Suponha que o problema (1.29), com a restrição de região de confiança inativa,

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && (\nabla p_\mu^k)^T d + \frac{1}{2} d^T H^k d \\ &\text{sujeito a} && \hat{A}^k d + \hat{f}^k = 0 \end{aligned} \tag{1.39}$$

é estritamente convexo, isto é, que H^k é definida positiva no espaço nulo de \hat{A}^k . Nestas condições, a solução de (1.39) coincide com o passo gerado pelo método de Newton discutido na seção anterior.

Lembrando que $z^k = (x^k, s^k)$, $d = (d_x, d_s)$ e usando (1.25), (1.26), (1.27) podemos reescrever o problema (1.39) como

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & \nabla f_0^k d_x - \mu(s^k)^{-1} d_s + \frac{1}{2} d_x^T W^k d_x + \frac{1}{2} d_s^T \Sigma^k d_s \\ \text{sujeito a} \quad & A^k d_x + d_s + f^k + s^k = 0. \end{aligned} \quad (1.40)$$

O lema abaixo mostra que o método PQS (1.40) com $\Sigma^k = \mu (S^k)^{-2}$ dada por (1.30) é equivalente a uma iteração primal de (1.36), enquanto que se $\Sigma^k = \Lambda^k (S^k)^{-1}$ dada por (1.31), então o método PQS é equivalente a uma iteração primal-dual de (1.38). Vários pesquisadores, incluindo [87], notaram essa equivalência.

Lema 1.8 *Considere que o problema (1.40) é estritamente convexo. Se $\Sigma^k = \mu (S^k)^{-2}$ em (1.40), então resolver exatamente (1.40) é equivalente a resolver (1.36). Por outro lado, se $\Sigma = (S^k)^{-1} \Lambda^k$, então resolver (1.40) é equivalente a resolver (1.38).*

Prova. As condições de KKT para o problema (1.40) garantem que, se $d = (d_x, d_s)$ é ótimo para o problema (1.40), então existe $\lambda^+ \geq 0$ tal que

$$\begin{aligned} \nabla f_0^k + W^k d_x + (A^k)^T \lambda^+ &= 0 \\ -\mu(s^k)^{-1} + \Sigma^k d_s + I \lambda^+ &= 0 \\ A^k d_x + d_s + f^k + s^k &= 0. \end{aligned}$$

Observe que com $\lambda^+ = \lambda^{k+1}$, se $\Sigma^k = \mu (S^k)^{-2}$, então o sistema acima é equivalente a (1.36). Por outro lado, se $\Sigma^k = (S^k)^{-1} \Lambda^k$, então o sistema é equivalente a (1.38), completando a prova. \square

A partir desta equivalência ficam claras as características primais e primais-duais estabelecidas em 1.3.1, quando da escolha da aproximação da hessiana do lagrangeano em relação à s .

Capítulo 2

Exemplos de trajetória central mal comportada

O presente capítulo é praticamente a tradução do trabalho [35], intitulado “Examples of ill-behaved central paths in convex optimization”, publicado inicialmente como “Rapport de Recherche” do “Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique” (INRIA) e submetido posteriormente à revista “Mathematical Programming”. É um trabalho realizado com meus orientadores e foi motivado por discussões que se iniciaram em agosto de 1999, quando nos encontrávamos, os três, no INRIA, e estudávamos os trabalhos de McLinden [56] e de Monteiro e Zhou [60]. McLinden mostra que, quando há complementaridade estrita, os pontos limites de qualquer sequência convergente de pontos centrais são centros analíticos do conjunto ótimo. Monteiro e Zhou garantem que, se as funções envolvidas na definição do problema são analíticas, além de outras hipóteses razoáveis, então a trajetória central primal é uma curva que converge para um único ponto no conjunto ótimo.

Tentando entender a necessidade de uma hipótese forte como analiticidade das funções envolvidas, construímos exemplos, numa região bastante simples do \mathbb{R}^2 , de problemas convexos em que todos os pontos do conjunto ótimo são pontos de acumulação da trajetória central primal. No primeiro exemplo, a função objetivo é convexa contínua e a trajetória central tem a forma de uma antena de TV com uma infinidade de segmentos horizontais de comprimento constante. O segundo exemplo é obtido perturbando suavemente a função objetivo do exemplo anterior. A trajetória central obtida é um ziguezague com variação infinita. Então suavizamos

ambas as funções, tornando-as diferenciáveis, e até mesmo C^∞ , sem contudo alterar o comportamento da trajetória central. Obviamente, as funções C^∞ que construímos não são analíticas.

2.1 Introdução

As abordagens de penalização foram centrais na evolução das técnicas de otimização. Problemas com restrições são frequentemente resolvidos por uma sequência de problemas penalizados, que dependem de um único parâmetro de penalização μ . Os otimizadores associados com cada valor de μ definem uma “trajetória de otimizadores”, que deve ser bem comportada e conduzir a uma solução do problema original.

Esta abordagem é extensamente desenvolvida no clássico livro de Fiacco e McCormick [26], que descreve métodos de penalidade externa, interna e mista para programação não linear. Os métodos de penalidade interna, também conhecidos como métodos de barreira, tiveram um desenvolvimento explosivo nos últimos 15 anos, devido ao sucesso dos métodos de pontos interiores para problemas lineares e de complementaridade linear (veja [22, 42, 46, 64, 73, 76, 86]; veja também as extensões para programação não linear em [9, 20, 24, 32, 34, 80]). O primeiro estudo profundo de trajetória de otimizadores, hoje conhecida como “trajetória central”, é devido a Bayer e Lagarias [5] e a Megiddo [57], que dão uma caracterização definitiva da trajetória primal-dual. Uma introdução aos métodos que seguem a trajetória central é dada por Gonzaga [39]. Sabemos que para programação linear a trajetória é bem definida, infinitamente diferenciável e tem um comprimento limitado associado com a complexidade dos métodos de trajetória central. O comportamento limite das derivadas da trajetória é descrito por Adler e Monteiro [2] e Witzgall et al. [85], que mostram que a trajetória se aproxima da face ótima com uma inclinação bem definida. Resultados similares são obtidos para problemas convexos por McLinden [56]: ele mostra que sob hipóteses razoáveis, que incluem complementaridade estrita, a trajetória central converge para o centro analítico do conjunto ótimo do problema. Vavasis e Ye [81] mostram que para programação linear em \mathbb{R}^n a trajetória central é composta de uma sequência de no máximo n^2 curvas alternadas de setores “quase-retos”.

A partir destes resultados, é razoável esperar conjuntos de otimizadores cal-

mos e suaves em problemas convexos. Neste capítulo, entretanto, mostramos que isto não é necessariamente verdade. Nós exibimos exemplos de problemas convexos para os quais a trajetória associada com qualquer função penalidade tem um comportamento indesejável.

Trabalhamos numa região extremamente simples de \mathbb{R}^2 e construímos funções objetivos de grau crescente de complexidade. Primeiro, exibimos uma função convexa que dá origem a uma trajetória central em forma de antena de TV, contendo um número infinito de segmentos horizontais de comprimento constante. O segundo exemplo é obtido perturbando suavemente a primeira função, o que resulta numa trajetória em forma de zigzague com variação infinita.

Nós, então, suavizamos ambas as funções, sem modificar o padrão das trajetórias, obtendo os mesmos comportamentos para funções objetivo diferenciáveis, e finalmente para funções de classe C^∞ .

A conclusão que tiramos destes exemplos é de que convexidade, ainda que adicionada diferenciabilidade em qualquer grau, não é uma propriedade suficientemente forte para garantir trajetórias centrais razoavelmente atraentes.

Finalmente, estudamos o efeito destes resultados na complexidade dos algoritmos. Nós provamos que nenhuma função penalizada construída como neste trabalho pode ser auto-concordante, e assim não é possível provar polinomialidade de qualquer algoritmo usando a teoria de Nesterov e Nemirovskii. Supondo que exista um bom algoritmo que segue a trajetória, percorrendo cada volta do zigzague em um número fixado de iterações, então este algoritmo será polinomial para nossos exemplos, mas uma leve mudança na definição do problema faz o algoritmo que segue a trajetória convergir num tempo infinito para um conjunto não ótimo.

Considerando o problema no formato de Nesterov-Nemirovskii e definindo a trajetória central por meio de uma barreira auto-concordante, mostramos os seguintes resultados: para os exemplos em que obtemos a trajetória central em forma de antena, a trajetória será agora um segmento de reta. Para os exemplos em zigzague, a trajetória será um zigzague amortecido em alguns casos, mas conjecturamos (e expomos nossas razões) que no exemplo mais simples em zigzague (Exemplo 3), a barreira auto-concordante gerará ainda um zigzague com comprimento infinito, para o qual um bom algoritmo que siga a trajetória será polinomial, o que é surpreendente.

2.2 Problema

Estamos interessados em problemas de programação não linear da forma

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeito a} && c_i(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $(-c_i) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ são funções convexas fechadas.

Um método de penalidade é baseado em alguma função de penalidade $p : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ e resolve problemas da forma

$$\min f(x) + \mu p(c(x)), \tag{2.1}$$

para algum parâmetro de penalidade $\mu > 0$. Se esses problemas são bem definidos, a imagem da transformação ponto-conjunto (\mathbb{R}_{++} denota o conjunto dos números reais positivos)

$$\mu \in \mathbb{R}_{++} \mapsto \chi(\mu) := \arg \min \{f(x) + \mu p(c(x))\}$$

é chamada *trajetória central*. Existe também uma trajetória central *dual*, mas neste trabalho só consideramos a trajetória central *primal* como definida acima.

Métodos de ponto interior usam a função barreira logarítmica, definida para $y \in \mathbb{R}_{++}^m$ (o conjunto dos m -vetores com componentes positivas) por

$$p(y) = -\sum_{i=1}^m \log y_i.$$

Neste caso, $\chi(\mu) = \arg \min \left\{ f(x) - \mu \sum_{i=1}^m \log(c_i(x)) \mid c(x) > 0 \right\}$. Nossos exemplos, entretanto, não dependem da função penalidade usada.

Cabe observar que a função barreira logarítmica foi utilizada pela primeira vez em otimização por Frisch [33].

Uma maneira simples de visualizar a trajetória central é a seguinte. Suponha que $\bar{x} \in \chi(\mu)$, para algum $\mu > 0$. Então \bar{x} também resolve

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f(x) + \mu p(c(x)) \\ &\text{sujeito a} && p(c(x)) = p(c(\bar{x})), \end{aligned}$$

ou equivalentemente

$$\text{minimizar}\{f(x) \mid p(c(x)) = p(c(\bar{x}))\}.$$

Geometricamente, isto significa que os pontos centrais são aqueles em que f e $(p \circ c)$ têm curvas de nível tangentes.

Vamos particularizar isto para um exemplo bidimensional bastante simples. Seja $F : z = (x, y) \in \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa fechada. Estudamos problemas da forma

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && F(x, y) \\ &\text{sujeito a} && y \geq 0, \end{aligned} \tag{2.2}$$

e suponhamos que suas soluções estão no eixo $Ox = \{(x, 0) : x \in \mathbb{R}\}$. Para este conjunto viável extremamente simples, a maioria das funções penalidades (isto é, aquelas estudadas em [4]) dá o mesmo conjunto de minimizadores, aqueles descritos por

$$\arg \min_{x \in \mathbb{R}} \{F(x, y) \mid y = \text{constante}\}. \tag{2.3}$$

Dependendo da penalidade usada, quer seja interna ou externa, y poderá assumir valores positivos ou negativos. Nós consideramos aqui o caso de métodos de pontos interiores cuja trajetória central é parametrizada por $y > 0$:

$$y \in \mathbb{R}_{++} \mapsto \chi(y) = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} F(x, y). \tag{2.4}$$

Denotamos $\{e^1, e^2\}$ a base canônica de \mathbb{R}^2 , e \mathbb{N} o conjunto dos números naturais.

2.3 Exemplos com funções objetivo contínuas

Esta seção é dedicada à construção de exemplos de trajetórias centrais mal-comportadas associadas a funções objetivo convexas contínuas. Após apresentar dois exemplos triviais, construímos o Exemplo 3, que tem uma trajetória central em forma de cruz. As construções feitas para este exemplo são então usadas em blocos no Exemplo 4, um dos mais interessantes deste trabalho: nós geramos trajetórias centrais com a forma de uma antena de TV com uma infinidade de ramos ou com a forma de zigzag com um número infinito de oscilações (veja Figura 2.3).

Exemplo 1 A função F é definida por $(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mapsto F(x, y) = ay + b$, onde $a > 0$ e $b \in \mathbb{R}$. Neste caso, $\chi(y) = \mathbb{R}$ para qualquer $y > 0$. \square

Exemplo 2 A função F é definida por $(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mapsto F(x, y) = ay + b + \varepsilon x$, onde $a > 0$, b e $\varepsilon \in \mathbb{R}$, com $\varepsilon \neq 0$. Agora, $\chi(y) = \emptyset$ para qualquer $y > 0$. \square

Agora perturbamos as funções nos Exemplos 1 e 2 para obter o primeiro exemplo não trivial. Considere $y_k > 0$ um número dado (o índice $k \in \mathbb{N}$ será útil mais adiante) e defina a função g_k^0 por

$$z = (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mapsto g_k^0(x, y) = \frac{1}{2} (\|z - z_k^-\| + \|z - z_k^+\| - 2), \quad (2.5)$$

onde $\|\cdot\|$ denota a norma euclidiana, e

$$z_k^- = (-1, y_k) \quad \text{e} \quad z_k^+ = (1, y_k).$$

A função g_k^0 é convexa. Seu conjunto de minimizadores é o segmento

$$[z_k^-, z_k^+] = \{(1-t)z_k^- + tz_k^+ : t \in [0, 1]\},$$

em que g_k^0 toma o valor 0. Esta função é também diferenciável, exceto nos pontos z_k^- e z_k^+ . Note que, como $\|\cdot\| \leq \|\cdot\|_1$ (a norma 1), $g_k^0(x, y) \leq \frac{1}{2}(|x-1| + |x+1| + 2|y-y_k| - 2)$, e

$$g_k^0(x, y) \leq \begin{cases} |y - y_k| & \text{se } |x| \leq 1, \\ |x| + |y - y_k| - 1 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.6)$$

Em nossas construções, usamos funções convexas g_k que são suavizações de g_k^0 , satisfazendo

$$0 \leq g_k(z) \leq g_k^0(z), \quad (2.7)$$

para z numa região grande.

Podemos, agora, apresentar nosso primeiro exemplo não trivial, a função f_k . Ela é obtida adicionando-se à função do Exemplo 2 (com a , b , e ε indexados por k) a constante $-a_k y_k$ e a função perturbação convexa g_k acima descrita, multiplicada por uma constante positiva c_k .

Exemplo 3 Considere os parâmetros reais dados a_k, b_k, c_k, y_k e ε_k . Então, a função f_k é definida por

$$z \in \mathbb{R}^2 \mapsto f_k(z) = a_k(y - y_k) + b_k + c_k g_k(z) + \varepsilon_k x, \quad (2.8)$$

onde a função convexa $g_k : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ satisfaz (2.7) com g_k^0 dada por (2.5). \square

Para nos familiarizarmos com a função f_k , que será usada constantemente, considere dois casos particulares com $g_k \equiv g_k^0$.

- Se $\varepsilon_k = 0$, temos o Exemplo 1 com uma perturbação adicionada $c_k g_k^0(\cdot)$. Considere c_k positiva, mas suficientemente pequena tal que o problema (2.2) tenha suas soluções no eixo Ox . Vemos, facilmente, usando (2.4), que para qualquer $y > 0$, $\chi(y) = \{0\}$ se $y \neq y_k$, e $\chi(y_k) = [-1, +1]$. A trajetória central é a cruz da imagem esquerda da Figura 2.1.
- Suponha, agora, que ε_k é não nulo, mas pequeno em módulo, digamos $|\varepsilon_k| < c_k$. Para $y \neq y_k$, $x \mapsto f_k(x, y)$ é estritamente convexa com conjuntos de nível compactos, assim $\chi(y)$ é um único ponto. Suponha agora que $y = y_k$. Observe que

$$\begin{aligned} f'_k(z_k^-; -e^1) &= c_k - \varepsilon_k, \\ f'_k(z_k^-; e^1) &= \varepsilon_k, \\ f'_k(z_k^+; -e^1) &= -\varepsilon_k, \\ f'_k(z_k^+; e^1) &= c_k + \varepsilon_k. \end{aligned}$$

Portanto, a desigualdade $|\varepsilon_k| < c_k$ implica que $\chi(y_k) = \{-1\}$ se $\varepsilon_k > 0$ e $\chi(y_k) = \{+1\}$ se $\varepsilon_k < 0$. A trajetória central é perturbada para o lado, como na imagem da direita da Figura 2.1: a trajetória desvia para a esquerda ou para a direita respectivamente se $\varepsilon_k > 0$ ou $\varepsilon_k < 0$.

Os principais exemplos deste capítulo são construídos com uma infinidade de cópias da função f_k , definida no Exemplo 3, com várias coordenadas y_k e coeficientes a_k, b_k, c_k , e ε_k . Essas funções são tangentes a uma *função suporte* $(x, y) \in \mathbb{R} \times$

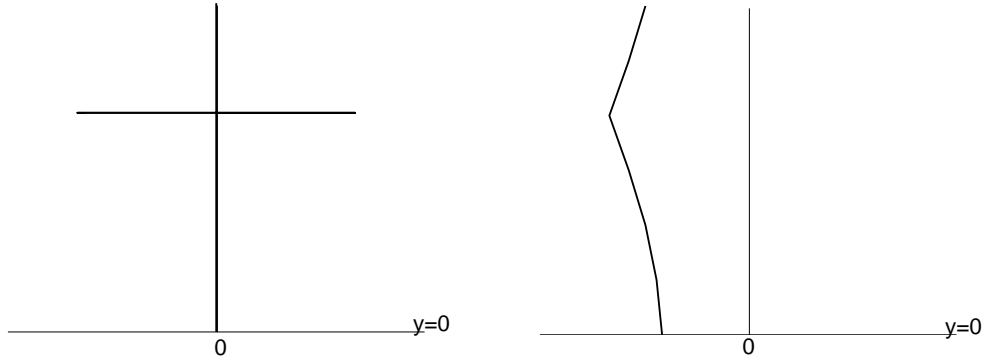


Figura 2.1: Trajetória central para o Exemplo 3 com $g_k = g_k^0$ e $\varepsilon_k = 0$ (esquerda) ou $\varepsilon_k > 0$ (direita).

$[-0.5, 1] \mapsto \psi(y)$, onde $\psi : [-0.5, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ tem as seguintes propriedades:

$$\begin{cases} \psi \text{ é continuamente diferenciável,} \\ \psi(y) = 0, \text{ para } y \in [-0.5, 0], \\ y \in [0, 1] \mapsto \psi(y) \text{ é estritamente convexa.} \end{cases} \quad (2.9)$$

Claramente, essas propriedades implicam que $\psi(y) > 0$ e $\psi'(y) > 0$ para todo $y \in (0, 1]$. As funções f_k são tangentes a uma função suporte ψ no sentido de que os coeficientes a_k e b_k são escolhidos usando a inclinação e o valor de ψ em y_k , como abaixo:

$$y_k = 2^{-k}, \quad a_k = \psi'(y_k), \quad \text{e} \quad b_k = \psi(y_k). \quad (2.10)$$

A partir das hipóteses (2.9) feitas para ψ , as sequências $\{y_k\}$, $\{a_k\}$, e $\{b_k\}$ são positivas, decrescentes e convergem para zero quando $k \rightarrow \infty$.

Temos ainda alguma liberdade na determinação de cada f_k , devido aos parâmetros não especificados $c_k > 0$, ε_k , e a função g_k . Os parâmetros c_k e ε_k serão fixados para controlar a sobreposição de duas funções consecutivas f_k e f_{k-1} e dar propriedades particulares à trajetória central, enquanto a função g_k será uma modificação apropriada de g_k^0 para fornecer propriedades de suavidade.

O controle fino da função objetivo nos próximos exemplos precisa ser feito somente num retângulo fechado de \mathbb{R}^2 definido por

$$\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid |x| \leq 1.5, -0.5 \leq y \leq 1\}. \quad (2.11)$$

Por exemplo, resultados de suavidade serão provados, somente, para pontos em Ω . Essas propriedades podem facilmente ser estendidas a todo espaço \mathbb{R}^2 , por um procedimento mostrado na Seção 2.7. Prestaremos atenção nas propriedades particulares satisfeitas nas faixas horizontais de Ω , definidas para $k = 1, 2, \dots$ por

$$\Omega_k = \{(x, y) \in \Omega \mid y \in [y_k, y_{k-1}]\}. \quad (2.12)$$

Nosso principal objetivo agora é definir os parâmetros de perturbação c_k e ε_k . Vamos examinar duas funções consecutivas f_{k-1} e f_k , para algum índice $k \geq 1$ (veja Figura 2.2).

Queremos que as funções f_{k-1} e f_k se “cruzem” na faixa Ω_k , com uma folga positiva r_k em y_k e y_{k-1} entre os modelos linearizados (veja Figura 2.2). A folga r_k deve satisfazer

$$\begin{aligned} r_k &\leq b_k - (b_{k-1} + a_{k-1}(y_k - y_{k-1})), \\ r_k &\leq b_{k-1} - (b_k + a_k(y_{k-1} - y_k)). \end{aligned}$$

Essas desigualdades são compatíveis com a positividade de r_k , pois os lados direitos são positivos devido à convexidade estrita de ψ em $[0, 1]$. Nossa escolha para r_k , $k \geq 1$, é:

$$r_k = \frac{1}{2} \min \{b_k - (b_{k-1} + a_{k-1}(y_k - y_{k-1})), b_{k-1} - (b_k + a_k(y_{k-1} - y_k))\}. \quad (2.13)$$

Portanto, $\{r_k\}$ é positivo e tende para zero quando $k \rightarrow \infty$. Agora, consideramos para $k \geq 0$ (para iniciar a indução, considere $r_0 = +\infty$ e $\varepsilon_{-1} = +\infty$):

$$c_k = \frac{1}{4} \min\{r_k, r_{k+1}\} \text{ para todo } k \quad (2.14)$$

e

$$\begin{aligned} &\text{ou } \varepsilon_k = 0 \text{ para todo } k \\ &\text{ou } \varepsilon_k = (-1)^k |\varepsilon_k| \text{ para todo } k, \text{ com } 0 < |\varepsilon_k| \leq \min\{c_k/4, |\varepsilon_{k-1}|\}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

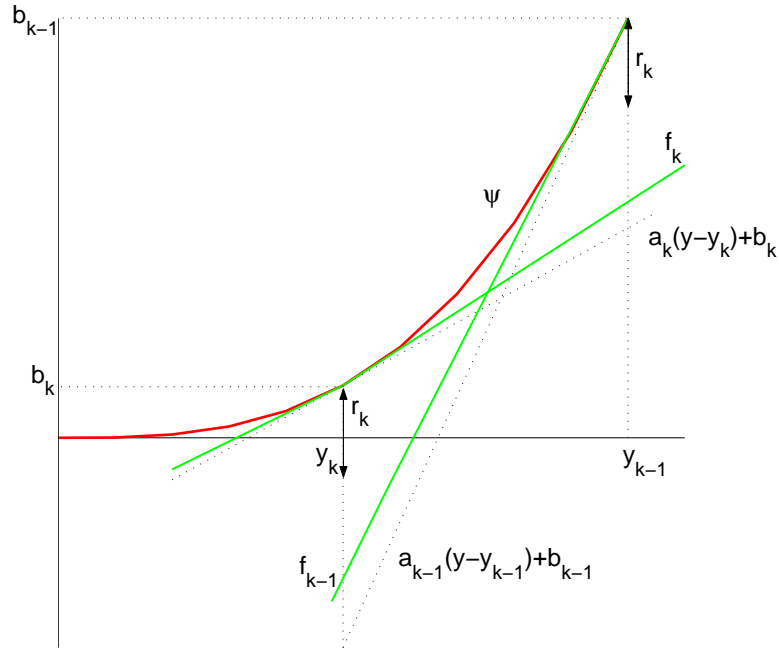


Figura 2.2: Escolha dos coeficientes da função f_k .

Portanto, ou a sequência $\{|\varepsilon_k|\}$ é identicamente nula, ou é positiva e não crescente. Note que $r_k \leq b_{k-1}/2$. Então $r_{k+1} \leq b_k/2$ e

$$|\varepsilon_k| \leq \frac{c_k}{4} \leq \frac{r_{k+1}}{16} \leq \frac{b_k}{32}. \quad (2.16)$$

Podemos, agora, especificar nosso quarto exemplo de função objetivo.

Exemplo 4 Seja $\psi : [-0.5, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função satisfazendo (2.9) e considere as funções $f_k, k \in \mathbb{N}$, definidas como no Exemplo 3, com y_k e os coeficientes $a_k, b_k, c_k, \varepsilon_k$ satisfazendo (2.10) e (2.13)–(2.15). As funções convexas g_k não estão especificadas, mas devem satisfazer (2.7) em Ω . A função objetivo F é então definida para $z \in \Omega$ por

$$F(z) = \sup_{k \in \mathbb{N}} f_k(z). \quad (2.17)$$

□

No resto desta seção explicitamos algumas características interessantes da função objetivo F introduzida no Exemplo 4, incluindo a forma de sua trajetória central. Começamos com uma propriedade de sobreposição de duas funções consecutivas f_{k-1} e f_k , o que implica que essas funções cruzam-se na faixa Ω_k .

Lema 2.1 *Considere as funções f_k e os parâmetros r_k como no Exemplo 4. Então, para $k \geq 1$ e $(x, y) \in \Omega$:*

$$\begin{aligned} f_{k-1}(x, y) &\leq f_k(x, y) - r_k && \text{se } y \leq y_k \\ f_k(x, y) &\leq f_{k-1}(x, y) - r_k && \text{se } y \geq y_{k-1}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Prova. Considere $(x, y) \in \Omega$, com $y \leq y_k$. Como $g_{k-1} \leq g_{k-1}^0$, $|x| \leq 1.5$ e $|y - y_{k-1}| \leq 1.5$, (2.6) nos dá $g_{k-1}(z) \leq 2$, e

$$f_{k-1}(x, y) \leq a_{k-1}(y - y_{k-1}) + b_{k-1} + 2c_{k-1} + 1.5|\varepsilon_{k-1}|. \quad (2.19)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} f_k(x, y) &\geq a_k(y - y_k) + b_k - |\varepsilon_k| |x| \\ &\geq a_{k-1}(y - y_k) + b_k - 1.5|\varepsilon_k|, \end{aligned} \quad (2.20)$$

pois $a_k \leq a_{k-1}$, $y \leq y_k$ e $g_k(\cdot) \geq 0$. Agrupando (2.19) e (2.20):

$$\begin{aligned} f_k(x, y) - f_{k-1}(x, y) &\geq a_{k-1}(y_{k-1} - y_k) + b_k - b_{k-1} - 2c_{k-1} - 1.5|\varepsilon_k| - 1.5|\varepsilon_{k-1}|. \end{aligned}$$

Temos que $|\varepsilon_k| \leq |\varepsilon_{k-1}| \leq \frac{r_k}{16}$ e $c_{k-1} \leq \frac{r_k}{4}$. Então, usando (2.13),

$$f_k(x, y) - f_{k-1}(x, y) \geq 2r_k - \frac{1}{2}r_k - \frac{3}{16}r_k \geq r_k.$$

Isto completa a prova da primeira desigualdade de (2.18). A prova da segunda desigualdade é similar. \square

Observe que o Lema 2.1 implica que em Ω

$$\begin{aligned} f_0 \leq f_1 \leq f_2 \leq \dots \leq f_{k-1} &&& \text{para } y \leq y_{k-1} \\ f_k \geq f_{k+1} \geq f_{k+2} \geq \dots &&& \text{para } y \geq y_k. \end{aligned}$$

Lema 2.2 *Considere as funções f_k e F definidas como no Exemplo 4 e $z = (x, y) \in \Omega$. Então $\lim_{k \rightarrow \infty} f_k(z) = 0$. Além disso:*

- (i) $F(x, y) = 0$, se $y \leq 0$;
- (ii) $F(z) = \max\{f_{k-1}(z), f_k(z)\}$, se $z \in \Omega_k$;

(iii) $F(x, y_k) = f_k(x, y_k)$, se $(x, y_k) \in \Omega$.

Prova. Considere $z = (x, y) \in \Omega$. Então $\lim_{k \rightarrow \infty} f_k(z) = 0$, pois g_k satisfaz (2.7) em Ω , g_k^0 é limitada por 2 em Ω , e todos os coeficientes de f_k convergem para 0.

