

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS**  
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica  
Departamento de Matemática Aplicada

**CONTROLE DINÂMICO DAS RESTRIÇÕES**  
**EM**  
**OTIMIZAÇÃO**

**Roberto Hugo Bielschowsky**  
**Orientador: José Mario Martínez**

Tese apresentada ao Instituto de Matemática,  
Estatística e Computação Científica - UNI-  
CAMP, como requisito parcial para a obtenção  
do título de Doutor em Matemática Aplicada.

Setembro - 1997  
Campinas -SP



# CONTROLE DINÂMICO DAS RESTRIÇÕES

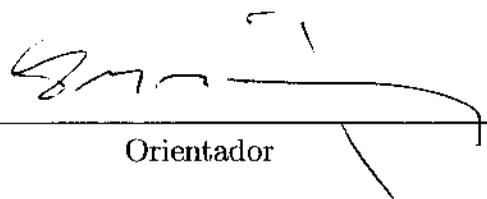
## EM

### OTIMIZAÇÃO

Este exemplar corresponde à redação final da tese, devidamente corrigida e defendida pelo Sr Roberto Hugo Bielschowsky e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 17 de novembro de 1997

Prof. Dr



Orientador

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

UNIDADE	BC		
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP		
	IMECC		
V.	Es.		
T. VBO BC/	32560		
FREQ.	395/98		
C	<input type="checkbox"/>	D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	24,1100		
DATA	16/10/98		
N.º CPD			

CM-00104561-8

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

Bielschowsky, Roberto Hugo

B476c      Controle dinâmico das restrições em otimização / Roberto Hugo  
Bielschowsky -- Campinas, [S.P. :s.n.], 1997.

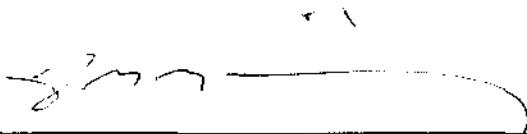
Orientador : José Mario Martínez

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

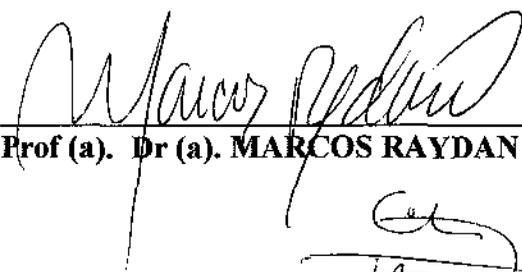
1. Otimização matemática. 2. Programação não-linear. I.  
Martínez, José Mario. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto  
de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

**Tese de Doutorado defendida e aprovada em 23 de setembro de 1997**

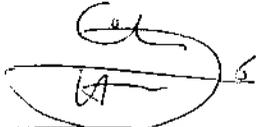
**Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.**



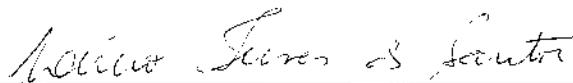
**Prof (a). Dr (a). JOSÉ MÁRIO MARTINEZ PÉREZ**



**Prof (a). Dr (a). MARCOS RAYDAN**



**Prof (a). Dr (a). CARLOS HUMES JR**



**Prof (a). Dr (a). LÚCIO TUNES DOS SANTOS**



**Prof (a). Dr (a). MARIA APARECIDA DINIZ EHRHARDT**

## RESUMO

Abordamos, nesta tese, o problema de obter pontos de mínimo local de funções diferenciáveis, definidas no  $\mathbb{R}^n$  e sujeitas a restrições. Nosso ponto de partida reside numa aposta em algoritmos que têm muito em comum com algoritmos de pontos factíveis, tais como, por exemplo, o GRG e o Gradiente Projetado, porém *relaxando de forma dinâmica* as restrições de igualdade  $h(x) = 0$ . Ou seja, relaxaremos a condição  $h(x^{(k)}) = 0$ , característica dos iterandos gerados em métodos de pontos factíveis, para uma na forma  $\|h(x^{(k)})\| = O(\|gp(x^{(k)})\|)$ .  $gp(x)$  representa a projeção ortogonal do gradiente  $\nabla f(x)$ , no espaço tangente às restrições  $\mathcal{N}(h'(x))$ .

No capítulo 1 situamos nossa abordagem. No capítulo 2 formulamos um algoritmo desenvolvendo-a para restrições de igualdade apenas, e que denominaremos de CDR (Controle Dinâmico das Restrições). Pensando em problemas de grande porte não estruturados formulamos uma versão adequada a tratar de forma inexata todos os subproblemas lineares envolvidos. Vale dizer, sem fatorações de matrizes. Ainda no segundo capítulo desenvolvemos uma teoria de convergência global para o método, e no terceiro uma teoria de convergência local. No quarto capítulo apresentamos os resultados de alguns testes preliminares com o algoritmo, realizados em colaboração com Francisco M. Gomes. No quinto capítulo e no apêndice tratamos de possíveis extensões de CDR, visando incluir também restrições de desigualdade.

## AGRADECIMENTOS

Meu primeiro agradecimento vai para o orientador José Mário Martínez, com quem aprendí, através de sua vivência e bom gosto, uma maneira de olhar para problemas de otimização, bem como, por mostrar com seu exemplo cotidiano, a forma de se consolidar um espaço institucional de pesquisa no qual se trabalha com seriedade e coletivamente. Em particular, este agradecimento se estende a todo o grupo que participa do seminário semanal coordenado por Martínez.

Um agradecimento todo especial devo ao professor Francisco M. Gomes. Os resultados apresentados no capítulo 4 fazem parte de um trabalho que está sendo desenvolvido juntamente com ele. Agradeço, de coração, não apenas a gentileza de me permitir usar parte do nosso trabalho neste capítulo da tese, mas igualmente o convívio desfrutado, bem como a expectativa de podermos avançar, significativamente, no estabelecimento de evidências numéricas para algumas das questões que, apenas tangencialmente, serão explicitadas no capítulo 4.

À UFRN, e em especial ao seu Departamento de Matemática, devo as condições favoráveis que me facilitaram a conclusão desta tese. À Capes, devo uma bolsa igualmente importante para criar tais condições.

Last, but not least, um agradecimento com muito amor a Gorete, por conseguir aturar este doutorando em matemática durante alguns anos.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1	SITUANDO NOSSA ABORDAGEM	1
1.2	ORGANIZAÇÃO DA TESE	18
1.3	NOTAÇÃO	20
1.3.1	SOBRE O USO DE “O” E “o”	22
1.4	LEMA DE TAYLOR PARA MRI	24
1.5	DESCIDA SUFICIENTE (DS)	27
<b>2</b>	<b>CDR</b>	<b>29</b>
2.1	HEURÍSTICA E DESCRIÇÃO INFORMAL DE CDR	30
2.1.1	HEURÍSTICA	30
2.1.2	DESCRIÇÃO INFORMAL DE CDR	37
2.2	PRIMEIRA ETAPA: ALGORITMOS AUXILIARES <i>REST</i> E <i>XCOR</i>	39
2.2.1	VERSÃO 0 DE <i>REST</i>	40
2.2.2	VERSÃO 1 DE <i>REST</i>	42
2.2.3	<i>XCOR</i>	44
2.3	CDR	46
2.4	CONVERGÊNCIA GLOBAL DE <i>CDR</i>	51
2.4.1	HIPÓTESES ASSUMIDAS E NOTAÇÃO	54
2.4.2	BOA DEFINIÇÃO POSSÍVEL PARA <i>XCOR</i>	56
2.4.3	BOA DEFINIÇÃO POSSÍVEL PARA <i>CDR</i>	61
2.4.4	CONVERGÊNCIA GLOBAL	65
2.5	CDRIN	71
2.5.1	PARA UM TRATAMENTO <i>INEXATO</i> DE MRI	72
2.5.2	DESCRIÇÃO DE <i>CDRIN</i>	79
2.5.3	CONVERGÊNCIA GLOBAL DE <i>CDRIN</i>	81
<b>3</b>	<b>CONVERGÊNCIA LOCAL</b>	<b>89</b>
3.1	ESTRUTURA LOCAL PERTO DE UM “BOM MINIMIZADOR”	90
3.2	CONVERGÊNCIA LOCAL A UM BOM MINIMIZADOR	94
3.2.1	ESCOLHAS PARA UMA CONVERGÊNCIA LOCAL “BOA”	94
3.2.2	CONVERGÊNCIA LOCAL LINEAR A CADA $p$ PASSOS	106
3.3	CONVERGÊNCIA SUPERLINEAR EM DOIS PASSOS DE $\{x_c^{(k)}\}$	115
3.3.1	CDRIN E A CONDIÇÃO DE DENNIS-MORÉ	115
3.3.2	CDRIN E PQS “INEXATO”	123
3.3.3	ATUALIZAÇÃO SECANTE	127
3.4	CDRLOC	137
3.4.1	DESCRIÇÃO DE CDRLOC	137

3.4.2	TAXAS DE CONVERGÊNCIA DE CDRLOC . . . . .	139
<b>4</b>	<b>TESTES NUMÉRICOS</b> . . . . .	<b>147</b>
4.1	OBJETIVOS . . . . .	147
4.2	IMPLEMENTAÇÃO REALIZADA . . . . .	150
4.2.1	SALVREST . . . . .	152
4.2.2	CORREÇÃO DE SEGUNDA ORDEM . . . . .	154
4.2.3	CALIBRAGEM INICIAL DE $\rho_{max}$ . . . . .	156
4.2.4	ESTRATÉGIAS PARA A FASE 1 . . . . .	161
4.3	TESTES COM PQS . . . . .	164
4.4	OS PROBLEMAS TESTADOS . . . . .	170
<b>5</b>	<b>MRIC E CONCLUSÕES</b> . . . . .	<b>177</b>
5.1	MRIC . . . . .	177
5.2	CONCLUSÕES E DESDOBRAMENTOS . . . . .	184
5.2.1	CONCLUSÕES . . . . .	184
5.2.2	DESDOBRAMENTOS . . . . .	186
<b>A</b>	<b>CDR para MRIC</b> . . . . .	<b>189</b>

# Capítulo 1

## INTRODUÇÃO

O objetivo principal deste capítulo consiste em situar informalmente nossa abordagem, bem como esboçar, em linhas gerais, o que faremos nesta tese e como o material a ser exposto se organiza nos seus cinco capítulos. Isto será feito nas duas primeiras seções. Mais três seções introdutórias de caráter técnico serão incluídas neste primeiro capítulo, conforme resumo organizado no final da seção §1.2.

### 1.1 SITUANDO NOSSA ABORDAGEM

O problema que desejamos abordar diz respeito à obtenção de pontos de mínimo local para uma função com  $n$  variáveis, sujeita a  $m$  restrições de igualdade. Consideremos  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ , com  $n \geq m$  e denotemos por MRI nosso problema em questão:

$$\text{Minimizar } f(x) \quad \text{sujeito a } h(x) = 0 \quad \text{MRI}$$

Nossa preocupação central, neste trabalho, é com a formulação de algoritmos para resolver MRI numa classe “razoavelmente grande” de problemas, inclusive com  $m$  e  $n$  “grandes”, visando a possibilidade de serem eficientemente implementados. *Resolver* tem aí o sentido de encontrar pontos de mínimo local. Consideraremos apenas o caso no qual  $f$  e  $h$  são suficientemente diferenciáveis ( $C^2$  Lipschitz basta). Acreditamos poder generalizar nossos resultados, de forma natural, para problemas envolvendo também restrições de desigualdade, mas preferimos concentrar nossa exposição no caso MRI.

Denotaremos sempre por  $\mathcal{H}_c$  a superfície de nível  $c$  da  $h$ , ou seja:

$$\mathcal{H}_c = h^{-1}(c) = \{x : h(x) = c\}$$

Dizemos que  $x \in \mathbb{R}^n$  é um ponto regular de  $h$ , caso  $h'(x)$  tenha posto máximo, e singular em caso contrário. Dizemos ainda que  $c \in \mathbb{R}^m$  é um valor regular de  $h$ , caso  $\mathcal{H}_c$  só contenha pontos regulares de  $h$ . Equivalentemente, dizemos que  $\mathcal{H}_c$  é um nível regular se todos os seus pontos forem regulares. Dizemos ainda que  $h$  é regular, se for regular em todos os pontos de seu domínio.

Denotemos o Lagrangeano de  $f$  e  $h$  por  $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ . Ou seja,

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T h(x) \quad (1.1)$$

Como estamos supondo  $f$  e  $h$  suficientemente diferenciáveis, se  $x^*$  é um ponto regular de  $h$  que resolve MRI, teremos garantidas, em  $x^*$ , as clássicas condições de Kuhn-Tucker KT, ou seja, um multiplicador de Lagrange  $\lambda^*$  tal que  $L$  seja estacionário em  $(x^*, \lambda^*)$ . Portanto, neste caso,  $(x^*, \lambda^*)$  satisfaz às equações de KT correspondentes, ou seja:

$$\nabla L(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla_x L(x, \lambda) \\ h(x) \end{pmatrix} = 0 \quad (1.2)$$

Note que as condições de KT (1.2) representam um sistema de  $(m+n)$  equações com  $(m+n)$  incógnitas, cujas soluções podem conter não apenas soluções verdadeiras de MRI, mas também pontos de sela e até mesmo de máximo. Ainda assim, podemos entender que por trás de todos os métodos para resolver MRI está, de forma mais ou menos implícita, a busca de uma solução para o sistema de equações (1.2), geralmente empreendida de modo a utilizar, fortemente, a rica estrutura herdada de MRI. Para resolver problemas não lineares tais métodos serão iterativos, com algumas poucas exceções para problemas particulares. Alguns métodos conseguem garantir condições teóricas para que pontos de KT, eventualmente gerados como pontos de acumulação de  $x^{(k)}$ , sejam soluções de MRI. A maior parte deles se contenta com uma heurística, que torne “altamente improvável” a obtenção de iterados se acumulando em pontos de KT que não sejam minimizadores da  $f$  restrita a  $h(x) = 0$ . Usualmente um tal método prescreve, para cada iterado  $x^{(k)}$ , um modelo simplificado que representa  $f$  e  $h$  perto de  $x^{(k)}$ , quase sempre linear ou quadrático, a partir do qual se gera um novo ponto  $x^{(k+1)}$ .

Fixemos  $W^*$  para representar a matriz hessiana do Lagrangeano  $L$  com respeito a  $x$ , associada a um ponto de KT  $x^*$  e seu multiplicador  $\lambda^*$ , ou seja,

$$W^* = \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*)$$

Diz-se que  $x^*$  satisfaz às condições suficientes de segunda ordem para MRI, caso seja um ponto de KT, regular de  $h$  e  $W^*$ , restrita ao espaço tangente a  $\mathcal{H}_0$  em  $x^*$ , seja positivo-definida. Frequentemente denotaremos tais pontos de KT simplesmente como *bons minimizadores* (de MRI).

Aproveitando a primeira das equações em 1.2, introduzimos um pouco mais de notação:

$A^\dagger$  – Dada uma matriz  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , denotamos por  $A^\dagger$  à pseudo-inversa de Moore-Penrose de  $A$  (vide [GL 87]). Nos casos que nos interessam mais de perto  $A$  tem posto máximo  $m$  implicando

$$A^\dagger = A^T(AA^T)^{-1} \quad (1.3)$$

$\lambda_{LS}$  – Para cada  $x \in \mathbb{R}^m$ , definimos o multiplicador de quadrados mínimos  $\lambda_{LS}(x)$  associado a  $f$  e  $h$  como  $\lambda_{LS}(x) = -(h'(x)^T)^\dagger \nabla f(x)$ . No caso que nos interessa,  $x$  é um ponto regular de  $h$ , e podemos escrever

$$\lambda_{LS}(x) = \operatorname{argmin}\{\|\nabla_x L(x, \lambda)\| : \lambda \in \mathbb{R}^m\} = -(h'(x)h'(x)^T)^{-1}h'(x)\nabla f(x) \quad (1.4)$$

Denotamos ainda por  $gp(x)$  à projeção ortogonal do gradiente na direção tangente às restrições em  $x$  (identificada como  $\mathcal{N}(h'(x))$ ). Resulta valer, fixando-se  $\lambda_{LS} = \lambda_{LS}(x)$ ,

$$gp(x) = \nabla_x L(x, \lambda_{LS}) = \nabla f(x) + h'(x)^T \lambda_{LS}(x) \quad (1.5)$$

Destacamos dois subconjuntos do  $\mathbb{R}^n$  associados a MRI que representam um papel fundamental para a sua compreensão. O primeiro é o conjunto factível  $\mathcal{H}_0$ . Denominaremos de conjunto dual, ou ainda algumas vezes, abusivamente, de variedade dual ao conjunto

$$\mathcal{D}_{\nabla L} = \{x \in \mathbb{R}^n : \nabla_x L(x, \lambda) = 0, \text{ para algum } \lambda \in \mathbb{R}^m\} \tag{1.6}$$

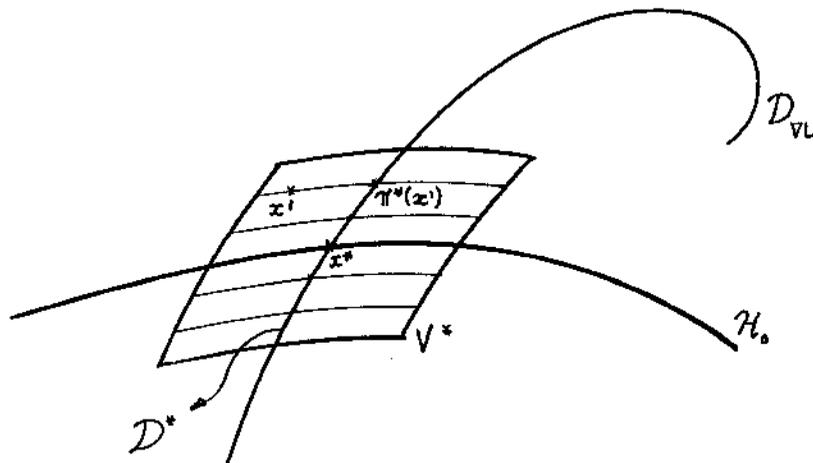
A equação que define  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  corresponde à primeira das equações de (1.2). Isto significa que cada um de seus pontos pode ser entendido como um ponto de KT da  $f$  restrita a algum nível  $\mathcal{H}_c$ . Em particular,  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  conterá os minimizadores de  $f/\mathcal{H}_c$  que forem pontos regulares de  $h$ .

Além disto, se  $f$  e  $h$  são suficientemente diferenciáveis, perto de um bom minimizador  $x^*$ ,  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  é uma superfície regular de dimensão  $m$ , transversal às superfícies de nível de  $h$  e formada por *bons minimizadores* da  $f$  restrita a algum nível vizinho de  $\mathcal{H}_0$ . Este resultado sai do teorema das funções implícitas, e sua demonstração pode ser encontrada em Luenberger [Lue 86 - Cap 10.7].

**OBSERVAÇÃO 1.1.1** - Além de organizar os minimizadores da  $f$  restrita aos níveis vizinhos do conjunto factível numa superfície diferenciável, este resultado permite definir uma “projeção”  $\Pi^* : V^* \rightarrow \mathcal{D}_{\nabla L}$ , numa vizinhança conveniente  $V^*$  de  $x^*$  e dada por:

$$\Pi^*(x) = \mathcal{D}^* \cap \mathcal{H}_{h(x)}, \tag{1.7}$$

onde as superfícies  $\mathcal{D}^* = \mathcal{D}_{\nabla L} \cap V^*$  e  $\mathcal{H}_{h(x)}$  são de classe  $C^1$  e sua interseção é transversal, se  $V^*$  for suficientemente pequena. Usando a forma local das submersões (vide [Lima 70]), é fácil verificar que  $\Pi^*$  resulta de classe  $C^1$ . Isto caracteriza  $(V^*, \Pi^*)$  como uma *vizinhança tubular  $C^1$*  de  $\mathcal{D}^*$ , cujas fibras são as superfícies de nível da  $h$ . Acreditamos que, *esta estrutura de vizinhança tubular local da variedade dual perto de um bom minimizador*, constitui uma expressão topológica importante da riqueza de estrutura derivada de MRI, e disponível para atacar (1.2). Retornaremos a este ponto com mais detalhes no capítulo 3.



Esboço da estrutura de  $\mathcal{D}^* = \mathcal{D}_{\nabla L} \cap V^*$

**OBSERVAÇÃO 1.1.2** - Gostaríamos de registrar algumas dificuldades que tornam impensável a construção de algoritmos para resolver MRI, com a generalidade colocada até agora. Há pelo menos duas situações nas quais pode não haver solução para MRI:

- i - O conjunto factível  $\mathcal{H}_0$  é vazio.

ii –  $\mathcal{H}_0$  não é compacto e  $f$  não é própria. \*

No caso i obviamente não pode haver soluções para MRI e no caso ii é muito fácil construir exemplos nos quais a função não tem ponto de mínimo local em  $\mathcal{H}_0$ . O problema difícil, neste contexto, reside em caracterizar algoritmicamente estas situações. A dificuldade consiste em não ser razoável esperar por algoritmos eficientes para garantir a inexistência de soluções para MRI.

Garantir que  $\mathcal{H}_0$  é vazio significa garantir que 0 não é valor mínimo de  $\|h(x)\|^2$ . Isto, essencialmente, corresponde a um problema de minimização global, muito difícil de equacionar algoritmicamente de forma eficiente no conjunto das funções de classe  $C^1$ , mesmo em domínios compactos do  $\mathbb{R}^n$ . Os algoritmos usualmente empregados para resolver MRI, aliás, parecem constituir bons exemplos do que não se deve fazer para enfrentar dificuldades em encontrar pontos factíveis, na medida que minimizadores de  $\|h(x)\|$  não factíveis funcionam como atratores para seus iterandos. Em geral, quando não há pontos factíveis, tais algoritmos, ou bem geram sequências ilimitadas, ou então acabam convergindo para minimizadores de  $\|h(x)\|$  que não são factíveis. Neste caso o algoritmo termina sem que se possa saber se o problema admite ou não pontos factíveis (vide [GMM 95]).

Se o algoritmo encontra trajetórias de descida da função objetivo, ou de alguma função de mérito conveniente para o problema, com  $\|x^{(k)}\| \rightarrow \infty$ , decidir, nestes casos, que não pode haver outras trajetórias conduzindo a minimizadores, nos parece um problema claramente inatacável nesta generalidade. Felizmente, há muitos problemas importantes, para os quais se podem estabelecer condições suficientes, de forma a garantir que as sequências de iterados geradas cheguem a uma solução para o problema (1.2). No entanto, no caso geral, pode tratar-se de um problema muito difícil definir, a priori, se tais condições são satisfeitas, ou não. Na prática, se formulam procedimentos para atacar MRI em geral, muito embora só seja possível garantir convergência de seus iterados a pontos de KT, supondo *hipóteses que garantam compacidade às trajetórias, bem como a possibilidade de se alcançar pontos factíveis à medida que  $k \rightarrow \infty$* . Frequentemente isto fica meio confuso nas formulações encontradas na literatura. Voltaremos a este ponto no momento de discutir as hipóteses que assumiremos, de forma a garantir boas propriedades de convergência global para o algoritmo a ser apresentado no capítulo 2.

Independentemente disto, podemos ter também problemas de robustez devidos ao método empregado. Aliás, é muito natural que alguns métodos sejam mais robustos que outros, ou ainda que estejam especialmente talhados para resolver determinados tipos de problemas, mas que esbarrem em outros relativamente mais simples. O problema 14, usado nos testes numéricos do capítulo 4 e discutido no exemplo 2.1, constitui um exemplo típico, no qual alguns métodos gerarão sequências convergentes a uma solução de MRI, e outros não. Serve para identificar deficiências importantes que podem distinguir alguns métodos dos demais.

Mesmo arriscando-nos a uma excessiva simplificação na caracterização dos métodos desenvolvidos para programar MRI com funções “suficientemente diferenciáveis”, ainda assim os classificariamos em tres grandes vertentes, intimamente relacionadas à decomposição de  $\mathbb{R}^{n+m}$  no sistema (1.2), em grandezas que medem “otimalidade” –  $\nabla_x L(x, \lambda) \in \mathbb{R}^n$ , acopladas a outras que medem “factibilidade” –  $h(x) \in \mathbb{R}^m$ . Vale dizer, *intimamente relacionadas a como se comportam com relação aos conjuntos dual  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  e factível  $\mathcal{H}_0$* .

---

\*Diz-se que  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  é própria caso seus conjuntos de nível  $\{x : |f(x)| \leq k\}$  sejam todos compactos.

## V1 - MÉTODOS DE PONTOS FACTÍVEIS

Provavelmente a forma mais antiga de resolver MRI corresponde a usar as  $m$  restrições para explicitar  $m$  das variáveis em função das  $n - m$  restantes. Desta maneira conseguimos *reduzir* MRI a um problema de minimização irrestrita com  $n - m$  variáveis. Infelizmente isto só é possível em casos muito simples. Os métodos de pontos factíveis têm em comum com eles o princípio de *forçar, a cada passo, uma redução significativa na função objetivo, mantendo porém a factibilidade*. De forma bem esquemática, poderíamos descrevê-los por:

PFAC

Dado  $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  tal que  $h(x^{(k)}) = 0$

P1 - Defina uma curva contínua  $\delta : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^n$ , de classe  $C^1$  numa vizinhança de 0, e tal que:

- i -  $\delta(0) = x^{(k)}$
- ii -  $h(\delta(t)) = 0$ , para todo  $t \in [0, 1]$ .
- iii-  $(f \circ \delta)'(0) < 0$

P2 - Use algum método de busca unidimensional para encontrar  $x^{(k+1)}$  sobre a curva  $\delta([0, 1])$ , de tal modo que  $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$

Frequentemente designaremos uma curva satisfazendo P1.iii, como uma *curva de descida para a  $f$  em  $x^{(k)}$* , uma vez que podemos garantir que a  $f$  desce ao longo de uma tal  $\delta(t)$ , pelo menos para valores pequenos de  $t$ .  $\delta'(0)$  é, neste caso, denominado uma *direção de descida para a  $f$  em  $x^{(k)}$* . Usualmente não se dispõe de uma tal curva  $\delta(t)$  explicitamente. Supondo que  $\mathcal{H}_0$  é um nível regular de  $h$ ,  $\delta(t)$  pode ser pensada a partir de uma parametrização de  $\mathcal{H}_0$  numa vizinhança de  $x^{(k)}$ , ou seja, através de uma  $\Psi : V \rightarrow \mathcal{H}_0$ , onde  $V$  é um aberto de  $\mathbb{R}^{n-m}$  e  $\Psi$  é  $C^1$ , regular, 1-1 com  $x^{(k)} \in \Psi(V)$ . Deste modo, o problema de diminuir a  $f$  em  $\mathcal{H}_0$  fica *reduzido* a um problema de diminuir  $(f \circ \Psi)$ , definida com  $n-m$  variáveis *livres* (ou ainda *reduzidas*), isto é, sem restrições. Em geral, uma tal  $\Psi$  não é dada explicitamente e, computacionalmente, apenas dispomos de suas derivadas em

$$x_r^{(k)} = \Psi^{-1}(x^{(k)}) \in V \quad (1.8)$$

O que se faz então é formar um modelo linear ou quadrático (*reduzido*) de  $f \circ \Psi$  e definir então uma curva de descida (*reduzida*),  $\delta_r(t)$ , para  $f \circ \Psi$  em  $x_r^{(k)}$ . A partir de  $\delta_r(t)$  podemos obter *uma curva de descida para a  $f$  em  $x^{(k)}$*  através

$$\delta(t) = \Psi(\delta_r(t)) \quad (1.9)$$

Frequentemente

$$\delta_r(t) = x_r^{(k)} + tv^{(k)}, \quad (1.10)$$

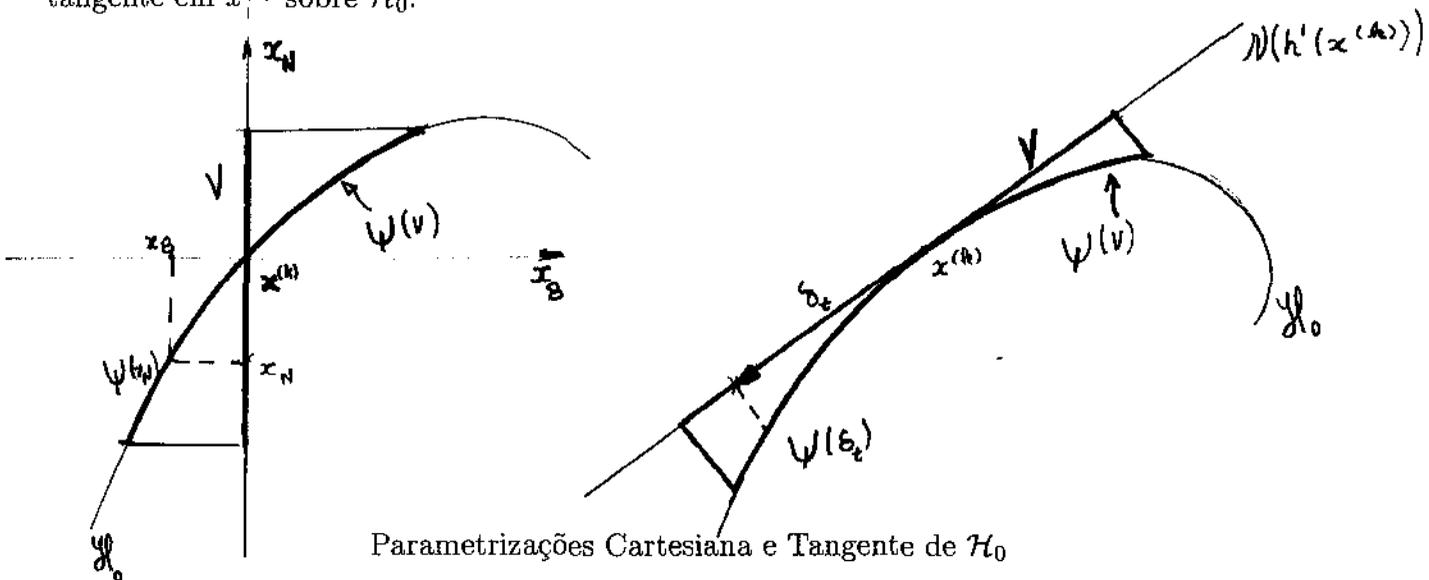
onde  $v^{(k)}$  representa alguma direção de descida para  $f \circ \Psi$  em  $x_r^{(k)}$ , mas nem sempre. Na verdade, o que se faz é definir pontos candidatos *reduzidos* como  $x_r^+ = \delta_r(t^+)$  e uma parte importante do método corresponde a obter pontos candidatos a satisfazer P2 *restaurando*

$x^+ = \delta(t^+) = \Psi(x_r^+)$ , uma vez que  $\Psi$  não é conhecida explicitamente.

Há duas grandes linhas para realizar tal esquema. Uma delas, que será denominada *PFAC com Redução Cartesiana* ou *GRG*,<sup>†</sup> corresponde a usar o teorema das funções implícitas para definir localmente  $\mathcal{H}_0$  como o gráfico de uma função  $\psi : V \rightarrow \mathbb{R}^m$ , tal que  $h(\psi(x_N), x_N) = 0$ . Neste caso

$$\Psi(x_N) = (\psi(x_N), x_N) \quad (1.11)$$

À outra linha, denominaremos *PFAC com Redução Tangente*. Corresponde a tomar uma parametrização de  $\mathcal{H}_0$  numa vizinhança de  $x^{(k)}$ , a partir do espaço tangente às restrições, ou seja, do núcleo de  $h'(x^{(k)})$ . Intuitivamente, corresponde a “projetar ortogonalmente” o espaço tangente em  $x^{(k)}$  sobre  $\mathcal{H}_0$ .



Parametrizações Cartesiana e Tangente de  $\mathcal{H}_0$

### I – PFAC com Redução Cartesiana – GRG

Wolfe em [Wol 63] propôs um método que ficou conhecido como *Gradiente Reduzido* (GR), basicamente para problemas de minimização não linear com restrições lineares (inclusive de desigualdade). Abadie e Carpentier (vide [AC 67] e [AC 69]) generalizaram o método de Wolfe, de forma a admitir também restrições não lineares, e fizeram uma implementação computacional considerada líder numa comparação realizada entre cerca de trinta métodos então disponíveis num trabalho publicado por Colville em [Col 68]. Tal método leva, historicamente, o nome de *Gradiente Reduzido Generalizado* (GRG) e corresponde a uma primeira maneira de realizar PFAC. Pode ser considerado um herdeiro direto do método ingênuo de reduzir o problema MRI a um problema irrestrito em  $n-m$  variáveis, que mencionamos inicialmente. Resumindo o que dissemos acima, a idéia central é reduzir em cada iteração, pelo menos *localmente*, o problema MRI a um problema irrestrito em  $n-m$  variáveis, via teorema das funções implícitas, e encontrar por aí uma *curva de descida reduzida*  $\delta_r(t) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{(n-m)}$ , bem como maneiras eficientes de garantir  $\delta(t) \in \mathcal{H}_0$ , atendendo PFAC e a partir de  $\delta_r(t)$ .

