

Tópicos em penalidades exatas diferenciáveis

Ellen Hidemi Fukuda

TESE APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Programa: Doutorado em Matemática Aplicada

Orientador: Prof. Dr. Paulo J. S. Silva

Durante o desenvolvimento deste trabalho a autora recebeu auxílio financeiro da CAPES e da FAPESP, através do processo nº 2007/53471-0.

São Paulo, abril de 2011

Tópicos em penalidades exatas diferenciáveis

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por Ellen Hidemi Fukuda e aprovada pela comissão julgadora.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Paulo José da Silva e Silva (orientador)	IME-USP
Prof. Dr. Carlos Humes Júnior	IME-USP
Prof. Dr. Roberto Andreani	IMECC-UNICAMP
Prof. Dr. José Mario Martínez	IMECC-UNICAMP
Profa. Dra. Elizabeth Wegner Karas	UFPR

"Nobody realizes that some people expend tremendous energy merely to be normal."

– Albert Camus

Agradecimentos

"Let us be grateful to the people who make us happy; they are the charming gardeners who make our souls blossom." – Marcel Proust

Ao Paulo, meu orientador, por ter me guiado no caminho da pesquisa desde a graduação, pela amizade, paciência, compreensão e dedicação a este trabalho.

Ao Fukushima-sensei, meu supervisor do estágio sanduíche, pela generosidade, compreensão e pelos valiosos ensinamentos.

Ao Nino, pela pesquisa que realizamos e que continuaremos a realizar.

Ao Mauricio, por ter sido meu primeiro co-autor e incentivador de carreira.

Ao Carlos, Elizabeth, Martínez, Ernesto, Fernanda, Marcelo e Sandra, pela participação na banca de defesa e pelas dicas e correções da tese.

Ao Benar, Hayashi-sensei, Mituhiro e Walter, pelos conselhos e ensinamentos.

Ao Chicão, Diane, Lobato, Marina e Ricardo, pelos congressos e pelas conversas não necessariamente de otimização.

A todos que passaram pela salinha em algum momento (Alexandre, Alvaro, Bustamante, Cardonha, Carlos, Daniel, Domingos Jr., Domingos S., Erika, Fabrício, Felipe, Gabriel, Gustavo, Hugo, Jan, Márcio, Mariana, Maya, Phillipe, Takashi, Tengan, Wanderley, Wellington, etc.), pelas conversas e pelo café do dia-a-dia.

À Yagura-san, pela atenção e preocupação em relação ao meu estágio sanduíche.

Ao Okuno-san, pelo grande apoio que me deu enquanto estive no Japão.

Aos colegas da universidade de Kyoto (Emad-san, Hu-san, Morita-san, Nishimori-san, Pierre, etc.), pela tranquilidade das nossas conversas.

À Gisely, Jocasta, Aline e Vinicius, pelos ótimos momentos que tive no Rio.

Aos imescosTM (Andrei, David, Luciana, Michel, Nelson, Phalkon, Roberta, Roger, Sandro, Sílvia, Ulisses, Wagner e Wendel), pela presença online constante.

À Cris e ao Marcel, pela confiança e pelas conversas no Skype.

Ao Antonio Carlos, Gordana, Marcelo e Salem, pelos cinemas, jantares, e principalmente, pela amizade.

Ao Leo, Rafael, Otávio, Ana, Débora e Gisele, pelas refeições e noites jogando Wii.

Ao Shota-san, pelos ótimos passeios e pela amizade que ultrapassa a distância.

À Ju, por ter sido uma amiga memorável ao longo desses anos.

Aos meus pais e ao Yuki (cachorro da família), por estarem sempre presentes.

Obrigada a todos.

Resumo

Durante as décadas de 70 e 80, desenvolveram-se métodos baseados em penalidades exatas diferenciáveis para resolver problemas de otimização não linear com restrições. Uma desvantagem dessas penalidades é que seus gradientes contêm termos de segunda ordem em suas fórmulas, o que impede a utilização de métodos do tipo Newton para resolver o problema. Para contornar essa dificuldade, utilizamos uma ideia de construção de penalidade exata para desigualdades variacionais, introduzida recentemente por André e Silva. Essa construção consiste em incorporar um estimador de multiplicadores, proposto por Glad e Polak, no lagrangiano aumentado para desigualdades variacionais.

Nesse trabalho, estendemos o estimador de multiplicadores para restrições gerais de igualdade e desigualdade, e enfraquecemos a hipótese de regularidade. Como resultado, obtemos uma função penalidade exata continuamente diferenciável e uma nova reformulação do sistema KKT associado a problemas não lineares. A estrutura dessa reformulação permite a utilização do método de Newton semi-suave, e a taxa de convergência local superlinear pode ser provada. Além disso, verificamos que a penalidade exata construída pode ser usada para globalizar o método, levando a uma abordagem do tipo Gauss-Newton. Por fim, realizamos experimentos numéricos baseando-se na coleção CUTE de problemas de teste.

Palavras-chave: estimador de multiplicadores, método de Newton semi-suave, penalidades exatas, programação não linear, reformulação de sistemas KKT.

Abstract

During the 1970's and 1980's, methods based on differentiable exact penalty functions were developed to solve constrained optimization problems. One drawback of these functions is that they contain second-order terms in their gradient's formula, which do not allow the use of Newton-type methods. To overcome such difficulty, we use an idea for construction of exact penalties for variational inequalities, introduced recently by André and Silva. This construction consists on incorporating a multipliers estimate, proposed by Glad and Polak, in the augmented Lagrangian function for variational inequalities.

In this work, we extend the multipliers estimate to deal with both equality and inequality constraints and we weaken the regularity assumption. As a result, we obtain a continuous differentiable exact penalty function and a new equation reformulation of the KKT system associated to nonlinear problems. The formula of such reformulation allows the use of semismooth Newton method, and the local superlinear convergence rate can be also proved. Besides, we note that the exact penalty function can be used to globalize the method, resulting in a Gauss-Newton-type approach. We conclude with some numerical experiments using the collection of test problems CUTE.

Keywords: exact penalties, multipliers estimate, nonlinear programming, reformulation of KKT systems, semismooth Newton method.

Sumário

Notações	1
1 Introdução	3
2 Preliminares	6
2.1 Elementos da otimização	6
2.2 Penalidades exatas	11
2.3 Funções semi-suaves	13
2.4 Método de Newton semi-suave	21
3 A penalidade exata	26
3.1 Estimador de multiplicadores	27
3.2 Construção da penalidade exata	33
3.3 Equivalência com pontos KKT	36
3.4 Resultados de exatidão	42
4 O algoritmo	48
4.1 Atualização do parâmetro de penalidade	48
4.2 Convergência local	53
4.3 Globalização do método	61
5 Experimentos numéricos	65
5.1 Detalhes de implementação	65
5.2 Comparação numérica	68
5.3 Comparação dos estimadores de multiplicadores	71
6 Conclusão	75

Notações

Matriz: Representamos por letras maiúsculas (A, B, \dots). A dimensão de uma matriz é $m \times n$ se ela possui m linhas e n colunas. Assim, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ se A possui dimensão $m \times n$ e seus elementos são números reais.

Matriz diagonal: Uma matriz diagonal de dimensão $n \times n$ com elementos da diagonal $c_i \in \mathbb{R}$, com $i = 1, \dots, n$, é denotada por $\text{diag}(c_1, \dots, c_n)$.

Matriz identidade: É representada por I_n quando ela tem dimensão $n \times n$. Quando a dimensão estiver implícita, denotamos simplesmente por I .

Transposta: A transposta de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é denotada por A^\top .

Vetor: Representamos por letras minúsculas (a, b, \dots). Além disso, $x \in \mathbb{R}^n$ se $x = (x_1, \dots, x_n)^\top = (x_i)_{i=1}^n$ possui dimensão n e $x_i \in \mathbb{R}$ para $i = 1, \dots, n$.

Mínimo e máximo: Dados $x, y \in \mathbb{R}^n$, denotamos por $\min(x, y)$ e $\max(x, y)$ aos vetores com i -ésimos componentes $\min(x_i, y_i)$ e $\max(x_i, y_i)$, respectivamente.

Gradiente e hessiana: Dada uma função $\phi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, o gradiente e a hessiana de ϕ em $x \in \mathbb{R}^n$, quando existem, são denotados por $\nabla\phi(x)$ e $\nabla^2\phi(x)$, respectivamente.

Gradiente e hessiana com respeito a uma variável: Se $\phi: \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2} \rightarrow \mathbb{R}$ e $(x, y) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2}$, então $\nabla_x\phi(x, y)$ e $\nabla_{xx}^2\phi(x, y)$ correspondem ao gradiente e à hessiana com respeito à primeira variável.

Jacobiana: Considerando um mapeamento $\phi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, ou seja, com $\phi \doteq (\phi_i)_{i=1}^m$ e $\phi_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$, a jacobiana de ϕ em $x \in \mathbb{R}^n$, quando existe, é dada por $J\phi(x) \doteq [\nabla\phi_1(x), \dots, \nabla\phi_m(x)]^\top$.

Conjunto dos reais positivos: É denotado por $\mathbb{R}_{++} \doteq \{c \in \mathbb{R}: c > 0\}$.

Produto interno: Dados dois vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$, denotamos o produto interno (euclidiano) de x e y por $\langle x, y \rangle \doteq x^\top y$.

Vetores ortogonais: Quando x e y são ortogonais entre si, ou seja, quando $\langle x, y \rangle = 0$, escrevemos $x \perp y$.

Norma de vetor: A norma (euclidiana) de $x \in \mathbb{R}^n$ é dada por $\|x\| \doteq \langle x, x \rangle^{1/2}$. Ademais, a norma infinita de x é denotada por $\|x\|_\infty \doteq \max_{i=1, \dots, n} |x_i|$.

Norma de matriz: A norma (euclidiana) de $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida e denotada por $\|A\| \doteq \sup_{x \neq 0} \|Ax\|/\|x\|$.

Subespaço ortogonal: Dado um subespaço $U \subset \mathbb{R}^n$, denotamos o subespaço ortogonal a ele por U^\perp .

Projeção ortogonal: Denotamos por P_U e P_{U^\perp} às projeções ortogonais nos subespaços U e U^\perp , respectivamente. Note que para todo $x \in \mathbb{R}^n$, podemos escrever $x = P_U(x) + P_{U^\perp}(x)$.

Função NCP: Uma função $\phi: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é denominada NCP se, para todo $x, y \in \mathbb{R}^n$, $\phi(x, y) = 0$ se, e somente se, $(x, y) \geq 0$ e $x \perp y$. As funções mínimo e a de Fischer-Burmeister são exemplos de funções NCP [FP03a, seção 1.5.1].

Sequência: As sequências de escalares $c_k \in \mathbb{R}$, vetores $x^k \in \mathbb{R}^n$ e matrizes $A^k \in \mathbb{R}^{m \times n}$ são denotadas, respectivamente, por $\{c_k\}$, $\{x^k\}$ e $\{A^k\}$. Observe a diferença entre x^k e x_k . O primeiro denota o k -ésimo iterado de uma sequência de vetores (no caso, $\{x^k\}$), enquanto que o segundo é um escalar, que indica a k -ésima coordenada do vetor $x \in \mathbb{R}^n$.

Capítulo 1

Introdução

Considere o seguinte problema de programação não linear:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.a.} & x \in X, \end{array} \quad (\text{PNL})$$

sendo que o conjunto viável é não vazio e definido por

$$X \doteq \{x \in \mathbb{R}^n : h(x) = 0, g(x) \leq 0\},$$

e $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ são funções de classe \mathcal{C}^2 . Uma maneira de resolver esse problema é utilizando métodos baseados em penalidades, tais como as penalidades quadráticas, os lagrangianos aumentados e as penalidades exatas. Esses últimos consistem em transformar o problema original restrito em um único problema irrestrito. Basicamente, uma função $w_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, que depende de um parâmetro positivo $c \in \mathbb{R}$, é uma *penalidade exata* associada a (PNL), se existe uma escolha adequada do coeficiente c tal que a minimização irrestrita de w_c recupera uma solução de (PNL).

Um exemplo bem conhecido é a penalidade exata proposta por Zangwill [Zan67]. Pode-se mostrar que os minimizadores do problema restrito (PNL) são soluções do seguinte problema irrestrito:

$$\min_x \left[f(x) + c \max \{0, g_1(x), \dots, g_m(x), |h_1(x)|, \dots, |h_p(x)|\} \right],$$

sob condições razoáveis e quando c é um escalar positivo suficientemente grande

[Ber99, seção 4.3.1]. Observamos que não é fácil achar o valor do parâmetro de penalidade c que garante a recuperação das soluções de (PNL). Além disso, a função máximo faz com que essa penalidade seja não diferenciável, exigindo métodos especiais para resolver o problema irrestrito.

Para contornar tal dificuldade, diversos autores propuseram fórmulas para penalidades exatas que sejam continuamente diferenciáveis. As primeiras dessas penalidades foram introduzidas por Fletcher em [Fle70] e por Glad e Polak em [GP79], respectivamente para problemas com restrições de igualdade e com restrições de igualdade e desigualdade. Outra contribuição importante foi dada por Mukai e Polak em [MP75]. Nos problemas irrestritos associados a essas penalidades, as variáveis estão no mesmo espaço das variáveis do problema original. Uma abordagem alternativa é realizar a minimização irrestrita no produto do espaço das variáveis e dos multiplicadores. Esse último caso, chamado método do *lagrangiano aumentado exato*, foi introduzido posteriormente por Di Pillo e Grippo [DPG79, DPG82].

Considerando apenas problemas com restrições de igualdade, esses autores formularam o problema irrestrito da seguinte forma:

$$\min_{x, \mu} \left[f(x) + \langle \mu, h(x) \rangle + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2 + \frac{1}{2} \left\| \mathcal{M}(x)(\nabla f(x) + Jh(x)^\top \mu) \right\|^2 \right],$$

onde $\mathcal{M}(x) \in \mathbb{R}^{\ell \times n}$ é uma matriz de classe \mathcal{C}^2 com $p \leq \ell \leq n$ e tal que $\mathcal{M}(x)Jh(x)^\top$ tem posto completo. Escolhas apropriadas de $\mathcal{M}(x)$ fazem com que a função objetivo acima seja quadrática na variável dual μ . Nesse caso, podemos escrever o multiplicador em termos de x e incorporá-lo novamente na função, obtendo assim um problema irrestrito no espaço das variáveis originais. Algumas dessas escolhas de $\mathcal{M}(x)$ recuperam a penalidade exata de Fletcher e de Mukai e Polak.

Para problemas com restrições de desigualdade, pode-se adicionar variáveis de folga e escrevê-las em termos de x através de uma escolha adequada da matriz $\mathcal{M}(x)$. No entanto, não se conhece uma forma de $\mathcal{M}(x)$ que também isole o multiplicador. Com isso, Di Pillo e Grippo propuseram uma nova penalidade baseando-se no estimador de multiplicadores dado por Glad e Polak [GP79]. A idéia, apresentada em [DPG85] e [DPG89], consiste em construir uma penalidade exata incorporando tal estimador na função lagrangiana aumentada de Hestenes, Powell e Rockafellar [Hes69, Pow69, Roc74]. A fim de contornar algumas limitações teóricas de tal penalidade, Lucidi propôs em [Luc92] uma outra penalidade exata

para problemas não lineares com restrições de desigualdade.

A mesma ideia foi estendida recentemente por André e Silva [AS10] para resolver desigualdades variacionais com o conjunto viável definido por restrições funcionais de desigualdade. Em seu trabalho, eles incorporaram o estimador de multiplicadores de Glad e Polak no lagrangiano aumentado para desigualdades variacionais, proposta por Auslender e Teboulle [AT00]. Se o problema variacional advém das condições necessárias de primeira ordem de um problema de otimização, então, essa penalidade é equivalente ao gradiente da penalidade de Di Pillo e Grippo a menos de termos de segunda ordem. Esse fato é importante no ponto de vista numérico pois, do contrário, teríamos que lidar com termos de terceira ordem quando utilizarmos métodos de resoluções de equações de segunda ordem, como o método de Newton.

Nessa tese, estudamos penalidades exatas continuamente diferenciáveis tomando como base os artigos citados acima. Estendemos a penalidade exata de André e Silva para resolver problemas de otimização do tipo (PNL), ou seja, com ambas as restrições de igualdade e desigualdade. Também adaptamos o estimador de multiplicadores de Glad e Polak de modo a enfraquecer uma hipótese de regularidade e o comparamos com um estimador proposto por Lucidi em [Luc92]. A função obtida é semi-suave ou, sob certas condições, fortemente semi-suave, o que permite o uso do método de Newton para tais tipos de funções [FP03b, capítulo 7]. Estabelecemos resultados de exatidão e provamos que a convergência do método é superlinear (ou, em alguns casos, quadrática). Ademais, indicamos uma maneira de globalizar o método com uma função de mérito específica que faz com que ele seja interpretado como do tipo Gauss-Newton.

Esse texto está organizado da seguinte forma. No capítulo 2, abordaremos os conceitos básicos e os resultados necessários para a elaboração do método. No capítulo 3, construiremos a função penalidade exata e provaremos a sua exatidão. O capítulo 4, por sua vez, será voltado ao método em si e aos resultados de convergência associados. No capítulo 5, apresentaremos alguns experimentos numéricos com o método proposto. Terminaremos no capítulo 6, com a conclusão final do trabalho e do doutorado.

Capítulo 2

Preliminares

Apresentaremos inicialmente alguns tópicos essenciais para o desenvolvimento dos próximos capítulos. Mostraremos, na seção 2.1, algumas notações e definições associadas ao problema (PNL), em particular, as condições de qualificação de restrições e as condições de segunda ordem que serão utilizadas no trabalho. Na seção 2.2, abordaremos formalmente o conceito de penalidade exata. Finalizamos com as seções 2.3 e 2.4, onde focaremos, respectivamente, no conceito de funções semi-suaves e na extensão do método de Newton para tais tipos de funções.

2.1 Elementos da otimização

Ao longo desse texto, referimos a soluções ótimas locais simplesmente como soluções ótimas, a menos que queiramos distinguir explicitamente o fato de ser local ou global. Começemos então a descrever algumas notações associadas ao problema (PNL). Considere $\lambda \in \mathbb{R}^m$ e $\mu \in \mathbb{R}^p$ os multiplicadores de Lagrange associados às restrições de desigualdade e igualdade, respectivamente. A *função lagrangiana* associada é então definida por

$$L(x, \lambda, \mu) \doteq f(x) + \langle \lambda, g(x) \rangle + \langle \mu, h(x) \rangle. \quad (2.1)$$

Seja $x^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução ótima de (PNL) que satisfaz uma condição de qualificação. As condições necessárias de primeira ordem para x^* indicam existência de

multiplicadores $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ e $\mu^* \in \mathbb{R}^p$ tais que

$$\begin{aligned}\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) &= 0, \\ h(x^*) &= 0, \\ 0 &\geq g(x^*) \perp \lambda^* \geq 0.\end{aligned}$$

Em particular, $g(x^*) \perp \lambda^*$ é denominada condição de *complementaridade*. Ademais, dizemos que (x^*, λ^*, μ^*) é uma tripla de *Karush-Kuhn-Tucker* (KKT) associada a (PNL).

Apresentaremos agora algumas condições de qualificação (de restrições) que serão citadas posteriormente nesse trabalho. Referimo-nos ao artigo [AMS05] e aos livros [Ber99, NW99] para um estudo aprofundado de algumas dessas condições. Antes, considere a seguinte notação para o conjunto dos índices das restrições de desigualdade ativas num ponto $x \in \mathbb{R}^n$:

$$I_=(x) \doteq \{i \in \{1, \dots, m\} : g_i(x) = 0\}. \quad (2.2)$$

Definição 2.1. *Um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ satisfaz a condição de qualificação de independência linear (LICQ) se os gradientes*

$$\nabla g_i(x), i \in I_=(x), \quad \nabla h_i(x), i = 1, \dots, p,$$

são linearmente independentes.

Definição 2.2. *Um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ satisfaz a condição de qualificação de Mangasarian-Fromovitz (MFCQ) se existe $d \in \mathbb{R}^n$ tal que*

$$\langle \nabla g_i(x), d \rangle < 0, i \in I_=(x), \quad \langle \nabla h_i(x), d \rangle = 0, i = 1, \dots, p,$$

e os gradientes $\nabla h_i(x), i = 1, \dots, p$ são linearmente independentes.

Ambas as condições acima são clássicas na literatura de otimização. Além disso, é fácil ver que LICQ implica em MFCQ e que existem contra-exemplos para a implicação contrária. Uma outra condição mais restritiva que MFCQ é definida a seguir, sendo que a diferença está apenas na troca do conjunto $I_=(x)$ por $I_{\geq}(x)$,

o qual é definido por

$$I_{\geq}(x) \doteq \{i \in \{1, \dots, m\} : g_i(x) \geq 0\}. \quad (2.3)$$

Definição 2.3. *Um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ satisfaz a condição de qualificação de Mangasarian-Fromovitz estendida (EMFCQ) se existe $d \in \mathbb{R}^n$ tal que*

$$\langle \nabla g_i(x), d \rangle < 0, \quad i \in I_{\geq}(x), \quad \langle \nabla h_i(x), d \rangle = 0, \quad i = 1, \dots, p,$$

e os gradientes $\nabla h_i(x)$, $i = 1, \dots, p$ são linearmente independentes.

Pelo teorema de alternativa de Motzkin [Man69], podemos observar que a condição EMFCQ em $x \in \mathbb{R}^n$ equivale a não existência de escalares $u_i \geq 0$, $i \in I_{\geq}(x)$ e v_i , $i = 1, \dots, p$ que satisfazem

$$\sum_{i \in I_{\geq}(x)} u_i \nabla g_i(x) + \sum_{i=1}^p v_i \nabla h_i(x) = 0,$$

com u_i , $i \in I_{\geq}(x)$ e v_i , $i = 1, \dots, p$ não todos nulos. Naturalmente, substituindo $I_{\geq}(x)$ por $I_{=}(x)$ na igualdade acima, obtemos uma afirmação equivalente para MFCQ.

Mostraremos agora outros tipos de condições associadas a uma tripla KKT (x^*, λ^*, μ^*) . Para isso, algumas notações são necessárias. O conjunto dos índices das restrições ativas e degeneradas (ou seja, ativas com multiplicador associado nulo) em x^* são denotados, respectivamente, por

$$I^* \doteq I_{=}(x^*) \quad \text{e} \quad I_0^* \doteq \{i \in I_{=}(x^*) : \lambda_i^* = 0\}. \quad (2.4)$$

Para qualquer $I \subseteq I_0^*$, definimos ainda os seguintes conjuntos:

$$U_I \doteq \{d \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla g_i(x^*), d \rangle = 0, \quad i \in I^* \setminus I, \\ \langle \nabla h_i(x^*), d \rangle = 0, \quad i = 1, \dots, p\} \quad \text{e} \quad (2.5)$$

$$U_0 \doteq \{d \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla g_i(x^*), d \rangle \leq 0, \quad i \in I_0^*\}. \quad (2.6)$$

Lembremos ainda que se x^* é solução ótima de (PNL) e satisfaz uma condição de

qualificação, então

$$\langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d, d \rangle \geq 0, \quad \text{para todo } d \in U_{I_0^*} \cap U_0. \quad (2.7)$$

Ela é denominada *condição necessária de segunda ordem* para (PNL) [NW99, teorema 12.5].

A primeira definição que citaremos é parecida com essa última condição necessária. A diferença está na ausência de uma condição de qualificação e na substituição da desigualdade pela desigualdade estrita.

Definição 2.4. *Uma tripla KKT (x^*, λ^*, μ^*) satisfaz a condição suficiente de segunda ordem se*

$$\langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d, d \rangle > 0, \quad \text{para todo } d \in U_{I_0^*} \cap U_0, d \neq 0.$$

Conforme seu próprio nome, essa é uma condição suficiente, ou seja, se ela é satisfeita em x^* , então x^* é um mínimo local estrito de (PNL) [NW99, seção 12.4]. A condição que veremos a seguir é claramente mais forte que essa e é utilizada, por exemplo, em alguns trabalhos recentes sobre programação quadrática sequencial [JTHZ05, Wri02].

Definição 2.5. *Uma tripla KKT (x^*, λ^*, μ^*) satisfaz a condição forte e suficiente de segunda ordem se*

$$\langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d, d \rangle > 0, \quad \text{para todo } d \in U_{I_0^*}, d \neq 0.$$

A última condição que mostraremos aqui foi proposta por Facchinei, Kanzow e Palagi em [FKP07]. Esses autores tinham o objetivo de resolver problemas de desigualdades variacionais com restrições funcionais de desigualdade. A seguir, traduzimos a definição deles para o contexto de otimização.

Definição 2.6. *Uma tripla KKT (x^*, λ^*, μ^*) satisfaz a condição de regularidade fraca se, para todo $I \subseteq I_0^*$, a Hessiana $\nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)$ é não singular no subespaço U_I ou, em outras palavras, se*

$$P_{U_I} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d \neq 0, \quad \text{para todo } d \in U_I, d \neq 0,$$

e para todo subconjunto $I \subseteq I_0^*$.