(i) Se $y \leq 0$, pelo Lema 2.1, $f_k(z)$ cresce com k . Então

$$F(z) = \sup_k f_k(z) = \lim_{k \rightarrow \infty} f_k(z) = 0.$$

(ii) e (iii) seguem imediatamente do Lema 2.1. \square

Lema 2.3 *A função objetivo F definida no Exemplo 4 é convexa e contínua em Ω . Considere $k \geq 1$ e suponha que $g_k \equiv g_k^0$. Então*

$$\arg \min_{|x| \leq 1.5} F(x, y_k) = \begin{cases} [-1, 1] & \text{se } \varepsilon_k = 0, \\ \{(-1)^{k+1}\} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.21)$$

Além disso, para $y \in (y_k, y_{k-1})$, $\arg \min_{|x| \leq 1.5} F(x, y)$ é reduzido a um único ponto. Este ponto é $x = 0$ quando $\varepsilon_k = \varepsilon_{k-1} = 0$.

Prova. A função F é claramente convexa, pois é o supremo de funções convexas f_k . Por outro lado, as funções f_k são limitadas em Ω (por $1.5a_0 + b_0 + 2\bar{c} + 1.5\varepsilon_0$, onde \bar{c} é um limitante para $\{c_k\}$), então F também é. Sendo uma função convexa limitada, F é contínua.

Quando $g_k \equiv g_k^0$ e $y = y_k$, podemos usar as propriedades da função f_k dadas depois do Exemplo 3 (note que $|\varepsilon_k| < c_k$). Se $\varepsilon_k = 0$, $\chi(y_k) = [-1, +1]$; se $\varepsilon_k > 0$, $\chi(y_k) = \{-1\}$; e se $\varepsilon_k < 0$, $\chi(y_k) = \{+1\}$. Isto nos leva à fórmula (2.21).

Considere agora o caso quando $g_k \equiv g_k^0$ e $y \in (y_k, y_{k-1})$. Se $\varepsilon_k = \varepsilon_{k-1} = 0$, $f_k(\cdot, y)$ e $f_{k-1}(\cdot, y)$ são ambas minimizadas em $x = 0$, então $F(\cdot, y)$ é também. Se $\varepsilon_k \neq 0$, como $F(\cdot, y)$ é estritamente convexa (máximo de duas funções estritamente convexas), ela tem, ainda, um único minimizador em algum $x \in (-1.5, 1.5)$. \square

Teorema 2.4 *Suponha que $g_k \equiv g_k^0$ no Exemplo 4. Então a trajetória $y \in (0, 1] \mapsto \chi(y)$ satisfaz as seguintes propriedades:*

(i) *Os pontos $z_k^- = (-1, 2^{-k})$ para k par e $z_k^+ = (1, 2^{-k})$ para k ímpar pertencem à trajetória.*

- (ii) Se $\epsilon_k = 0$ para todo $k \in \mathbb{N}$, então os segmentos de reta $[z_k^-, z_k^+]$ pertencem à trajetória.
- (iii) Para qualquer $y \in (0, 1]$ tal que $y \neq 2^{-k}$ para todo $k \in \mathbb{N}$, $\chi(y)$ é um único ponto.
- (iv) Se $\epsilon_k \neq 0$ para todo $k \in \mathbb{N}$, então $\chi(\cdot)$ é uma curva contínua.

Prova. Os itens (i) a (iii) seguem diretamente do Lema 2.3. Vamos provar (iv).

A transformação $y \in (0, 1] \mapsto \chi(y)$ é semi-contínua superior (no sentido de Rockafellar e Wets [71, Section 5.B]) por causa do seguinte: se $y \rightarrow \bar{y} > 0$ e algum $x_y \in \chi(y) \rightarrow \bar{x}$, então $\bar{x} \in \chi(\bar{y})$, como podemos ver tomando o limite quando $x_y \rightarrow \bar{x}$ na desigualdade $F(x_y, y) \leq F(x, y)$ para todo x tal que $|x| \leq 1.5$.

Agora, se $\epsilon_k \neq 0$ para todo $k \in \mathbb{N}$, então o Lema 2.3 implica que $\chi(y)$ é um único ponto. Isto e os fatos de que a trajetória está no conjunto limitado Ω e $\chi(\cdot)$ é semi-contínua superior implicam que $y \mapsto \chi(y)$ é uma curva contínua, completando a prova. \square

A partir deste teorema podemos reconhecer o comportamento da trajetória, como mostra a Figura 2.3: se $\epsilon_k = 0$, então a trajetória se parece com uma antena de TV com uma infinidade de ramos (figura da esquerda). Se $\epsilon_k \neq 0$, então a curva é contínua e visita alternadamente os pontos z_k^- , quando k é par, e z_k^+ , quando k é ímpar, resultando num ziguezague com variação infinita (figura da direita).

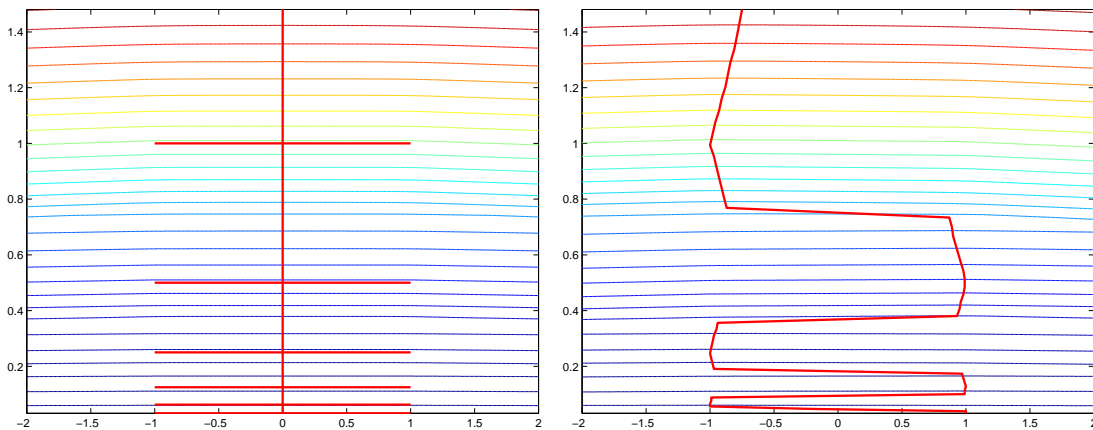


Figura 2.3: Antena e ziguezague para função objetivo C^0 .

Este exemplo mostra que um problema convexo contínuo pode gerar trajetórias $y \mapsto \chi(y)$ mal-comportadas. Construímos uma trajetória que não é uma

curva, com $\chi(y)$ alternando entre um ponto e um segmento de reta um número infinito de vezes, e outra que é uma curva que faz um zigzague com variação ilimitada.

As soluções ótimas neste exemplo não satisfazem a complementaridade estrita, pois $F(x, y) = 0$ se $y \leq 0$. As trajetórias centrais não devem mudar, entretanto, se um termo ay , com $a > 0$, for adicionado a F . Então, vale a complementaridade estrita. Note que a forma das trajetórias centrais é compatível com o resultado de McLinden [56], de acordo com quem, quando vale complementaridade estrita, os pontos limites de qualquer seleção convergente de pontos centrais são centros analíticos do conjunto ótimo. Aqui, o centro analítico coincide com o conjunto ótimo, pois a única restrição é sempre ativa nas soluções.

Neste exemplo, F é convexa mas não suave. As trajetórias centrais obtidas não são curvas suaves. As Seções 2.5 e 2.6 serão dedicadas à obtenção de trajetórias similares para problemas suaves. Mas antes disto, estabelecemos algumas ferramentas técnicas que serão úteis na suavização da função F do Exemplo 4.

2.4 Suavização do máximo de duas funções

Esta é uma seção auto-contida em que mostramos como suavizar o máximo de duas funções convexas, com valores reais. Esta operação será necessária nas próximas seções para gerar exemplos com funções objetivo suaves similares as do Exemplo 4.

Considere duas funções $f_1, f_2 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, ambas convexas de classe C^q , onde q é um inteiro não negativo ou $q = \infty$. O máximo de f_1 e f_2 é denotado por f_{max} :

$$z \in \mathbb{R}^n \mapsto f_{max}(z) = \max\{f_1(z), f_2(z)\}.$$

Em geral, esta função é somente contínua, mas pode ser suavizada de uma maneira simples, arredondando suas emendas, sem mudar longe delas. Como, para t_1 e $t_2 \in \mathbb{R}$, $\max\{t_1, t_2\} = \frac{1}{2}(t_1 + t_2 + |t_1 - t_2|)$, a função-max pode ser suavizada introduzindo uma aproximação suave do valor absoluto. Isto é explicado abaixo.

Considere $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa de classe C^q , com a seguinte propriedade:

$$\varphi(w) = |w|, \quad \text{para } |w| \geq 1. \quad (2.22)$$

Um exemplo de tal função é dado na imagem da esquerda da Figura 2.4, e a construção concreta é detalhada mais adiante.

A função φ é uma aproximação C^q da função valor absoluto que não a modifica para $|w| \geq 1$. Será necessário fazer esta aproximação mais e mais precisa. Considere $r > 0$ um escalar medindo a precisão da aproximação, que aumenta quando $r \rightarrow 0$, e considere a função convexa $\varphi_r : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$\varphi_r(w) = r \varphi\left(\frac{w}{r}\right), \quad \text{para todo } w \in \mathbb{R}. \quad (2.23)$$

De fato φ_r é convexa e $\varphi_r(w) = |w|$ para $|w| \geq r$. Segue da convexidade de φ_r que, para qualquer w e $w' \in \mathbb{R}$:

$$|w| \leq \varphi_r(w) \leq \varphi_r(w') + |w - w'|. \quad (2.24)$$

Dado $r > 0$, introduzimos uma função $M_r : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$

$$M_r(t_1, t_2) = \frac{1}{2}(t_1 + t_2 + \varphi_r(t_1 - t_2)), \quad (2.25)$$

que é uma versão suave da função-max. É portanto natural aproximar a função f_{max} por (veja a imagem da direita na Figura 2.4):

$$z \in \mathbb{R}^n \mapsto f(z) = M_r(f_1(z), f_2(z)). \quad (2.26)$$

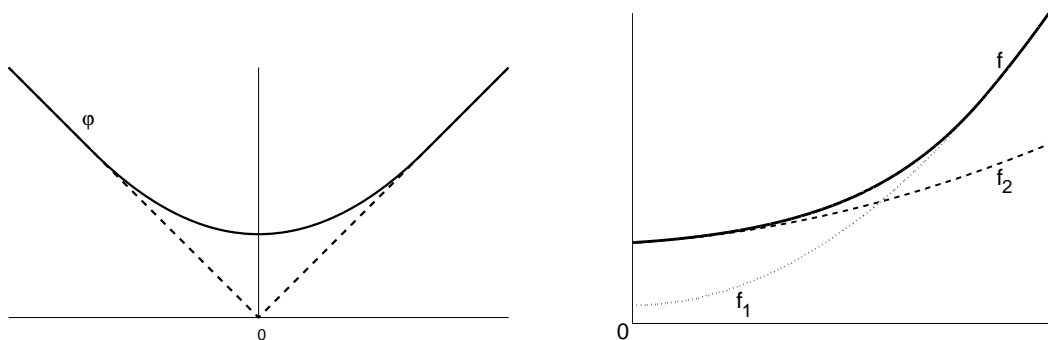


Figura 2.4: Suavização da função valor absoluto e do máximo de duas funções convexas.

O próximo lema mostra que M_r é convexa e crescente, enquanto o Lema 2.6 mostra em que sentido a função f definida por (2.26) é uma suavização convexa da

função máximo.

Lema 2.5 *A função M_r definida por (2.25) é convexa e crescente: se $t_1 \leq t'_1$ e $t_2 \leq t'_2$, então $M_r(t_1, t_2) \leq M_r(t'_1, t'_2)$.*

Prova. A convexidade de M_r segue da convexidade de φ_r . Para a monotocidade, usamos (2.24):

$$\begin{aligned} M_r(t'_1, t'_2) &= \frac{1}{2}(t'_1 + t'_2 + \varphi_r(t'_1 - t'_2)) \\ &\geq \frac{1}{2}(t'_1 + t'_2 + \varphi_r(t_1 - t_2) - |(t'_1 - t'_2) - (t_1 - t_2)|) \\ &\geq \frac{1}{2}(t'_1 + t'_2 + \varphi_r(t_1 - t_2) - (t'_1 - t_1) - (t'_2 - t_2)) \\ &= M_r(t_1, t_2). \end{aligned}$$

□

Lema 2.6 *Considere f_1 e f_2 duas funções convexas de classe C^q , com $0 \leq q \leq \infty$, e $f_{\max} = \max\{f_1, f_2\}$. Considere a função f definida por (2.26), onde M_r é construída como acima, com a função φ de classe C^q . Então*

- (i) f é convexa,
- (ii) f é de classe C^q ,
- (iii) $z \in \mathbb{R}^n$, $|f_1(z) - f_2(z)| \geq r \implies f(z) = f_{\max}(z)$,
- (iv) para todo $z \in \mathbb{R}^n$, $f_{\max}(z) \leq f(z) \leq f_{\max}(z) + r/2$.

Prova. (i) A convexidade de f segue da convexidade de f_1 e f_2 e da convexidade e monotonicidade de M_r proveniente do Lema 2.5.

(ii) Isto segue do fato que $f_1, f_2, \varphi, \varphi_r$ e M_r são todas de classe C^q .

(iii) Considere $z \in \mathbb{R}^n$ e $\Delta f = f_1(z) - f_2(z)$. Se $|\Delta f| \geq r$, então da definição de φ_r temos que $\varphi_r(\Delta f) = |\Delta f|$. Então

$$f(z) = \frac{1}{2}(f_1(z) + f_2(z) + |f_1(z) - f_2(z)|) = f_{\max}(z).$$

(iv) Por (2.24) com $w' = 0$ e $w \in \mathbb{R}$, $|w| \leq \varphi_r(w) \leq |w| + r$. Então, de acordo com (2.26):

$$\frac{1}{2}(f_1(z) + f_2(z) + |\Delta f|) \leq f(z) \leq \frac{1}{2}(f_1(z) + f_2(z) + |\Delta f| + r),$$

que prova (iv). □

2.4.1 Exemplos de funções de suavização

Agora discutiremos a construção de uma classe de funções de suavização, integrando duas vezes uma função densidade de probabilidade. Esta técnica de suavização é proposta por Chen e Mangasarian em [15, 16]. Começamos com uma função densidade de probabilidade $w \in \mathbb{R} \mapsto \sigma(w) \in \mathbb{R}$ com suporte compacto:

$$\sigma(w) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(w) dw = 1 \quad \text{e} \quad \sigma(w) = 0, \text{ para } w \notin (0, 1).$$

Defina $\bar{\varphi}$ integrando σ duas vezes:

$$w \in \mathbb{R} \mapsto \bar{\varphi}(w) = \int_{-\infty}^w \int_{-\infty}^t \sigma(\tau) d\tau dt.$$

Considere $c = 1 - \bar{\varphi}(1)$. Como $\bar{\varphi}'(w) = 0$ para $w < 0$ e $\bar{\varphi}'(w) \leq 1$ para todo $w \in [0, 1]$, então $\bar{\varphi}(1) \leq 1$ e $c \geq 0$. A função de suavização $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é a simetrização de $\bar{\varphi}$, definida por

$$\varphi(w) = \bar{\varphi}(|w|) + c. \quad (2.27)$$

Esta função é convexa e satisfaz (2.22). Sua suavidade depende de σ .

Fornecemos agora dois exemplos.

Exemplo de suavização C^1 .

O primeiro exemplo é baseado na função pulso definida abaixo e será usado na Seção 2.5:

$$\sigma(w) = \begin{cases} 1 & \text{se } w \in [0, 1], \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Integrando duas vezes esta função pulso, obtemos uma função de suavização continuamente diferenciável

$$\varphi(w) = \begin{cases} \frac{1}{2}w^2 + \frac{1}{2} & \text{se } w \in [-1, 1], \\ |w| & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.28)$$

Exemplo de suavização C^∞ .

O segundo exemplo, que será usado na Seção 2.6, é uma função de suavização de classe C^∞ mas não analítica. Para obtê-la, considere inicialmente um exemplo

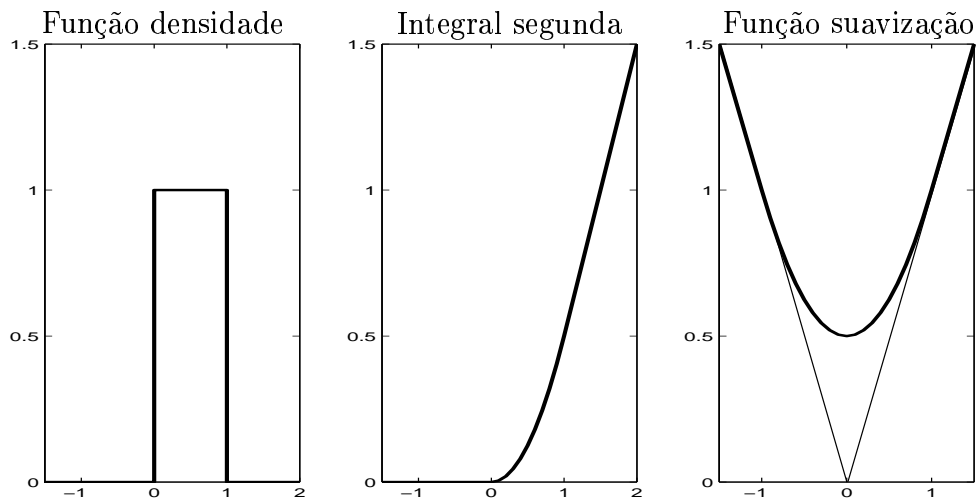


Figura 2.5: Função de suavização obtida pela dupla integração da função pulso.

clássico de uma função não analítica de classe C^∞ (veja [27, pág. 51]) definida por

$$w \in \mathbb{R} \mapsto \theta(w) = \begin{cases} e^{-1/w^2} & \text{se } w > 0, \\ 0 & \text{se } w \leq 0. \end{cases} \quad (2.29)$$

Para $w \neq 0$ e $q \in \mathbb{N}$, as derivadas de ordem q de θ , $\theta^{(q)}(w)$, podem ser computadas por cálculos elementares. Para $w < 0$, $\theta^{(q)}(w) = 0$; enquanto para $w > 0$, $\theta^{(q)}(w)$ é um polinômio de grau $3q$ em w^{-1} , vezes $\theta(w)$. Sabe-se que

$$\lim_{w \rightarrow 0} \frac{1}{w^p} \theta(w) = 0, \quad \forall p \in \mathbb{N}, \quad (2.30)$$

assim $\theta^{(q)}(0) = 0$, para qualquer $q \in \mathbb{N}$. Agora, definimos

$$w \in \mathbb{R} \mapsto \sigma(w) = \beta \theta(w) \theta(1 - w), \quad (2.31)$$

onde $\beta > 0$ é tal que $\int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(w) dw = 1$. A função assim definida é uma função densidade de probabilidade, com derivadas de qualquer ordem nulas fora de $[0, 1]$. Finalmente, a função de suavização não analítica φ de classe C^∞ é obtida pela dupla integração desta função densidade.

2.5 Exemplos continuamente diferenciáveis

Nossa tarefa agora é suavizar a função objetivo F introduzida no Exemplo 4, sem modificar o padrão da trajetória central obtida para $\varepsilon_k = 0$ (antena) e $\varepsilon_k \neq 0$ (zig-zague). Uma análise da construção de F mostra que, para atingir este objetivo, é necessário suavizar as funções elementares f_k introduzidas em (2.8), que por sua vez requerem a suavização de g_k^0 e do operador “sup” que aparece em (2.17).

Enquanto suavizar g_k^0 é muito fácil, suavizar o operador sup requer o uso dos resultados da seção anterior. Começamos mostrando como efetuar essas operações de suavização e apresentamos o Exemplo 5, em que a trajetória central exhibe os padrões de antenna e zig-zague. Mas o zig-zague é ainda uma curva não suave.

Então, melhoramos a suavização para obter um exemplo C^q , com $q > 1$: novamente temos trajetórias centrais com o mesmo padrão, mas agora o zig-zague é $(q - 1)$ vezes diferenciável.

2.5.1 Um exemplo de classe C^1

Suavização de g_k^0 .

Vamos considerar, inicialmente, a suavização das funções elementares f_k . Para isso, construímos g_k na fórmula (2.8) como uma aproximação suave da função contínua g_k^0 dada por (2.5). Uma análise da Seção 2.3 nos mostra que os lemas envolvendo g_k permanecem verdadeiros se esta função toma valores não negativos não excedendo aqueles de g_k^0 (veja condição (2.7)). Em outras palavras, esta operação de suavização precisa ser feita a partir de baixo, decrescendo g_k^0 . A razão é que, para $\varepsilon_k = 0$, o segmento horizontal da trajetória central permanecerá central, enquanto que, para $\varepsilon_k \neq 0$, a trajetória central fará voltas ainda maiores. Portanto, o comportamento padrão das trajetórias centrais anteriores será preservado.

Para este exemplo, definimos $g_k : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, para $k \in \mathbb{N}$ e $z = (x, y) \in \Omega$, por

$$g_k(z) = \frac{1}{4} (g_k^0(z))^2. \quad (2.32)$$

Lema 2.7 *A função g_k definida por (2.32), com g_k^0 dada em (2.5), é convexa, continuamente diferenciável e satisfaz (2.7) em Ω .*

Prova. A função g_k^0 é convexa e toma valores não negativos, e $t \in \mathbb{R}_+ \mapsto t^2/4$ é convexa e crescente. Portanto, g_k é convexa.

Por outro lado, g_k^0 é de classe C^∞ perto de qualquer $z \in \Omega \setminus \{z_k^-, z_k^+\}$. Então, o mesmo é verdadeiro para g_k . Analisamos agora a suavidade de g_k em z_k^+ , sabendo que o argumento é análogo em z_k^- . A função g_k é diferenciável em z_k^+ se seu subdiferencial é reduzido a um único ponto (veja [41, Seção VI.2.1]). De [41, teorema VI.6.3.1], sabemos que $\partial g(z_k^+)$ é a envoltória convexa do conjunto dos limites de seqüências convergentes $\nabla g(z^j)$ para $z^j \rightarrow z_k^+$, $z^j \notin \{z_k^-, z_k^+\}$. Considere uma seqüência $(z^j) \subset \Omega$. Temos que $\nabla g_k(z^j) = \frac{1}{2} g_k^0(z^j) \nabla g_k^0(z^j)$. Como $\|\nabla g_k^0(z^j)\|$ é limitada por 1 e $g_k^0(z^j) \rightarrow 0$, deduzimos que $\lim_{j \rightarrow \infty} \nabla g_k(z^j) = 0$. Então $\partial g_k(z_k^+) = \{0\}$. A diferenciabilidade contínua de g_k segue de um resultado de análise convexa conhecido (veja [41, observação VI.2.2.6]). Para concluir, note que g_k satisfaz (2.7) em Ω , pois para (2.6), $g_k^0(z) \leq 2$ naquele conjunto. \square

Agora descreveremos nosso quinto exemplo.

Exemplo 5 A função $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é feita a partir dos seguintes ingredientes.

- A função suporte $\psi : [-0.5, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ é definida para $y \in [-0.5, 1]$ por

$$\psi(y) = \frac{1}{2} (\max\{0, y\})^2. \quad (2.33)$$

As condições em (2.9) são satisfeitas.

- Para $k \in \mathbb{N}$, g_k é uma função definida por (2.32), onde g_k^0 é dada por (2.5). De acordo com o Lema 2.7, g_k é uma função convexa C^1 satisfazendo (2.7).
- As funções elementares f_k , $k \in \mathbb{N}$, são então definidas por (2.8) (como no Exemplo 3), com coordenadas y_k e coeficientes a_k , b_k , c_k e ε_k satisfazendo (2.10) e (2.13)–(2.15).
- A função de suavização φ é dada por (2.28).

A função objetivo F é agora construída por um processo recorrente.

- Considere $F_0(z) = f_0(z)$, para todo $z \in \Omega$.
- Para $k = 1, 2, \dots$, considere

$$F_k(z) = M_{r_k}(f_k(z), F_{k-1}(z)), \quad \text{para todo } z \in \Omega, \quad (2.34)$$

onde r_k é definido por (2.13), e M_{r_k} é definida por (2.23) e (2.25).

Então F é obtida como o limite pontual das funções F_k :

$$F(z) = \lim_{k \rightarrow \infty} F_k(z), \quad \forall z \in \Omega. \quad (2.35)$$

□

O próximo lema dá algumas propriedades elementares das funções F_k e F . Denotamos por $\text{int } \Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : |x| < 1.5, -0.5 < y < 1\}$ o interior do conjunto Ω .

Lema 2.8 *Considere $k \in \mathbb{N}$. A função F_k definida no Exemplo 5 é convexa e continuamente diferenciável em $\text{int } \Omega$. Além disso:*

- (i) $F(z) = F_{k+i}(z)$, se $i \in \mathbb{N}$ e $z = (x, y) \in \Omega$ com $y \geq y_k$;
- (ii) $F_k(z) = f_k(z)$, se $z = (x, y) \in \Omega$ e $y \leq y_k$;
- (iii) $F(z) = 0$, se $z = (x, y) \in \Omega$ e $y \leq 0$;
- (iv) $F(z) = F_k(z) = M_{r_k}(f_k(z), f_{k-1}(z))$, se $z \in \Omega_k$.

Prova. Convexidade e diferenciabilidade são provadas por indução. De acordo com (2.8) e o Lema 2.7, $F_0 = f_0$ é convexa e C^1 . Suponha agora que $k \geq 1$ e que F_{k-1} seja convexa e C^1 . Como f_k é convexa e C^1 (como f_0), então (2.34), o fato que φ é C^1 e o Lema 2.6 mostram que F_k é também convexa e C^1 .

(i) Do Lema 2.6(iv) e definição (2.34) temos que $F_k \geq f_k$. Para $z \in \Omega$ com $y \geq y_k$, o Lema 2.1 nos dá

$$F_k(z) \geq f_k(z) \geq f_{k+1}(z) + r_{k+1}.$$

Com base no Lema 2.6(iii) e definição (2.34) temos $F_{k+1}(z) = F_k(z)$.

Para o mesmo $z \in \Omega$, temos que $y \geq y_k \geq y_{k+1}$, assim o resultado que acabamos de provar mostra que $F_{k+2}(z) = F_{k+1}(z) = F_k(z)$. Por indução, $F_{k+i}(z) = F_k(z)$, para qualquer $i \in \mathbb{N}$. A definição (2.35) de F agora nos conduz ao resultado.

(ii) Provamos por indução. Por definição, $F_0 = f_0$. Suponha agora que (ii) vale para $k-1$, com $k \geq 1$, e considere $z \in \Omega$ tal que $y \leq y_k$. Por indução e pelo Lema 2.1:

$$F_{k-1}(z) = f_{k-1}(z) \leq f_k(z) - r_k.$$

Então, de acordo com o Lema 2.6(iii) e a definição (2.34), temos que $F_k(z) = f_k(z)$.

(iii) Para $z = (x, y) \in \Omega$ com $y \leq 0$, $F(z) = \lim F_k(z)$ [por (2.35)] = $\lim f_k(z)$ [pelo item (ii)] = 0 [pelo Lema 2.2].

(iv) Considere $z \in \Omega_k$. Então $y \in [y_k, y_{k-1}]$. Pelo item (ii) e $y \leq y_{k-1}$, $F_{k-1}(z) = f_{k-1}(z)$, assim a definição (2.34) nos leva a

$$F_k(z) = M_{r_k}(f_k(z), f_{k-1}(z)).$$

Por outro lado, $F(z) = F_k(z)$ pelo item (i). □

O lema acima mostra que a construção recorrente não é de fato necessária. A função F pode ser definida simplesmente aplicando-se (iv) para $k \in \mathbb{N}$. Denote por $\bar{f} = \sup_{k \in \mathbb{N}} f_k$ a função objetivo do Exemplo 4, com os dados do Exemplo 5. Então os Lemas 2.8(iv) e 2.6(iv) garantem que

$$\bar{f}(z) \leq F(z) \leq \bar{f}(z) + r_k/2, \quad \text{para } z \in \Omega_k. \quad (2.36)$$

Isto mostra que a função F é uma suavização de \bar{f} . O processo de suavização arredonda as emendas em cada faixa Ω_k , mas a suavização de cada emenda não afeta as demais.

Lema 2.9 *A função F construída no Exemplo 5 é convexa e continuamente diferenciável em $\text{int } \Omega$.*

Prova. Sabemos do Lema 2.8(iii) que $F(x, y) = 0$ se $y \leq 0$. Então F é convexa e C^1 em $\Omega_- = \{(x, y) \in \text{int } \Omega \mid y < 0\}$.

Vamos mostrar agora que F é convexa e C^1 em $\Omega_+ = \{(x, y) \in \text{int } \Omega \mid y > 0\}$. Considere $k \in \mathbb{N}$. Pelo Lema 2.8, $F(z) = F_k(z)$ no conjunto aberto $O_k = \{(x, y) \in \text{int } \Omega \mid y > y_k\}$, assim F é convexa e suave neste conjunto. Como k é arbitrário e $\Omega_+ = \cup_{k \in \mathbb{N}} O_k$, F é convexa e suave em Ω_+ .