<sup>†</sup> O nome histórico para tal linha seria *Gradiente Reduzido Generalizado – GRG*. Um nome que nos parece mais adequado para esta linha, com o objetivo de tratar unificadamente os métodos de pontos factíveis, seria *PFAC com Parametrização Cartesiana*. Fazendo a média adotamos *PFAC com Redução Cartesiana ou GRG*. O  $N$  de  $x_N$  em (1.11) vem de pensar nas variáveis livres como *não básicas*, por oposição às demais – *básicas* – assumindo a herança do método simplex sobre o qual se baseia fortemente o GRG.

Supondo-se  $x^{(k)}$  um ponto regular de  $h$ , podemos escrever *implicitamente*  $m$  das variáveis *básicas* em função das  $n-m$  restantes *não básicas* (*livres, reduzidas*), usando as  $m$  equações correspondentes a se impor  $h(x) = 0$ . Na prática isto significa

i – Decompor a matriz jacobiana em

$$h'(x^{(k)}) = [B^{(k)} \quad N^{(k)}], \quad (1.12)$$

eventualmente reindexando as variáveis, de forma que  $B^{(k)}$  seja não singular, e decompor  $x^{(k)} = (x_B^{(k)}, x_N^{(k)})$  correspondentemente.

ii – Considerar  $\psi : V \subset \mathbb{R}^{n-m} \rightarrow \mathbb{R}^m$  de classe  $C^1$ , definida implicitamente numa vizinhança  $V$  de  $x_N^{(k)}$ , de modo que para todo  $x_N \in V$  tenhamos

$$h(\psi(x_N), x_N) = 0 \quad (1.13)$$

Diminuir a  $f$  numa vizinhança de  $x^{(k)}$  é agora um problema de diminuir a função *reduzida*  $\phi(x_N) = f(\psi(x_N), x_N)$  em  $V$ . O gradiente reduzido, ou seja a direção de máxima subida para  $\phi$  em  $x_N^{(k)}$ , se escreve como (vide [MS 95 - §11.1]):

$$\nabla\phi(x_N^{(k)}) = \left[ -((B^{(k)})^{-1}N^{(k)})^T \quad I \right] \nabla f(x^{(k)}) \quad (1.14)$$

Por aí a tarefa de encontrar *direções de descida reduzida adequadas* para  $\phi(x_N^{(k)} + \cdot)$  torna-se uma tarefa mais ou menos corriqueira. Dada uma tal  $d_N^{(k)} \in \mathbb{R}^{n-m}$  uma maneira natural de definir  $\delta_N(t) : [0, 1] \rightarrow V$  e  $\delta(t) : [0, 1] \rightarrow \mathcal{H}_0$  seria

$$\delta_N(t) = x_N^{(k)} + td_N^{(k)} \quad (1.15)$$

$$\delta(t) = (\psi(\delta_N(t)), \delta_N(t)) \quad (1.16)$$

A tarefa de definir um ponto candidato  $x^+ = \delta(t^+) \in \mathcal{H}_0$ , conforme exigido em PFAC2, a partir de  $\delta_N(t^+)$ , corresponde a resolver o sistema de  $m$  equações nas  $m$  incógnitas  $x_B$ , dado por

$$h(x_B, \delta_N(t^+)) = 0 \quad (1.17)$$

e começando com  $x_B = x_B^{(k)}$ . O método de Newton, por exemplo, teria neste caso como iteração típica:

$$x_B \leftarrow x_B - \left[ \frac{\partial h(x_B, \delta_N(t^+))}{\partial x_B} \right]^{-1} h(x_B, \delta_N(t^+)) \quad (1.18)$$

O ponto alto do método GRG reside na importação eficiente de técnicas utilizadas no método Simplex para PL, separando as variáveis em básicas e não básicas, a partir da matriz jacobiana  $h'(x)$ . Como bem assinalam Martinez e Santos em [MS 95], “usando técnicas de fatoração de matrizes e de manipulação de esparsidade similares às usadas no Simplex, foram desenvolvidos programas GRG extremamente eficientes do ponto de vista prático e, inclusive, com valor comercial”. Embora relativamente pouco se tenha publicado na literatura recente de programação não linear sobre métodos de pontos factíveis, o fato é que implementações do GRG como GRG2 e LSGRG2 de Lasdon e colaboradores, aparentemente, continuam altamente competitivas, se comparadas com PQS. Pelo menos isto é o que Fan, Sarkar e Lasdon reivindicam em [FSL 88], com base em testes numéricos realizados com cerca de 50 problemas-teste e, até onde tenhamos notícia, sem contestação publicada.

## II – PFAC com Redução Tangente

Considerando  $x^{(k)}$  um ponto regular de  $h$ , uma maneira idealizada de sistematizar esta linha seria considerar uma parametrização de  $\mathcal{H}_0$  perto de  $x^{(k)}$  como uma projeção conveniente dos vetores no espaço tangente ao longo das geodésicas, conforme faz Luenberger em [Lue 84 - §11.5]. Os geômetras costumam chamá-la de aplicação exponencial -  $Exp$  (vide [Car 88]). Considere  $\mathcal{H}_0$  como uma superfície riemanniana com a métrica induzida pelo  $\mathbb{R}^n$  e  $V$  uma vizinhança de 0 adequada no espaço tangente às restrições, ou seja, em  $\mathcal{N}(h'(x^{(k)}))$ . A parametrização

$$Exp^{(k)} : V \rightarrow \mathcal{H}_0 \quad (1.19)$$

calcula  $Exp^{(k)}(v)$  como o ponto sobre a geodésica que começa em  $x^{(k)}$ , é tangente a  $v$ , e de tal forma que o comprimento de arco entre  $x^{(k)}$  e  $Exp^{(k)}(v)$  sobre a geodésica é exatamente  $\|v\|$ . O sentido a se tomar sobre a geodésica é o natural, ou seja, o de  $v$ . Destacamos a seguir duas propriedades da aplicação Exponencial:

PT1 – Se  $v$  está no espaço tangente a  $\mathcal{H}^{(k)} = \mathcal{H}_{h(x^{(k)})}$  podemos escrever uma aproximação de segunda ordem de  $Exp^{(k)}(v)$  como:

$$Exp^{(k)}(v) = v + \delta_{soc}^{(k)}(v) + o(\|v\|^2), \quad \text{onde} \quad (1.20)$$

$$\delta_{soc}^{(k)}(v) = \operatorname{argmin}\{\delta : h'(x^{(k)})^T \delta + h(x^{(k)} + \delta) = h(x^{(k)})\} \quad (1.21)$$

$$= h'(x^{(k)})^\dagger [h(x^{(k)}) - h(x^{(k)} + v)] \quad (1.22)$$

$\delta_{soc}^{(k)}(v)$  é frequentemente denominada na literatura de *Correção de Segunda Ordem* (*second order correction*) para  $x^{(k)} + v$ , no caso onde  $x^{(k)}$  é factível. Corresponde a um candidato natural para restaurar  $x^{(k)} + v$  ao nível  $\mathcal{H}^{(k)}$ , com um passo "pequeno" relativamente a  $\|v\|$  e usando apenas informações sobre derivadas em  $x^{(k)}$ . Em outras palavras, se  $v$  está no espaço tangente a  $\mathcal{H}^{(k)}$  em  $x^{(k)}$ , é fácil ver de  $h'(x^{(k)})v = 0$  e de (1.22) que:

$$\|h(x^{(k)} + v) - h(x^{(k)})\| = O(\|v\|^2) \quad (1.23)$$

$$\|h(x^{(k)} + v + \delta_{soc}^{(k)}(v)) - h(x^{(k)})\| = o(\|v\|^2) \quad (1.24)$$

$$\|\delta_{soc}^{(k)}(v)\| = o(\|v\|) \quad (1.25)$$

(1.20-1.22) é uma consequência direta do fato que a derivada  $Exp^{(k)'}(0)$  é a identidade no espaço tangente  $\mathcal{N}(h'(x^{(k)}))$  e que a segunda derivada de uma geodésica parametrizada pelo comprimento de arco, como  $Exp^{(k)}(tv)$  com  $\|v\| = 1$ , é sempre normal à superfície Riemanniana em questão, ou seja,  $\mathcal{H}^{(k)}$  neste caso. (vide [Car 88])

PT2 – As contas que Luenberger faz na proposição 1 da seção §11.5 em [Lue 84] implicam que o polinômio de Taylor de ordem dois  $q^{(k)}(v)$  para  $L(x^{(k)} + v)$ ,  $\lambda_{LS}(x^{(k)})$  é, igualmente, o polinômio de Taylor de ordem 2 para  $(f \circ Exp)$  em  $V$ . Ou seja,

$$f(Exp(v)) = q^{(k)}(v) + o(\|v\|)^2 \quad (1.26)$$

A exponencial talvez seja a maneira mais intrínseca do ponto de vista geométrico, de se parametrizar uma superfície numa vizinhança de um de seus pontos. PT1 e PT2 correspondem a uma forma de justificar o *folclórico princípio* segundo o qual *a f se comporta, numa*

vizinhança suficientemente pequena de  $x$  em  $\mathcal{H}_0$ , do mesmo jeito que o Lagrangeano, com  $\lambda = \lambda_{\text{LS}}(x)$ , no espaço tangente  $\mathcal{N}(h'(x))$ .

Neste sentido, a aplicação exponencial seria um excelente candidato para se *reduzir ao espaço tangente* o problema de diminuir a  $f$  ao longo de  $\mathcal{H}_0$ . No entanto sairia caro demais restaurar os pontos candidatos fazendo  $x^+ = \delta(t^+) = \text{Exp}(\delta_T(t^+))$ , a partir de  $\delta_T(t^+)$  obtida no espaço tangente a  $\mathcal{H}^{(k)}$  em  $x^{(k)}$ . Felizmente, para garantir as propriedades de convergência naturais para este tipo de problema não é necessária uma restauração tão fina. Em linhas bem gerais, é suficiente garantir uma *restauração* de  $\delta_T(t^+)$  a  $\delta(t^+)$ , de modo a se conservar uma propriedade bem mais fraca, satisfeita pela aplicação exponencial, a saber:

$$\|\delta(t^+) - \delta_T(t^+)\| = o(\delta_T(t^+)) \quad (1.27)$$

Na verdade, neste caso, *tampouco é essencial que  $\delta_T(t^+)$  esteja exatamente no espaço tangente, mas que o faça, apenas, num sentido aproximado.*

Dado  $v \in \mathcal{N}(h'(x^{(k)}))$ , (1.24-1.25) indicam que  $x^{(k)} + tv + \delta_{\text{soc}}^{(k)}(tv)$  é um bom candidato a restaurar aproximadamente  $x^{(k)} + tv$  na medida que satisfaz (1.27). Os métodos usuais, “tipo Gauss-Newton”, para resolver o sistema de  $m$  equações com  $n \geq m$  incógnitas  $h(x) = 0$  e ponto inicial em  $x^{(k)} + \delta_T(t^+)$ , atendem naturalmente a este tipo de exigência, conforme veremos no capítulo 2.

Basicamente PFAC, neste caso, se define por encontrar  $\delta_T(t)$  (aproximadamente) no espaço tangente a  $\mathcal{H}_0$  em  $x^{(k)}$  como curva de descida para uma aproximação linear, ou quadrática, do lagrangeano em  $x^{(k)}$ .  $\delta(t)$  resultaria de um processo que poderíamos denotar por *Restauração da Factibilidade* de  $x^{(k)} + \delta_T(t)$ . Uma propriedade fundamental a ser garantida na fase de restauração, corresponde a obter  $\delta_T(t)$  e  $\delta(t)$  *relativamente próximos entre si*, no sentido de (1.27).

Dois exemplos históricos aí correspondem a fazer:

i – Gradiente Projetado (GP)

$$\delta_T(t) = x^{(k)} - tgp(x^{(k)}), \quad \text{para } t \leq t_0 \quad (1.28)$$

ii – Gradiente Conjugado Projetado

$$\delta_T(t) = x^{(k)} - tv^{(k)}, \quad \text{onde } t \leq t_0 \text{ e} \quad (1.29)$$

$$v^{(k)} = -\nabla L(x^{(k)}, \lambda^{(k)}) + \mu^{(k)}v^{(k-1)} \quad (1.30)$$

$t_0$  tem aí o sentido de uma posição inicial para se fazer a busca unidimensional, devendo estar uniformemente limitado.  $v^{(k)}$  é calculado em ii com o sentido de generalizar o método de gradientes conjugados para problemas quadráticos e o valor de  $\mu^{(k)}$  deriva daí.  $\lambda^{(k)}$  é calculado de forma a garantir que  $v^{(k)}$  esteja no espaço tangente às restrições em  $x^{(k)}$ .

PFAC, com  $\delta_T(t)$  escolhido como em i e  $\delta(t)$  como uma *restauração* à factibilidade de  $x^{(k)} + \delta_T(t)$ , resume esquematicamente, numa versão para MRI, um algoritmo que Rosen classificou como *Gradient Projection Method* em [Ros 61], bem como o primeiro dos dois algoritmos que Miele e colaboradores publicaram em [MHH 69], sob a denominação de *versão ordinária de Sequential Gradient-Restoration Algorithms* (SGRA). A escolha em ii corresponde à *versão para gradientes conjugados* de SGRA, igualmente apresentada em [MHH 69]. Na verdade, se

substituímos  $gp(x^{(k)})$  em (1.28) por outras direções de descida “razoáveis” no espaço tangente, estaremos descrevendo diferentes esquemas *PFAC de Redução Tangente*.

Algoritmos de programação não linear cujos iterados permanecem sempre factíveis, surgiram no início da década de 60 já num contexto de problemas de minimização com restrições de igualdade e desigualdade (MRD). GP é uma das versões pioneiras de tais métodos e foi publicada por Rosen em [Ros 60] e [Ros 61]. Em [Ros 61], Rosen abordou problemas cujas funções objetivo eram lineares e as restrições não lineares e convexas. Seu trabalho tem ainda o mérito de se preocupar em demonstrar resultados teóricos, numa época na qual a tendência dominante parecia ser tentar formulações heurísticas para construir algoritmos implementáveis, testá-los computacionalmente e não se preocupar com formalizações matematicamente consistentes dos resultados empíricos. Inclusive Rosen preferiu sacrificar generalidade na formulação, de modo a poder garantir seus resultados teoricamente. Na verdade, seu algoritmo pode facilmente ser estendido para regiões não convexas, conforme êle mesmo aponta no seu artigo, e funções objetivo não lineares.

Neste aspecto, todos os algoritmos publicados por Miele junto com colaboradores, a começar por [MHH 69], vão na direção exatamente oposta, ou seja, o chute é livre e o critério de validação empírico. No entanto valem pela heurística e ousadia, em especial [MLC 71]. Ocuparam seu espaço na década de 70, particularmente nas aplicações a problemas de controle ótimo (vide [MPD 70]). A denominação SGRA é bastante sugestiva e o que o algoritmo faz, de fato, é alternar passos em direção à otimalidade com ciclos de restauração.

Em [MLC 71], Miele, Levy e Cragg propuseram generalizações de SGRA na versão que usa gradientes conjugados, com tres possibilidades diferentes de opções, que nos parecem de fato muito interessantes de serem testadas. A primeira possibilidade corresponde a flexibilizar a restauração, admitindo o que êles denominam de *restauração incompleta*. No caso deles, *restauração incompleta* significa fazer apenas uma restauração em cada ciclo de restaurações. A segunda admite mais de um passo do ciclo gradiente conjugado para cada ciclo de restaurações, que eles denominam de *restauração infrequente*. A terceira corresponde a testar o efeito de duas maneiras diferentes de calcular os multiplicadores de Lagrange em (1.30). A primeira destas opções corresponde a usar o multiplicador de quadrados mínimos  $\lambda_{LS}(x^{(k)})$  e, a outra, a calculá-lo de forma que se melhore de alguma maneira, a cada passo, a factibilidade de uma aproximação de Taylor linear de  $h$  em  $x^{(k)}$ . Ou seja, esta segunda maneira de calcular os multiplicadores de Lagrange é feita de modo a buscar uma aproximação do conjunto factível  $\mathcal{H}_0$  ainda no ciclo gradiente conjugado do método, ao se calcular  $\lambda^{(k)}$  de forma a reduzir  $\|h(x^{(k)}) + h'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)})\|$ . Tais algoritmos já não correspondem exatamente aos algoritmos PFAC, mas conservam muito de suas características. Num certo sentido esta segunda opção para  $\lambda^{(k)}$  corresponde a um esquema que mistura elementos dos métodos de pontos factíveis com elementos presentes na Programação Quadrática Sequencial, (a ser exposta adiante). No referido artigo estas oito opções diferentes são comparadas em cinco problemas-teste com até cinco variáveis e tres restrições. Concluem que, nos testes apresentados:

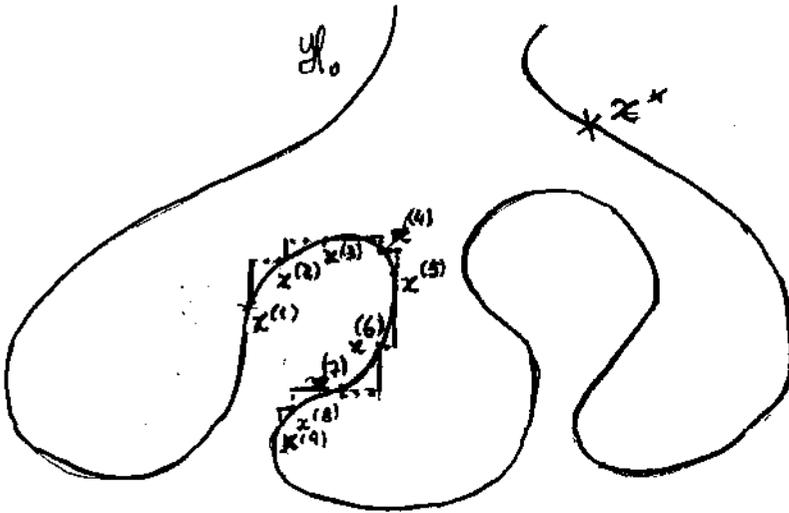
- MLC.1 – Os algoritmos de restauração incompleta se comportam melhor que os de restauração completa
- MLC.2 – Os de restauração infrequente, com um limite superior de  $(n-m)$  iterações de gradiente conjugado entre duas restaurações, é melhor que as outras opções correspondentes à frequência.

MLC.3 – Os melhores resultados teriam sido obtidos por uma versão com restauração incompleta, infrequente e com a segunda opção para o multiplicador de Lagrange. Inclusive indicam como muito significativa sua superioridade sobre o que poderíamos classificar de versão standard do SGRA, ou seja, essencialmente uma implementação do algoritmo exposto em [MHH 69], com restauração completa após cada passo gradiente conjugado.

Estes testes numéricos nos parecem indicar que, uma importante margem de eficiência pode ser conquistada com a flexibilização de algoritmos como os que estão esquematizados em PFAC. Contudo, a falta de uma preocupação teórica mais sistemática nos parece ser uma lacuna importante aí. Para se ter uma idéia, 20 anos depois de Miele e colaboradores terem publicado seus algoritmos em [MHH 69], Rom e Avriel publicaram em [RA 89.1] e [RA 89.2], dois artigos na mesma revista (JOTA) nos quais propõem algumas modificações para que se possa garantir, teoricamente, propriedades de convergência global a SGRA e, mesmo assim, apenas na sua versão mais simples. Receamos que nos casos de restauração incompleta e/ou infrequente, as modificações a serem propostas tenham que ser bem maiores.

Uma preocupação que nos parece relevante em PFAC, é com relação à precisão necessária para resolver a fase de restauração em algoritmos como GP, SGRA e GRG. Claramente a “precisão infinita”, implícita na equação  $h(x^+) = 0$ , exigida na restauração em PFAC1.ii é irreal, na medida que alguma tolerância teria que ser admitida na prática. Além disto, exigir excessiva precisão pode causar ineficiência. Mukai e Polak em [MP 78] elaboraram o que denominam, no abstract do artigo, de “an efficient implementation scheme for optimization algorithms in the family of gradient projection, reduced gradient and gradient restoration methods”, ou seja, para algoritmos tipo PFAC. Sua preocupação vai bem além da que seria exigida para se garantir, na fase de restauração, uma tolerância finita, porém pequena, na medida em que propõem um esquema no qual a tolerância  $\|h(x^+)\| \leq \epsilon$  exigida na restauração é reajustada dinamicamente em cada iteração, de forma a diminuir progressivamente à medida que os iterandos vão se aproximando de pontos de KT. Manter os iterandos flexivelmente próximos ao conjunto factível é, igualmente, a principal motivação em [Mar 96] e [Mar 97].

Algoritmos tipo GRG têm implementações reconhecidamente competitivas (vide [MW 93]), e acreditamos haver possibilidades muito interessantes em PFAC com Redução Tangente, ainda por serem exploradas, na linha de relaxar adequadamente a factibilidade dos iterandos. Apesar disto, nos parece visível que métodos de pontos factíveis parecem relativamente desprestigiados na programação não linear, com relação às outras duas grandes vertentes que exporemos a seguir, chegando a se gerar um certo *folclore* na otimização, segundo o qual, *métodos de pontos factíveis podem se perder dando passos excessivamente pequenos longe da solução*. A idéia que nos parece fazer parte do folclore tem um certo apelo heurístico, se pensamos em restrições cuja superfície de nível  $\mathcal{H}_0$  é significativamente não linear, como na figura abaixo. A obrigação de ter que acompanhar as restrições de perto induziria passos muito pequenos, longe de pontos de KT, enquanto que outros métodos teriam, supostamente, menos dificuldades ao enfrentar este tipo de situação. Por exemplo, pudemos constatar, explicitamente, este tipo de preocupação quanto à perda de eficiência de métodos que, de alguma forma, mantenham os iterados controladamente próximos da factibilidade, na argumentação de dois diferentes referees a artigos submetidos à publicação recentemente, embora isto não nos pareça claramente comprovado em trabalhos publicados. Num certo sentido, esta tese vai na direção de argumentar que um tal ponto de vista talvez não passe mesmo de preconceito sem maiores fundamentos. Voltaremos a este ponto no momento oportuno.



$\mathcal{H}_0$  com muitas “oscilações” podendo forçar passos PFAC muito pequenos.

Uma linha completamente diferente de métodos de pontos factíveis, corresponde a tentar resolver MRI *acompanhando trajetórias de um sistema de equações diferenciais ordinárias*. No artigo “ODE versus SQP methods for constrained optimization” ([BB 89]) Brown e Biggs publicam uma rápida revisão de tais métodos. Há várias formas de construí-los. A mais óbvia corresponde a acompanhar as trajetórias do campo gradiente de  $-f/\mathcal{H}_0$  (vide [Tan 78] e [Tan 79]), supondo sempre que  $\mathcal{H}_0$  é um nível regular. Em linhas gerais isto significa que, dado um ponto factível  $x^{(k)}$ , obtem-se  $x^{(k+1)}$  como um ponto (aproximadamente) sobre a trajetória de

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -gp(x) = -(\nabla f(x) + h'(x)^T \lambda_{LS}(x)) \\ x(0) = x^{(k)} \end{cases} \quad (1.31)$$

Observe que o campo de vetores  $gp(x)$  no lado direito de (1.31) é exatamente  $-\nabla f/\mathcal{H}_0(x)$ . Suas trajetórias serão, portanto, sempre factíveis e  $f$  estritamente decrescente ao longo de cada uma delas. Pode-se notar um certo esforço, por parte de alguns pesquisadores, na tentativa de aproveitar, não apenas os bons algoritmos disponíveis para a obtenção de soluções numéricas de equações diferenciais ordinárias, como também as boas propriedades teóricas desfrutadas “genericamente” pelas órbitas dos campos gradientes (vide PM 78)], para implementar algoritmos de minimização. No entanto tal linha ainda não conseguiu escapar de um círculo relativamente restrito, apesar de Brown e Biggs anunciarem de forma bastante provocativa, no abstract do artigo acima referido, que “Num conjunto de dezoito problemas-teste difíceis, observamos que vários dos métodos de EDO são mais bem sucedidos que qualquer uma das técnicas PQS”.

## V2 - MÉTODOS DE PENALIZAÇÃO

A idéia que fundamenta os métodos de penalização para MRI consiste em resolver, a cada iteração, um subproblema de minimização irrestrita, e ir penalizando mais e mais, a cada iteração, o afastamento da factibilidade. A forma de fazê-lo é através de uma função contínua, que se anula em  $\mathcal{H}_0$ , e é positiva fora de  $\mathcal{H}_0$ . Usualmente, isto se define por uma função contínua  $P : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ , tal que,

$$P(0) = 0 \quad (1.32)$$

$$P(y) > 0, \text{ se } y \neq 0 \quad (1.33)$$

e um parâmetro de penalização  $\rho \geq 0$ . O problema penalizado, associado a MRI, consiste em

$$\text{Minimizar } \phi(x) = f(x) + \rho P(h(x)) \tag{1.34}$$

O método de penalização correspondente satisfaria:

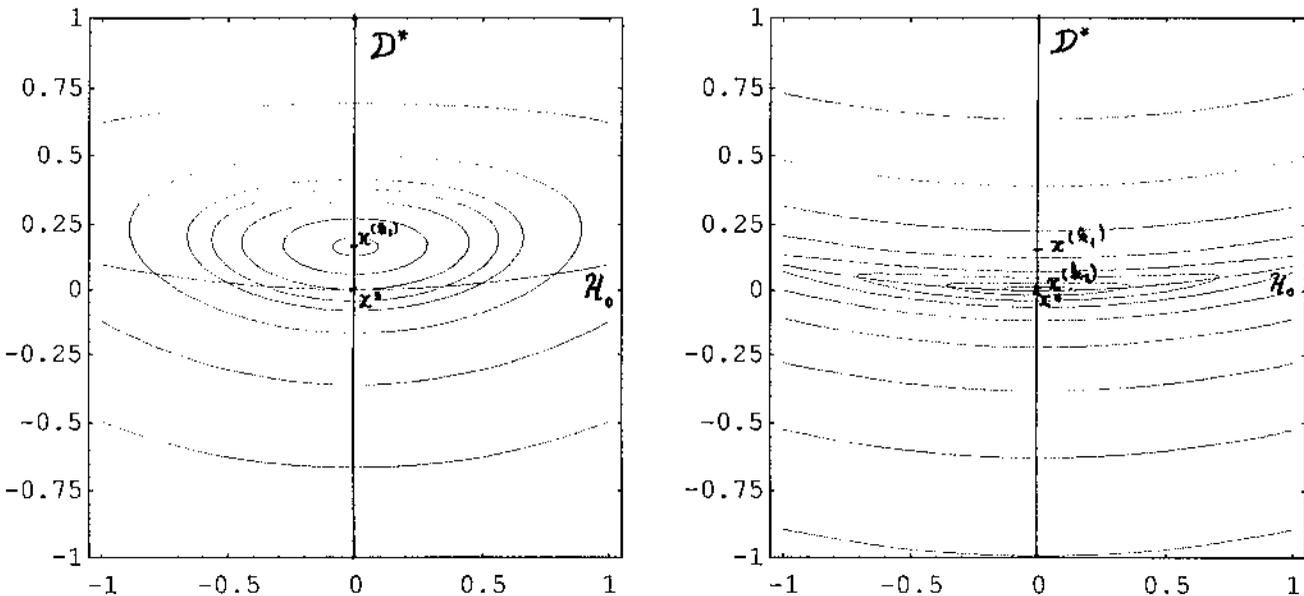
PEN

Dados  $\rho^{(1)} \geq 0$ ,  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  e  $k = 1$ :

P1 – Ache uma solução  $x^{(k)}$  de (1.34), com  $\rho = \rho^{(k)}$ .

P2 – Escolha  $\rho^{(k+1)} > \rho^{(k)}$ , faça  $k \leftarrow k + 1$  e retorne para P1.

Em [Fle 87, §12.1], Flecher situa os métodos de penalização como os primeiros métodos a surgir para minimizar funções não lineares, com restrições não lineares. Em particular, atribue a Courant, em [Cou 43], a aplicação de um tal método a MRI com  $P(y) = \|y\|^2$ . É frequente encontrar  $P(y) = y^T A y$  com  $A$  positivo-definida, em geral diagonal. Nestes casos temos métodos de penalização com  $P$  diferenciável. A restrição maior a tais métodos é de conduzirem a problemas de minimização irrestrita muito mal condicionados, à medida que para obter convergência precisamos fazer  $\rho^{(k)} \rightarrow \infty$ . Isto fica visível na figura abaixo, onde esboçamos o que acontece em duas iterações de PEN, aplicado a minimizar  $f(x, y) = x^2 + (y - 1)^2$  sujeito a  $h(x, y) = y - x^2/10$ . Correspondem a  $\rho^{(k_1)} = 5$  e  $\rho^{(k_2)} = 200$ .



Curvas de nível de  $\phi(x) = x^2 + (y - 1)^2 + \rho(y - x^2/10)$  com  $\rho^{(k_1)} = 5$  e  $\rho^{(k_2)} = 200$

A penalização com funções não diferenciáveis, como  $P(y) = \|y\|_2$ ,  $P(y) = \|y\|_1$ , ou ainda  $P(y) = \|y\|_\infty$ , tem despertado relativo interesse nos últimos 20 anos. Tal interesse decorre de ser possível garantir, para uma tal  $P$ , a existência de uma cota superior para  $\rho$ , tal que a partir dela, soluções de MRI são igualmente soluções de (1.34). Isto significa que, nestes casos, não é necessário “estourar” o parâmetro de penalização para resolver MRI com PEN. Tais métodos levam a denominação de métodos de penalização exata. Em contrapartida, os subproblemas de minimização irrestrita deixam de ser diferenciáveis. Contudo, o fato de  $P$  ser convexa e contínua, garante uma estrutura em cima da qual se pode trabalhar (vide [FLE 87], cap. 14).

Do nosso ponto de vista, a observação a ser destacada aqui, reside no fato que *as soluções*  $x^{(k)}$  *dos subproblemas de minimização irrestrita, obtidos em P1 de PEN, são pontos da variedade dual*  $\mathcal{D}_{\nabla L}$ . Isto pode ser visto, facilmente, caso P seja diferenciável, já que, neste caso,  $x^{(k)}$  será um ponto estacionário de  $\phi$ , ou seja:

$$0 = \nabla\phi(x) = \nabla f(x^{(k)}) + h'(x^{(k)})^T \lambda^{(k)}, \text{ onde} \quad (1.35)$$

$$\lambda^{(k)} = \rho^{(k)} \nabla P(h(x^{(k)})) \quad (1.36)$$

Se P for uma das tres normas  $\|\cdot\|_1$ ,  $\|\cdot\|_2$  ou  $\|\cdot\|_\infty$ , os resultados em [FLE 87 - cap XIV], essencialmente, garantem o mesmo.

Um dos métodos mais populares que usam penalização na função objetivo é, sem dúvida, o Lagrangeano aumentado, que também é conhecido como o método dos multiplicadores. Foi sugerido pela primeira vez, independentemente, por Hestenes em [Hes 69] e por Powell em [Pow 69]. Conta com implementações bem sucedidas, entre as quais se destaca LANCELOT (vide [CGT 91] e [CGT 92]), para problemas de grande porte. As bibliotecas OPTIMA e OPTPACK também contêm programas baseados em Lagrangeano aumentado.

Basicamente, corresponde a penalizar o lagrangeano  $L(x, \lambda)$  na forma:

$$\phi(x, \lambda, \rho) = L(x, \lambda) + \rho \|h(x)\|^2 \quad (1.37)$$

O fato notável aí é que se  $x^*$  é um bom minimizador de MRI, e adivinhamos o multiplicador  $\lambda^*$  em  $x^*$ , então existe um  $\bar{\rho} \geq 0$  tal que  $\bar{\phi}(x) = \phi(x, \lambda^*, \rho)$  tem um minimizador local em  $x^*$ , para cada  $\rho \geq \bar{\rho}$  (vide [FLE 87] e [MS 95]). Ou seja, podemos esperar não ter que "estourar" o parâmetro de penalização, se soubermos formas de bem aproximar  $\lambda^*$ .