Finalizamos o assunto com a relação entre as duas últimas condições citadas.

Proposição 2.7. *Sejam $x^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução ótima de (PNL) que satisfaz uma condição de qualificação, e $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ e $\mu^* \in \mathbb{R}^p$ os multiplicadores associados. Então, as seguintes afirmações são verdadeiras.*

- (a) *Se (x^*, λ^*, μ^*) satisfaz a condição forte e suficiente de segunda ordem, então ela satisfaz a regularidade fraca.*
- (b) *A regularidade fraca em (x^*, λ^*, μ^*) não necessariamente implica na condição forte e suficiente de segunda ordem.*

Demonstração.

[(a)] Como $I \subseteq I_0^*$ implica $U_I \subseteq U_{I_0^*}$, a condição forte e suficiente de segunda ordem pode ser escrita como

$$\langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d, d \rangle > 0, \quad \text{para todo } d \in U_I, d \neq 0 \text{ e todo } I \subseteq I_0^*.$$

Fixe $I \subseteq I_0^*$ e $d \in U_I$ com $d \neq 0$. Então, por hipótese,

$$\begin{aligned} & \langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d, d \rangle > 0 \\ \Leftrightarrow & \left\langle P_{U_I} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d + P_{U_I^\perp} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d, d \right\rangle > 0. \end{aligned}$$

Como $P_{U_I^\perp}$ é simétrica e $d \in U_I$, temos

$$\left\langle P_{U_I^\perp} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d, d \right\rangle = \left\langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d, P_{U_I^\perp} d \right\rangle = 0,$$

o que implica que

$$\langle P_{U_I} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d, d \rangle > 0.$$

Isso mostra que $P_{U_I} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)d \neq 0$, indicando que a condição de regularidade fraca é satisfeita.

[(b)] Considere o seguinte contra-exemplo:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \doteq -x_2 \\ \text{s.a.} \quad & g_1(x) \doteq -x_1^2 + x_2 \\ & g_2(x) \doteq -x_1 \\ & g_3(x) \doteq x_1, \end{aligned}$$

com $n = 2$, $m = 3$ e $p = 0$. Nesse caso, $x^* = (0, 0)^\top$ e $I^* = \{1, 2, 3\}$. Das condições KKT, temos:

$$0 = \nabla_x L(x^*, \lambda^*) = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} + \lambda_1^* \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} + \lambda_2^* \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} + \lambda_3^* \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

ou seja, $\lambda_1^* = 1$ e $\lambda_2^* = \lambda_3^*$. Tomando o caso em que $\lambda_2^* = \lambda_3^* = 0$, temos $I_0^* = \{2, 3\}$ e assim,

$$U_0 = \{d \in \mathbb{R}^2: d_1 = 0\}, \quad U_{I_0^*} = \{d \in \mathbb{R}^2: d_2 = 0\},$$

e $U_{\{2\}} = U_{\{3\}} = U_\emptyset = \{(0, 0)^\top\}$. Para $I = I_0^*$, temos:

$$P_{U_{I_0^*}} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d = P_{U_{I_0^*}} \begin{bmatrix} -2d_1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2d_1 \\ 0 \end{bmatrix} \neq 0,$$

o que mostra que a regularidade fraca é satisfeita. No entanto, como

$$\langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d, d \rangle = -2d_1^2 \leq 0,$$

a condição forte e suficiente de segunda ordem não é satisfeita. □

2.2 Penalidades exatas

Conforme discutimos na introdução desse trabalho, os métodos baseados em penalidades exatas consistem na substituição do problema original restrito por um único problema irrestrito. Essencialmente, uma penalidade exata para (PNL) é uma função $w_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que o problema irrestrito penalizado

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} w_c(x) \tag{2.8}$$

resulta em uma solução de (PNL), para um valor de parâmetro $c > 0$. Espera-se ainda que a escolha desse parâmetro seja feita de modo que essa propriedade seja válida para todo c acima de um certo limiar.

No entanto, existem, na literatura, mais de um nível de exatidão para as penalidades. Adaptamos aqui as definições de exatidão dadas por Di Pillo e Grippo em [DPG89], removendo o conjunto compacto exógeno necessário em seu artigo. Inicialmente, considere as seguintes notações:

Notação 2.8. Denotamos por \mathcal{G}_f e \mathcal{L}_f os conjuntos dos minimizadores globais e locais do problema (PNL), respectivamente. Além disso, para cada $c > 0$, denotamos os conjuntos dos minimizadores globais e locais do problema penalizado (2.8), por $\mathcal{G}_w(c)$ e $\mathcal{L}_w(c)$.

Com isso, podemos apresentar com precisão as definições de penalidades existentes.

Definição 2.9. Uma função $w_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma penalidade exata fraca para o problema (PNL) se existe $\bar{c} > 0$ tal que

$$\mathcal{G}_w(c) = \mathcal{G}_f, \quad \text{para todo } c \geq \bar{c}.$$

Note que a penalidade exata fraca diz respeito à equivalência das soluções globais apenas. Como essas soluções não são usualmente garantidas pelos métodos de otimização sem restrições, essa definição é pouco atraente. A seguinte definição é mais interessante, por levar em conta os minimizadores locais dos problemas.

Definição 2.10. Uma função $w_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma penalidade exata para o problema (PNL) se existe $\bar{c} > 0$ tal que

$$\mathcal{G}_w(c) = \mathcal{G}_f \quad \text{e} \quad \mathcal{L}_w(c) \subseteq \mathcal{L}_f, \quad \text{para todo } c \geq \bar{c}.$$

Observe que não é necessário que todo minimizador local de (PNL) seja também solução local do problema (2.8). Se, mesmo assim quisermos substituir $\mathcal{L}_w(c) \subseteq \mathcal{L}_f$ por $\mathcal{L}_w(c) = \mathcal{L}_f$ na definição acima, então w_c seria considerada uma *penalidade exata forte*. Essa última definição não será, no entanto, utilizada nesse trabalho.

Na prática, o limiar \bar{c} das definições acima não pode ser encontrado facilmente de forma direta. Dessa forma, os métodos baseados em penalidades exatas também contam com uma sequência de atualizações do parâmetro de penalidade e consequentes minimizações irrestritas. No entanto, sabe-se que, na prática, poucas

atualizações são necessárias [GP79]. No capítulo 5, confirmaremos esse resultado com experimentos numéricos utilizando a penalidade exata que será construída.

2.3 Funções semi-suaves

Nesta seção, estamos interessados nas propriedades associadas a funções semi-suaves e fortemente semi-suaves. Estas foram introduzidas por Mifflin para funcionais reais [Mif77] e posteriormente estendidas por Qi e Sun para mapeamentos vetoriais [QS93]. Sua definição engloba mapeamentos suaves e funções muito comuns na prática, como a função mínimo (ou máximo), a norma e a projeção em um conjunto poliedral.

O estudo dessas funções é importante para nós, em particular porque estamos interessados em resolver o seguinte sistema de equações:

$$W(x) = 0, \tag{2.9}$$

onde $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é, por enquanto, apenas uma função localmente Lipschitz contínua. Quando W é suave, uma abordagem bem conhecida para resolvê-lo é o *método de Newton*. A cada iteração k desse método, os iterados são atualizados da seguinte forma:

$$x^{k+1} \doteq x^k + d^k,$$

onde as direções são definidas por

$$d^k \doteq -JW(x^k)^{-1}W(x^k).$$

No caso em que W é não suave, a jacobiana $JW(x^k)$ pode não existir. Nosso interesse está, portanto, na extensão do método de Newton para tais tipos de funções. Para isso, consideramos, nesta seção, algumas definições e propriedades iniciais, que podem também ser conferidas em [FP03a, FP03b, Qi93].

Definição 2.11. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função localmente Lipschitz contínua em $x \in \mathbb{R}^n$ e denote por D_W o conjunto dos pontos diferenciáveis de W . Então, o B-subdiferencial de W em x é definido por*

$$\partial_B W(x) \doteq \left\{ H \in \mathbb{R}^{n \times n} : H = \lim_{D_W \ni x^k \rightarrow x} JW(x^k) \right\}.$$

Note que o conjunto $\partial_B W(x)$ é não vazio, pois sempre existe uma sequência $\{x^k\}$ de pontos diferenciáveis acima. Esse fato segue do teorema de Rademacher [FP03a, teorema 3.1.1], que diz que, dado um conjunto aberto $U \subseteq \mathbb{R}^n$, se $W: U \rightarrow \mathbb{R}$ é localmente Lipschitz contínua, então W é (Fréchet-)diferenciável em quase todo U . Em outras palavras, os pontos de U em que W é não diferenciável formam um conjunto de medida nula. Observe ainda que a definição acima (e as posteriores) também pode ser escrita para uma função $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ com $n \neq m$. Optamos por enunciar dessa forma por utilizarmos somente o caso particular.

Definição 2.12. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função localmente Lipschitz contínua em $x \in \mathbb{R}^n$. A jacobiana generalizada (de Clarke) de W em x é dada por*

$$\partial W(x) \doteq \text{conv } \partial_B W(x),$$

onde conv denota fecho convexo*.

A definição acima mostra que se W é continuamente diferenciável em x , então $\partial W(x)$ se reduz a $\{JW(x)\}$. Além disso, $\partial W(x)$ é não vazia, convexa e compacta [FP03b, proposição 7.4.1] para todo x . Referimo-nos ainda a [FP03b, seção 7.1] para as propriedades e as regras de cálculo associadas à jacobiana generalizada. Ilustramos aqui apenas o teorema do tipo valor médio [FP03b, proposição 7.1.16] para funções não necessariamente suaves.

Proposição 2.13. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função localmente Lipschitz contínua num aberto. Para todo $x', x \in \mathbb{R}^n$ com o segmento $[x', x]$ contido nesse aberto, existem $z^i \in (x, x')$ e $\alpha_i \geq 0$, $i = 1, \dots, n$, com $\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1$ tais que*

$$W(x') - W(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i H_i(x' - x),$$

onde $H_i \in \partial W(z^i)$ para todo $i = 1, \dots, n$.

A jacobiana generalizada é utilizada para estender resultados clássicos de funções suaves para funções localmente Lipschitz contínuas. A ideia para resolver (2.9)

*Relembramos que o fecho convexo de um conjunto não vazio S é a intersecção de todos os conjuntos convexos que contêm S . (Veja [HUL01, definição 1.3.2] ou [Roc70, teorema 2.3].) Observamos ainda que $\partial_B W(x) \neq \emptyset$, o que faz com que a definição de $\partial W(x)$ faça sentido.

é que as direções sejam tomadas da seguinte forma:

$$d^k \doteq -H_k^{-1}W(x^k), \quad \text{com } H_k \in \partial W(x^k). \quad (2.10)$$

No entanto, não podemos estender o método de Newton para equações não suaves utilizando simplesmente $\partial W(x^k)$, pois, em geral, o modelo linear definido por um elemento $H_k \in \partial W(x^k)$ não define uma boa aproximação de W . Em outras palavras, a igualdade

$$\lim_{x \rightarrow x^k} \frac{W(x) + H_k(x^k - x) - W(x^k)}{\|x - x^k\|} = 0$$

não é sempre satisfeita.

Funções localmente Lipschitz contínuas com jacobianas generalizadas que definem essa boa aproximação são denominadas *semi-suaves*. Antes de apresentarmos formalmente essa classe de funções, consideramos outras duas definições importantes. Primeiro, denotamos a *derivada direcional* de W em $x \in \mathbb{R}^n$ na direção $d \in \mathbb{R}^n$ como $W'(x; d)$, ou seja,

$$W'(x; d) \doteq \lim_{t \downarrow 0} \frac{W(x + td) - W(x)}{t};$$

e observamos que $W'(x; \cdot)$ é positivamente homogênea, isto é, $W'(x; td) = tW'(x; d)$ para todo $t \geq 0$. Além disso, dizemos que W é *direcionalmente diferenciável* em um ponto x se sua derivada direcional existe para todas as direções a partir de x , ou seja, se $W'(x; d)$ existe para todo d .

Definição 2.14. *Uma função $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é B-diferenciável (ou Bouligand-diferenciável) em $x \in \mathbb{R}^n$ se for direcionalmente diferenciável em x e*

$$\lim_{d \rightarrow 0} \frac{W(x + d) - W(x) - W'(x; d)}{\|d\|} = 0.$$

Para funções localmente Lipschitz contínuas e no espaço de dimensão finita \mathbb{R}^n , Shapiro [Sha90] mostrou que funções B-diferenciáveis e direcionalmente diferenciáveis são equivalentes. Observe ainda que podemos reescrever a igualdade acima usando a notação de “o” pequeno, ou seja,

$$W(x + d) = W(x) + W'(x; d) + o(\|d\|). \quad (2.11)$$

Com respeito a essas funções, o seguinte resultado pode ser estabelecido.

Lema 2.15. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função B-diferenciável numa vizinhança de $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Então,*

(a) $W'(x; \cdot)$ é Lipschitz contínua para todo $x \in \mathbb{R}^n$ na vizinhança de \bar{x} .

(b) Para todo $d \in \mathbb{R}^n$, existe $H \in \partial W(\bar{x})$ tal que $W'(\bar{x}; d) = Hd$.

Demonstração.

[(a)] Seja L a constante de Lipschitz de W em uma vizinhança de \bar{x} e x um vetor pertencente a essa vizinhança. Pela definição de derivada direcional, para todo $d, d' \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} \|W'(x; d) - W'(x; d')\| &= \left\| \lim_{t \downarrow 0} \frac{W(x + td) - W(x + td')}{t} \right\| \\ &\leq \lim_{t \downarrow 0} \frac{\|W(x + td) - W(x + td')\|}{t} \\ &\leq L\|d - d'\|, \end{aligned}$$

o que mostra que $W'(x; \cdot)$ é Lipschitz contínua.

[(b)] Considere uma sequência de escalares positivos $\{t_k\} \rightarrow 0$. Observe que pelo teorema do tipo valor médio (proposição 2.13), para todo k , existem $\alpha_i^k \geq 0$, $i = 1, \dots, n$, com $\sum_{i=1}^n \alpha_i^k = 1$ e $H_i^k \in \partial W(\bar{x} + t'_{i,k}d)$ com $t'_{i,k} \in (0, t_k)$ tais que

$$W(\bar{x} + t_k d) - W(\bar{x}) = \sum_{i=1}^n t_k \alpha_i^k H_i^k d.$$

Note que $\{H_i^k\}_k$ é limitada para todo $i = 1, \dots, n$ [FP03b, proposição 7.1.4]. Sem perda de generalidade, considere que cada $\{H_i^k\}_k$ converge para H_i^* , que pertence a $\partial W(\bar{x})$, pois a jacobiana generalizada é fechada. Além disso, novamente sem perda de generalidade, considere $\{\alpha_i^k\}_k \rightarrow \alpha_i^*$, o que implica em $\sum_{i=1}^n \alpha_i^* = 1$. Dividindo a igualdade anterior por t_k e tomando $k \rightarrow \infty$, temos:

$$W'(\bar{x}; d) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{W(\bar{x} + t_k d) - W(\bar{x})}{t_k} = \sum_{i=1}^n \alpha_i^* H_i^* d.$$

Definindo $H \doteq \sum_{i=1}^n \alpha_i^* H_i^*$, temos a igualdade do enunciado. Mais ainda, pela convexidade da jacobiana generalizada, temos que $H \in \partial W(\bar{x})$, o que conclui a prova. \square

A seguir, consideramos finalmente a definição de função semi-suave e suas diferentes caracterizações.

Definição 2.16. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função localmente Lipschitz contínua. Dizemos que W é semi-suave em um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ se W é B-diferenciável numa vizinhança de \bar{x} e*

$$\lim_{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x}} \frac{\|W'(x; x - \bar{x}) - W'(\bar{x}; x - \bar{x})\|}{\|x - \bar{x}\|} = 0.$$

Se reforçarmos a condição acima para

$$\limsup_{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x}} \frac{\|W'(x; x - \bar{x}) - W'(\bar{x}; x - \bar{x})\|}{\|x - \bar{x}\|^2} < +\infty.$$

então dizemos que W é fortemente semi-suave em \bar{x} .

A definição acima mostra que se W é semi-suave em \bar{x} , então W é B-diferenciável numa vizinhança de \bar{x} , e assim, a derivada direcional $W'(\bar{x}; x - \bar{x})$ fornece uma boa aproximação de $W(x)$ para todo x próximo de \bar{x} . Na proposição a seguir veremos que, além disso, $W'(\bar{x}; x - \bar{x})$ pode ser aproximado por qualquer elemento da jacobiana generalizada $\partial W(x)$.

Proposição 2.17. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função B-diferenciável numa vizinhança de $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. As seguintes afirmações são equivalentes:*

(a) W é semi-suave em \bar{x} .

(b)
$$\lim_{\substack{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x} \\ H \in \partial W(x)}} \frac{W'(\bar{x}; x - \bar{x}) - H(x - \bar{x})}{\|x - \bar{x}\|} = 0.$$

(c)
$$\lim_{\substack{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x} \\ H \in \partial W(x)}} \frac{W(x) - H(x - \bar{x}) - W(\bar{x})}{\|x - \bar{x}\|} = 0.$$

Demonstração.

[(a) \Rightarrow (b)] Tomando $d = x - \bar{x}$, observamos que (b) equivale a

$$\lim_{\substack{0 \neq d \rightarrow 0 \\ H \in \partial W(\bar{x} + d)}} \frac{W'(\bar{x}; d) - Hd}{\|d\|} = 0. \quad (2.12)$$

Suponha então que vale (a) e tome $\varepsilon \in (0, 1)$ arbitrário. Pela definição de semi-suavidade e pelo lema 2.15(a), existe $L > 0$ e $\delta_1 \in (0, 1)$ tais que

$$\begin{aligned} \|W'(\bar{x} + \bar{d}; \bar{d}) - W'(\bar{x}; \bar{d})\| &\leq \varepsilon \|\bar{d}\|, \\ \|W'(\bar{x} + \bar{d}; u) - W'(\bar{x} + \bar{d}; v)\| &\leq L \|u - v\|, \end{aligned} \quad (2.13)$$

para todo $\bar{d} \in \mathbb{R}^n$ com $\|\bar{d}\| \leq 2\delta_1$ e todo $u, v \in \mathbb{R}^n$.

Fixe $d \in \mathbb{R}^n$ com $\|d\| \leq \delta_1$ e $H \in \partial W(\bar{x} + d)$. Pelo teorema de Carathéodory[†], existem $H_i \in \partial_B W(\bar{x} + d)$ e $\alpha_i \geq 0$, $i = 1, \dots, n+1$, com $\sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i = 1$, tais que

$$H = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i H_i.$$

Usando a definição de B-subdiferencial, isso significa que existe uma sequência $\{d_i^k\}_k$ com $\|d_i^k\| \leq 2\delta_1$ e $d_i^k \rightarrow d$ para todo $i = 1, \dots, n+1$, tal que

$$H = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i \lim_{k \rightarrow \infty} JW(\bar{x} + d_i^k).$$

Pelo lema 2.15(b), $W'(\bar{x} + d_i^k; u) = JW(\bar{x} + d_i^k)u$ para todo $u \in \mathbb{R}^n$. Logo, multiplicando a igualdade acima por d , temos:

$$Hd = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i \lim_{k \rightarrow \infty} W'(\bar{x} + d_i^k; d) = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i W'(\bar{x} + d_i^k; d).$$

Isso mostra que, pela definição de limite, existe $\delta_2 > 0$ tal que $\|d_i^k - d\| \leq$

[†]O teorema de Carathéodory mostra que todo elemento do fecho convexo de $S \subset \mathbb{R}^n$ pode ser escrito como combinação convexa de $n+1$ elementos de S . (Veja [HUL01, teorema 1.3.6] ou [Roc70, teorema 17.1].)

$\min\{\delta_2, \varepsilon\|d\|\}$ implica

$$\left\| \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i W'(\bar{x} + d_i^k; d) - Hd \right\| \leq \varepsilon L \|d\|. \quad (2.14)$$

Suponha agora que $\|d_i^k - d\| \leq \min\{\delta_2, \varepsilon\|d\|\}$ para todo $i = 1, \dots, n$. Então, pelas desigualdades (2.13) e lembrando que $\|d_i^k\| \leq 2\delta_1$, temos:

$$\begin{aligned} \|W'(\bar{x} + d_i^k; d_i^k) - W'(\bar{x}; d_i^k)\| &\leq 2\varepsilon\|d\|, \\ \|W'(\bar{x} + d_i^k; d_i^k) - W'(\bar{x} + d_i^k; d)\| &\leq L\|d_i^k - d\| \leq \varepsilon L\|d\|, \\ \|W'(\bar{x}; d_i^k) - W'(\bar{x}; d)\| &\leq L\|d_i^k - d\| \leq \varepsilon L\|d\|, \end{aligned}$$

para todo i . Então,

$$\begin{aligned} \|W'(\bar{x}; d) - W'(\bar{x} + d_i^k; d)\| &\leq \|W'(\bar{x}; d) - W'(\bar{x}; d_i^k)\| \\ &\quad + \|W'(\bar{x}; d_i^k) - W'(\bar{x} + d_i^k; d_i^k)\| \\ &\quad + \|W'(\bar{x} + d_i^k; d_i^k) - W'(\bar{x} + d_i^k; d)\| \\ &\leq \varepsilon(2 + 2L)\|d\|, \end{aligned}$$

para todo i . Finalmente, utilizando (2.14) e a desigualdade acima,

$$\begin{aligned} &\|W'(\bar{x}; d) - Hd\| \\ &\leq \left\| \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i W'(\bar{x}; d) - \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i W'(\bar{x} + d_i^k; d) \right\| + \left\| \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i W'(\bar{x} + d_i^k; d) - Hd \right\| \\ &\leq \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i \|W'(\bar{x}; d) - W'(\bar{x} + d_i^k; d)\| + \left\| \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i W'(\bar{x} + d_i^k; d) - Hd \right\| \\ &\leq \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i [\varepsilon(2 + 2L)\|d\|] + \varepsilon L\|d\| \\ &= \varepsilon(2 + 3L)\|d\|. \end{aligned}$$

Como ε pode ser tomado arbitrariamente pequeno, a conclusão segue.

[(b) \Rightarrow (a)] A implicação segue diretamente do fato de que, pelo lema 2.15(b), para

todo x suficientemente próximo de \bar{x} , existe $H \in \partial W(x)$ tal que

$$W'(x; x - \bar{x}) = H(x - \bar{x}).$$

[(b) \Leftrightarrow (c)] Como W é B-diferenciável em \bar{x} , temos:

$$\lim_{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x}} \frac{W(x) - W(\bar{x}) - W'(\bar{x}; x - \bar{x})}{\|x - \bar{x}\|} = 0.$$

Assim, a equivalência das afirmações segue facilmente. \square

A proposição acima mostra que o modelo linear definido por um elemento da jacobiana generalizada define uma boa aproximação da função quando esta é semi-suave. Isso implica que o método de Newton pode ser estendido para esses tipos de funções. A seguir descrevemos um resultado similar para funções fortemente semi-suaves.

Proposição 2.18. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função B-diferenciável numa vizinhança de $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Se W é também fortemente semi-suave em \bar{x} , então as seguintes afirmações são válidas:*

$$(a) \quad \limsup_{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x}} \frac{W(x) - W(\bar{x}) - W'(\bar{x}; x - \bar{x})}{\|x - \bar{x}\|^2} < \infty,$$

$$(b) \quad \limsup_{\substack{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x} \\ H \in \partial W(x)}} \frac{H(x - \bar{x}) - W'(\bar{x}; x - \bar{x})}{\|x - \bar{x}\|^2} < \infty,$$

$$(c) \quad \limsup_{\substack{\bar{x} \neq x \rightarrow \bar{x} \\ H \in \partial W(x)}} \frac{W(x) - H(x - \bar{x}) - W(\bar{x})}{\|x - \bar{x}\|^2} < \infty.$$

Demonstração.

[(a)] Defina $\phi(t) \doteq W(\bar{x} + td)$ para todo $t \in [0, 1]$. Então, pela definição de derivada direcional, para todo $t \in [0, 1]$,

$$W'(\bar{x} + td; d) \doteq \lim_{s \downarrow 0} \frac{W(\bar{x} + td + sd) - W(\bar{x} + td)}{s} = \lim_{s \downarrow 0} \frac{\phi(t + s) - \phi(t)}{s} = \phi'(t).$$

Como ϕ é localmente Lipschitz contínua em $[0, 1]$, pelo teorema de Rademacher, ela é diferenciável em quase todo esse intervalo. Logo, para todo d ,

$$W(\bar{x} + d) - W(\bar{x}) = \phi(1) - \phi(0) = \int_0^1 \phi'(t) dt = \int_0^1 W'(\bar{x} + td; d) dt. \quad (2.15)$$

Pela definição de função fortemente semi-suave e pelo fato de $W'(x; \cdot)$ ser positivamente homogênea para todo $x \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} & \limsup_{0 \neq d \rightarrow 0} \frac{\|W'(\bar{x} + td; td) - W'(\bar{x}; td)\|}{\|td\|^2} < \infty \\ & = \limsup_{0 \neq d \rightarrow 0} \frac{\|W'(\bar{x} + td; d) - W'(\bar{x}; d)\|}{t\|d\|^2} < \infty. \end{aligned}$$

Em outras palavras,

$$W'(\bar{x} + td; d) - W'(\bar{x}; d) = tO(\|d\|^2).$$

Logo, voltando à igualdade (2.15), temos:

$$W(\bar{x} + d) - W(\bar{x}) = \int_0^1 [W'(\bar{x}; d) + tO(\|d\|^2)] dt = W'(\bar{x}; d) + O(\|d\|^2),$$

e o resultado segue tomando $d \doteq x - \bar{x}$.