Note que F é contínua em Ω . De fato, pelos Lemas 2.2 e 2.3, \bar{f} se anula em Ω_- e é contínua em Ω , assim (2.36) implica na continuidade de F em qualquer ponto $(x, 0) \in \Omega$. Para mostrar a convexidade de F , considere dois pontos $z \in \Omega_-$ e $z' \in \Omega_+$, e um escalar $t \in [0, 1]$. Como F se anula em Ω_- , é suficiente mostrar que $F((1-t)z + tz') \leq tF(z')$. Esta desigualdade claramente vale se $(1-t)z + tz' \in \Omega_-$, pois então o lado esquerdo se anula e $F(z') \geq 0$ (use (2.36) e a não negatividade de \bar{f} em Ω_+). Caso contrário, considere z'' o ponto em $[z, z']$ tal que $(z'')^\top e^2 = 0$.

Então $(1-t)z + tz' = (1-t')z'' + t'z'$ para algum $t' \in [0, t]$. Como F é não negativa e convexa no fecho de Ω_+ [41, proposição IV.1.2.6] e $F(z'') = 0$, deduzimos que $F((1-t)z + tz') = F((1-t')z'' + t'z') \leq t'F(z') \leq tF(z')$.

Temos ainda que provar que F é C^1 em um ponto arbitrário $z = (x, 0)$, com $-1.5 < x < 1.5$. Para tanto é suficiente mostrar que $\partial F(z) = \{0\}$. Considere $\delta \in \partial F(z)$. Ao longo de qualquer direção $h = (h_1, h_2)$, tal que $h_2 \leq 0$, temos que $F'(z, h) = 0$, por que F se anula no fecho de Ω_- . Para $h = (0, -1)$, $0 = F'(z, h) \geq \delta^\top h = -\delta_2$. Então $\delta_2 \geq 0$. Para $h = (\pm 1, 0)$, $0 = F'(z, h) \geq \delta^\top h = \pm \delta_1$. Então $\delta_1 = 0$. Concluimos que $\delta = (0, \delta_2)$, com $\delta_2 \geq 0$. Pela convexidade,

$$F(x, y_k) \geq F'((x, 0); (0, y_k)) \geq \delta_2 y_k. \quad (2.37)$$

De acordo com o Lema 2.8, $F(x, y_k) = f_k(x, y_k) \leq b_k + c_k g_k(x, y_k) + 1.5 |\varepsilon_k|$. De (2.16) e do fato que $g_k(x, y_k) \leq 0.5$, segue imediatamente que $F(x, y_k) \leq 2b_k = y_k^2$. Então, o limite em (2.37) implica que $\delta = 0$. \square

O Lema 2.9 mostra que a função F construída no Exemplo 5 é realmente convexa e suave. Vamos examinar sua trajetória central.

Para $\varepsilon_k = 0$, o padrão da antena da trajetória central é preservado, como no exemplo 4. Isto é essencialmente uma consequência do Lema 2.8. De fato, cada segmento $[z_k^-, z_k^+]$ pertence à trajetória central, porque $F(z) = f_k(z)$ quando $z = (x, y_k) \in \Omega$. Para $y \in (y_k, y_{k-1})$, sabemos que ambas $f_k(\cdot, y)$ e $f_{k-1}(\cdot, y)$ são unicamente minimizadas em $x = 0$. Então, isto é também o caso para $F(\cdot, y) = M_{r_k}(f_k(\cdot, y), f_{k-1}(\cdot, y))$, pela propriedade de monotocidade de M_{r_k} (Lema 2.5).

Considere agora o caso quando $\varepsilon_k \neq 0$ é computado como em (2.15). Para $y \in (y_k, y_{k-1})$, $F(\cdot, y)$ tem um único minimizador (pelas mesmas razões acima). Para $y = y_k$, $F(\cdot, y_k) = f_k(\cdot, y_k)$, e um cálculo fácil usando (2.8) e (2.32) nos fornece

$$\arg \min_{x \in \mathbb{R}} F(x, y_k) = \{(-1)^{k+1}(1 + \tau_k)\},$$

onde $0 < \tau_k = 2|\varepsilon_k|/c_k \leq 0.5$. Como no Exemplo 4, a trajetória central é uma curva contínua (para $y > 0$) formando um ziguezague, no entanto, com voltas ainda maiores.

As trajetórias centrais em forma de antena e ziguezague para a função objetivo C^1 do exemplo 5 são apresentadas na Figura 2.6 (o ziguezague é a curva

tracejada).

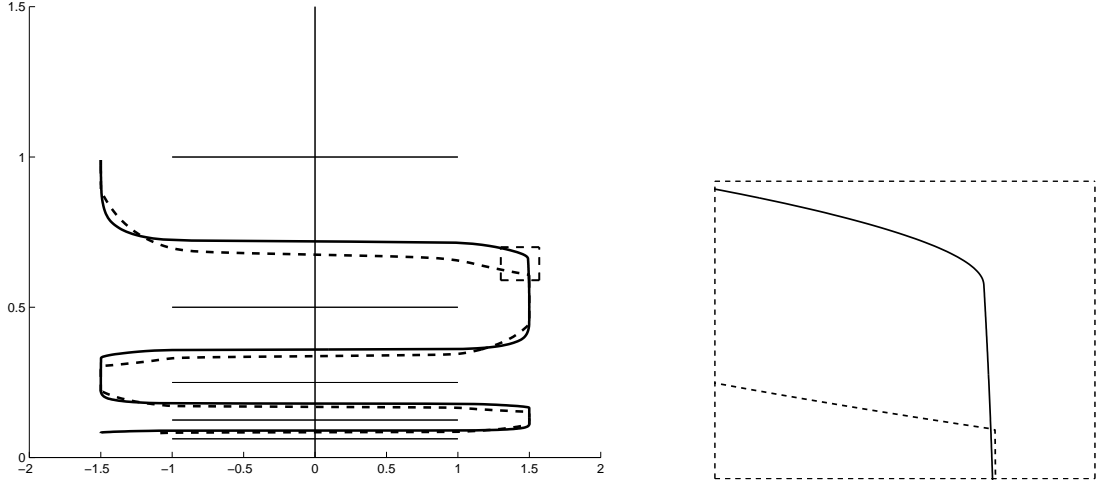


Figura 2.6: Trajetória central em ziguezague para funções objetivo C^1 e C^2 .

2.5.2 Um exemplo de classe C^q com $q > 1$

É fácil modificar os ingredientes que determinam a função F no Exemplo 5 para obter uma função objetivo mais suave. Considere $q \geq 2$ um inteiro que especifica o grau de suavidade desejado ($q = 1$ no Exemplo 5). As modificações a serem feitas são as seguintes. Primeiro, em vez de definir g_k por (2.32), considere

$$g_k(z) = \left(\frac{g_k^0(z)}{2} \right)^{q+1}, \quad \text{para } z \in \Omega. \quad (2.38)$$

A função suporte $\psi : [-0.5, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ em (2.33) é agora definida por

$$\psi(y) = \frac{1}{q+1} (\max\{0, y\})^{q+1}, \quad \text{para } y \in [-0.5, 1], \quad (2.39)$$

e a função de suavização $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$ em (2.28) é agora obtida como na Seção 2.4.1, começando com a função densidade de probabilidade

$$\sigma(w) = \begin{cases} \beta w^{q-2} (1-w)^{q-1} & \text{se } w \in [0, 1], \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.40)$$

onde $\beta > 0$ é tal que $\int \sigma(w) dw = 1$. Pode-se mostrar, usando argumentos análogos

àqueles das Seções 2.5 e 2.6 que, com essas modificações, a função objetivo no Exemplo 5 é convexa e de classe C^q .

Suavidade da trajetória central.

O próximo lema dá condições que garantem a suavidade da trajetória central em ziguezague. A trajetória correspondente à função objetivo C^2 , obtida com $q = 2$ nos dados acima, é a curva cheia na Figura 2.6.

Lema 2.10 *Considere o Exemplo 5, em que $g_k = \gamma \circ g_k^0$, onde $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é duas vezes diferenciável e satisfaz $\gamma'(0) = 0$, assim como $\gamma'(t) > 0$ e $\gamma''(t) > 0$ quando $t > 0$. Suponha também que a função de suavização φ é duplamente diferenciável e que a função objetivo F é convexa e de classe C^q , com $q \geq 2$. Então, a trajetória central em ziguezague é uma função de classe C^{q-1} de $y > 0$.*

Prova. A trajetória central é definida por (2.4), onde χ pode assumir *a priori* multivalores. Como F é convexa e diferenciável, um ponto $z = (x, y)$ está na trajetória central se, e somente se, ele satisfaz a condição de otimalidade

$$\nabla_x F(x, y) = 0.$$

Queremos mostrar que χ é injetora e é de classe C^{q-1} . Como ∇F é C^{q-1} , isto é uma consequência clara do teorema da função implícita se $\nabla_{xx}^2 F(x, y)$ é não nula ao longo da trajetória central em ziguezague. De fato, vamos mostrar que $\nabla_{xx}^2 F(x, y) > 0$, o que concluirá a prova.

Considere $z = (x, y)$, com $y > 0$, um ponto arbitrário na trajetória central em ziguezague. Observe que quando $\varepsilon_k > 0$:

$$F'(z_k^-; -e^1) = f'_k(z_k^-; -e^1) = c_k \gamma'(0) (g_k^0)'(z_k^-; -e^1) - \varepsilon_k = -\varepsilon_k < 0.$$

Analogamente, quando $\varepsilon_k < 0$: $F'(z_k^+; e^1) = \varepsilon_k < 0$. Portanto, $z \notin [z_k^-, z_k^+]$, $g_k^0(z) > 0$, e g_k^0 é C^∞ em torno de z .

Vamos mostrar que $\nabla_{xx}^2 f_k(z) > 0$ ou, equivalentemente, como $c_k > 0$, que $\nabla_{xx}^2 g_k(z) > 0$. Pelas hipóteses e pela suavidade de g_k^0 em torno de z :

$$\nabla_{xx}^2 g_k(z) = \gamma'(g_k^0(z)) \nabla_{xx}^2 g_k^0(z) + \gamma''(g_k^0(z)) (\nabla_x g_k^0(z))^2.$$

Como $g_k^0(z) > 0$, temos que $\gamma'(g_k^0(z)) > 0$ e $\gamma''(g_k^0(z)) > 0$. Também, como

$z \notin \{z_k^-, z_k^+\}$:

$$\nabla_x g_k^0(z) = \frac{1}{2} \left(\frac{x+1}{\|z - z_k^-\|} + \frac{x-1}{\|z - z_k^+\|} \right).$$

Esta derivada se anula somente se $x = 0$. Por outro lado, para $x = 0$:

$$\nabla_{xx}^2 g_k^0(z) = \frac{(y - y_k)^2}{\|(1, y - y_k)\|^3}.$$

Esta quantidade se anula somente se $y = y_k$. Como $(0, y_k)$ não está na trajetória central em ziguezague, deduzimos que $\nabla_{xx}^2 g_k(z) > 0$, então $\nabla_{xx}^2 f_k(z) > 0$.

Se $y = y_k$, $F(z) = f_k(z)$ e $\nabla_{xx}^2 F(x, y) = \nabla_{xx}^2 f_k(z) > 0$.

Suponha agora que $y \in (y_k, y_{k-1})$. Então, de acordo com o Lema 2.8(iv),

$$F(z) = M_{r_k}(f_k(z), f_{k-1}(z)) = \frac{1}{2} \left(f_k(z) + f_{k-1}(z) + \varphi_{r_k}(f_k(z) - f_{k-1}(z)) \right).$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \nabla_{xx}^2 F(x, y) &= \frac{1}{2} \left(\left[1 + \varphi'_{r_k}(f_k(z) - f_{k-1}(z)) \right] \nabla_{xx}^2 f_k(z) + \right. \\ &\quad \left[1 - \varphi'_{r_k}(f_k(z) - f_{k-1}(z)) \right] \nabla_{xx}^2 f_{k-1}(z) + \\ &\quad \left. \varphi''_{r_k}(f_k(z) - f_{k-1}(z)) \left[\nabla_x f_k(z) - \nabla_x f_{k-1}(z) \right]^2 \right). \end{aligned}$$

Pela construção de φ em (2.22), $|\varphi'_r(t)| \leq 1$ para qualquer $t \in \mathbb{R}$. Então, os três termos no parentêses principal acima são todos não negativos. Por outro lado, mostramos que $\nabla_{xx}^2 f_k(z) > 0$ e $\nabla_{xx}^2 f_{k-1}(z) > 0$, e como os fatores dessas duas quantidades não podem se anular, deduzimos que $\nabla_{xx}^2 F(x, y) > 0$. \square

2.6 Um exemplo de classe C^∞

Esta seção é razoavelmente técnica, mas resolve nossa última questão: construir um exemplo infinitamente suave. A construção é similar à desenvolvida na seção anterior, mas agora todas as funções envolvidas na construção e suavização de F devem ser de classe C^∞ . Novamente nós obtemos trajetórias em forma de antena e ziguezague, mas a trajetória em ziguezague é uma curva infinitamente diferenciável.

Exemplo 6 A função $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é construída da mesma maneira que no Exemplo 5, com as seguintes modificações.

- A função suporte $\psi : [-0.5, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ é agora definida para $y \in [-0.5, 1]$ por

$$\psi(y) = \theta\left(\frac{y}{2}\right), \quad (2.41)$$

onde θ é a função C^∞ dada em (2.29).

- As funções perturbações $g_k : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, para $k \in \mathbb{N}$, são agora obtidas pela suavização com θ das funções g_k^0 definidas em (2.5): para $z = (x, y) \in \Omega$,

$$g_k(z) = g_k^\infty(z) = \theta\left(\frac{1}{3}g_k^0(z)\right). \quad (2.42)$$

- A função suavização φ é agora a função C^∞ dada no final da Seção 2.4, usando a função θ e a função densidade de probabilidade definidas por (2.31).

□

Vamos motivar as escolhas feitas no Exemplo 6. É fácil verificar (calculando derivadas segundas) que θ é estritamente convexa em $(0, \sqrt{2/3})$. Portanto, a função suporte ψ satisfaz as condições em (2.9). Por outro lado, sabemos por (2.6) que, para $z \in \Omega$, $0 \leq g_k^0(z) \leq 2$. Então, g_k^∞ é convexa em Ω , como uma composição de uma função convexa não decrescente e uma função convexa. Também é fácil verificar que, para $w \geq 0$, $0 \leq \theta(w) \leq w$. Então, para $z \in \Omega$, temos que $0 \leq g_k^\infty(z) \leq g_k^0(z)$ e (2.7) é satisfeita.

Nosso principal trabalho nessa seção é provar que F é de classe C^∞ (sua convexidade e o comportamento das trajetórias centrais são obtidos a partir de argumentos análogos àqueles da Seção 2.5). Para tanto, usamos o seguinte resultado citado por Fleming [27, pág. 50] como um caso especial de um teorema de Whitney [83].

Lema 2.11 *Considere $\Gamma \subset \mathbb{R}^p$ o fecho de um conjunto aberto Γ_0 e suponha que Γ é convexo. Considere ϕ de classe C^q em Γ_0 , para algum $q \in \mathbb{N}$, e contínua em Γ . Além disso, suponha que, para cada $m \geq 0$ e $n \geq 0$, com $m + n = q$, existe uma função $\bar{\phi}_{m,n}$ contínua em Γ tal que*

$$\bar{\phi}_{m,n}(z) = \frac{\partial^q \phi}{\partial x^m \partial y^n}(z), \quad \text{para todo } z \in \Gamma_0.$$

Então existe uma função $\bar{\phi}$ de classe C^q em \mathbb{R}^p tal que $\bar{\phi}(z) = \phi(z)$ para todo $z \in \Gamma$. Em particular, ϕ é de classe C^q em Γ .

A grosso modo, este lema garante que, se toda derivada parcial de ordem q de ϕ em Γ_0 pode ser continuamente estendida a Γ , então ϕ é de classe C^q em Γ .

De acordo com o Lema 2.11, temos que olhar para as derivadas parciais das funções envolvidas na definição de F , e controlar seu comportamento perto de possíveis pontos singulares. Então, faremos isto para g_k^0 , θ , g_k^∞ , f_k , φ e finalmente para F .

Derivadas de g_k^0 . O próximo lema estabelece um limitante para essas derivadas.

Lema 2.12 *Para todo $q \in \mathbb{N}$, existe uma constante positiva N_q tal que, para todo $k, m, n \in \mathbb{N}$ com $m + n = q$ e todo $z \in \Gamma$ com $g_k^0(z) > 0$, vale*

$$\left| \frac{\partial^q g_k^0}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq \frac{N_q}{(g_k^0(z))^{q-1}}. \quad (2.43)$$

Prova. Quando $q = 0$, o resultado é verdadeiro com $N_0 = 1$. Agora vamos fixar $k, m, n \in \mathbb{N}$ com $m + n = q > 0$. Para $z \in \Omega$ com $g_k^0(z) > 0$,

$$\frac{\partial^q g_k^0}{\partial x^m \partial y^n}(z) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^q}{\partial x^m \partial y^n} \|z - z_k^-\| + \frac{\partial^q}{\partial x^m \partial y^n} \|z - z_k^+\| \right).$$

Calculando essas derivadas, obtemos

$$\frac{\partial^q g_k^0}{\partial x^m \partial y^n}(z) = \frac{Q_{q,k}^-(z)}{\|z - z_k^-\|^{2q-1}} + \frac{Q_{q,k}^+(z)}{\|z - z_k^+\|^{2q-1}},$$

onde $Q_{q,k}^\pm$ (nesta sentença, a ordem dos superíndices $+$ e $-$ importa) é uma soma de produtos de uma constante (dependente de m e n) vezes q fatores escolhidos entre $(x \pm 1)$ e $(y - y_k)$. Como $|x \pm 1|$ e $|y - y_k|$ são limitados por $\|z - z_k^\mp\|$, existe uma constante $N_{m,n}$ independente de k tal que

$$\left| \frac{\partial^q g_k^0}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq N_{m,n} \left(\frac{1}{\|z - z_k^-\|^{q-1}} + \frac{1}{\|z - z_k^+\|^{q-1}} \right).$$

Usando a desigualdade triangular e $\|z_k^- - z_k^+\| = 2$, temos que

$$g_k^0(z) = \frac{1}{2} (\|z - z_k^-\| + \|z - z_k^- + z_k^- - z_k^+\| - 2) \leq \|z - z_k^-\|.$$

Analogamente, $g_k^0(z) \leq \|z - z_k^+\|$. Disto segue que

$$\left| \frac{\partial^q g_k^0}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq \frac{2N_{m,n}}{(g_k^0(z))^{q-1}}.$$

O resultado segue com $N_q := \max \{2N_{m,n} \mid m+n=q, m, n \in \mathbb{N}\}$. \square

Derivadas de uma função composta. Considere a função composta $\phi = \gamma \circ \eta$, onde $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ e $\eta : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ são funções de classe C^q . Considere $m, n \in \mathbb{N}$ tais que $q = m + n > 0$. A derivada parcial ϕ pode ser escrita como uma soma finita da forma

$$\frac{\partial^q \phi}{\partial x^m \partial y^n}(z) = \sum_j \alpha_j \gamma^{(l_j)}(\eta(z)) \mathcal{P}_j, \quad (2.44)$$

onde α_j são inteiros, $l_j \in \{1, 2, \dots, q\}$ e \mathcal{P}_j são produtos de l_j derivadas parciais de η em z , com soma das ordens igual a q .

Derivadas de θ . A derivada de ordem $l \in \mathbb{N}$ de θ , definida em (2.29), calculada em w , é dada por

$$\theta^{(l)}(w) = \begin{cases} \theta(w) P_{3l} \left(\frac{1}{w} \right) & \text{se } w > 0 \\ 0 & \text{se } w \leq 0, \end{cases} \quad (2.45)$$

onde $P_{3l} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é um polinômio de grau $3l$.

Derivadas de g_k^∞ . Agora aplicamos os resultados acima para obter um limitante para as derivadas de g_k^∞ definida em (2.42). O próximo lema também mostra que g_k^∞ é de classe C^∞ , o que estende o Lema 2.7 para o Exemplo 6.

Lema 2.13 *As funções g_k^∞ , $k \geq 0$, são convexas e de classe C^∞ em Ω . Além disso, para qualquer $q \in \mathbb{N}$, existe uma constante positiva K_q tal que, para todo $k, m, n \in \mathbb{N}$ com $m+n=q$ e para todo $z \in \Omega$, vale*

$$\left| \frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq K_q. \quad (2.46)$$

Prova. Considere $k, m, n \in \mathbb{N}$ fixados, $q = m + n$. Para $q = 0$, o fato que g_k^0 é limitado por 2 em Ω implica (2.46) com $K_0 = \theta(2)$. Por outro lado g_k^∞ é claramente contínua em Ω . Portanto, podemos supor que $q > 0$. Para simplificar a notação consideramos $g(\cdot) \equiv g_k^0(\cdot)/3$, então $g_k^\infty = \theta \circ g$.

Sabemos que g_k^0 é C^∞ , exceto nos pontos z_k^- e z_k^+ , onde ela é não diferenciável. Portanto, g_k^∞ é C^∞ em todo ponto $z \in \Omega \setminus \{z_k^-, z_k^+\}$. Para mostrar sua suavidade em z_k^\pm provamos que toda derivada parcial de ordem q de g^∞ converge para zero quando $z \rightarrow z_k^\pm$ e aplicamos o Lema 2.11.

Vamos calcular as derivadas de g_k^∞ em um ponto $z \in \Omega \setminus \{z_k^-, z_k^+\}$. Como acima:

$$\frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) = \sum_j \alpha_j \theta^{(l_j)}(g(z)) \mathcal{P}_j, \quad (2.47)$$

onde α_j são inteiros, $l_j \in \{1, 2, \dots, q\}$ e \mathcal{P}_j são produtos de l_j derivadas parciais de g , com soma das ordens iguais a q .

Sabemos por (2.45) que, se $g_k^0(z) = 0$, então $\theta^{(l_j)}(g(z)) = 0$ para todo j , assim $\frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) = 0$. Considere agora o caso quando $g_k^0(z) \neq 0$. Então, a partir de (2.45), novamente

$$\theta^{(l_j)}(g(z)) = \theta(g(z)) P_{3l_j} \left(\frac{1}{g(z)} \right), \quad (2.48)$$

onde $P_{3l_j} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é um polinômio de grau $3l_j$. Por outro lado, cada derivada de g satisfaz (2.43), então

$$|\mathcal{P}_j| \leq \prod_{i=1}^{l_j} \frac{N_{q_i}}{(g(z))^{q_i-1}} \leq \frac{\bar{N}_q^q}{(g(z))^{r_j}},$$

onde $\bar{N}_q := \max\{1, N_1, \dots, N_q\}$ e $r_j \leq q$. Combinando isto com (2.48) e (2.47) temos

$$\left| \frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq \theta(g(z)) \sum_j \alpha_j P_{3l_j} \left(\frac{1}{g(z)} \right) \frac{\bar{N}_q^q}{(g(z))^{r_j}} = \theta(g(z)) \tilde{P}_{4q} \left(\frac{1}{g(z)} \right),$$

onde $\tilde{P}_{4q} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é um polinômio de grau $\leq 4q$. Mostramos que para $z \in \Omega \setminus \{z_k^-, z_k^+\}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) = 0 & \text{se } g_k^0(z) = 0, \\ \left| \frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq \theta \left(\frac{g_k^0(z)}{3} \right) \tilde{P}_{4q} \left(\frac{3}{g_k^0(z)} \right) & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.49)$$

Agora vamos provar que g_k^∞ é C^∞ em z_k^+ (a prova é análoga em z_k^-). Pelo Lema 2.11, é suficiente mostrar que

$$\lim_{z \rightarrow z_k^+} \frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) = 0.$$

Considere uma sequência $\{z_i\}$ em $\Omega \setminus \{z_k^-, z_k^+\}$ tal que $z_i \rightarrow z_k^+$. Então $g_k^0(z_i) \rightarrow 0$ e o limite acima segue de (2.49) e (2.30).

Temos ainda que provar (2.46). De (2.30), a função

$$w \in \mathbb{R} \mapsto \begin{cases} \theta(w) \tilde{P}_{4q}(1/w) & \text{se } w > 0 \\ 0 & \text{se } w \leq 0 \end{cases}$$

é contínua e g_k^0 toma seus valores no conjunto compacto $[0, 2]$. Portanto, de (2.49), existe uma constante positiva K_q dependente somente em q , tal que para qualquer $z \in \Omega$:

$$\left| \frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq K_q.$$

□

Relembramos que f_k é definida por (2.8), onde $g_k = g_k^\infty$ é agora dada por (2.42). Como g_k^∞ é convexa e de classe C^∞ em Ω (Lema 2.13), assim é f_k . A função de suavização φ também é convexa e C^∞ . É, então, possível estender o Lema 2.8.

Lema 2.14 *Para todo $k \in \mathbb{N}$, a função F_k do Exemplo 6 é convexa e de classe C^∞ e todas as propriedades (i)-(iv) no Lema 2.8 valem.*

Prova. A prova é análoga a do Lema 2.8. □

Para prosseguir, precisamos de um resultado técnico.

Lema 2.15 *Para k suficientemente grande,*

$$2 \leq \frac{\psi(y_{k-1})}{r_k} \leq 3 \quad e \quad \frac{2}{y_k^3} \leq \frac{a_{k-1}}{r_k} \leq \frac{3}{y_k^3}.$$

Prova. Para simplificar a notação, considere

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \psi(y_k) - [\psi(y_{k-1}) + \psi'(y_{k-1})(y_k - y_{k-1})], \\ \beta_k &= \psi(y_{k-1}) - [\psi(y_k) + \psi'(y_k)(y_{k-1} - y_k)]. \end{aligned} \tag{2.50}$$

Por (2.10) e (2.13), $r_k = \frac{1}{2} \min \{\alpha_k, \beta_k\}$.

Vamos provar inicialmente que $\beta_k \leq \alpha_k$, para $k \geq 1$. Como ψ é positiva e crescente em $(0, 1)$, temos a partir de (2.41):

$$\beta_k \leq \psi(y_{k-1}) = \theta(y_k).$$

Agora considere (2.50) para $k \geq 1$, e use os seguintes fatos: $\psi(y_k) \geq 0$, $y_k - y_{k-1} = -y_k$, $\psi'(y_{k-1}) = \psi(y_{k-1})/y_k^3$, $\psi(y_{k-1}) = \theta(y_k)$ e $y_k \leq 1/2$. Obtemos

$$\alpha_k \geq \psi'(y_{k-1})y_k - \psi(y_{k-1}) = \left(\frac{1}{y_k^2} - 1\right) \theta(y_k) \geq \theta(y_k).$$

Então $\beta_k \leq \alpha_k$. Consequentemente $r_k = \beta_k/2$. Assim, usando novamente $y_k - y_{k-1} = -y_k$ e $\psi(y_k) = e^{-3/y_k^2} \psi(y_{k-1})$, obtemos

$$\begin{aligned} r_k &= \frac{1}{2} (\psi(y_{k-1}) - \psi(y_k) - \psi'(y_k)y_k) \\ &= \frac{1}{2} \left(\psi(y_{k-1}) - \left(1 + \frac{8}{y_k^2}\right) \psi(y_k) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - e^{-3/y_k^2} \left(1 + \frac{8}{y_k^2}\right) \right) \psi(y_{k-1}). \end{aligned}$$

Como $e^{-3/y_k^2} (1 + 8/y_k^2)$ é positiva e tende a zero (por (2.30)), temos para k suficientemente grande

$$2 \leq \frac{\psi(y_{k-1})}{r_k} = \frac{2}{1 - e^{-3/y_k^2} \left(1 + \frac{8}{y_k^2}\right)} \leq 3,$$

provando a primeira expressão. Para a segunda, basta observar que, por (2.10) e (2.41), $a_{k-1} = \psi'(y_{k-1}) = \psi(y_{k-1})/y_k^3$. \square

Derivadas de f_k . As primeiras derivadas em $z \in \Omega$ são

$$\frac{\partial f_k}{\partial x}(z) = c_k \frac{\partial g_k^\infty}{\partial x}(z) + \varepsilon_k \quad \text{e} \quad \frac{\partial f_k}{\partial y}(z) = a_k + c_k \frac{\partial g_k^\infty}{\partial y}(z). \quad (2.51)$$

Suas derivadas de ordem superior para $m, n, q \in \mathbb{N}$, tal que $m + n = q \geq 2$, são

$$\frac{\partial^q f_k}{\partial x^m \partial y^n}(z) = c_k \frac{\partial^q g_k^\infty}{\partial x^m \partial y^n}(z). \quad (2.52)$$

Lema 2.16 Considere $m, n \in \mathbb{N}$, tal que $q := m + n \geq 1$. Para todo $k \geq 0$:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\partial^q f_k}{\partial x^m \partial y^n}(z) = 0, \quad \text{uniformemente para } z \in \Omega. \quad (2.53)$$

Além disso, existe constante positiva R_q , tal que para $z \in \Omega$ e k suficientemente grande:

$$\left| \frac{\partial^q f_k}{\partial x^m \partial y^n}(z) - \frac{\partial^q f_{k-1}}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq R_q \frac{r_k}{y_k^3}. \quad (2.54)$$

Prova. A primeira proposição do lema segue imediatamente das fórmulas de f_k e suas derivadas (veja (2.51) e (2.52)), do limitante (2.46) obtido no Lema 2.13, e do fato que a_k, b_k, c_k , e ε_k tendem a zero.