É imediato verificar que os minimizadores de  $\bar{\phi}(x)$  também estão na variedade dual  $\mathcal{D}_{\nabla L}$ . O segundo resultado básico aí, que dá a chave de como atualizar o multiplicador  $\lambda^{(k)}$ , corresponde a considerar a restrição de  $\bar{\phi}$  à  $\mathcal{D}_{\nabla L}$ , e verificar que para  $\rho$  suficientemente grande, porém limitado, todo bom minimizador  $x^*$  é um ponto de máximo para  $\bar{\phi}/\mathcal{D}_{\nabla L}$ . Pelo menos perto de um tal  $x^*$ ,  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  admite uma parametrização natural em função de  $\lambda$ , digamos  $x(\lambda)$ , garantida pelo teorema das funções implícitas, e portanto  $\bar{\phi}/\mathcal{D}_{\nabla L}$  também pode se escrever em função de  $\lambda$ . Daí a chave para tentar melhorar, pelo menos perto de  $x^*$ , as aproximações do maximizador  $\lambda^*$  de  $\phi(x(\lambda), \lambda, \rho)$  a cada iteração, pensando em  $\rho$  fixo e suficientemente grande (vide [FLE 87] - §12.2).

Como nos demais métodos de Penalização, o primeiro passo de cada iteração típica do Lagrangeano aumentado, consiste em calcular um minimizador para

$$\bar{\phi}^{(k)}(x) = \phi(x, \lambda^{(k)}, \rho^{(k)})$$

A iteração se conclue com a atualização, não só de  $\rho^{(k)}$ , mas também de  $\lambda^{(k)}$ . A arte de bem fazê-lo consiste em saber combinar, adequadamente, as informações disponíveis, com o objetivo de obter aproximações cada vez melhores do multiplicador  $\lambda^*$  na solução, bem como fazer  $\rho$  crescer o necessário, porém "sem excessos".

O que nos interessa ressaltar aqui é o fato que no Lagrangeano aumentado, não apenas os iterados caminham sobre a variedade dual, mas a própria construção do algoritmo, bem como a taxa de convergência a ser obtida, repousam sobre como trabalhar o *comportamento dual de  $\phi$  ao longo de  $\mathcal{D}_{\nabla L}$* . Saber explorar esta dualidade, me parece ser a característica que faz com que o Lagrangeano aumentado seja, ao que tudo indica, o mais “popular” dentre os métodos de Penalização.

Em resumo, para nós é grata a idéia de olhar para os métodos de Penalização como *Métodos de Pontos Duais*, ou seja, métodos cujos iterados caminham sobre a variedade dual  $\mathcal{D}_{\nabla L}$ . Na verdade, temos que tomar um certo cuidado aí. Diferentemente do que acontece com os métodos de pontos factíveis para os quais, salvo engano, raras são as preocupações sistemáticas, como a de Mukai e Polak supra-citadas, com o relaxamento da factibilidade, neste caso faz parte da construção dos algoritmos obter os minimizadores dos subproblemas de forma apenas aproximada. Isto equivale a considerar que, *caminhar sobre a variedade dual não aparenta ter aqui a mesma importância que, em algoritmos de pontos factíveis como o GRG, parece ser devotada à exigência de manter os iterandos sobre o conjunto factível*.

### V3 - PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL - PQS

A terceira grande vertente dos métodos desenvolvidos para MRI é também a mais recente, (segundo [MS 95] o primeiro algoritmo PQS seria de 1963, proposto por Wilson em sua tese de doutorado [Wil 63], para problemas convexos). Começou a ficar em evidência na década de 70 e, a julgar pela literatura publicada de lá para cá, foi certamente a que mais esteve em evidência nos últimos 20 anos. Conta ainda com vários pacotes disponíveis, como NPSOL, NLPQL, OPSYC, OPTIMA, MATLAB e SQP, para ficarmos apenas com a lista citada em [MW 93]. Do ponto de vista local, essencialmente, corresponde a resolver (1.2) pelo método de Newton, incluindo aí suas variantes quasi-Newton, Newton inexato, etc...

O método de Newton, formulado para resolver localmente um sistema de  $n$  equações com  $n$  incógnitas, dado por  $F(x) = 0$ , onde  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  é de classe  $C^1$ , pode ser sintetizado por:

NEWT - Dado  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ , para cada  $k \geq 0$ , encontre o passo  $\delta^{(k)}$  resolvendo a correspondente equação para a aproximação de Taylor linear da  $F$ , ou seja:

$$F'(x^{(k)})\delta + F(x^{(k)}) = 0 \quad (1.38)$$

e faça  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta^{(k)}$ .

Dizemos que uma sequência  $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  tem convergência superlinear (quadrática) a  $x^*$ , caso, ou bem  $x^{(k)} = x^*$  para todo  $k$  suficientemente grande, ou então

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|} = 0 \quad \left( \limsup \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|^2} < \infty \right)$$

O resultado clássico, para NEWT, diz que se  $x^{(0)}$  estiver suficientemente perto de um  $x^*$  que resolve  $F(x) = 0$ , e for tal que  $F'(x^*)$  seja inversível, então as iterações de NEWT estarão bem definidas e  $x^{(k)}$  terá convergência superlinear a  $x^*$ . Se  $F'(x)$  é Lipschitz numa vizinhança de  $x^*$ , então a convergência é quadrática. É de se ressaltar que, se começamos longe de uma tal solução  $x^*$ , NEWT frequentemente fracassa, requerendo técnicas que permitam globalizá-lo, ou seja, formas de se começar longe de uma solução de modo a, no final, convergir com iterações de NEWT. Há varias maneiras de fazê-lo. Por questões de eficiência, há ainda

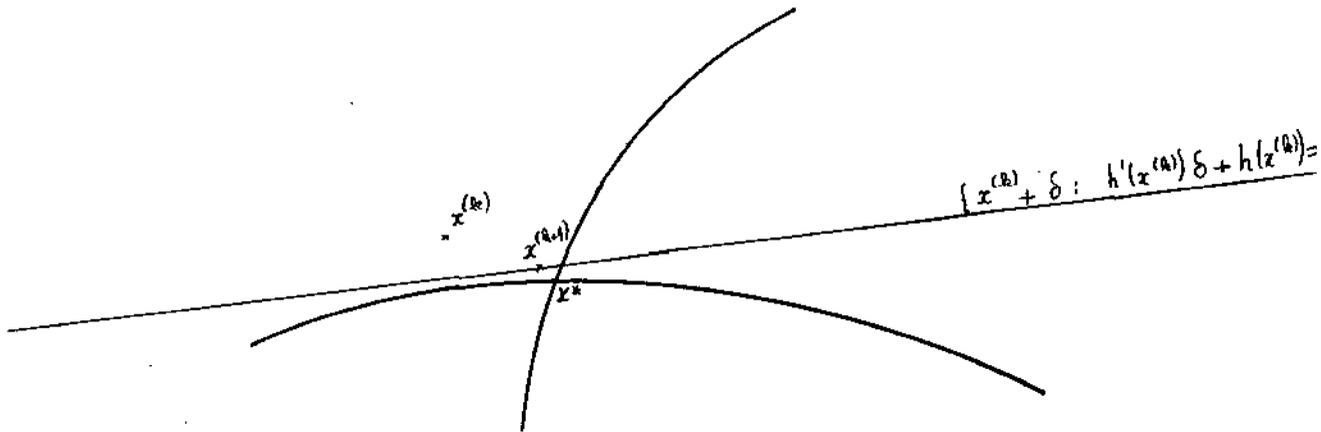
um grande elenco de variantes para flexibilizar a solução de (1.38), conduzindo a algoritmos denominados na literatura de *Quasi-Newton* e *Newton inexato* (vide [DS 83], [FLE 87] e [MS 95]). Tais algoritmos conservam boas propriedades de convergência local, e admitem um custo computacional, por iteração, bem inferior ao exigido para resolver (1.38).

Retomando o que dissemos acima, PQS essencialmente corresponde a aplicar o método de Newton para resolver (1.2). A arte de fazê-lo, aqui, consiste em bem utilizar as particularidades derivadas do fato que o sistema (1.2) tem uma estrutura muito especial herdada de MRI. Em particular, é fácil verificar que, numa vizinhança de um bom minimizador  $x^*$ , o método de Newton pode se reescrever como um método no qual cada passo resolve um subproblema quadrático. Considere para, cada  $k$ , o subproblema quadrático

$$\text{minimizar } q^{(k)}(\delta) \quad (1.39)$$

$$\text{s.a. } h'(x^{(k)})\delta + h(x^{(k)}) = 0, \quad (1.40)$$

onde  $q^{(k)}(\delta)$  é o polinômio de Taylor, de segunda ordem, de  $L(x^{(k)} + \delta, \lambda^{(k)})$ .



Passo PQS típico perto de um bom minimizador  $x^*$ .

O que se mostra aí (vide [Fle 87, §12.4]), é que, dados  $x^{(1)}$  suficientemente próximo de um bom minimizador  $x^*$  e  $\lambda^{(1)}$  suficientemente próximo de  $\lambda^*$ , aplicar o método de Newton a (1.2), começando em  $(x^{(1)}, \lambda^{(1)})$ , gera exatamente os mesmos iterados que:

### Programação Quadrática Sequencial (PQS) - Versão Local.

Para  $k = 1, 2, \dots$

P1 - Resolva (1.39-1.40) para obter  $\delta^{(k)}$  e defina  $\lambda^{(k+1)}$  como o multiplicador de Lagrange associado ao subproblema quadrático na sua solução.

P2 - Faça  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta^{(k)}$

Como a matriz jacobiana associada a (1.2), em  $x^*$ , é

$$\nabla^2 L(x^*, \lambda^*) = \begin{bmatrix} W^* & h'(x^*)^T \\ h'(x^*) & 0 \end{bmatrix} \quad (1.41)$$

fica fácil verificar que ela é inversível, se  $x^*$  é um bom minimizador de MRI. Neste caso, não só podemos garantir convergência local superlinear de PQS a  $(x^*, \lambda^*)$  em  $\mathbb{R}^{(m+n)}$ , decorrente de se estar aplicando o método de Newton a (1.2), com hessiano inversível, mas igualmente

na variável  $x$  isoladamente, muito embora nos pareça que ainda constitui um problema em aberto, saber se a convergência a um bom minimizador na variável  $x$  é quadrática, mesmo que  $f$  e  $h$  sejam  $C^\infty$ .

Do mesmo jeito que NEWT só funciona de forma adequada localmente, também o algoritmo acima apresentado como uma versão local de PQS carece de um processo de globalização. Neste processo de globalização, igualmente, forma-se em cada iterado  $x^{(k)}$  um subproblema quadrático, cuja função objetivo, de alguma maneira, aproxime o Lagrangeano em  $x^{(k)}$ , com restrições lineares relacionadas à aproximação de Taylor de 1ª ordem de  $h(x^{(k)} + \cdot)$ , visando definir um passo candidato  $\delta^+$ . <sup>†</sup>  $\delta^+$  depois é testado por uma função de mérito adequada, que usualmente é a própria  $f$ , ou algum lagrangeano, *augmentado* por um termo de penalização. Caso a descida proporcionada por  $x^{(k)} + \delta^+$  à função de mérito seja considerada suficiente, faz-se  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta^+$ , atualiza-se o modelo quadrático, e a iteração se completa com um teste para verificar se as condições de KT foram adequadamente atingidas.

Entre as diferentes formas de fazer a globalização de PQS, há inúmeras variantes na literatura, em função de diferentes funções de mérito empregadas, bem como da forma de se definir o que fazer, uma vez rejeitado um passo candidato. Igualmente ao que acontecia com o método de Newton, há ainda diversos métodos tipo Quasi-Newton e/ou Newton-inexato em formato PQS. De sorte que é bem considerável a quantidade de artigos sobre métodos tipo PQS, disponível nas melhores publicações da área nestes últimos vinte anos .

Num certo sentido PQS parece ter o apelo heurístico de um método cujos iterandos não precisam caminhar excessivamente próximos ao conjunto factível  $\mathcal{H}_0$ , nem tampouco colados à variedade dual  $\Sigma_{\nabla L}$ , admitindo assim a possibilidade de escolher, mais livremente, caminhos alternativos que conduzam à solução em  $\mathcal{H}_0 \cap \Sigma_{\nabla L}$ . A principal vantagem, pretendida pelos que apostam em métodos tipo PQS sobre os métodos de penalização, parece ser de não ter que administrar, com pouca “visibilidade”, parâmetros de penalização que podem tornar mal condicionados os subproblemas quadráticos. Já sobre os métodos de pontos factíveis, a vantagem pretendida é de não precisar dar passos excessivamente pequenos, longe da solução, por conta de um conjunto factível com muitas “oscilações”, ou ainda, “muito curvo”. Além disto, poder-se-ia argumentar em favor de PQS que, ao começar longe das restrições, um método de pontos factíveis pressupõe uma fase inicial objetivando a factibilidade, para só depois começar a pensar em dar passos genuinamente preocupados em melhorar também a “otimalidade” (leia-se aproximar-se de  $\Sigma_{\nabla L}$ ). Já um algoritmo PQS faz, em cada iteração, as duas coisas ao mesmo tempo, sem precisar se preocupar com a posição do ponto inicial. Em contrapartida, no capítulo 4, levantamos alguns questionamentos quanto à eficiência e robustez de métodos PQS, relativamente longe das restrições.

Vale ressaltar ainda que, embora esta classificação dos métodos nas tres vertentes acima descritas corresponda, esquematicamente, às principais tendências que se impuseram na elaboração de algoritmos para atacar MRI, alguns algoritmos não se encaixam exatamente no que foi colocado acima. O fato de todo bom minimizador de MRI ser um minimizador irrestrito de  $\phi(\cdot, \lambda^*, \rho)$ , para  $\rho$  suficientemente grande, permite abordagens mistas. Por exem-

<sup>†</sup>Observamos que longe do conjunto factível, nem sempre é possível garantir satisfação às restrições linearizadas (1.40) a não ser parcialmente.

plo, a que é testada por Miele e colaboradores em [MLC 72], na qual o critério de saída da fase de tentar resolver o subproblema irrestrito é o número de iterações, ou aquela empregada por Tapia em [Tap 77] e [Tap 88] que, entre outras coisas, faz uma única iteração quasi-Newton entre cada atualização do multiplicador. Ou ainda, a de Hager em [Hag 93], na qual a penalização do Lagrangeano é combinada com outros ingredientes. Nestes casos, nos parece ficar descaracterizada a propriedade, acima apontada nos métodos de penalização “puros”, de ter seus iterados acompanhando de perto a variedade dual.

Possivelmente, grande parte do segredo de um bom programa para resolver MRI, tem mais a ver com detalhes computacionais do que com esquemas gerais como os que vamos tratar aqui. Mesmo assim, nos parece que ainda há um espaço importante para discutí-los. Acreditamos continuar verdadeira, 10 anos depois, a afirmação que Fletcher faz no seu livro ([Fle 87, §12.1]), sobre diferentes abordagens para resolver problemas de otimização não linear, com restrições: “Indeed there is no general agreement on the best approach and much research is still been done.” Pelo menos aparentemente, PQS tem despontado como o mais popular dos métodos para a otimização não linear nestes últimos vinte anos. Ainda assim nos parece impossível estabelecer com nitidez que uma das tres vertentes seja mais ou menos recomendável que as demais, para algoritmos razoavelmente abrangentes. Pelo menos esta é a impressão que me ficou ao folhear a literatura da área. Ou seja, parece continuar sendo uma questão mais para futurólogos do que para matemáticos, a de saber, dentre as tres grandes vertentes apontadas acima, se alguma delas, de fato, tende a prevalecer ou a desaparecer a longo prazo. Se novas técnicas como, por exemplo, as baseadas em computação paralela, tenderão a reciclá-las, ou simplesmente torná-las obsoletas. Ou ainda, se a busca de maior eficiência, conduzirá a algoritmos cada vez mais dedicados a tipos específicos de problemas, a ponto de tornar cada vez menos importante algoritmos abrangentes para problemas de otimização.

## 1.2 ORGANIZAÇÃO DA TESE

Esta tese está organizada de forma que, no começo de cada capítulo se tenta descrever informalmente o que será feito naquele capítulo, o mesmo acontecendo no início de cada seção e subseção. Neste momento, apenas delinearemos, em rápidas pinceladas, as principais questões a serem abordadas e como se organiza sua exposição ao longo dos demais capítulos da tese.

Nosso objetivo principal neste trabalho, consiste na *formulação de um algoritmo, que nas suas características mais gerais, tem claras afinidades com os métodos de pontos factíveis com redução tangente*, mas cuja preocupação central acompanha as colocadas por Miele-Levy-Cragg em [MLC 71] e Mukai-Polak em [MP 78], com relação a *flexibilizar a exigência de factibilidade dos iterados gerados*. Igualmente a Mukai e Polak, não nos referimos aqui apenas a uma flexibilização dentro de tolerâncias usuais, quando se trabalha em problemas práticos. Ainda assim, nossa abordagem tem características próprias, bastante diversas da por eles apresentada. Em particular, nosso enfoque é mais específico, e corresponde a definir um modo *de reajustar o afastamento da factibilidade admissível a cada iteração*, de uma forma que julgamos poder ser implementada eficientemente, e de modo a *casar mecanismos para garantir uma exploração adequada da “robustez” local* dos métodos usualmente empregados na fase de restauração dos algoritmos de pontos factíveis, com *medidas do afastamento da variedade dual* que poderíamos qualificar de *dinâmicas*. Sequer nos parece que o método a ser proposto possa se enquadrar no esquema geral descrito em [MP 78]. Por outro lado, a natureza da solução

que apresentamos é nitidamente diferente da que é testada para gradientes conjugados em [MLC 71], além de embutir uma clara determinação em sistematizar, de forma matematicamente consistente, o material a ser apresentado. O algoritmo será exposto em detalhes no capítulo 2 em duas versões: uma, que denominaremos de *exata*, pressupõe fatorações de algumas das matrizes envolvidas nos subproblemas lineares (pelo menos da matriz jacobiana das restrições). A outra, a ser denominada de *inexata*, generaliza a primeira versão, e tem por objetivo problemas de grande porte. Se caracteriza por admitir, que todos os subproblemas lineares e quadráticos envolvidos, possam ser resolvidos por métodos iterativos. Ainda no capítulo 2, demonstraremos propriedades de convergência global dos algoritmos propostos. Denotaremos o método a ser desenvolvido por CDR (Controle Dinâmico das Restrições).

No capítulo 3, estabelecemos uma teoria de convergência local para CDR, com forte apelo visual, no sentido de se apoiar fortemente sobre a estrutura de *vizinhança tubular* local da superfície dual  $\Sigma_{\nabla L}$ , com fibras  $\mathcal{H}_c$ , numa vizinhança suficientemente pequena de um bom minimizador. Nosso enfoque corresponde a ir definindo gradativamente condições sobre a implementação do método, e sob as quais se possa garantir propriedades cada vez mais finas de convergência local, para as sequências geradas pela sua aplicação a MRI.

No capítulo 4, apresentamos e analisamos alguns testes numéricos, realizados com uma implementação preliminar da versão exata de CDR, com resultados que nos encorajam a aperfeiçoar a implementação apresentada. Reiteramos que os resultados apresentados no capítulo 4 fazem parte de um trabalho que está sendo desenvolvido juntamente com o professor Francisco M. Gomes. Um segundo tema que gostaríamos de destacar no capítulo 4, corresponde a questionar a “folclórica” vantagem dos métodos tipo PQS sobre os de pontos factíveis. Neste ponto, estamos longe de poder apresentar resultados conclusivos. Muito pelo contrário, nossa preocupação aqui, é apenas em levantar questionamentos, de forma bastante incipiente, com base em testes numéricos e argumentos heurísticos, relativamente à robustez e eficiência de se caminhar longe das restrições com PQS. Incipiente, porém suficientemente sugestiva para valer a pena dar-lhe um destaque neste trabalho.

O capítulo 5 é dedicado a conclusões e possíveis desdobramentos deste trabalho. Embora venhamos a fazê-lo informalmente, nele daremos um certo destaque a como generalizar nossa abordagem para problemas de otimização diferenciável que incluam, também, restrições de desigualdades. Esboçaremos duas variantes de algoritmos para minimização com restrições de igualdade e canalização, que generalizam a abordagem CDR proposta para MRI, e sobre as quais acreditamos ser possível generalizar também os resultados teóricos, estabelecidos nos capítulos 2 e 3. No apêndice à tese, descrevemos detalhadamente um algoritmo concretizando uma das variantes apontadas no capítulo 5.

O resto deste capítulo inicial contém material introdutório de natureza mais formal, que julgamos importante sistematizar para facilitar a leitura do que se segue. Como se pode perceber, já na primeira seção fomos introduzindo notação, que pretendemos fazer vigorar para toda a tese, à medida que ela se fazia necessária. Continuaremos a fazê-lo desta forma, daqui para a frente. Ainda assim, consideramos que pode ser útil para o leitor poder dispor da seção §1.3, destinada a organizar, num mesmo espaço, a notação a ser usada ao longo da tese. A exceção fica por conta da notação “ $o(\cdot)$ ” e “ $O(\cdot)$ ”, cuja exposição é organizada, *exclusivamente*, na subseção §1.3.1. Na seção 1.4, sistematizaremos uma generalização do lema de Taylor de ordem 2, objetivando funções definidas no  $\mathbb{R}^n$  e submetidas à restrições de igualdade. A

seção §1.5 se destina a descrever um esquema auxiliar, a ser empregado nas formulações dos nossos algoritmos, visando definir passos de *Descida Suficiente* (DS) relativamente a modelos quadráticos.

### 1.3 NOTAÇÃO

Sejam  $n > m$ ,  $f : \mathbb{R}^n \leftarrow \mathbb{R}$  e  $h : \mathbb{R}^n \leftarrow \mathbb{R}^m$ , funções de classe  $C^2$ .

Denotamos por MRI, ao problema de minimização com restrições de igualdade

$$\text{Minimizar } f(x) \text{ s.a. } h(x) = 0.$$

Usaremos a seguinte notação:

$g(x) = \nabla f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  - Gradiente da  $f$ .

$h'(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$  - Derivada de  $h$ .

$\mathcal{N}(A) = \{x : Ax = 0\}$  - Núcleo de  $A$

$A^\dagger$  - Pseudo-inversa de Moore-Penrose de  $A$  (vide [GL 87]). No caso que nos interessa mais de perto, a matriz  $A$  é  $m \times n$ , tem posto máximo  $m$ , e  $A^\dagger$  se escreve como:

$$A^\dagger = A^T(AA^T)^{-1} \quad (1.42)$$

$P(x) = h'(x)^{\dagger T} h'(x)$  - Projecção ortogonal sobre  $\mathcal{N}(h'(x))$ .

$\Sigma_h = \{x : h'(x) \text{ não tem posto máximo}\}$  -  $\Sigma_h$  é o conjunto dos pontos singulares de  $h$ . Dizemos que  $x$  é um ponto regular de  $h$ , caso  $h'(x)$  tenha posto máximo.

$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T h(x)$  - Lagrangeano de  $f$  em  $(x, \lambda) \in \mathbb{R}^{n \times m}$

$\lambda_{\text{LS}}(x) = \operatorname{argmin} \{\|\lambda\| : \lambda = \operatorname{argmin}\{\|h'(x)^T \lambda + g(x)\| : \lambda \in \mathbb{R}^m\}\} = -(h'(x)^\dagger)^T g(x)$   
- Multiplicador de quadrados mínimos. Embora  $\lambda_{\text{LS}}(x)$  esteja definido em todo  $\mathbb{R}^n$ , estaremos essencialmente interessados em situações nas quais  $x$  é um ponto regular de  $h$ , ou seja, para as quais

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{LS}}(x) &= -h'(x)^{\dagger T} g(x) = \operatorname{argmin}\{\|h'(x)^T \lambda + g(x)\| : \lambda \in \mathbb{R}^m\} \\ &= -(h'(x)h'(x)^T)^{-1} h'(x)g(x) \end{aligned} \quad (1.43)$$

$gp(x) = P(x)g(x) = g(x) + h'(x)^T \lambda_{\text{LS}}(x)$  - Projecção ortogonal de  $g(x)$  sobre  $\mathcal{N}(h'(x))$ .

$n_g(x) = \frac{\|gp(x)\|}{\|g(x)\| + 1}$  - Funciona como uma medida relativa do tamanho do gradiente projetado.

$\mathcal{H}_c = \{x : h(x) = c\}$  - Denota uma superfície de nível  $c$  para  $h$ .

$\mathcal{D}_{\nabla L} = \{x : \nabla L(x, \lambda) = g(x) + h'(x)^T \lambda = 0, \text{ para algum } \lambda \in \mathbb{R}^m\}$ . – Denota o conjunto dual, às vezes abusivamente denominado de variedade dual.

### OBSERVAÇÃO 1.3.1 –

De (1.42) segue que  $h'(x)^\dagger$  é de classe  $C^1$  em  $\mathbb{R}^n - \Sigma_h$ . Portanto, igualmente  $P(x)$ ,  $\lambda_{LS}(x)$  e  $gp(x)$  são  $C^1$  em  $\mathbb{R}^n - \Sigma_h$ .

Dizemos que um ponto  $x^*$  é estacionário, ou de Kuhn-Tucker, para MRI, caso  $h(x^*) = 0$  e  $gp(x^*) = 0$ . Nestes casos fixaremos ainda, como notação:

$$\begin{aligned}\lambda^* &= \lambda_{LS}(x^*) \\ W^* &= \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) \\ P^* &= P(x^*)\end{aligned}$$

Dizemos que  $x^*$  é um bom minimizador para MRI, sempre que satisfizer às condições de segunda ordem para MRI em  $x^*$ . Em outras palavras, caso  $x^*$  seja um ponto regular de  $h$ , estacionário e a restrição de  $W^*$  ao espaço tangente às restrições  $P^* \mathbb{R}^n$  for positivo-definida.

Uma barra em cima de um conjunto significa o seu fecho :

$$\bar{A} = \left\{ x : x = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n \text{ e } x_n \in A \right\}$$

$C_\rho = \{x : \|h(x)\| \leq \rho\}$  recebe, abusivamente, a denominação de "cilindro de confiança de raio  $\rho^n$ ".

Denotamos por MRD, ao problema de minimização com restrições de igualdade e desigualdade

$$\text{Minimizar } \{f(x) \text{ s.a } h(x) = 0, \quad g(x) \geq 0\}.$$

e por MRIC ao caso particular de MRD no qual todas as restrições de desigualdade se escrevem como canalizações, ou seja,  $\ell \leq x \leq u$ , com  $-\infty \leq \ell_i < u_i \leq \infty$ .

$\Omega$  representará o conjunto factível com relação às restrições de desigualdade. Ou seja :

$$\Omega = \{x : g(x) \geq 0\}$$

Em particular  $\Omega = \{x : \ell \leq x \leq u\}$ , para MRIC.

$P_K$  – Se  $K \subset \mathbb{R}^n$  é fechado e convexo,  $P_K$  designará a projeção euclideana de  $\mathbb{R}^n$  em  $K$ . Ou seja, se  $v \in \mathbb{R}^n$ :

$$P_K(v) = \operatorname{argmin}\{\|v + x\|_2 : x \in K\}. \quad (1.44)$$

Às vezes, adotaremos ainda a notação  $v_K = P_K(v)$ . Note que, nesta notação  $P(x) = P_{\mathcal{N}(h'(x))}$ .

Se  $X$  for um espaço topológico, dizemos que  $Y \subset X$  é genérico em  $X$ , caso contenha uma interseção enumerável de subconjuntos abertos e densos de  $X$ . Uma propriedade em  $X$  é

dita genérica, caso o subconjunto dos pontos de  $X$ , que a satisfazem, for genérico. *O teorema de Baire diz que num espaço métrico completo todo conjunto genérico é também denso* (vide [Lima 70.B], [PM 78]). O conceito de propriedades genéricas não é essencial para o desenvolvimento deste trabalho. No entanto aqui e ali detectaremos propriedades genéricas em espaços de Baire compondo um pano de fundo interessante para argumentos de natureza heurística.

Dizemos que  $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^{n \times n}$  é um subconjunto de matrizes coercivamente positivo definidas, caso toda matriz em  $\mathcal{B}$  seja positivo definida e, para algum  $K > 0$ , possamos garantir  $\|Ax\| \geq K\|x\|$ , para todo  $A \in \mathcal{B}$  e todo  $x \in \mathbb{R}^n$ .

### 1.3.1 SOBRE O USO DE “O” E “o”

Entendemos que o uso das notações  $o(\cdot)$  e  $O(\cdot)$  pode simplificar muito a redação de um texto matemático que trate de análise no  $\mathbb{R}^n$ , mas que seu uso indevido pode conduzir a erros por vezes penosos de serem detectados. Neste sentido, gostaríamos de deixar bem explícitas, as condições nas quais usaremos tal notação:

i – PARA SEQUÊNCIAS : Considere sequências infinitas  $\{s^{(k)} \in \mathbb{R}^n : 1 \leq k < \infty\}$ ,  $\{t^{(k)} \in \mathbb{R}^n : 1 \leq k < \infty\}$  e  $\{w^{(k)} \in [0, \infty) : 1 \leq k < \infty\}$ .

i.1 – Dizemos que  $s^{(k)} = t^{(k)} + O(w^{(k)})$ , caso existam  $\xi > 0$  e  $k_\xi \in \mathbb{N}$ , tais que, para todo  $k > k_\xi$ ,

$$\|s^{(k)} - t^{(k)}\| \leq \xi w^{(k)} \quad (1.45)$$

i.2 – Dizemos que  $s^{(k)} = t^{(k)} + o(w^{(k)})$ , caso para todo  $\xi > 0$ , exista  $k_\xi \in \mathbb{N}$ , tal que, para todo  $k > k_\xi$

$$\|s^{(k)} - t^{(k)}\| \leq \xi w^{(k)} \quad (1.46)$$

ii – PARA FUNÇÕES EM  $\mathbb{R}^N$ : Sejam  $U \subset \mathbb{R}^N$ ,  $\psi : U \rightarrow \mathbb{R}$  uma função não negativa, e considere ainda funções  $\psi_1 : U \rightarrow \mathbb{R}^p$  e  $\psi_2 : U \rightarrow \mathbb{R}^p$ .

ii.1 – Dizemos que  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi)$  em  $U$ , relativamente ao nível 0 de  $\psi$ , se houver  $\xi > 0$  e  $\delta_\xi > 0$ , tais que, se  $\psi(x) < \delta_\xi$  e  $x \in U$ , então

$$\|\psi_1(x) - \psi_2(x)\| \leq \xi \psi(x) \quad (1.47)$$

ii.2 – Dizemos que  $\psi_1 = \psi_2 + o(\psi)$  em  $U$ , relativamente ao nível 0 de  $\psi$ , se para todo  $\xi > 0$ , existir  $\delta_\xi > 0$ , tal que, se  $\psi(x) < \delta_\xi$  e  $x \in U$ , então

$$\|\psi_1(x) - \psi_2(x)\| \leq \xi \psi(x) \quad (1.48)$$

Como sempre estaremos interessados em trabalhar com  $o(\cdot)$  e  $O(\cdot)$  em  $U$ , relativamente ao nível 0 de  $\psi$ , assumiremos daqui para a frente que sempre será este o contexto, e omitiremos a referência a “relativamente ao nível 0 de  $\psi$ ”.  $U$ , na prática, sempre corresponderá a um domínio em algum  $\mathbb{R}^N$ , delimitado por algumas restrições, no qual nos interesse garantir desigualdades como as expressas em (1.47-1.48).

**OBSERVAÇÃO 1.3.2** Propriedades de O e o

Enunciamos, a seguir, algumas propriedades de muito fácil demonstração, mas que tornam o e O uma notação com grande poder de síntese.

P1 – Se  $s^k = t^k + O(w^k)$  e  $t^k = \tilde{t}^k + O(\tilde{w}^k)$  então  $s^k = \tilde{t}^k + O(w^k + \tilde{w}^k)$ . Se além disto,  $w^k = O(\tilde{w}^k)$  então  $s^k = \tilde{t}^k + O(\tilde{w}^k)$ . Em particular  $s^k = O(\|t^k\|)$  define uma relação de ordem parcial entre sequências no  $\mathbb{R}^n$  e, para cada sequência de números reais positivos  $\{w^{(k)}\}$ , i.1 define uma relação de equivalência entre sequências no  $\mathbb{R}^n$ . O mesmo continua válido, se substituímos O por o.