[(b) e (c)] Os resultados seguem diretamente do item (a) e seguindo a demonstração da proposição 2.17. \square

Finalmente, referimo-nos a [FP03b, seção 7.4] para outros resultados envolvendo funções semi-suaves. Observamos, em particular, que produtos por um escalar, somas e composições de funções (fortemente) semi-suaves são também (fortemente) semi-suaves [FP03b, proposição 7.4.4]. Na próxima seção, voltamos ao sistema de equações (2.9) de nosso interesse.

2.4 Método de Newton semi-suave

Considere novamente o sistema de equações (2.9), definindo agora $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ como uma função semi-suave. O método de Newton aplicado a tais funções, o

qual denominamos simplesmente de *método de Newton semi-suave*, é originalmente apresentado tomando-se a direção de busca (2.10) para cada iteração k . O teorema de convergência local desse método pode ser visto, por exemplo, em [FP03b, seção 7.5] e [QS93]. Alternativamente, e baseando-se em [Qi93], apresentamos aqui resultados de um método modificado, ou seja, que substitui em (2.10), a jacobiana generalizada $\partial W(x^k)$ pelo B-subdiferencial $\partial_B W(x^k)$.

Optamos por esse método modificado porque, no teorema de convergência local do método original, é necessário que todo $H \in \partial W(x^*)$ seja não singular, onde x^* é zero de W . Considerando a função semi-suave $W(x) \doteq |x|$ com $W: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, por exemplo, observamos que 0 é zero de W , $\partial_B W(0) = \{-1, 1\}$ e $\partial W(0) = [-1, 1]$. O método de Newton converge nesse exemplo, mas $0 \in \partial W(0)$, o que implica que a hipótese do teorema não é satisfeita. Trocando $\partial W(x^k)$ por $\partial_B W(x^k)$, a hipótese requerida no teorema é mais fraca e, portanto, preferida. A seguir, apresentamos o método de Newton semi-suave do nosso interesse e seus resultados associados.

Algoritmo 2.19. *Método de Newton semi-suave*

1. Inicialize $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Tome $k = 0$.
2. Se $W(x^k) = 0$, pare.
3. Escolha $H_k \in \partial_B W(x^k)$ e encontre uma direção $d^k \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$W(x^k) + H_k d^k = 0. \quad (2.16)$$

4. Faça $x^{k+1} \doteq x^k + d^k$. Tome $k = k + 1$ e vá para o passo 2.

Observe que o sistema de equações (2.16) tem solução única quando H_k é não singular. A seguinte definição será, então, utilizada.

Definição 2.20. *Dizemos que $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é fortemente BD-regular em $x \in \mathbb{R}^n$ se todos os elementos do B-subdiferencial $\partial_B W(x)$ são não singulares.*

Lema 2.21. *Seja $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ fortemente BD-regular em $x \in \mathbb{R}^n$. Então, existe uma vizinhança $V(x)$ de x e uma constante C tal que, para todo $y \in V(x)$ e $H \in \partial_B W(y)$, H é não singular e*

$$\|H^{-1}\| \leq C. \quad (2.17)$$

Demonstração. Inicialmente, considere $y \in V(x) \cap D_W$, ou seja, com W sendo diferenciável em y . Queremos provar que $JW(y)$ é não singular e que

$$\|JW(y)^{-1}\| \leq C,$$

para algum C . Suponha então, por contradição, que existe $\{y^k\} \subset D_W$ com $y^k \rightarrow x$ tal que $JW(y^k)$ é singular para todo k ou tal que $\|JW(y^k)^{-1}\| \rightarrow \infty$.

A segunda hipótese não ocorre porque o fato de W ser localmente Lipschitz contínua implica em $\partial W(x)$ ser limitada em $V(x)$ [FP03b, proposição 7.1.4.]. Por outro lado, se $JW(y^k)$ é singular para todo k , então $JW(y^k) \rightarrow H$ com $H \in \partial_B W(x)$ e H é singular. Isso é uma contradição, pois W é fortemente BD-regular em x . Para o caso em que $y \in V(x) \setminus D_W$, basta usarmos a definição de B-subdiferencial para concluir a não singularidade e a desigualdade (2.17). \square

Antes de enunciarmos o teorema de convergência local, relembramos que a seguinte desigualdade é satisfeita:

$$\|a\| \leq \|a - b\| + \|b\| \quad \text{para todo } a, b \in \mathbb{R}^n. \quad (2.18)$$

Teorema 2.22. *Seja $x^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução de (2.9) com $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ semi-suave e fortemente BD-regular em x^* . Então, a sequência $\{x^k\}$ gerada pelo algoritmo 2.19 está bem definida e converge superlinearmente a x^* numa vizinhança de x^* , ou seja,*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} = 0.$$

Além disso, se $W(x^k) \neq 0$ para todo k , então a norma de W decresce superlinearmente, ou seja,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|W(x^{k+1})\|}{\|W(x^k)\|} = 0.$$

Demonstração. Lembrando que $W(x^*) = 0$ por hipótese e usando a desigual-

dade (2.18), temos

$$\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x^*\| &= \|(x^k - x^*) - H_k^{-1}W(x^k)\| \\
&\leq \|H_k^{-1}[W(x^k) - W(x^*) - W'(x^*; x^k - x^*)]\| \\
&\quad + \|H_k^{-1}[H_k(x^k - x^*) - W'(x^*; x^k - x^*)]\| \\
&\leq \|H_k^{-1}\| [\|W(x^k) - W(x^*) - W'(x^*; x^k - x^*)\| \\
&\quad + \|H_k(x^k - x^*) - W'(x^*; x^k - x^*)\|].
\end{aligned}$$

O lema 2.21, o fato de W ser B-diferenciável (em particular, ver igualdade (2.11)) e a proposição 2.17 garantem que

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq o(\|x^k - x^*\|), \quad (2.19)$$

o que mostra que $\{x^k\}$ converge superlinearmente a x^* .

Provemos agora que a norma de W decresce superlinearmente. Observe primeiro que pelo lema 2.21, existem C e $\delta_1 > 0$ tais que se $\|x - x^*\| \leq \delta_1$ e $H \in \partial_B W(x)$, então H é não singular e $\|H^{-1}\| \leq C$. Como W é B-diferenciável, para todo $\varepsilon \in (0, 1)$, existe $\delta_2 \in (0, \delta_1)$ tal que se $\|x - x^*\| \leq \delta_2$, então

$$\|W(x) - W'(x^*; x - x^*)\| \leq \varepsilon \|x - x^*\|. \quad (2.20)$$

Ademais, por (2.19), existe $\delta \in (0, \delta_2)$ tal que se $\|x^k - x^*\| \leq \delta$, então

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \varepsilon \|x^k - x^*\|.$$

Considere agora k suficientemente grande tal que $\|x^k - x^*\| \leq \delta$. Por (2.20) com $x = x^{k+1}$ e utilizando novamente a desigualdade (2.18), temos:

$$\begin{aligned}
\|W(x^{k+1})\| &\leq \|W(x^{k+1}) - W'(x^*; x^{k+1} - x^*)\| + \|W'(x^*; x^{k+1} - x^*)\| \\
&\leq \varepsilon \|x^{k+1} - x^*\| + \|W'(x^*; x^{k+1} - x^*)\|.
\end{aligned}$$

Pelo lema 2.15(a), $W'(x^*; \cdot)$ é Lipschitz contínua com constante L . Logo, para k suficientemente grande,

$$\|W(x^{k+1})\| \leq (\varepsilon + L)\|x^{k+1} - x^*\| \leq (\varepsilon + L)\varepsilon\|x^k - x^*\|. \quad (2.21)$$

Pela definição do passo e pela limitação da norma de H_k^{-1} , temos:

$$\|x^{k+1} - x^k\| = \|H_k^{-1}W(x^k)\| \leq C\|W(x^k)\|.$$

Assim,

$$\begin{aligned} \|x^k - x^*\| &\leq \|x^{k+1} - x^k\| + \|x^{k+1} - x^*\| \\ &\leq C\|W(x^k)\| + \varepsilon\|x^k - x^*\|, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\|x^k - x^*\| \leq \frac{C}{1 - \varepsilon}\|W(x^k)\|.$$

Retornando a (2.21) e usando a desigualdade acima, temos

$$\|W(x^{k+1})\| \leq \frac{\varepsilon C(\varepsilon + L)}{1 - \varepsilon}\|W(x^k)\|.$$

Como, por hipótese, $W(x^k) \neq 0$ para todo k , podemos dividir a desigualdade acima por $\|W(x^k)\|$. Dessa forma, como ε pode ser arbitrariamente pequeno, concluímos que W decresce superlinearmente. \square

Finalizamos a seção mostrando que, para o caso em que a função é fortemente semi-suave, a taxa de convergência é mais do que superlinear, ou seja, que nesse caso é quadrática.

Corolário 2.23. *Seja $x^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução de (2.9) com $W: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ fortemente semi-suave e fortemente BD-regular em x^* . Então, a sequência $\{x^k\}$ gerada pelo algoritmo 2.19 está bem definida e converge quadraticamente, ou seja,*

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|^2} < \infty.$$

Demonstração. A prova é análoga a anterior, bastando substituir a proposição 2.17 pela proposição 2.18 em (2.19). \square

Capítulo 3

A penalidade exata

Este capítulo será dedicado à construção de uma penalidade exata continuamente diferenciável para o problema (PNL). Ela será baseada essencialmente nos trabalhos de Di Pillo e Grippo [DPG85, DPG89] e de André e Silva [AS10]. Em ambos os casos, os autores incorporam um estimador de multiplicadores em uma função lagrangiana aumentada, com a diferença de que os primeiros estavam interessados em problemas do tipo (PNL), enquanto os posteriores consideraram o problema de desigualdades variacionais com restrições funcionais de desigualdade.

Mais especificamente, André e Silva formularam uma penalidade para o problema de encontrar $\bar{x} \in \bar{X} \doteq \{x \in \mathbb{R}^n : \bar{g}(x) \leq 0\}$ tal que

$$\langle F(\bar{x}), x - \bar{x} \rangle \geq 0, \quad \text{para todo } x \in \bar{X},$$

onde $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $\bar{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ são dados e de classe \mathcal{C}^1 . Substituindo \bar{X} pelo conjunto viável X de (PNL) e F pelo gradiente ∇f da função objetivo, observamos que esse problema estende a condição necessária de primeira ordem do problema (PNL). Isso mostra a utilidade dessa penalidade e das ideias associadas a ela para o nosso contexto de otimização.

O capítulo está organizado da seguinte forma. Na seção 3.1, criaremos uma função que, para cada ponto, estima os multiplicadores de Lagrange associados. A construção da penalidade exata será feita na seção 3.2. A seguir, na seção 3.3, mostraremos que pontos KKT são equivalentes, sob certas condições, a um determinado sistema de equações. Finalmente, na seção 3.4, mostraremos que a função construída é de fato uma penalidade exata.

3.1 Estimador de multiplicadores

O primeiro passo para a construção da penalidade exata é a criação de um *estimador de multiplicadores*. Mais precisamente, queremos construir funções $\lambda: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $\mu: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$, associadas respectivamente às restrições de desigualdade e igualdade, tais que $\lambda(x)$ e $\mu(x)$ estimam os multiplicadores de Lagrange para um ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Em particular, se x^* é um ponto KKT, então o estimador deve ser capaz de retornar seus multiplicadores λ^* e μ^* associados, ou seja, deve-se satisfazer $\lambda(x^*) = \lambda^*$ e $\mu(x^*) = \mu^*$. Além disso, considerando que usaremos esse estimador na construção de uma penalidade exata continuamente diferenciável, é necessário que $\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$ sejam também continuamente diferenciáveis.

O estimador de multiplicadores utilizado em [AS10, DPG85, DPG89] foi proposto por Glad e Polak em [GP79], e consiste na resolução do seguinte problema irrestrito, para cada $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\min_{\lambda, \mu} \|\nabla_x L(x, \lambda, \mu)\|^2 + \zeta^2 \|G(x)\lambda\|^2, \quad (3.1)$$

onde $\zeta > 0$, $G(x) \doteq \text{diag}(g_1(x), \dots, g_m(x))$ e $L(x, \lambda, \mu)$ é definida em (2.1). Mais precisamente, o estimador $(\lambda(x), \mu(x))$ é uma solução ótima do problema acima. Considerando as condições KKT do problema (PNL), observamos que essa minimização visa satisfazer a condição do gradiente $\nabla_x L(x, \lambda, \mu) = 0$ e a complementaridade $\langle g(x), \lambda \rangle = 0$.

O problema (3.1) é quadrático e convexo, e tem solução única se a condição de qualificação LICQ for válida em x . Como os métodos baseados em penalidades exatas podem requerer o cômputo de estimadores em qualquer ponto, viável ou não, é necessário, como hipótese, que LICQ seja válida em todo o espaço \mathbb{R}^n . Essa condição é forte, especialmente se observarmos que LICQ é usualmente referida apenas a pontos viáveis do problema. Logo, é interessante buscar outras formas de estimadores que requerem uma hipótese menos restritiva que essa. Com isso em mente, modificamos o estimador de multiplicadores e propomos a seguinte condição.

Definição 3.1. *Um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ satisfaz a condição de qualificação de independência linear relaxada (LICQ relaxada) se os gradientes*

$$\nabla g_i(x), \quad i \in I_=(x), \quad \nabla h_i(x), \quad i \in E_=(x)$$

são linearmente independentes, onde $I_=(x)$ foi definido em (2.2) e

$$E_=(x) \doteq \{i \in \{1, \dots, p\} : h_i(x) = 0\}.$$

Ademais, definimos o conjunto dos pontos de \mathbb{R}^n que a satisfazem como*

$$\mathcal{R} \doteq \{x \in \mathbb{R}^n : x \text{ satisfaz LICQ relaxada}\}.$$

Naturalmente, essa condição é menos restritiva que LICQ e é mais razoável por permitir que mais pontos inviáveis a satisfaçam. De fato, a diferença entre ela e LICQ está apenas nos pontos inviáveis, pois $E_=(x) = \{1, \dots, p\}$ quando x é viável. Para ilustrar a vantagem da LICQ relaxada, considere um exemplo simples abaixo.

Exemplo 3.2. *Sejam $n = 2$, $m = 2$, $p = 1$ e funções definidas por*

$$\begin{cases} g_1(x) \doteq -x_1 + x_2, \\ g_2(x) \doteq x_1 + x_2 - 1, \\ h(x) \doteq x_2. \end{cases}$$

Esse exemplo pode ser visualizado na figura 3.1, onde o segmento em negrito denota o conjunto viável. Se tomarmos o ponto inviável $\tilde{x} \doteq (0.5, 0.5)^\top$, observamos que $I_=(\tilde{x}) = \{1, 2\}$ e $E_=(\tilde{x}) = \emptyset$. Portanto, \tilde{x} satisfaz a condição de LICQ relaxada, mas não satisfaz LICQ.

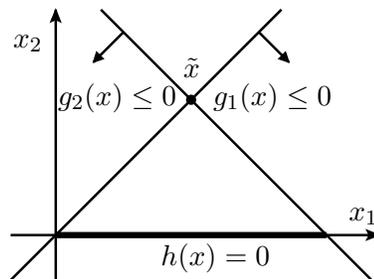


Figura 3.1: Diferença entre LICQ e LICQ relaxada.

Apesar da diferença entre LICQ e LICQ relaxada ser simples, optamos pela última não apenas por ela ser menos restritiva, mas porque a adaptação do multiplicador de estimadores de Glad e Polak (problema (3.1)) é igualmente simples.

*A notação \mathcal{R} vem da palavra relaxada.

Nesse caso, obtemos o estimador resolvendo-se o seguinte problema de minimização irrestrita, para cada $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\min_{\lambda, \mu} \|\nabla_x L(x, \lambda, \mu)\|^2 + \zeta^2(\|G(x)\lambda\|^2 + \|H(x)\mu\|^2), \quad (3.2)$$

onde $H(x) \doteq \text{diag}(h_1(x), \dots, h_p(x))$.

Considerando as condições KKT do problema (PNL), observamos que a minimização acima continua forçando a condição do gradiente $\nabla_x L(x, \lambda, \mu) = 0$ e a complementaridade $\langle g(x), \lambda \rangle = 0$. A diferença agora é que o novo estimador contém a mais o termo $\|H(x)\mu\|^2$, ou seja, ele força também a complementaridade das restrições de igualdade $\langle h(x), \mu \rangle = 0$, mesmo que ela seja irrelevante nas condições KKT. É importante observar que ele permite o uso da hipótese enfraquecida, ou seja, da LICQ relaxada, além de não perder nenhuma propriedade do estimador (3.1). De fato, observe que o problema associado (3.2) é equivalente a

$$\begin{aligned} & \min_{\lambda, \mu} \|\nabla f(x) + Jg(x)^\top \lambda + Jh(x)^\top \mu\|^2 + \zeta^2\|G(x)\lambda\|^2 + \zeta^2\|H(x)\mu\|^2 \\ &= \min_{\lambda, \mu} \left\| \begin{bmatrix} Jg(x)^\top & Jh(x)^\top \\ \zeta G(x) & 0 \\ 0 & \zeta H(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -\nabla f(x) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\|^2, \end{aligned} \quad (3.3)$$

ou seja, é um problema de quadrados mínimos linear.

Mostraremos agora algumas propriedades associadas ao estimador construído acima. Em particular, veremos que a condição LICQ relaxada estabelece a unicidade da solução do problema (3.2). Além disso, o estimador devolve, em pontos KKT, os multiplicadores associados, e são continuamente diferenciáveis com as jacobianas podendo ser obtidas facilmente.

Proposição 3.3. *Seja $x \in \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$, ou seja, que satisfaz LICQ relaxada. Definindo a matriz $N(x) \in \mathbb{R}^{(m+p) \times (m+p)}$ por*

$$N(x) \doteq \begin{bmatrix} Jg(x)Jg(x)^\top + \zeta^2 G(x)^2 & Jg(x)Jh(x)^\top \\ Jh(x)Jg(x)^\top & Jh(x)Jh(x)^\top + \zeta^2 H(x)^2 \end{bmatrix}, \quad (3.4)$$

temos:

- (a) A matriz $N(x)$ é positiva definida.

(b) A solução única $(\lambda(x), \mu(x))$ de (3.2) (equivalentemente, (3.3)) é dada por:

$$\begin{bmatrix} \lambda(x) \\ \mu(x) \end{bmatrix} = -N^{-1}(x) \begin{bmatrix} Jg(x) \\ Jh(x) \end{bmatrix} \nabla f(x).$$

(c) Se $(x, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$ satisfaz as condições KKT, então $\bar{\lambda} = \lambda(x)$ e $\bar{\mu} = \mu(x)$.

(d) As jacobianas de $\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$ satisfazem a seguinte igualdade:

$$\begin{bmatrix} J\lambda(x) \\ J\mu(x) \end{bmatrix} = -N^{-1}(x) \begin{bmatrix} R_1(x) \\ R_2(x) \end{bmatrix},$$

com

$$\begin{aligned} R_1(x) &\doteq Jg(x) \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda(x), \mu(x)) + 2\zeta^2 \Lambda(x) G(x) Jg(x) \\ &\quad + \sum_{i=1}^m e_i^m \nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x))^\top \nabla^2 g_i(x), \\ R_2(x) &\doteq Jh(x) \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda(x), \mu(x)) + 2\zeta^2 M(x) H(x) Jh(x) \\ &\quad + \sum_{i=1}^p e_i^p \nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x))^\top \nabla^2 h_i(x), \end{aligned}$$

onde $\Lambda(x) \doteq \text{diag}(\lambda_1(x), \dots, \lambda_m(x))$ e $M(x) \doteq \text{diag}(\mu_1(x), \dots, \mu_p(x))$ são matrizes diagonais com entradas $\lambda_i(x) \doteq [\lambda(x)]_i$ e $\mu_i(x) \doteq [\mu(x)]_i$, respectivamente, e_i^m, e_i^p são os i -ésimos elementos da base canônica de \mathbb{R}^m e \mathbb{R}^p respectivamente, e

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) &\doteq \nabla_x L(x, \lambda, \mu) \Big|_{\lambda=\lambda(x), \mu=\mu(x)}, \\ \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda(x), \mu(x)) &\doteq \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda, \mu) \Big|_{\lambda=\lambda(x), \mu=\mu(x)}. \end{aligned}$$

Demonstração.

[(a)] Defina $A(x) \in \mathbb{R}^{(n+m+p) \times (m+p)}$ como a matriz associada ao problema de

quadrados mínimos linear (3.3), isto é,

$$A(x) \doteq \begin{bmatrix} Jg(x)^\top & Jh(x)^\top \\ \zeta G(x) & 0 \\ 0 & \zeta H(x) \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Sem perda de generalidade, podemos escrever $Jg(x)^\top = [Jg(x)^\top_{=} | Jg(x)^\top_{\neq}]$, sendo que $Jg(x)_{=}$ e $Jg(x)_{\neq}$ correspondem às partes de $Jg(x)$ onde $g_i(x) = 0$ e $g_i(x) \neq 0$, respectivamente. De modo análogo, definimos as submatrizes $Jh(x)_{=}$, $Jh(x)_{\neq}$, $G(x)_{\neq}$ e $H(x)_{\neq}$, e assim

$$A(x) = \begin{bmatrix} Jg(x)^\top_{=} & Jg(x)^\top_{\neq} & Jh(x)^\top_{=} & Jh(x)^\top_{\neq} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \zeta G(x)_{\neq} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \zeta H(x)_{\neq} \end{bmatrix}.$$

Na representação acima, podemos notar que as colunas de $A(x)$ são linearmente independentes por LICQ relaxada (e assim a primeira e a terceira coluna de $A(x)$ são linearmente independentes) e pela presença de matrizes diagonais não nulas $G(x)_{\neq}$ e $H(x)_{\neq}$. Como $N(x) = A(x)^\top A(x)$, podemos então concluir que $N(x)$ é não singular e positiva definida.

[(b)] Derivando a função objetivo do problema (3.3) e igualando a zero, temos:

$$A(x)^\top A(x) \begin{bmatrix} \lambda(x) \\ \mu(x) \end{bmatrix} = A(x)^\top \begin{bmatrix} -\nabla f(x) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

onde $A(x)$ é definida em (3.5). O resultado segue do fato de que a matriz $N(x) = A(x)^\top A(x)$ é não singular pelo item (a).

[(c)] Pelas condições KKT, $\nabla_x L(x, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = 0$, $G(x)\bar{\lambda} = 0$ e $H(x)\bar{\mu} = 0$, isto é, a função objetivo de (3.2) em $(\bar{\lambda}, \bar{\mu})$ é nula. O resultado segue porque a solução de (3.2) é única pelo item (b), e porque sua função objetivo é sempre maior ou igual a zero.

[(d)] Do item (b), temos:

$$\begin{aligned} -Jg(x)\nabla f(x) &= (Jg(x)Jg(x)^\top + \zeta^2 G(x)^2)\lambda(x) + Jg(x)Jh(x)^\top \mu(x), \\ -Jh(x)\nabla f(x) &= Jh(x)Jg(x)^\top \lambda(x) + (Jh(x)Jh(x)^\top + \zeta^2 H(x)^2)\mu(x), \end{aligned}$$

o que equivale a

$$Jg(x)\nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) + \zeta^2 G(x)^2 \lambda(x) = 0, \quad (3.6)$$

$$Jh(x)\nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) + \zeta^2 H(x)^2 \mu(x) = 0. \quad (3.7)$$

Pela equação (3.6) temos:

$$\sum_{i=1}^m e_i^m \nabla g_i(x)^\top \nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) + \zeta^2 G(x)^2 \lambda(x) = 0.$$

Derivando tal igualdade em x , obtemos:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i=1}^m e_i^m \nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x))^\top \nabla^2 g_i(x) + 2\zeta^2 \Lambda(x) G(x) Jg(x) + \zeta^2 G(x)^2 J\lambda(x) \\ &\quad + Jg(x) \left(\nabla_{xx}^2 L(x, \lambda(x), \mu(x)) + Jg(x)^\top J\lambda(x) + Jh(x)^\top J\mu(x) \right) \\ &= R_1(x) + Jg(x)Jg(x)^\top J\lambda(x) + Jg(x)Jh(x)^\top J\mu(x) + \zeta^2 G(x)^2 J\lambda(x). \end{aligned}$$

Analogamente, a equação (3.7) nos dá

$$0 = R_2(x) + Jh(x)Jh(x)^\top J\mu(x) + Jh(x)Jg(x)^\top J\lambda(x) + \zeta^2 H(x)^2 J\mu(x),$$

e essas duas equações fornecem o resultado desejado. \square

Como o problema (3.3) é de quadrados mínimos linear, sabemos que sua resolução requer uma fatoração de matriz, cuja complexidade é de ordem cúbica. Pelos itens (b) e (d) da proposição acima, verificamos que a fatoração utilizada para computar o estimador pode também ser aproveitada para calcular a sua jacobiana. Naturalmente, isso é um fato importante do ponto de vista prático.