O segundo resultado é provado examinando três casos, dependendo dos valores de q, m , e n .

- Caso 1: $q \geq 2$. Usando (2.52), o limitante (2.46) e o fato que ambos c_{k-1} e c_k não excedem a $r_k/4$ (veja (2.14)), obtemos para qualquer $k \geq 1$:

$$\left| \frac{\partial^q f_k}{\partial x^m \partial y^n}(z) - \frac{\partial^q f_{k-1}}{\partial x^m \partial y^n}(z) \right| \leq (c_k + c_{k-1}) K_q \leq \frac{r_k}{2} K_q.$$

Então, (2.54) segue com $R_q = K_q/2$, pois $y_k \leq 1$.

- Caso 2: $q = m = 1$. Usando (2.51), o limitante (2.46), o fato que ambos c_{k-1} e c_k não excedem a $r_k/4$ e $|\varepsilon_k| \leq |\varepsilon_{k-1}| \leq r_k/16$ (veja (2.16)), temos para qualquer $k \geq 1$:

$$\left| \frac{\partial f_k}{\partial x}(z) - \frac{\partial f_{k-1}}{\partial x}(z) \right| \leq \frac{r_k}{2} K_1 + 2|\varepsilon_{k-1}| \leq \frac{r_k}{2} \left(K_1 + \frac{1}{4} \right).$$

A desigualdade (2.54) segue como no caso 1.

- Caso 3: $q = n = 1$. Usando (2.51), o limitante (2.46), o fato que ambos c_{k-1} e c_k não excedem a $r_k/4$ e $a_k \leq a_{k-1} \leq 3r_k/y_k^3$ (veja Lema 2.15), obtemos para k suficientemente grande:

$$\left| \frac{\partial f_k}{\partial y}(z) - \frac{\partial f_{k-1}}{\partial y}(z) \right| \leq 2a_{k-1} + \frac{r_k}{2} K_1 \leq \frac{6r_k}{y_k^3} + \frac{r_k}{2} K_1 \leq \frac{r_k}{y_k^3} \left(6 + \frac{K_1}{2} \right),$$

pois $y_k \leq 1$. De onde segue a desigualdade (2.54).

□

Derivadas de φ : Não precisamos de uma expressão explícita para as derivadas da função de suavização φ , apenas limitantes. De (2.22), se $|w| \geq 1$, então $\varphi'(w) = \pm 1$ e $\varphi^{(l)}(w) = 0$ para $l \geq 2$. Portanto, como $\varphi \in C^\infty$, para qualquer inteiro $l \geq 1$, existe uma constante positiva S_l , tal que

$$|\varphi^{(l)}(w)| \leq S_l, \quad \text{para qualquer } w \in \mathbb{R}. \quad (2.55)$$

O principal resultado desta seção é o seguinte.

Lema 2.17 *A função objetivo F do Exemplo 6 é convexa e de classe C^∞ em Ω .*

Prova. Usando os mesmos argumentos do início da prova do Lema 2.9, temos que F se anula em $\Omega_- = \{(x, y) \in \text{int } \Omega \mid y < 0\}$ e é C^∞ em $\Omega_+ = \{(x, y) \in \text{int } \Omega \mid y > 0\}$. Ela é também convexa e contínua em Ω .

Ainda temos que mostrar que F é C^∞ em Ω , sabendo que ela é suave em $\Omega_0 = \Omega_- \cup \Omega_+$. Para tanto, aplicamos o Lema 2.11: é suficiente mostrar que toda derivada parcial de F tem uma extensão contínua de Ω_0 para Ω .

Esta extensão em um ponto $(x, y) \in \Omega \setminus \Omega_0$, com $y \neq 0$, é direta, por isso concentramos nossa atenção naqueles pontos da forma $\tilde{z} = (x, 0)$, com $x \in [-1.5, 1.5]$.

Considere $m, n \in \mathbb{N}$ fixos, tais que $q := m + n > 0$. É suficiente mostrar que $\frac{\partial^q F}{\partial x^m \partial y^n}(z_i)$ converge para zero quando $z_i = (x_i, y_i) \in \Omega_0$ converge para \tilde{z} . Podemos supor que $y_i > 0$, pois caso contrário a derivada parcial se anula (um caso fácil).

Para todo $i \in \mathbb{N}$, existe $k_i \in \mathbb{N}$ tal que z_i pertence à faixa Ω_{k_i} . Para simplificar a notação, considere, para $z \in \Omega$,

$$h_{k_i}(z) = \frac{f_{k_i}(z) - f_{k_i-1}(z)}{r_{k_i}}.$$

Do Lema 2.14,

$$F(z_i) = M_{r_{k_i}}(f_{k_i}(z_i), f_{k_i-1}(z_i)) = \frac{1}{2}(f_{k_i}(z_i) + f_{k_i-1}(z_i) + r_{k_i}\varphi(h_{k_i}(z_i))).$$

Portanto,

$$\frac{\partial^q F}{\partial x^m \partial y^n}(z_i) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^q f_{k_i}}{\partial x^m \partial y^n}(z_i) + \frac{\partial^q f_{k_i-1}}{\partial x^m \partial y^n}(z_i) + r_{k_i} \frac{\partial^q (\varphi \circ h_{k_i})}{\partial x^m \partial y^n}(z_i) \right). \quad (2.56)$$

Quando $z_i \rightarrow \tilde{z}$, $k_i \rightarrow \infty$, e assim o Lema 2.16 implica que os dois primeiros termos em (2.56) tendem a zero.

Usando (2.44), o último termo em (2.56) pode ser escrito como

$$r_{k_i} \frac{\partial^q(\varphi \circ h_{k_i})}{\partial x^m \partial y^n}(z_i) = r_{k_i} \sum_j \alpha_j \varphi^{(l_j)}(h_{k_i}(z_i)) \mathcal{P}_j, \quad (2.57)$$

onde α_j são inteiros, $l_j \in \{1, 2, \dots, q\}$ e \mathcal{P}_j são produtos de l_j derivadas parciais de h_{k_i} em z_i , com soma das ordens igual a q . Por (2.55), para todo $l_j \in \{1, 2, \dots, q\}$,

$$|\varphi^{(l_j)}(h_{k_i}(z_i))| \leq \bar{S}_q, \quad (2.58)$$

onde $\bar{S}_q := \max\{1, S_1, \dots, S_q\}$ é independente de i . Vamos examinar o produto \mathcal{P}_j :

$$|\mathcal{P}_j| = \left| \prod_{l=1}^{l_j} \frac{\partial^{q_l} h_{k_i}}{\partial x^{m_l} \partial y^{n_l}}(z_i) \right| = \frac{1}{r_{k_i}^{l_j}} \prod_{l=1}^{l_j} \left| \frac{\partial^{q_l} f_{k_i}}{\partial x^{m_l} \partial y^{n_l}}(z_i) - \frac{\partial^{q_l} f_{k_i-1}}{\partial x^{m_l} \partial y^{n_l}}(z_i) \right|.$$

Pelo Lema 2.16, para i (e conseqüentemente k_i) suficientemente grande,

$$|\mathcal{P}_j| \leq \frac{1}{r_{k_i}^{l_j}} \prod_{l=1}^{l_j} \left(R_{q_l} \frac{r_{k_i}}{y_{k_i}^3} \right) \leq \left(\frac{\bar{R}_q}{y_{k_i}^3} \right)^q,$$

onde $\bar{R}_q := \max\{1, R_1, \dots, R_q\}$ é independente de i . Combinando esta estimativa com (2.57) e (2.58), temos

$$r_{k_i} \left| \frac{\partial^q(\varphi \circ h_{k_i})}{\partial x^m \partial y^n}(z_i) \right| \leq r_{k_i} \bar{S}_q \frac{\bar{R}_q^q}{y_{k_i}^{3q}} \sum_j \alpha_j \leq 2K \frac{r_{k_i}}{y_{k_i}^{3q}},$$

onde K é uma constante independente de i . Do Lema 2.15, $r_{k_i} \leq \psi(y_{k_i-1})/2 = \theta(y_{k_i})/2$. Então

$$r_{k_i} \left| \frac{\partial^q(\varphi \circ h_{k_i})}{\partial x^m \partial y^n}(z_i) \right| \leq K \frac{\theta(y_{k_i})}{y_{k_i}^{3q}}.$$

Por (2.30) e $y_{k_i} \rightarrow 0$, o lado direito desta desigualdade converge para zero. \square

Para concluir, vamos olhar a trajetória central (2.4), associada com a função F no Exemplo 6. Isto depende dos valores de ε_k satisfazendo (2.15).

Se $\varepsilon_k = 0$ para todo $k \in \mathbb{N}$, a trajetória central exibe um padrão de antena, como antes. De fato, para $y \in (y_k, y_{k-1})$, $f_k(\cdot, y)$ e $f_{k-1}(\cdot, y)$ têm um único minimizador em $x = 0$ ($g_k^0(\cdot, y)$ é positiva e estritamente convexa e θ é estritamente convexa em $(0, 2/3)$), assim $F(\cdot, y)$ também o é (veja Lemas 2.14 e 2.8). Para $y = y_k$, $F(\cdot, y_k) = f_k(\cdot, y_k)$, que é minimizada para $x \in [-1, +1]$.

Se $\varepsilon_k \neq 0$ e $|\varepsilon_k|$ é suficientemente pequeno, para todo $k \in \mathbb{N}$, a trajetória central exibe um padrão de ziguezague com variação infinita. De fato, $F(\cdot, y_k)$ é minimizada em um único ponto $x \notin [-1, +1]$ caracterizado por

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x, y_k) = \frac{\partial f_k}{\partial x}(x, y_k) = c_k \frac{\partial g_k^\infty}{\partial x}(x, y_k) + \varepsilon_k = 0.$$

Temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_k^\infty}{\partial x}(x, y_k) &= \frac{18}{(g_k^0(x, y_k))^3} \frac{\partial g_k^0}{\partial x}(x, y_k) \theta\left(\frac{1}{3}g_k^0(x, y_k)\right) \\ &= \begin{cases} \frac{18}{(x+1)^3} \theta(|x+1|/3) & \text{se } x < -1 \\ \frac{18}{(x-1)^3} \theta(|x-1|/3) & \text{se } x > +1. \end{cases} \end{aligned}$$

Então um cálculo simples mostra que, se $\varepsilon_k > 0$ é suficientemente pequeno, o minimizador $x \in [-1.5, -1)$; e se $-\varepsilon_k > 0$ é suficientemente pequeno, o minimizador $x \in (1, 1.5]$. Por outro lado, devido à convexidade de g_k e Lemas 2.14 e 2.8, a trajetória central está inteiramente em Ω e, pelo Lema 2.10, ela é uma função C^∞ de $y > 0$.

Notas complementares

Nos últimos exemplos provamos resultados de suavidade para F em $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. É fácil modificar estes exemplos de forma que a trajetória central não mude muito e F torne-se suave ou C^∞ no espaço todo. Defina a seguinte função convexa suave:

$$z = (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mapsto q(z) = \alpha (x^2 - (1.4)^2) + \psi(y),$$

onde $\alpha > 0$ é grande e ψ é a função suporte usada para construir F , e considere $\bar{F}(\cdot) = \max\{F(\cdot), q(\cdot)\}$. Esta função coincide com F na região de interesse (para $|x| \leq 1.4$ e $y \in [-0.5, 1]$). Suavizando \bar{F} pelo método da Seção 2.4 tornamo-la tão suave como F , e a trajetória central permanece praticamente a mesma.

Como vimos no final da Seção 2.3, a complementaridade estrita será satisfeita em todos nossos exemplos se adicionarmos um termo linear ay a F .

Não é possível construir trajetórias centrais com padrões como da antena ou do ziguezague com uma função objetivo analítica. Monteiro e Zhou [60] garantem, na verdade, que se as funções envolvidas na definição do problema são analíticas, juntamente com outras hipóteses razoáveis, então a trajetória central primal é uma curva que converge para um único ponto no conjunto ótimo (resultados correlatos são dados por Cominetti [19] e Champion [14]). É portanto notável que suavidade C^∞ ainda nos permita construir trajetórias centrais com comportamento indesejável.

2.7 Consequências algorítmicas

Agora discutiremos as consequências destes exemplos na complexidade dos algoritmos que seguem uma trajetória central. Esta discussão foi levantada por um dos revisores do nosso trabalho [40] quando da sua submissão à Revista “Mathematical Programming”.

Aqui a dimensão do problema é fixada e visamos resultados de complexidade em termos da precisão de uma solução. Iremos estabelecer polinomialidade para algum algoritmo no sentido que para qualquer $\epsilon > 0$ dado, o algoritmo alcança pontos (x^j, y^j) tais que $y^j \leq y^* + \epsilon$ em $h = O(|\ln \epsilon|)$ iterações, quando y^* é o valor ótimo de y .

Estabeleceremos os seguintes fatos:

- (i) No formato usado aqui, nenhuma função penalizada pode ser auto-concordante e, então, não pode-se provar polinomialidade dos algoritmos que seguem a trajetória.
- (ii) Se considerarmos que um esquema preditor-corretor necessita somente um número fixo de passos para cobrir cada volta do ziguezague, então o algoritmo será polinomial.
- (iii) Uma ligeira mudança na definição do problema destrói a propriedade acima e, pior, faz o método preditor-corretor convergir para um conjunto não ótimo em tempo infinito.
- (iv) Usando a formulação Nesterov-Nemirovskii do problema com uma barreira auto-concordante, a trajetória será uma linha reta para $\epsilon_k = 0$ e um ziguezague para o caso $|\epsilon_k| > 0$. Este ziguezague será amortecido com as mudanças intro-

duzidas em (iii), e explicamos por que acreditamos que ele pode ter variação ilimitada.

Considere qualquer função F de classe C^3 , construída como na Seção 2.5 ou 2.6, e qualquer função penalidade $(x, y) \mapsto p(y)$.

Resultado (i): falta de auto-concordância das funções penalizadas.

Para provar (i), usamos os seguintes resultados extraídos de Nesterov e Nemirovskii [64, Corolário 2.1.1].

Lema 2.18 *Considere Φ auto-concordante em $Q \subseteq \mathbb{R}^n$. Então o subespaço*

$$\{h \in \mathbb{R}^n \mid h^T \nabla^2 \Phi(x) h = 0\}$$

é independente em $x \in Q$.

O item (i) acima segue do seguinte lema.

Lema 2.19 *A função $z = (x, y) \in \Omega \mapsto \Phi(z) = F(z) + p(y)$ não é auto-concordante.*

Prova. Considere $z = (0, 2^{-k})$, para algum $k \in \mathbb{N}$. Então, por construção, F é afim ao longo de $z + \lambda h$, para $h = (1, 0)$, $\lambda \in [-1, 1]$. Então $h^T \nabla^2 F(z) h = 0$ e também $h^T \nabla^2 \Phi(z) h = 0$, porque p independe de x . Para qualquer $z = (x, y)$ tal que $y \neq 2^{-k}$, $k \in \mathbb{N}$, $h^T \nabla^2 \Phi(z) h \neq 0$. O resultado segue do Lema 2.18, completando a prova. \square

Resultado (ii): polinomialidade de um algoritmo preditor-corretor ideal.

Imagine que um método preditor-corretor (possivelmente usando um oráculo para executar passos corretores perfeitos) segue a trajetória central para algum de nossos exemplos em ziguezague de forma que cada volta do ziguezague é coberta em, no máximo, P passos, para algum $P \in \mathbb{N}$ fixado. Assim, começando a partir de $\bar{z} = (0, 1)$, um ponto $z = (x, y)$ com $y \leq 2^{-L}$, $L > 0$, será atingido em não mais que PL passos e, então, o algoritmo será polinomial.

Resultado (iii): exemplos sem convergência.

Os exemplos tornam-se mais interessantes com a definição abaixo. Sejam $a > 0$ e $0 < \delta \ll 1$ constantes dadas, F qualquer uma de nossas funções com uma trajetória central em ziguezague e considere o problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } F(z) + ay \\ &\text{sujeito a } y \geq -\delta. \end{aligned}$$

A função F é plana numa região grande $\Upsilon \subset \{z \in \Omega \mid y \in [-\delta, 0]\}$. Os pontos centrais para $y \geq 0$ estão nos mesmos ziguezagues como em nossos exemplos. Embora não estejamos interessados nos pontos centrais para $y \in [-\delta, 0]$, é fácil ver que todos os pontos em Υ são centrais.

Agora vamos examinar o comportamento de um algoritmo preditor-corretor. Ele será o mesmo que para o caso (ii), mas agora a sequência (x^i, y^i) gerada pelo método terá $y^i \rightarrow 0$ e, conseqüentemente, nenhum ponto de acumulação da sequência poderá ser ótimo: a sequência converge para o conjunto não ótimo $\{z \in \mathbb{R}^2 \mid y = 0\}$.

Resultado (iv): Barreira auto-concordante.

Agora discutiremos as trajetórias centrais para nossos problemas usando uma barreira auto-concordante. Esta discussão não será rigorosa e deve ficar como proposta para trabalhos futuros.

Vamos definir o problema de acordo com Nesterov e Nemirovskii:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } t \\ &\text{sujeito a } G(x, y) - t \leq 0 \\ &\quad y \geq -\delta, \end{aligned}$$

onde $G(x, y) = F(x, y) + ay$, $\delta \geq 0$, $a \geq 0$ e F é a função objetivo em qualquer um de nossos exemplos. Considere $z^* = (x^*, y^*)$ uma solução ótima e defina $G^* = G(x^*, y^*)$. Parametrizamos a trajetória central como um conjunto de centros: para cada $T \in (G^*, 1]$, considere os conjuntos

$$\begin{aligned} \Lambda_T &= \{(x, y, t) \in \mathbb{R}^3 \mid G(x, y) - t \leq 0, y \geq -\delta, t \leq T\}, \\ \overset{\circ}{\Lambda}_T &= \text{int } \Lambda_T. \end{aligned}$$

Para $T \in (G^*, 1]$, considere $p_T(x, y, t) : \overset{\circ}{\Lambda}_T \rightarrow \mathbb{R}$ uma família de barreiras auto-concordantes. Aqui supomos que p_T é a barreira universal definida por Nesterov e Nemirovskii [64, pág. 50] para o conjunto Λ_T . Então os pontos centrais são

$$w(T) = (x(T), y(T), t(T)) = \arg \min_{w \in \overset{\circ}{\Lambda}_T} p_T(w).$$

Agora comentaremos o comportamento da trajetória central em alguns casos. Note que $T \mapsto w(T)$ é uma curva contínua.

(a) $\varepsilon_k = 0$: neste caso, $p_T(x, y, t)$ é simétrica em relação a x para quaisquer y, t . Isto significa que $x(T) = 0$ para todo $T \in (G^*, 1]$, e a trajetória central para o problema original problema é a linha reta $\{(0, y) \mid y \in (-\delta, 1]\}$. Os ramos da antena desaparecem.

(b) $\varepsilon_k \neq 0, \delta \geq 0, a \geq 0$.

Dado T , considere $w(T)$ um ponto central e $y^+(T)$ tal que $G(0, y^+(T)) = T$, como na Figura 2.7. Pela definição de $w(T)$, obviamente temos: supondo que $x(T)$ é conhecido, $(y(T), t(T))$ é o minimizador da restrição de p_T no conjunto bidimensional definido por $x = x(T)$, representado na Figura 2.7 da esquerda. Similarmente, dado $y(T)$, $(x(T), t(T))$ é o minimizador de p_T na fatia y constante de Λ_T , representada na Figura 2.7 da direita.

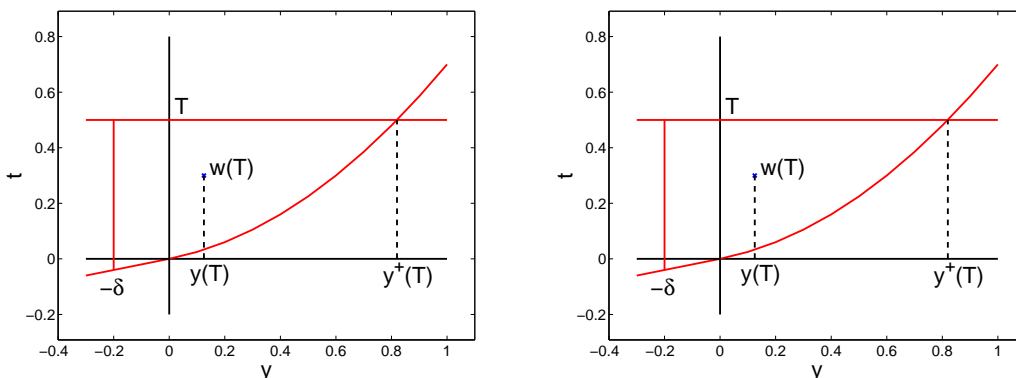


Figura 2.7: Dois cortes bidimensionais de Λ_T .

Para relacionar com centros analíticos, vamos usar as seguintes hipóteses intuitivas: os centros de ambos os conjuntos bidimensionais acima são bem aproximados pelos centros analíticos desses conjuntos considerados como bidimensionais, isto é, usando a barreira universal definida para esses conjuntos bidimensionais. Então podemos enunciar alguns palpites razoáveis relacionados aos centros.

Suponha que $y(T) = 2^{-k}$ para algum $k \in \mathbb{N}$.

Da Figura 2.7 da direita, vemos que se $\varepsilon_k < 0$, então $x(T) > 0$; e se $\varepsilon_k > 0$, então $x(T) < 0$ e a trajetória faz um ziguezague.

O valor $|x(T)|$ depende da relação entre $|\varepsilon_k|$ (a inclinação na base do conjunto) e a altura $T - G(0, 2^{-k})$.

Vamos supor que $\delta = 0$. O caso $\delta > 0$ é mais simples e o comentamos abaixo.

Como T se aproxima de zero (lembre-se que $T \in (0, 1]$), a relação $y(T)/y^+(T)$ deve tender a uma constante. Devido a forma simples do conjunto na Figura 2.7 da esquerda, esta constante deve ser positiva. Pelos mesmos argumentos, como $T \rightarrow 0$, a seguinte relação também convergirá para uma constante:

$$\frac{G(0, y(T))}{T - G(0, y(T))} \rightarrow c \in (0, 1).$$

Vamos examinar a sequência $T^k \rightarrow 0$ escolhida tal que $y(T^k) = 2^{-k}$ (as voltas do ziguezague). Defina $z_k = (0, y(T^k))$. Temos que $G(z_k) = \psi(2^{-k}) + 2^{-k}a$, onde ψ é a função suporte definida por (2.9). Então

$$\frac{\psi(2^{-k}) + 2^{-k}a}{T - G(z_k)} \rightarrow c. \quad (2.59)$$

Temos dois casos a considerar:

a > 0. Em todos nossos exemplos, $\lim_{y \rightarrow 0^+} \psi(y)/y = 0$. Então $\psi(2^{-k})/2^{-k} \rightarrow 0$ e concluímos, a partir de (2.59), que

$$\frac{\psi(2^{-k})}{T - G(z_k)} \rightarrow 0.$$

Como $\varepsilon_k < \psi(2^{-k})$ por construção,

$$\frac{\varepsilon_k}{T - G(z_k)} \rightarrow 0.$$

Isto significa que o ziguezague é amortecido.

Se $\delta > 0$ e $a > 0$, como $T \rightarrow -\delta$, o ziguezague também será amortecido por uma ligeira adaptação dos mesmos argumentos. A última parte da trajetória, para $T \leq 0$, será um segmento de reta.

Existe outra maneira de provar que a trajetória será um ziguezague amortecido. O algoritmo preditor-corretor desenvolvido em Nesterov e Nemirovskii [64, Seção 3.5] tem complexidade polinomial. Vimos que, se o ziguezague não é amortecido, então o algoritmo preditor-corretor convergirá para um ponto ruim em tempo infinito.

a = 0. Este é o caso mais interessante, para o qual só temos um palpite no presente estado de nossa pesquisa. Suponhamos que estejamos usando a função objetivo mais simples, como no Exemplo 3. Então ε_k é da ordem de $\psi(2^{-k})$ e concluímos, a partir de (2.59), que

$$\frac{\varepsilon_k}{T - G(z_k)} \rightarrow \bar{c} > 0,$$

onde \bar{c} é uma constante. Então, chegamos à surpreendente conclusão (se nossos palpites estão corretos): neste caso a trajetória será ainda um ziguezague com variação infinita. Mas o algoritmo preditor-corretor será polinomial, como vimos em (ii), e é provado por Nesterov e Nemirovskii.

Capítulo 3

Um algoritmo de filtros baseado em restauração

Este capítulo é praticamente a tradução do trabalho [40], intitulado “A globally convergent filter method for nonlinear programming”, escrito originalmente em inglês, em colaboração com Clóvis Gonzaga e Márcia Vanti. Neste trabalho, nós apresentamos um algoritmo de filtro para programação não linear e provamos sua convergência global para pontos estacionários. Cada iteração é composta de uma fase de viabilidade ou restauração, que reduz uma medida de inviabilidade, e uma fase de otimalidade, que reduz a função objetivo numa aproximação tangencial do conjunto viável. Essas duas fases são totalmente independentes: o único acoplamento entre elas é estabelecido pelo filtro. O método é independente dos algoritmos internos usados em cada iteração, desde que esses algoritmos satisfaçam hipóteses razoáveis sobre sua eficiência. O algoritmo principal não usa regiões de confiança e nenhuma propriedade dos modelos lineares. Sob hipóteses padrões, mostramos dois resultados: para o filtro com um tamanho mínimo, o algoritmo gera um ponto de acumulação estacionário; para um filtro levemente maior, todos os pontos de acumulação são estacionários.

3.1 Introdução

Estudaremos o problema de programação não linear

$$(P) \quad \begin{array}{ll} \text{minimizar} & f_0(x) \\ \text{sujeito a} & f_{\mathcal{E}}(x) = 0 \\ & f_{\mathcal{I}}(x) \leq 0, \end{array}$$

onde os conjuntos de índices \mathcal{E} e \mathcal{I} referem-se às restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente. Considere a cardinalidade de $\mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ sendo m , e suponha que as funções $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, para $i = 0, 1, \dots, m$, são continuamente diferenciáveis. As matrizes Jacobianas de $f_{\mathcal{E}}$ e $f_{\mathcal{I}}$ são denotadas, respectivamente, por $A_{\mathcal{E}}(\cdot)$ e $A_{\mathcal{I}}(\cdot)$.

Definimos a função $f^+ : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ por

$$f_i^+(x) = \begin{cases} f_i(x) & \text{se } i \in \mathcal{E} \\ \max\{0, f_i(x)\} & \text{se } i \in \mathcal{I}. \end{cases} \quad (3.1)$$

A i -ésima restrição, para $i = 1, \dots, m$, é satisfeita em $x \in \mathbb{R}^n$ se $f_i^+(x) = 0$. Consideramos uma medida de inviabilidade das restrições $x \in \mathbb{R}^n \mapsto h(x)$, que é uma penalidade exata aplicada às restrições. Usualmente esta medida é dada por

$$h(x) = \|f^+(x)\|, \quad (3.2)$$

onde $\|\cdot\|$ denota uma norma arbitrária.

Um algoritmo de programação não linear deve trabalhar com dois critérios conflitantes, f_0 e h , que devem ser simultaneamente minimizados, com preferência dada para a medida de inviabilidade h , que deve ir para zero.

Otimalidade e viabilidade podem ser combinadas usando funções penalidade ou Lagrangianos aumentados, ou podem ser tratadas mais ou menos independentes. Os métodos estudados neste trabalho pertencem à classe em que f_0 e h são tratadas como dois objetivos independentes. Cada iteração desses métodos é composta de duas fases: uma fase de viabilidade, que decresce h , seguida de uma fase de otimalidade, que decresce f_0 .

Tais métodos remontam ao método de gradiente projetado de Rosen [74] e GRG de Abadie e Carpentier [1]. Eles foram estudados, recentemente, por Martínez e Pilotta [53]. Combinando as idéias de programação quadrática sequencial e algoritmos de região de confiança para problemas com somente restrições de igualdade, Celis, Dennis e Tapia [13] começaram uma linha de pesquisa que levou ao método de Byrd e Omojokum [8, 66]: cada iteração deste método trabalha em uma região de confiança centrada na iterada corrente x^k , e é composta de um passo *normal* (passo de viabilidade) seguido de um passo *tangencial* (passo de otimalidade). O passo tangencial deve seguir uma direção no espaço nulo da Jacobiana das restrições em x^k .