P2 – Se  $s^k = t^k + O(w^k)$  e  $t^k = \tilde{t}^k + o(\tilde{w}^k)$  então existe  $\eta > 0$ , tal que, para todo  $\xi > 0$ , se pode encontrar  $k_\xi$  tal que se  $k > k_\xi$ , então

$$\|s^{(k)} - \tilde{t}^{(k)}\| \leq \eta w^{(k)} + \xi \tilde{w}^{(k)} \quad (1.49)$$

Se, além disto,  $w^{(k)} = o(\tilde{w}^{(k)})$ , obtemos  $s^k = \tilde{t}^k + o(\tilde{w}^k)$ . Algo análogo continua valendo se trocamos o por O e O por o nas relações consideradas em P2.

P3 – Algo inteiramente análogo a P1 e P2 vale para funções. Ou seja, se  $\psi$  e  $\tilde{\psi}$  são funções não negativas no mesmo domínio U,  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi)$  em U e  $\psi_2 = \tilde{\psi}_2 + O(\tilde{\psi})$  em U, então  $\psi_1 = \tilde{\psi}_2 + O(\psi + \tilde{\psi})$  em U. Em particular,  $\psi = O(\|\tilde{\psi}\|)$  em U, define uma relação de ordem para funções em U e, para cada  $\psi : U \rightarrow [0, \infty)$ , ii.1 define uma relação de equivalência entre funções com domínio em U. O mesmo permanece válido se substituímos O por o.

P4 – Se  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi)$  em U e  $\psi_2 = \tilde{\psi}_2 + o(\tilde{\psi})$  em U, então existem  $\eta > 0$ ,  $\delta_\eta > 0$ , tais que para todo  $\xi > 0$  se pode encontrar  $\delta_\xi > 0$  de tal modo que, se  $\psi(x) < \delta_\eta$ ,  $\tilde{\psi}(x) < \delta_\xi$  e  $x \in U$  então

$$\|\psi_1(x) - \psi_2(x)\| \leq \eta \psi(x) + \xi \tilde{\psi}(x) \quad (1.50)$$

**OBSERVAÇÃO 1.3.3**  $O(\cdot) + o(\cdot)$ 

P1 – P4 nos permitem definir operações de soma com o e O, tanto para sequências, como para funções, de maneira natural. Ou seja, podemos pensar  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi) + O(\tilde{\psi})$  em U, como sendo  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi + \tilde{\psi})$  em U. O mesmo vale, se substituímos O por o. Para definir  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi) + o(\tilde{\psi})$  em U, recorreremos à propriedade estabelecida em P4, dizendo que neste caso existem  $\eta > 0$ ,  $\delta_\eta > 0$  tais que, para todo  $\xi > 0$ , se pode encontrar  $\delta_\xi$  tal que, se  $x \in U$   $\psi(x) < \delta_\eta$  e  $\tilde{\psi}(x) < \delta_\xi$ , então (1.50) fica garantida.

iii – ORDEM DE GRANDEZA : Dizemos que duas sequências no  $\mathbb{R}^n$ ,  $\{s^k\}$  e  $\{t^k\}$  têm a mesma ordem de grandeza, em norma, caso  $s^k = O(\|t^k\|)$  e  $t^k = O(\|s^k\|)$ . Denotamos tal fato por  $\|s^k\| \approx \|t^k\|$ . No caso de sequências de números reais positivos, dizemos simplesmente que têm a mesma ordem de grandeza.

Do mesmo jeito podemos dizer que duas funções reais, não negativas,  $\psi$  e  $\tilde{\psi}$ , definidas em  $U \subset \mathbb{R}^N$ , têm a mesma ordem de grandeza (relativamente ao nível 0), caso  $\psi = O(\tilde{\psi})$  e  $\tilde{\psi} = O(\psi)$ .

iv – DESIGUALDADES: Se  $n = 1$ , podemos, da mesma forma, usar as notações  $o$  e  $O$ , para desigualdades envolvendo seqüências de números reais. Uma maneira de fazê-lo é dizer que  $s^{(k)} \leq t^{(k)} + O(w^{(k)})$ , caso  $\max\{0, s^{(k)} - t^{(k)}\} = O(w^{(k)})$ . No caso de funções, se  $p = 1$ , dizemos que  $\psi_1 \leq \psi_2 + O(\psi)$  em  $U$ , caso  $\max\{0, \psi_1 - \psi_2\} = O(\psi)$  em  $U$ . Algo inteiramente análogo funciona para  $o$ .

### OBSERVAÇÃO 1.3.4 ABUSOS DE REDAÇÃO

P1-P4 nos autorizam a cometer alguns abusos de redação como, por exemplo, escrever  $s^{(k)} = O(t^{(k)}) = O(w^{(k)})$ , com o significado preciso de indicar que  $s^{(k)} = O(w^{(k)})$ , dado que,  $s^{(k)} = O(t^{(k)})$  e  $t^{(k)} = O(w^{(k)})$ . Ou ainda que  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi) = \psi_3 + o(\theta)$ , para indicar  $\psi_1 = \psi_3 + o(\theta)$ , se soubermos que  $\psi_1 = \psi_2 + O(\psi)$ ,  $\psi_2 = \psi_3 + o(\theta)$  e  $\psi = o(\theta)$ . A lista de abusos possíveis, a partir de P1-P4, é bastante óbvia. Eles serão cometidos, na medida que facilitarem a exposição. Algo equivalente a P1-P4 funciona também para desigualdades, no sentido apontado em iv, igualmente contribuindo para simplificar a redação.

Na manipulação com  $o$  e  $O$  para funções, frequentemente os domínios das variáveis podem estar mudando, com o acréscimo e decréscimo de variáveis. Usualmente, as variáveis cujas restrições são relevantes em (1.47–1.48), correspondem às de  $\psi$ , bem como às relativas ao domínio de  $f$  e  $h$  em  $\mathbb{R}^n$ . As demais usualmente delas decorrem, ficando claro, em cada passagem, de qual domínio  $U$  se trata, sem necessidade de ficar explicitando-o a cada momento. Na próxima seção escreveremos o lema de Taylor para MRI nesta notação, com detalhes usualmente dispensáveis, de forma a esclarecer melhor este ponto.

## 1.4 LEMA DE TAYLOR PARA MRI

O nosso objetivo nesta seção, é expor uma generalização do lema de Taylor para aproximações quadráticas de funções reais, definidas no  $\mathbb{R}^n$ , de classe  $C^2$ . Tal resultado nos será muito útil ao nos permitir trabalhar, adequadamente, com um conceito que frequentemente aparece na literatura, (vide [Fle 87]), qual seja o de *correção de segunda ordem*, para passos candidatos definidos na direção tangente às restrições.

Na seção §1.1, indicamos uma maneira de pensar a aplicação Exponencial, para justificar uma questão que faz parte do folclore da otimização com restrições de igualdade, qual seja, a idéia que, localmente, “o comportamento do lagrangeano no espaço tangente às restrições, reflete o comportamento da  $f$  ao longo das restrições”. A versão do lema de Taylor a ser apresentada, permite olhar para a mesma *questão folclórica*, de um outro ponto de vista.

Dados  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ , de classe  $C^2$ , considere  $q_x(\cdot)$  como o polinômio de Taylor de segunda ordem de  $L(x + \cdot, \lambda_{LS}(x))$ , para cada  $x \in \mathbb{R}^n$ , bem como um compacto  $V \subset \mathbb{R}^n$  no qual  $h$  seja regular. Na notação estabelecida na seção 1.3.1, o teorema de Taylor de ordem 2 para  $L(x + \cdot, \lambda_{LS}(x))$  em  $V$ , se escreve:

$$L(x + \delta, \lambda_{LS}(x)) = q_x(\delta) + o(\|\delta\|^2), \text{ em } U = V \times \mathbb{R}^m \quad (1.51)$$

Ao restringirmos  $\delta$  a acréscimos  $\delta_t$ , na direção tangente às restrições, obtemos

$$\|h(x + \delta_t) - h(x)\| = O(\|\delta_t\|^2), \text{ em} \quad (1.52)$$

$$U = \{(x, \delta_t) : x \in V \text{ e } h'(x)\delta = 0\} \quad (1.53)$$

Fixemos, ao longo desta subseção,  $V \subset \mathbb{R}^n$  como um compacto formado por pontos regulares de  $h$ . Considere  $U \subset \mathbb{R}^{2n}$  como em (1.53).

Uma forma de nos aproximarmos mais da superfície de nível  $\mathcal{H}_{h(x)}$  a partir de  $x + \delta_t$ , é fazendo uma correção  $\delta_{soc} \in \mathcal{R}(h'(x)^T)$ , tal que  $h'(x)\delta_{soc} + [(h(x + \delta_t) - h(x))] = 0$ , ou seja,

$$\delta_{soc} = \delta_{soc}(x, \delta_t) = -h'(x)^\dagger [(h(x + \delta_t) - h(x))] \quad (1.54)$$

Com isto, obtemos um ponto  $x_+ = x + \delta_t + \delta_{soc}$ . O lema, que demonstraremos a seguir, nos dirá que:

- i - Até segunda ordem em  $\|\delta_t\|$ ,  $x_+$  pode ser pensado como uma restauração de  $x + \delta_t$ , à mesma superfície de nível de  $h$  na qual está  $x$ , no sentido que:

$$\|h(x_+) - h(x)\| = o(\|\delta_t\|^2), \text{ em } U \quad (1.55)$$

- ii- Até segunda ordem em  $\|\delta_t\|$ , a variação da  $f$  entre  $x$  e  $x_+$ , se confunde com a variação de  $q_x$  em  $\mathcal{N}(A)$ , no sentido que

$$f(x_+) - f(x) = q_x(\delta_t) + o(\|\delta_t\|^2), \text{ em } U \quad (1.56)$$

A comparação entre (1.51–1.52) e (1.55–1.56), nos parece fornecer uma tradução formalmente adequada da idéia colocada acima, ou seja, “o comportamento do lagrangeano  $L(x + \cdot, \lambda_{LS}(x))$  no espaço tangente, reflete o comportamento da  $f$  ao longo das restrições”.

Como estamos interessados em situações nas quais temos, apenas, aproximações do hessiano do lagrangeano, no enunciado do lema a seguir incluiremos em (1.56) um termo a mais, de segunda ordem em  $\|\delta_t\|$ , e que reflete a adequação da aproximação usada ao hessiano verdadeiro.

#### LEMA 1.4.1 ( LEMA DE TAYLOR DE SEGUNDA ORDEM PARA MRI )

Sejam  $f$  e  $h$  de classe  $C^2$  e  $V \subset \mathbb{R}^n$ , um compacto no qual  $h$  seja regular.

Para cada  $x \in V$ , considere uma matriz simétrica  $B$ , que aproxime  $W_{LS}(x) = \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda_{LS}(x))$ , bem como o modelo quadrático

$$q_x(\delta) = g(x)^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta \quad (1.57)$$

Consideremos ainda, para  $x \in V$  e  $\delta_t \in \mathcal{N}(h'(x))$ ,  $\delta_{soc} = \delta_{soc}(x, \delta_t) \in \mathcal{R}(h'(x)^T)$ , tal que

$$\Delta h = h(x + \delta_t) - h(x) \quad (1.58)$$

$$\delta_{soc} = -h'(x)^\dagger \Delta h, \quad (1.59)$$

e seja  $x_+ = x + \delta_t + \delta_{soc}$ . Então, em

$$U = \{(x, \delta_t, B) : x \in V, h'(x)\delta_t = 0, B \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ e simétrica}\}, \quad (1.60)$$

obtemos:

$$\delta_{soc} = O(\|\delta_t\|^2) \quad (1.61)$$

$$f(x_+) - f(x) = q_x(\delta_t) + \frac{1}{2} \delta_t^T (W_{LS}(x) - B) \delta_t + o(\|\delta_t\|^2) \quad (1.62)$$

$$h(x_+) - h(x) = o(\|\delta_t\|^2) \quad (1.63)$$

**DEMONSTRAÇÃO :**

Sejam então  $V$ ,  $U$ ,  $x$ ,  $x_+$ ,  $\delta_t$  e  $\delta_{soc}$  como no enunciado do lema. Veja que, ao supor  $h$  regular no compacto  $V$ , (1.61) segue facilmente de (1.58–1.60).

(1.43) e (1.58 – 1.59) nos garantem:

$$\begin{aligned} g(x)^T \delta_{soc} &= g(x)^T (-h'(x)^\dagger \Delta h) = -[(h'(x)^\dagger)^T g(x)]^T \Delta h \\ &= \lambda_{LS}(x)^T \Delta h \end{aligned} \quad (1.64)$$

Do desenvolvimento de Taylor para  $h$  e de (1.64), obtemos em  $U$ :

$$g(x)^T \delta_{soc} = \frac{1}{2} \delta^T \left( \sum_{i=1}^m (\lambda_{LS}(x))_i \nabla^2 h_i(x) \right) \delta_t + o(\|\delta_t\|^2) \quad (1.65)$$

Supondo  $f$  e  $h$  de classe  $C^2$ , ao considerar a observação 1.3.2, (1.61), (1.65) e o desenvolvimento de Taylor de segunda ordem para  $f$ , obtemos em  $U$ :

$$\begin{aligned} f(x_+) - f(x) &= g(x)^T \delta_t + g(x)^T \delta_{soc} + \frac{1}{2} (\delta_t + \delta_{soc})^T \nabla^2 f(x) (\delta_t + \delta_{soc}) + o(\|\delta_t + \delta_{soc}\|^2) \\ &= g(x)^T \delta_t + \frac{1}{2} \delta_t^T \left( \sum_{i=1}^m (\lambda_{LS}(x))_i \nabla^2 h_i(x) \right) \delta_t + \frac{1}{2} \delta_t^T \nabla^2 f(x) \delta_t + o(\|\delta_t\|^2) \end{aligned} \quad (1.66)$$

(1.62) resulta de (1.57) e (1.66).

(1.63) segue da observação 1.3.2, (1.59), (1.61) e do desenvolvimento de Taylor de  $h$ , uma vez que em  $U$ :

$$\begin{aligned} h(x_+) - h(x) &= h'(x) (\delta_t + \delta_{soc}) + \frac{1}{2} \delta_t^T \nabla^2 h(x) \delta_t + O(\|\delta_{soc}\| \|\delta_t\| + \|\delta_{soc}\|^2) + o(\|\delta_t + \delta_{soc}\|^2) \\ &= h'(x) \delta_{soc} + \Delta h + o(\|\delta_t\|^2) = o(\|\delta_t\|^2) \end{aligned}$$

**OBSERVAÇÃO 1.4.1 – CORREÇÕES DE SEGUNDA ORDEM**

Nossos algoritmos para MRI escolherão passos na direção tangente às restrições, para diminuir  $f$  num ponto  $x_c$ , baseados num modelo quadrático que aproxima o polinômio de Taylor de segunda ordem do lagrangeano no ponto em questão. Mesmo que não façamos nenhuma correção adicional ao passo  $\delta_t$ , (1.52) nos diz que se  $\delta_t$  não for muito grande, nos afastamos relativamente pouco da superfície de nível de  $h$  em  $x_c$ . O lema de Taylor para MRI diz que, ao fazer uma correção  $\delta_{soc}$ , tendemos a andar “mais próximo” ainda do nível no qual  $x_c$  está, e com um ponto candidato  $x_+ = x_c + \delta_t + \delta_{soc}$ , no qual, a descida da  $f$  tende a refletir melhor do que em qualquer outro, a descida do modelo quadrático no espaço tangente às restrições, pelo menos no caso  $W = B$ . Uma das opções para compor a avaliação de mérito dos passos candidatos, será a própria  $f$ . Neste caso, torna-se tentadora a opção de adicionar ao passo  $\delta_t$ , uma “Correção de Segunda Ordem” (no sentido de (1.61),  $\delta_{soc}$ , para formar um candidato a ser testado. Principalmente, ao levarmos em conta que, o custo do passo  $\delta_{soc}$  é muito inferior ao custo das fatorações de  $A = h'(x)$ , ou de  $AA^T$ , usualmente realizadas para se encontrar um passo  $\delta_t \in \mathcal{N}(A)$ , de “descida suficiente” para o modelo quadrático. Na formulação exata do algoritmo, o lema compõe um pano de fundo importante na sua concepção, mas não chega a ser usado na construção formal explicitamente. No caso da formulação “*inexata*” do algoritmo na seção 2.5, a adaptação que lá faremos deste lema para o caso “*inexato*”, terá um papel decisivo também na sua formalização, conforme ficará claro na ocasião. Igualmente decisivo será seu papel na análise local da convergência.

## 1.5 DESCIDA SUFICIENTE (DS)

A maneira mais usual de se obter resultados de convergência global, em algoritmos para minimização de funções diferenciáveis, com ou sem restrições, geralmente pressupõe que a sequência gerada pelo algoritmo permaneça numa parte compacta do domínio. Corresponde a forçar algum tipo de *descida suficiente* em cada iteração, de forma a obrigar que alguma função de mérito para o problema convirja para  $-\infty$ , a menos que condições de Kuhn-Tucker se satisfaçam, no limite, para alguma subsequência gerada. Um exemplo clássico, de formulação bastante abrangente, para minimização sem restrições usando regiões de confiança é o de Powell em [Pow 75], no qual cada passo garante, para o modelo quadrático adotado na região de confiança corrente, uma descida maior do que uma *fração de sua descida de Cauchy*. Obrigando que o passo a ser dado igualmente faça a função objetivo descer alguma *fração da descida de Cauchy*, sob condições usuais de compacidade e regularidade, Powell consegue garantir pontos de acumulação estacionários para as sequências geradas por seu algoritmo.

Nossa ferramenta básica para obter propriedades de convergência global, igualmente se baseará em testar passos, para os quais se garanta uma descida maior que uma *fração da descida de Cauchy*, para um dado modelo quadrático em sua região de confiança corrente. O algoritmo auxiliar DS, abaixo, tem por finalidade descrever tais passos .

Será usado para definir pontos candidatos, a serem testados nos algoritmos que geraram os respectivos modelos. Em geral, o que se testará, uma vez definido um passo em DS, inclui verificar se a função a ser diminuída desceu com o passo candidato uma fração significativa da "Descida de Cauchy" obtida em DS.

Daremos a DS uma formulação bastante abrangente, aplicável a tratar de forma "ine-xata" subproblemas que surgem em MRD, MRI ou mesmo em minimização sem restrições. No caso MRD, DS escolhe um passo que deve permanecer em  $\Omega = \{x : r_i(x) \geq 0\}$ , um *Conjunto de Trabalho*  $\mathcal{W}$  de restrições  $\rho$ -ativas no passo  $x + \delta$  a ser obtido, no sentido que  $r_i(x + \delta) \leq \rho$ , para todo  $i \in \mathcal{W}$ . São fornecidos a  $DS = DS(x, q, v, \Delta, A, \eta, \Omega, \rho)$ :

$$x \in \mathbb{R}^n$$

$$q(\delta) = g^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta$$

$$v \text{ tal que } \|Av\| \leq \eta \|A\| \|v\|$$

$$\Delta$$

$$A$$

$$\eta \geq 0$$

$$\Omega \in \mathbb{R}^n$$

$$\rho$$

– Corresponde a uma aproximação quadrática da função objetivo, ou de seu lagrangeano em  $x$ .

– Corresponde à uma aproximação da direção de Cauchy em  $x$ .

– Corresponde ao raio da região de confiança.

– Corresponde a uma aproximação de  $h'(x)$

– Corresponde a uma tolerância para resolver de  $A\delta = 0$  aproximadamente.

– Corresponde ao conjunto factível associado às restrições de desigualdade.

– Corresponde a uma tolerância para as restrições ativas.

DS pode ser descrito por:

P1 – Passo de Cauchy

i – Faça

$$\delta_{PC} = \operatorname{argmin}\{q(\mu v) : x + \mu v \in \Omega, \|v\| \leq \Delta\} \quad (1.67)$$

ii – Escolha um *Conjunto de Trabalho*  $\mathcal{W} \subset \{i : r_i(x + \delta_{PC}) \leq \rho\}$

P2 – Passo DS

Ache  $\delta$ , tal que:

$$\begin{cases} q(\delta) \leq .1q(\delta_{PC}) \\ \|\delta\| \leq \Delta \\ \|A\delta\| \leq \eta\|A\|\|\delta\| \\ r_i(x + \delta) \leq \rho, \text{ se } i \in \mathcal{W} \end{cases}$$

### OBSERVAÇÃO 1.5.1 –

- i – Note que  $\delta = \delta_{PC}$  é sempre uma opção possível em P2.
- ii – Ao caso de minimização sem restrições, corresponde fazer  $A = 0$ ,  $\Omega = \mathbb{R}^n$ ,  $\eta = 0$  e  $\rho$  qualquer, em  $DS(x, q, v, \Delta, A, \eta, \Omega, \rho)$ . À MRI corresponde fazer  $\Omega = \mathbb{R}^n$  e  $\rho$  qualquer. Aos casos nos quais queremos soluções “*exatas*” dos subproblemas envolvidos em algoritmos para MRI, corresponde fazer  $\eta = 0$ . Neste sentido, usaremos  $A = 0$ ,  $\Omega = \mathbb{R}^n$ ,  $\eta = 0$  e  $\rho = 0$  como “*defaults*”, sempre que for o caso. Por exemplo:

$$\begin{aligned} DS(x, q, v, \Delta, A) &= DS(x, q, v, \Delta, A, 0, \mathbb{R}^n, 0) \\ DS(x, q, v, \Delta) &= DS(x, q, v, \Delta, 0, 0, \mathbb{R}^n, 0) \end{aligned}$$

Veja que  $\rho$  não interfere, se não há restrições de desigualdade. Caso existam, serve para que se flexibilize o conceito de restrições ativas num ponto, para restrições apenas  $\rho$ -ativas, no sentido apontado acima. Usaremos DS num algoritmo para MRIC, formulado no apêndice.

- iii – Geralmente a denominação “*descida de Cauchy*” está associada à descida obtida com o passo (1.67), para  $v = -\nabla f(x)$ , no caso MSR, e  $v = -gp(x) = -P(x)g(x)$ , no caso MRI. Cometemos o abuso de admitir outras possibilidades para  $v$ , sem alterar a denominação empregada, visando trabalhar com uma formulação *inexata* para resolver MRI, bem como pensando no algoritmo para MRIC, no apêndice. Com esta flexibilização, a escolha de  $v$  passa a ser crucial na determinação de passos que, de fato, propiciem “*Descida Suficiente*” aos algoritmos que chamam DS.

No caso onde há restrições de desigualdade, a coisa se complica um pouco, e retornaremos a esta questão no momento oportuno.

# Capítulo 2

## CDR

Conforme discutimos no capítulo 1, o algoritmo que descreveremos neste capítulo para atacar MRI, pode ser pensado como um *PFAC com redução tangente e relaxamento dinâmico das restrições*, no sentido que, dado um ponto  $x_c = x_c^{(k)}$  ele tenta obter  $x^{(k+1)}$  com um passo para minimizar a  $f$  “próximo ao nível”

$$\mathcal{H}_c = \{x : \|h(x)\| = \|h(x_c)\|\},$$

e, em compensação, testa ao chegar em  $x^{(k+1)}$ , para ver se podemos tomar  $x_c^{(k+1)} = x^{(k+1)}$ , ou se  $x^{(k+1)}$  está longe demais do nível  $\mathcal{H}_0 = \{x : h(x) = 0\}$ . Neste segundo caso obteremos  $x_c^{(k+1)}$  reduzindo significativamente  $\|h(x^{(k+1)})\|$ , num processo que denotaremos por *Restauração* da factibilidade. Estaremos relaxando a condição  $h(x) = 0$ , por uma do tipo:

$$\begin{aligned}\|h(x_c^{(k)})\| &= O(\|gp(x_c^{(k)})\|) \\ \|h(x_c^{(k+1)})\| &= O(\|gp(x_c^{(k)})\|)\end{aligned}$$

Esta dependência de  $h(x)$  com o gradiente projetado é o que justifica caracterizar como dinâmico o relaxamento da factibilidade que estamos propondo, e denotar o método por CDR (Controle Dinâmico das Restrições).

Na seção 2.1, apresentamos alguns ingredientes heurísticos que servem como pano de fundo para o método, bem como uma descrição informal do algoritmo, a ser formalmente exposto nas seções 2.2 e 2.3. Na seção 2.4, detalhamos hipóteses sobre as quais se consegue garantir que CDR esteja bem definido, bem como alguns resultados de convergência global sobre os iterados gerados numa aplicação de CDR. Na seção 2.5 apresentamos uma generalização de CDR, que admite um tratamento *inexato de todos* os subproblemas lineares e quadráticos envolvidos. Neste sentido, às vezes denotaremos por CDRIN a versão INexata de CDR. Mostraremos, ainda na seção 2.5, como generalizar os resultados teóricos da seção anterior. Apesar de ser formalmente possível fazer uma exposição deste caso mais geral, apenas, de modo a economizar algumas páginas desta tese, acreditamos ganhar consideravelmente em transparência e legibilidade ao fazê-lo na forma atual.

Para simplificar a exposição dos algoritmos a serem definidos, atribuiremos valores numéricos a muitos dos parâmetros que permanecem fixos a cada chamada dos algoritmos em questão, mas que a rigor deveriam ser considerados como definidos em intervalos. Embora esta flexibilidade na definição dos parâmetros seja importante do ponto de vista da implementação dos algoritmos, tratá-los literalmente nada acrescentaria do ponto de vista conceitual, mas tornaria a leitura bem mais cansativa.

## 2.1 HEURÍSTICA E DESCRIÇÃO INFORMAL DE CDR

### 2.1.1 HEURÍSTICA

Nosso objetivo, nesta subseção, é tentar situar um pouco melhor o que norteia, matematicamente, nossa aposta num algoritmo tipo *PFAC com relaxamento dinâmico das restrições*. Conforme já apontamos na seção 1.1, nosso ponto de partida corresponde a pensar que procuramos um ponto, na interseção do conjunto factível com a variedade dual, e que tenha “boas chances” de também ser uma solução para MRI. Desdobraremos em tres itens nossa argumentação:

#### F1 – VANTAGENS DE SE ANDAR PRÓXIMO A $\mathcal{H}_0$

Começamos reconhecendo que, andar próximo a  $\mathcal{H}_0$ , não pode ser pensado como a melhor estratégia em todos os casos. Por exemplo, se a  $f$  é convexa, e tem um minimizador global relativamente perto de um conjunto factível, com muitas “oscilações na sua curvatura”, como na figura da página 12, provavelmente valerá a pena realizar um esforço inicial para se aproximar do minimizador global da  $f$ , sem maiores preocupações com a factibilidade. Para esta tarefa, provavelmente seria mais adequado começar com algum método de minimização sem restrições, para buscar uma primeira aproximação do minimizador global da  $f$ , e depois usar um método de penalização como o lagrangeano aumentado, ou talvez até aplicar o lagrangeano aumentado já de saída. Já com relação a PQS, alimentamos algumas dúvidas a cerca de sua capacidade para enfrentar problemas com grandes oscilações na curvatura das restrições. Em particular, o exemplo 2.1 se destina a observar, num problema bastante simples, como um método PQS pode “se atrapalhar”, em pontos próximos da variedade dual, e nos quais a curvatura dos níveis  $\mathcal{H}_c$  varia significativamente. Desdobramos em 4 pontos nosso argumento em favor das vantagens de se andar próximo a  $\mathcal{H}_0$ .

F1.1 – Robustez local de  $\mathcal{H}_0$  –  $\mathcal{H}_0$  resulta ser, localmente, um conjunto de minimizadores bastante robusto de  $\varphi(x) = \frac{1}{2}\|h(x)\|^2$ , no sentido que o método de Gauss-Newton, (correspondente a dar passos  $\delta = -h'(x)^\dagger h(x)$  em  $x$ ) parece funcionar muito bem numa vizinhança “razoável” de  $\mathcal{H}_0$ , desde que  $\mathcal{H}_0$  seja um nível regular de  $h$ . Alimentamos a expectativa que isto possa ser eficientemente explorado numa implementação do algoritmo, no bojo do *controle dinâmico* a que nos referimos.

F1.2 – “Miopia” na direção normal às restrições, longe de  $\mathcal{H}_0$  – Temos que reconhecer, de saída, que procurar minimizadores globais de  $\|h(x)\|^2$  pode ser uma tarefa muito difícil, mesmo que saibamos previamente de sua existência. Por exemplo, se começamos num ponto próximo a um minimizador não factível de  $\|h(x)\|^2$ . Em particular, se usamos métodos como o PQS, que buscam se aproximar da factibilidade com passos na direção normal às restrições, visando reduzir  $\|h(x)\|$ . Não vemos como enfrentar este tipo de dificuldade, em algoritmos usuais para MRI, como os que situamos na seção 1.1, a não ser neles introduzindo salvaguardas, uma vez detectados obstáculos para se reduzir significativamente  $\|h(x)\|$ , de forma a recorrer a algoritmos especificamente desenhados para resolver  $h(x) = 0$  e capazes

de “escapar” de minimizadores locais não factíveis de  $\|h(x)\|^2$ . No entanto, há ainda um outro tipo de dificuldades que se apresenta ao caminharmos longe das restrições com algoritmos como o PQS, e que gostaríamos de situar aqui. Do ponto de vista local, conforme apontamos em F1, o método GN é eficiente para resolver  $h(x) = 0$ , sob condições de regularidade usuais. No entanto, longe de  $\mathcal{H}_0$ , procurar passos na direção normal às restrições pode ser muito ineficiente, *mesmo em situações nas quais nenhum minimizador local, não factível, de  $\|h(x)\|^2$  se apresente atraindo os iterandos*. A seguir, discutiremos um exemplo sem minimizadores não factíveis de  $h$ , no qual, ao aplicarmos um particular algoritmo PQS, não apenas o passo na direção normal às restrições “enxerga muito mal” o conjunto factível, mas também o passo na direção tangente contribue para dificultar ainda mais a aproximação do conjunto factível, em pontos próximos à variedade dual.

EXEMPLO 2.1 – Consideremos o problema MRI

$$\text{Minimizar } f(x_1, x_2) = x_2 \quad \text{s.a. } h(x_1, x_2) = x_2 - 100(x_1 + \alpha x_2)^2 \quad (2.1)$$

(2.1) corresponde a um problema aparentemente muito simples, qual seja, encontrar pontos de tangente horizontal na parábola de equação  $h(x) = 0$  em  $\mathbb{R}^2$ . Usaremos para tanto, um algoritmo PQS com região de confiança sugerido em [DEM], e que implementamos para ajudar nos testes numéricos a serem discutidos no capítulo 4. (2.1) com  $\alpha = 1$  faz parte da bateria de testes, exposta no capítulo 4, como o problema de número 14. O que se registra na primeira coluna da tabela 4.8 é que, ao se começar no ponto  $x^{(0)} = (-1, -2)$ , os iterandos não conseguem se aproximar do minimizador em  $(0, 0)$ , após 100 iterações. Nas figuras 2.1–2.2, registramos a trajetória dos iterandos até  $k = 100$ , inicializados em  $x^{(0)}$  pelo referido algoritmo aplicado a (2.1), sendo que na figura 2.1 correspondendo ao caso  $\alpha = 0$ , e na 2.2 ao caso  $\alpha = 1$ . Registramos ainda as curvas de nível de  $h$ , os passos horizontais com linha cheia, os passos verticais com linha tracejada, e a variedade dual  $x_1 = -\alpha x_2$ . O que se observa no caso  $\alpha = 0$ , é que o primeiro passo vertical vai na direção da variedade dual  $x_1 = 0$ , e que o passo horizontal leva o primeiro iterando para  $x^{(1)} = (-.1848, -63.03)$ . Isto é razoável, porque na verdade  $|h(x^{(1)})| = 66.5 < |h(x^{(0)})| = 102$ , e  $x^{(1)}$  está visivelmente mais próximo da variedade dual  $x = 0$ . Na figura 2.1 pode-se observar, à medida que as iterações progredirem, que o raio da região de confiança vai ficando bem pequeno, até que  $x^{(k)}$  se ajuste sobre a variedade dual, e depois começa a crescer de forma que a sequência gerada convirja à solução  $(0, 0)$  de (2.1), caminhando sobre a variedade dual, de maneira relativamente rápida. No caso  $\alpha = 1$ , obtivemos na primeira iteração  $x^{(1)} = (461.68, -462.41)$ . Isto pode parecer muito ruim, mas na verdade, nossa medida de distância da factibilidade é  $|h(x)|$ . Igualmente ao caso  $\alpha = 0$ , obtivemos aqui  $|h(x^{(1)})| = 515.6 < |h(x^{(0)})| = 902$ , e  $x^{(1)}$  bem mais próximo da variedade dual, que neste caso será a reta  $x_2 = -x_1$ . No entanto, conforme se pode observar na figura 2.2, as 100 próximas iterações são gastas, com passos próximos da variedade dual, para ir de  $x^{(1)}$  até  $x^{(100)} = (461.1206, -461, 1197)$ . A figura 2.3 corresponde a ampliar uma janela quadrada com comprimento .2 na figura 2.2, para tentar observar melhor o que está acontecendo neste caso. Na figura 2.3 destacamos ainda o eixo de simetria  $\mathcal{S}$  das parábolas  $h(x) = c$ , ou seja, a reta  $x_2 = -x_1 + .0025$ , além dos elementos presentes na figura 2.2. O que se observa aí é que, no caso  $\alpha = 0$ , a variedade dual  $y = -\alpha x$  coincidia com o eixo de simetria, e

para  $\alpha = 1$  elas são distintas. O seu desacoplamento parece ter um efeito dramático sobre a performance do algoritmo. No caso  $\alpha = 1$ , apesar dos pontos na variedade dual não terem tanta “visibilidade” sobre o conjunto factível  $\mathcal{H}_0$  quanto os pontos no eixo de simetria, ainda assim, sempre que  $x^{(k)}$  consegue voltar bem perto da variedade dual, os passos começam a crescer em tamanho inicialmente. No entanto, qualquer deslize numa iteração que se complete um pouco mais longe da linha dos vértices das parábolas, é fatal para o tamanho dos passos seguintes. Poder-se-ia explicar este fenômeno, pelo menos neste caso, atribuindo-o a um problema de escala, uma vez que ao fazer  $(x_1, x_2) \leftarrow (x_1/10, x_2/10)$ , ele desaparece. Acharos um pouco simplista ir por aí. Preferimos atribuí-lo a dois fatores:

- i- “Miopia” do passo na direção normal às restrições, fora da linha dos vértices.
- ii- O processo de avaliação de mérito dos passos candidatos nos métodos PQS, ao inviabilizar que os passos na direção vertical e horizontal possam ser avaliados separadamente.