Para concluir a seção, descrevemos agora um outro estimador de multiplicadores. Sob o pretexto de enfraquecer a hipótese LICQ em \mathbb{R}^n , Lucidi propôs em [Luc92], adicionar um outro termo na função objetivo do problema associado ao

estimador (3.1). Visto que ele considerou apenas problemas com restrições de desigualdade, adaptamos sua ideia de modo a resolver (PNL). Então, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, podemos obter um estimador resolvendo o seguinte problema:

$$\min_{\lambda, \mu} \|\nabla_x L(x, \lambda, \mu)\|^2 + \zeta^2 \left(\|G(x)\lambda\|^2 + \alpha(x)(\|\lambda\|^2 + \|\mu\|^2) \right), \quad (3.8)$$

onde

$$\alpha(x) \doteq \sum_{i=1}^m \max\{g_i(x), 0\}^{q_1} + \sum_{i=1}^p [h_i(x)]^{q_2},$$

com $q_1, q_2 \geq 2$. A hipótese requerida por esse estimador é mais fraca que a de Glad e Polak (problema (3.1)) e a do estimador (3.2) que propomos. De fato, ele pede apenas que LICQ seja válida no conjunto dos pontos **viáveis**.

Além disso, a proposição 3.3 pode ser reescrita se substituirmos o estimador (3.2) pela adaptação do Lucidi. Em particular, a matriz $A(x)$ em (3.5) é substituída por

$$\bar{A}(x) \doteq \begin{bmatrix} Jg(x)^\top & Jh(x)^\top \\ \zeta G(x) & 0 \\ \zeta \alpha(x)^{1/2} I & 0 \\ 0 & \zeta \alpha(x)^{1/2} I \end{bmatrix}.$$

Note que $\bar{A}(x)$ possui colunas linearmente independentes se x é inviável, já que nesse caso $\alpha(x) \neq 0$. Isso também ocorre quando x é viável devido à hipótese LICQ. Resultados análogos a proposição 3.3 podem ainda ser provados. Mesmo que a hipótese requerida por (3.8) seja menos restritiva que a proposta aqui, podemos observar que o termo $\alpha(x)(\|\lambda\|^2 + \|\mu\|^2)$ pode introduzir um tipo de dependência entre os multiplicadores que não existia no outro estimador. Esse fato será discutido com mais clareza na seção 5.3 com os experimentos numéricos associados. Por esse motivo, nosso foco será dado apenas no estimador (3.2) que propomos, apesar de todos os resultados seguintes poderem ser provados ao usarmos (3.8).

3.2 Construção da penalidade exata

Mostraremos agora de forma precisa a ideia dada por Di Pillo e Grippo [DPG85, DPG89] na construção de uma penalidade exata. Essencialmente, eles consideraram a incorporação do estimador de multiplicadores de Glad e Polak [GP79] no lagrangiano aumentado clássico, introduzido por Hestenes, Powell e Rockafellar

[Hes69, Pow69, Roc74], cuja fórmula segue abaixo:

$$\begin{aligned} L_c(x, \lambda, \mu) &\doteq f(x) + \langle \lambda, g(x) \rangle + \frac{c}{2} \|g(x)\|^2 - \frac{1}{2c} \sum_{i=1}^m \max \{0, -\lambda_i - cg_i(x)\}^2 \\ &\quad + \langle \mu, h(x) \rangle + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2. \end{aligned}$$

Da mesma maneira, podemos usar os estimadores $\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$ definidos na proposição 3.3(b). Assim, definimos a função $w_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ como

$$w_c(x) \doteq L_c(x, \lambda(x), \mu(x)).$$

Mais precisamente,

$$\begin{aligned} w_c(x) &= f(x) + \langle \lambda(x), g(x) \rangle + \frac{c}{2} \|g(x)\|^2 - \frac{c}{2} \left\| \max \left\{ 0, -\frac{\lambda(x)}{c} - g(x) \right\} \right\|^2 \\ &\quad + \langle \mu, h(x) \rangle + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Note que w_c é continuamente diferenciável devido à estrutura do lagrangiano aumentado e à maneira com que $\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$ são construídos. Em particular, seu gradiente é dado por

$$\begin{aligned} \nabla w_c(x) &= \nabla f(x) + Jg(x)^\top \lambda(x) + (cJg(x)^\top + J\lambda(x)^\top)(g(x) + y_c(x)) \\ &\quad + Jh(x)^\top \mu(x) + (cJh(x)^\top + J\mu(x)^\top)h(x), \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde

$$y_c(x) \doteq \max \left\{ 0, -\frac{\lambda(x)}{c} - g(x) \right\}. \quad (3.11)$$

Conforme podemos observar acima, o gradiente $\nabla w_c(x)$ possui, em sua fórmula, as jacobianas $J\lambda(x)$ e $J\mu(x)$. Independente do estimador (formulado utilizando (3.1) ou (3.2)), essas jacobianas contêm, por sua vez, termos de segunda ordem do problema, ou seja, $\nabla^2 f(x)$, $\nabla^2 g_i(x)$ com $i = 1, \dots, m$ e $\nabla^2 h_i(x)$ com $i = 1, \dots, p$. Esse fato pode ser confirmado na proposição 3.3(d) e em [DPG89, proposição 12]. Do ponto de vista computacional, ele impede a utilização de métodos que necessitam da hessiana $\nabla^2 w_c(x)$, pois ela deveria conter termos de terceira ordem do problema.

Na seção 3.3, mostraremos que os pontos KKT do problema (PNL) estão asso-

ciados ao sistema de equações $\nabla w_c(x) = 0$. Juntando com a observação anterior, isso significa que o sistema não pode ser resolvido com métodos usuais de segunda ordem, como o método de Newton. De fato, em [DPG85, DPG89], os autores não realizaram experimentos numéricos e não se preocuparam com a maneira de resolver o sistema na prática. Para contornar esse inconveniente, gostaríamos então de ignorar os termos de segunda ordem que aparecem na fórmula de $\nabla w_c(x)$. Aparece-nos então a questão de como fazer isso seguindo fundamentos teóricos.

A resposta para essa questão está no trabalho de André e Silva [AS10], onde é proposta uma reformulação das condições KKT associadas a desigualdades variacionais com restrições funcionais de desigualdade. Como estamos interessados apenas no problema variacional proveniente da condição necessária de primeira ordem de (PNL), e como possuímos também restrições de igualdade, devemos realizar uma adaptação na reformulação desses autores. Para construir a reformulação, eles incorporam o estimador de multiplicadores de Glad e Polak no lagrangiano aumentado para desigualdades variacionais, introduzida por Auslender e Teboulle [AT00]. Adaptando para o nosso caso, essa função é definida por:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_c(x, \lambda, \mu) &\doteq \nabla f(x) + Jg(x)^\top \lambda + cJg(x)^\top \max \left\{ g(x), -\frac{\lambda}{c} \right\} \\ &\quad + Jh(x)^\top \mu + cJh(x)^\top h(x). \end{aligned}$$

Note que $\mathcal{L}_c(x, \lambda, \mu)$ é igual a $\nabla_x L_c(x, \lambda, \mu)$, o gradiente do lagrangiano aumentado clássico com respeito à primeira variável. Adaptando para o nosso contexto, temos a função $W_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ definida por

$$W_c(x) \doteq \mathcal{L}_c(x, \lambda(x), \mu(x)). \tag{3.12}$$

Equivalentemente, utilizando (3.11),

$$\begin{aligned} W_c(x) &= \nabla f(x) + Jg(x)^\top \lambda(x) + cJg(x)^\top (g(x) + y_c(x)) \\ &\quad + Jh(x)^\top \mu(x) + cJh(x)^\top h(x) \\ &= \nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) + cJg(x)^\top (g(x) + y_c(x)) + cJh(x)^\top h(x). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Da mesma forma que André e Silva, provamos na seção 3.3, que os pontos KKT de (PNL) estão associados não apenas ao sistema de equações $\nabla w_c(x) = 0$, mas

também a $W_c(x) = 0$. Esse fato é bem interessante, pois

$$\nabla w_c(x) = W_c(x) + J\lambda(x)^\top(g(x) + y_c(x)) + J\mu(x)^\top h(x), \quad (3.14)$$

ou seja, $W_c(x)$ é igual a $\nabla w_c(x)$ a menos de termos de segunda ordem do problema, que desejávamos **ignorar** previamente. Na seção seguinte, mostraremos então a correspondência de W_c e ∇w_c com pontos KKT.

3.3 Equivalência com pontos KKT

Nesta seção, analisaremos a seguinte afirmação: um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é KKT associado ao problema (PNL) se, e somente se, sob certas hipóteses, resolve o sistema de equações não lineares $W_c(x) = 0$ ou $\nabla w_c(x) = 0$. Observamos que o primeiro sistema é útil para o desenvolvimento de um algoritmo a ser utilizado na prática, enquanto que o segundo é necessário para a demonstração dos resultados de exatidão na seção 3.4. Durante a prova, seguiremos um caminho análogo ao percorrido em [AS10, DPG89]. Além do estimador de multiplicadores e da adição das restrições de igualdade, a diferença está no modo de enunciar os resultados usando uma medida de inviabilidade, a qual é definida a seguir.

Definição 3.4. *Seja $\mathcal{F}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma medida de inviabilidade definida por*

$$\mathcal{F}(x) \doteq \frac{1}{2} \left(\|\max\{0, g(x)\}\|^2 + \|h(x)\|^2 \right),$$

e com gradiente

$$\nabla \mathcal{F}(x) = Jg(x)^\top \max\{0, g(x)\} + Jh(x)^\top h(x).$$

Observe que $\mathcal{F}(x) = 0$ se, e somente se, x é viável. Dizemos ainda que x é um ponto estacionário da medida de inviabilidade \mathcal{F} se $\nabla \mathcal{F}(x) = 0$. Claramente, todo ponto viável é também um ponto estacionário de \mathcal{F} .

Provemos inicialmente a afirmação do início da seção para a função W_c . Em particular, mostramos abaixo que se x é KKT, então $W_c(x) = 0$, independente do valor do parâmetro c .

Proposição 3.5. *Seja (x, λ, μ) uma tripla KKT associada ao problema (PNL) com $x \in \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$. Então, $W_c(x) = 0$ para todo $c > 0$.*

Demonstração. Pela proposição 3.3(c), temos que $\lambda = \lambda(x)$ e $\mu = \mu(x)$. Então,

$$\begin{aligned} W_c(x) &= \nabla_x L(x, \lambda, \mu) + cJg(x)^\top \max\{g(x), -\lambda/c\} + cJh(x)^\top h(x) \\ &= \nabla_x L(x, \lambda, \mu) + 0 \\ &= 0, \end{aligned}$$

onde a segunda igualdade segue da complementaridade e da viabilidade, e a última segue da condição do gradiente $\nabla_x L(x, \lambda, \mu) = 0$. \square

Quanto à implicação contrária da afirmação, mostramos que ela pode ser verdadeira quando c é suficientemente grande. Quando ela não for verdadeira, encontramos um ponto estacionário de \mathcal{F} que é inviável para o problema (PNL). Antes do teorema principal, consideramos alguns resultados adicionais.

Proposição 3.6. *Sejam $\{x^k\} \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ sequências tais que $x^k \rightarrow \bar{x} \in \mathcal{R}$, $c_k \rightarrow \infty$ e $W_{c_k}(x^k) = 0$ para todo k . Então, \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} .*

Demonstração. Pela fórmula de $W_{c_k}(x^k)$ dada em (3.13), temos:

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla_x L(x^k, \lambda(x^k), \mu(x^k)) + c_k Jg(x^k)^\top \max\{g(x^k), -\lambda(x^k)/c_k\} \\ &\quad + c_k Jh(x^k)^\top h(x^k). \end{aligned}$$

Como $\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$ são contínuas por LICQ relaxada e lembrando que f , g e h são funções de classe \mathcal{C}^2 , podemos dividir a equação acima por c_k e tomar o limite para concluir que

$$Jg(\bar{x})^\top \max\{g(\bar{x}), 0\} + Jh(\bar{x})^\top h(\bar{x}) = 0,$$

isto é, $\nabla \mathcal{F}(\bar{x}) = 0$. \square

Observamos que os resultados de [AS10] e [DPG89], análogos à proposição acima, mostram que \bar{x} é um ponto viável. Essa afirmação pode ser feita somente devido à inclusão de algumas hipóteses: no caso de [AS10], as restrições funcionais de desigualdade são convexas; e em [DPG89], a condição EMFCQ (definição 2.3) é válida em \bar{x} .

Corolário 3.7. *Sejam $\{x^k\} \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ sequências tais que $x^k \rightarrow \bar{x} \in \mathcal{R}$, $c_k \rightarrow \infty$ e $W_{c_k}(x^k) = 0$ para todo k . Suponha que uma das seguintes afirmações é válida:*

- (a) g_i é convexa para todo $i = 1, \dots, m$ e h_i é afim para todo $i = 1, \dots, p$;
- (b) EMFCQ é válida em \bar{x} .

Então, \bar{x} é um ponto viável de (PNL).

Demonstração. Suponha que a afirmação (a) é válida. Então, \mathcal{F} é convexa devido às hipóteses e pelo fato de $\max\{0, \cdot\}^2$ ser convexa e não decrescente. Pela proposição 3.6, temos $\nabla \mathcal{F}(\bar{x}) = 0$. Lembrando que o conjunto viável de (PNL) é não vazio, isso implica que \bar{x} é minimizador de \mathcal{F} . Logo, \bar{x} é viável.

Suponha agora que a afirmação (b) vale. Novamente pela proposição 3.6, temos $\nabla \mathcal{F}(\bar{x}) = 0$. Relembrando (2.3), podemos então escrever

$$\sum_{i \in I_{\geq}(\bar{x})} g_i(\bar{x}) \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{i=1}^p h_i(\bar{x}) \nabla h_i(\bar{x}) = 0.$$

Assim, pela condição EMFCQ, temos que $g_i(\bar{x}) = 0$ para todo $i \in I_{\geq}(\bar{x})$ e $h_i(\bar{x}) = 0$ para todo $i = 1, \dots, p$, e concluímos que \bar{x} é viável. \square

O resultado a seguir mostra que para um parâmetro de penalidade suficientemente grande, pontos quase viáveis que satisfazem $W_c(x) = 0$ são KKT.

Proposição 3.8. *Seja $\bar{x} \in \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ um ponto viável do problema (PNL). Então existem \bar{c} e $\bar{\delta} > 0$ (que dependem de \bar{x}) tais que se $\|x - \bar{x}\| \leq \bar{\delta}$ com $x \in \mathcal{R}$, $c \geq \bar{c}$ e $W_c(x) = 0$, então $(x, \lambda(x), \mu(x))$ é uma tripla KKT associada a (PNL).*

Demonstração. Inicialmente, observe que

$$Y_c(x)\lambda(x) = -cY_c(x)(g(x) + y_c(x)), \quad (3.15)$$

onde $Y_c(x) \doteq \text{diag}([(y_c)(x)]_1, \dots, [(y_c)(x)]_m)$. De fato, considere um índice i tal que $-\lambda_i(x)/c \geq g_i(x)$. Como nesse caso $\max\{g_i(x), -\lambda_i(x)/c\} = -\lambda_i(x)/c$, temos que

$$-c[y_c(x)]_i(g_i(x) + [y_c(x)]_i) = -c[y_c(x)]_i \max\left\{g_i(x), -\frac{\lambda_i(x)}{c}\right\} = [y_c(x)]_i \lambda_i(x).$$

Por outro lado, para i tal que $-\lambda_i(x)/c < g_i(x)$, temos $[y_c(x)]_i = 0$. Logo, a igualdade

$$-c[y_c(x)]_i(g_i(x) + [y_c(x)]_i) = [y_c(x)]_i \lambda_i(x)$$

também é satisfeita, e assim, (3.15) é válida.

Agora note que de (3.6) obtemos:

$$\begin{aligned} Jg(x)\nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) &= -\zeta^2 G(x)^2 \lambda(x) \\ &= -\zeta^2 G(x)(G(x) + Y_c(x))\lambda(x) + \zeta^2 G(x)Y_c(x)\lambda(x) \\ &= -\zeta^2 G(x)\Lambda(x)(g(x) + y_c(x)) + \zeta^2 G(x)Y_c(x)\lambda(x), \end{aligned}$$

onde na última igualdade usamos o fato de que $\Lambda(x)$, $G(x)$ e $Y_c(x)$ são matrizes diagonais. Combinando o resultado acima com (3.15), segue que

$$\frac{1}{c} Jg(x)\nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) = -\zeta^2 G(x) \left(\frac{1}{c} \Lambda(x) + Y_c(x) \right) (g(x) + y_c(x)).$$

E a definição de W_c em (3.13) nos dá

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} Jg(x)W_c(x) &= \frac{1}{c} Jg(x)\nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) + Jg(x)Jg(x)^\top (g(x) + y_c(x)) \\ &\quad + Jg(x)Jh(x)^\top h(x) \\ &= -\zeta^2 G(x) \left(\frac{1}{c} \Lambda(x) + Y_c(x) \right) (g(x) + y_c(x)) \\ &\quad + Jg(x)Jg(x)^\top (g(x) + y_c(x)) + Jg(x)Jh(x)^\top h(x). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Além disso, pela equação (3.7),

$$Jh(x)\nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) = -\zeta^2 H(x)^2 \mu(x),$$

e portanto

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} Jh(x)W_c(x) &= -\frac{1}{c} \zeta^2 H(x)^2 \mu(x) + Jh(x)Jg(x)^\top (g(x) + y_c(x)) \\ &\quad + Jh(x)Jh(x)^\top h(x) \\ &= Jh(x)Jg(x)^\top (g(x) + y_c(x)) \\ &\quad + \left(Jh(x)Jh(x)^\top - \frac{1}{c} \zeta^2 H(x)M(x) \right) h(x). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Agrupando os resultados (3.16) e (3.17), podemos escrever

$$\frac{1}{c} \begin{bmatrix} Jg(x) \\ Jh(x) \end{bmatrix} W_c(x) = K_c(x) \begin{bmatrix} g(x) + y_c(x) \\ h(x) \end{bmatrix}, \quad (3.18)$$

com

$$K_c(x) \doteq \begin{bmatrix} (K_c(x))_1 & Jg(x)Jh(x)^\top \\ Jh(x)Jg(x)^\top & (K_c(x))_2 \end{bmatrix},$$

onde

$$\begin{aligned} (K_c(x))_1 &\doteq Jg(x)Jg(x)^\top - \zeta^2 G(x) ((1/c)\Lambda(x) + Y_c(x)), \\ (K_c(x))_2 &\doteq Jh(x)Jh(x)^\top - (1/c)\zeta^2 H(x)M(x). \end{aligned}$$

Observando que \bar{x} é viável, se $c \rightarrow \infty$, então $y_c(\bar{x}) \rightarrow -g(\bar{x})$ e portanto $K_c(\bar{x}) \rightarrow N(\bar{x})$ (definição (3.4)). Pela hipótese de LICQ relaxada, temos que $N(\bar{x})$ é não singular e por continuidade existem \bar{c} e $\bar{\delta}$ tais que se $\|x - \bar{x}\| \leq \bar{\delta}$ e $c \geq \bar{c}$, então $K_c(x)$ é também não singular.

Sejam x e c tais que $\|x - \bar{x}\| \leq \bar{\delta}$, $c \geq \bar{c}$ e $W_c(x) = 0$. A equação (3.18) implica que $g(x) + y_c(x) = 0$ e $h(x) = 0$ pois $K_c(x)$ é não singular. Incorporando isso na definição de W_c nos dá $\nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) = 0$. Mais ainda,

$$g(x) + y_c(x) = 0 \Leftrightarrow -\min\{-g(x), \lambda(x)/c\} = 0.$$

Como o mínimo é uma função NCP e $c > 0$, temos que $0 \geq g(x) \perp \lambda(x) \geq 0$, e assim concluímos que $(x, \lambda(x), \mu(x))$ é uma tripla KKT. \square

Combinando os resultados anteriores, obtemos o seguinte teorema.

Teorema 3.9. *Sejam $\{x^k\} \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ sequências tais que $c_k \rightarrow \infty$ e $W_{c_k}(x^k) = 0$ para todo k . Considere $\{x^{k_j}\}$ uma subsequência de $\{x^k\}$ tal que $x^{k_j} \rightarrow \bar{x} \in \mathcal{R}$. Então, ou existe K tal que $(x^{k_j}, \lambda(x^{k_j}), \mu(x^{k_j}))$ é uma tripla KKT associada a (PNL) para todo $k_j > K$, ou \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} inviável para (PNL).*

Demonstração. Pela proposição 3.6, \bar{x} é ponto estacionário de \mathcal{F} . Se \bar{x} for viável, então podemos concluir pela proposição 3.8 que existe um índice K tal que $(x^{k_j}, \lambda(x^{k_j}), \mu(x^{k_j}))$ é uma tripla KKT para todo $k_j > K$. \square

Observe que a subsequência $\{x^{k_j}\}$ do teorema acima existe se, por exemplo, $\{x^k\}$ for limitada. O resultado a seguir é uma consequência imediata do teorema anterior, com a diferença de que iremos supor que todos os pontos estacionários da medida de inviabilidade \mathcal{F} são viáveis. Pelo corolário 3.7, essa propriedade é verdadeira, por exemplo, sob a condição EMFCQ, ou se g_i é convexa e h_i é afim.

Corolário 3.10. *Suponha que existe $\bar{c} > 0$ tal que*

$$Z \doteq \{x \in \mathbb{R}^n : W_c(x) = 0, c > \bar{c}\}$$

é limitado. Suponha ainda que $Z \subset \mathcal{R}$ e que todos os pontos estacionários de \mathcal{F} são viáveis para (PNL). Então existe $\tilde{c} > 0$ tal que se $W_c(x) = 0, c > \tilde{c}$ então $(x, \lambda(x), \mu(x))$ é uma tripla KKT associada a (PNL).

Demonstração. Suponha que não existe tal \tilde{c} , ou seja, que existem sequências $\{x^k\} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ com $W_{c_k}(x^k) = 0$ e $c_k \rightarrow \infty$ e tal que $(x^k, \lambda(x^k), \mu(x^k))$ não é KKT. Mas para $c_k > \bar{c}$, temos que $x^k \in Z$, que é limitado. Logo, existe uma subsequência convergente $\{x^{k_j}\}$ de $\{x^k\}$. Pelo teorema 3.9, isso não é possível, já que por hipótese não existem pontos estacionários de \mathcal{F} que são inviáveis. \square

Infelizmente, a hipótese de limitação do resultado anterior não é adequada pois ela não é fácil de ser verificada. Uma possibilidade é então utilizar um conjunto compacto exógeno que contém a solução, da mesma forma que em [DPG85, DPG89]. Não está claro, no entanto, como escolher tal compacto. Portanto, ainda está em aberto a apresentação de condições razoáveis que fazem com que os zeros de W_c sejam limitados, por exemplo, explorando a coercividade ou a monotonicidade sobre os dados do problema. Resultados nessa direção foram apresentados em [AS10], só que somente para problemas de complementaridade não linear, que são casos particulares de desigualdades variacionais.

Terminada a demonstração de que pontos KKT são equivalentes, sob certas condições, ao sistema de equações $W_c(x) = 0$, mostraremos agora que eles são equivalentes também a $\nabla w_c(x) = 0$, com w_c definido em (3.9).