As fases de viabilidade e otimalidade tornam-se mais independentes nos algoritmos de *restauração inexata* descritos por Martínez [51] e por Martínez e Pilotta [52, 53], que centram a região de confiança em cada iteração no ponto obtido *depois* da fase de viabilidade. Qualquer método para reduzir h pode ser usado na fase de viabilidade: eles descrevem um algoritmo para problemas com restrições de igualdade não lineares e restrições de desigualdade em caixa. O método para a fase de viabilidade pode usar também as idéias de Byrd, Gilbert e Nocedal [9] e de Byrd, Hribar e Nocedal [10], que reescrevem o problema usando restrições de igualdade e variáveis de folga não negativas. Tolerâncias relacionadas à viabilidade são discutidas por Mukai and Polak [63]. Rom and Avriel [72] usaram o esquema Mukai-Polak para provar teoremas de convergência para algoritmos clássicos de restauração usando redução progressiva da tolerância de viabilidade.

Nesses algoritmos, o progresso é usualmente medido por uma *função de mérito* $\psi = f_0 + \nu h$, onde ν é um peso positivo. Na iteração k , os pontos em $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \psi(x) \geq \psi(x^k)\}$ são *proibidos*, e o passo tenta diminuir o valor de ψ . A escolha de ν é delicada: pequenos valores de ν podem proibir soluções ótimas; valores grandes de ν podem tornar o algoritmo muito lento. Veja o exemplo mostrado na Seção 3.5, onde nós exibimos estes diferentes comportamentos.

Como regra geral, os algoritmos devem incluir algum procedimento para aumentar ν quando necessário, aumentando a importância de h em ψ . Esta escolha de ν depende, normalmente, de ambos os passos: viabilidade e otimalidade, reduzindo a independência entre eles.

Algoritmos de filtro. Algoritmos de filtro definem uma *região proibida* de uma maneira inteligente, memorizando os pares $(f_0(x^k), h(x^k))$ bem escolhidos nas iterações anteriores, e então evitando pontos dominados por eles pela regra usual de dominação de Pareto:

$$\text{“ } x \text{ domina } y \text{ se, e somente se, } f_0(y) \geq f_0(x) \text{ e } h(y) \geq h(x) \text{ ”.}$$

Não podemos construir o conjunto de pontos proibidos, mas é muito fácil verificar quando um ponto pertence a ele, fazendo um pequeno número de comparações em \mathbb{R}^2 .

Esses métodos foram introduzidos por Fletcher e Leyffer em seu importante artigo [29], e uma prova de convergência global foi obtida por Fletcher, Gould, Leyffer, Toint e Wächter [28]. Esta abordagem foi também aplicada a algoritmos de pontos interiores por Ulbrich, Ulbrich e Vicente [78]. Nesses artigos, cada fase de viabilidade deve reduzir h até que uma propriedade chamada *compatibilidade* seja verificada, a qual depende do raio da região de confiança e do modelo linear das restrições.

Nosso método é um algoritmo de restauração inexata no sentido de Martínez e Pilotta [52], que usa um filtro. O método tem as seguintes características:

- Cada iteração começa com um filtro e sua região proibida associada.
- As fases de viabilidade e otimalidade são totalmente independentes, e podem ser baseadas em qualquer algoritmo que satisfaça algumas hipóteses razoáveis. A única conexão entre ambas as fases é que elas não permitem gerar pontos proibidos.
- Diferentemente dos algoritmos de filtro citados acima, nenhuma compatibilidade é exigida depois do passo de viabilidade: a única exigência é que h decresça de pelo menos uma razão fixada.
- Em nosso primeiro algoritmo, o número de pares $(h(x^k), f_0(x^k))$ introduzidos no filtro talvez seja o mínimo possível para garantir a existência de um ponto de acumulação estacionário.

Convergência local. Neste trabalho nós nos detivemos na análise da convergência global dos algoritmos de filtro, sem discutir detalhes dos algoritmos internos. Fletcher e Leyffer [29] comentam que os algoritmos de filtro podem sofrer do efeito Maratos e propõem uma correção de segunda ordem para remediar essa deficiência. Wächter e Biegler, em seu recente trabalho [82], propõem um método de filtros usando buscas lineares e também discutem o uso de uma correção de segunda ordem. Em nossa abordagem geral, é fácil mostrar que o efeito Maratos pode ocorrer quando o método é aplicado ao exemplo de Powell [68]. Embora acreditemos que esquemas de correção de segunda ordem possam ser arquitetados para esta abordagem, não discutiremos isto neste trabalho.

Estrutura do capítulo. Nesta seção nós apresentamos algumas definições e hipóteses gerais. A Seção 3.2 descreve o principal algoritmo e prova que, sob hipóteses bastante gerais relacionadas ao comportamento de um passo completo do algoritmo, toda sequência gerada por ele tem um ponto de acumulação estacionário. Esta seção discute também como quebrar estas hipóteses gerais em hipóteses para as fases de viabilidade e otimalidade razoáveis e independentes. A Seção 3.3 descreve os algoritmos internos e mostra como satisfazer as hipóteses usadas na Seção 3.2. A Seção 3.4 aprofunda a análise de convergência mostrando que os valores da função objetivo sempre convergem sob as hipóteses da Seção 3.2, e apresenta dois melhoramentos nos algoritmos: primeiro, usando um filtro ligeiramente maior, provamos que todos os pontos de acumulação são estacionários; segundo, discutimos um passo de otimalidade simplificado, usando as matrizes Jacobianas já calculadas na fase de viabilidade. A Seção 3.5 exhibe um exemplo gráfico mostrando o mecanismo de funcionamento do algoritmo.

Hipóteses. Desenvolvemos algoritmos que geram sequências (x^k) e (z^k) em \mathbb{R}^n . Aqui estão as hipóteses gerais usadas neste capítulo.

- (H1) As iteradas (x^k) e (z^k) permanecem num domínio convexo e compacto $X \subset \mathbb{R}^n$.
- (H2) Todas as funções $f_i(\cdot)$, para $i = 0, 1, \dots, m$, são Lipschitz continuamente diferenciáveis num conjunto aberto contendo X .
- (H3) Todo ponto de acumulação viável $\bar{x} \in X$ de (x^k) satisfaz a condição de qualificação de Mangasarian-Fromovitz (M-F), ou seja, os gradientes $\nabla f_i(\bar{x})$ para

$i \in \mathcal{E}$ são linearmente independentes, e existe uma direção $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $A_{\mathcal{E}}(\bar{x})d = 0$ e $A_{\bar{\mathcal{I}}}(\bar{x})d < 0$, onde $\bar{\mathcal{I}} = \{i \in \mathcal{I} \mid f_i(\bar{x}) = 0\}$.

A primeira hipótese é razoavelmente usual. Ela pode ser cumprida adicionando-se uma restrição de caixa, suficientemente grande, ao problema. Se o conjunto $\{x \in \mathbb{R}^n \mid h(x) \leq \bar{H}\}$ é limitado para algum $\bar{H} \geq h(x^0)$, então o filtro pode começar com um par $(-\infty, \bar{H})$ (veja adiante a estrutura do filtro), proibindo para sempre pontos x com $h(x) \geq \bar{H}$. Analogamente, se $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f_0(x) \leq \bar{F}\}$ para algum limite superior \bar{F} para o valor de uma solução ótima, então o par $(\bar{F}, -\infty)$ no filtro garante (H1). De fato, ambas as entradas podem ser usadas se $\{x \in \mathbb{R}^n \mid h(x) \leq \bar{H}, f_0(x) \leq \bar{F}\}$ é limitado.

De (H2) concluímos que, para $x, y \in X$ e $i = 0, 1, \dots, m$,

$$f_i(y) = f_i(x) + \nabla f_i(x)^T(y - x) + o(x, y), \quad (3.3)$$

onde $|o(x, y)| \leq M\|x - y\|^2$ e $M > 0$ é uma constante de Lipschitz.

Os conjuntos linearizados. Associamos a cada $z \in \mathbb{R}^n$ uma linearização do conjunto $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f_{\mathcal{E}}(x) = f_{\mathcal{E}}(z), f_{\mathcal{I}}(x) \leq f_{\mathcal{I}}^+(z)\}$:

$$L(z) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid A_{\mathcal{E}}(z)(x - z) = 0, f_{\mathcal{I}}(z) + A_{\mathcal{I}}(z)(x - z) \leq f_{\mathcal{I}}^+(z)\}. \quad (3.4)$$

Num ponto viável z , $L(z)$ é uma linearização do conjunto viável. A Figura 3.1 mostra o conjunto viável definido por restrições de desigualdade e o correspondente conjunto linearizado associado ao ponto z , inviável para apenas uma das restrições. Observe que as restrições não são necessariamente convexas.

Os seguintes fatos são facilmente vistos:

- A condição de Mangasarian-Fromowitz em um ponto viável z é equivalente ao seguinte: $A_{\mathcal{E}}(z)$ tem linhas linearmente independentes e o conjunto $L(z)$ satisfaz uma condição de Slater, isto é, $L(z)$ tem um ponto interior, ou seja, um ponto $y \in L(z)$ tal que $f_{\mathcal{I}}(z) + A_{\mathcal{I}}(z)(y - z) < f_{\mathcal{I}}^+(z)$.
- As condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) para (P) em z coincidem com as condições KKT em z para o problema de minimizar $f_0(\cdot)$ em $L(z)$. Essas condições são também equivalentes à inexistência de uma direção de descida viável a partir de z em $L(z)$.

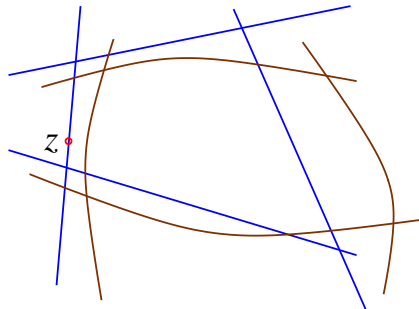


Figura 3.1: Exemplo de conjunto linearizado.

Condições de Otimalidade. Teceremos aqui alguns comentários sobre as condições de otimalidade e nosso uso da expressão *ponto estacionário*.

Vamos definir a *direção de Cauchy projetada* ou *direção do gradiente projetado* associada com cada $z \in \mathbb{R}^n$

$$d_c(z) = P_{L(z)}(z - \nabla f_0(z)) - z, \quad (3.5)$$

onde $P_\Gamma(w)$ denota a projeção ortogonal de $w \in \mathbb{R}^n$ sobre o conjunto fechado $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$.

A direção do gradiente projetado é bem conhecida (veja por exemplo Bertsekas [6]). Ela satisfaz $d_c(z) = 0$ se, e somente se, não existe direção de descida viável a partir de z em $L(z)$. Concluimos a partir dos fatos acima que, em um ponto viável z , as condições de KKT são equivalentes a $d_c(z) = 0$. Se $d_c(z) \neq 0$, então $\nabla f_0(z)^T d_c(z) < 0$.

De fato, esta direção é a principal construção usada por Martínez e Svaiter [55] para definir uma condição de otimalidade que está entre KKT e Fritz-John em generalidade: um ponto viável \bar{x} satisfaz a condição de otimalidade Martínez-Svaiter se, e somente se,

$$\liminf_{x \rightarrow \bar{x}} \|d_c(x)\| = 0. \quad (3.6)$$

Esta condição de otimalidade é na verdade razoavelmente construtiva. O que iremos provar neste trabalho é que nossos algoritmos produzem pontos viáveis satisfazendo (3.6). Esses pontos serão chamados de *estacionários*.

Aqui temos dois caminhos possíveis: ou levamos isto em consideração no nosso trabalho e não usamos a condição de Mangasarian-Fromowitz, ou a usamos e lembramos que, neste caso, KKT e Martínez-Svaiter são condições equivalentes. Nós escolhemos a segunda opção.

Para a completude, provamos agora esta equivalência, usando propriedades de continuidade da transformação ponto-conjunto $L(\cdot)$ que são mostradas no apêndice. Incluímos este tratamento no trabalho pois acreditamos que isto pode ter algum interesse em si próprio.

Lema 3.1 *Considere \bar{x} um ponto viável satisfazendo a condição de M-F. Então:*

(i) *A transformação (3.5) é contínua em \bar{x} .*

(ii) *\bar{x} satisfaz as condições de Karush-Kuhn-Tucker se e somente se ele satisfaz as condições de Martínez-Svaiter.*

Prova. (i) segue diretamente dos Lemas A.1 e A.2: sob a condição M-F, $z \mapsto L(z)$ é uma transformação contínua em \bar{x} pelo Lema A.1, e Lema A.2 garante que $z \mapsto P_{L(z)}(z - \nabla f_0(z))$ é contínua porque $\nabla f_0(\cdot)$ é contínuo.

Para provar (ii), note que para uma transformação contínua $d_c(\cdot)$, (3.6) é equivalente a $d_c(\bar{x}) = 0$, que como vimos acima é equivalente às condições de KKT, completando a prova. \square

3.2 O algoritmo

Nesta seção apresentaremos o método, sem qualquer especificação dos algoritmos internos usados nos passos de viabilidade e otimalidade. Mais adiante impomos algumas hipóteses na performance desses passos, e provamos que toda sequência gerada pelo algoritmo tem um ponto de acumulação estacionário. Na próxima seção mostraremos que métodos razoavelmente usuais para os passos internos satisfazem essas hipóteses.

Algoritmo 3.2 *Algoritmo de filtro.*

Dados: $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $F_0 = \emptyset$, $\mathcal{F}_0 = \emptyset$, $\alpha \in (0, 1)$.

$k = 0$

REPITA

$$(\tilde{f}_0, \tilde{h}) = (f_0(x^k) - \alpha h(x^k), (1 - \alpha)h(x^k)).$$

Construa o conjunto $\bar{F}_k = F_k \cup \{(\tilde{f}_0, \tilde{h})\}$.

Defina o conjunto $\bar{\mathcal{F}}_k = \mathcal{F}_k \cup \{x \in \mathbb{R}^n \mid f_0(x) \geq \tilde{f}_0, h(x) \geq \tilde{h}\}$.

Fase de viabilidade:

se $h(x^k) = 0$, então faça $z^k = x^k$

senão, calcule $z^k \notin \bar{\mathcal{F}}_k$ tal que $h(z^k) < (1 - \alpha) h(x^k)$.

se impossível, então pare com insucesso.

Fase de otimalidade:

se z^k e estacionário, então pare com sucesso

senão, calcule $x^{k+1} \notin \bar{\mathcal{F}}_k$ tal que $x^{k+1} \in L(z^k)$ e $f_0(x^{k+1}) \leq f_0(z^k)$.

Atualização do filtro:

se $f_0(x^{k+1}) < f_0(x^k)$, então

$$F_{k+1} = F_k, \quad \mathcal{F}_{k+1} = \mathcal{F}_k \quad (\text{iteração-}f_0)$$

senão,

$$F_{k+1} = \bar{F}_k, \quad \mathcal{F}_{k+1} = \bar{\mathcal{F}}_k \quad (\text{iteração-}h)$$

$k = k + 1$.

A Seção 3.5 mostra um exemplo gráfico, onde cada passo do algoritmo é representado. A principal característica do algoritmo é a construção do filtro: no início de cada iteração, o par $(f_0(x^k) - \delta, h(x^k) - \delta)$, com $\delta = \alpha h(x^k)$, $\alpha \in (0, 1)$, é *temporariamente* introduzido no filtro. Depois de completar a iteração, esta entrada torna-se permanente no filtro somente se a iteração *não* produz um decréscimo em f_0 .

O algoritmo trabalha com o filtro e com o conjunto proibido associado com ele. Devemos ter em mente que o conjunto proibido nunca é construído, mas nos ajuda a entender o processo.

Regras de parada. O algoritmo pode parar em duas situações:

- (i) Um ponto estacionário é obtido. Neste caso não há nada para provar.
- (ii) O algoritmo da fase de viabilidade falha. Isto pode bem acontecer, dependendo do método usado para a fase de viabilidade. Uma condição comum que pode causar a falha é a existência de um ponto estacionário \bar{x} para $h(\cdot)$, com $h(\bar{x}) \neq 0$.

Eliminação das entradas do filtro. Sempre que uma nova entrada (f_0^j, h^j) é introduzida no filtro, podemos eliminar todas as entradas dominadas por esta que acabou de entrar. Isto evita comparações desnecessárias na verificação de quando um ponto é proibido. Veja o exemplo na Seção 3.5.

A partir de agora, iremos supor que o algoritmo gera seqüências infinitas (x^k) e (z^k) . Supomos também que as Hipóteses (H1-H3) são satisfeitas, e fazemos agora a principal hipótese sobre a performance do algoritmo em cada iteração. Adiamos a discussão sobre esta hipótese para o final desta seção, onde ela será completamente analisada e substituída por outras mais simples. Na próxima seção estabeleceremos métodos que satisfazem essa hipótese.

A principal hipótese. Dada uma iterada x^k , começamos definindo a *folga do filtro* em x^k :

$$H_k = \min \{ 1, \min \{ h^j \mid (f_0^j, h^j) \in F_k, f_0^j \leq f_0(x^k) \} \}, \quad (3.7)$$

ilustrada na Figura 3.2.

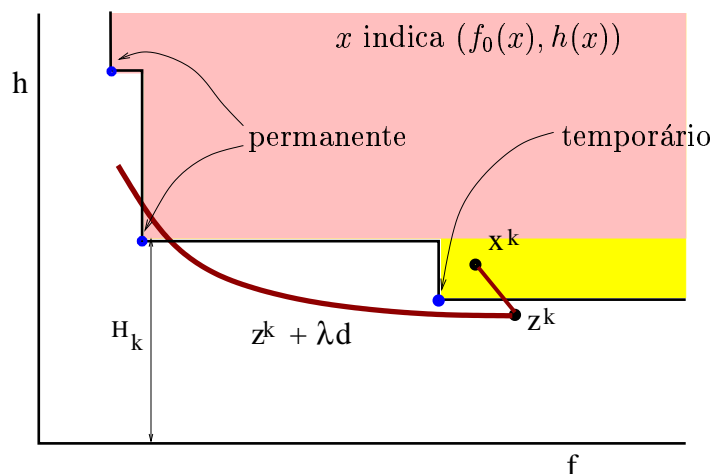


Figura 3.2: Exemplo do conjunto \bar{F}_k e da quantidade H_k .

Nossa principal hipótese é:

(H4) Dado um ponto viável não estacionário $\bar{x} \in X$, existe uma vizinhança V de \bar{x} tal que para toda iterada $x^k \in V$,

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\sqrt{H_k}). \quad (3.8)$$

Note que (H4) é uma condição local. A relação (3.8) significa que existe $M > 0$ dependente em \bar{x} tal que, sempre que x^k está perto de \bar{x} , $f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) \geq M\sqrt{H_k}$.

Alguns fatos. Os seguintes fatos seguem diretamente das hipóteses e da construção feita pelo algoritmo.

Fato 3.3 Dado $k \in \mathbb{N}$, $x^{k+p} \notin \mathcal{F}_{k+1}$, para todo $p \geq 1$.

Fato 3.4 Dado $k \in \mathbb{N}$, pelo menos uma das duas seguintes situações ocorrem.

- (i) $h(x^{k+1}) \leq (1 - \alpha) h(x^k)$.
- (ii) $f_0(x^{k+1}) \leq f_0(x^k) - \alpha h(x^k)$.

Fato 3.5 Dado $k \in \mathbb{N}$, $h^j > 0$ para todo $j \in \mathbb{N}$ tal que $(f_0^j, h^j) \in F_k$. Consequentemente, $H_k > 0$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

Pelo Algoritmo 3.2, o par (\tilde{f}_0, \tilde{h}) é incluído no filtro no final da iteração se, e somente se, ela é uma iteração- h . Se $\tilde{h} = h(x^k) = 0$, então $z^k = x^k$ e $f_0(x^{k+1}) < f_0(z^k)$, assim a iteração k é uma iteração- f_0 e seguem ambas proposições do fato acima.

Lema 3.6 Considere $\bar{x} \in X$ um ponto não estacionário. Então existe $\bar{k} \in \mathbb{N}$ e uma vizinhança V de \bar{x} tal que sempre que $k > \bar{k}$ e $x^k \in V$, a iteração k é uma iteração- f_0 .

Prova. Se $\bar{x} \in X$ é um ponto viável, então por (H4) e Fato 3.5, existe uma vizinhança V de \bar{x} tal que para todo $x^k \in V$,

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\sqrt{H_k}) > 0,$$

e k é uma iteração- f_0 .

Suponha que \bar{x} é inviável, isto é, $h(\bar{x}) > 0$. Suponha, por contradição, que existe um conjunto infinito $\mathcal{K} \subset \mathbb{N}$ tal que $x^k \xrightarrow{\mathcal{K}} \bar{x}$ e todas as iterações em \mathcal{K} são iterações- h . Como h e f_0 são funções contínuas, temos

$$h(x^k) \xrightarrow{\mathcal{K}} h(\bar{x}) \quad \text{e} \quad f_0(x^k) \xrightarrow{\mathcal{K}} f_0(\bar{x}).$$

Então deve existir $k_1 \in \mathcal{K}$ tal que para todo $k \in \mathcal{K}$, $k \geq k_1$

$$|h(x^k) - h(\bar{x})| < \frac{\alpha}{2} h(x^{k_1}) \quad \text{e} \quad |f_0(x^k) - f_0(\bar{x})| < \frac{\alpha}{2} h(x^{k_1}). \quad (3.9)$$

Para dado $k_2 \in \mathcal{K}$ tal que $k_2 > k_1$,

$$|h(x^{k_2}) - h(\bar{x})| < \frac{\alpha}{2} h(x^{k_1}) \quad \text{e} \quad |f_0(x^{k_2}) - f_0(\bar{x})| < \frac{\alpha}{2} h(x^{k_1}). \quad (3.10)$$

Usando a desigualdade triangular, (3.9) e (3.10), temos

$$|h(x^{k_2}) - h(x^{k_1})| < \alpha h(x^{k_1}) \quad \text{e} \quad |f_0(x^{k_2}) - f_0(x^{k_1})| < \alpha h(x^{k_1}).$$

Portanto, $x^{k_2} \in \mathcal{F}_{k_1+1}$, contradizendo o Fato 3.3 e completando a prova. \square

Lema 3.7 *Suponha que $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ não tem ponto de acumulação estacionário. Então, para k suficientemente grande, todas iterações são iterações- f_0 .*

Prova. Suponha, por contradição, que existe uma infinidade de iterações- h . Então existe um conjunto infinito $\mathcal{K}_1 \subset \mathbb{N}$ tal que para $k \in \mathcal{K}_1$, a iteração k é uma iteração- h . Pela Hipótese (H1), $(x^k)_{k \in \mathcal{K}_1}$ é limitado, e então existe $\mathcal{K}_2 \subset \mathcal{K}_1$ e $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que $x^k \xrightarrow{\mathcal{K}_2} \bar{x}$. Do lema anterior, \bar{x} deve ser um ponto de acumulação estacionário, contradizendo a hipótese e completando a prova. \square

Teorema 3.8 *A sequência (x^k) tem um ponto de acumulação estacionário.*

Prova. Suponha, por contradição, que $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ não tem ponto de acumulação estacionário. Então, do Lema 3.7 para k grande (digamos, $k > k_1$), todas iterações são iterações- f_0 , $f_0(x^k)$ decresce e então

$$f_0(x^{k+1}) - f_0(x^k) \rightarrow 0. \quad (3.11)$$

Para todo $k \geq k_1$, $F_k = F_{k_1}$ por construção, e usando o Fato 3.5, $H_k = H_{k_1} > 0$.

A sequência (x^k) não pode ter um ponto de acumulação viável, pois, por (H4), se existe $\mathcal{K}_1 \in \mathbb{N}$ e um $\bar{x} \in X$ viável, tal que $x^k \xrightarrow{\mathcal{K}_1} \bar{x}$, então para $k \in \mathcal{K}_1$ grande (digamos $k > k_2 > k_1$),

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\sqrt{H_{k_1}}) > 0,$$

contradizendo (3.11).

Agora provamos a seguinte afirmação: para $k \in \mathbb{N}$ grande,

$$h(x^{k+1}) \leq (1 - \alpha) h(x^k). \quad (3.12)$$

Suponha, por contradição, que em algum conjunto infinito $\mathcal{K}_2 \subset \mathbb{N}$,

$$h(x^{k+1}) > (1 - \alpha) h(x^k).$$

Usando o Fato 3.4, para $k \in \mathcal{K}_2$,

$$f_0(x^{k+1}) \leq f_0(x^k) - \alpha h(x^k).$$

Usando (3.11), concluímos que $h(x^k) \xrightarrow{\mathcal{K}_2} 0$, o que contradiz o fato de que (x^k) não tem ponto de acumulação viável.

Então (3.12) vale e $h(x^k)$ converge linearmente para zero. Isto novamente contradiz o fato de que (x^k) não tem ponto de acumulação viável, completando a prova. \square

A hipótese (H4). Esta hipótese refere-se a cada iteração completa. Embora possa ser difícil verificá-la para algoritmos específicos, sua interpretação é simples: perto de um ponto não estacionário, o passo de otimalidade domina, e a redução de f_0 é grande. A folga do filtro H_k indica o quanto é permitido a h aumentar no passo tangencial e, sendo tangencial, é esperado que h mude com o quadrado da variação de x . Em um passo tangencial eficiente, f_0 variará linearmente com a variação de x , e então (H4) será verdadeira.

Agora mostramos como (H4) pode ser substituída por hipóteses mais simples, feitas separadamente para os passos de viabilidade e otimalidade.

Condição do passo de viabilidade.

(H5) Em toda iteração $k \in \mathbb{N}$, o passo de viabilidade deve satisfazer

$$h(x^k) - h(z^k) = \Omega(\|z^k - x^k\|). \quad (3.13)$$

Isto pode também ser escrito como

$$\|z^k - x^k\| = O(h(x^k)), \quad (3.14)$$

pois $h(z^k) \geq 0$. Note que, como $\nabla f_0(\cdot)$ é limitado em X , pelo teorema do valor médio, para todo $k \in \mathbb{N}$,

$$|f_0(z^k) - f_0(x^k)| = O(\|z^k - x^k\|).$$

Usando isto e (3.14) temos

$$|f_0(z^k) - f_0(x^k)| = O(h(x^k)). \quad (3.15)$$

Condição do passo de otimalidade.

(H6) Dado um ponto viável não estacionário $\bar{x} \in X$, existe uma vizinhança V de \bar{x} tal que, para qualquer iterada $x^k \in V$,

$$f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\sqrt{H_k}). \quad (3.16)$$

A hipótese (H5) é usada por Martínez [51], e é uma condição global. Isto significa que o passo de viabilidade deve ser eficiente no sentido que a direção $z^k - x^k$ deve ser uma boa direção de descida para h . Martínez discute esta hipótese e mostra que ela é satisfeita sob condições razoáveis. A hipótese (H6) isola o passo tangencial, e é local (associada com cada ponto viável não estacionário). Sua interpretação é a mesma que aquela dada para (H4), mas sem a influência do passo de viabilidade.

Observação. Note entretanto que a condição (H5) não é completamente independente da fase de viabilidade porque ela usa H_k , que é uma quantidade associada a x^k . Além disso, a condição é expressa para $x^k \in V$, e não $z^k \in V$, mas isto não é importante pois $\|x^k - z^k\| = O(h(x^k))$: se x^k está perto de \bar{x} , então o mesmo é verdadeiro para z^k .

Antes de provar que (H5) e (H6) implicam (H4), vamos estabelecer mais uma hipótese, que não é necessária aqui mas é bastante razoável e será útil mais adiante. Ela é similar a (H5), mas aplicada à função objetivo.

(H7) Dado um ponto viável não estacionário $\bar{x} \in X$, existe uma vizinhança V de \bar{x} tal que para qualquer iterada $x^k \in V$,

$$f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\|x^{k+1} - z^k\|).$$

Com esta hipótese, a interpretação de (H6) torna-se razoavelmente simples: ela pode ser estabelecida como $\|z^k - x^{k+1}\| = \Omega(\sqrt{H_k})$, e será verdadeira quando a variação de h for da ordem de $\|z^k - x^{k+1}\|^2$, o que é bastante razoável num passo tangencial. A Figura 3.2 ilustra a trajetória do par $(f_0(z^k + \lambda d), h(z^k + \lambda d))$ quando λ cresce e $d = x^{k+1} - z^k$.

Finalmente, provamos dois lemas, estendendo para o passo completo as propriedades do passo tangencial perto de um ponto viável não estacionário.