Note-se que este fenômeno independe de estarmos caminhando num conjunto aparentemente afastado da solução. No caso de começarmos no ponto  $(1, -15)$ , correspondente ao outro ponto testado na bateria de testes do capítulo 4, por exemplo, já a partir da segunda iteração os iterandos permanecem no quadrado  $[0, 1] \times [0, 1]$ . No entanto, levam cerca de 70 iterações para convergirem para  $(0, 0)$ , tropeçando no mesmo tipo de dificuldades apontadas acima.

Figura 2.1: Exemplo 2.1 com  $\alpha = 0$

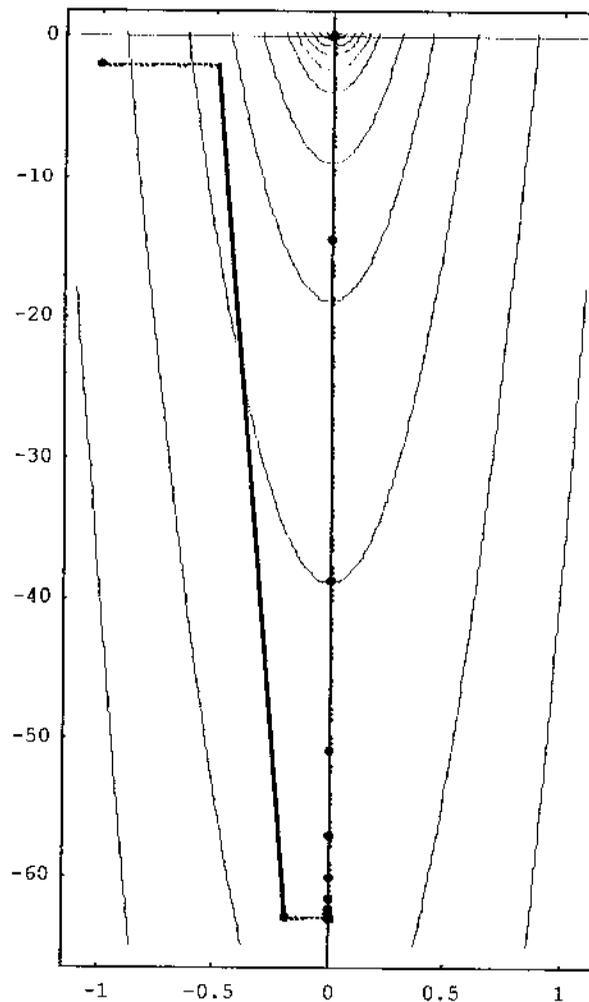


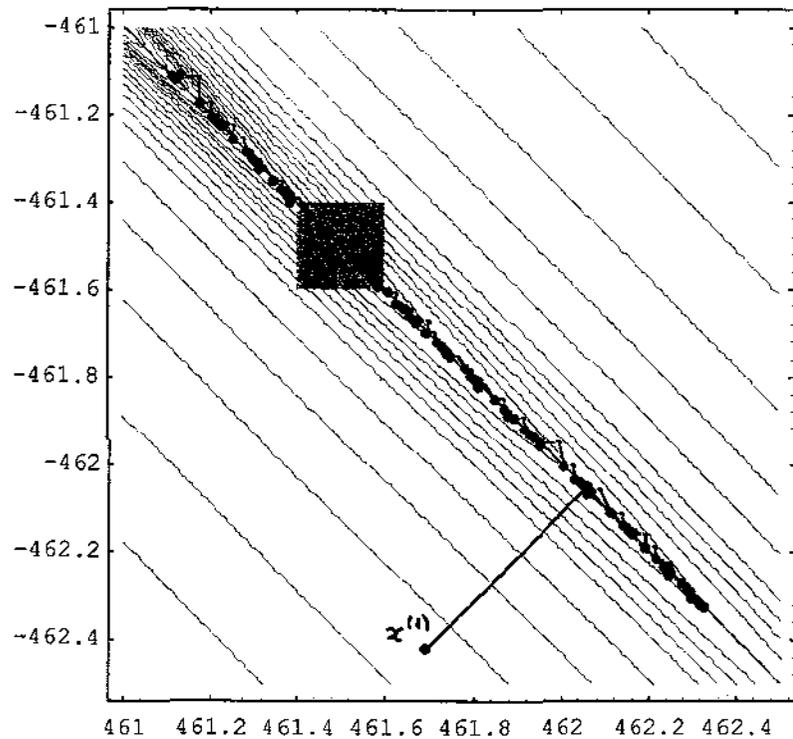
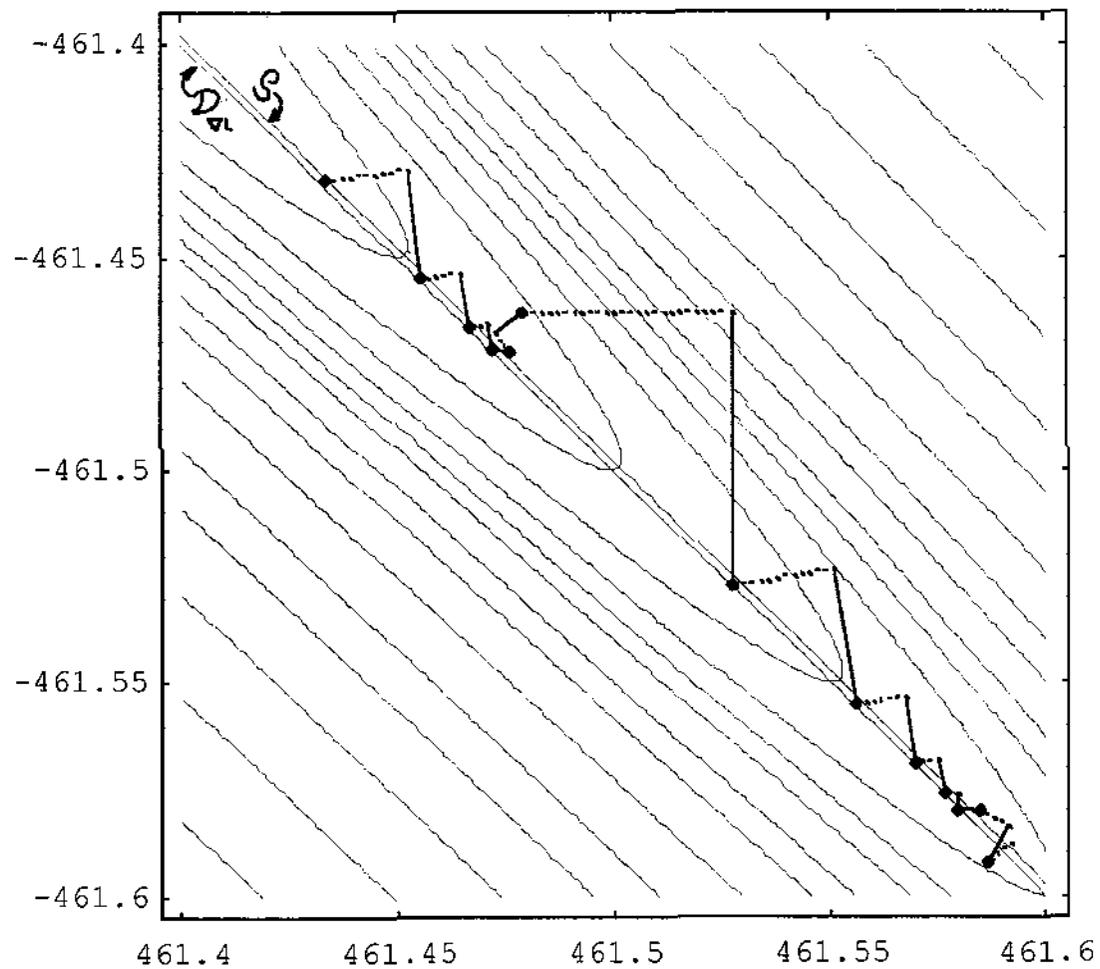
Figura 2.2: 100 iterações do exemplo 2.1 com  $\alpha = 1$ 

Figura 2.3: Ampliação da janela quadrada de comprimento .2 na figura 2.2



O que acontece neste exemplo 2.1, nos parece ser da mesma natureza do que ocorre com os problemas de números 2 e 13, da lista de problemas de Boggs e Tolle que usaremos para teste, conforme destacaremos no momento oportuno. Não temos elementos para concluir muita coisa ainda, mas nosso palpite é que a dificuldade para diminuir  $\|h(x)\|$ , próximo a pontos da variedade dual correspondentes à restrições com significativas variações na sua curvatura, constitua um fenômeno bastante comum na aplicação de algoritmos tipo PQS, em pontos relativamente afastados do conjunto factível.

F1.3 – Bifurcações na variedade dual – A variedade dual  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  frequentemente não será um conjunto conexo. Ao nos aproximarmos de  $\mathcal{D}_{\nabla L}$ , porém longe da factibilidade, nada nos assegura que venhamos a ter pontos factíveis na componente conexa de  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  perto da qual chegamos. Por outro lado, do ponto de vista de encontrar um ponto estacionário para MRI, é indiferente saber de qual componente conexa de  $\mathcal{H}_0$  nos manteremos vizinhos. Além disto, se alguma componente conexa de  $\mathcal{H}_0$  tiver preferência, possivelmente isto estará relacionado a termos começado num ponto factível, e desejarmos permanecer na mesma componente conexa de  $\mathcal{H}_0$  onde começamos.

Uma outra maneira de dizer a mesma coisa, é pensar que minimizadores da  $f$  em níveis que estejam longe da factibilidade, podem “se perder” em alguma bifurcação entre o nível considerado e  $\mathcal{H}_0$ , não guardando nenhuma relação com a existência de minimizadores da  $f$  em  $\mathcal{H}_0$ . Voltaremos a este ponto em F1.4, ao argumentar que o “comportamento” da  $f$  ao longo de uma superfície de nível da  $h$ , longe da factibilidade, pode não ter nada a ver com o “comportamento” da  $f$  em  $\mathcal{H}_0$ .

F1.4 – “Comportamento” da  $f$  em níveis vizinhos – Entendemos que argumentos de natureza mais qualitativa, frequentemente estão longe de traduzir-se em algoritmos numericamente robustos. Apesar disto, acreditamos ser uma vantagem dos métodos que caminham próximo ao conjunto factível, o fato da  $f$ , num certo sentido, apresentar genericamente o mesmo “comportamento” em níveis vizinhos. Traduzimos, matematicamente, a idéia de duas funções terem o mesmo “comportamento” em variedades diferenciáveis, pensando, como se faz frequentemente em sistemas dinâmicos, que duas funções  $f$  e  $\tilde{f}$ , de classe  $C^2$ , em variedades difeomorfas  $M$  e  $\tilde{M}$ , têm o mesmo comportamento global, caso os fluxos gerados por  $\nabla f$  e  $\nabla \tilde{f}$  sejam topologicamente equivalentes. Ou seja, caso exista um homeomorfismo  $\psi : M \rightarrow \tilde{M}$ , que leve órbitas de  $\nabla f$  em órbitas de  $\nabla \tilde{f}$ . (vide [PM 78]).

Suponhamos, para simplificar um pouco o argumento, que as superfícies de nível de  $h$  sejam compactas, e que os níveis vizinhos a  $\mathcal{H}_0 \neq \emptyset$  sejam regulares e difeomorfos entre si. \*

---

\*O teorema de Sard garante, sob algumas condições de diferenciabilidade da  $h$ , que seus valores regulares formam um conjunto denso no  $\mathbb{R}^m$  (vide [Soto 76], [Hir 76]). Se supomos que os níveis da  $h$  são todos compactos, obtemos que a propriedade de ser regular, corresponde a um subconjunto aberto e denso do  $\mathbb{R}^m$ , nestes casos. Admitida a compacidade das superfícies de nível de  $h$ , e que  $\mathcal{H}_0 \neq \emptyset$  é regular, obtemos que numa vizinhança de  $\mathcal{H}_0$  todos os níveis são regulares. Um argumento relativamente standard de folheações, que me foi transmitido oralmente por Alcides Lins Neto, garante, neste caso, que eles também são difeomorfos entre si. Deste modo, se sabemos que as superfícies de nível de  $h$  são compactas, e que  $\mathcal{H}_0 \neq \emptyset$ , devemos esperar, genericamente, encontrá-las regulares e difeomorfas, numa vizinhança de  $\mathcal{H}_0$ .

O teorema de estabilidade estrutural para campos gradientes em variedades compactas (vide [Sma 61]), nos permite inferir que, para um subconjunto aberto e denso de funções objetivo  $f$  em  $C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ , obteremos para suas restrições aos níveis vizinhos a  $\mathcal{H}_0$ , o mesmo “comportamento” que no nível  $\mathcal{H}_0$ . Ou seja, para cada  $f$  neste subconjunto genérico, encontraremos uma família contínua de homeomorfismos  $\psi_\mu : \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}_\mu$ , levando as órbitas de  $\nabla(f/\mathcal{H}_0)$  em órbitas de  $\nabla(f/\mathcal{H}_\mu)$ , para  $\mu$  suficientemente próximo de 0. Em particular,  $\psi_\mu$  leva minimizadores de  $f$ , em minimizadores de  $\tilde{f}$ , órbitas do fluxo de  $\nabla f$  que convergem para um minimizador de  $f$ , em órbitas convergindo para o minimizador correspondente do fluxo de  $\tilde{f}$ , etc.

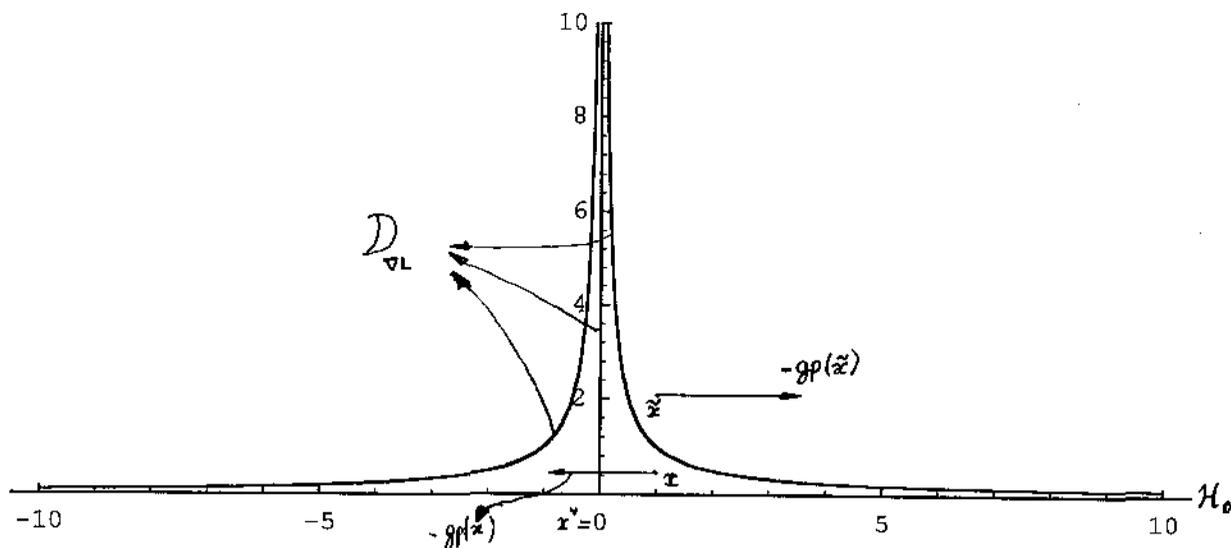
No entanto, sem maiores preocupações com precisão, não é difícil imaginar comportamentos muito diferentes para a  $f$  em níveis relativamente longe entre si. O exemplo 2.2 vai neste sentido

**EXEMPLO 2.2** Considere o problema

$$\text{Minimizar } f(x, y) = y + x^2(2 - x^2y^2) \text{ s.a. } h(x, y) = y = 0 \quad (2.2)$$

Seus pontos de KT em cada nível  $y = y_c$  são dados por  $\partial f/\partial x = 4x(1 - x^2y_c^2)$ . Portanto, em cada nível  $y = y_c \neq 0$ , a  $f$  terá um ponto de mínimo em  $x = 0$  e dois pontos de máximo em  $x = -1/y_c$  e  $x = 1/y_c$ .

Desenho correspondente a direções de descida, em dois pontos que estejam em níveis relativamente próximo e longe do nível 0:



A  $f$  pode enganar relativamente “longe” de  $y = 0$ .

Podemos pensar que  $x = 0$  é, localmente, o “mesmo” minimizador em todos os níveis de  $h$ , dado que o polinômio de Taylor de segunda ordem do  $L(x, y_c, \lambda_{LS}(0, y_c))$ , restrito a  $y = y_c$  e em torno de  $x = 0$ , é  $q(x, y_c) = 2x^2$ . Vale dizer,  $q(x, y_c)$  independe de  $y_c$ . Isto significa que numa vizinhança do minimizador  $x = 0$ , e para os níveis  $y = y_c$  suficientemente vizinhos do nível 0, a  $f$  se comporta da mesma maneira.

Em particular, se tomamos um ponto  $-a \leq x_c \leq a$  num nível  $y = y_c$ , para o qual  $|y_c| < 1/a$ , os passos de descida serão na direção do minimizador  $x = 0$ . No entanto um pouco afastado do nível zero, apesar do minimizador “persistir”, se tomarmos  $x_c > 1/y_c$ , os passos de descida estarão apontando na direção contrária ao minimizador  $x = 0$ . Em outras palavras, uma decisão sobre a direção a tomar, relativamente longe de  $y_c = 0$ , nos mandaria exatamente no sentido inverso ao que precisamos ir.

## F2 – RELAXAMENTO CONTROLADO DA FACTIBILIDADE EM PFAC

Obviamente, exigir que todos os iterados sejam factíveis é pedir demais. Algum relaxamento da factibilidade, dentro de uma tolerância prefixada, sempre existirá na prática. A questão é como fazer este relaxamento, de forma a melhorar a eficiência dos algoritmos. Podemos expressar esta tolerância, a ser admitida em cada iteração, por um parâmetro  $\rho^{(k)}$ , e pensar que em cada iteração daremos um passo a partir de  $x_c^{(k)}$ , visando aproximar  $x^{(k+1)}$  significativamente de  $\mathcal{D}_{\nabla_L}$ , mas respeitando a tolerância  $\|h(x^{(k+1)})\| \leq \rho^{(k)}$ . Os principais pontos a nortear a definição de  $\rho^{(k)}$  nos parecem ser:

- $\rho.1$  – Aproveitar a robustez local do método GN para resolver  $\|h(x)\| = 0$ , no sentido de tentar fazer com que passos na direção normal às restrições, cuidadosamente escolhidos, possam ser eficientes para reduzir  $\|h(x)\|$ , se  $\|h(x)\| \leq \rho^{(k)}$ .
- $\rho.2$  – Tentar fazer com que o comportamento da  $f$ , restrita a níveis de  $h$  dentro da tolerância  $\rho^{(k)}$ , não apresentem grandes discrepâncias no seu “comportamento”.
- $\rho.3$  – Tentar garantir espaço na direção normal às restrições, visando facilitar passos suficientemente “grandes” na direção horizontal.

Claramente, os dois primeiros pontos apontam para se diminuir  $\rho^{(k)}$ , enquanto que  $\rho.3$  aponta no sentido inverso. *Nossa aposta é na possibilidade de trabalhar satisfatoriamente este confronto.*

Um passo  $\delta_t^{(k)}$  dado na direção tangente às restrições em  $x_c^{(k)}$  é, via de regra, da mesma ordem de grandeza que a norma do gradiente projetado  $\|gp(x_c^{(k)})\|$ . Por exemplo ao se adotar um modelo quadrático  $q^{(k)}(\delta) = g(x_c^{(k)})^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta$  para aproximar o Lagrangeano da  $f$ , isto se verifica com os passos Newton e de Cauchy, se  $B$  satisfizer condições usuais. Para tais passos  $\delta_t^{(k)}$ , o deslocamento na direção normal correspondente seria

$$\Delta h_c^{(k)} = \|h(x_c^{(k)} + \delta_t^{(k)}) - h(x_c^{(k)})\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|^2)$$

e chega a  $o(\|gp(x_c^{(k)})\|^2)$ , caso façamos uma correção de segunda ordem, como a que é sugerida pelo lema de Taylor para MRI (1.4.1).

Neste sentido, para não restringirmos desnecessariamente o passo na direção tangente, precisamos de tanto mais espaço na direção normal às restrições, quanto maior for  $\|gp(x_c^{(k)})\|$ . Daí a oportunidade de fazer, via  $\rho^{(k)}$ , um controle dinâmico das restrições.

Em resumo, longe da solução nos parece suficiente tentar se aproximar de  $\mathcal{D}_{\nabla_L}$  mantendo-se *dinamicamente próximo da factibilidade*, porém sem preocupações excessivas com ela, só tentando forçá-la mais, à medida que  $\|gp(x_c^{(k)})\| \rightarrow 0$ . Além disto, perto de  $x^*$ , a transversalidade entre  $\mathcal{D}_{\nabla_L}$  e  $\mathcal{H}_0$  nos dá uma estrutura muito mais rica para ser explorada do que longe de  $x^*$ .

F3 – COMPETITIVIDADE DE PFAC

Uma de nossas preocupações básicas é com um método que possa ser implementado de forma robusta e eficiente. Métodos de pontos factíveis estão bem menos presentes na literatura recente de programação não-linear, do que PQS e métodos de penalização. Ainda assim, autores que publicaram artigos testando métodos tipo PFAC contra métodos PQS, num período relativamente recente, como Lasdon e colaboradores em [FSL 88] e Brown-Biggs em [BB 89], reivindicam competitividade a seus métodos frente a PQS. Por outro lado, Miele e colaboradores, já em [MLC 71], apontavam para uma maior eficiência de métodos que fazem algum tipo de relaxamento nas restrições em SGRA. Nossa expectativa é, também, a de que relaxando dinamicamente a factibilidade, se consiga dar mais eficiência a métodos tipo PFAC com redução tangente. Em especial, métodos PFAC com redução tangente nos parecem mais adequados do que os tipo GRG, tanto para se introduzir um relaxamento dinâmico das restrições, como também para um tratamento inexato dos subproblemas lineares.

2.1.2 DESCRIÇÃO INFORMAL DE CDR

Os pontos levantados na subsecção anterior apontam para uma *estratégia que estabeleça um compromisso entre, propiciar um relaxamento na factibilidade necessário para se poder dar um passo suficientemente grande na direção tangente às restrições, longe da solução, e uma forma de fazê-lo que não nos afaste desnecessariamente da factibilidade.*

A forma de se tentar garantir esta estratégia, algoritmicamente, está baseada na idéia de ir controlando a factibilidade dos iterados a serem obtidos, através *Cilindros de Confiança* definidos em cada  $x_c^{(k)}$  como

$$C^{(k)} = \{z : \|h(z)\| \leq \rho_c^{(k)}\}$$

$\rho_c^{(k)}$  recebe, abusivamente, a denominação de “*raio do cilindro de confiança  $C^{(k)}$* ”. A idéia central aí, corresponde a começar com  $x_c^{(k)}$  em  $C^{(k)}$ , e só aceitar  $x^{(k+1)}$  caso algum lagrangeano da  $f$ , adequadamente escolhido, se reduza significativamente e  $x^{(k+1)}$  não saia de um cilindro de confiança maior, digamos com “*raio*” igual a  $2\rho_c^{(k)}$ .

Detalhando um pouco melhor a descrição esboçada acima, pensamos num algoritmo cujas iterações possam ser separadas em duas etapas distintas. Na primeira etapa, ao começar em  $x^{(k)}$ , tentamos obter  $\rho_c^{(k)}$  e  $x_c^{(k)}$  *controladamente próximo* de  $x^{(k)}$ , no sentido que

$$\|h(x_c^{(k)})\| \leq \rho_c^{(k)} = O(\|gp(x_c^{(k)})\|) \quad (2.3)$$

Apenas para fixar idéias, poderíamos fazer por exemplo:

$$\rho_c^{(k)} = \nu \frac{\|gp(x_c^{(k)})\|}{\|g(x_c^{(k)})\| + 1} \rho_{max}^{(k)}, \quad \text{onde } 10^{-3} \leq \nu \leq 10^3$$

Se for razoável definir  $\rho_c^{(k)}$  de forma que  $\|h(x_c^{(k)})\| \leq \rho_c^{(k)}$ , podemos fazer  $x_c^{(k)} = x^{(k)}$  e passar para a segunda etapa da  $k$ -ésima iteração. Caso contrário, aplicamos a  $x^{(k)}$  um algoritmo para reduzir  $\|h(x)\|^2$ , até conseguir atender à exigência colocada em (2.3)

$\rho_{max}^{(k)}$  desempenha um papel importante aí, com o significado de delimitar uma vizinhança de  $\mathcal{H}_0$ , na qual os “*cilindros de confiança*” sejam confiáveis, no sentido que, o comportamento

da  $f$  em cada nível  $\mathcal{H}_{h_c} = \{x : h(x) = h_c\}$  com  $\|h_c\| \leq \rho_{max}^{(k)}$  não difira, *no essencial*, do comportamento da  $f$  no nível  $\mathcal{H}_0$ . A sequência  $\{\rho_{max}^{(k)}\}$  é monótona (não crescente). No momento oportuno explicaremos detalhadamente a tradução algorítmica desta idéia. Além disto  $\rho_{max}^{(k)}$  também carregará, de alguma maneira, a expectativa que a restauração da factibilidade deve funcionar em  $\mathcal{C}^{(k)}$ , embora não achemos necessário explicitar esta característica diretamente na construção de CDR. †

A segunda etapa começa com  $x_c^{(k)}$  e  $\rho_c^{(k)}$  satisfazendo (2.3). Nela se usa um modelo quadrático  $q(\delta) = g(x_c^{(k)})^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta$ , numa dada região de confiança, para obter  $x^{(k+1)} = x_+ = x_c^{(k)} + \delta_t + \delta_{soc}$ , de tal forma que:

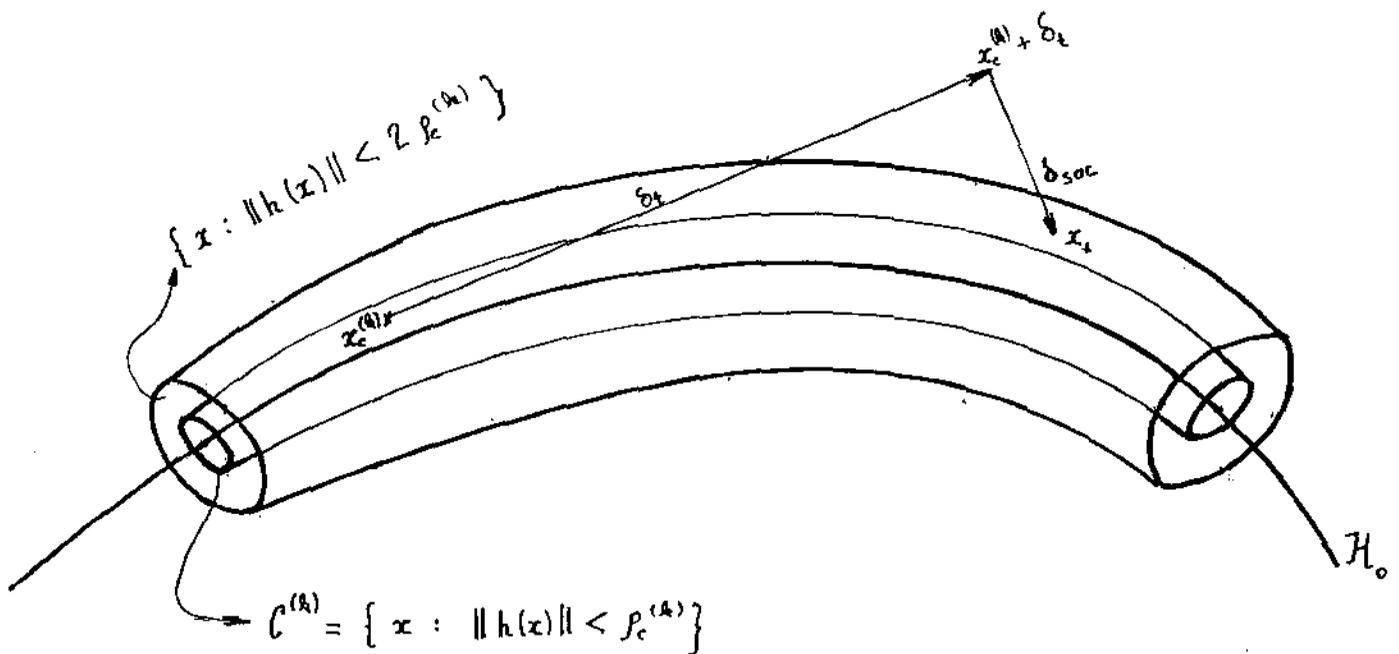
i -  $\delta_t \in \mathcal{N}(h'(x_c^{(k)}))$  é definido de forma a produzir um “decréscimo suficiente” no modelo quadrático  $q(\delta)$ .

ii -  $\delta_{soc} \in R(h'(x_c^{(k)}))^T$  é tal que

$$\delta_{soc} = 0(\|\delta_t\|^2) \quad (2.4)$$

Uma tal liberdade na escolha de  $\delta_{soc}$  é suficiente para a correção definida no lema de Taylor para MRI 1.4.1.

Esboço correspondente à 2ª parte de uma iteração típica:



$x_+$  cumpre a 1ª exigência ou seja  $\|h(x_+)\| < 2\rho_c^{(k)}$

†Na prática, pensamos que CDR deva ser precedido de um algoritmo inicializador para reduzir  $\|h(x)\|$ , até ajustar um  $\rho_{max}^{(0)}$  no qual a restauração se proceda de maneira eficiente. Além disto, embutimos em CDR uma salvaguarda para interromper sua execução, caso a restauração fique muito ineficiente, de forma a acionar algum outro algoritmo mais eficaz para reduzir  $\|h(x)\|$ , e depois retornar a CDR, impondo uma redução significativa a  $\rho_{max}^{(k)}$ . Esperamos deixar claro, no capítulo 4, que se pode embutir em  $\rho_{max}^{(k)}$  a expectativa de confiabilidade na restauração, procedendo desta maneira.

$x_+$  será aceito, caso cumpra duas exigências:

- i –  $\|h(x_+)\| < 2\rho_c^{(k)}$ .
- ii – A redução no lagrangeano  $L(x, \lambda)$ , entre  $x_c^{(k)}$  e  $x_+$  for uma fração significativa da redução  $q(\delta_t)$  no modelo quadrático.

Se  $x_+$  não for aceito, reduz-se significativamente o raio da região de confiança e busca-se novo  $x_+$  da mesma forma. A única condição imposta sobre  $\lambda \in \mathbb{R}^m$  é que permaneça uniformemente limitado a cada aplicação do algoritmo. Em particular a própria  $f$  poderia ser usada para auxiliar na avaliação de mérito do passo “Horizontal”  $\delta_H = \delta_t + \delta_{soc}$ .