Corolário 3.11. *Seja (x, λ, μ) uma tripla KKT associada ao problema (PNL) com $x \in \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$. Então, $\nabla w_c(x) = 0$ para todo $c > 0$.*

Demonstração. Fixe $c > 0$. Da igualdade (3.14) e da proposição 3.5, temos

$$\nabla w_c(x) = J\lambda(x)^\top (g(x) + y_c(x)) + J\mu(x)^\top h(x).$$

Como x é KKT, $h(x) = 0$ e $\max\{g(x), -\lambda(x)/c\} = 0$, e a conclusão segue. \square

Corolário 3.12. *Seja $\bar{x} \in \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ um ponto viável de (PNL). Então, existem $\bar{c}, \bar{\delta} > 0$ (que dependem de \bar{x}) tais que se $\|x - \bar{x}\| \leq \bar{\delta}$ com $x \in \mathcal{R}, c \geq \bar{c}$ e $\nabla w_c(x) = 0$, então $(x, \lambda(x), \mu(x))$ é uma tripla KKT associada a (PNL).*

Demonstração. A prova é análoga à demonstração da proposição 3.8. Nesse caso, temos:

$$K_c(x) \doteq \begin{bmatrix} (K_c(x))_{11} & (K_c(x))_{12} \\ (K_c(x))_{21} & (K_c(x))_{22} \end{bmatrix},$$

onde

$$\begin{aligned} (K_c(x))_{11} &\doteq Jg(x)Jg(x)^\top - \zeta^2 G(x) \left(\frac{1}{c} \Lambda(x) + Y_c(x) \right) + \frac{1}{c} Jg(x)J\lambda(x)^\top, \\ (K_c(x))_{12} &\doteq Jg(x)Jh(x)^\top + \frac{1}{c} Jg(x)J\mu(x)^\top, \\ (K_c(x))_{21} &\doteq Jh(x)Jg(x)^\top + \frac{1}{c} Jh(x)J\lambda(x)^\top, \\ (K_c(x))_{22} &\doteq Jh(x)Jh(x)^\top - \frac{1}{c} \zeta^2 H(x)M(x) + \frac{1}{c} Jh(x)J\mu(x)^\top. \end{aligned}$$

Tomando $c \rightarrow \infty$, podemos concluir também que $K_c(\bar{x}) \rightarrow N(\bar{x})$ e o resultado segue diretamente. \square

Corolário 3.13. *Sejam $\{x^k\} \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ sequências tais que $c_k \rightarrow \infty$ e $\nabla w_{c_k}(x^k) = 0$ para todo k . Considere $\{x^{k_j}\}$ uma subsequência de $\{x^k\}$ tal que $x^{k_j} \rightarrow \bar{x} \in \mathcal{R}$. Então, ou existe K tal que $(x^{k_j}, \lambda(x^{k_j}), \mu(x^{k_j}))$ é uma tripla KKT associada a (PNL) para todo $k_j > K$, ou \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} inviável para (PNL).*

Demonstração. É fácil observar que a proposição 3.6 é válida ao substituirmos W_c por ∇w_c . Então, o resultado segue diretamente da demonstração do teorema 3.9, substituindo a proposição 3.8 pelo corolário 3.12. \square

3.4 Resultados de exatidão

Utilizando-se dos resultados da seção anterior, provaremos agora a equivalência dos minimizadores de (PNL) e do problema irrestrito penalizado (2.8). Relembrando das notações e definições dadas na seção 2.2, provaremos inicialmente que w_c é uma penalidade exata fraca, ou seja, que os minimizadores globais coincidem. Para isso, necessitamos que os minimizadores satisfaçam LICQ relaxada, mais especificamente, consideramos a seguinte hipótese ao longo da seção.

Hipótese 3.14. *Considere que $\emptyset \neq \mathcal{G}_f \subset \mathcal{R}$ e $\mathcal{L}_w(c) \subset \mathcal{R}$ para todo c suficientemente grande. Note que esta última condição implica que $\mathcal{G}_w(c) \subset \mathcal{R}$ para todo c*

suficientemente grande.

Antes de apresentar o teorema principal associado aos minimizadores globais, consideramos alguns resultados adicionais.

Lema 3.15. *A função w_c definida em (3.9) no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ pode ser escrita como*

$$w_c(x) = f(x) + \langle \lambda(x), g(x) + y_c(x) \rangle + \frac{c}{2} \|g(x) + y_c(x)\|^2 + \langle \mu(x), h(x) \rangle + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2.$$

Demonstração. Observe que

$$\begin{aligned} & \langle \lambda(x), g(x) + y_c(x) \rangle + \frac{c}{2} \|g(x) + y_c(x)\|^2 \\ &= \langle \lambda(x), g(x) \rangle + \frac{c}{2} \|g(x)\|^2 + \langle \lambda(x), y_c(x) \rangle + \frac{c}{2} \|y_c(x)\|^2 + c \langle g(x), y_c(x) \rangle \\ &= \langle \lambda(x), g(x) \rangle + \frac{c}{2} \|g(x)\|^2 + \left\langle y_c(x), \frac{c}{2} y_c(x) - c \left(-\frac{\lambda(x)}{c} - g(x) \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Consideramos então dois casos:

1. Para índice i tal que $[y_c(x)]_i = -\lambda_i(x)/c - g_i(x)$, temos

$$[y_c(x)]_i \left(\frac{c}{2} [y_c(x)]_i - c \left(-\frac{\lambda_i(x)}{c} - g_i(x) \right) \right) = -\frac{c}{2} [y_c(x)]_i^2.$$

2. Do contrário, para i tal que $[y_c(x)]_i = 0$, temos

$$[y_c(x)]_i \left(\frac{c}{2} [y_c(x)]_i - c \left(-\frac{\lambda_i(x)}{c} - g_i(x) \right) \right) = 0 = -\frac{c}{2} [y_c(x)]_i^2.$$

Portanto, (3.19) é equivalente a

$$\langle \lambda(x), g(x) \rangle + \frac{c}{2} \|g(x)\|^2 - \frac{c}{2} \|y_c(x)\|^2,$$

e a conclusão segue. □

O lema abaixo mostra que o valor da função w_c e da função objetivo coincidem em pontos KKT.

Lema 3.16. *Seja (x, λ, μ) uma tripla KKT associada ao problema (PNL) com $x \in \mathcal{R}$. Então, $w_c(x) = f(x)$ para todo $c > 0$.*

Demonstração. Pela proposição 3.3(c), como x satisfaz a hipótese de LICQ relaxada, $\lambda(x) = \lambda$. Das condições KKT, $h(x) = 0$ e $0 \leq \lambda(x) \perp g(x) \leq 0$, ou seja, $g(x) + y_c(x) = 0$. A prova segue então da fórmula de w_c dada no lema 3.15. \square

Proposição 3.17. *Sejam $\{x^k\} \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ sequências tais que $\{x^k\}$ é limitada, $c_k \rightarrow \infty$ e $x^k \in \mathcal{G}_w(c_k)$ para todo k . Se a hipótese 3.14 é válida, então existe K tal que $x^k \in \mathcal{G}_f$ para todo $k > K$.*

Demonstração. Suponha que a afirmação é falsa, ou seja, que para todo K , existe $k > K$ tal que $x^k \notin \mathcal{G}_f$. Considere inicialmente $\hat{x} \in \mathcal{G}_f$, que existe pois $\mathcal{G}_f \neq \emptyset$ pela hipótese 3.14. Como \hat{x} é um ponto KKT e satisfaz LICQ relaxada novamente devido à hipótese 3.14, temos, pelo lema 3.16,

$$w_{c_k}(x^k) \leq w_{c_k}(\hat{x}) = f(\hat{x}), \quad (3.20)$$

para todo k . A hipótese de limitação de $\{x^k\}$ garante que existe uma subsequência de $\{x^k\}$ que converge a um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Sem perda de generalidade, podemos escrever $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = \bar{x}$. Tomando então o limite superior em ambos os lados de (3.20) temos

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} w_{c_k}(x^k) \leq f(\hat{x}). \quad (3.21)$$

Agora, pelo lema 3.15, w_{c_k} pode ser escrita como

$$\begin{aligned} w_{c_k}(x^k) &= f(x^k) + \langle \lambda(x^k), g(x^k) + y_{c_k}(x^k) \rangle + \frac{c_k}{2} \|g(x^k) + y_{c_k}(x^k)\|^2 \\ &\quad + \langle \mu(x^k), h(x^k) \rangle + \frac{c_k}{2} \|h(x^k)\|^2. \end{aligned}$$

Logo, a desigualdade (3.21) implica, pela continuidade das funções envolvidas, que $h(\bar{x}) = 0$ e $g(\bar{x}) + \max\{0, -g(\bar{x})\} = 0$, o que implica que $g(\bar{x}) \leq 0$. Ademais, como $c_k > 0$ e as normas de vetores são não negativas,

$$w_{c_k}(x^k) \geq f(x^k) + \langle \lambda(x^k), g(x^k) + y_{c_k}(x^k) \rangle + \langle \mu(x^k), h(x^k) \rangle.$$

Novamente tomando o limite superior em ambos os lados, temos que $f(\bar{x}) \leq \limsup_{k \rightarrow \infty} w_{c_k}(x^k)$. Portanto, $f(\bar{x}) \leq f(\hat{x})$ e $\bar{x} \in X$, isto é, $\bar{x} \in \mathcal{G}_f$.

Como \bar{x} é um ponto viável e satisfaz LICQ relaxada pela hipótese 3.14, existem \bar{c} e $\bar{\delta}$ conforme o corolário 3.12. Seja \bar{K} suficientemente grande tal que $\|x^k - \bar{x}\| \leq \bar{\delta}$, $c_k \geq \bar{c}$ e $x^k \in \mathcal{G}_w(c_k) \subset \mathcal{R}$ para todo $k > \bar{K}$. Como $x^k \in \mathcal{G}_w(c_k)$ implica

$\nabla w_{c_k}(x^k) = 0$, o mesmo corolário garante que x^k é um ponto KKT, e portanto viável, para todo $k > \bar{K}$. Além disso, o lema 3.16 e a desigualdade (3.20) implicam que

$$f(x^k) = w_{c_k}(x^k) \leq f(\hat{x}),$$

para todo $k > K$. Concluimos então que para tal \bar{K} , $x^k \in \mathcal{G}_f$ para todo $k > \bar{K}$, o que é uma contradição. \square

Proposição 3.18. *Suponha que a hipótese 3.14 seja válida. Então para todo $c > 0$, se $\mathcal{G}_w(c) \subseteq \mathcal{G}_f$, então $\mathcal{G}_w(c) = \mathcal{G}_f$.*

Demonstração. Considere $c > 0$ e $\tilde{x} \in \mathcal{G}_w(c)$. Como $\mathcal{G}_w(c) \subseteq \mathcal{G}_f$, \tilde{x} é um ponto KKT e, assim pelo lema 3.16, $w_c(\tilde{x}) = f(\tilde{x})$. Por outro lado, seja $\hat{x} \in \mathcal{G}_f$ tal que $\hat{x} \neq \tilde{x}$. Como \hat{x} é também um ponto KKT e satisfaz LICQ relaxada pela hipótese 3.14, temos novamente pelo lema 3.16, que $w_c(\hat{x}) = f(\hat{x})$. Logo, pela definição de soluções globais,

$$w_c(\tilde{x}) = f(\tilde{x}) = f(\hat{x}) = w_c(\hat{x}).$$

Dessa forma, $\hat{x} \in \mathcal{G}_w(c)$ e o resultado segue. \square

Juntando as duas proposições acima, temos o resultado final associado aos minimizadores globais.

Teorema 3.19. *Se existe $\bar{c} > 0$ tal que*

$$\bar{Z} \doteq \bigcup_{c \geq \bar{c}} \mathcal{G}_w(c)$$

é limitado e a hipótese 3.14 é válida, então w_c é uma penalidade exata fraca associada a (PNL).

Demonstração. Pela proposição 3.18, é suficiente mostrar que existe $\tilde{c} > 0$ tal que $\mathcal{G}_w(c) \subseteq \mathcal{G}_f$ para todo $c \geq \tilde{c}$. Suponha que existam sequências $\{x^k\} \in \bar{Z}$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ com $c_k \geq \bar{c}$, $c_k \rightarrow \infty$ e $x^k \in \mathcal{G}_w(c_k)$ para todo k . Como \bar{Z} é limitado, a proposição 3.17 garante que existe K tal que $x^k \in \mathcal{G}_f$ para todo $k > K$. O resultado segue tomando $\tilde{c} = c_K$. \square

Sabemos que a desvantagem da definição de exatidão fraca é que os métodos de minimização irrestrita só garantem soluções globais sob certas condições, como

a convexidade. Por esse motivo, desejamos provar que w_c é uma penalidade exata, mais especificamente, que além de ser uma penalidade exata fraca, todo minimizador local do problema penalizado é solução local do problema original restrito, para c suficientemente grande.

Primeiramente, vamos mostrar que a igualdade do lema 3.16 se torna uma desigualdade se o ponto considerado não é mais KKT, mas apenas viável.

Lema 3.20. *Seja $x \in \mathbb{R}^n$ um ponto viável para (PNL). Então, $w_c(x) \leq f(x)$ para todo $c > 0$.*

Demonstração. Tome $c > 0$ fixo. Pelo lema 3.15, $w_c(x)$ pode ser escrito como

$$w_c(x) = f(x) + \sum_{i=1}^m [\bar{y}_c(x)]_i + \langle \mu(x), h(x) \rangle + \frac{c}{2} \|h(x)\|^2,$$

onde

$$[\bar{y}_c(x)]_i \doteq \lambda_i(x) (g_i(x) + [y_c(x)]_i) + \frac{c}{2} (g_i(x) + [y_c(x)]_i)^2.$$

Como $h(x) = 0$, é suficiente mostrar que $[\bar{y}_c(x)]_i \leq 0$ para todo $i = 1, \dots, m$. Consideramos assim dois casos:

1. Para um índice i tal que $[y_c(x)]_i = -\lambda_i(x)/c - g_i(x)$, temos

$$[\bar{y}_c(x)]_i = \lambda_i(x) \left(-\frac{\lambda_i(x)}{c} \right) + \frac{c}{2} \left(-\frac{\lambda_i(x)}{c} \right)^2 = -\frac{\lambda_i^2(x)}{2c} \leq 0.$$

2. Para um índice i tal que $[y_c(x)]_i = 0$, isto é, $\lambda_i(x)/c + g_i(x) \geq 0$, temos

$$[\bar{y}_c(x)]_i = \lambda_i(x)g_i(x) + \frac{c}{2}g_i^2(x) = \frac{c}{2}g_i(x) \left[2 \left(\frac{\lambda_i(x)}{c} + g_i(x) \right) - g_i(x) \right].$$

Como $g_i(x) \leq 0$, o termo entre colchetes acima é não negativo, e portanto $[\bar{y}_c(x)]_i \leq 0$.

Logo, concluímos que $w_c(x) \leq f(x)$. □

Os resultados associados a minimizadores locais são semelhantes ao teorema 3.9 e ao corolário 3.13 no sentido de que, se não recuperamos uma solução local do problema original, então terminamos num ponto estacionário de \mathcal{F} que é inviável para o problema (PNL).

Teorema 3.21. *Sejam $\{x^k\} \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ sequências tais que $c_k \rightarrow \infty$ e $x^k \in \mathcal{L}_w(c_k)$ para todo k . Considere $\{x^{k_j}\}$ uma subsequência de $\{x^k\}$ tal que $x^{k_j} \rightarrow \bar{x} \in \mathcal{R}$. Se a hipótese 3.14 é válida, então ou existe K tal que $x^{k_j} \in \mathcal{L}_f$ para todo $k_j > K$, ou \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} inviável para (PNL).*

Demonstração. Note que $x^{k_j} \in \mathcal{L}_w(c_{k_j})$ implica em $\nabla w_{c_{k_j}}(x^{k_j}) = 0$ para todo k_j . Então, pelo corolário 3.13, existe K tal que x^{k_j} é KKT para todo $k_j > K$ ou \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} inviável. Considerando o primeiro caso, e fixando $k_j > K$, pelo lema 3.16, existe um vizinhança $V(x^{k_j})$ de x^{k_j} tal que

$$f(x^{k_j}) = w_{c_{k_j}}(x^{k_j}) \leq w_{c_{k_j}}(x), \quad \text{para todo } x \in V(x^{k_j}).$$

A desigualdade acima é claramente verdadeira para todo $x \in V(x^{k_j}) \cap X$. Logo, usando o lema 3.20 podemos concluir que

$$f(x^{k_j}) \leq w_{c_{k_j}}(x) \leq f(x), \quad \text{para todo } x \in V(x^{k_j}) \cap X.$$

Isto significa que $x^{k_j} \in \mathcal{L}_f$ para todo $k_j > K$, o que completa a demonstração. \square

Corolário 3.22. *Suponha que existe $\bar{c} > 0$ tal que*

$$\hat{Z} \doteq \bigcup_{c > \bar{c}} \mathcal{L}_w(c)$$

é limitado. Suponha ainda que a hipótese 3.14 é válida e que todos os pontos estacionários de \mathcal{F} são viáveis para (PNL). Então existe $\tilde{c} > 0$ tal que se $x \in \mathcal{L}_w(c)$ e $c > \tilde{c}$, então $x \in \mathcal{L}_f$.

Demonstração. Suponha que o resultado é falso, ou seja, que existem sequências $\{x^k\} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ com $x^k \in \mathcal{L}_w(c_k)$ e $c_k \rightarrow \infty$ e tal que $x^k \notin \mathcal{L}_f$. Para $c_k > \tilde{c}$, temos que $x^k \in \hat{Z}$, que é limitado. A contradição segue do teorema 3.21 e do fato de não existir pontos estacionários de \mathcal{F} que sejam inviáveis. \square

Capítulo 4

O algoritmo

No capítulo anterior, construímos uma penalidade exata w_c para o problema (PNL) e uma reformulação W_c das suas condições KKT. Agora, definiremos um método local do tipo Gauss-Newton para resolver o sistema de equações $W_c(x) = 0$, associado a pontos KKT, e globalizaremos tal método, em particular, utilizando a penalidade exata w_c . Inicialmente, na seção 4.1, mostraremos como escolher parâmetros de penalidade que garantem pontos KKT do problema. A seção 4.2 será dedicada ao método de Newton semi-suave que pode ser aplicado ao sistema $W_c(x) = 0$, e à demonstração da sua taxa de convergência superlinear. Finalmente, mostraremos na seção 4.3 algumas ideias para globalizar o método.

4.1 Atualização do parâmetro de penalidade

Os resultados de exatidão apresentados na seção 3.4 não nos mostram uma maneira de escolher o parâmetro de penalidade c . Da mesma forma que em [AS10], buscamos então uma forma de atualizá-lo adaptando um algoritmo de Glad e Polak [GP79]. A ideia, apresentada originalmente em [Pol76], é criar uma função que mede o risco de computar um zero de W_c que não é ponto KKT. Ela é denominada de *função de teste* e para construí-la, consideramos primeiro a seguinte notação:

$$a_c(x) \doteq g(x) + y_c(x) = \max \left\{ g(x), -\frac{\lambda(x)}{c} \right\}, \quad (4.1)$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$ e $c > 0$. Além disso, a seguinte propriedade vale.

Lema 4.1. *Para todo $c > 0$, $a_c(x) = 0$ se, e somente se, $0 \geq g(x) \perp \lambda(x) \geq 0$.*

Demonstração. O resultado segue facilmente porque

$$\max \left\{ g(x), -\frac{\lambda(x)}{c} \right\} = -\min \left\{ -g(x), \frac{\lambda(x)}{c} \right\},$$

$c > 0$ e a função mínimo é NCP. \square

A função de teste que utilizamos é uma adaptação da função definida em [GP79], levando-se em conta a viabilidade das restrições de igualdade $h(x) = 0$ (inexistentes em [GP79]) e, naturalmente, a reformulação W_c . Para todo $c > 0$, ela é definida por $t_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$t_c(x) \doteq -\|W_c(x)\|^2 + \frac{1}{c^\gamma} (\|a_c(x)\|^2 + \|h(x)\|^2),$$

com $\gamma > 0$. É fácil observar que t_c é contínua, para todo $c > 0$, devido à continuidade das funções envolvidas. Na proposição a seguir observamos que t_c é de fato uma função de teste.

Proposição 4.2. *As seguintes afirmações são equivalentes:*

- (a) $(x, \lambda(x), \mu(x))$ é uma tripla KKT associada a (PNL).
- (b) $W_c(x) = 0$, $a_c(x) = 0$ e $h(x) = 0$.
- (c) $W_c(x) = 0$ e $t_c(x) \leq 0$.

Demonstração. Por (3.13) e (4.1), temos que

$$W_c(x) = \nabla_x L(x, \lambda(x), \mu(x)) + cJg(x)^\top a_c(x) + cJh(x)^\top h(x).$$

Juntamente com o lema 4.1 e a definição de tripla KKT, temos a equivalência entre (a) e (b). Por outro lado, a equivalência entre (b) e (c) é imediata pela fórmula de $t_c(x)$, e concluímos o resultado. \square

Mostraremos agora que para qualquer $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz LICQ relaxada, ou \bar{x} é inviável para (PNL) e estacionário da medida de inviabilidade \mathcal{F} , ou existe um parâmetro \bar{c} suficientemente grande de modo que $t_c(x) \leq 0$ para todo $c \geq \bar{c}$ e todo x contido numa vizinhança de \bar{x} . Pela proposição 4.2, esse segundo caso nos indica uma forma de atualizar o parâmetro de penalidade c . Mais precisamente, a cada

cômputo aproximado do zero de W_c , aumentamos o valor do parâmetro c caso o teste t_c nesse ponto seja maior que zero.

Lema 4.3. *Seja $S \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto compacto sem pontos KKT. Então, ou existem $\bar{c}, \bar{\varepsilon}$ (que dependem de S) tais que $\|W_c(x)\| \geq \bar{\varepsilon}$ para todo $x \in S$ e todo $c \geq \bar{c}$; ou existem $\{x^k\} \subset S, \{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ tais que $c_k \rightarrow \infty, \|W_{c_k}(x^k)\| \rightarrow 0$ e $\{x^k\}$ converge para um ponto estacionário de \mathcal{F} que é inviável para (PNL).*

Demonstração. Se a primeira afirmação não é válida, então existem sequências $\{x^k\} \subset S$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ tais que $x^k \rightarrow \bar{x} \in S, c_k \rightarrow \infty$ e $\|W_{c_k}(x^k)\| \rightarrow 0$. Pela definição de W_{c_k} em (3.13) e usando a continuidade das funções envolvidas ($\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$ são contínuas por LICQ relaxada), temos:

$$\begin{aligned} & \nabla f(x^k) + Jg(x^k)^\top \lambda(x^k) + Jh(x^k)^\top \mu(x^k) \\ & + c_k \left(Jg(x^k)^\top \max \left\{ g(x^k), -\frac{\lambda(x^k)}{c_k} \right\} + Jh(x^k)^\top h(x^k) \right) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Como $c_k \rightarrow \infty, Jg(\bar{x})^\top \max\{g(\bar{x}), 0\} + Jh(\bar{x})^\top h(\bar{x}) = 0$, ou seja, \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} . Suponha por contradição que \bar{x} é viável e defina

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}^k & \doteq \lambda(x^k) + c_k \max \left\{ g(x^k), -\frac{\lambda(x^k)}{c_k} \right\} = \max \left\{ \lambda(x^k) + c_k g(x^k), 0 \right\} \quad e \\ \bar{\mu}^k & \doteq \mu(x^k) + c_k h(x^k), \end{aligned}$$

para todo k . Definindo também

$$\varepsilon_k \doteq \nabla f(x^k) + Jg(x^k)^\top \bar{\lambda}^k + Jh(x^k)^\top \bar{\mu}^k,$$

segue de (4.2) que $\varepsilon_k \rightarrow 0$. Claramente, $\bar{\mu}^k \rightarrow \bar{\mu}$ para algum $\bar{\mu}$ porque $h(\bar{x}) = 0$. Provemos agora que $\bar{\lambda}^k \rightarrow \bar{\lambda}$ para algum $\bar{\lambda} \geq 0$.

Pela definição de $\bar{\lambda}^k$, se $g_i(\bar{x}) < 0$ então $\bar{\lambda}_i^k = 0$ para k suficientemente grande. Sem perda de generalidade, podemos escrever $Jg(x^k)^\top = [Jg(x^k)^\top_{=} | Jg(x^k)^\top_{\neq}]$, sendo que $Jg(x^k)_{=}^\top$ e $Jg(x^k)_{\neq}^\top$ correspondem às partes de $Jg(x^k)$ com $\bar{\lambda}_i^k = 0$ e $\bar{\lambda}_i^k \neq 0$, respectivamente. Da mesma forma, $\bar{\lambda}^k = (0^\top, (\bar{\lambda}_{\neq}^k)^\top)^\top$. Assim, para todo k ,

$$Jg(x^k)^\top_{\neq} (\bar{\lambda}_{\neq}^k) = \varepsilon_k - \nabla f(x^k) - Jh(x^k)^\top \bar{\mu}^k.$$

Considere k suficientemente grande. Multiplicando a igualdade acima por $Jg(x^k)_{\neq}^\top$

e pela hipótese de LICQ relaxada,

$$\bar{\lambda}_{\neq}^k = (Jg(x^k)_{\neq} Jg(x^k)_{\neq}^\top)^{-1} Jg(x^k)_{\neq} (\varepsilon_k - \nabla f(x^k) - Jh(x^k)^\top \bar{\mu}^k).$$

Logo, como o termo da direita é limitado, temos que $\bar{\lambda}_{\neq}^k$ é convergente. Consequentemente, $\bar{\lambda}^k \rightarrow \bar{\lambda}$ para algum $\bar{\lambda} \geq 0$ e

$$\nabla f(\bar{x}) + Jg(\bar{x})^\top \bar{\lambda} + Jh(\bar{x})^\top \bar{\mu} = 0,$$

ou seja, $\nabla_x L(\bar{x}, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = 0$. A condição de complementaridade segue da definição de $\bar{\lambda}^k$. Portanto, $(\bar{x}, \bar{\lambda}, \bar{\mu})$ é uma tripla KKT, o que é uma contradição, pois $\bar{x} \in S$ e esse conjunto S não possui pontos KKT por hipótese. \square

Proposição 4.4. *Para todo $\bar{x} \in \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$, ou \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} que é inviável para (PNL), ou existem $\bar{c}, \bar{\delta} > 0$ tais que se $c \geq \bar{c}$ e $\|x - \bar{x}\| \leq \bar{\delta}$ com $x \in \mathcal{R}$, então $t_c(x) \leq 0$.*

Demonstração. Suponha que a segunda afirmação não é válida, ou seja, que existam seqüências $\{x^k\} \subset \mathbb{R}^n$ e $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ tais que $x^k \rightarrow \bar{x}$, $c_k \rightarrow \infty$ e $t_{c_k}(x^k) > 0$ (o que mostra diretamente que x^k não é KKT para todo k). Considere então dois casos:

1. Suponha que \bar{x} não é um ponto KKT. Então, pelo lema 4.3 aplicado ao conjunto $S \doteq \{x^k\} \cup \{\bar{x}\}$, temos que \bar{x} é um ponto estacionário de \mathcal{F} que é inviável, ou temos

$$t_{c_k}(x^k) \leq -\bar{\varepsilon}^2 + \frac{1}{c_k^\gamma} (\|a_{c_k}(x^k)\|^2 + \|h(x^k)\|^2),$$

para todo k suficientemente grande. Como $c_k^\gamma \rightarrow \infty$, temos uma contradição nesse último caso, conforme queríamos.