Lema 3.9 *(H5) e (H6) implicam (H4).*

Prova. Seja \bar{x} um ponto viável não estacionário, e seja V_1 a vizinhança definida por (H6). Como $\|x^k - z^k\| = O(h(x^k))$, existe uma vizinhança $\tilde{V}_1 \subset V_1$ de \bar{x} tal que para $x^k \in \tilde{V}_1$, $z^k \in V_1$. Considere uma iterada x^k em \tilde{V}_1 . Usando (H5) e (H6), existem constantes positivas M e N tais que

$$\begin{aligned} f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) &= f_0(x^k) - f_0(z^k) + f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}) \\ &\geq M\sqrt{H_k} - Nh(x^k) \\ &\geq \left(M - N\sqrt{h(x^k)}\right)\sqrt{H_k}, \end{aligned}$$

onde usamos o fato que $h(x^k) \leq H_k$. Por continuidade de h em \bar{x} , existe uma vizinhança $V \subset \tilde{V}_1$ tal que para qualquer $x \in V$, $\sqrt{h(x)} \leq 0.5M/N$. Para qualquer iterada x^k nesta vizinhança, $f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) \geq 0.5M\sqrt{H_k}$, completando a prova. \square

Lema 3.10 *Considere que (H5-H7) valem. Então dado um ponto viável não estacionário $\bar{x} \in X$, existe uma vizinhança V de \bar{x} tal que para qualquer $x^k \in V$,*

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\|x^{k+1} - x^k\|).$$

Prova. Sejam V_1 e V_2 vizinhanças de um ponto viável não estacionário \bar{x} provenientes respectivamente de (H6) e (H7). Como na prova do Lema 3.9, em alguma vizinhança $\tilde{V}_1 \subset V_1$ de \bar{x} , temos que

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) = f_0(x^k) - f_0(z^k) + f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}),$$

com $|f_0(x^k) - f_0(z^k)| = O(h(x^k))$ por (3.15) e $f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\sqrt{H^k})$. Deduzimos facilmente desses dois fatos que para x^k suficientemente perto de \bar{x} , digamos $x^k \in V_3 \subset \tilde{V}_1$, $|f_0(x^k) - f_0(z^k)| \leq 0.5(f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}))$. Segue que

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) \geq 0.5(f_0(z^k) - f_0(x^{k+1})). \quad (3.17)$$

Podemos também escrever

$$\|x^k - x^{k+1}\| \leq \|x^k - z^k\| + \|z^k - x^{k+1}\|,$$

com $\|x^k - z^k\| = O(h(x^k))$ por (H5) e $\|z^k - x^{k+1}\| = \Omega(f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}))$, pela continuidade Lipschitz de f_0 . Novamente pelo mesmo raciocínio usado na prova do último lema, para $x^k \in \tilde{V}_2 \subset V_2$, $z^k \in V_2$, e temos por (H6) que $\|z^k - x^{k+1}\| = \Omega(\sqrt{H^k})$. Como acima, deduzimos que para x^k suficientemente perto de \bar{x} , digamos $x^k \in V_4 \subset \tilde{V}_2$, $\|x^k - z^k\| \leq \|z^k - x^{k+1}\|$, e então

$$\|x^k - x^{k+1}\| \leq 2 \|z^k - x^{k+1}\|.$$

Usando na sequência (3.17), a Hipótese (H7) e esta expressão na vizinhança $V = V_3 \cap V_4$, obtemos

$$\begin{aligned} f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) &\geq 0.5(f_0(z^k) - f_0(x^{k+1})) \\ &= \Omega(\|z^k - x^{k+1}\|) \\ &= \Omega(\|x^k - x^{k+1}\|), \end{aligned}$$

completando a prova. □

3.3 Algoritmos internos

Nesta seção discutiremos os passos internos usados em cada iteração do algoritmo principal. Supomos que o Algoritmo 3.2 gerou sequências infinitas (x^k) e (z^k) , e que as Hipóteses (H1-H3) são satisfeitas.

Algoritmo do passo de viabilidade. O objetivo da fase de viabilidade é encontrar um ponto z^k tal que $h(z^k) < (1 - \alpha)h(x^k)$ e $z^k \notin \bar{\mathcal{F}}_k$.

O procedimento para esta restauração da viabilidade pode ser, em princípio, qualquer algoritmo iterativo que diminua h , e que atinja uma terminação finita, pois, como vimos acima, todas as entradas do filtro $(f_0^j, h^j) \in F_k$ têm $h^j > 0$.

O passo de viabilidade estudado por Martínez [51] satisfaz a hipótese (H5) e aplica-se diretamente ao nosso caso. Assim nós não iremos descrever, neste trabalho, o procedimento da fase de viabilidade em detalhes.

Note que o algoritmo da fase de viabilidade pode falhar, se $h(\cdot)$ tem um ponto estacionário inviável. Neste caso, o método pára com insucesso.

3.3.1 Algoritmo do passo de otimalidade

O passo de otimalidade deve encontrar x^{k+1} no conjunto linearizado $L(z^k)$ tal que $f_0(x^{k+1}) \leq f_0(z^k)$, e de modo que $x^{k+1} \notin \bar{\mathcal{F}}_k$. Iremos descrever, para isto, um método de região de confiança bastante geral, e então mostraremos que o passo resultante satisfaz as hipóteses (H6) e (H7).

A ferramenta principal para a análise (não necessariamente para a construção) de tais algoritmos é a direção de Cauchy projetada descrita na introdução, no início do capítulo.

O método do gradiente projetado. Um método bastante simples (mas impraticável) para o passo tangencial é o seguinte: a partir de z^k , calcule a direção de Cauchy projetada $d_c(z^k) = P_{L(z^k)}(z^k - \nabla f_0(z^k)) - z^k$ e faça uma busca de Armijo ao longo de $z^k + \lambda d_c(z^k)$, $\lambda \in [0, 1]$. A busca deve evitar pontos proibidos, o que pode ser conseguido usando na busca de Armijo a função objetivo

$$\theta(\lambda) = \begin{cases} f_0(z^k + \lambda d_c(z^k)) & \text{se } z^k + \lambda d_c(z^k) \notin \bar{\mathcal{F}}_k, \\ +\infty & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Não provaremos a eficiência deste passo tangencial, pois ele é um caso par-

particular da iteração de região de confiança que descreveremos a partir de agora. A principal exigência do passo de região de confiança será que ele produza um ponto pelo menos tão bom quanto o chamado “ponto de Cauchy”, que está na direção do gradiente projetado.

A Figura 3.3 mostra a direção de Cauchy projetada $d_c(z^k)$ a partir de um ponto z^k . As curvas elípticas representam as curvas de nível da função objetivo. A área delimitada por uma poligonal é o conjunto linearizado $L(z^k)$.

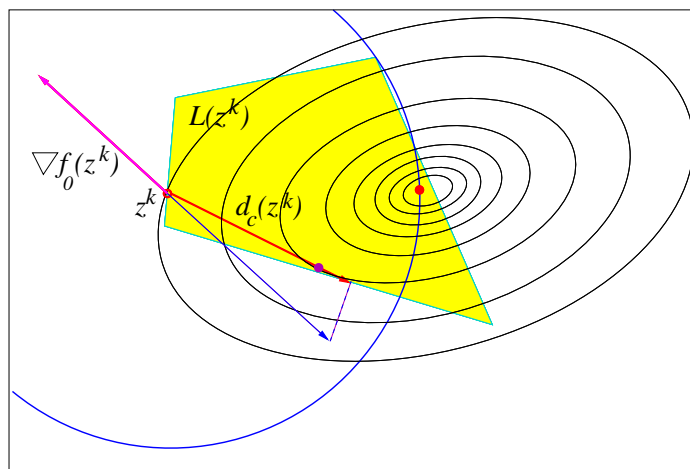


Figura 3.3: Direção de Cauchy projetada.

O modelo quadrático. Dado $z^k \in X$ gerado pelo Algoritmo 3.2 na fase de viabilidade, o algoritmo de região de confiança associa a z^k um modelo quadrático de f_0 ,

$$x \in \mathbb{R}^n \mapsto m_k(x) = f_0(z^k) + \nabla f_0(z^k)^T(x - z^k) + \frac{1}{2}(x - z^k)^T B_k(x - z^k), \quad (3.18)$$

onde B_k é uma matriz $n \times n$ simétrica. Esta matriz pode ser uma aproximação de $\nabla^2 f_0(z^k)$, ou qualquer outra matriz, desde que a hipótese (H8) abaixo seja verificada. Usualmente, B_k será uma aproximação da Hessiana de alguma função Lagrangiana, e então m_k deixa de ser um modelo de f_0 para incorporar a curvatura das restrições. Embora isto possa ser essencial num algoritmo eficiente, esta discussão foge do escopo deste trabalho.

(H8) Existe $\beta > 0$ tal que o modelo quadrático (3.18) satisfaz $\|B_k\| \leq \beta$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

O passo de região de confiança usa um raio $\Delta > 0$ e calcula um passo $d(z^k, \Delta) \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|d(z^k, \Delta)\| \leq \Delta$. Definimos a *redução predita* produzida pelo passo $d(z^k, \Delta)$ como

$$pred(z^k, \Delta) = m_k(z^k) - m_k(z^k + d(z^k, \Delta)), \quad (3.19)$$

e a *redução verdadeira* como

$$ared(z^k, \Delta) = f_0(z^k) - f_0(z^k + d(z^k, \Delta)). \quad (3.20)$$

Lembramos que o Lema 1.2 garante que

$$ared(z^k, \Delta) = pred(z^k, \Delta) + o(z^k, \Delta), \quad (3.21)$$

onde

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0^+} \frac{o(z^k, \Delta)}{\Delta} = 0$$

uniformemente em $z^k \in X$.

No algoritmo do passo de otimalidade que será discutido abaixo, fazemos as seguintes escolhas que simplificam o tratamento:

- (1) Cada cálculo de região de confiança começa com um raio $\Delta \geq \Delta_{min}$, onde $\Delta_{min} > 0$ é fixado. A escolha de Δ é irrelevante para a teoria, e ele normalmente vem da iteração precedente.
- (2) Um passo $d(z^k, \Delta)$ somente é aceito se a seguinte condição de decréscimo suficiente é satisfeita:

$$ared(z^k, \Delta) > \eta pred(z^k, \Delta), \quad (3.22)$$

para um dado $\eta \in (0, 1)$.

- (3) O cálculo de região de confiança resolve aproximadamente o problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && m_k(x) \\ &\text{sujeito a} && x \in L(z^k) \\ &&& \|x - z^k\| \leq \Delta, \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde $\|\cdot\|$ é qualquer norma em \mathbb{R}^n .

Agora explicaremos o que significa “resolver aproximadamente”. Dado $z \in X$ e o conjunto $L(z)$, a direção do gradiente projetado é definida por

$$d_c(z) = P_{L(z)}(z - \nabla f_0(z)) - z. \quad (3.24)$$

Defina

$$\varphi(z) = -\nabla f_0(z)^T \frac{d_c(z)}{\|d_c(z)\|}.$$

Então φ é a taxa de decréscimo de f_0 ao longo de d_c . Como usual, denotamos $d_c^k = d_c(z^k)$, $\varphi^k = \varphi(z^k)$. Como dissemos na introdução, no início do capítulo, $\varphi(z) > 0$ sempre que z é um ponto viável não estacionário.

Agora usamos os resultados conhecidos sobre minimização de $m_k(\cdot)$ ao longo de uma direção (veja a discussão do ponto de Cauchy na Seção 1.1.2). Definimos o ponto de Cauchy generalizado como o minimizador de $m_k(\cdot)$ ao longo de d_c , na região de confiança $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - z^k\| \leq \Delta\}$,

$$x_c = \operatorname{argmin} \{m_k(x) \mid \|x - z^k\| \leq \Delta, x = z^k + \lambda d_c^k, \lambda \in [0, 1]\}.$$

Sabemos que

$$m_k(z^k) - m_k(x_c) \geq \frac{\xi \varphi^k}{2} \min \left\{ \frac{\varphi^k}{\|B_k\|}, \|d_c^k\|, \Delta \right\}$$

onde ξ depende da norma usada. Usando a Hipótese (H8), isto pode ser reescrito como

$$m_k(z^k) - m_k(x_c) \geq \frac{\xi \varphi^k}{2} \min \left\{ \frac{\varphi^k}{\beta}, \|d_c^k\|, \Delta \right\}. \quad (3.25)$$

Aceitamos como uma solução aproximada de (3.23) qualquer solução viável para este problema satisfazendo a desigualdade de (3.25).

Na Figura 3.4, as curvas elípticas representam as curvas de nível da função objetivo. A área delimitada por uma poligonal é o conjunto linearizado $L(z^k)$. A área hachurada contida no conjunto linearizado é o conjunto dos pontos melhores que o ponto de Cauchy, ou seja, o conjunto dos pontos que consideramos como solução aproximada de (3.23).

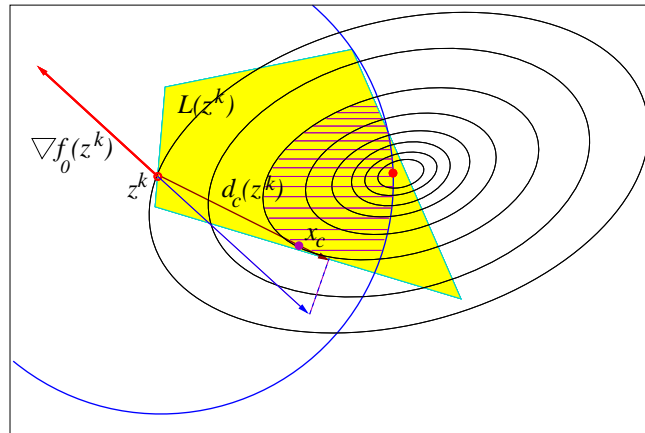


Figura 3.4: Ponto de Cauchy e melhores que ele.

Depois de estabelecer o passo de região de confiança, estudaremos suas propriedades.

Algoritmo 3.11 *Passo de otimalidade.*

Dados: $\eta \in (0, 1)$, $\Delta_{min} > 0$, $z^k \notin \bar{\mathcal{F}}_k$, $\Delta = \Delta^0 \geq \Delta_{min}$.

REPITA

Calcule $d = d(z^k, \Delta)$ tal que $\|d\| \leq \Delta$, $z^k + d \in L(z^k)$ e

$$pred(z^k, \Delta) \geq \frac{\xi \varphi^k}{2} \min \left\{ \frac{\varphi^k}{\|B_k\|}, \|d_c^k\|, \Delta \right\}.$$

Calcule $ared(z^k, \Delta) = f_0(z^k) - f_0(z^k + d)$.

se $z^k + d \notin \bar{\mathcal{F}}_k$ e $ared(z^k, \Delta) > \eta pred(z^k, \Delta)$, então

faça $x^{k+1} = z^k + d$, $\Delta_k = \Delta$ e pare com sucesso

senão, $\Delta = \Delta/2$.

Nossa tarefa agora é provar que este algoritmo satisfaz as hipóteses (H6,H7) feitas para o passo de otimalidade.

Lema 3.12 *Para todo $z \in X$, $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $(z + d) \in L(z)$,*

$$|h(z + d) - h(z)| = O(\|d\|^2).$$

Prova. De (3.3), para todo $z \in X$, $d \in \mathbb{R}^n$, $i = 0, 1, \dots, m$

$$f_i(z + d) - f_i(z) \leq \nabla f_i(z)^T d + O(\|d\|^2).$$

Como $(z + d) \in L(z)$, por definição de $L(z)$ dada em (3.4), temos para $i = 1, \dots, m$

$$f_i(z) + \nabla f_i(z)^T d \leq f_i^+(z),$$

e então

$$f_i(z + d) \leq f_i^+(z) + O(\|d^2\|).$$

Devemos provar que

$$f_i^+(z + d) \leq f_i^+(z) + O(\|d^2\|). \quad (3.26)$$

Se $f_i(z + d) < 0$, isto é verdadeiro, pois o lado direito é positivo. Se não, $f_i^+(z + d) = f_i(z + d)$. Usando (3.26) na definição de norma, temos

$$\|f^+(z + d)\| = \|f^+(z)\| + O(\|d^2\|),$$

completando a prova. □

Agora estudaremos o passo de otimalidade perto de um ponto viável não estacionário $\bar{x} \in X$. O primeiro lema diz que se ignorarmos o filtro, então o passo de região de confiança será grande perto de \bar{x} .

Lema 3.13 *Considere $\bar{x} \in X$ um ponto viável não estacionário satisfazendo uma condição M-F. Então existem uma vizinhança \tilde{V} de \bar{x} , $\tilde{\Delta} \in (0, \Delta_{min})$ e uma constante $\tilde{c} > 0$ tal que para todo $z^k \in \tilde{V}$,*

- (i) *para todo $\Delta > 0$, $pred(z^k, \Delta) \geq \tilde{c} \min\{\Delta, \tilde{\Delta}\}$,*
- (ii) *para todo $\Delta \in (0, \tilde{\Delta})$, $ared(z^k, \Delta) > \eta pred(z^k, \Delta) \geq \eta \tilde{c} \Delta$.*

Prova. Da condição de decréscimo de Cauchy generalizado (3.25), que é satisfeita por construção em cada iteração,

$$pred(z^k, \Delta) \geq \frac{\xi \varphi(z^k)}{2} \min \left\{ \frac{\varphi(z^k)}{\beta}, \|d_c^k\|, \Delta \right\}.$$

Do Lema 3.1, deduzimos que $z \mapsto \|d_c(z)\|$ e $z \mapsto \varphi(z) = -\nabla f_0(z)^T \frac{d_c(z)}{\|d_c(z)\|}$ são contínuas em \bar{x} . Então, existe uma vizinhança \tilde{V} de \bar{x} tal que para $z^k \in \tilde{V}$, $\varphi(z^k) \geq \varphi(\bar{x})/2$ e $\|d_c(z^k)\| \geq \|d_c(\bar{x})\|/2$. Assim, para $z^k \in \tilde{V}$,

$$pred(z^k, \Delta) \geq \frac{\xi \varphi(\bar{x})}{4} \min \left\{ \frac{\varphi(\bar{x})}{2\beta}, \frac{\|d_c(\bar{x})\|}{2}, \Delta \right\}.$$

Isto pode ser escrito como $\text{pred}(z^k, \Delta) \geq \tilde{c} \min\{\Delta_1, \Delta\}$, provando (i).

De (3.21), para quaisquer $k \in \mathbb{N}$ e $\Delta > 0$,

$$\begin{aligned} \text{ared}(z^k, \Delta) &= \text{pred}(z^k, \Delta) + o(z^k, \Delta) \\ &= \eta \text{pred}(z^k, \Delta) + (1 - \eta) \text{pred}(z^k, \Delta) + o(z^k, \Delta), \end{aligned}$$

onde $\lim_{\Delta \rightarrow 0^+} \frac{o(z^k, \Delta)}{\Delta} = 0$ uniformemente em z^k . Para $\Delta \leq \Delta_1$, $\text{pred}(z^k, \Delta) \geq \tilde{c} \Delta$ e então

$$\text{ared}(z^k, \Delta) \geq \eta \text{pred}(z^k, \Delta) + (1 - \eta)\tilde{c} \Delta + o(z^k, \Delta).$$

Para Δ suficientemente pequeno, digamos, $\Delta \leq \tilde{\Delta} \leq \Delta_1$,

$$(1 - \eta)\tilde{c} \Delta + o(z^k, \Delta) \geq 0,$$

completando a prova. □

O Algoritmo 3.11, na iteração k , começa com $\Delta^0 \geq \Delta_{\min}$ e itera fazendo $\Delta^j = 2^{-j} \Delta^0$, $j = 0, 1, \dots$, e calculando para cada Δ^j o passo $d(z^k, \Delta^j)$. Sempre que $\Delta^j < \tilde{\Delta}$, a condição $\text{ared}(z^k, \Delta^j) > \eta \text{pred}(z^k, \Delta^j)$ é satisfeita: o raio Δ^j pode somente ser rejeitado se $z^k + d(z^k, \Delta^j) \in \bar{\mathcal{F}}_k$.

Por construção, $z^k \notin \bar{\mathcal{F}}_k$, pois $h(z^k) < (1 - \alpha)h(x^k)$. Como $\bar{\mathcal{F}}_k$ é um conjunto fechado, para Δ^j suficientemente pequeno, $z^k + d(z^k, \Delta^j) \notin \bar{\mathcal{F}}_k$. Isto mostra que o algoritmo sempre termina.

Mostramos abaixo que o Algoritmo 3.11 proposto para o passo de otimalidade satisfaz as Hipóteses (H6) e (H7).

Lema 3.14 *Considere $\bar{x} \in X$ um ponto viável não estacionário satisfazendo uma condição M-F, e suponha que (3.13) vale. Então existe uma vizinhança V de \bar{x} tal que para $x^k \in V$,*

$$f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\sqrt{H_k}), \quad (3.27)$$

$$f_0(z^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\|x^{k+1} - z^k\|), \quad (3.28)$$

onde $x^{k+1} = z^k + d(z^k, \Delta)$ é calculado pelo Algoritmo 3.11.

Prova. Por um argumento usual, é suficiente mostrar que, para qualquer subsequência $(x^k)_{k \in \mathcal{K}}$ convergindo para \bar{x} , (3.27) e (3.28) são verdadeiras para $k \in \mathcal{K}$ grande.

Suponha que $x^k \xrightarrow{\mathcal{K}} \bar{x}$, onde $\mathcal{K} \subset \mathbb{N}$. Segue que $z^k \xrightarrow{\mathcal{K}} \bar{x}$, pois, por (3.14), $\|x^k - z^k\| = O(h(x^k)) \xrightarrow{\mathcal{K}} 0$.

Considere $\tilde{V} \subset X$ e $\tilde{\Delta} > 0$, respectivamente, a vizinhança de \bar{x} e raio dados pelo Lema 3.13. Para $k \in \mathcal{K}$ grande, digamos $k \in \mathcal{K}_1 \subset \mathcal{K}$, $z^k \in \tilde{V}$. Vamos considerar uma iteração $k \in \mathcal{K}_1$, e denotar $(\tilde{f}_0, \tilde{h}) = (f_0(x^k) - \alpha h(x^k), (1 - \alpha)h(x^k))$ a entrada temporária no filtro.

O Algoritmo 3.11 começa com um raio $\Delta^0 \geq \Delta_{\min}$ e calcula $d(z^k, \Delta^j)$, $\Delta^j = 2^{-j}\Delta^0$, $j = 0, 1, \dots$, até que $z^k + d(z^k, \Delta^j) \notin \bar{\mathcal{F}}_k$ e $\text{ared}(z^k, \Delta^j) > \eta \text{pred}(z^k, \Delta^j)$. Então $\Delta_k = \Delta^j$. Vamos definir $\hat{\Delta}$ como o primeiro Δ^j tal que

$$\text{ared}(z^k, \Delta^j) > \eta \text{pred}(z^k, \Delta^j) \quad \text{e} \quad (3.29)$$

$$z^k + d(z^k, \Delta^j) \notin \bar{\mathcal{F}}_k \quad \text{ou} \quad f_0(z^k + d(z^k, \Delta^j)) \geq \tilde{f}_0. \quad (3.30)$$

Para simplificar a notação, denotemos $\hat{d} = d(z^k, \hat{\Delta})$ e $\hat{x} = z^k + \hat{d}$. Note que $\hat{\Delta} \geq \Delta_k$, e $\hat{\Delta} > \Delta_k$ acontece somente quando $f_0(\hat{x}) \geq \tilde{f}_0$. Iremos deduzir as propriedades deste passo \hat{d} , e então provar que esta situação não pode ocorrer quando x^k está suficientemente perto de \bar{x} .

Primeiro, provaremos que \hat{x} satisfaz os limites no lema.

Escolha $\bar{\Delta} \leq \tilde{\Delta}/2$.

(i) Primeiro, o caso fácil: suponha que $\hat{\Delta} \geq \bar{\Delta}$. Então, pelo Lema 3.13,

$$\text{pred}(z^k, \hat{\Delta}) \geq \tilde{c} \min\{\hat{\Delta}, \tilde{\Delta}\} \geq \tilde{c}\bar{\Delta}.$$

Pela definição de $\hat{\Delta}$, (3.29) vale, e então

$$f_0(z^k) - f_0(\hat{x}) \geq \eta \tilde{c} \bar{\Delta} = \Omega(1).$$

Segue trivialmente que $f_0(z^k) - f_0(\hat{x}) = \Omega(\sqrt{H_k})$ e $f_0(z^k) - f_0(\hat{x}) = \Omega(\|x^k - \hat{x}\|)$, porque, em ambos os casos, o lado direito é limitado em X .

(ii) Agora suponha que $\hat{\Delta} < \bar{\Delta}$. Então o raio $2\hat{\Delta} < 2\bar{\Delta} \leq \tilde{\Delta} < \Delta_{\min}$ não satisfaz (3.30) (e foi rejeitado pelo Algoritmo 3.11). Pelo Lema 3.13,

$$\text{ared}(z^k, d(z^k, 2\hat{\Delta})) > \eta \text{pred}(z^k, d(z^k, 2\hat{\Delta})),$$

e segue de (3.30) que $z^k + d(z^k, 2\hat{\Delta}) \in \bar{\mathcal{F}}_k$ e $f_0(z^k + d(z^k, 2\hat{\Delta})) < \tilde{f}_0$. Pela definição de H_k , devemos ter $h(z^k + d(z^k, 2\hat{\Delta})) \geq H_k$.

Por construção, $h(z^k) < (1 - \alpha)h(x^k) \leq (1 - \alpha)H_k$. Assim,

$$h(z^k + d(z^k, 2\hat{\Delta})) - h(z^k) \geq \alpha H_k.$$

Pelo Lema 3.12,

$$h(z^k + d(z^k, 2\hat{\Delta})) - h(z^k) = O(\|d(z^k, 2\hat{\Delta})\|^2) = O(\hat{\Delta}^2), \quad (3.31)$$

pois $\|d(z^k, 2\hat{\Delta})\| \leq 2\hat{\Delta}$. Combinando esses dois resultados, obtemos $\alpha H_k \leq O(\hat{\Delta}^2)$, ou

$$\hat{\Delta} = \Omega(\sqrt{H_k}). \quad (3.32)$$

Usando novamente o Lema 3.13 com $\hat{\Delta} < \bar{\Delta} < \tilde{\Delta}$,

$$f_0(z^k) - f_0(\hat{x}) \geq \eta\tilde{c}\Omega(\sqrt{H_k}) = \Omega(\sqrt{H_k}), \quad (3.33)$$

$$f_0(z^k) - f_0(\hat{x}) \geq \eta\tilde{c}\hat{\Delta} = \Omega(\hat{\Delta}). \quad (3.34)$$

Assim, o passo \hat{d} satisfaz as condições no lema.

Para finalizar a prova, devemos mostrar que, para $k \in \mathcal{K}_2$ grande, $f_0(\hat{x}) < \tilde{f}_0$, que implica $\hat{x} \notin \bar{\mathcal{F}}_k$, e assim $\hat{x} = x^{k+1}$.

De (3.23) e (3.15), existem constantes positivas M e N tais que

$$\begin{aligned} f_0(\hat{x}) &\leq f_0(z^k) - M\sqrt{H_k} \\ f_0(z^k) &\leq f_0(x^k) + Nh(x^k). \end{aligned}$$

Somando membro a membro, temos que $f_0(\hat{x}) \leq f_0(x^k) - M\sqrt{H_k} + Nh(x^k)$. É imediato verificar que, para $k \in \mathcal{K}_2$ tal que $\sqrt{h(x^k)} < M/(N+\alpha)$ (digamos, $k \in \mathcal{K}_3$), $f_0(\hat{x}) < f_0(x^k) - \alpha h(x^k) = \tilde{f}_0$, completando a prova. \square

3.4 Melhoramentos

Nesta seção apresentamos três melhoramentos para nossos algoritmos. Primeiro, melhoramos a análise de convergência mostrando que, sob as hipóteses (H5,H6), a sequência de valores da função objetivo sempre converge, reduzindo bastante a possibilidade de alcançar pontos de acumulação não estacionários, especialmente quando (H7) é adicionada. Então mostramos como uma pequena mudança no algo-

ritmo principal exclui totalmente a possibilidade de gerar pontos de acumulação não estacionários. Terceiro, discutimos um passo de otimalidade simplificado usando as matrizes Jacobianas já calculadas na fase de viabilidade em vez de recalculá-las em z^k .

3.4.1 Convergência dos valores da função objetivo

Continuaremos a análise das sequências (x^k) geradas pelo algoritmo feita na Seção 3.2. Começamos mostrando que f_0 não pode crescer muito em uma única iteração.

Lema 3.15 *Suponha que as hipóteses (H5, H6) valiam. Então existe uma constante $M > 0$ tal que em qualquer iteração k ,*

$$f_0(x^{k+1}) \leq f_0(x^k) + Mh(x^k).$$

Prova. Note que $f_0(\cdot)$ somente pode crescer em uma iteração- h . De (3.15), existe uma constante $M > 0$ tal que em qualquer iteração k , $f_0(z^k) \leq f_0(x^k) + Mh(x^k)$. Por construção, $f(x^{k+1}) \leq f(z^k)$, completando a prova. \square

Agora mostramos que f_0 não pode crescer muito em uma sequência de iterações.

Lema 3.16 *Suponha que as hipóteses (H5, H6) valiam. Considere uma sequência finita de iterações $I = \{\bar{k}, \bar{k} + 1, \dots, K\}$ tal que para $k \in I$, $f^k \equiv f_0(x^k) \geq f_0(x^{\bar{k}})$ ¹ e seja $M > 0$ dado pelo Lema 3.15. Então*

$$f^K \leq f^{\bar{k}} + \frac{M}{\alpha} h(x^{\bar{k}}).$$

Prova.