## 2.2 PRIMEIRA ETAPA: ALGORITMOS AUXILIARES REST E XCOR

Conforme descrevemos na seção anterior, na primeira etapa da  $k$ -ésima iteração do algoritmo procuramos um ponto  $x_c^{(k)}$ , *controladamente próximo* de  $x^{(k)}$ , e  $\rho_c^{(k)}$  satisfazendo (2.3). Do ponto de vista algorítmico, traduziremos isto impondo:

$$\|h(x_c^{(k)})\| \leq \rho_c^{(k)} \quad (2.5)$$

$$\rho_c^{(k)} = \nu \frac{\|gp(x_c^{(k)})\|}{\|g(x_c^{(k)})\| + 1} \rho_{max}^{(k)}, \quad \text{onde } 10^{-3} \leq \nu \leq 10^3 \quad (2.6)$$

$$\rho_c^{(k)} \leq \rho_{max}^{(k)} \quad (2.7)$$

Para obter um tal  $x_c^{(k)}$ , usaremos dois algoritmos auxiliares - REST e XCOR.

REST é um algoritmo que se ocupa exclusivamente com a factibilidade. Ou seja, ao aplicar REST a  $(z, \rho)$ , com  $z \in \mathbb{R}^n$  e  $\rho > 0$ , se bem sucedido, REST encontra  $z_+$  tal que  $\|h(z_+)\| < \rho$ . Se pensamos que  $h(x^{(0)}) = 0$ , REST estará, a cada aplicação, trabalhando no sentido de *RESTAURAR* a factibilidade. Daí o nome REST.

XCOR pode ser pensado como o algoritmo auxiliar que, em cada iteração, gerencia se já encontramos um ponto  $x_c^{(k)}$  satisfazendo (2.5 – 2.7), ou se precisamos continuar ainda na primeira etapa, acionando REST de forma a chegar mais próximo da factibilidade. O nome XCOR vem de entender que ele objetiva encontrar o ponto *CORRENTE*,  $x_c^{(k)}$ , da segunda etapa do algoritmo.

A forma de fazê-lo nos garantirá, implicitamente, caso REST seja bem sucedido

$$\|x_c^{(k)} - x^{(k)}\| = O(\|h(x^{(k)})\|) \quad (2.8)$$

(2.8) traduz matematicamente, a idéia de obter  $x_c^{(k)}$  *controladamente próximo* de  $x^{(k)}$ .

Um desafio aí, é permitir que se use, o mais possível, dados da iteração anterior para o processo de restauração, de forma a poder economizar nas atualizações e fatorações de  $h'(x)$ .

### 2.2.1 VERSÃO 0 DE REST

Seja  $\psi : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ , e denote por FAC o problema:

$$(FAC) \text{ Minimizar } f(z) = \psi(h(z)) \text{ s.a. } h(z) = 0.$$

Observe que  $f$  é constante nas superfícies de nível de  $h$ . Ou seja, o problema FAC se reduz a encontrar um ponto factível para  $h$ . Vale observar ainda que, *todos os algoritmos tipo PQS atacam FAC tentando minimizar  $\|h(z)\|^2$  de forma muito parecida.*

Partimos da constatação que, ao aplicar um método PQS de forma “bem sucedida”, espera-se que próximo da solução seus passos possam ser descritos por  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta_H^{(k)} + \delta_V^{(k)}$ , onde  $\delta_H^{(k)}$  é tangente às restrições e o passo normal  $\delta_V^{(k)} = \delta_{GN}^{(k)} = h'(x^{(k)})^T \mu_{GN}^{(k)}$  satisfaça

$$h'(x^{(k)})\delta_V^{(k)} + h(x^{(k)}) = 0 \quad (2.9)$$

Observe que, se PQS é bem sucedido num problema FAC, então obtemos  $\delta_H^{(k)} = 0$  e  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta_V^{(k)}$ . Isto significa que  $x^{(k)}$  é obtido por um algoritmo “tipo Gauss-Newton” para quadrados mínimos, perto da factibilidade (vide [Fle 87, cap. 6]). Daí resulta sua convergência local quadrática perto de pontos factíveis e regulares.

Se aplicamos a FAC um método PQS típico, usando regiões de confiança, e com “descida suficiente” para alguma função de mérito adequada, isto corresponde a uma forma clássica de globalizar algoritmos Gauss-Newton, pedindo, em cada iteração, “descida suficiente” para  $\|h(z)\|^2$  nas regiões de confiança respectivas. Denotaremos por versão 0 de REST, um algoritmo como o que obtemos desta maneira, no qual se considera, também, uma tolerância  $\rho \geq 0$  para a factibilidade.

Ao começar em  $z \in \mathbb{R}^n$ , *REST.0 tenta obter um ponto  $z'$  tal que  $\|h(z')\| \leq \rho$ , para algum  $\rho \geq 0$  fornecido.*

**REST.O( $z, \rho$ )**

Dados  $z \in \mathbb{R}^n$ ;  $\rho \geq 0$ ;  $\Delta_{min} > 0$

Faça  $A \leftarrow h'(z)$ ;  $h \leftarrow h(z)$  e escolha  $\Delta \geq \Delta_{min}$

P1 – Passo DS para  $\|h(z)\|^2$

a – Considere:

$$\Gamma(\delta) = \|h + A\delta\|^2 - \|h\|^2 \quad (2.10)$$

$$\delta_{PC} = \operatorname{argmin}\{\Gamma(\theta A^T h) : \|\theta A^T h\| \leq \Delta\} \quad (2.11)$$

b – Encontre  $\delta \in \mathcal{R}(A^T)$ , tal que

$$\Gamma(\delta) \leq .1\Gamma(\delta_{PC}) \text{ e } \|\delta\| \leq \Delta \quad (2.12)$$

e faça  $z_+ \leftarrow z + \delta$  e  $h_+ \leftarrow h(z_+)$

P2 – Testando  $z_+$ 

Se  $\frac{\|h_+\|^2 - \|h\|^2}{\Gamma(\delta)} \leq \cdot 1$ , faça  $\Delta \leftarrow \Delta/2$  e vá para P1 .

P3 – Atualizando

a – Se REST fracassar RETORNE. Senão faça  $z \leftarrow z_+$ .

b – Se  $\|h\| \leq \rho$ , RETORNE. Senão faça:

$$h \leftarrow h(z) \text{ e } A \leftarrow h'(z)$$

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

Vá para P1

## OBSERVAÇÃO 2.2.1 -

- i- Obviamente, o passo  $\delta_{PC}$  sempre atende (2.12). Observe que poderíamos ter remetido o passo P1 para DS (vide §1.5), pedindo-lhe que encontrasse  $\mu \in \mathbb{R}^m$  aplicando DS a  $\Gamma(\mu) = \|h + AA^T\mu\|^2 - \|h\|^2$ , com a direção de Cauchy dada por  $v = AA^T h$ , e o raio da região de confiança atualizado da mesma maneira que antes, a cada rejeição. As duas formulações são teoricamente equivalentes, sendo a primeira mais usual em algoritmos tipo PQS. A segunda formulação tem a vantagem de corresponder a resolver subproblemas lineares em regiões de confiança esféricas no  $\mathbb{R}^m$  enquanto que a relação (2.12) indica regiões elipsoidais no  $\mathbb{R}^m$  ao colocar  $\|\delta\| = \|A^T\mu\| \leq \Delta$ . Perto do conjunto factível, as duas formulações são equivalentes no sentido que teremos o passo Gauss-Newton (GN) atendendo às duas igualmente.
- ii- A forma mais simples de medir o fracasso em REST é decretá-lo caso o número de iterações numa mesma chamada torne-se excessivamente grande. Nosso entendimento é que o fracasso em REST, corresponde ao fracasso de qualquer algoritmo da família PQS, ao tentar resolver FAC começando em  $z$ . Há duas situações a considerar aí:
- ii.1 – O fracasso em REST é um forte indício da possibilidade de não existirem pontos factíveis para MRI. Neste sentido, funciona como um "teste de factibilidade para MRI".
- ii.2 – Se tivermos um ponto factível  $z$ , podemos sempre adotar uma estratégia de retornar a  $z$ , caso se detecte algum fracasso em REST, e impor uma redução significativa a  $\rho_{max}$ . Informalmente, nos parece "razoável", admitida alguma hipótese de compacidade para  $\{x^{(k)}\}$ , esperarmos encontrar pontos estacionários com esta pequena adaptação do algoritmo. Suponhamos que  $\mathcal{H}_0$  seja compacto e não vazio. O teorema de Sard, conforme colocado no rodapé em F1.4 da §2.1.1, nos indica ser "razoável" esperarmos, numa vizinhança compacta de  $\mathcal{H}_0$ , obter  $h'(x)$  com posto máximo. Podemos supor ainda que uma tal vizinhança, caso exista, seja um cilindro de confiança  $\mathcal{C}$  de "raio" positivo. Neste caso, só precisaremos voltar "artificialmente" a  $z$  e reduzir  $\rho_{max}$  num conjunto finito de vezes. Quando  $\rho_{max}$  for suficientemente pequeno, a construção que descrevemos informalmente na seção anterior, indica que nenhum iterado sairá mais de  $\mathcal{C}$ . Conforme veremos adiante, num tal  $\mathcal{C}$ , REST seria sempre bem sucedido, e CDR teria em  $\mathcal{C}$  pontos de acumulação estacionários para MRI.

- iii – Perto de pontos regulares e factíveis, o passo Gauss-Newton é sabidamente eficiente. Longe da factibilidade, no entanto, REST.0 pode ser muito ineficiente, analogamente ao que aponta Fletcher em [Fle 87, cap. 6] para o caso de sistemas sobredeterminados ( $n \leq m$ ). Ao testarmos problemas típicos, como os da lista que usaremos no capítulo 4, mesmo em casos onde os iterados convergem para pontos factíveis de  $h$ , algumas vezes observaremos que REST, começando longe da factibilidade pode ficar muito ineficiente, tornando recomendável a adoção de salvaguardas. Nossa expectativa é no sentido que, no mais das vezes, o espaço na direção normal necessário para se dar passos grandes “longe” da solução, nos permita caminhar “folgadoamente” numa região, na qual passos “tipo Gauss-Newton” sejam eficientes. Trataremos deste ponto teoricamente, ainda neste capítulo, bem como baseado em testes numéricos no capítulo 4.

### 2.2.2 VERSÃO 1 DE REST

Um inconveniente desta versão  $O$  de REST, está na sua potencial ineficiência, ao exigir uma atualização de  $h'(z)$ , a cada iteração. A versão 1 corrige isto, ao permitir:

- Que se comece REST usando o mesmo  $A$  obtido anteriormente. Em particular se estamos em  $x^{(k+1)}$  podemos fazer  $A^{(k+1)} = h'(x_c^{(k)})$ .
- Uma atualização arbitrária de  $A^{(j+1)}$ , se  $z^{(j+1)}$  foi obtido em REST a partir de  $z^{(j)}$  e desde que a restauração feita tenha sido bem sucedida no sentido que

$$\theta = \frac{\|h(z^{(j+1)})\|}{\|h(z^{(j)})\|} < \theta_{max},$$

para algum parâmetro  $0 \leq \theta_{max} < 1$  dado a REST. Desta forma, poderemos manter  $A^{(j+1)} = A^{(j)}$ , por exemplo, caso  $A^{(j)}$  tenha sido bem sucedido na iteração anterior. Em contrapartida, precisamos de alguma salvaguarda para a inadequação de  $A^{(j)}$ , como a que está sendo introduzida em P2.a.

REST( $z, \rho, \theta_{max}$ )

Dados  $z \in \mathbb{R}^n$ ;  $0 < \rho$ ;  $\Delta_{min} > 0$  e  $0 \leq \theta_{max} < 1$

Faça  $h_0 = h \leftarrow h(z)$

Escolha uma aproximação  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  de  $h'(z)$  e  $\Delta \geq \Delta_{min}$

P1 – Passo DS para  $\|h(z)\|^2$

a – Considere:

$$\Gamma(\delta) = \frac{1}{2}(\|h + A\delta\|^2 - \|h\|^2) \quad (2.13)$$

$$\delta_{PC} = \operatorname{argmin}\{\Gamma(\theta A^T h) : \|\theta A^T h\| \leq \Delta\} \quad (2.14)$$

b - Encontre  $\delta \in \mathcal{R}(A^T)$ , tal que

$$\Gamma(\delta) \leq .1\Gamma(\delta_{pc}) \quad \text{e} \quad \|\delta\| \leq \Delta \quad (2.15)$$

e faça  $z_+ \leftarrow z + \delta$  e  $h_+ \leftarrow h(z_+)$

P2 - Testando  $z_+$  com salvaguarda para inadequação de  $A$

a - Se  $\frac{\|h_+\|^2 - \|h\|^2}{\Gamma(\delta)} \leq .1$ ,  $A = h'(z)$  e  $\Delta \leq \Delta_{min}$ ,

Faça  $A \leftarrow h'(z)$ ,  $\Delta \geq \Delta_{min}$  e vá para P1 .

b - Se  $\frac{\|h_+\|^2 - \|h\|^2}{\Gamma(\delta)} \leq .1$ , faça  $\Delta \leftarrow \Delta/2$  e vá para P1 .

P3 - Atualização e critério de parada

a - Se REST fracassar, RETORNE. Senão faça  $\theta = \frac{\|h_+\|}{\|h\|}$ ;  $z \leftarrow z_+$ ;  $h \leftarrow h(z)$

b - Se  $\|h\| \leq \rho$ , RETORNE.

c - Se  $\theta \geq \theta_{max}$ , faça  $A \leftarrow h'(z)$

Se  $\|h\| \leq \frac{1}{2}\|h_0\|$ , escolha entre retornar e seguir.

d - Se  $\theta < \theta_{max}$ , escolha  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$

e - Faça  $\Delta \geq \Delta_{min}$  e vá para P1

**OBSERVAÇÃO 2.2.2** -

Além de continuar devolvendo  $z$ , tal que  $\|h(z)\| < \rho$ , como na versão 0 de REST, nesta nova permitimos, opcionalmente, antecipar a saída em P3.c, caso

$$\begin{aligned} \|h\| &\leq \frac{1}{2}\|h_0\| \quad \text{e} \\ \theta &\geq \theta_{max}, \end{aligned}$$

Veja que  $\theta \geq \theta_{max}$ , ao indicar uma inadequação de  $A$  para restaurar eficientemente, exige uma nova atualização de  $A$  por  $h'(z)$ .

O motivo para criar esta flexibilidade é que, frequentemente, estaremos usando fatorações de  $A$ , tornando o cálculo do gradiente projetado  $gp(z)$  relativamente barato. Neste caso, torna-se oportuno permitir que XCOR decida, a cada atualização de  $A$  por  $h'(z)$ , se será necessário gastar mais uma fatoração de  $A$  para continuar restaurando, ou se é o caso de usar a fatoração a ser feita para completar a iteração do algoritmo principal, com um passo na direção tangente.

Daqui para a frente, sempre que nos referirmos a REST, será a esta nova versão, salvo menção em contrário.

### 2.2.3 XCOR

Conforme colocamos anteriormente, XCOR funcionará como o *gerente* da restauração. Nele se decide, em cada iteração do algoritmo principal, se (2.5 – 2.7) foi atendido satisfatoriamente, podemos considerar que o ponto corrente  $x_c = x_c^{(k)}$  foi encontrado, e passar a procurar um passo na direção tangente às restrições, ou se ainda precisamos encontrar um ponto mais próximo da factibilidade com REST, nesta iteração de CDR .

Como a obtenção de  $x_c$  estará vinculada à atualização de  $h$ , do jacobiano de  $h$  e do gradiente projetado  $\mathcal{g}$  em  $x_c$  , “gerenciaremos” também, em XCOR, a convergência do algoritmo principal.

#### XCOR

Supondo que XCOR seja chamado na  $k$ -ésima iteração do algoritmo principal, CDR , podemos interpretar os dados iniciais de XCOR por :

- $x$  – Corresponde a  $x^{(k)}$ , ponto inicial da  $k$ -ésima iteração de CDR.
- $\rho$  – Corresponde ao “raio do cilindro de confiança”,  $\mathcal{C}_{k-1}$ , em  $x_c^{(k-1)}$  .
- $\rho_{max}$  – Corresponde a um limite superior para o “raio” do cilindro de confiança .
- $h$  – Corresponde a  $h(x^{(k)})$ .
- $A$  – Corresponde ao jacobiano de  $h$ , no ponto  $x_c^{(k-1)}$ , em CDR.
- $\rho_{tol}$  e  $\epsilon_{tol}$  –  $x_c$  é declarado solução de MRI, caso  $\|h(x_c)\| \leq \rho_{tol}$  e  $n_{\mathcal{g}} \leq \epsilon_{tol}$

Caso bem sucedido, XCOR tem duas saídas:

- Devolver em  $x$  a solução de MRI, na tolerância dada.
- Devolver  $x$  e  $\rho$ , satisfazendo  $\|h(x)\| \leq \rho = O(\|gp(x)\|)$  .

#### P0 – Inicialização

Escolha entre restaurar em P4 e seguir para P1.

#### P1 – Atualização de $A$ e $\mathcal{g}$

Faça  $h \leftarrow h(x)$  ;  $A \leftarrow h'(x)$  ;  $g \leftarrow g(x)$  ;  $\mathcal{g} \leftarrow gp(x)$  e  $n_{\mathcal{g}} \leftarrow \frac{\|\mathcal{g}\|}{\|g\| + 1}$

#### P2 – Testando a convergência do algoritmo principal

Se  $\|h\| \leq \rho_{tol}$  e  $n_{\mathcal{g}} \leq \epsilon_{tol}$  , RETORNE.

Se  $\|h\| \geq \rho_{tol}$  e  $n_{\mathcal{g}} \leq \epsilon_{tol}$  , vá para P4.

#### P3 – Salvaguarda para compatibilização entre $\rho$ e $\|\mathcal{g}\|$

a – Faça  $\beta_{\rho} = \min\{10^3 n_{\mathcal{g}} \rho_{max}, \rho_{max}/2\}$

- b – Escolha  $\rho \in [10^{-3}n_{\varphi}\rho_{max}, \beta_{\rho}]$
- c – Se  $\|h\| < \rho$ , RETORNE.

#### P4 – Restauração

- a – Escolha  $\theta_{max} \in [0, .95]$ ,  $\tilde{\rho} \in [10^{-3}\|h\|, \|h\|/2]$
- b – Aplique REST a  $(x, \tilde{\rho}, \theta_{max})$ , para obter um novo  $x$ .
- c – Se REST fracassou, RETORNE. Senão vá para P1.

#### OBSERVAÇÃO 2.2.3 –

- i – Veja que  $[10^{-3}n_{\varphi}\rho_{max}, \beta_{\rho}] \neq \Phi$ , sempre. Supondo que REST não fracassa, obtemos ainda que:
  - i.a – Se  $\|h(x)\| \leq 10^{-3}n_{\varphi}\rho_{max}$ , então XCOR termina.
  - i.b – Se  $\|h(x)\| \geq \beta_{\rho}$ , REST será novamente acionado.
  - i.c – Temos toda a liberdade de escolher entre retornar a REST, ou terminar a primeira etapa, caso  $10^{-3}n_{\varphi}\rho_{max} < \|h(x)\| < \beta_{\rho}$ .
- ii – Ao se inicializar XCOR em P0, dispomos de  $x = x^{(k)}$ ,  $A = h'(x_c^{(k-1)})$ ,  $\rho = \rho_c^{(k-1)}$ , e temos duas opções, quanto a forçar uma restauração em P0.b, com os dados disponíveis:
  - ii.a – Se  $x^{(k)}$  não ameaçou sair do cilindro de confiança da iteração anterior, por exemplo  $\|h(x^{(k)})\| < \frac{1}{2}\rho_c^{(k-1)}$ , e não há nenhuma indicação de estarmos chegando perto de um ponto estacionário para MRI, é o caso de se apostar que não será necessária nenhuma restauração na  $k$ -ésima iteração de CDR, desprezar os dados de  $x_c^{(k-1)}$ , e seguir para a atualização a ser feita em P1. O risco, neste caso, é descobrir, em P3, que uma restauração precisa ser feita, depois de gastar uma atualização de  $A$  e calcular  $\varphi$ .
  - ii.b – Caso contrário, frequentemente será melhor apostar que uma restauração pode ser necessária, ou pelo menos útil, na iteração em questão. Além disto, ela é relativamente barata de se tentar, uma vez dada a fatoração de  $A$ . Portanto, a possibilidade de propor uma restauração, sem atualização do jacobiano verdadeiro, nos parece importante para a eficiência do algoritmo principal, pelo menos em casos onde a não linearidade de  $h$  seja “decente”. Perto da solução, esperamos bruscas reduções de  $n_{\varphi}$ . Ao analisarmos a convergência local, ficará mais claro que, poder iniciar XCOR restaurando com os dados de  $x_c^{(k-1)}$ , é um ingrediente fundamental para a eficiência do algoritmo perto da solução.
- iii – O ideal seria conseguir fazer todas as restaurações usando os dados da iteração anterior, disponíveis em P0.c, de modo a ter que fazer, em cada iteração de CDR, apenas a atualização de  $A$  por  $h'(x)$  necessária para a segunda etapa. Isto nem sempre será possível, pois REST pode ficar ineficiente, sem uma atualização de  $A$  pelo jacobiano verdadeiro, longe da solução. Nossa expectativa é que, se  $\rho_{max}^{(0)}$  for bem calibrado antes de iniciar o algoritmo principal, poucas vezes se fará necessário atualizar  $A$  duas vezes, numa mesma iteração de CDR, e só muito raramente mais de duas. Isto se confirmará nos testes numéricos analisados no capítulo 4.

## 2.3 CDR

CDR funciona como o algoritmo principal. Nele se descreve a segunda etapa de uma iteração típica, na qual se procura dar um passo “próximo” ao nível  $\mathcal{H}_c$ , e que produza uma redução significativa no Lagrangeano.

A  $k$ -ésima iteração de CDR dispõe inicialmente de:

- $\rho_{tol} \geq 0$  – Tolerância admissível para a factibilidade na solução .
- $\varepsilon_{tol} \geq 0$  – Tolerância admissível associada ao gradiente projetado na solução .
- $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  – Ponto inicial da iteração.
- $\lambda^{(k-1)} \in \mathbb{R}^m$  – Multiplicador de Lagrange definido na iteração anterior.
- $\rho_c \in \mathbb{R}$  – ”Raio do cilindro de confiança”  $C_{k-1}$  em  $x_c^{(k-1)}$ .
- $\rho_{max} \in \mathbb{R}$  – Limite superior para o ”raio do cilindro de confiança” .
- $L_c^- \in \mathbb{R}$  – Valor de  $L(x_c^{(j)}, \lambda^{(j)})$ , em alguma iteração anterior, conforme critério estabelecido no passo 4.b.
- $\Delta L_H^- \in \mathbb{R}$  – Variação “Horizontal” do Lagrangeano na iteração anterior
- $A_c \in \mathbb{R}^{m \times n}$  – Valor de  $h'(x_c^{(k-1)})$ .
- $\Delta \geq \Delta_{min} > 0$  – Raio da região da confiança.

Na iteração inicial devemos dispor de  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ,  $A_c = h'(x^{(0)})$ , e  $\rho_{max} > 0$ . Valores iniciais típicos para as demais variáveis e parâmetros seriam  $\lambda^{(-1)} = 0$ ,  $\rho_c = \rho_{max}/2$ ,  $L_c^- = \Delta L_H^- = 10^{100}$ ,  $\rho_{tol} = 10^{-5}$ ,  $\varepsilon_{tol} = 10^{-5}$ ,  $\Delta_{min} = 10^{-4}$

Podemos descrever a  $k$ -ésima iteração de CDR por:

**Passo 1.** Atualização de  $x_c, \rho_c$  e do modelo quadrático associado:

a) Obtenha  $\rho_c$ ,  $x_c$ ,  $A_c$ ,  $g_c$  e  $\varphi_c$  aplicando XCOR a  $x^{(k)}$ ,  $\rho_c$ ,  $\rho_{max}$ ,  $A_c$ ,  $\rho_{tol}$  e  $\varepsilon_{tol}$ .

Se XCOR retornou no Passo 2, pare, aceitando  $x_c$  como solução

Se XCOR retornou no Passo 4.c, pare, decretando fracasso na restauração.

b) Escolha uma matriz simétrica  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  e considere:

$$q(\delta) = g_c^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta \quad (2.16)$$

**Passo 2.** Definição do ponto candidato  $x_+$ 

- a) Ache  $\delta_t$ , aplicando DS a  $(x_c, q, \mathcal{P}_c, \Delta, A_c)$ , e escolha  $\lambda_+ \in \mathbb{R}^m$
- b) Escolha  $\delta_{soc} = A_c^T \mu_{soc}$ , e faça  $\delta_+ = \delta_t + \delta_{soc}$ ,  $x_+ = x_c + \delta_+$ .

**Passo 3.** Testando  $x_+$ :

Faça

$$\Delta L_H = L(x_+, \lambda_+) - L(x_c, \lambda_+) \quad (2.17)$$

$$r = \frac{\Delta L_H}{q(\delta_t)} \quad (2.18)$$

Se

$$\|h(x_+)\| > 2\rho_c \text{ ou } r < 10^{-4} \quad (2.19)$$

Então faça  $\Delta \leftarrow \Delta/2$  e vá para o Passo 2.a.

**Passo 4.** Atualização

Faça  $\Delta L_V^- = L(x_c, \lambda_+) - L(x^{(k)}, \lambda^{(k-1)})$

a) Se

$$\Delta L_V^- \geq \frac{1}{2}(L_c^- - L(x^{(k)}, \lambda^{(k-1)})) \quad (2.20)$$

então faça  $\rho_{max} \leftarrow \rho_{max}/2$ ,

b) Se

$$\Delta L_V^- > -\frac{1}{2}\Delta L_H^- \quad (2.21)$$

então faça  $L_c^- \leftarrow L(x_c, \lambda_+)$ .

- c) Faça  $k \leftarrow k + 1$ ;  $x^{(k)} \leftarrow x_+$ ;  $\lambda^{(k-1)} \leftarrow \lambda_+$ ;  $\Delta L_H^- \leftarrow \Delta L_H$
- d) Escolha  $\Delta \geq \Delta_{min}$  e vá para o Passo 1.

**OBSERVAÇÃO 2.3.1** -

i - Há tres escolhas naturais para  $\lambda_+$  em P2.a:

- $\lambda_+ = 0$ , correspondente a usar a própria  $f$  como função de mérito.
- $\lambda_+ = \lambda_{LS}(x_c)$ , denominado multiplicador de quadrados mínimos.
- $\lambda_+$  definido como o multiplicador de Lagrange no minimizador do modelo quadrático utilizado.

ii - Há tres variações importantes de  $L$ , cuja notação gostaríamos de fixar:

- ii.1-  $\Delta L_H^{(k)} = L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)}) - L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)})$  – “Descida Horizontal suficiente” no Lagrangeano, garantida em P3.
- ii.2-  $\Delta L_V^{(k)} = L(x_c^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}) - L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)})$  – Variação “Vertical” no Lagrangeano, devida a atualização de multiplicadores, bem como a possíveis restaurações, na iteração  $(k + 1)$ .
- ii.3-  $\Delta L_c^{(k)} = L(x_c^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}) - L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)})$  – Variação corrente do Lagrangeano.

Observe que

$$\Delta L_c^{(k)} = \Delta L_H^{(k)} + \Delta L_V^{(k)} \quad (2.22)$$

O objetivo do passo é conquistar uma “descida suficiente” em  $\Delta L_c^{(k)}$ , mas só a temos garantida em  $\Delta L_H^{(k)}$ . A variação  $\Delta L_V^{(k)}$  pode ser positiva e vai depender fundamentalmente de  $\rho_c$ . O controle de  $\rho_{max}$  se processa em P4.a e P4.b, em função de quanto  $\Delta L_V^{(k)}$  sobe, relativamente à descida no Lagrangeano conquistada desde um valor de referência  $L_c^- = L(x_c^{(k^-)}, \lambda^{(k^-)})$ , fixado em alguma iteração  $k^-$  anterior. Caso a subida em  $\Delta L_V^{(k)}$  destrua, ou ameace “fortemente”, a descida conquistada desde  $k^-$ , diminua-se  $\rho_{max}$  e atualiza-se o valor de  $L_c^-$ . Caso isto não aconteça, mas  $\Delta L_V^{(k)}$  destrua, ou ameace fortemente, apenas a descida  $\Delta L_H^{(k)}$  conquistada na  $k$ -ésima iteração, atualiza-se apenas  $L_c^-$ . Nossa expectativa é que ao controlarmos  $\rho_{max}$ , estaremos controlando  $\Delta L_V^{(k)}$ . Desta forma se propiciaria, também a  $\Delta L_c^{(k)}$ , uma “descida suficiente”. Ainda nesta seção voltamos a este ponto para tentar esclarecê-lo um pouco mais.

O lema a seguir mostra que, para  $j \geq 1$ , se  $\rho_{max}$  não se altera nas iterações de ordem  $k + 1, \dots, k + j + 1$ , então consegue-se garantir para  $\Delta L_c^{(k, k+j)} = L(x_c^{(k+j+1)}, \lambda^{(k+j+1)}) - L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) = \sum_{i=k}^{k+j} \Delta L_c^{(i)}$ , uma descida proporcional à soma das descidas conquistadas nos passos Horizontais correspondentes.

**LEMA 2.3.1** *Se  $\rho_{max}^{(k)}/2 = \rho_{max}^{(k+1)} = \dots = \rho_{max}^{(k+j+1)}$ , para  $j \geq 1$ , então*

$$\begin{aligned} \Delta L_c^{(k, k+j)} &= L(x_c^{(k+j+1)}, \lambda^{(k+j+1)}) - L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) = \\ \sum_{i=k}^{k+j} \Delta L_c^{(i)} &\leq \frac{1}{4} \sum_{i=k}^{k+j} \Delta L_H^{(i)} \end{aligned} \quad (2.23)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Vamos mostrar inicialmente que, se  $L_c^-$  é atualizado na iteração  $\hat{k}$ , mas não em  $\hat{k} + 1, \dots, \hat{k} + \hat{j} < k + j + 1$ , para  $j \geq 1$ , então

$$\sum_{i=\hat{k}}^{\hat{k}+\hat{j}} \Delta L_c^{(i)} \leq \frac{1}{4} \sum_{i=\hat{k}}^{\hat{k}+\hat{j}} \Delta L_H^{(i)} \quad (2.24)$$

Como não há atualização de  $L_c^-$  em  $\hat{k} + 1, \dots, \hat{k} + \hat{j}$ , P4.b e (2.22) garantem

$$L(x_c^{(\hat{k}+\hat{j})}, \lambda^{(\hat{k}+\hat{j})}) - L_c^- = \sum_{i=\hat{k}}^{\hat{k}+\hat{j}-1} \Delta L_c^{(i)} \leq \frac{1}{2} \sum_{i=\hat{k}}^{\hat{k}+\hat{j}-1} \Delta L_H^{(i)} \quad (2.25)$$

Como estamos incluindo em 2.24, a possibilidade de haver atualização de  $L_c$  na iteração  $\hat{k} + \hat{j} + 1 \leq k + j + 1$ , precisamos estimar também  $\Delta L_c^{(\hat{k}+\hat{j})}$ . Como  $\rho_{max}$  não se altera na iteração  $\hat{k} + \hat{j} + 1$ , P4.a garante

$$\Delta L_V^{(\hat{k}+\hat{j})} = L(x_c^{(\hat{k}+\hat{j}+1)}, \lambda^{(\hat{k}+\hat{j}+1)}) - L(x^{(\hat{k}+\hat{j}+1)}, \lambda^{(\hat{k}+\hat{j})}) < \frac{1}{2}(L_c^- - L(x^{(\hat{k}+\hat{j}+1)}, \lambda^{(\hat{k}+\hat{j})})) \quad (2.26)$$

e, por conseguinte,

$$L(x_c^{(\hat{k}+\hat{j}+1)}, \lambda^{(\hat{k}+\hat{j}+1)}) - L_c^- \leq \frac{1}{2}(L(x^{(\hat{k}+\hat{j}+1)}, \lambda^{(\hat{k}+\hat{j})}) - L_c^-) = \frac{1}{2}(\Delta L_H^{(\hat{k}+\hat{j})} + L(x_c^{(\hat{k}+\hat{j})}, \lambda^{(\hat{k}+\hat{j})}) - L_c^-) \quad (2.27)$$

(2.25) e (2.27) garantem (2.24). Se não houver nenhuma outra atualização de  $L_c^-$  entre as iterações  $k$  e  $k + j + 1$ , (2.24) garante o lema. Caso  $k_1^- = k < k_2^- < \dots < k_s^- \leq k + j + 1$ , correspondam às iterações nas quais houve atualização de  $L_c^-$ , (2.24) nos permite concluir:

$$\begin{aligned} \Delta L_c^{(k,k+j)} &= \sum_{i=1}^{s-1} \sum_{\ell=k_i^-}^{k_{i+1}^- - 1} \Delta L_c^{(\ell)} + \sum_{\ell=k_s^-}^{k+j} \Delta L_c^{(\ell)} \\ &\leq \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{s-1} \sum_{\ell=k_i^-}^{k_{i+1}^- - 1} \Delta L_H^{(\ell)} + \frac{1}{4} \sum_{\ell=k_s^-}^{k+j} \Delta L_H^{(\ell)} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i=k}^{k+j} \Delta L_H^{(i)} \end{aligned}$$

□

### OBSERVAÇÃO 2.3.2 --

A – Ao descrevermos informalmente CDR na seção 2.1, ressaltamos a importância de  $\rho_{max}$  como o parâmetro responsável pela qualificação “de confiança”, dada aos cilindros de raio  $\rho_c^{(k)}$ , no sentido que, o “comportamento” da  $f$ , nas superfícies de nível neles contidas, deve refletir o “comportamento” da  $f$  no nível 0. Pretendemos concretizar algorítmicamente tal idéia com a atualização de  $\rho_{max}$  proposta em P4.a.