2. Suponha agora que \bar{x} é um ponto KKT. Pela equação (3.18),

$$K_{c_k}(x^k) \begin{bmatrix} a_{c_k}(x^k) \\ h(x^k) \end{bmatrix} = \frac{1}{c_k} \begin{bmatrix} Jg(x^k) \\ Jh(x^k) \end{bmatrix} W_{c_k}(x^k)$$

para todo k . Lembremos que $K_{c_k}(x^k)$ converge para a matriz não singular $N(\bar{x})$ (definição (3.4)) e $Jg(x^k)$, $Jh(x^k)$ convergem respectivamente para

$Jg(\bar{x})$ e $Jh(\bar{x})$. Então, para k suficientemente grande, temos:

$$\left\| \begin{bmatrix} a_{c_k}(x^k) \\ h(x^k) \end{bmatrix} \right\| \leq \frac{2}{c_k} \|N^{-1}(\bar{x})\| \|W_{c_k}(x^k)\| \left\| \begin{bmatrix} Jg(\bar{x}) \\ Jh(\bar{x}) \end{bmatrix} \right\|.$$

Tomando o quadrado em ambos os lados da desigualdade acima,

$$\begin{aligned} \|a_{c_k}(x^k)\|^2 + \|h(x^k)\|^2 &\leq \frac{2}{c_k^2} \|N^{-1}(\bar{x})\|^2 \|W_{c_k}(x^k)\|^2 \times \\ &\times (\|Jg(\bar{x})\|^2 + \|Jh(\bar{x})\|^2). \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} t_{c_k}(x^k) &= -\|W_{c_k}(x^k)\|^2 + \frac{1}{c_k^\gamma} (\|a_{c_k}(x^k)\|^2 + \|h(x^k)\|^2) \\ &\leq \left(-1 + \frac{2}{c_k^{\gamma+2}} \|N^{-1}(\bar{x})\|^2 (\|Jg(\bar{x})\|^2 + \|Jh(\bar{x})\|^2) \right) \|W_{c_k}(x^k)\|^2, \end{aligned}$$

que não é positivo, pois $c_k^{\gamma+2} \rightarrow \infty$, dando novamente uma contradição.

□

Terminamos a seção com a estratégia de atualização dinâmica do parâmetro de penalidade e o teorema associado. Observamos em particular que o modelo de iteração de algoritmo $\mathcal{A}(x, c)$, denotado abaixo, engloba o método de Newton semi-suave que utilizaremos na seção 4.2.

Algoritmo 4.5. *Atualização do parâmetro de penalidade exata.*

1. Seja $\mathcal{A}(x, c)$ uma função de iteração de um algoritmo que computa um zero de W_c . Inicialize $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $c_0 > 0$, $\xi > 1$ e $\gamma > 0$. Tome $k = 0$.
2. Se x^k é um ponto KKT associado a (PNL), pare.
3. Enquanto $t_{c_k}(x^k) > 0$, faça $c_k = \xi c_k$.
4. Compute $x^{k+1} = \mathcal{A}(x^k, c_k)$, tome $k = k + 1$ e vá para o passo 2.

Teorema 4.6. *Seja $\{x^k\} \subseteq \mathcal{R} \subset \mathbb{R}^n$ uma sequência produzida pelo algoritmo 4.5. Se $\{x^k\}$ for limitada e infinita, então para cada um de seus pontos de acumulação*

pertencentes a \mathcal{R} , ou ele satisfaz as condições KKT ou é um ponto estacionário de \mathcal{F} que é inviável para (PNL).

Demonstração. Seja \bar{x} um ponto de acumulação de $\{x^k\}$. Então, pela proposição 4.4, se \bar{x} não é um ponto estacionário de \mathcal{F} que é inviável, então $t_{c_k}(x^k) \leq 0$ para todo k suficientemente grande. Seja \bar{c} o maior valor de c_k computado. Como \bar{x} é um ponto de acumulação viável de um algoritmo que computa o zero de W_c , temos que $W_{\bar{c}}(\bar{x}) = 0$. Além disso, a continuidade de $t_{\bar{c}}$ garante que $t_{\bar{c}}(\bar{x}) \leq 0$. Assim, pela proposição 4.2, segue que \bar{x} é um ponto KKT. \square

4.2 Convergência local

Da mesma forma que a penalidade exata para desigualdades variacionais [AS10] e conforme a igualdade (3.14), $W_c(x)$ não contém termos de segunda ordem associados a (PNL), ao contrário de $\nabla w_c(x)$. Se W_c for também semi-suave, podemos resolver o sistema de equações

$$W_c(x) = 0 \tag{4.3}$$

usando o método de Newton semi-suave, apresentado na seção 2.4. Na proposição a seguir provamos que W_c é de fato semi-suave, e sob hipóteses adicionais, fortemente semi-suave.

Proposição 4.7. *A função $W_c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ definida em (3.12) é semi-suave. Além disso, se $\nabla^2 f$, $\nabla^2 g_i$, $i = 1, \dots, m$ e $\nabla^2 h_i$, $i = 1, \dots, p$ são localmente Lipschitz contínuas, então W_c é fortemente semi-suave.*

Demonstração. Inicialmente, note que $\max\{0, \cdot\}$ é fortemente semi-suave [FP03b, proposição 7.4.7] e que todas as demais funções envolvidas são continuamente diferenciáveis, por hipótese ou por construção (no caso de $\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$). Como funções continuamente diferenciáveis são suaves e como a soma e a composta de funções semi-suaves são semi-suaves, temos que W_c é semi-suave. Além disso, funções continuamente diferenciáveis com derivadas Lipschitz contínuas são fortemente semi-suaves [FP03b, proposição 7.4.5(b)], o que mostra que a segunda parte da proposição também é satisfeita. \square

Para provar que o método de Newton semi-suave aplicado ao sistema (4.3) converge superlinearmente, pelo teorema 2.22, precisamos provar que W_c é fortemente

BD-regular (definição 2.20) em um ponto KKT. Para isso, o primeiro passo é caracterizar os elementos do B -subdiferencial em uma vizinhança de um ponto KKT. Nesse caso, o seguinte lema é necessário.

Lema 4.8. *Sejam $c > 0$ e x^* um ponto KKT associado a (PNL) tal que $x \in \mathcal{R}$ para todo x próximo de x^* . Defina*

$$A(x) \doteq \left\{ i \in \{1, \dots, m\} : g_i(x) \geq -\frac{\lambda_i(x)}{c} \right\}$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Então, existe uma vizinhança $V(x^*)$ de x^* tal que

$$I^* \setminus I_0^* \subseteq A(x) \subseteq I^*,$$

para todo $x \in V(x^*)$, lembrando que I^* e I_0^* são definidos em (2.4).

Demonstração. Considere $i \in I^* \setminus I_0^*$ e provemos a primeira inclusão. Pela definição dos conjuntos de índices, $g_i(x^*) = 0$ e $\lambda_i(x^*) > 0$. Como g_i e λ_i são contínuas, por definição e por LICQ relaxada, respectivamente, concluímos que $i \in A(x)$ para x suficientemente próximo de x^* . Para provar a outra inclusão, considere $i \notin I^*$ e provemos que $i \notin A(x)$. Pela definição de I^* e pela condição de complementaridade, $g_i(x^*) < 0$ e $\lambda_i(x^*) = 0$. Logo, novamente pela continuidade de g_i e λ_i , resulta que $i \notin A(x)$ para todo x próximo de x^* . \square

Teorema 4.9. *Seja x^* um ponto KKT associado a (PNL) com $x^* \in \mathcal{R}$. Considere ainda $c > 0$ e $V(x^*) \subset \mathcal{R}$ uma vizinhança de x^* . Se $x \in V(x^*)$, então para todo $H \in \partial_B W_c(x)$, existe um conjunto de índices $I \subseteq I_0^*$ tal que*

$$H = H_c(x, I) + S_c(x, I),$$

onde

$$\begin{aligned} H_c(x, I) &\doteq \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda(x), \mu(x)) + \sum_{i \in I^* \setminus I} \nabla g_i(x) (\nabla \lambda_i(x)^\top + c \nabla g_i(x)^\top) \\ &\quad + \sum_{i=1}^p \nabla h_i(x) (\nabla \mu_i(x)^\top + c \nabla h_i(x)^\top), \end{aligned} \tag{4.4}$$

e $S_c(x, I)$ é uma matriz tal que $\|S_c(x, I)\| \leq \rho(x)$, com ρ sendo uma função contínua não negativa tal que $\rho(x^*) = 0$.

Demonstração. Considere $x \in V(x^*)$ e $H \in \partial_B W_c(x)$ fixos. Seja $\{x^k\}$ uma sequência tal que $x^k \rightarrow x$, existe $JW_c(x^k)$ para todo k e $JW_c(x^k) \rightarrow H$. Relembrando a fórmula de W_c em (3.12), essa jacobiana existe quando $g_i(x^k) \neq -\lambda_i(x^k)/c$ para todo i , ou se, para todo i tal que $g_i(x^k) = -\lambda_i(x^k)/c$, temos $\nabla g_i(x^k) = -\nabla \lambda_i(x^k)/c$. Considere agora os conjuntos de índices definidos abaixo:

$$\begin{aligned} A^k &\doteq \left\{ i \in \{1, \dots, m\} : g_i(x^k) \geq -\frac{\lambda_i(x^k)}{c} \right\} \quad \text{e} \\ N^k &\doteq \left\{ i \in \{1, \dots, m\} : g_i(x^k) < -\frac{\lambda_i(x^k)}{c} \right\}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Podemos então escrever $W_c(x^k)$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} W_c(x^k) &= \nabla f(x^k) + Jg(x^k)^\top \lambda(x^k) + Jh(x^k)^\top \mu(x^k) \\ &\quad + c \sum_{i \in A^k} g_i(x^k) \nabla g_i(x^k) - \sum_{i \in N^k} \lambda_i(x^k) \nabla g_i(x^k) + cJh(x^k)^\top h(x^k). \end{aligned}$$

Derivando a expressão acima, temos:

$$\begin{aligned} JW_c(x^k) &= \nabla^2 f(x^k) + \sum_{i=1}^m \lambda_i(x^k) \nabla^2 g_i(x^k) + \sum_{i=1}^m \nabla g_i(x^k) \nabla \lambda_i(x^k)^\top \\ &\quad + \sum_{i=1}^p \mu_i(x^k) \nabla^2 h_i(x^k) + \sum_{i=1}^p \nabla h_i(x^k) \nabla \mu_i(x^k)^\top \\ &\quad + c \sum_{i \in A^k} g_i(x^k) \nabla^2 g_i(x^k) + c \sum_{i \in A^k} \nabla g_i(x^k) \nabla g_i(x^k)^\top \\ &\quad - \sum_{i \in N^k} \lambda_i(x^k) \nabla^2 g_i(x^k) - \sum_{i \in N^k} \nabla g_i(x^k) \nabla \lambda_i(x^k)^\top \\ &\quad + c \sum_{i=1}^p h_i(x^k) \nabla^2 h_i(x^k) + c \sum_{i=1}^p \nabla h_i(x^k) \nabla h_i(x^k)^\top. \end{aligned}$$

Pela definição de $\nabla_{xx} L(x, \lambda(x), \mu(x))$ e observando que $A^k = \{1, \dots, m\} \setminus N^k$,

$$\begin{aligned} JW_c(x^k) &= \nabla_{xx} L(x^k, \lambda(x^k), \mu(x^k)) + \sum_{i \in A^k} \nabla g_i(x^k) \left(\nabla \lambda_i(x^k)^\top + c \nabla g_i(x^k)^\top \right) \\ &\quad + \sum_{i=1}^p \nabla h_i(x^k) \left(\nabla \mu_i(x^k)^\top + c \nabla h_i(x^k)^\top \right) + S_c(x^k), \end{aligned}$$

com

$$S_c(x^k) \doteq c \sum_{i \in A^k} g_i(x^k) \nabla^2 g_i(x^k) - \sum_{i \in N^k} \lambda_i(x^k) \nabla^2 g_i(x^k) + c \sum_{i=1}^p h_i(x^k) \nabla^2 h_i(x^k).$$

Agora, pelo lema 4.8, para k suficientemente grande,

$$I^* \setminus I_0^* \subseteq A^k \subseteq I^*.$$

Assim, tomando $k \rightarrow \infty$, obtemos $g_i(x^k) \rightarrow 0$ para todo $i \in A^k$. É fácil ver também que $N^k \subseteq I_0^* \cup (\{1, \dots, m\} \setminus I^*)$, o que implica que $\lambda_i(x^k) \rightarrow 0$ para todo $i \in N^k$. Além disso, para k suficientemente grande e tomando uma subsequência, temos que $A^k = I^* \setminus I$ para algum $I \subseteq I_0^*$, e $h_i(x^k) \rightarrow 0$ para $i = 1, \dots, p$. O resultado segue então pela definição de B -subdiferencial. \square

Corolário 4.10. *Sejam $c > 0$ e x^* um ponto KKT associado a (PNL) com $x^* \in \mathcal{R}$. Então, para todo $H \in \partial_B W_c(x^*)$, existe um conjunto de índices $I \subseteq I_0^*$ tal que $H = H_c(x, I)$, onde $H_c(x, I)$ é definido em (4.4).*

Demonstração. Como $\rho(x^*) = 0$, temos que $S_c(x^*, I) = 0$ para qualquer I e $c > 0$. Logo, a conclusão segue do teorema 4.9. \square

Um resultado análogo pode ser obtido quando trocamos W_c por ∇w_c . A seguir, denotamos o B -subdiferencial de ∇w_c em $x \in \mathbb{R}^n$ por $\partial_B^2 w_c(x)$. Além disso, supomos momentaneamente que as funções associadas ao problema (PNL) possuem derivadas de terceira ordem.

Corolário 4.11. *Seja x^* um ponto KKT associado a (PNL) com $x^* \in \mathcal{R}$. Considere ainda $c > 0$ e $V(x^*) \subset \mathcal{R}$ uma vizinhança de x^* . Se $x \in V(x^*)$, então para todo $H \in \partial_B^2 w_c(x)$, existe um conjunto de índices $I \subseteq I_0^*$ tal que*

$$H = \tilde{H}_c(x, I) + \tilde{S}_c(x, I),$$

onde $\tilde{S}_c(x, I)$ é uma matriz tal que $\|\tilde{S}_c(x, I)\| \leq \rho(x)$, com ρ definida no teo-

rema 4.9, e

$$\begin{aligned} \tilde{H}_c(x, I) = & H_c(x, I) + \sum_{i \in I^* \setminus I} \nabla \lambda_i(x) \nabla g_i(x)^\top - \frac{1}{c} \sum_{i \in I} \nabla \lambda_i(x) \nabla \lambda_i(x)^\top \\ & + \sum_{i=1}^p \nabla \mu_i(x) \nabla h_i(x)^\top, \end{aligned} \quad (4.6)$$

com $H_c(x, I)$ definida em (4.4).

Demonstração. A demonstração é análoga a do teorema 4.9. Assim, considere $x \in V(x^*)$ e $H \in \partial_B^2 w_c(x)$ fixo. Seja $\{x^k\}$ uma sequência tal que $x^k \rightarrow x$, existe a hessiana $\nabla^2 w_c(x^k)$ para todo k e $\nabla^2 w_c(x^k) \rightarrow H$. Pela igualdade (3.14) com $x = x^k$ e reescrevendo-a em termos de A^k e N^k (definidos em (4.5)), temos:

$$\nabla w_c(x^k) = W_c(x^k) + \sum_{i \in A^k} g_i(x^k) \nabla \lambda_i(x^k) - \frac{1}{c} \sum_{i \in N^k} \lambda_i(x^k) \nabla \lambda_i(x^k) + J\mu(x^k)^\top h(x^k).$$

Derivando essa expressão, obtemos:

$$\begin{aligned} \nabla^2 w_c(x^k) = & JW_c(x^k) + \sum_{i \in A^k} \nabla \lambda_i(x^k) \nabla g_i(x^k)^\top - \frac{1}{c} \sum_{i \in N^k} \nabla \lambda_i(x^k) \nabla \lambda_i(x^k)^\top \\ & + \sum_{i=1}^p \nabla \mu_i(x^k) \nabla h_i(x^k)^\top + \tilde{S}_c(x^k), \end{aligned}$$

onde

$$\tilde{S}_c(x^k) \doteq \sum_{i \in A^k} g_i(x^k) \nabla^2 \lambda_i(x^k) - \frac{1}{c} \sum_{i \in N^k} \lambda_i(x^k) \nabla^2 \lambda_i(x^k) + \sum_{i=1}^p h_i(x^k) \nabla^2 \mu_i(x^k). \quad (4.7)$$

O resultado segue então de forma análoga à demonstração do teorema 4.9. \square

Corolário 4.12. *Sejam $c > 0$ e x^* um ponto KKT associado a (PNL) com $x^* \in \mathcal{R}$. Então, para todo $H \in \partial_B^2 w_c(x^*)$, existe um conjunto de índices $I \subseteq I_0^*$ tal que $H = \tilde{H}_c(x, I)$, onde $\tilde{H}_c(x, I)$ é definido em (4.6).*

Demonstração. Como $\rho(x^*) = 0$, temos que $\tilde{S}_c(x^*, I) = 0$ para qualquer I e $c > 0$. Logo, pelo corolário 4.11, o resultado segue. \square

Conforme discutimos no final da seção 3.2 e observando o termo (4.7), ressaltamos que uma avaliação de $\nabla^2 w_c(x)$, supondo que ela existe, requer avaliações de

$\nabla^2 \lambda_i(x)$ e $\nabla^2 \mu_i(x)$. Pela proposição 3.3(d), essas hessianas requerem, por sua vez, derivadas de terceira ordem das funções f , g_i e h_i , o que dificulta, do ponto de vista computacional, resolver o sistema $\nabla w_c(x) = 0$ através do método de Newton semi-suave. Apesar disso, para fins teóricos, mostraremos os resultados de convergência para ambos os sistemas ((4.3) e com ∇w_c).

Para provarmos esses resultados de convergência, devemos analisar primeiro algumas hipóteses. Em [FKP07], os autores sugerem utilizar a hipótese de regularidade fraca (definição 2.6) no contexto de desigualdades variacionais. Propomos agora outras condições que garantem a convergência, mas que sejam mais familiares no contexto de otimização. A primeira delas é a condição suficiente de segunda ordem (definição 2.4). Infelizmente, ela sozinha não foi suficiente para que conseguíssemos a prova da taxa de convergência.

Conforme veremos adiante, uma hipótese adicional que garante a convergência rápida é a *complementaridade estrita*, ou seja,

$$I_0^* = \emptyset, \quad \text{onde } x^* \text{ é ponto KKT.}$$

Sabemos, no entanto, que essa hipótese é forte, no sentido de que não é satisfeita em muitos casos. Os resultados clássicos em programação quadrática sequencial [NW99, capítulo 18], por exemplo, utilizam essas duas hipóteses, mas trabalhos recentes dessa área [JTHZ05, Wri02] usam, ao invés disso, a condição forte e suficiente de segunda ordem (definição 2.5). Essa hipótese também garante a taxa de convergência superlinear, mas pela proposição 2.7, ela é mais forte que a regularidade fraca. Logo, uma outra alternativa que propomos é usar a condição suficiente de segunda ordem com uma outra condição associada à não singularidade da hessiana do lagrangiano $\nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*)$.

A hipótese, que definimos na equação (4.8) do teorema abaixo, é parecida com a regularidade fraca para $I = I_0^*$. A diferença está em pedir não singularidade apenas em pontos de $U_{I_0^*}$ fora de U_0 . Nesse caso, desejamos que a condição suficiente de segunda ordem lide com os elementos de $U_{I_0^*}$ pertencentes a U_0 . Provemos finalmente a não singularidade dos B-subdiferenciais de W_c em pontos KKT.

Proposição 4.13. *Seja x^* um ponto KKT associado a (PNL) com $x^* \in \mathcal{R}$. Suponha que uma das hipóteses a seguir é verdadeira:*

- (a) *A regularidade fraca é satisfeita em x^* .*

(b) A condição forte e suficiente de segunda ordem é satisfeita em x^* .

(c) A condição suficiente de segunda ordem é satisfeita em x^* e

$$P_{U_{I_0^*}} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d \neq 0, \quad \text{para todo } d \in U_{I_0^*} \setminus U_0, d \neq 0. \quad (4.8)$$

(d) A condição suficiente de segunda ordem e a complementaridade estrita são satisfeitas em x^* .

Então W_c é fortemente BD-regular em x^* para todo $c > 0$ suficientemente grande.

Demonstração. Suponha, por contradição, que existem sequências $\{c_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ e $\{H_k\} \subset \mathbb{R}^{n \times n}$ tais que $c_k \rightarrow +\infty$ e $H_k \in \partial_B W_{c_k}(x^*)$ é singular para todo k . Então, existe $\{d^k\} \subset \mathbb{R}^n$ com $d^k \neq 0$ e $\|d^k\| = 1$, tal que $H_k^\top d^k = 0$ para todo k e, conseqüentemente, $\langle H_k^\top d^k, d^k \rangle = 0$ para todo k . Suponha, sem perda de generalidade, que $\{d^k\}$ converge para algum $d^* \in \mathbb{R}^n$. Pelo corolário 4.10, para todo k , existe um conjunto de índices $I_k \subseteq I_0^*$ tal que

$$\begin{aligned} H_k^\top d^k &= \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d^k + \sum_{i \in I^* \setminus I_k} \langle \nabla g_i(x^*), d^k \rangle (\nabla \lambda_i(x^*) + c_k \nabla g_i(x^*)) \\ &\quad + \sum_{i=1}^p \langle \nabla h_i(x^*), d^k \rangle (\nabla \mu_i(x^*) + c_k \nabla h_i(x^*)). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Considerando que existem finitos conjuntos I_k , podemos supor, sem perda de generalidade, que $I_k = I$ para todo k . Portanto,

$$\begin{aligned} \langle H_k^\top d^k, d^k \rangle &= \langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d^k, d^k \rangle + \sum_{i \in I^* \setminus I} \langle \nabla g_i(x^*), d^k \rangle \langle \nabla \lambda_i(x^*), d^k \rangle \\ &\quad + c_k \sum_{i \in I^* \setminus I} \langle \nabla g_i(x^*), d^k \rangle^2 + \sum_{i=1}^p \langle \nabla h_i(x^*), d^k \rangle \langle \nabla \mu_i(x^*), d^k \rangle \\ &\quad + c_k \sum_{i=1}^p \langle \nabla h_i(x^*), d^k \rangle^2. \end{aligned}$$

Dividindo a expressão acima por c_k , tomando $c_k \rightarrow +\infty$ e lembrando que para todo k , $\langle H_k^\top d^k, d^k \rangle = 0$, temos:

$$\sum_{i \in I^* \setminus I} \langle \nabla g_i(x^*), d^k \rangle^2 + \sum_{i=1}^p \langle \nabla h_i(x^*), d^k \rangle^2 \rightarrow 0,$$

o que implica que $\langle \nabla g_i(x^*), d^* \rangle = 0$, para todo $i \in I^* \setminus I$ e $\langle \nabla h_i(x^*), d^* \rangle = 0$, para todo $i = 1, \dots, p$, isto é, $d^* \in U_I$.