Denotemos $f^k = f_0(x^k)$, $h^k = h(x^k)$, para $k \in I$ e $\bar{h} = h^{\bar{k}}$. Vamos também definir os seguintes valores, representados na Figura 3.5:

$$\begin{aligned} \phi_0 &= f^{\bar{k}} \\ \phi_1 &= \phi_0 + M\bar{h} \\ \phi_2 &= \phi_1 + M(1 - \alpha)\bar{h} = \phi_0 + [1 + (1 - \alpha)]M\bar{h} \end{aligned}$$

¹Note que (f^k) não é necessariamente crescente, mas \bar{k} é uma iteração- h .

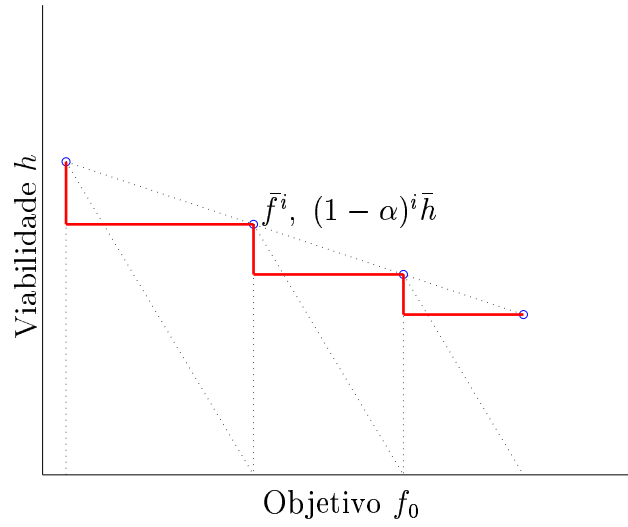


Figura 3.5: Geometria dos valores usados na prova do Lema 3.16

$$\phi_j = \phi_0 + \left(\sum_{i=0}^{j-1} (1 - \alpha)^i \right) M \bar{h} \leq \phi_0 + \frac{M}{\alpha} \bar{h}.$$

Mostraremos que a sequência $(f^k)_{k \in I}$ tem pelo menos um elemento em cada intervalo $[\phi_j, \phi_{j+1}]$, $j = 0, 1, \dots$, até seu último elemento. Conseqüentemente f^K será menor que $\phi_0 + M\bar{h}/\alpha$.

– Primeiro intervalo: a iteração \bar{k} é uma iteração- h . O par $(\phi_0 - \alpha\bar{h}, (1 - \alpha)\bar{h})$ entra no filtro permanente, e então $h^k \leq (1 - \alpha)\bar{h}$ para $k = \bar{k} + 1, \dots, K$ e $f^{\bar{k}+1} \leq \phi_0 + M\bar{h} = \phi_1$ pelo Lema 2.7.

– Segundo intervalo: Considere k_1 o maior $k \in I$ tal que $f^k \leq \phi_1$ (várias iterações- h e iterações- f_0 podem ter ocorrido entre \bar{k} e k_1). Agora k_1 é uma iteração- h , e como para o primeiro intervalo,

$$(f^{k_1} - \alpha h^1, (1 - \alpha)h^1) \leq (\phi_1, (1 - \alpha)^2 \bar{h})$$

entra no filtro. Então $h^k \leq (1 - \alpha)^2 \bar{h}$ para $k = k_1 + 1, \dots, K$ e $\phi_1 \leq f^{k_1+1} \leq \phi_{k_1} + M(1 - \alpha)\bar{h} \leq \phi_2$ pelo Lema 3.15.

Seguindo o mesmo processo, detectamos uma iteração- h k_2 , a última no segundo intervalo, e f^{k_2+1} estará no terceiro intervalo, e assim por diante até que f^K seja atingido. Então $f^K \leq \phi_0 + M\bar{h}/\alpha$, completando a prova. \square

Podemos agora provar o principal resultado desta análise:

Teorema 3.17 *Suponha que as hipóteses (H5, H6) valem. Então a sequência $(f_0(x^k))$ converge.*

Prova. Vamos denotar $f^k \equiv f_0(x^k)$ para $k \in \mathbb{N}$. A sequência (f^k) é limitada por hipótese. Usaremos o seguinte fato, que é um exercício simples em sequências: Dada uma sequência (f^k) tal que $\limsup(f^k) > \liminf(f^k) + \delta$, $\delta > 0$, é possível extrair duas subsequências $(f^k)_{k \in \mathcal{K}}$ e $(f^{k+j_k})_{k \in \mathcal{K}}$, $\mathcal{K} \subset \mathbb{N}$ tal que, para qualquer $k \in \mathcal{K}$,

$$\begin{aligned} f^{k+j_k} &\geq f^k + \delta \\ f^{k+r} &\geq f^k \quad \text{para } r = 1, \dots, j_k. \end{aligned}$$

Na verdade, para provar este fato é suficiente tomar uma subsequência convergente para $\limsup(f^k)$ e associar a cada índice (digamos, l) o último índice $l - j_l$, tal que $f^{l-j_l} \leq f^l - \delta$, se ele existe. Para l grande, a construção estará sempre bem definida.

Suponha, por contradição, que $\limsup(f^k) > \liminf(f^k) + \delta$, para algum $\delta > 0$, e considere a subsequência $(f^k)_{k \in \mathcal{K}}$ dada pela construção acima. Então, pelo Lema 3.16, concluímos que, para todo $k \in \mathcal{K}$, a iteração k é uma iteração- h e

$$f^k + \delta \leq f^{k+j_k} \leq f^k + \frac{M}{\alpha} h(x^k). \quad (3.35)$$

Tomando subsequências se necessário, assuma que $(x^k)_{k \in \mathcal{K}}$ converge para um ponto \bar{x} . Então \bar{x} deve ser estacionário pelo Lema 3.6, e consequentemente $h(x^k) \xrightarrow{\mathcal{K}} 0$. Isto contradiz (3.35), completando a prova. \square

Agora incorporamos a hipótese (H7) e mostramos que, perto de um ponto viável não estacionário, a função objetivo sempre muda de uma grande quantidade, excluindo a possibilidade de pontos de acumulação viáveis não estacionários.

Lema 3.18 *Suponha que as hipóteses (H5-H7) valem. Considere $\bar{x} \in X$ um ponto viável não estacionário. Então existe uma vizinhança V de \bar{x} e $\delta > 0$ tal que, quando $x^k \in V$, existe $l_k \in \mathbb{N}$ tal que*

$$f_0(x^{k+l_k}) \leq f_0(x^k) - \delta. \quad (3.36)$$

Prova. De (H4) e Lema 3.10, existe uma vizinhança V_1 de \bar{x} e constantes $\beta_1, \beta_2 > 0$ tais que para todo $x^k \in V_1$,

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) \geq \beta_1 \|x^{k+1} - x^k\|, \quad (3.37)$$

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) \geq \beta_2 \sqrt{H_k}, \quad (3.38)$$

e a iteração k é uma iteração- f_0 . Considere $\epsilon > 0$ tal que

$$\mathcal{B}_\epsilon(\bar{x}) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - \bar{x}\| < \epsilon\} \subset V_1,$$

e defina $V = \mathcal{B}_{\epsilon/2}(\bar{x})$.

Considere $k \in \mathbb{N}$ tal que $x^k \in V$. Enquanto x^{k+i} , $i = 1, 2, \dots$ permanece em $\mathcal{B}_\epsilon(\bar{x})$, as iterações $(k+i)$ são iterações- f_0 , e o filtro não muda, isto é,

$$F_{k+i} = F_k \quad \text{e} \quad \mathcal{F}_{k+i} = \mathcal{F}_k \quad \text{para } i = 1, 2, \dots$$

Conseqüentemente, de (3.38), f_0 decresce de pelo menos uma quantidade constante $\beta_2 \sqrt{H_k}$. Então, existe $l_k \in \mathbb{N}$ finito tal que $x^{k+l_k} \notin \mathcal{B}_\epsilon(\bar{x})$, $x^{k+i} \in \mathcal{B}_\epsilon(\bar{x})$, para $i = 0, 1, \dots, l_k - 1$. Temos que

$$\|x^{k+l_k} - x^k\| \geq \frac{\epsilon}{2} \quad (3.39)$$

pois $x^k \in \mathcal{B}_{\epsilon/2}(\bar{x})$. Usando (3.37), (3.39) e a desigualdade triangular,

$$\begin{aligned} f_0(x^k) - f_0(x^{k+l_k}) &= \sum_{i=0}^{l_k-1} f_0(x^{k+i}) - f_0(x^{k+i+1}) \\ &\geq \beta_1 \sum_{i=0}^{l_k-1} \|x^{k+i+1} - x^{k+i}\| \\ &\geq \beta_1 \|x^k - x^{k+l_k}\| \\ &\geq \beta_1 \epsilon / 2, \end{aligned}$$

completando a prova. □

Agora é trivial provar (e isto será feito adiante) que pontos viáveis não estacionários não podem ser pontos de acumulação da sequência. A presença de pontos de acumulação não estacionários é então reduzida a uma possibilidade aparentemente improvável: existir um ponto de acumulação inviável atingido por pulos

grandes a partir de pontos arbitrariamente próximos de uma solução estacionária, e que os valores da função objetivo converjam. Agora nós mostramos como uma pequena mudança em nosso algoritmo evita esta possibilidade.

3.4.2 O algoritmo modificado

A única mudança está no critério usado para introduzir um ponto no filtro, que agora torna-se:

Atualização do filtro: Dados $\varepsilon > 0$

se $f_0(x^{k+1}) < f_0(x^k) - \min\{(h(x^k))^2, \varepsilon\}$, então

$$F_{k+1} = F_k, \quad \mathcal{F}_{k+1} = \mathcal{F}_k \quad (\text{iteração-}f_0)$$

senão,

$$F_{k+1} = \bar{F}_k, \quad \mathcal{F}_{k+1} = \bar{\mathcal{F}}_k \quad (\text{iteração-}h)$$

Isto implica que, potencialmente, mais pontos serão introduzidos no filtro.

Perto de pontos viáveis não estacionários, o critério para entrada no filtro torna-se

$$f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) \geq (h(x^k))^2 = o(h(x^k)) = o(H_k).$$

O termo $o(H_k)$ se anula quando adicionado a $f_0(x^k) - f_0(x^{k+1}) = \Omega(\sqrt{H_k})$, e então o Lema 3.6 permanece verdadeiro. O Lema 3.7 e o Teorema 3.8 também permanecem verdadeiros; é imediato verificar que as mesmas provas aplicam-se ao algoritmo modificado. Então todos os resultados da Seção 3.2 permanecem válidos, e a sequência tem um ponto de acumulação estacionário.

Teorema 3.19 *Todo ponto de acumulação de (x^k) é estacionário.*

Prova. Por contradição, suponha que $x^k \xrightarrow{\mathcal{K}} \bar{x}$, \bar{x} não estacionário. Do Lema 3.6, sabemos que, para $k \in \mathcal{K}$ grande, todas as iterações são iterações- f_0 .

Se $h(\bar{x}) > 0$, então, para $k \in \mathcal{K}$ grande, $h(x^k) > h(\bar{x})/2$ e, consequentemente, $f_0(x^{k+1}) \leq f_0(x^k) - \delta_1$, com $\delta_1 = \min\{\varepsilon, (h(\bar{x}))^2/4\} > 0$.

Se $h(\bar{x}) = 0$, então o Lema 3.18 garante que, para $k \in \mathcal{K}$ grande, existem $\delta_2 > 0$ e $j_k \in \mathbb{N}$ tais que

$$f_0(x^{k+j_k}) \leq f_0(x^k) - \delta_2.$$

Em qualquer caso, construímos uma subsequência $(x^{k+j_k})_{k \in \mathcal{K}}$ tal que, para $k \in \mathcal{K}$,

$$f_0(x^{k+j_k}) \leq f_0(x^k) - \delta,$$

onde $\delta = \min\{\delta_1, \delta_2\} > 0$.

Segue que a sequência $f_0(x^k)$ não é uma sequência de Cauchy, contradizendo o teorema 3.17 e completando a prova. \square

3.4.3 O passo tangencial simplificado

Em nosso algoritmo, os passos de viabilidade e tangencial são independentes. Isto significa que as Jacobianas $A_{\mathcal{E}}$ e $A_{\mathcal{I}}$ devem ser calculadas ambas em x^k e z^k . Na maioria dos algoritmos baseados nos passos de viabilidade e otimalidade, o passo tangencial usa em z^k o modelo linear calculado em x^k , reduzindo os cálculos.

Isto faz sentido se x^k está perto de z^k , e se o algoritmo de viabilidade efetuou somente um passo para atingir z^k a partir de x^k . Se vários passos foram usados, então o passo tangencial pode ser simplificado aproximando as Jacobianas pelas recém calculadas no procedimento de viabilidade.

Iremos agora mudar o passo tangencial e usar a seguinte transformação, que associa a cada $(z, x) \in \mathbb{R}^{2n}$ o conjunto

$$L(z, x) = \{y \in \mathbb{R}^n \mid A_{\mathcal{E}}(x)(y - z) = 0, f_{\mathcal{I}}(z) + A_{\mathcal{I}}(x)(y - z) \leq f_{\mathcal{I}}^+(z)\} \quad (3.40)$$

e o ponto

$$d_c(z, x) = P_{L(z, x)}(z - \nabla f_0(z)) - z. \quad (3.41)$$

Assim, $L(z^k, x^k)$ é o mesmo que $L(z^k)$ dado por (3.4), com $A_{\mathcal{E}}(z^k)$, $A_{\mathcal{I}}(z^k)$ substituídas por $A_{\mathcal{E}}(x^k)$, $A_{\mathcal{I}}(x^k)$.

Quando $x^k \xrightarrow{\mathcal{K}} \bar{x}$, $\bar{x} \in X$ viável, $\mathcal{K} \subset \mathbb{N}$, é também verdade que $z^k \xrightarrow{\mathcal{K}} \bar{x}$, pois, por (3.14), $\|x^k - z^k\| = O(h(x^k))$. Assim, precisamos da continuidade de (3.40) e (3.41) em um par (\bar{x}, \bar{x}) : isto é garantido por mudanças diretas na prova do Lema A.1.

A única mudança no tratamento está no Lema 3.12, que agora torna-se:

Lema 3.20 Para quaisquer $z, x \in X$, tais que $\|z - x\| = O(h(x))$ e $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $(z + d) \in L(z, x)$,

$$|h(z + d) - h(z)| = h(x) O(\|d\|) + O(\|d\|^2).$$

Prova. Por (3.3), para qualquer $z \in X$, $d \in \mathbb{R}^n$, $i = 0, 1, \dots, m$,

$$f_i(z + d) - f_i(z) \leq \nabla f_i(z)^T d + O(\|d\|^2).$$

Pela condição de Lipschitz em ∇f_i , $i = 0, 1, \dots, m$,

$$\|\nabla f_i(z) - \nabla f_i(x)\| = O(\|z - x\|) = O(h(x))$$

e

$$\begin{aligned} \nabla f_i(z)^T d &= \nabla f_i(x)^T d + O(h(x)) \|d\| + O(\|d\|^2) \\ &= \nabla f_i(x)^T d + h(x) O(\|d\|) + O(\|d\|^2). \end{aligned}$$

Agora, procedemos como na prova do Lema 3.12, e temos que

$$\|f^+(z + d)\| = \|f^+(z)\| + h(x) O(\|d\|) + O(\|d\|^2),$$

completando a prova. □

O Lema 3.13 não é afetado pelas mudanças, e somente precisamos mudar a prova do Lema 3.14.

O único lugar onde o Lema 3.20 é usado na prova é nas expressões (3.31) e (3.32). Mostraremos agora que, com uma boa escolha do valor $\bar{\Delta}$ (definido naquela prova), (3.32) é ainda válido.

Vamos modificar (3.31), usando o Lema 3.20:

$$\alpha H_k \leq h(z^k + d(z^k, 2\hat{\Delta})) - h(z^k) = h(x^k) O(\|d(z^k, 2\hat{\Delta})\|) + O(\|d(z^k, 2\hat{\Delta})\|^2).$$

Como $d(z^k, 2\hat{\Delta}) \leq 2\hat{\Delta}$ e $h(x^k) < H_k$,

$$H_k \leq cH_k\hat{\Delta} + O(\hat{\Delta}^2),$$

onde $c > 0$ é uma constante dependente somente de \bar{x} . Para uma escolha de $\bar{\Delta}$ tal

que $c\bar{\Delta} < 1/2$, obtemos

$$\frac{1}{2}H_k = O(\hat{\Delta}^2),$$

o que implica (3.32).

A partir deste ponto, a prova é idêntica, provando que o algoritmo simplificado tem as mesmas propriedades de convergência do algoritmo original.

3.5 Um exemplo gráfico

Nesta seção apresentaremos um exemplo gráfico do mecanismo dos algoritmos. Considere o problema bidimensional

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } x_2 \\ &\text{sujeito a } f(x) = x_2 + (2 + x_1)\cos(x_1) = 0. \end{aligned}$$

A Figura 3.6 (bem como todas as figuras que seguem) mostra as curvas de nível de $h(x) = |f(x)|$ e um minimizador local. A figura da direita mostra os pares $(f(x), h(x))$.

Usando uma função de mérito $\psi(x) = f(x) + \nu h(x)$, com $\nu = 0.5$, a Figura 3.6 mostra os pontos proibidos associados com o ponto $(1, -4)$, isto é, os pontos x tais que $\psi(x) \geq \psi((1, -4))$. Note que o otimizador local está proibido para este valor de ν . Isto acontece porque ν é muito pequeno, menor que os multiplicadores de KKT ótimos.

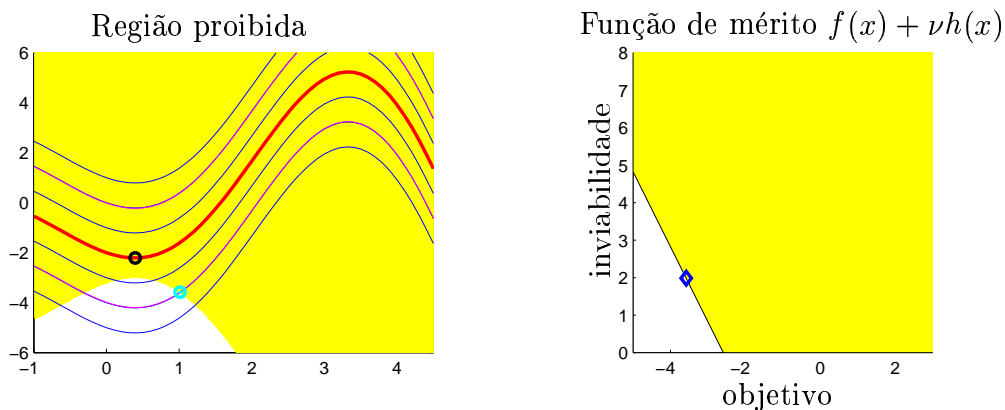


Figura 3.6: A função de mérito proíbe o otimizador local.

A Figura 3.7 mostra a mesma situação para $\nu = 1.5$, e agora o otimizador

local nunca é proibido. Isto é na realidade verdadeiro para qualquer valor $\nu \geq 1$, maior que o valor do multiplicador ótimo.

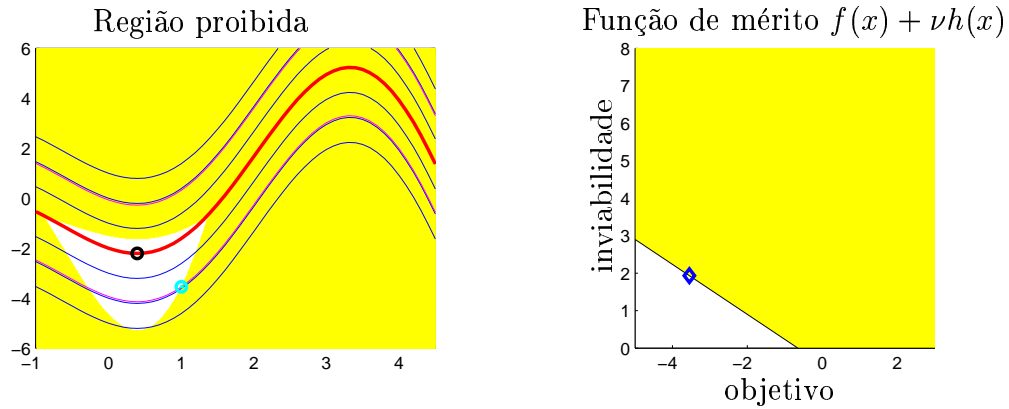


Figura 3.7: Agora o otimizador não é proibido.

As próximas figuras mostram algumas iterações do método de filtro, programado em Matlab e usando algoritmos internos que são intencionalmente imprecisos mas satisfazem todas as hipóteses. A Figura 3.8 mostra a primeira iteração. Na esquerda, a região temporariamente proibida associada com a primeira iterada, e um passo de viabilidade seguido de um passo tangencial. A figura da direita mostra o filtro: agora $F_0 = \emptyset$ e \bar{F}_0 contém somente o ponto $(f_0(x^0) - \alpha h(x^0), (1 - \alpha)h(x^0))$. Os pares resultantes dos passos de viabilidade e tangencial são também mostrados. Para o passo tangencial, mostramos os pares correspondentes a $z^k + \lambda(x^{k+1} - z^k)$, $\lambda \in [0, 1]$.

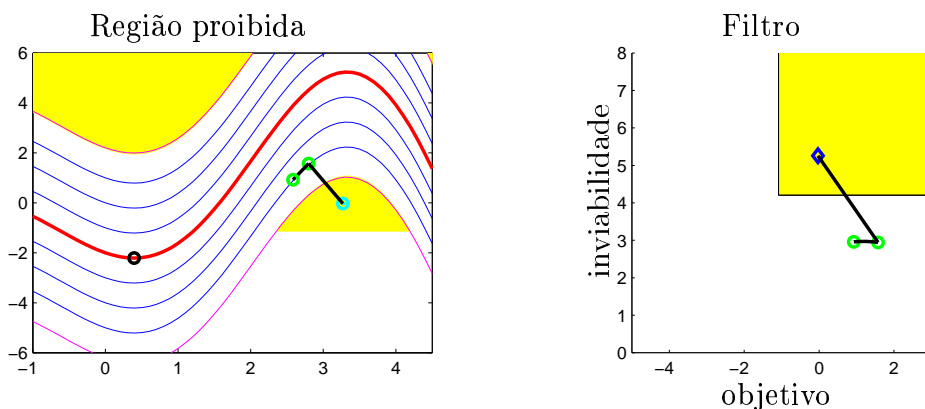


Figura 3.8: Primeira iteração de um método de filtro.

A primeira iteração foi uma iteração- h , pois $f_0(x^1) > f_0(x^0)$. Assim,

$(f_0(x^0), h(x^0))$ torna-se uma entrada permanente no filtro. A Figura 3.9 mostra a segunda iteração, onde os pontos e pares permanentemente proibidos estão na região escura.

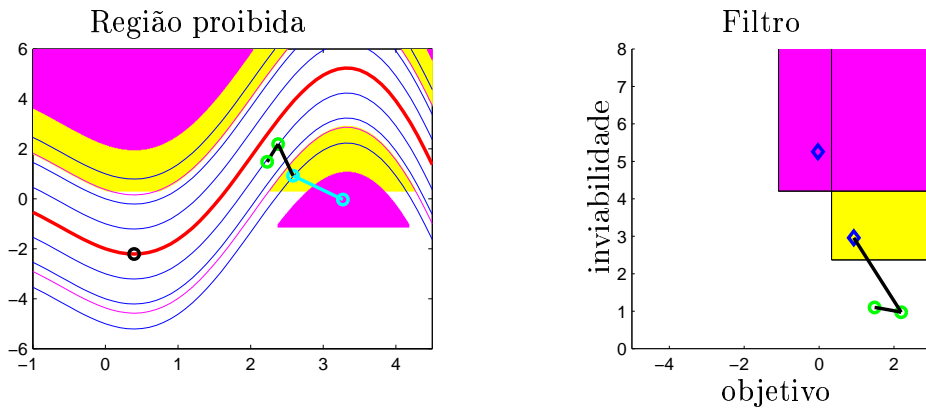


Figura 3.9: Pontos temporária e permanentemente proibidos depois da primeira iteração.

A segunda iteração foi também uma iteração- h , e o filtro permanente tem dois pontos. A terceira iteração é uma iteração- f_0 .

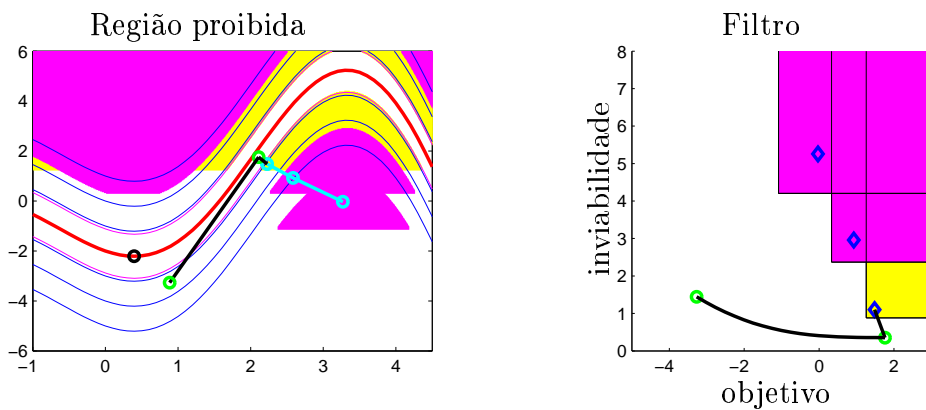


Figura 3.10: Terceira iteração: uma iteração- f_0 .

Depois mais uma iteração- h (iteração 4), entradas dominadas pelo novo par podem ser eliminadas do filtro. A última figura mostra a quinta iteração.

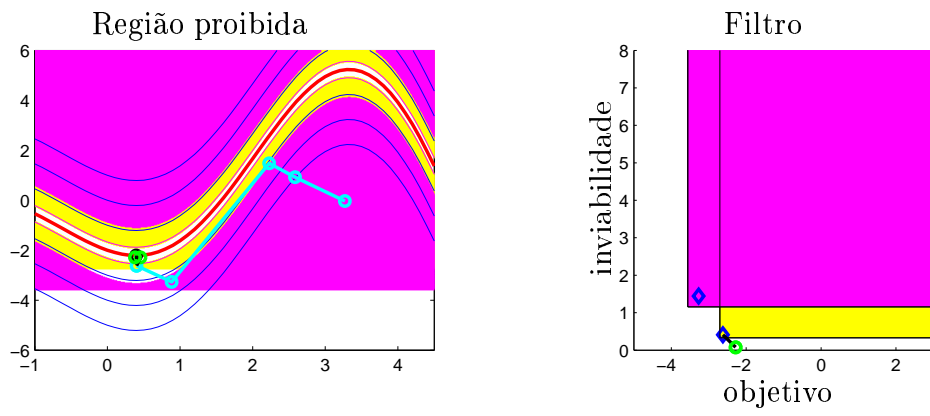


Figura 3.11: Quinta iteração: dois elementos do filtro foram eliminados.

Conclusões

Concluimos apresentando algumas questões que abrem perspectivas para trabalhos futuros.

Exemplos de trajetórias centrais mal comportadas.

Nós apresentamos, no Capítulo 2, alguns exemplos de problemas convexos bidimensionais para os quais as trajetórias centrais primais, associadas com qualquer função penalidade, são mal comportadas. Ou seja, algumas têm a forma de uma antena de TV com uma infinidade de segmentos centrais de comprimento constante, e outras têm a forma de ziguezague com variação infinita. Nestes exemplos, o conjunto ótimo é um segmento de reta e o conjunto de centros analíticos coincide com o conjunto ótimo.

Os primeiros exemplos apresentados naquele capítulo são construídos com funções contínuas, mas não diferenciáveis. Nós, então, os suavizamos através da composição com funções de suavização e construímos exemplos convexos C^1 e até mesmo C^∞ , cujas trajetórias centrais exibem aqueles comportamentos.

Concluimos, assim, que convexidade, mesmo com diferenciabilidade em qualquer grau, ainda que as funções envolvidas no problema sejam C^∞ , não é suficiente para impedir formas patológicas da trajetória central. O resultado é de fato surpreendente, pois Monteiro e Zhou [60] garantem que, se as funções envolvidas na definição do problema são analíticas, juntamente com outras hipóteses razoáveis, então a trajetória central primal é uma curva que converge para um único ponto no conjunto ótimo.

Finalmente, estudamos o efeito destes resultados na complexidade dos algoritmos. Provamos que nenhuma função penalizada construída como neste trabalho pode ser auto-concordante, e assim não é possível provar polinomialidade de qualquer algoritmo usando a teoria de Nesterov e Nemirovskii. Supondo que exista um bom algoritmo que segue a trajetória, percorrendo cada volta do ziguezague em um

número fixado de iterações, então este algoritmo será polinomial para nossos exemplos, mas uma leve mudança na definição do problema faz o algoritmo que segue a trajetória convergir num tempo infinito para um conjunto não ótimo.