Para fixar idéias, usemos a própria  $f$  como função de mérito para avaliar o passo, vale dizer, façamos  $\lambda_+ = 0$  em todas as iterações. Neste caso, pelo que está disposto em P4.b, para que haja redução de  $\rho_{max}$  na  $k$ -ésima iteração, é necessário que nela se realize uma restauração, na qual a  $f$  consuma, pelo menos, metade da descida conquistada desde a restauração realizada em  $x_c^-$ . Ou seja:

$$f(x_c^{(k)}) - f(x^{(k)}) \geq \frac{1}{2}(f_c^- - f(x^{(k)})) \quad (2.28)$$

Equivalentemente, poderíamos escrever que em  $x_c^{(k)}$  faz-se uma diminuição de  $\rho_{max}$ , caso no ponto restaurado  $x_c^{(k)}$ , a  $f$  valha mais do que seu valor médio entre a última restauração  $x_c^-$  e  $x^{(k)}$ . Ou seja,

$$f(x_c^{(k)}) \geq \frac{1}{2}(f_c^- + f(x^{(k)})) \quad (2.29)$$

Consideremos ainda que  $x_c^- = x_c^{(k-)}$  e  $x_c = x_c^{(k)}$  sejam pontos correntes, em iterações de ordem  $k_- < k$  de CDR, nas quais foram realizadas restaurações, e que nas iterações entre  $k_-$  e  $k$  não foram realizadas restaurações. Portanto, entre  $x_c^-$  e  $x_c^{(k)}$ , todos os passos foram dados no sentido de reduzir significativamente a  $f$  nos respectivos níveis correntes de  $h$ , e que a restauração de  $x_c^{(k)}$  a  $x_c^-$  tenta obter  $x_c^{(k)}$  “perto” de  $x_c^-$ . Podemos entender ainda que  $x_c^-$  e  $x_c^{(k)}$  estão relativamente próximos de  $\mathcal{H}_0$ , já que passaram por uma restauração. Portanto, se o “comportamento” da  $f$ , restrita a dois níveis contidos em cilindros com a mesma “confiabilidade”  $\rho_{max}$ , forem parecidos, tudo deveria se passar como se entre  $x_c^-$  e  $x_c^{(k)}$  tivéssemos caminhado num nível mais próximo da factibilidade, e que a  $f$  tenha igualmente descido significativamente entre  $x_c^-$  e  $x_c^{(k)}$ .

Isto equivale a pensar que, se  $\mathcal{C}_{\rho_{max}}$  delimita um cilindro de confiança, uma possível subida da  $f$  entre  $x_c^{(k)}$  e  $x_c^-$  na restauração, não deveria atrapalhar a descida “significativa” conquistada entre  $x_c^-$  e  $x_c^{(k)}$ . O que está disposto em P4.a é que, se a  $f$  subir na restauração para  $x_c^k$ , mais do que a metade da descida conquistada entre  $x_c^-$  e  $x_c^{(k)}$ , então reduzimos  $\rho_{max}^{(k)}$  à metade. Na próxima seção mostraremos que este conceito funciona teoricamente, no sentido que, enquanto o gradiente projetado  $\varphi_c^{(k)}$  ficar uniformemente “longe” de zero,  $\rho_{max}^{(k)}$  também ficará. Equivalentemente, *haverá espaço para dar passos de “descida suficiente”*.

B – Formalmente, permitimos qualquer valor positivo para  $\rho_{max}$  ao iniciar CDR. Na prática, veremos que valores de  $\rho_{max}$  excessivamente grandes podem tornar o algoritmo muito ineficiente. Além disto, poderemos ter problemas com a restauração, se quisermos aplicar REST com  $\|h(x^{(0)})\| \gg 0$ . Isto será discutido, mais detalhadamente, à luz dos dados numéricos que disporemos no capítulo 4. Para a situação na qual  $\|h(x^{(0)})\| \gg 0$ , a implementação de CDR que testaremos no capítulo 4 será precedida por um algoritmo tipo *Fase 1*. A preocupação central na *Fase 1* é com a factibilidade, visando garantir um novo  $x^{(0)}$ , para o qual possamos ter  $\|h(x^{(0)})\| < \rho_{max}^{(0)}/2$  e um  $\rho_{max}^{(0)}$  “bem calibrado”.

Os valores que indicamos como típicos para os parâmetros e condições iniciais das variáveis, correspondem aos que adotamos nos testes discutidos no capítulo 4. Os valores iniciais para  $\lambda^{(-1)}$ ,  $L_c^-$  e  $\Delta L_H$  são definidos de forma que  $\rho_{max}$  não se altere na primeira iteração de CDR, bem como a fixar  $L_c^- = L(x^{(1)}, \lambda^{(0)})$  ao seu final.

C – Em P2 de CDR, exigimos que um passo candidato satisfizesse

$$q(\delta_t) \leq \nu q(\delta_{PC}), \quad (2.30)$$

com  $\nu = .1$  em DS. No sentido do comentário feito no parágrafo imediatamente anterior à seção §2.1, qualquer outro valor de  $\nu > 0$  serviria neste caso. Vale ressaltar a possibilidade de se obter  $\delta_t$ , satisfazendo DS implicitamente. Ou seja, para alguma constante  $\nu_0 > 0$ , poderemos garantir, implicitamente, (2.30) com  $\nu > \nu_0 > 0$ , *sem contudo estabelecer a priori qual o valor para  $\nu$* . Toda a teoria que se segue permaneceria válida neste caso.

D – Uma vez que vamos assumir  $f$  e  $h$  de classe  $C^2$ , a exigência que se comece cada iteração com  $\Delta \geq \Delta_{min}$  é, provavelmente, dispensável do ponto de vista teórico, desde que adotemos uma estratégia adequada de atualização para  $\Delta$ . Incluímos tal exigência, afim de evitarmos complicações desnecessárias, para os nossos objetivos, e cujo tratamento se dá de forma “razoavelmente standard” .

## 2.4 CONVERGÊNCIA GLOBAL DE CDR

Para obtermos resultados teóricos sobre CDR, precisaremos formular algumas hipóteses básicas. A literatura recente sobre convergência global de algoritmos “tipo PQS” para MRI (vide [BSS 87], [PY 89], [Ale 89], [DEM]), tem apresentado um conjunto de hipóteses, com formulações ligeiramente diferenciadas de autor para autor, frequentemente denominadas de “standard”, e que poderíamos classificar em tres categorias:

### A – HIPÓTESES SOBRE OS DADOS

Tipicamente,  $f$  e  $h$  são de classe  $C^2$ .

### B – HIPÓTESES SOBRE A IMPLEMENTAÇÃO

Aqui, em geral se colocam limitações, geralmente razoáveis, sobre a implementação do algoritmo. Uma hipótese típica sobre a implementação, seria exigir *aproximações  $B^{(k)}$  dos hessianos uniformemente limitadas*.

### C – HIPÓTESES SOBRE OS ITERADOS

Há, basicamente, dois tipos distintos de hipóteses sobre os iterados de algoritmos PQS para MRI, aparecendo nas formulações “standard”:

#### C.i – Hipótese de Compacidade – (HC)

Usualmente, se pede que a *sequência  $\{x^{(k)}\}$  gerada pelo algoritmo permaneça limitada*

#### C.ii – Hipótese de Regularidade – (HR)

A hipótese de regularidade impõe que, *a sequência gerada permaneça uniformemente afastada do conjunto singular  $\Sigma_h$* , e tipicamente se formula exigindo algo do tipo

$$\|(h'(x^{(k)})h'(x^{(k)})^T)^{-1}\| = O(1)$$

As hipóteses sobre os dados e sobre a implementação, comportam muitas variações, algumas ligeiramente menos restritivas que outras. Via de regra, são bastante claras e “razoáveis”. Elas correspondem a hipóteses a priori, seja sobre os dados do problema, seja sobre a forma de resolvê-lo. Já as hipóteses sobre os iterados, têm a perigosa característica de hipóteses “ex-post”, ou seja, são hipóteses sobre o resultado da aplicação do algoritmo. A hipótese sobre a compacidade, HC, apesar de usualmente formulada sobre os iterados obtidos nos algoritmos, fica garantida sob a hipótese de compacidade das superfícies de nível da  $h$ . Além disto, tem uma forte probabilidade de resultar na prática, se assumimos que a  $f$  é própria, ou seja, se  $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = \infty$ . † Por outro lado, nos parece impossível dizer algo relevante sobre  $\{x^{(k)}\}$ , se permitimos que  $\|x^{(k)}\| \rightarrow \infty$ . Neste sentido, HC pode ser considerada como uma hipótese a priori, bastante “razoável” sobre os dados do problema. A vantagem de formulá-la como hipótese sobre os iterados, em vez de como hipótese sobre os dados, é poder fazer uma formulação mais geral, e que englobe pelo menos duas situações diferentes e significativas, nas quais hipóteses sobre os dados a garantem, ou pelo menos sugerem fortemente.

† Nos nossos testes numéricos, encontramos uma situação que nos parece pouco comum, na qual aplicamos um algoritmo PQS a uma função própria, começando num ponto “próximo” do conjunto factível, e gerando uma sequência de iterados aparentemente divergindo para  $\infty$ , em norma. Na ocasião oportuna comentaremos este exemplo. Acreditamos que isto seja bem mais difícil de acontecer com CDR.

Muito diferente é a situação da hipótese HR, para métodos nos quais se pretenda não andar colado à factibilidade.

Para simplificar o argumento que se segue, suponhamos que todas as superfícies de nível de  $h$  sejam compactas, e  $h$  seja  $C^\infty$ . Conforme argumentamos na §2.1.1, o teorema de Sard nos permite, informalmente, pensar que dado um nível qualquer de  $h$ , digamos  $\mathcal{H}_0$ , é “pouco provável” que haja pontos singulares de  $h$  numa vizinhança suficientemente pequena de  $\mathcal{H}_0$ . No entanto, o mesmo não se pode dizer num domínio  $D$ , pré-fixado. Ou seja, nos parece extremamente artificial supor que fixado um domínio  $D$ , a priori, ele não venha a ter pontos do conjunto singular  $\Sigma_h$ .<sup>§</sup> Por exemplo, em [PY 89], Powell e Yuan definem um algoritmo “típico” da família PQS, para MRI com região de confiança, no qual, além de assumir suficiente diferenciabilidade para  $f$  e  $h$ , suas hipóteses básicas definidas na seção 3.1 do referido artigo se formulam como:

- (a) Existe um conjunto convexo e compacto  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ , tal que  $x_k$  e  $x_k + d_k$  estão em  $\Omega$ , para todo  $k$ .
- (b)  $h'(x)$  tem posto máximo para todo  $x \in \Omega$
- (c) As matrizes  $\{B_k : k = 1, 2, 3, \dots\}$  são uniformemente limitadas.

Veja que nesta formulação, há o cuidado de só definir hipóteses referentes a dados do problema. A hipótese de compacidade vem em (a), e seus autores têm a preocupação de justificá-la no texto. A hipótese de regularidade em (b), vem aparentemente na forma de uma hipótese sobre o domínio convexo  $\Omega$ , e não sobre os iterados. A exigência de convexidade sobre  $\Omega$ , talvez até pudesse ser dispensada, ou pelo menos bastante amenizada ali. Mesmo sem considerar  $\Omega$  convexo, uma formulação que exija regularidade sobre todo  $\Omega$ , nos parece absurdamente restritiva, para um método que se justifica, em boa parte, por não andar colado às restrições.

Poderia se pensar, no entanto, se não houver uma exigência forte de convexidade, que o domínio  $D$  não está fixado a priori, e que para cada  $h$ , o domínio que interessa é  $D - V_{\Sigma_h}$ , onde  $V_{\Sigma_h}$  é alguma vizinhança fechada de  $\Sigma_h$ . Isto nos garantiria HR em  $D - V_{\Sigma_h}$ . O que nos parece complicar definitivamente este quadro, é que alguns pontos singulares de  $h$ , não factíveis, podem funcionar como “atratores” de  $x^{(k)}$ . Por exemplo, se  $x^*$  for um “bom minimizador” não factível de  $\varphi(x) = \|h(x)\|^2/2$ , e  $f$  for uma função constante, ao iniciarmos em  $x_0$ , suficientemente próximo de  $x^*$ , tanto o nosso algoritmo, como qualquer algoritmo típico da família PQS, geraria uma sequência convergindo a  $x^* \in \Sigma_h$ , conforme já havíamos observado em F1.2 da §2.1.1. Ou seja, HR assume, ex-post, um resultado praticamente impossível de se estabelecer a priori, para alguma classe de funções importante, se pensamos em domínios

<sup>§</sup> Considere para cada  $h \in C^1(D, \mathbb{R}^m)$  o seu 1-jato, ou seja  $j^1(h) : D \rightarrow L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ , dada por  $j^1(h)(x) = h'(x)$ . Neste contexto,  $\Sigma_h = j^1(h)^{-1}(\Sigma_1)$ , onde  $\Sigma_1$  é o conjunto das matrizes que não têm posto  $m$ . Não é difícil ver que,  $\Sigma_1$  é uma subvariedade diferenciável de  $L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ , de codimensão  $n - m + 1$  (vide [Soto 76, pg 14]). Com o teorema de transversalidade, (vide [Soto 76],[Hir 76]) obtemos, neste caso, para “um subconjunto aberto e denso” de funções  $h$ , que  $\Sigma_h \cap D$ , ou bem é vazia, ou uma subvariedade de mesma codimensão  $n - m + 1$  que  $\Sigma_1$ , em  $L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ . Além do mais, isto se dá de forma estável. Ou seja, se  $h$  estiver neste conjunto, e  $\Sigma_h \cap D$  for não vazia, então o mesmo acontece para as funções próximas de  $h$  em  $C^1(D, \mathbb{R}^m)$ . Esta persistência de  $\Sigma_h \cap D$ , é uma das razões que nos faz considerar artificial supor HR, ou seja,  $\Sigma_h \cap D = \emptyset$ . Na prática, tentar definir domínios amplos no  $\mathbb{R}^n$  que excluam as singularidades de  $h$ , corresponde a evitar superfícies com dimensão  $(m - 1)$ , que só não existirão para escolhas muito particulares de  $h$ .

mais amplos que alguma vizinhança, possivelmente “bem pequena”, do conjunto factível. Neste sentido podemos considerá-la inadequada, teoricamente, para algoritmos tipo PQS, que pretendem tirar proveito de não se restringir a alguma vizinhança pequena da factibilidade.

Ao analisar um algoritmo típico da família PQS, em [GMM 95], sem assumir a fatídica hipótese “*standard*” de regularidade para  $h'(x)$  ao longo dos iterados, seus autores obtêm uma propriedade de convergência global, para pontos de um conjunto  $\Sigma_{MRI}$ , que denominaremos de conjunto crítico do problema.  $\Sigma_{MRI}$  tem duas componentes. Uma, “boa”, formada pelos pontos de Kuhn-Tucker  $\Sigma_{KT}$  para MRI, e outra, “má”, formada pelo que consideramos (com algum abuso), como o conjunto crítico de  $\varphi(x)$ . O conjunto crítico  $\Sigma_\varphi$ , é formado pelos pontos críticos de  $\varphi(x)$  não factíveis, bem como pelos pontos singulares e factíveis de  $h$ . Aproveitamos a oportunidade, para detalhar a definição destes conjuntos:

a - CONJUNTO CRÍTICO DE  $\varphi(x) = \|h(x)\|^2/2$

A rigor, o conjunto crítico de  $\varphi(x)$  deveria, talvez, ser definido como o conjunto dos pontos nos quais  $\nabla\varphi(x) = h'(x)^T h(x) = 0$ . Neste sentido, todo o conjunto factível deveria estar nele. Vamos cometer um pequeno abuso, e excluir de nossa definição os pontos factíveis e regulares de  $h$ . Ou seja, definimos

$$\Sigma_\varphi^{INFAC} = \{x : h(x)'h(x) = 0 \text{ e } h(x) \neq 0\} \quad (2.31)$$

$$\Sigma_\varphi^{FAC} = \{x : h(x) = 0\} \cap \Sigma_h \quad (2.32)$$

$$\Sigma_\varphi = \Sigma_\varphi^{FAC} \cup \Sigma_\varphi^{INFAC} \quad (2.33)$$

b - CONJUNTO DOS PONTOS CRÍTICOS PARA MRI

O conjunto dos pontos críticos do problema, será então formado por  $\Sigma_\varphi$ , e pelos pontos estacionários (de Kuhn-Tucker) para MRI, ou seja:

$$\Sigma_{KT} = \{x : x \text{ é ponto de Kuhn-Tucker para MRI}\} \quad (2.34)$$

$$\Sigma_{MRI} = \Sigma_\varphi \cap \Sigma_{KT} \quad (2.35)$$

Neste contexto, a propriedade de convergência global obtida em [GMM], pode ser descrita dizendo que, se não houver nenhum ponto estacionário, no qual a sequência gerada pelo algoritmo se acumule, então este fracasso implica na existência de iterados, ou de pontos de acumulação dos iterados em  $\Sigma_\varphi$ . A formulação em [GMM] tem duas vantagens importantes:

- i - É mais geral do que a formulação considerada *standard*, no sentido de não exigir que os iterados estejam uniformemente afastados do conjunto  $\Sigma_h$ , formado pelos pontos singulares de  $h$ , mas apenas de  $\Sigma_\varphi \subset \Sigma_h$ . Por exemplo, na formulação [GMM], é admissível que um iterando  $z$  seja um ponto singular de  $h$ , desde que  $\nabla\varphi(z) = h'(z)^T h(z) = 0$ .
- ii - É mais transparente, no sentido de não varrer para debaixo do tapete, com uma hipótese artificial, a possibilidade concreta de fracasso do algoritmo, na sua busca de pontos estacionários para MRI.

Isto evidentemente não supera a realidade dura, de não se poder garantir, a priori, soluções para MRI, ao se começar longe da factibilidade. Até porque, mesmo que existam pontos factíveis, garantir que eles possam ser atingidos com algoritmos como o nosso, ou “tipo PQS”, corresponde a supor que sempre poderemos resolver, algoritmicamente, o problema de achar minimizadores globais de  $\varphi(x) = \|h(x)\|^2/2$ , com algoritmos “tipo REST”, e isto é

impossível.

Nossa formulação para CDR vai na mesma direção apontada em [GMM], ao não supor HR, ou seja, ao não supor que os pontos gerados em CDR estejam uniformemente afastados do conjunto singular  $\Sigma_h = \{x : h'(x) \text{ não tem posto máximo}\}$ . Estabeleceremos, nesta seção, os dois principais resultados a respeito de CDR, supondo algumas hipóteses a serem colocadas na §2.4.1. No primeiro, se garante a "boa definição" possível, estabelecendo que CDR só pare em pontos críticos para MRI, no sentido da definição acima. No segundo, garantimos que toda sequência gerada por CDR tem pontos de acumulação no conjunto *crítico para MRI*, ou seja,  $\Sigma_{MRI}$ . Em particular, garante-se a existência de pontos de Kuhn-Tucker entre os pontos de acumulação de uma sequência gerada pelo algoritmo, desde que não haja pontos de acumulação em  $\Sigma_\varphi$ .

Na §2.4.1, introduzimos as hipóteses a serem assumidas, bem como algumas questões de notação. Em 2.4.2 estarão os lemas relativos a REST e XCOR, que garantem a "boa definição" possível para XCOR. Em 2.4.3, demonstramos o lema que nos quantifica a *descida suficiente* a ser obtida em cada iteração, bem como o teorema da "boa definição" possível para CDR, e, em 2.4.4, o lema que nos garante espaço na direção normal, para passos de "descida suficiente" do Lagrangeano, desembocando num resultado de convergência global para CDR.

## 2.4.1 HIPÓTESES ASSUMIDAS E NOTAÇÃO

Começamos com algumas questões de notação, a serem assumidas ao longo da seção 2.4.

### NOTAÇÃO:

- Denotamos por  $x^{(k)}$ , o ponto inicial da  $k$ -ésima iteração de CDR, e por  $z^{(k,j)}$ , o  $j$ -ésimo ponto obtido por REST, na  $k$ -ésima iteração de CDR, considerando  $z^{(k,0)} = x^{(k)}$ . Reservaremos a letra  $x$  aos pontos gerados em CDR, e  $z$  a pontos gerados em REST.
- O índice  $c$ , subscrito a uma variável ( $x_c, p_c, \rho_c, \dots$ ), indicará, sempre, o valor desta variável ao retornar de XCOR, ou seja, medida ao final do Passo 1 de CDR.

Passamos a assumir daqui para a frente, na seção 2.4, as seguintes hipóteses.

**HDIF – HIPÓTESE SOBRE A DIFERENCIABILIDADE DE  $f$  E  $h$**   
 $f$  e  $h$  são de classe  $C^2$ .

**HC – HIPÓTESE DE COMPACIDADE**

Dado  $x^{(0)}$ , existe  $R > 0$  tal que  $\|z^{(k,j)}\| \leq R$ , para todo  $z^{(k,j)}$  gerado numa aplicação de CDR, a partir de  $x^{(0)}$ .

**HB – HIPÓTESE DA LIMITAÇÃO UNIFORME DE  $B$**

Se  $\{B^{(k)}\}$  é a sequência de aproximações hessianas usada numa aplicação de CDR a  $x^{(0)}$ , então existe  $\xi_B > 0$  tal que  $\|B^{(k)}\| < \xi_B$ .

**H $\lambda$  – HIPÓTESE DA LIMITAÇÃO UNIFORME DE  $\lambda$**

Se  $\{\lambda^{(k)}\}$  é a sequência de multiplicadores escolhidos em P2.a de CDR, então existe  $\xi_\lambda > 0$  tal que  $\|\lambda^{(k)}\| < \xi_\lambda$ .

**HSOC – HIPÓTESE SOBRE A CORREÇÃO DE 2<sup>ª</sup> ORDEM  $\delta_{soc}$**

Para cada aplicação de CDR temos:

$$\|\delta_{soc}^{(k)}\| = O(\|\delta_l^{(k)}\|^2)$$

**HA – HIPÓTESE SOBRE A ATUALIZAÇÃO DE A FEITA EM REST**

Existe  $\xi_{atA} > 0$ , tal que, dados  $z^{(k,j)}$  e  $z^{(k,\ell)}$ , então:

$$\|A^{(k,j)} - A^{(k,\ell)}\| \leq \xi_{atA} \|z^{(k,j)} - z^{(k,\ell)}\| \tag{2.36}$$

Observe que, sob HC e HDIF, se  $A^{(k,j)} = h'(z^{(k,j)})$  e  $A^{(k,\ell)} = h'(z^{(k,\ell)})$ , (2.36) se satisfaz, automaticamente, para algum  $\xi_{atA} > 0$ . Ao manter  $A^{(k,\ell)}$  constante, entre duas atualizações consecutivas de A pelo jacobiano verdadeiro, idem. Finalmente, é difícil imaginar um método de atualização decente para A, que não respeite HA.

**HPR – HIPÓTESE SOBRE O PASSO NA RESTAURAÇÃO**

Para cada aplicação de CDR, existe  $\xi_{Rest} > 0$ , tal que :

$$\|z^{(k,j+1)} - z^{(k,j)}\| \leq \xi_{Rest} \|h(z^{(k,j)})\|$$

Uma maneira de garantir HPR, seria forçar  $\Delta \leq \xi_{Rest} \|h\|$  na atualização em P3.c de REST, para algum  $\xi_{Rest}$  “grande”, fornecido a priori. Na maioria das situações de interesse, isto não seria necessário, ou funcionaria como uma salvaguarda a ser muito pouco acionada. Observe que, supondo HC, os passos de Cauchy e Gauss-Newton para  $\varphi(z)$  com  $\Delta = \infty$ ,

$$\begin{aligned} \delta_{PC} &= -\frac{\|A^T h\|^2}{\|AA^T h\|^2} A^T h \\ \delta_{GN} &= -A^T (AA^T)^{-1} h \end{aligned}$$

satisfazem HPR, desde que  $z^{(k,j)}$  permaneça “longe” do conjunto singular de  $h$ , ou seja, que  $\{z^{(k,j)} : j \geq 1\} \cap \Sigma_h = \emptyset$ .

Observe que HDIF é uma hipótese sobre os dados do problema, e HC sobre os iterados do algoritmo, com as atenuantes do comentário feito no início da seção. As demais são hipóteses bastante razoáveis sobre a implementação.

**CONVENÇÕES**

i – Fixemos, por toda a seção 2.4, uma dada aplicação de CDR a  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ , atendendo às hipóteses acima. Serão geradas sequências, em CDR e REST, que denotaremos por:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{(k)} &= \{z^{(k,j)} : 0 \leq j < j_k + 1\} \\ \mathcal{Z} &= \{z^{(k,j)} : 0 \leq k < k_f + 1, 0 \leq j < j_k + 1\} \end{aligned}$$

$0 \leq j_k \leq \infty$  representa o “número” de iterados de REST, na k-ésima iteração de CDR, e  $0 \leq k_f \leq \infty$ , o “número” de iterações de CDR

- ii – A letra  $\xi_j$  indicará uma constante positiva, associada a uma dada aplicação de CDR a um ponto  $x^{(0)}$ , e estará incorporada aos enunciados dos lemas. Já  $\bar{\xi}_j$ , é usada apenas no interior de cada lema, *apagando-se* ao terminar sua demonstração.

### DEFINIÇÃO – SUCESSO EM *XCOR*

Dizemos que *XCOR* é bem sucedido na *k*-ésima iteração de CDR, caso aconteça uma das duas alternativas:

- i –  $Z^{(k)}$  é finita e  $z^{(k,j_k)} \notin \Sigma_\varphi$ .
- ii – Existe  $x^* = \lim_{j \rightarrow \infty} z^{(k,j)}$  e  $x^*$  é estacionário para MRI.

Dizemos ainda que *XCOR* é bem sucedido, caso seja bem sucedido em todas as iterações de CDR.

Podemos entender que há duas possibilidades para CDR, caso *XCOR* seja bem sucedido na *k*-ésima iteração:

- i – *XCOR* tem terminação finita, e gera um ponto não-estacionário para MRI,  $x_c^{(k)} = z^{(k,j_k)}$ . Neste caso, veremos na §2.4.3, que CDR consegue definir  $x^{(k+1)}$  satisfatoriamente.
- ii – Para algum *k*, ou bem *XCOR* termina num ponto estacionário  $z^{(k,j_k)}$ , ou gera uma sequência convergindo para um ponto estacionário de MRI. Neste caso,  $\overline{Z^{(k)}} \cap \Sigma_{KT} \neq \Phi$ , CDR não passa desta *k*-ésima iteração, e podemos dizer que *XCOR* encontrou um ponto estacionário para MRI, na *k*-ésima iteração.

### 2.4.2 BOA DEFINIÇÃO POSSÍVEL PARA *XCOR*

Há situações nas quais *XCOR*, obviamente, não poderá ser bem sucedido. Por exemplo, se MRI não tiver pontos factíveis.

O teorema ao qual nos dedicamos nesta seção, consiste em caracterizar o fracasso em *XCOR* na *k*-ésima iteração, pela existência de iterados de REST, arbitrariamente próximos de  $\Sigma_\varphi$ . Ou seja, se *XCOR* não for bem sucedido na *k*-ésima iteração de CDR, então uma das duas alternativas ocorrerá:

- $z^{(k,j)} \in \Sigma_\varphi$  para algum *j*
- $Z^{(k)} = \{z^{(k,j)}\}_{1 \leq j < \infty}$  se acumula em  $\Sigma_\varphi$ .

Pela observação feita no início da seção, esta é a *boa definição possível*, para *XCOR*. De maneira mais resumida podemos dizer que:

**TEOREMA 2.4.1 BOA DEFINIÇÃO DE *XCOR*** – Se  $\overline{Z^{(k)}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ , então *XCOR* é bem sucedido na *k*-ésima iteração de CDR.

Para demonstrar o teorema, começaremos com dois lemas preliminares, que caracterizam o comportamento de REST, quando chamado em *XCOR*.

Se  $z^{(k,j)} \in \Sigma_\varphi$  podemos estar num minimizador não factível de  $\varphi(x)$ , e nunca conseguir sair de  $z^{(k,j)}$  com REST. Neste sentido a "boa definição" possível para REST é:

**LEMA 2.4.2** Se  $z^{(k,j)} \notin \Sigma_\varphi$ , e  $x_c^{(k)} = z^{(k,j)}$  então REST gera  $z^{(k,j+1)}$  num conjunto finito de iterações, de tal modo que para algum  $\xi_{\Delta\varphi} > 0$  (independente de  $k$ )

$$-\Delta\varphi^{(k,j)} = \frac{1}{2}(\|h(z^{(k,j)})\|^2 - \|h(z^{(k,j+1)})\|^2) \geq \xi_{\Delta\varphi} \|A^{(k,j)T} h(z^{(k,j)})\|^2 \quad (2.37)$$

### DEMONSTRAÇÃO:

Seja  $z^{(k,j)} \notin \Sigma_\varphi$ . Por hipótese,  $x_c^{(k)} = z^{(k,j)}$  e, portanto, XCOR não parou em  $z^{(k,j)}$ . Em particular,  $h(z^{(k,j)}) = 0$ . Suponhamos então que REST procura um  $z^{(k,j+1)}$ , no qual  $\varphi$  valha menos. Por HC e HA, seja  $\xi_A > 0$  tal que, para todo  $z^{(k,j)}$  gerado,

$$\|A^{(k,j)}\| \leq \xi_A \quad (2.38)$$

Simplifiquemos a notação para :

$$z = z^{(k,j)}, \quad h = h(z), \quad A = A^{(k,j)}, \quad \varphi = \frac{1}{2}\|h\|^2, \quad \Gamma(\delta) = \frac{1}{2}(\|h + A\delta\|^2 - \|h\|^2).$$

Para mostrar que  $z^{(k,j+1)}$  está bem definido, basta considerar o caso no qual  $A = h'(z)$ . Se  $A = h'(z)$ , a salvaguarda em P2.a de REST garante que, se P2.b nunca aceitar um candidato com este A, após um conjunto finito de rejeições, obteremos  $A = h'(z)$ .