Agora, observe que para todo k ,

$$\sum_{i \in I^* \setminus I} \langle \nabla g_i(x^*), d^k \rangle \nabla g_i(x^*) \in U_I^\perp \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^p \langle \nabla h_i(x^*), d^k \rangle \nabla h_i(x^*) \in U_I^\perp.$$

De fato, para todo $d \in U_I$,

$$\sum_{i \in I^* \setminus I} \langle \nabla g_i(x^*), d^k \rangle \langle \nabla g_i(x^*), d \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^p \langle \nabla h_i(x^*), d^k \rangle \langle \nabla h_i(x^*), d \rangle = 0,$$

pela definição de U_I . Esse fato, juntamente com a igualdade (4.9) com $I_k = I$ (novamente sem perda de generalidade), e lembrando que $H_k^\top d^k = 0$ para todo k , mostra que

$$\begin{aligned} 0 &= P_{U_I} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d^k + P_{U_I} \left[\sum_{i \in I^* \setminus I} \langle \nabla g_i(x^*), d^k \rangle \nabla \lambda_i(x^*) \right] \\ &\quad + P_{U_I} \left[\sum_{i=1}^p \langle \nabla h_i(x^*), d^k \rangle \nabla \mu_i(x^*) \right], \end{aligned}$$

para todo k . Tomando $k \rightarrow \infty$ na igualdade acima, temos:

$$P_{U_I} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d^* = 0, \quad (4.10)$$

novamente porque $d^* \in U_I$.

Se a hipótese (a) é satisfeita, isso nos dá uma contradição e concluímos que W_c é fortemente BD-regular em x^* . No caso da hipótese (b), o resultado segue porque ela é mais forte que a condição (a) pela proposição 2.7. Suponha agora que a hipótese (c) é válida. Se $d^* \notin U_0$, temos novamente uma contradição devido à hipótese (4.8) e porque

$$I \subseteq I_0^* \quad \Rightarrow \quad I^* \setminus I \supseteq I^* \setminus I_0^* \quad \Rightarrow \quad U_I \subseteq U_{I_0^*}.$$

Para o caso em que $d^* \in U_0$, note que a igualdade (4.10), o fato de $d^* \in U_I$ e P_{U_I}

ser simétrica implicam em

$$0 = \langle P_{U_I} \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d^*, d^* \rangle = \langle \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \mu^*) d^*, d^* \rangle,$$

o que contradiz a condição suficiente de segunda ordem. Finalmente, suponha que a hipótese (d) é satisfeita. Como $I_0^* = \emptyset$, temos que $U_0 = \mathbb{R}^n$. O resultado segue, pois a condição suficiente de segunda ordem é, nesse caso, idêntica à condição forte (item (b)), que já se mostrou suficiente para a prova. \square

Finalmente, agrupando os resultados obtidos, temos o seguinte teorema.

Teorema 4.14. *Seja x^* um ponto KKT associado a (PNL) com $x^* \in \mathcal{R}$. Suponha que qualquer uma das hipóteses ((a) a (d)) da proposição 4.13 é satisfeita. Então, a sequência $\{x^k\}$ gerada pelo método de Newton semi-suave converge localmente a x^* com taxa superlinear. Além disso, se $\nabla^2 f$, $\nabla^2 g_i$, $i = 1, \dots, m$ e $\nabla^2 h_i$, $i = 1, \dots, p$ são localmente Lipschitz contínuas em x^* , então a convergência é localmente quadrática.*

Demonstração. A convergência superlinear segue diretamente da proposição 4.7, da proposição 4.13 e do teorema 2.22. No caso da convergência quadrática, basta substituímos o teorema 2.22 pelo corolário 2.23. \square

4.3 Globalização do método

Na seção anterior, verificamos que o método de Newton semi-suave aplicado ao sistema $W_c(x) = 0$ converge localmente com taxa superlinear (ou quadrática). No entanto, quando o ponto inicial não é suficientemente próximo do zero da função, que é usualmente desconhecido, essa convergência pode não ser estabelecida. Para lidar com iterados iniciais arbitrários, necessitamos de uma maneira de globalizar o método, em particular, utilizando uma *função de mérito*. Mais precisamente, desejamos encontrar uma função que verifica se um iterado é melhor ou pior que o iterado anterior, no sentido de estar se aproximando ou não de um zero de W_c .

No nosso caso, a função de mérito mais natural de se imaginar é o quadrado da norma de W_c . De fato, considere $\theta_N: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$\theta_N(x) \doteq \frac{1}{2} \|W_c(x)\|^2,$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Note que se x^* satisfaz $W_c(x^*) = 0$, então $\theta_N(x^*) = 0$. Além disso, como $\theta_N(x) \geq 0$ para todo x , x^* é um minimizador global de θ_N . No entanto, θ_N é não diferenciável, o que faz com que métodos especiais sejam requeridos para resolver o problema.

Para contornar a não diferenciabilidade, André e Silva [AS10] se concentraram em problemas de complementaridade não linear, que são casos particulares de desigualdades variacionais, e utilizaram uma estratégia proposta por De Luca, Facchinei e Kanzow [DLFK00] de usar um algoritmo híbrido. Mais especificamente, computaram a direção utilizando sua reformulação KKT e realizaram a globalização com uma função de mérito baseada na Fischer-Burmeister.

Utilizando essa estratégia para o problema (PNL), essa função de mérito pode ser construída através de uma reformulação do sistema KKT associado, diferente de W_c . Observe que se (x, λ, μ) é uma tripla KKT associada a (PNL), então o seguinte sistema de equações (semi-suaves) é satisfeito:

$$\Psi_{\text{FB}}(x, \lambda, \mu) \doteq \begin{bmatrix} \nabla_x L(x, \lambda, \mu) \\ h(x) \\ \varphi_{\text{FB}}(-g_1(x), \lambda_1) \\ \vdots \\ \varphi_{\text{FB}}(-g_m(x), \lambda_m) \end{bmatrix} = 0,$$

onde $\varphi_{\text{FB}}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ corresponde à *função de Fischer-Burmeister**, definida por

$$\varphi_{\text{FB}}(y, z) \doteq \sqrt{y^2 + z^2} - y - z,$$

para todo $y, z \in \mathbb{R}$. A função $\varphi_{\text{FB}}(\cdot, \cdot)$ é diferenciável exceto no ponto $(0, 0)$, mas $\varphi_{\text{FB}}^2(\cdot, \cdot)$ é continuamente diferenciável em todo o espaço. Assim, a função de mérito diferenciável associada é o quadrado da norma dessa reformulação, ou seja, definida por $\theta_{\text{FB}}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ com

$$\theta_{\text{FB}}(x) \doteq \frac{1}{2} \|\Psi_{\text{FB}}(x, \lambda(x), \mu(x))\|^2,$$

onde $\lambda(\cdot)$ e $\mu(\cdot)$ correspondem a um estimador de multiplicadores.

Entretanto, para o nosso problema, observamos que a possibilidade mais natural

*Lembramos que a Fischer-Burmeister é uma função NCP, conforme o capítulo das notações.

para função de mérito continuamente diferenciável é a própria penalidade exata w_c que construímos, definida em (3.9). De fato, lembramos que a igualdade (3.14) mostra essencialmente que

$$\nabla w_c(x) = W_c(x) + \text{termos de segunda ordem},$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Como um minimizador x^* de w_c satisfaz $\nabla w_c(x^*) = 0$, temos que x^* é zero de W_c a menos de termos de segunda ordem. No entanto, pelo teorema 3.9 e corolário 3.13, vimos que, sob certas hipóteses,

$$x^* \text{ é ponto KKT de (PNL)} \Leftrightarrow W_c(x^*) = 0 \Leftrightarrow \nabla w_c(x^*) = 0,$$

para c suficientemente grande. Isso significa que os termos de segunda ordem são ignorados em pontos KKT, o que faz com que a penalidade exata w_c possa ser utilizada como função de mérito. Note ainda que nesse caso o método é do tipo *Gauss-Newton*, no sentido de que é possível ignorar termos de segunda ordem em pontos relevantes, ou seja, em pontos KKT.

Como w_c é diferenciável, podemos aplicar, por exemplo, a estratégia de busca linear para minimizá-la. No algoritmo a seguir, juntamos então a ideia de globalização com w_c , o método de Newton semi-suave (algoritmo 2.19) com W_c e a atualização dinâmica do parâmetro de penalidade (algoritmo 4.5).

Algoritmo 4.15. *Método do tipo Gauss-Newton para penalidade exata diferenciável w_c , com cômputo de direções utilizando W_c .*

1. Escolha $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $c_0 > 0$, $\xi > 1$, $\varepsilon_1 \geq 0$, $\varepsilon_2, \varepsilon_3 \in (0, 1)$ e $\sigma \in (0, 1/2)$.
Tome $k = 0$.
2. Se $\|\nabla w_{c_k}(x^k)\| \leq \varepsilon_1$, pare.
3. Enquanto $t_{c_k}(x^k) > 0$, faça $c_k = \xi c_k$.
4. Compute $W_{c_k}(x^k)$ e tome $H_k \in \partial_B W_{c_k}(x^k)$.
5. Compute d^k tal que $H_k d^k = -W_{c_k}(x^k)$.
6. Se $\langle \nabla w_{c_k}(x^k), d^k \rangle > -\varepsilon_2 \|d^k\| \|\nabla w_{c_k}(x^k)\|$ ou $\|d^k\| < \varepsilon_3 \|\nabla w_{c_k}(x^k)\|$,
faça $d^k = -\nabla w_{c_k}(x^k)$.

7. Encontre $t_k > 0$ tal que $w_{c_k}(x^k + t_k d^k) \leq w_{c_k}(x^k) + \sigma t_k \langle \nabla w_{c_k}(x^k), d^k \rangle$ com uma estratégia de backtracking.
8. Faça $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$, $k = k + 1$ e vá para o passo 2.

Observe inicialmente que o passo 2 se refere ao critério de parada, e que no passo 3 atualizamos o parâmetro de penalidade quando a função de teste é positiva. Nos passos 4 e 5, um elemento do B-subdiferencial do iterado é escolhido e com ele, computamos a direção de Newton, o que requer a resolução de um sistema de ordem $n \times n$. No passo 6 verificamos se essa direção é suficientemente descendente e se a condição da norma é satisfeita. Se esses critérios não são satisfeitos, substituímos essa direção pela de Cauchy.

Quanto ao tamanho de passo, realizamos uma busca linear do tipo Armijo no passo 7. Note que para cada iteração dessa busca, computamos o valor funcional $w_{c_k}(x^k + t_k d^k)$, que requer o cálculo do estimador de multiplicadores $\lambda(x^k + t_k d^k)$ e $\mu(x^k + t_k d^k)$. Como esses, por sua vez, estão associados a um sistema de quadrados mínimos de ordem $(n + m + p) \times (m + p)$, necessitamos de uma fatoração de matriz, cuja complexidade é de ordem cúbica. Como essa matriz associada ao sistema muda a cada ponto, essa estratégia pode ser computacionalmente cara, dependendo do número de iterações do tipo Armijo requerido. No capítulo 5, veremos, com os experimentos computacionais realizados, que essa estratégia é de fato custosa.

Capítulo 5

Experimentos numéricos

No capítulo anterior, apresentamos um método para resolver (PNL), com base numa penalidade exata diferenciável. Em particular, propomos um método do tipo Gauss-Newton que minimiza a penalidade w_c , computando direções com a reformulação semi-suave W_c e realizando buscas lineares do tipo Armijo. Este capítulo será dedicado à implementação desse método, descrito no algoritmo 4.15, com a linguagem Python e nos experimentos numéricos que realizamos.

Na seção 5.1, descreveremos os detalhes relativos à implementação do algoritmo 4.15. Em seguida, na seção 5.2, mostraremos o comportamento do algoritmo com os problemas de otimização com restrições da coleção CUTE [BCGT95]. Como parâmetro de comparação, analisaremos também os testes realizados com o ALGENCAN [ABMS07, ABMS08], um algoritmo de lagrangiano aumentado do projeto TANGO [BM11]. Finalizaremos na seção 5.3, com comparações entre o estimador de multiplicadores (3.2) que formulamos, e o estimador baseado nas ideias do Lucidi [Luc92] definido em (3.8).

5.1 Detalhes de implementação

Conforme citamos anteriormente, o algoritmo 4.15 foi implementado com a linguagem de programação Python e utilizamos as bibliotecas NumPy e SciPy para computação numérica. Inicialmente, descrevemos na tabela 5.1, os principais valores de parâmetros utilizados. Observamos que os valores desses parâmetros, em sua maioria, foram também usados na implementação da penalidade exata para complementaridade não linear [AS10] e no ALGENCAN [ABMS07, ABMS08].

Parâmetro	Valor	Onde foi definido ou utilizado	Referência
ζ	2.0	estimador de multiplicadores (3.2)	pág. 29
q_1	3.0	estimador de multiplicadores (3.8)	pág. 33
q_2	2.0	estimador de multiplicadores (3.8)	pág. 33
γ	2.0	função de teste	pág. 49
ξ	10.0	atualização do parâmetro de penalidade	pág. 52
σ	10^{-4}	busca linear do tipo Armijo	pág. 63
ε_1	10^{-8}	critério de parada do algoritmo	pág. 63
ε_2	10^{-8}	direção suficiente de descida	pág. 63
ε_3	10^{-8}	condição da norma	pág. 63

Tabela 5.1: Principais parâmetros do algoritmo.

No cômputo de um elemento do B-subdiferencial $H_k \in \partial_B W_{c_k}(x^k)$, é possível que tenhamos que escolher um parâmetro de convexidade devido à função máximo contida na fórmula de $W_{c_k}(x_k)$. Escolhemos aquele que elimina λ_i e não g_i . Além disso, se esse H_k é computacionalmente singular, então adicionamos a ele um múltiplo da matriz identidade para que a resolução de sistemas (do passo 5 do algoritmo 4.15) seja possível. Tal resolução é feita com a rotina `linalg.solve`.

Ademais, a resolução de sistemas de quadrados mínimos necessária para o cômputo do estimador de multiplicadores $\lambda(x^k)$ e $\mu(x^k)$ (ver (3.2) e (3.8)) é realizada com a rotina `linalg.lstsq`, que utiliza decomposição por valores singulares. Implementamos também a versão que usa fatoração de Cholesky e a fatoração QR, mas como a diferença entre elas foi pouco significativa, mostraremos nas seções seguintes os experimentos apenas com a versão que usa `linalg.lstsq`.

Para aumentar a robustez da nossa implementação, realizamos também busca linear não monótona [GLL86], ou seja, permitimos que o valor da função de mérito w_c aumente, considerando um intervalo de 10 iterações. Se a direção de Cauchy é escolhida ao invés da direção de Newton (passo 6 do algoritmo 4.15), usamos o passo espectral [BMR00] para calcular o tamanho de passo inicial da iteração. Mais precisamente, definindo o tamanho de passo inicial da iteração k como t_k^0 , com $t_0^0 = 1.0$ e considerando os vetores

$$s^k \doteq x^k - x^{k-1} \quad \text{e} \quad y^k \doteq \nabla w_{c_k}(x^k) - \nabla w_{c_k}(x^{k-1}),$$

para todo k , escolhemos t_k^0 , com $k \neq 0$ da seguinte forma: se $\langle s^k, y^k \rangle \leq 0$, então

$t_k^0 = \max\{1, \|x^k\|/\|d^k\|\}$. Do contrário,

$$t_k^0 = \min \left\{ t_{\max}, \max \left\{ t_{\min}, \frac{\langle s^k, s^k \rangle}{\langle s^k, y^k \rangle} \right\} \right\},$$

onde t_{\min} e t_{\max} são os salva-guardas para os valores do tamanho de passo. No nosso algoritmo, definimos $t_{\min} = 10^{-4}$ e $t_{\max} = 10^4$.

Quanto à estratégia de backtracking para a busca dos tamanhos de passo, utilizamos a interpolação quadrática [NW99, seção 3.4], devido à sua evidente robustez. Nesse caso, para cada iteração i da busca linear (realizada numa iteração externa k), se o minimizador da quadrática t_k^i não difere muito do tamanho de passo anterior t_k^{i-1} ou se for muito pequena, tomamos simplesmente o passo anterior dividido por 2. Mais formalmente,

$$\text{se } t_k^i \notin [\sigma_1 t_k^{i-1}, \sigma_2 t_k^{i-1}], \quad \text{então } t_k^i = \frac{t_k^{i-1}}{2},$$

onde $\sigma_1, \sigma_2 \in (0, 1)$. Do contrário, continuamos com o minimizador da quadrática t_k^i computado. Os valores dos salva-guardas acima foram escolhidos como $\sigma_1 = 0.1$ e $\sigma_2 = 0.9$ na implementação.

Nos experimentos, verificamos que as atualizações do parâmetro de penalidade com a função de teste (passo 3 do algoritmo 4.15) não foram tão frequentes conforme gostaríamos [GP79]. Para aumentar a robustez do algoritmo, adicionamos então uma outra forma de atualizar esse parâmetro. A ideia, utilizada pelo ALGENCAN, é comparar a inviabilidade das iterações atual e anterior. Se uma certa medida de inviabilidade diminui suficientemente, então não há razão para aumentar o valor do parâmetro. Assim, se numa iteração k , a condição abaixo é satisfeita:

$$\max \{ \|a_{c_k}(x^k)\|_\infty, \|h(x^k)\|_\infty \} > \nu \max \{ \|a_{c_{k-1}}(x^{k-1})\|_\infty, \|h(x^{k-1})\|_\infty \},$$

com $a_{c_k}(x^k)$ definido em (4.1) e $\nu < 1$, então aumentamos o parâmetro de penalidade. Ao contrário da condição $t_{c_k}(x^k) \geq 0$, essa desigualdade é satisfeita com mais frequência, e portanto, optamos por aumentar o parâmetro fazendo $c_k = c_k + 5k$, ou seja, c_k cresce gradativamente de acordo com a iteração k . Além disso, no nosso caso, $\nu = 0.99$.

Ainda em relação ao parâmetro de penalidade, utilizamos novamente a ideia do ALGENCAN para escolher o parâmetro inicial c_0 . Observe que ter um critério para

escolher c_0 é interessante, devido aos diferentes tipos de problemas não lineares existentes. A fórmula abaixo é criada de acordo com o escalamento da função objetivo f com as restrições h e g :

$$c_0 \doteq \max \left\{ c_{\min}, \min \left\{ c_{\max}, \frac{10 \max(|f(x^0)|, 1)}{\max(1, 1/2(\|h(x^0)\|^2 + \|\max\{g(x^0), 0\}\|^2))} \right\} \right\},$$

onde c_{\min} e c_{\max} são os valores mínimo e máximo permitidos para os parâmetros de penalidade. No nosso caso, definimos $c_{\min} = 1$ e $c_{\max} = 10^8$.

Finalmente, em relação ao critério de parada, utilizamos, além da condição do gradiente da função de mérito (passo 2 do algoritmo 4.15), a condição de que o iterado satisfaz aproximadamente as condições KKT. Além disso, limitamos o número máximo de iterações em 100000 e o tempo em 10 minutos. Observamos que esses limites são razoáveis se considerarmos a dimensão (de no máximo 300) dos problemas da coleção CUTE, cujos experimentos realizamos.

5.2 Comparação numérica

Nesta seção, apresentamos os resultados dos experimentos numéricos que realizamos com a coleção CUTE (“*Constrained and Unconstrained Testing Environment*”) [BCGT95], modelados na linguagem AMPL [Van11]. Como critério de comparação, realizamos também testes com ALGENCAN [ABMS07, ABMS08], do projeto TANGO. Consideramos todos os problemas com restrições do CUTE com no máximo 300 variáveis e restrições, o que resulta em 328 problemas. Entre essas instâncias, existem casos em que as implementações falham devido a avaliações de funções em pontos inadequados. Nesse caso, a função não está definida no ponto ou o AMPL não consegue lidar com ele. Essas falhas ocorreram em 3 instâncias apenas para a penalidade exata, 5 apenas para o ALGENCAN e 2 para ambos. Ao final, consideramos então 318 problemas no total para realizar os testes.

A principal motivação desses testes é verificar se o método que propomos é suficientemente robusto. Até onde conhecemos, experimentos numéricos com penalidades exatas como as de Glad e Polak [GP79] e de Di Pillo e Grippo [DPG89] não foram abordadas na literatura, a não ser para um número limitado de instâncias de porte bem pequeno. Para verificarmos o comportamento do método proposto, é necessário que tomemos algum outro método como base. Escolhemos

então o método de lagrangiano aumentado, em particular, o ALGENCAN, devido à suficiente familiaridade que temos com sua implementação.

A implementação do método proposto nessa tese, que por conveniência referimos agora apenas de penalidade exata, não possui, naturalmente, maturidade como o ALGENCAN. Muitos testes ainda devem ser realizados, com busca de parâmetros de algoritmo adequados e inclusão de mais ideias para aumentar a robustez (além das citadas na seção 5.1). Considerando isso, e para que o ALGENCAN seja um bom parâmetro de comparação, é conveniente que adaptemos seu código de modo que ele se comporte como um lagrangiano aumentado puro. Eliminamos então as extrapolações, os passos newtonianos e a aceleração de sua implementação.

Somando-se a isso, ao contrário do ALGENCAN, o método de penalidade exata que formulamos não distingue restrições de caixa

$$\{x \in \mathbb{R}^n : \ell \leq x \leq u\},$$

com $\ell, u \in \mathbb{R}^n$ dados, das demais restrições de desigualdade. Modificamos então a interface do ALGENCAN com o AMPL de modo que ele também não diferencie as restrições de caixa.

Analisemos agora o resultado dos testes realizados. Conforme a tabela 5.2, o ALGENCAN resolve mais problemas que o método baseado na penalidade exata, com taxa de robustez de 92.45% e 87.11%, respectivamente para o ALGENCAN e para a penalidade exata. Isso mostra que a penalidade exata é suficientemente robusta, conforme desejávamos. Além disso, constatamos que em 9 instâncias de problemas, a penalidade exata retornou um ponto estacionário da medida de inviabilidade \mathcal{F} que é inviável para o problema.

Algoritmo	Problemas resolvidos	Robustez
Penalidade exata	277	87.11%
ALGENCAN	294	92.45%

Tabela 5.2: Robustez do método com a penalidade exata e do ALGENCAN, com número total de instâncias de problemas igual a 318.

Em relação ao número de avaliações de função dos problemas, a penalidade exata teve um desempenho melhor que a modificação do ALGENCAN. Para verificarmos isso, apresentamos um gráfico de perfil desempenho [DM02] na figura 5.1a. Esse resultado é interessante particularmente para problemas cujas avaliações de

função são caras computacionalmente. Instâncias desse tipo claramente aparecem na literatura [BH07, BGHW03].

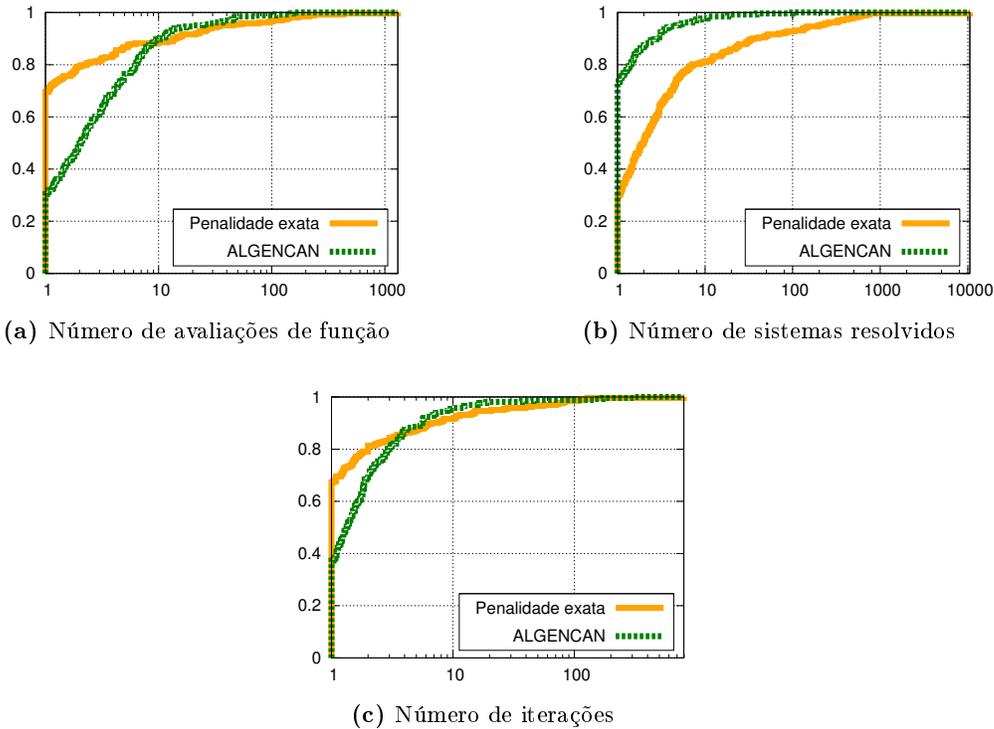


Figura 5.1: Gráficos de perfil desempenho para penalidade exata e ALGENCAN.

Por outro lado, o número de sistemas de equações resolvidos é menor no ALGENCAN, conforme a figura 5.1b. Observamos, no entanto, que essa comparação não é totalmente apropriada, pois ela faz sentido apenas nos casos em que o número de variáveis n não difere muito do número total de restrições $m+p$. Lembramos que o algoritmo 4.15 resolve basicamente um sistema $n \times n$ por iteração para computar a direção de Newton, e pelo menos um sistema $(n+m+p) \times (m+p)$ durante a busca linear do tipo Armijo. No caso do ALGENCAN, temos apenas sistemas de ordem $n \times n$ em cada iteração interna. Apesar desse fato, essa comparação claramente mostra que a busca linear do tipo Armijo é cara, conforme discutimos no final da seção 4.3.