Algumas questões, no entanto, são levantadas por estes exemplos e merecem atenção futura.

Barreira auto-concordante.

Considerando o problema no formato de Nesterov-Nemirovskii [64] e definindo a trajetória central por meio de uma barreira auto-concordante, mostramos alguns resultados. Esta questão foi sugerida por um dos revisores do nosso trabalho [35], quando da sua submissão à revista “Mathematical Programming”. Para os exemplos em que obtemos a trajetória central em forma de antena, a trajetória será agora um segmento de reta. Para os exemplos em zig-zague, a trajetória será um zig-zague amortecido em alguns casos, mas conjecturamos (e expomos nossas razões) que no exemplo mais simples em zig-zague (Capítulo 2, Exemplo 3), a barreira auto-concordante gerará ainda um zig-zague com comprimento infinito, para o qual um bom algoritmo que siga a trajetória será polinomial.

O resultado é surpreendente e não foi apresentado de forma suficientemente rigorosa, pois, além de ser um assunto difícil, foge ao escopo deste trabalho. Merece, sem sombra de dúvida, nossa atenção num próximo trabalho.

Método de filtro.

No Capítulo 3 apresentamos um algoritmo de filtro para programação não linear e provamos sua convergência global para pontos estacionários. Cada iteração é composta de uma fase de restauração, que reduz uma medida de inviabilidade, e uma fase de otimalidade, que reduz a função objetivo numa aproximação tangencial do conjunto viável. Essas duas fases são totalmente independentes, e o único acoplamento entre elas é estabelecido pelo filtro. Informações sobre as iterações são acumuladas através do filtro, impedindo que se retorne à proximidade de pontos já pesquisados. O método é independente dos algoritmos internos usados em cada iteração, desde que esses algoritmos satisfaçam hipóteses razoáveis sobre sua eficiência. O algoritmo principal não usa regiões de confiança, e nenhuma propriedade dos modelos lineares. Sob hipóteses padrões, mostramos dois resultados: para o filtro com um tamanho mínimo, o algoritmo gera um ponto de acumulação estacionário; para um filtro levemente maior, todos os pontos de acumulação são estacionários.

Acreditamos que esse trabalho abre espaço para novas pesquisas. Salientamos algumas delas.

Efeito Maratos.

Vimos na Seção 1.3.3 que há uma equivalência na resolução do problema de PNL (1.18) pelos métodos PQS e Newton quando as hessianas do modelo quadrático são as hessianas do Lagrangeano com os multiplicadores ótimos. Sabemos, por outro lado, que o método de Newton tem propriedades de convergência local quadrática quando a Jacobiana das restrições na solução é não singular. Como este método é localmente rápido, é desejável que, arbitrariamente próximo a uma solução local estrita do problema, um passo completo de Newton seja aceito. Apesar de o novo ponto se aproximar de uma solução ótima local, ele é rejeitado por alguns algoritmos por causa do critério utilizado para aceitação do passo. Isto é conhecido como *efeito Maratos* [49] e pode nos levar a passos curtos, em pontos arbitrariamente próximos de uma solução ótima, fazendo com que o método tenha más propriedades de convergência local.

Muitos métodos que utilizam funções de mérito para avaliar o passo sofrem do efeito Maratos, e recomendam rejeitar um ponto, arbitrariamente próximo a uma solução local, essencialmente bom. Martínez e Santos [54] fazem uma interessante relação de funções de mérito utilizadas na literatura, comentando quais sofrem ou não do efeito Maratos.

Fletcher e Leyffer [29] comentam que os métodos de filtro podem também sofrer do efeito Maratos, ainda que sejam menos restritivos em termos de aceitação de passos que os métodos com funções de mérito. Para remediar isto, os autores propõem uma modificação no algoritmo introduzindo uma correção de segunda ordem.

Wächter e Biegler, em seu recente trabalho [82] de algoritmo de filtros com busca linear, também propõem uma correção de segunda ordem e mostram resultados de convergência local do algoritmo.

No formato atual, o nosso algoritmo de filtros sofre do efeito Maratos, como se mostra facilmente usando o exemplo de Powell [68]. Como proposta de trabalho futuro, devemos discutir como evitar o efeito Maratos e analisar as propriedades de convergência local do algoritmo. Esta discussão foi levantada por Andreas Wächter quando da sua leitura do nosso trabalho [40].

Pontos interiores com filtro.

O algoritmo de pontos interiores para programação não linear proposto por Byrd, Gilbert e Nocedal [9] e Byrd, Hribar e Nocedal [10] faz uso de uma função de mérito para avaliação de cada passo. Como vimos, a atualização do parâmetro de penalidade da função de mérito é bastante delicada, podendo fazer com que o algoritmo fique bastante lento ou recuse pontos próximos da solução. A nossa sugestão é então estudar a possibilidade de estender nosso algoritmo para o caso de métodos de pontos interiores, mesclando as idéias de [9, 10] com o algoritmo de filtro proposto neste trabalho.

Ulbrich, Ulbrich e Vicente [78], Wächter e Biegler [82] propuseram métodos de pontos interiores para programação não linear que utilizam a técnica de filtros em substituição à função de mérito. Em [78], o algoritmo decompõe o passo primal-dual obtido das condições de KKT perturbadas em um passo normal e um tangencial, cujos tamanhos são controlados por um parâmetro tipo região de confiança. Cada entrada no filtro é um par ordenado, cuja primeira componente é resultante da viabilidade e centralidade e é associada com o passo normal; a segunda resulta da otimalidade (complementaridade e dualidade) e relaciona-se com o passo tangencial. Em [82], o algoritmo proposto usa busca linear na direção de Newton obtida a partir das condições de KKT do problema. A fase de restauração é incorporada ao algoritmo de uma forma que nos parece artificial. Ela é exigida se o sistema a ser resolvido para obter a direção de Newton é (quase) singular, ou se o comprimento do passo naquela direção se torna muito pequeno.

Implementação.

Temos a intenção de implementar o algoritmo proposto, inicialmente em Matlab, e testá-lo para comparar seu desempenho com outros métodos. Nosso interesse particular é utilizá-lo em problemas práticos de fluxo de potência ótimo.

Apêndice

Propriedades de continuidade de transformações

Considere $L : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ a transformação definida em (3.4),

$$z \in \mathbb{R}^n \mapsto L(z) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid A_{\mathcal{E}}(z)(x - z) = 0, f_{\mathcal{I}}(z) + A_{\mathcal{I}}(z)(x - z) \leq f_{\mathcal{I}}^+(z)\},$$

onde $z \mapsto A_{\mathcal{E}}(z)$ e $z \mapsto A_{\mathcal{I}}(z)$ são contínuas.

Dizemos que $x \in \mathbb{R}^n$ é um ponto interior de $L(z)$ se $x \in L(z)$ e $f_{\mathcal{I}}(z) + A_{\mathcal{I}}(z)(x - z) < f_{\mathcal{I}}^+(z)$.

Lema A.1 *Considere $\bar{z} \in \mathbb{R}^n$ tal que $A_{\mathcal{E}}(\bar{z})$ tem linhas linearmente independentes e $L(\bar{z})$ tem um ponto interior (isto é, a condição de qualificação M-F é satisfeita em \bar{z}). Então a transformação ponto-conjunto $L(\cdot)$ é contínua em \bar{z} .*

Prova. Considere a sequência (z^k) , tal que $z^k \rightarrow \bar{z}$, e os conjuntos $L(z^k)$.

(1) Semi-continuidade superior: Considere $x^k \in L(z^k)$, $k \in \mathbb{N}$, tal que $x^k \rightarrow \bar{x}$. Usando a continuidade de todas as funções envolvidas na definição de $L(\cdot)$, o fato que $\bar{x} \in L(\bar{z})$ é direto.

(2) Semi-continuidade inferior: Considere um ponto arbitrário $\bar{x} \in L(\bar{z})$. Devemos exibir uma sequência $x^k \in L(z^k)$, $k \in \mathbb{N}$, tal que $x^k \rightarrow \bar{x}$.

Defina $x^k = P_{L(z^k)}(\bar{x})$, onde $P_{\Gamma}(w)$ denota a projeção ortogonal de $w \in \mathbb{R}^n$ sobre o conjunto fechado $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$.

Por contradição, suponha que existam um conjunto infinito $\mathcal{K} \subset \mathbb{N}$ e $\varepsilon > 0$, tais que, para todo $k \in \mathcal{K}$, $\|x^k - \bar{x}\| > \varepsilon$. Nós iremos estabelecer a contradição obtendo $k \in \mathcal{K}$ e um ponto $w^k \in L(z^k)$ tal que $\|w^k - \bar{x}\| < \varepsilon$.

Considere $y \in \mathbb{R}^n$ um ponto interior de $L(\bar{z})$. Então, para todo $\lambda \in (0, 1)$,

$$y_{\lambda} = \lambda y + (1 - \lambda)\bar{x}$$

é um ponto interior de $L(\bar{z})$. Escolha λ tal que $\|y_\lambda - \bar{x}\| < \varepsilon/2$, e defina w^k como a projeção de y_λ sobre $\{x \in \mathbb{R}^n \mid A_\varepsilon(z^k)(x - z^k) = 0\}$. Para z^k suficientemente perto de \bar{z} , $A_\varepsilon(z^k)$ tem linhas linearmente independentes, e a projeção é dada por

$$(y_\lambda - w^k) = A_\varepsilon(z^k)^T (A_\varepsilon(z^k)A_\varepsilon(z^k)^T)^{-1} A_\varepsilon(z^k)(y_\lambda - z^k).$$

A projeção é contínua em \bar{z} e então $y_\lambda - w^k \rightarrow 0$, pois $A_\varepsilon(\bar{z})(y_\lambda - \bar{z}) = 0$. Da continuidade de A_I e $f_I(\bar{z}) + A_I(\bar{z})(y_\lambda - \bar{z}) < f_I^+(\bar{z})$, e os fatos que $z^k \xrightarrow{\mathcal{K}} \bar{z}$ e $w^k \xrightarrow{\mathcal{K}} y_\lambda$, para $k \in \mathcal{K}$ grande,

$$f_I(z^k) + A_I(z^k)(w^k - z^k) < f_I^+(z^k).$$

Assim, para $k \in \mathcal{K}$ grande, temos $w^k \in L(z^k)$ e $\|w^k - y_\lambda\| < \varepsilon/2$. Para tal w^k ,

$$\|\bar{x} - w^k\| \leq \|\bar{x} - y_\lambda\| + \|y_\lambda - w^k\| < \varepsilon,$$

completando a prova. □

Lema A.2 *Considere a transformação ponto-conjunto $z \in \mathbb{R}^n \mapsto L(z) \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ e uma função $z \in \mathbb{R}^n \mapsto p(z) \in \mathbb{R}^n$ contínua em $\bar{z} \in \mathbb{R}^n$. Então $z \in \mathbb{R}^n \mapsto P_{L(z)}(p(z))$ é contínua em \bar{z} .*

Prova. Considere uma sequência $z^k \rightarrow \bar{z} \in \mathbb{R}^n$, $x^k = P_{L(z^k)}(p(z^k))$. Nós devemos provar que $x^k \rightarrow \bar{x} = P_{L(\bar{z})}(p(\bar{z}))$.

Da semi-continuidade inferior de $L(\cdot)$, existe uma sequência $y^k \in L(z^k)$ tal que $y^k \rightarrow \bar{x}$. Por definição de projeção,

$$\|p(z^k) - x^k\| \leq \|p(z^k) - y^k\|. \tag{A.42}$$

Então $(p(z^k) - x^k)$ é limitado e, conseqüentemente, (x^k) é limitado. Considere $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ e $\mathcal{K} \subset \mathbb{N}$ tais que $(x^k) \xrightarrow{\mathcal{K}} \tilde{x}$. Usando a semi-continuidade superior de $L(\cdot)$, $\tilde{x} \in L(\bar{z})$ e então por definição de projeção,

$$\|\tilde{x} - p(\bar{z})\| \geq \|\bar{x} - p(\bar{z})\|.$$

Tomando limites em (A.42) para $k \in \mathcal{K}$, $k \rightarrow \infty$,

$$\|p(\bar{z}) - \tilde{x}\| \leq \|p(\bar{z}) - \bar{x}\|.$$

Segue que $\|p(\bar{z}) - \tilde{x}\| = \|p(\bar{z}) - \bar{x}\|$, e assim $\tilde{x} = \bar{x}$ por unicidade de projeção sobre um conjunto convexo. Isto prova que \bar{x} é o único ponto de acumulação de (x^k) , completando a prova. \square

Referências Bibliográficas

- [1] J. Abadie and J. Carpentier. Generalization of the Wolfe reduced-gradient method to the case of nonlinear constraints. In R. Fletcher, editor, *Optimization*, pages 37–47. Academic Press, New York, 1968.
- [2] I. Adler and R. D. C. Monteiro. Limiting behavior of the affine scaling continuous trajectories for linear programming problems. *Mathematical Programming*, 50:29–51, 1991.
- [3] K. M. Anstreicher. Linear programming in $O([n^3/\ln n]L)$ operations. *SIAM Journal on Optimization*, 9:803–812, 1999.
- [4] A. Auslender, R. Cominetti, and M. Haddou. Asymptotic analysis for penalty and barrier methods in convex and linear programming. *Mathematics of Operations Research*, 22:43–62, 1997.
- [5] D. A. Bayer and J. C. Lagarias. The nonlinear geometry of linear programming, Part I : Affine and projective scaling trajectories. *Transactions of the American Mathematical Society*, 314(2):499–526, 1989.
- [6] D. P. Bertsekas. *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, Belmont, Massachusetts, 1995.
- [7] P. T. Boggs and J. W. Tolle. Sequential quadratic programming. *Acta Numer.*, 4:1–51, 1996.
- [8] R. H. Byrd. Robust trust region methods for constrained optimization. Third SIAM Conference on Optimization, 1987.
- [9] R. H. Byrd, J. C. Gilbert, and J. Nocedal. A trust region method based on interior point techniques for nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 89(1):149–185, 2000.

- [10] R. H. Byrd, M. E. Hribar, and J. Nocedal. An interior point algorithm for large-scale nonlinear programming. *SIAM Journal on Optimization*, 9(4):877–900, 1999.
- [11] R. H. Byrd, R. B. Schnabel, and G. A. Schultz. A trust region algorithm for nonlinearity constrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 24:1152–1170, 1987.
- [12] T. J. Carpenter, I. J. Lustig, J. M. Mulvey, and D. F. Shanno. Higher order predictor-corrector interior point methods with application to quadratic objectives. *SIAM Journal on Optimization*, 3:696–725, 1993.
- [13] M. R. Celis, J. E. Dennis, and R. A. Tapia. A trust region strategy for nonlinear equality constrained optimization. In P. T. Boggs, R. H. Byrd, and R. B. Schnabel, editors, *Numerical Optimization 1984*, pages 71 – 82. SIAM, Philadelphia, 1985.
- [14] T. Champion. *Asymptotic Convergence of Penalty Trajectories in Convex Programming with Multiple Solutions*. PhD thesis, Département de Mathématique, Université de Montpellier II, France, 2001.
- [15] C. Chen and O. L. Mangasarian. Smoothing methods for convex inequalities and linear complementary problems. *Mathematical Programming*, 71:1–112, 1995.
- [16] C. Chen and O. L. Mangasarian. A class of smoothing functions for nonlinear and mixed complementary problems. *Computational Optimization and Applications*, 5:97–138, 1996.
- [17] T. F. Coleman and Y. Li. On the convergence of interior-reflective Newton methods for nonlinear minimization subject to bounds. *Mathematical Programming*, 67:189–224, 1994.
- [18] T. F. Coleman and Y. Li. An interior trust region approach for nonlinear minimization subject to bounds. *SIAM J. Optimization*, 6(2):418–445, May 1996.
- [19] R. Cominetti. Nonlinear averages and convergence of penalty trajectories in convex programming. In Rainer Tichatschke Michel Théra, editor, *Ill-posed*

- variational problems and regularization techniques*, volume 477 of *Lecture Notes in Economics and Mathematical System*, pages 65–78. Springer Verlag, Berlin, 1999.
- [20] A. R. Conn, N. I. M. Gould, D. Orban, and P. L. Toint. A primal-dual trust region algorithm for minimizing a non-convex function subject to general inequality and linear equality constraints. Technical Report RAL-TR-1999-054, Computation Science and Engineering Department, Atlas Centre, Rutherford Appleton Laboratory, Oxon, OX11 0QX, 1999.
- [21] G. Dantzig. Maximization of a linear function of variables subject to linear inequalities. In T. C. Koopmans, editor, *Activity Analysis of Production and Allocation*, pages 339–347. John Wiley, New York, 1951.
- [22] D. den Hertog. *Interior Point Approach to Linear, Quadratic and Convex Programming*. Mathematics and its Applications 277. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1992.
- [23] D. den Hertog. *Interior Point Approach to Linear, Quadratic and Convex Programming. Algorithms and Complexity*. PhD thesis, Faculty of Mathematics and Informatics, September 1992.
- [24] J. E. Dennis, M. Heinkenschloss, and L. N. Vicente. Trust-region interior-point SQP algorithms for a class of nonlinear programming problems. Technical Report 94-45, Department of Computational and Applied Mathematics, Rice University, 1994.
- [25] A. S. El-Bakry, R. A. Tapia, T. Tsuchya, and Y. Zhang. On the formulation and theory of the Newton interior-point method for nonlinear programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 89:507–541, 1996.
- [26] A. V. Fiacco and G. P. McCormick. *NonLinear Programming : Sequential Unconstrained Minimization Techniques*. John Wiley & Sons, New York, 1968. Reprint : Volume 4 of *SIAM Classics in Applied Mathematics*, SIAM Publications, Philadelphia, PA 19104–2688, USA, 1990.
- [27] W. H. Fleming. *Functions of Several Variables*. Addison-Wesley Publishing Company, United States, 1965.

- [28] R. Fletcher, N. Gould, S. Leyffer, P. Toint, and A. Wächter. Global convergence of trust-region and SQP-filter algorithms for general nonlinear programming. *SIAM Journal on Optimization*, 2002. to appear.
- [29] R. Fletcher and S. Leyffer. Nonlinear programming without a penalty function. Technical Report NA/171, Dundee University, Dept. of Mathematics, 1997. Revised 2000.
- [30] R. Fletcher, S. Leyffer, and P. L. Toint. On the global convergence of an SLP-filter algorithm. Technical Report NA/183, Dundee University, Dept. of Mathematics, 1999.
- [31] R. Fletcher, S. Leyffer, and P. L. Toint. On the global convergence of a filter-SQP algorithm. *SIAM Journal on Optimization*, 13(1):44–59, 2002.
- [32] A. Forsgren and P. E. Gill. Primal-dual interior methods for nonconvex nonlinear programming. *SIAM Journal on Optimization*, 8(4):1132–1152, 1998.
- [33] K. R. Frisch. The logarithmic potential method for convex programming. Unpublished manuscript, Institute of Economics, University of Oslo, Oslo, Norway, May 1955.
- [34] D. M. Gay, M. L. Overton, and M. H. Wright. A primal-dual interior method for nonconvex nonlinear programming. In Yuan Y, editor, *Advances in Nonlinear Programming*, pages 31–56. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.
- [35] J. C. Gilbert, C. C. Gonzaga, and E. W. Karas. Examples of ill-behaved central paths in convex optimization. Technical Report 4179, INRIA, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, 2001.
- [36] F. A. M. Gomes, M. C. Maciel, and J. M. Martínez. Nonlinear programming algorithms using trust regions and augmented Lagrangians with nonmonotone penalty parameters. *Mathematical Programming*, 84(1):161–200, January 1999.
- [37] J. Gondzio. Multiple centrality corrections in a primal dual method for linear programming. *Comp. Opt. and Appl.*, 6:137–156, 1996.
- [38] C. C. Gonzaga. An algorithm for solving linear programming problems in $O(n^3L)$ operations. In N. Megiddo, editor, *Progress in Mathematical Program-*

- ming : Interior Point and Related Methods*, pages 1–28. Springer Verlag, New York, 1989.
- [39] C. C. Gonzaga. Path following methods for linear programming. *SIAM Review*, 34(2):167–227, 1992.
- [40] C. C. Gonzaga, E. W. Karas, and M. Vanti. A globally convergent filter method for nonlinear programming. Optimization online, 2001.
- [41] J-B. Hiriart-Urruty and C. Lemarechal. *Convex Analysis and Minimization Algorithms I*. Springer-Verlag, New York, 1993.
- [42] B. Jansen. *Interior Point Techniques in Optimization*. Applied Optimization 6. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1997.
- [43] N. K. Karmarkar. A new polynomial-time algorithm for linear programming. *Combinatorica*, 4:373–395, 1984.
- [44] L. G. Khachiyan. A polynomial algorithm for linear programming. *Soviet Mathematics Doklady*, 20:191–194, 1979.
- [45] V. Klee and G. Minty. How good is the simplex algorithm? In O. Sisha, editor, *Inequalities III*. Academic Press, New York, 1972.
- [46] M. Kojima, N. Megiddo, T. Noma, and A. Yoshise. A unified approach to interior point algorithms for linear complementarity problems. In *Lecture Notes in Computer Science*, volume 538, Springer Verlag, Berlin, 1991.
- [47] M. Kojima, S. Mizuno, and A. Yoshise. A primal–dual interior point algorithm for linear programming. In N. Megiddo, editor, *Progress in Mathematical Programming : Interior Point and Related Methods*, pages 29–47. Springer Verlag, New York, 1989.
- [48] K. Levenberg. A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares. *Quart. Appl. Math.*, 2:164–168, 1944.
- [49] N. Maratos. *Exact Penalty Function Algorithms for Finite Dimensional and Control Optimization Problems*. PhD thesis, Imperial College Science Technology, University of London, 1978.

- [50] D. W. Marquardt. An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters. *SIAM J. Appl. Math.*, 11:431–441, 1963.
- [51] J. M. Martínez. Inexact-restoration method with Lagrangian tangent decrease and a new merit function for nonlinear programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 2001. To appear.
- [52] J. M. Martínez and E. A. Pilotta. Inexact restoration algorithms for constrained optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 104:135–163, 2000.
- [53] J. M. Martínez and E. A. Pilotta. Inexact restoration methods for nonlinear programming: Advances and perspectives. In Qi, Teo, and Yang, editors, *Optimization and Control with Applications*. Kluwer, 2001. To appear.
- [54] J. M. Martínez and S. A. Santos. Métodos computacionais de otimização. 20.^o Colóquio Brasileiro de Matemática - IMPA, July 1995. In Portuguese.
- [55] J. M. Martínez and B. F. Svaiter. A practical optimality condition without constraint qualifications for nonlinear programming. Technical report, Institute of Mathematics, University of Campinas, Brazil, 2001.
- [56] L. McLinden. An analogue of Moreau’s proximation theorem, with application to the nonlinear complementarity problem. *Pacific Journal of Mathematics*, 88(1):101–161, 1980.
- [57] N. Megiddo. Pathways to the optimal set in linear programming. In N. Megiddo, editor, *Progress in Mathematical Programming : Interior Point and Related Methods*, pages 131–158. Springer Verlag, New York, 1989. Identical version in : *Proceedings of the 6th Mathematical Programming Symposium of Japan, Nagoya, Japan*, pages 1–35, 1986.
- [58] S. Mehrotra. On the implementation of a primal–dual interior point method. *SIAM Journal on Optimization*, 2(4):575–601, 1992.
- [59] R. D. C. Monteiro and I. Adler. Interior path following primal–dual algorithms : Part I : Linear programming. *Mathematical Programming*, 44:27–41, 1989.

- [60] R. D. C. Monteiro and F. Zhou. On the existence and convergence of the centra path for convex programming and some duality results. *Computational Optimization and Applications*, 10:51–77, 1998.
- [61] J. J. Moré. Recent developments in algorithms and software for trust region methods. In A. Bachem, M. Grötschel, and B. Korte, editors, *Mathematical Programming, The Sate of the Art*. Springer Verlag, 1983.
- [62] J. J. Moré and D. C. Sorensen. Computing a trust region step. *SIAM Journal on Sci. Statist. Comput.*, 4:553–572, 1983.
- [63] H. Mukai and E. Polak. On the use of approximations in algorithm for optimization problems with equality and inequality constraints. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 15:674–693, 1978.
- [64] Y. E. Nesterov and A. S. Nemirovskii. *Interior-Point Polynomial Algorithms in Convex Programming*, volume 13 of *SIAM Studies in Applied Mathematics 13*. SIAM, Philadelphia, 1994.
- [65] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, 1999.
- [66] E. Omojokun. *Trust Region Algorithms for Optimization with Nonlinear Equality and Inequality Constraints*. PhD thesis, Dept. of Computer Science, University of Colorado, 1991.
- [67] M. J. D. Powell. A hybrid method for nonlinear equations. In P. Rabinowitz, editor, *Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations*. Gordon and Breach, London, 1970.
- [68] M. J. D. Powell. Convergence properties of a class of minimization algorithms. In O. L. Mangasarian, R. R. Meyer, and S. M. Robinson, editors, *Nonlinear Programming 2*, pages 1–27. Academic Press, New York, 1975.
- [69] M. J. D. Powell and Y. Yuan. A trust region algorithm for equality constrained optimization. *Mathematical Programming*, 49:189–211, 1991.
- [70] J. Renegar. A polynomial-time algorithm, based on Newton’s method, for linear programming. *Mathematical Programming*, 40:59–93, 1988.

- [71] R. T. Rockafellar and R. Wets. *Variational Analysis*. Springer, 1998.
- [72] M. Rom and M. Avriel. Properties of the sequential gradient-restoration algorithm (SGRA), part 2: Convergence analysis. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 62:99–126, 1989.
- [73] C. Roos, T. Terlaky, and J. P. Vial. *Theory and Algorithms for Linear Optimization: An Interior Point Approach*. John Wiley & Sons, Chichester, 1997.
- [74] J. B. Rosen. The gradient projection method for nonlinear programming, part 1, linear constraints. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 8:181–217, 1960.
- [75] D. F. Shanno and R. J. Vanderbei. Interior-point methods for nonconvex nonlinear programming: Orderings and higher-order methods. *Mathematical Programming*, 87(2):303–316, 2000.
- [76] T. Terlaky, editor. *Interior Point Methods of Mathematical Programming*. Kluwer Academic Press, 1996.
- [77] M. J. Todd. Potential-reduction methods in mathematical programming. Technical report, School of Operations Research and Industrial Engineering, Cornell University, Ithaca, NY, 1995.
- [78] M. Ulbrich, S. Ulbrich, and L. N. Vicente. A globally convergent primal-dual interior-point filter method for nonconvex nonlinear programming. Technical Report 00-11, Dep. de Matemática, Universidade de Coimbra, April 2000.
- [79] P. M. Vaidya. An algorithm for linear programming which requires $O((m+n)n^2 + (m+n)^{1.5}nL)$ arithmetic operations. *Mathematical Programming*, 47:175–201, 1990. Condensed version in : *Proceedings of the 19th Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, pages 29–38, 1987.
- [80] R. J. Vanderbei and D. F. Shanno. An interior-point algorithm for nonconvex nonlinear programming. *Computational Optimization and Applications*, 13:231–252, 1999.
- [81] S. A. Vavasis and Y. Ye. A primal-dual interior point method whose running time depends only on the constraint matrix. *Mathematical Programming*, 74:79–120, 1996.

- [82] A. Wächter and L. T. Biegler. Global and local convergence of line search filter methods for nonlinear programming. Technical Report B-01-09, CAPD, Department of Chemical Engineering Carnegie Mellon University Pittsburgh, August 2001.
- [83] H. Whitney. Functions differentiable on the boundaries of regions. *Ann. of Math.*, 35:482–485, 1934.
- [84] R. B. Wilson. *A Simplicial Algorithm for Convex Programming*. PhD thesis, Harvard University, Graduate School of Business Administration, 1963.
- [85] C. Witzgall, P. T. Boggs, and P. D. Domich. On the convergence behavior of trajectories for linear programming. In J. C. Lagarias and M. J. Todd, editors, *Mathematical Developments Arising from Linear Programming : Proceedings of a Joint Summer Research Conference held at Bowdoin College, Brunswick, Maine, USA, June/July 1988*, volume 114 of *Contemporary Mathematics*, pages 161–187. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, USA, 1990.
- [86] S. J. Wright. *Primal-Dual Interior-Point Methods*. SIAM Publication, Philadelphia, 1997.
- [87] H. Yamashita. A globally convergent primal-dual interior point method for constrained optimization. Technical report, Mathematical Systems Institute Inc., Tokyo, Japan, 1992. Revised in March 1994.
- [88] H. Yamashita, H. Yabe, and T. Tanabe. A globally and superlinearly convergent primal- dual interior point trust region method for large scale constrained optimization. Technical report, Mathematical Systems Inc., Shinjuku-ku, Tokyo, Japan, July 1997.