Finalmente, em relação ao número de iterações da penalidade exata e o número de iterações internas do ALGENCAN, verificamos que a penalidade exata é vanta-

josa, conforme podemos observar na figura 5.1c. Note que o número de iterações da penalidade exata é igual ao número de sistemas de ordem $n \times n$ resolvidos, exceto pelos raros casos em que o elemento do B-subdiferencial é computacionalmente singular. Esse resultado sugere que se substituirmos o critério do tipo Armijo por uma estratégia que requer poucas resoluções de sistemas $(n + m + p) \times (m + p)$, então diminuiríamos a diferença entre os números de sistemas de equações totais dos algoritmos. Como pesquisa futura, poderíamos utilizar métodos de regiões de confiança, em particular, o método de Moré-Sorensen [And04, MS83], que possui a vantagem de requerer poucas avaliações de funções.

5.3 Comparação dos estimadores de multiplicadores

Concluimos o capítulo com uma comparação entre os estimadores de multiplicadores formulados em (3.2) e (3.8) que, por praticidade, referimos apenas como o estimador novo e o estimador do Lucidi, respectivamente. Lembramos inicialmente que o estimador do Lucidi requer apenas que LICQ seja válida nos pontos viáveis do problema, o que é uma condição mais fraca que LICQ relaxada em todo o espaço, requerida pelo estimador novo. No entanto, na prática, observamos que a versão do Lucidi pode trazer algumas desvantagens.

A explicação para isso está na diferença entre os estimadores em um ponto inviável x , ou seja, no termo $\alpha(x)\|\lambda\|^2$ que aparece somente na versão do Lucidi, em (3.8). Considere, por exemplo, um problema com duas restrições de desigualdade e um multiplicador ótimo $\lambda_1^* > 0$, associado à primeira restrição. Durante o progresso do algoritmo, se o iterado x é suficientemente inviável com respeito a g_2 , então o termo $\alpha(x)\|\lambda\|^2$ pode diminuir o valor de λ_1 , retardando a aproximação de λ_1 para λ_1^* . Esse tipo de perturbação aumenta com o aumento do número de restrições. Em outras palavras, o termo adicional utilizado no estimador do Lucidi pode introduzir um novo tipo de dependência entre os multiplicadores de Lagrange que não aparece no estimador novo ou mesmo no estimador de Glad e Polak [GP79].

Mostraremos agora que não é difícil utilizar as ideias acima para obter instâncias de problemas em que o algoritmo com o estimador do Lucidi requer muitas iterações. Observando a fórmula da penalidade exata w_c , dada em (3.9), notamos que, em pontos inviáveis, a estrutura das restrições se tornam mais visíveis que a função objetivo quando o parâmetro de penalidade c cresce. Em particular, dado $c > 0$, podemos obter w_c com um minimizador local inviável usando duas

restrições: a primeira contém um mínimo local inviável (por exemplo, uma função cúbica) e a segunda é uma função afim. Um exemplo é considerado abaixo.

Exemplo 5.1. *Sejam $n = 1$, $m = 2$, $p = 0$ e funções definidas por*

$$\begin{cases} f(x) \doteq 10(x - 4), \\ g_1(x) \doteq -0.5x^3 - 2x^2 + 12, \\ g_2(x) \doteq 4 - x. \end{cases}$$

As linhas sólidas e finas da figura 5.2 representam os dados do problema, ou seja, f , g_1 e g_2 . As curvas tracejadas, por sua vez, mostram as estruturas de w_c (computadas com o estimador novo) para três valores de parâmetro c diferentes.

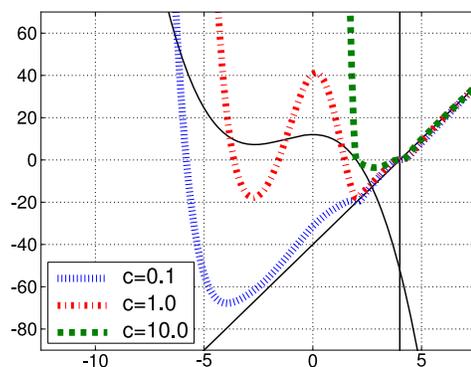


Figura 5.2: Estrutura da função penalidade w_c para diferentes valores de c .

Considere agora um iterado inicial do algoritmo, que está próximo da borda do vale associado ao mínimo local inviável de w_c . A restrição afim e a função objetivo são escolhidos de forma que o ponto inicial está entre a solução ótima e o vale. A ideia dessa construção está baseada no fato de que com o estimador do Lucidi, tendemos a cair nesse vale mais facilmente, o que força o algoritmo a atualizar mais o parâmetro de penalidade. Para o exemplo 5.1, a solução ótima é 4, e podemos tomar $x = 3.8$ como o iterado inicial e $c = 20$. Novamente, ilustramos as funções f , g_1 e g_2 na figura 5.3 com linhas sólidas finas. As demais curvas representam w_c computadas com $c = 20$ e $c = 25$, e com ambos os estimadores de multiplicadores. O gráfico da direita da figura 5.3 é apenas uma versão ampliada do retângulo indicado no gráfico da esquerda.

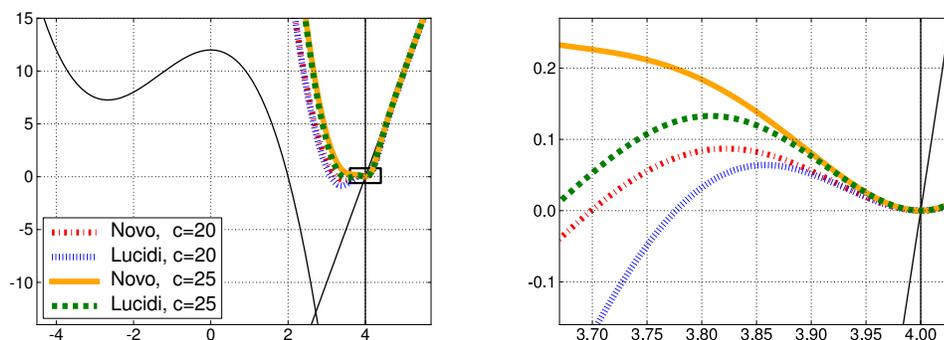


Figura 5.3: Estruturas de w_c , com dois valores de c diferentes, e computadas com ambos os estimadores de multiplicadores.

Observe que para $c = 20$ e com o estimador do Lucidi, o iterado x pode cair mais facilmente no vale à sua esquerda, conseqüentemente ficando mais longe do ponto ótimo. De fato, se $x \approx 3.853$, o iterado cai para o vale quando a versão do Lucidi é utilizada e o mesmo ocorre com o estimador novo somente à esquerda de $x \approx 3.825$. Quando $c = 25$, então o iterado associado ao estimador do Lucidi continua a tender para a região do vale, mesmo quando $x \approx 3.8$, enquanto que para o estimador novo, o vale desaparece, fazendo com que o iterado se aproxime da solução de forma imediata. Nesse exemplo, o estimador do Lucidi requer $c = 35$ para atingir esse mesmo comportamento.

η	c inicial	Estimador novo			Estimador do Lucidi		
		Iter.	Sistemas	c final	Iter.	Sistemas	c final
10	20	4	7	25	9	25	35
1000	2000	20	62	2225	29	397	2765
100000	200000	94	852	220930	176	2594	270980

Tabela 5.3: Diferença entre os estimadores de multiplicadores.

O exemplo 5.1 pode ser facilmente estendido substituindo a função objetivo por

$$f(x) \doteq \eta(x - 4),$$

onde $\eta > 0$. Consideramos ainda $x = 3.8$ como o ponto inicial. A tabela 5.3

mostra os resultados numéricos obtidos com a implementação do algoritmo 4.15 usando ambos os estimadores e diferentes valores de η . Mostramos em particular o número de iterações, o número de sistemas resolvidos e o valor final do parâmetro de penalidade c . Note que a diferença entre os parâmetros de penalidade iniciais e finais aumenta quando o valor de η cresce.

A necessidade de um parâmetro de penalidade maior com o estimador do Lucidi pode ser observada também através dos problemas da coleção CUTE, utilizados nos experimentos descritos na seção 5.2. Nesse caso, temos um total de 323 instâncias (ao contrário dos 318 citados anteriormente), porque não precisamos eliminar os 5 problemas com erros de avaliações de função ocorridos somente no ALGENCAN.

Note que um valor alto do parâmetro de penalidade pode também aumentar a possibilidade do método convergir para um ponto estacionário da medida de inviabilidade \mathcal{F} que é inviável para (PNL). De fato, durante os testes associados à escolha adequada dos parâmetros do algoritmo, observamos que o método com o estimador do Lucidi falha mais nesse sentido. No entanto, com uma escolha cuidadosa dos parâmetros do algoritmo (no caso, já apresentada na tabela 5.1) conseguimos fazer com que ambas as implementações resolvam 282 problemas desse conjunto de testes, e que os números de problemas que retornam pontos estacionários de \mathcal{F} inviáveis sejam iguais (no caso, igual a 9).

Comparação do valor de c final	Número de problemas
Estimador novo $>$ estimador do Lucidi	51
Estimador novo $<$ estimador do Lucidi	66
Estimador novo $=$ estimador do Lucidi	161

Tabela 5.4: Diferença entre os estimadores de multiplicadores com os 282 problemas do CUTE resolvidos por ambos.

Como última comparação, observemos a tabela 5.4. Verificamos, que entre os problemas do CUTE em que ambas as versões resolvem, a versão do Lucidi termina com parâmetro de penalidade c maior em 66 problemas, enquanto que o estimador novo termina com c maior em 51 instâncias. Esses resultados mostram que o método com o estimador do Lucidi é tão robusta quanto o método com o estimador novo. Ele traz a desvantagem de tender para um valor alto de parâmetro de penalidade, mas também tem a vantagem teórica de requerer a condição LICQ somente no conjunto viável.

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho, propomos um método do tipo Gauss-Newton para resolver (PNL) utilizando uma penalidade exata continuamente diferenciável. Provamos resultados de exatidão enfraquecendo a hipótese de regularidade necessária e, em seguida, mostramos que o método converge localmente com taxa superlinear (ou quadrática). Finalmente, propomos uma maneira de globalizar o método, e realizamos experimentos numéricos com a coleção CUTE. Tomando o ALGENCAN como parâmetro de comparação, verificamos que o método é suficientemente robusto. Esse resultado é interessante porque, até onde sabemos, não havia na literatura análises de experimentos computacionais com penalidades exatas como as de Glad e Polak [GP79] e de Di Pillo e Grippo [DPG89].

Convém mencionarmos agora alguns possíveis trabalhos futuros relacionados. Primeiro, devemos verificar se a globalização utilizada não destrói a taxa de convergência superlinear, ou seja, se o efeito Maratos não acontece. Infelizmente não conseguimos provar até o momento que de fato ele não ocorre. Do ponto de vista prático, é interessante também substituímos a busca linear do tipo Armijo por um método que realiza poucas avaliações de função, pois no nosso caso, elas consistem em resoluções de sistemas de quadrados mínimos, que são computacionalmente caras. Podemos investigar, por exemplo, a utilização de métodos de região de confiança, em particular, o método de Moré-Sorensen [And04, MS83].

Uma hipótese requerida em [AS10, DPG85, DPG89, GP79] é que LICQ seja válida em todo o espaço. Propomos uma alternativa mais razoável, ou seja, que LICQ relaxada seja satisfeita em todo o espaço, e em [Luc92] requer-se uma condição mais fraca ainda, isto é, que LICQ seja válida no conjunto viável associado

ao problema. Apesar disso, existe a possibilidade de enfraquecer ainda mais essa hipótese, com a utilização de pseudo-inversas [BIG74] na definição do estimador de multiplicadores. Em particular, podemos verificar uma possível utilização da condição de qualificação de posto constante (CRCQ) [AMS05].

Observamos ainda que a penalidade exata proposta foi construída para problemas de otimização com restrições de igualdade e desigualdade, sem distinguir as restrições “fáceis” das demais. É interessante então criarmos penalidades que diferenciam, por exemplo, as restrições de caixa das demais de desigualdade, o que tornaria o método mais eficiente. Outra questão natural é a busca por novas penalidades exatas que estejam baseadas em outras fórmulas de lagrangianos aumentados existentes na literatura, como a penalidade cúbica [EF99].

Finalmente, observamos que as penalidades exatas não se restringem apenas a programação não linear e a desigualdades variacionais. Podemos, por exemplo, verificar a utilização de penalidades exatas diferenciáveis para programação cônica de segunda ordem (SOCP). Muitos métodos foram criados para resolver um SOCP linear (ou seja, com função objetivo linear) [AG03, BV04, LVBL98]. Porém, no caso de SOCP não linear, o tratamento é recente e poucos métodos eficientes foram desenvolvidos até o momento [KFF09, KF07, YY09]. Com essa motivação, é possível que possamos utilizar as mesmas ideias abordadas nessa tese para criar uma penalidade exata diferenciável para SOCP não linear. De fato, resultados iniciais nessa direção já foram estabelecidos durante o estágio sanduíche da autora. Porém, muita investigação deverá ser realizada ainda.

Referências Bibliográficas

- [ABMS07] R. Andreani, E. G. Birgin, J. M. Martínez e M. L. Schuverdt. On augmented Lagrangian methods with general lower-level constraints. *SIAM Journal on Optimization*, 18(4):1286–1309, 2007.
- [ABMS08] R. Andreani, E. G. Birgin, J. M. Martínez e M. L. Schuverdt. Augmented Lagrangian methods under the constant positive linear dependence constraint qualification. *Mathematical Programming*, 111(1-2):5–32, 2008.
- [AG03] F. Alizadeh e D. Goldfarb. Second-order cone programming. *Mathematical Programming*, 95(1):3–51, 2003.
- [AMS05] R. Andreani, J. M. Martínez e M. L. Schuverdt. On the relation between constant positive linear dependence condition and quasinormality constraint qualification. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 125(2):473–485, 2005.
- [And04] M. Andretta. Um método de restrições ativas para minimização em caixas. Dissertação de mestrado, IME-USP, 2004.
- [AS10] T. A. André e P. J. S. Silva. Exact penalties for variational inequalities with applications to nonlinear complementarity problems. *Computational Optimization and Applications*, 47(3):401–429, 2010.
- [AT00] A. Auslender e M. Teboulle. Lagrangian duality and related multiplier methods for variational inequality problems. *SIAM Journal on Optimization*, 10(4):1097–1115, 2000.

- [BCGT95] I. Bongartz, A. R. Conn, N. I. M. Gould e Ph. L. Toint. CUTE: constrained and unconstrained testing environment. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 21(1):123–160, 1995.
- [Ber99] D. P. Bertsekas. *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, 2a. edição, 1999.
- [BGHW03] L. T. Biegler, O. Ghattas, M. Heinkenschloss e B. V. B. Waanders, editores. *Large-scale PDE-constrained optimization*, volume 30 de *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Berlin, 2003. Springer.
- [BH07] D. Bates e M. Hagström, editores. *Nonlinear analysis and synthesis techniques for aircraft control*, volume 365 de *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, Berlin, 2007. Springer.
- [BIG74] A. Ben-Israel e T. N. E. Greville. *Generalized Inverses: Theory and Applications*. Wiley, New York, 2a. edição, 1974.
- [BM11] E. G. Birgin e J. M. Martínez. TANGO: Trustable algorithms for nonlinear general optimization. <http://www.ime.usp.br/~egbirgin/tango>, Universidade de São Paulo e Universidade Estadual de Campinas, Janeiro 2011.
- [BMR00] E. G. Birgin, J. M. Martínez e M. Raydan. Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets. *SIAM Journal on Optimization*, 10(4):1196–1211, 2000.
- [BV04] S. Boyd e L. Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [DLFK00] T. De Luca, F. Facchinei e C. Kanzow. A theoretical and numerical comparison of some semismooth algorithms for complementarity problems. *Computational Optimization and Applications*, 16(2):173–205, 2000.
- [DM02] E. D. Dolan e J. J. Moré. Benchmarking optimization software with performance profiles. *Mathematical Programming*, 91(2):201–213, 2002.

- [DPG79] G. Di Pillo e L. Grippo. A new class of augmented Lagrangians in nonlinear programming. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 17(5):618–628, 1979.
- [DPG82] G. Di Pillo e L. Grippo. A new augmented Lagrangian function for inequality constraints in nonlinear programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 36(4):495–519, 1982.
- [DPG85] G. Di Pillo e L. Grippo. A continuously differentiable exact penalty function for nonlinear programming problems with inequality constraints. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 23(1):72–84, 1985.
- [DPG89] G. Di Pillo e L. Grippo. Exact penalty functions in constrained optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 27(6):1333–1360, 1989.
- [EF99] J. Eckstein e M. C. Ferris. Smooth methods of multipliers for complementarity problems. *Mathematical Programming*, 86(1):65–90, 1999.
- [FKP07] F. Facchinei, C. Kanzow e L. Palagi. Comunicação pessoal, 2007.
- [Fle70] R. E. Fletcher. A class of methods for nonlinear programming with termination and convergence properties. In J. Abadie, editor, *Integer and Nonlinear Programming*, p. 157–173. North-Holland, Amsterdam, 1970.
- [FP03a] F. Facchinei e J. S. Pang. *Finite-dimensional variational inequalities and complementarity problems, Vol. I*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, New York, 2003.
- [FP03b] F. Facchinei e J. S. Pang. *Finite-dimensional variational inequalities and complementarity problems, Vol. II*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, New York, 2003.
- [GLL86] L. Grippo, F. Lampariello e S. Lucidi. A nonmonotone line search technique for Newton’s method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23(4):707–716, 1986.

- [GP79] T. Glad e E. Polak. A multiplier method with automatic limitation of penalty growth. *Mathematical Programming*, 17(2):140–155, 1979.
- [Hes69] M. R. Hestenes. Multiplier and gradient methods. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 4(5):303–320, 1969.
- [HUL01] J.B. Hiriart-Urruty e C. Lemaréchal. *Fundamentals of Convex Analysis*. Springer Verlag, Heidelberg, 2001.
- [JTHZ05] J. B. Jian, C. M. Tang, Q. J. Hu e H. Y. Zheng. A feasible descent SQP algorithm for general constrained optimization without strict complementarity. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 180(2):391–412, 2005.
- [KF07] H. Kato e M. Fukushima. An SQP-type algorithm for nonlinear second-order cone programs. *Optimization Letters*, 1(2):129–144, 2007.
- [KFF09] C. Kanzow, I. Ferenczi e M. Fukushima. On the local convergence of semismooth Newton methods for linear and nonlinear second-order cone programs without strict complementarity. *SIAM Journal on Optimization*, 20(1):297–320, 2009.
- [Luc92] S. Lucidi. New results on a continuously differentiable exact penalty function. *SIAM Journal on Optimization*, 2(4):558–574, 1992.
- [LVBL98] M. S. Lobo, L. Vandenberghe, S. Boyd e H. Lebet. Applications of second-order cone programming. *Linear Algebra and Its Applications*, 284(1-3):193–228, 1998.
- [Man69] O. L. Mangasarian. *Nonlinear programming*. Prentice-Hall, 1969.
- [Mif77] R. Mifflin. Semismooth and semiconvex functions in constrained optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 15:957–972, 1977.
- [MP75] H. Mukai e E. Polak. A quadratically convergent primal-dual algorithm with global convergence properties for solving optimization problems with equality constraints. *Mathematical Programming*, 9(3):336–349, 1975.

- [MS83] J. J. Moré e D. C. Sorensen. Computing a trust region step. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 4(3):553–572, 1983.
- [NW99] J. Nocedal e S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Verlag, New York, 1a. edição, 1999.
- [Pol76] E. Polak. On the global stabilization of locally convergent algorithms. *Automatica*, 12(4):337–342, 1976.
- [Pow69] M. J. D. Powell. A method for nonlinear constraints in minimization problems. In R. Fletcher, editor, *Optimization*, p. 283–298. Academic Press, New York, 1969.
- [Qi93] L. Qi. Convergence analysis of some algorithms for solving nonsmooth equations. *Mathematics of Operations Research*, 18(1):227–244, 1993.
- [QS93] L. Qi e J. Sun. A nonsmooth version of Newton’s method. *Mathematical Programming*, 58(1–3), 1993.
- [Roc70] R. T. Rockafellar. *Convex Analysis*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1970.
- [Roc74] R. T. Rockafellar. Augmented Lagrange multiplier functions and duality in nonconvex programming. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 12(2):268–285, 1974.
- [Sha90] A. Shapiro. On concepts of directional differentiability. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 66(3):477–487, 1990.
- [Van11] R. J. Vanderbei. AMPL models. <http://www.orfe.princeton.edu/~rvdb/ampl/nlmodels>, Princeton University, Janeiro 2011.
- [Wri02] S. J. Wright. Modifying SQP for degenerate problems. *SIAM Journal on Optimization*, 13(2):470–497, 2002.
- [YY09] H. Yamashita e H. Yabe. A primal-dual interior point method for nonlinear optimization over second-order cones. *Optimization Methods & Software*, 24(3):407–426, 2009.
- [Zan67] W. L. Zangwill. Nonlinear programming via penalty functions. *Management Science*, 13(5):344–358, 1967.

Índice Remissivo

- ALGENCAN, 65, 68
- AMPL, 68
- B-subdiferencial, 13, 54, 56, 65
- backtracking, 64, 67
- biblioteca
 - NumPy, 65
 - SciPy, 65
- busca linear
 - do tipo Armijo, 64, 70
 - não monótona, 66
- condição
 - complementaridade estrita, 58
 - de Karush-Kuhn-Tucker, *veja* KKT
 - forte e suficiente de 2a. ordem, 9, 58
 - KKT, 7
 - necessária de 1a. ordem, 6
 - necessária de 2a. ordem, 9
 - regularidade fraca, 9, 58
 - suficiente de 2a. ordem, 9, 58
- condição de qualificação, 7
 - CRCQ, 76
 - de independência linear, *veja* LICQ
 - de posto constante, *veja* CRCQ
 - de regularidade, *veja* LICQ
 - EMFCQ, 8, 37
 - LICQ, 7, 33
 - LICQ relaxada, 27, 42
 - Mangasarian-Fromovitz, *veja* MFCQ
 - Mangasarian-Fromovitz estendida, *veja* EMFCQ
 - MFCQ, 7
- convergência
 - global, 75
 - quadrática, 25, 61
 - superlinear, 23, 61
- critério de parada, 64, 68
- CUTE, 65, 68, 74
- decomposição
 - por valores singulares, *veja* SVD
 - SVD, 66
- derivada direcional, 15
- desigualdades variacionais, 26
- direção
 - de Cauchy, 64, 66
 - de máxima descida, *veja* de Cauchy
 - de Newton, 13, 64, 66
- efeito Maratos, 75
- estimador de multiplicadores, 27, 29, 71
 - de Glad e Polak, 27
 - do Lucidi, 33, 71
- fatoração
 - de Cholesky, 66
 - QR, 66

- fecho convexo, 14
- função
- B-diferenciável, 15
 - Bouligand-diferenciável, 15
 - de Fischer-Burmeister, 2, 62
 - de mérito, 61
 - de teste, 48, 67
 - direcionalmente diferenciável, 15
 - fortemente BD-regular, 22, 59
 - fortemente semi-suave, 17, 53
 - lagrangiana, 6
 - lagrangiana aumentada, 34, 35
 - Lipschitz contínua, 13, 14
 - NCP, 2, 40, 49, 62
 - penalidade exata, 3, 12, 45
 - penalidade exata forte, 12
 - penalidade exata fraca, 12, 42
 - semi-suave, 16, 53
- globalização, 61
- gráfico de perfil desempenho, 69
- interpolação quadrática, 67
- jacobiana generalizada, 14
- método
- de lagrangiano aumentado, 65
 - de lagrangiano aumentado exato, 4
 - de Moré-Sorensen, 71, 75
 - de Newton, 13
 - de Newton semi-suave, 21, 53
 - do tipo Gauss-Newton, 63
- medida de inviabilidade, 36, 67
- norma
- euclidiana, 2
 - infinita, 2
- parâmetro de penalidade, 48, 74
- passo espectral, 66
- penalidade exata, *veja* função
- de André e Silva, 5, 35
 - de Di Pillo e Grippo, 4, 33
 - de Fletcher, 4
 - de Glad e Polak, 4
 - de Lucidi, 4
 - de Mukai e Polak, 4
 - de Zangwill, 3
- não diferenciável, *veja* de Zangwill
- para desigualdades variacionais, *veja*
- de André e Silva
- para SOCP, 76
- produto interno euclidiano, 2
- programação
- cônica de segunda ordem, *veja* SOCP
 - não linear, 3
 - quadrática sequencial, 9
- projeção euclidiana, 13
- projeção ortogonal, 2, 9
- quadrados mínimos linear, 29, 32, 66
- reformulação KKT, 35, 62
- SOCP, 76
- TANGO, 65
- teorema
- de alternativa, 8
 - de Carathéodory, 18
 - de convergência, 21, 53
 - de Rademacher, 13, 20
 - do valor médio, 14, 16