Suponhamos então que  $A = h'(z)$ , e seja  $z_+ = z + \delta_+$  um ponto candidato, a ser testado em P2.b de REST, obtido numa região de confiança, de raio  $\Delta$ . Como  $\nabla\varphi(z) = \nabla\Gamma(z) = A^T h$ , e  $\varphi$  é de classe  $C^2$ , HC junto com o lema de Taylor nos propiciam  $\bar{\xi}_1 > 0$ , independente de  $k$  e  $j$ , tal que:

$$\Gamma(\delta_+) = \frac{1}{2}(\|h + A\delta_+\|^2 - \|h\|^2) = (A^T h)^T \delta_+ + \frac{1}{2}\delta_+^T A^T A \delta_+ \leq .1\Gamma(\delta_{PC}) \quad (2.39)$$

$$-\Gamma(\delta_{PC}) \geq -\frac{1}{2}\nabla\Gamma^T \delta_{PC} \geq \frac{1}{2}\|(A^T h)\| \min\left\{\frac{\|A^T h\|}{\xi_A^2}, \Delta\right\} \quad (2.40)$$

$$\Delta\varphi_+ = \varphi(z_+) - \varphi(z) \leq \Gamma(\delta_+) + \bar{\xi}_1 \|\delta_+\|^2 \quad (2.41)$$

Faça  $\bar{\xi}_2 = \min\left\{\frac{1}{2\xi_A^2}, \frac{1}{80\xi_1}\right\}$  e observe que se

$$\bar{\Delta} = \bar{\xi}_2 \|A^T h\| \quad (2.42)$$

e  $\Delta \leq 2\bar{\Delta}$ , obtemos de DS, (2.40), (2.41) e (2.42)

$$\bar{\xi}_1 \|\delta_+\|^2 \leq \bar{\xi}_1 \Delta^2 \leq 2\bar{\xi}_1 \bar{\xi}_2 \Delta \|A^T h\| \leq \frac{1}{20} |\Gamma(\delta_{PC})| < \frac{1}{2} |\Gamma(\delta_+)| \quad (2.43)$$

$$\text{implicando } \Delta\varphi_+ \leq \frac{1}{2}\Gamma(\delta_+) < 0 \quad (2.44)$$

Isto significa que  $z_+$  passa no teste em P2.b, se  $\Delta < 2\bar{\Delta}$ . Como  $A^T h = 0$ , por hipótese, e a cada rejeição fazemos  $\Delta \leftarrow \Delta/2$ ,  $z^{(k,j+1)}$  será gerado num conjunto finito de iterações. Portanto, se  $A = h'(z)$

$$\Delta \geq \min\{\bar{\Delta}, \Delta_{min}\} \quad (2.45)$$

Por P2.a, se  $A = h'(z)$  e  $\Delta$  é aceito, então  $\Delta \geq \Delta_{min}$ . Isto significa que (2.45) vale, também neste caso. Como  $\|h\| \leq \rho_{max}^{(0)}$ , obtemos

$$\frac{\Delta_{min}}{\xi_A \rho_{max}^{(0)}} \|A^T h\| \leq \Delta_{min} \frac{\|A\| \|h\|}{\xi_A \rho_{max}^{(0)}} \leq \Delta_{min}.$$

Se fizermos então

$$\bar{\xi}_3 = \min\{\bar{\xi}_2, \frac{\Delta_{min}}{\xi_A \rho_{max}^{(0)}}\}$$

e observarmos também (2.42) e (2.45), obteremos

$$\Delta \geq \bar{\xi}_3 \|A^T h\| \quad (2.46)$$

Observe que as constantes  $\bar{\xi}_A, \bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2$  e  $\bar{\xi}_3$ , independem de  $k$  e que (2.39) e (2.40) independem da hipótese  $A = h'(z)$ . Portanto (2.37) segue de (2.46), (2.39), (2.40) e do critério de aceitação do passo, em P2 de REST.  $\square$

Duas coisas são importantes na restauração :

- i – Que ela produza em cada iteração uma redução suficiente em  $\|h(z^{(k,j)})\|$ , para garantir que, num conjunto finito de iterações, se consiga a restauração exigida em XCOR.
- ii – Que  $x_c^{(k)}$  esteja “controladamente próximo” de  $x^{(k)}$ , na  $k$ -ésima iteração de CDR.

No lema abaixo garantimos isto, com a condição que os iterados de REST se mantenham longe de  $\Sigma_\varphi$ , ou seja,  $\bar{Z}^{(k)} \cap \Sigma_\varphi = \phi$ .

**LEMA 2.4.3 (DA RESTAURAÇÃO )** *Suponhamos que  $\bar{Z}^{(k)} \cap \Sigma_\varphi = \phi$ , na  $k$ -ésima iteração de CDR. Então REST teve terminação finita, sempre que acionado em XCOR na  $k$ -ésima iteração de CDR.*

Além disto , existem  $0 < \xi_4^{(k)} < 1$  e  $\xi_5^{(k)} > 0$  tais que:

i- Se  $j \in \mathbb{N}$  e  $0 \leq j \leq j_k - 2$ , então

$$\frac{\|h(z^{(k,j+2)})\|}{\|h(z^{(k,j)})\|} \leq \xi_4^{(k)} \quad (2.47)$$

ii- Se  $m \in \mathbb{N}$  e  $j < m \leq j_k$ , então

$$\|z^{(k,m)} - z^{(k,j)}\| < \xi_5^{(k)} \|h(z^{(k,j)})\| \quad (2.48)$$

iii- Se também vale  $\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \phi$ , então obtemos  $\xi_4^{(k)}$  e  $\xi_5^{(k)}$  como constantes  $0 < \xi_4 < 1$  e  $\xi_5 > 0$ , ou seja, independentes de  $k$ .

DEM :

Suponhamos que  $\overline{\mathcal{Z}^{(k)}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ .

Vamos mostrar, inicialmente, a existência de  $\sigma^{(k)} > 0$ , tal que se  $j < j_k$

$$\|h'(z^{(k,j)})^T h(z^{(k,j)})\| \geq \sigma^{(k)} \|h(z^{(k,j)})\| \quad (2.49)$$

Para verificá-lo, se  $h(z^{(k,j)}) = 0$  então  $j = j_k$ . Portanto, podemos supor

$$h(z^{(k,j)}) \neq 0 \quad (2.50)$$

sem perda de generalidade. Suponhamos ainda, por absurdo, que (2.49) não seja possível com  $\sigma^{(k)} > 0$ . Isto nos garante uma subsequência infinita,  $\{z^{(k,j_i)}\}$  tal que

$$\lim_{i \rightarrow \infty} h'(z^{(k,j_i)})^T \frac{h(z^{(k,j_i)})}{\|h(z^{(k,j_i)})\|} = 0$$

Possivelmente passando a uma subsequência, (2.50), HC e a compacidade da esfera de raio 1 no  $\mathbb{R}^n$  nos autorizam a supor  $z^{(k,j_i)}$  convergente, digamos a  $z^*$  e  $h(z^{(k,j_i)})/\|h(z^{(k,j_i)})\|$  a  $w^*$ . Como  $h$  é de classe  $C^1$ , obtemos

$$h'(z^*)^T w^* = 0 \quad \text{e} \quad w^* = 1 \quad (2.51)$$

Se  $h(z^*) \neq 0$  então  $w^* = h(z^*)/\|h(z^*)\|$  e:

$$\nabla\varphi(z^*) = h'(z^*)^T h(z^*) = 0 \quad (2.52)$$

(2.51–2.52) garantem  $z^*$  em  $\Sigma_\varphi$ , contradizendo a hipótese do lema. Portanto, podemos assumir (2.49) com  $\sigma^{(k)} > 0$ .

De HC, seja  $\xi_A > 0$ , tal que, para todo  $z^{(k,j)}$  gerado, tenhamos:

$$\|h'(z^{(k,j)})\| < \xi_A \quad (2.53)$$

Suponhamos que  $z^{(k,j)}$ ,  $z^{(k,j+1)}$ ,  $z^{(k,j+2)}$  tenham sido gerados e que  $A^{(k,j)} = h'(z^{(k,j)})$ , (2.37) e (2.49) garantem:

$$\|h(z^{(k,j)})\|^2 - \|h(z^{(k,j+1)})\|^2 \geq \xi_{\Delta\varphi} \|h'(z^{(k,j)})^T h(z^{(k,j)})\|^2 \geq \xi_{\Delta\varphi} (\sigma^{(k)})^2 \|h(z^{(k,j)})\|^2 \quad (2.54)$$

implicando

$$\frac{\|h(z^{(k,j+1)})\|}{\|h(z^{(k,j)})\|} \leq \sqrt{1 - \xi_{\Delta\varphi} (\sigma^{(k)})^2} \quad (2.55)$$

Se  $A^{(k,j)} \neq h'(z^{(k,j)})$  e  $A^{(k,j+1)} \neq h'(z^{(k,j+1)})$ , então a condição para não precisar atualizar  $A$  pelo jacobiano verdadeiro se cumpriu em  $z^{(k,j+1)}$ . Pelo disposto em P3.d de REST, isto significa que

$$\frac{\|h(z^{(k,j+1)})\|}{\|h(z^{(k,j)})\|} \leq \theta_{max} \quad (2.56)$$

(2.55–2.56) implicam (2.47) com  $\xi_A^{(k)} = \max\{\sqrt{1 - \xi_{\Delta\varphi} (\sigma^{(k)})^2}, .95\} < 1$

Note ainda que, ao se chamar REST em  $z^{(k,j_0)}$ ,  $h(z^{(k,j_0)}) \neq 0$  e em P4 de XCOR se determinou que REST deve retornar a XCOR assim que obtiver

$$\|h(z^{(k,j_0+s)})\| < \bar{\rho},$$

para algum  $\bar{\rho} > 10^{-3}\|h(z^{(k,j_0)})\|$ . Portanto, a taxa linear de redução em dois passos de  $\|h(z^{(k,j)})\|$ , explicitada em (2.47), implica na terminação finita de REST, sempre que chamado num ponto  $z^{(k,j_0)}$ , a partir de XCOR.

Para provar (ii), observe inicialmente que HPR nos garante  $\xi_{\text{Rest}} > 0$  tal que, para todo  $z^{(k,i+1)}$  gerado por REST:

$$\|z^{(k,i+1)} - z^{(k,i)}\| \leq \xi_{\text{Rest}} \|h(z^{(k,i)})\| \quad (2.57)$$

De (2.47) e (2.57), obtemos para  $\ell \geq 2$ :

$$\begin{aligned} \|z^{(k,j+\ell)} - z^{(k,j)}\| &\leq \sum_{i=j}^{j+\ell-1} \|z^{(k,i+1)} - z^{(k,i)}\| \\ &\leq \xi_{\text{Rest}} \sum_{i=j}^{j+\ell-1} \|h(z^{(k,i)})\| \\ &\leq \xi_5^{(k)} \|h(z^{(k,j)})\| \end{aligned}$$

onde

$$\xi_5^{(k)} = 2\xi_{\text{Rest}} \sum_1^{\infty} (\xi_4^{(k)})^i = \frac{2\xi_{\text{Rest}}}{1 - \xi_4^{(k)}} \quad (2.58)$$

Para ver (iii), basta observar que se  $\overline{\mathcal{Z}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ , com o mesmo argumento usado no início da demonstração, conseguimos obter  $\sigma^{(k)} = \sigma > 0$ , ou seja independentemente de  $k$ , em (2.49). Isto faz com que as demais constantes definidas acima também independam de  $k$ .  $\square$

## DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 2.4.1:

Suponhamos que na  $k$ -ésima iteração de CDR, tenhamos obtido

$$\overline{\mathcal{Z}^{(k)}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset \quad (2.59)$$

Como (2.59) e o lema 2.4.3 garantem REST bem definido, e com terminação finita, sempre que acionado, XCOR igualmente estará bem definido.

Se XCOR tiver terminação finita, como  $x_c^{(k)} = z^{(k,j)} \notin \Sigma_\varphi$  por (2.59), não há o que demonstrar. Suponhamos, então, que XCOR não tem terminação finita. Neste caso serão geradas duas sequências infinitas, definidas por:

$$y_\ell = z^{(k,j_\ell)} \quad \text{em P4 de XCOR} \quad (2.60)$$

$$\rho_\ell > 10^{-3} n_\varphi(y_\ell) \rho_{\max}^{(k)} \quad (2.61)$$

(2.47) nos garante que:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} h(z^{(k,j)}) = 0 \quad (2.62)$$

Como  $\{y_\ell\}$  é uma subsequência de  $\mathcal{Z}^{(k)} = \{z^{(k,j)} : 1 \leq j < \infty\}$ , (2.62) e (2.48) nos dizem que  $\mathcal{Z}^{(k)}$  é uma sequência de Cauchy. Seja

$$z^* = \lim_{j \rightarrow \infty} z^{(k,j)} = \lim_{\ell \rightarrow \infty} y_\ell \quad (2.63)$$

(2.62) implica então

$$\|h(z^*)\| = 0 \quad (2.64)$$

Como XCOR não tem terminação finita, P3 de XCOR nos diz que

$$\|h(y_\ell)\| > \rho_\ell > 10^{(-3)} n_\varphi(y_\ell) \rho_{max}^{(k)}$$

e, portanto, podemos concluir de (2.62), que

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} n_\varphi(y_\ell) = 0 \quad (2.65)$$

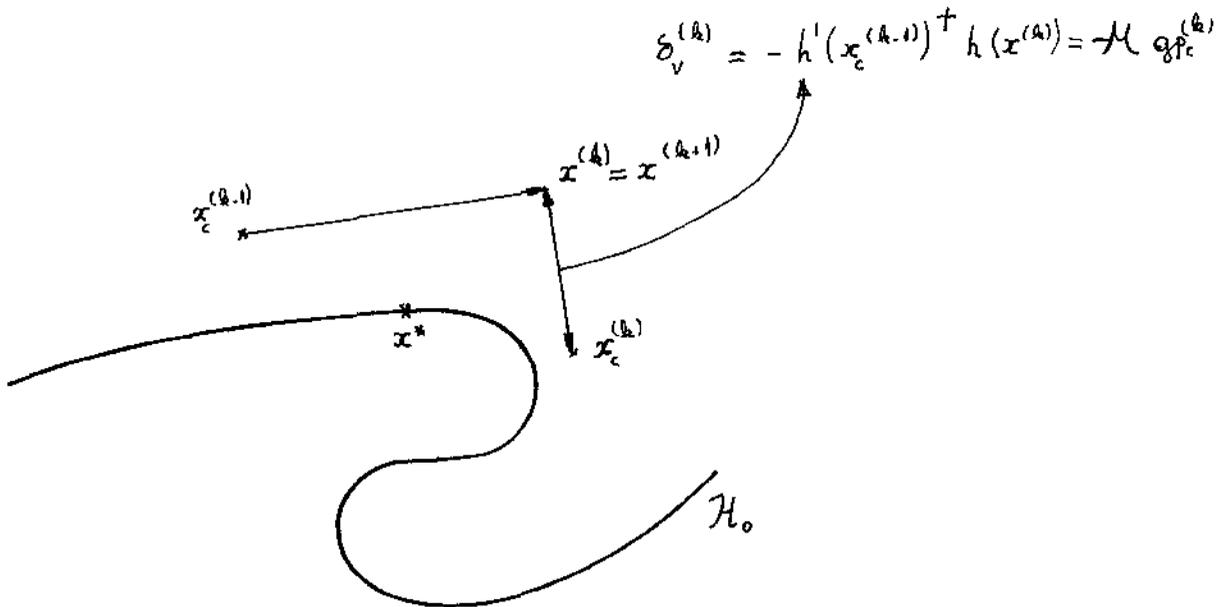
A hipótese (2.59) nos permite afirmar que  $z^* \notin \Sigma_\varphi$ . Em particular, isto nos garante que  $n_\varphi(z) = \|gp(z)\| / (\|g(z)\| + 1)$  é contínua em  $z^*$ . (2.65) e (2.64) confirmam então, que  $z^*$  é estacionário para MRI. Mas isto significa dizer que  $\mathcal{Z}^{(k)}$  convergiu para um ponto estacionário, ou seja, que XCOR foi bem sucedido nesta  $k$ -ésima iteração  $\square$

### 2.4.3 BOA DEFINIÇÃO POSSÍVEL PARA CDR

Como pode acontecer de REST convergir para um ponto de  $\Sigma_\varphi$ , só faz sentido falar em boa definição para CDR, supondo  $\overline{\mathcal{Z}^{(k)}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$  para todo  $k$ . Isto implica, pelo teorema 2.4.1, XCOR bem sucedido. Se XCOR for bem sucedido, mas não tiver terminação finita, fica garantida a convergência a um ponto estacionário para o problema, com taxa linear garantida pelo lema da restauração (2.4.3). Analisar a “boa definição” possível para CDR, corresponde a garantir que, se  $x_c^{(k)} \notin \Sigma_{MRI} = \Sigma_\varphi \cup \Sigma_{KT}$  para todo  $k$ , então CDR gera, em tempo finito, um ponto  $x^{(j)} \neq x^{(k)}$ , para algum  $j > k$ .

Um lema que quantifica a descida suficiente do lagrangeano, obtida na segunda etapa de CDR, nos garantirá que cada  $x^{(k)}$  seja gerado em tempo finito, nestas condições. Contudo poderia acontecer, pelo menos teoricamente, e conforme ilustramos abaixo, que se  $x^{(k)}$  estiver suficientemente longe da factibilidade, então a direção pela qual se restaurou de  $x^{(k)}$  a  $x_c^{(k)}$  seja, exatamente, uma direção tangente às restrições, em  $x_c^{(k)}$ . Neste caso, a depender da  $f$ , teríamos a possibilidade de obter  $x^{(k+1)} = x^{(k)}$ . A demonstração que isto não pode acontecer, para todo  $j > k$ , consiste em verificar que, neste caso,  $\rho_{max}^{(j)} < 2\|h(x^{(k)})\|$ , para algum  $j > k$ , o que obriga  $x^{(j)} \neq x^{(k)}$ .

Desenho ilustrativo de uma situação na qual pode ocorrer  $x^{(k+1)} = x^{(k)}$



Se por acaso  $\delta_V^{(k)} = -\mu g_c^{(k)}$  e  $\delta_V^{(k)} \leq \Delta$ , podemos testar  $x^{(k+1)} = x^{(k)}$

Neste sentido, o teorema da *boa definição possível*, para MRI, pode ser enunciado por:

#### TEOREMA 2.4.4 (TEOREMA DA BOA DEFINIÇÃO DE CDR)

Suponhamos que  $x^{(k)}$ , gerado por CDR, não seja crítico para MRI. Então para algum  $i \geq k$ , acontece uma das três alternativas:

- i - XCOR fracassa na  $i$ -ésima iteração de CDR, isto é,  $\overline{Z^{(i)}} \cap \Sigma_\varphi \neq \emptyset$
- ii - XCOR encontra ponto estacionário para MRI, isto é,  $\overline{Z^{(i)}} \cap \Sigma_{KT} \neq \emptyset$
- iii -  $x^{(i+1)} \neq x^{(k)}$ .

Para demonstrar o teorema acima, precisaremos do “*lema da descida suficiente*”, que enunciamos a seguir. Nele se garante que, a segunda etapa de CDR é resolvida em tempo finito, desde que  $x_c^{(k)} \notin \Sigma_{MRI}$ . Além disto, se quantifica a descida de  $L$ , conquistada na segunda etapa, como função da norma do gradiente projetado, e do raio do cilindro de confiança em  $x_c^{(k)}$ .

**LEMA 2.4.5 (DESCIDA SUFICIENTE)** Se  $x_c^{(k)} \notin \Sigma_{MRI}$  então  $x^{(k+1)}$  é aceito para algum dos candidatos testados em P3 de CDR.

Além disto, existem constantes positivas  $\xi_1, \xi_2$  e  $\xi_3$  tais que :

$$-\Delta L_H^{(k)} = L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) - L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)}) \geq \xi_1 \|gp_c^{(k)}\| \min\{\xi_2 \|gp_c^{(k)}\|, \xi_3 (\rho_c^{(k)})^{1/2}, \Delta_{min}\} \quad (2.66)$$

#### DEMONSTRAÇÃO:

Para simplificar a notação, omitiremos o superscrito  $(k)$  na demonstração. Seja  $x_+ = x_c + \delta_t + \delta_{soc}$ , um ponto candidato obtido em P2 de CDR, na  $k$ -ésima iteração, e  $\lambda_+$  seu respectivo multiplicador, obtido em P2.a. Por  $HB, H\lambda, HC, HSOC, HDIF, DS$  e (2.16), dispomos de constantes positivas  $\xi_B, \bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2$  e  $\bar{\xi}_3$ , tais que:

$$\|B\| \leq \xi_B \quad (2.67)$$

$$\|h(x_+) - h(x_c)\| \leq \bar{\xi}_1 \|\delta_t\|^2 \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} \Delta L_H^+ &= L(x_+, \lambda^+) - L(x_c, \lambda^+) = \mathcal{P}_c^T \delta_t + \bar{\xi}_2 \|\delta_t\|^2 \\ &\leq q(\delta_t) + \bar{\xi}_3 \|\delta_t\|^2 \end{aligned} \quad (2.69)$$

Podemos supor que  $\|\mathcal{P}_c\| \neq 0$ , pois caso contrário  $\rho_c = 0$  e  $x_c \in \Sigma_{\text{MRI}}$ . De (1.67), (2.16), (2.67) e P2.a de CDR, resulta que:

$$\|\delta_{\text{PC}}\| \geq \min\left\{\frac{\|\mathcal{P}_c\|}{\xi_B}, \Delta\right\} \quad (2.70)$$

$$q(\delta_{\text{PC}}) \leq \frac{1}{2} g_c^T \delta_{\text{PC}} \leq -\frac{1}{2} \|\mathcal{P}_c\| \min\left\{\frac{\|\mathcal{P}_c\|}{\xi_B}, \Delta\right\} \quad (2.71)$$

Faça:

$$\bar{\xi}_4 = \min\left\{\frac{1}{2\xi_B}, \frac{1}{80\xi_3}\right\} \quad (2.72)$$

$$\bar{\xi}_5 = \frac{1}{2\sqrt{\bar{\xi}_1}} \quad (2.73)$$

Afirmamos que a iteração termina com

$$\Delta \geq \bar{\Delta} = \min\{\bar{\xi}_4 \|\mathcal{P}_c\|, \bar{\xi}_5 \sqrt{\rho_c}, \Delta_{\text{min}}\} \quad (2.74)$$

Verifique que, se  $\Delta < 2\bar{\Delta}$ , obtemos  $\|\delta_{\text{PC}}\| = \Delta$ , e:

$$\bar{\xi}_3 \|\delta_t\|^2 \leq \bar{\xi}_3 \Delta^2 < 2\bar{\xi}_3 \bar{\xi}_4 \|\mathcal{P}_c\| \Delta < \frac{1}{40} \|\mathcal{P}_c\| \Delta \leq \frac{1}{20} |q(\delta_{\text{PC}})| \leq \frac{1}{2} |q(\delta_t)|$$

De  $\bar{\xi}_3 \|\delta_t\|^2 \leq \frac{1}{2} |q(\delta_t)|$  e (2.69), obtemos

$$\Delta L_H^+ < \frac{1}{2} q(\delta_t) \quad (2.75)$$

De (2.68), (2.74) e  $\|h(x_c)\| \leq \rho_c$  temos

$$\|h(x_+)\| < 2\rho_c \quad (2.76)$$

(2.75) e (2.76) nos dizem que, se  $\Delta < 2\bar{\Delta}$ , então o passo  $\delta_t$  é aceito por CDR, confirmando a afirmação feita acima.

A aceitação de  $x_+$ , em P3 de CDR, acarreta:

$$\Delta L_H^+ \leq 10^{-4} q(\delta_t) \leq 10^{-5} q(\delta_{\text{PC}}) \quad (2.77)$$

(2.71), (2.74) e (2.77) garantem (2.66) □

### DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 2.4.4

Suponhamos, por absurdo, que  $x^{(k)}$  não esteja em  $\Sigma_{\text{MRI}}$ , mas nenhuma das tres alternativas, no enunciado do teorema, se verifique.

Então XCOR não fracassa, nem encontra ponto estacionário, o que significa dizer pelo teorema 2.4.1, que XCOR tem sempre terminação finita num ponto  $x_c^{(k)} \notin \Sigma_{\text{MRI}}$ . O lema da descida suficiente, juntamente com a hipótese de absurdo, garantem, assim, que para todo  $j \in \mathbb{N}$ ,  $x^{(j)}$  está bem definido, e

$$x^{(j)} = x^{(k)} \quad (2.78)$$

Vamos mostrar inicialmente que, sob as hipóteses feitas

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \rho_{\max}^{(i)} = 0. \quad (2.79)$$

Suponhamos, por contradição, que isto não aconteça.

Como  $\rho_{\max}^{(i+1)} \neq \rho_{\max}^{(i)}$  significa  $\rho_{\max}^{(i+1)} = \rho_{\max}^{(i)}/2$ , se (2.79) não acontece, podemos supor que para algum  $i_0$ , e todo  $i \geq i_0$

$$\rho_{\max}^{(i)} = \rho_{\max}^{(i_0)} \quad (2.80)$$

Como  $\rho_{\max}^{(i)}$  não se altera depois de  $i_0$ , o lema 2.23 implica, para todo  $i \geq i_0$ :

$$L(x_c^{(i+1)}, \lambda^{(i+1)}) - L(x_c^{(i_0)}, \lambda^{(i_0)}) = \sum_{j=i_0}^i \Delta L_c^{(j)} \leq \frac{1}{4} \sum_{j=i_0}^i \Delta L_H^{(j)} \quad (2.81)$$

Basta considerar duas possibilidades, para a sequência  $\{\mathcal{P}_c^{(k)}\}$ :

i -  $\lim_{i \rightarrow \infty} \mathcal{P}_c^{(i)} = 0$

Neste caso, o controle dinâmico garante  $\|h(x^{(i)})\| < 2\rho^{(i)} \rightarrow 0$  e, por (2.78), podemos concluir

$$h(x^{(k)}) = 0 \quad (2.82)$$

Mas (2.82) significa que não pode haver restauração na  $k$ -ésima iteração. Como estamos supondo que  $x^{(k)}$  não é estacionário, o lema anterior nos assegura, neste caso, que

$$x^{(k+1)} \neq x_c^{(k)} = x^{(k)}, \quad (2.83)$$

contradizendo (2.78).

ii - Existe subsequência  $\{\mathcal{P}_c^{i_\ell} : 1 \leq \ell < \infty\}$ , tal que  $\|\mathcal{P}_c^{i_\ell}\| \geq \bar{\xi}_1 > 0$ .

De XCOR se obtém

$$\rho^{(i_\ell)} \geq 10^{-3} \rho_{\max}^{(i_\ell)} \|\mathcal{P}_c^{(i_\ell)}\| \quad (2.84)$$

(2.80), (2.84) e o lema da descida suficiente, nos garantem uma cota superior  $-\bar{\xi}_2 < 0$ , para  $\Delta L_H^{(i_\ell)}$ , e (2.81) garante então  $\lim_{i \rightarrow \infty} L(x_c^{(i)}, \lambda^{(i)}) = -\infty$ , contradizendo  $H\lambda + HC + HDIF$ .

Como uma das duas possibilidades teria que valer para  $\{\mathcal{P}_c^{(k)}\}$ , chegamos a uma contradição com (2.80). Portanto, vale (2.79), e isto igualmente garante (2.82). Neste caso, da mesma forma que acima, obtemos (2.83), contradizendo (2.78), e garantindo o lema.  $\square$

### 2.4.4 CONVERGÊNCIA GLOBAL

Nosso teorema de convergência global poderia ser enunciado de duas formas. No seu formato mais conciso, ele simplesmente garante pontos de acumulação em  $\Sigma_{\text{MRI}} = \Sigma_{\text{KT}} \cup \Sigma_{\varphi}$ , para as sequências geradas em CDR. Além disto, ao impor hipóteses bastante razoáveis sobre o tamanho dos passos, e escolhendo multiplicadores adequados para avaliar seu mérito, garantimos que todos os pontos de acumulação estão em  $\Sigma_{\text{MRI}}$ . Detalhando mais, chegamos a:

**TEOREMA 2.4.6** *Se  $\mathcal{Z}$  não tem pontos, nem pontos de acumulação em  $\Sigma_{\varphi}$ , então, ou bem CDR gera, em tempo finito, um ponto estacionário para MRI, ou então uma sequência, que tem pontos estacionários no seu conjunto de acumulação.*

*Além disto, se o passo "horizontal", e o multiplicador  $\lambda^{(k)}$ , usado para avaliá-lo, satisfizerem*

$$\|x^{(k+1)} - x_c^{(k)}\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|) \quad (2.85)$$

$$\|\lambda^{(k)} - \lambda_{\text{LS}}(x_c^{(k)})\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|) \quad (2.86)$$

*então todos os pontos de acumulação serão estacionários*

A boa definição de CDR, estabelecida na seção anterior, é um resultado frágil, no sentido que sequer evita a possibilidade de infinitos retornos ao mesmo ponto, já que não temos uma função de mérito estritamente monótona. No entanto, pelo teorema 2.4.4, para tanto, basta que se exija XCOR bem sucedido em cada iteração. Ou seja, pelo teorema 2.4.1,  $\overline{\mathcal{Z}^{(k)}} \cap \Sigma_{\varphi} = \emptyset$ , para todo k. Como  $\overline{\mathcal{Z}^{(k)}}$  é compacto, e  $\Sigma_{\varphi}$  fechado, isto equivale a afirmar que a distância

$$d^{(k)} = \inf\{\|x - y\| : x \in \mathcal{Z}^{(k)}, y \in \Sigma_{\varphi}\} \quad (2.87)$$

é um número positivo, para todo k.

Para a obtenção de pontos estacionários para MRI, a hipótese do teorema acima, ou seja,  $\overline{\mathcal{Z}} \cap \Sigma_{\varphi} = \emptyset$  é de fato mais exigente, na medida que, corresponde a pedir algum tipo de "uniformidade nas distâncias" entre  $\overline{\mathcal{Z}^{(k)}}$  e  $\Sigma_{\varphi}$ , de modo a assegurar

$$d^{(k)} \geq d = \inf\{\|x - y\| : x \in \mathcal{Z}, y \in \Sigma_{\varphi}\} > 0 \quad (2.88)$$

#### OBSERVAÇÃO 2.4.1 - ESPAÇO NORMAL SUFICIENTE E O TEOREMA 2.4.6

A idéia central por trás da demonstração do teorema 2.4.6, consiste em estabelecer a clássica contradição entre HC e  $L(x^{(k)}, \lambda^{(k)}) \rightarrow -\infty$ , caso  $\liminf \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| > 0$ . A dificuldade para garantir a "descida suficiente" para  $L$ , em cada iteração, que produziria esta contradição, está em ter *espaço nos cilindros de confiança, para dar passos horizontais "suficientemente grandes"*. Isto pode ser visto na dependência da descida  $\Delta L_H^{(k)}$ , com o "raio do cilindro de confiança", explicitada em (2.66). Neste sentido, um passo fundamental da demonstração, está organizada no lema a seguir, no qual se garante um "espaço normal suficiente", caso  $\mathcal{Z}$  fique longe de  $\Sigma_{\varphi}$  e  $\liminf \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| > 0$ , no sentido de obtermos, neste caso,  $\rho_{\text{max}}^{(k)}$  constante, a partir de alguma iteração  $k_0$ . Em particular, o lema da descida suficiente garantirá então, que a descida "horizontal"  $\Delta L_H^{(k)}$  é de fato "suficiente", e o lema (2.3.1) nos dirá que eventuais subidas  $\Delta L_V^{(k)}$ , não destroem a descida suficiente conquistada com  $\Delta L_H^{(k)}$ . Isto nos dará, para

o lagrangeano, uma variação mais negativa que uma fração de  $\Delta L_H^{(k)}$ , em cada passo.

A segunda parte do lema corresponde à segunda parte do teorema, e é importante para a convergência local do método. Nela se garante que  $\rho_{max}^{(k)}$  fica constante, para  $k$  suficientemente grande, se os multiplicadores de Lagrange e os passos “horizontais”, satisfizerem às condições (2.85–2.86), colocadas no enunciado do teorema de convergência global (2.4.6), independentemente de  $\sup \liminf \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| > 0$ .

**LEMA 2.4.7 (ESPAÇO NORMAL SUFICIENTE)** *Se CDR não tem terminação finita e  $\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ , então*

*i– Existem  $\xi_5$  e  $\xi_\rho > 0$ , tais que  $\rho_{max}^{(k)}$  não diminui na  $k$ -ésima iteração, desde que*

$$\rho_{max}^{(k)} \leq \min\{\xi_\rho \|\mathcal{P}_c^k\|, \xi_5\} \quad (2.89)$$

*Em particular, se  $\liminf \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| > 0$  então, para algum  $k_0 > 0$  e todo  $k$ ,*

$$\rho_{max}^{(k)} \geq \rho_{max}^{(k_0)} \quad (2.90)$$

*ii– Se o passo “horizontal”, e o multiplicador  $\lambda^{(k)}$  usado para avaliá-lo, satisfizerem (2.85–2.86), então igualmente encontramos  $k_0 > 0$ , garantindo (2.90), para todo  $k$ .*

### DEMONSTRAÇÃO:

A demonstração do lema tem por pano de fundo que, dado  $\liminf \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| > 0$ , a descida  $\Delta L_H^{(k)}$ , garantida por (2.66), é, assintoticamente, maior que uma fração da raiz quadrada de  $\rho_c^{(k)}$ , enquanto que, numa restauração, uma possível subida de  $\Delta L_V^{(k)}$  é  $O(\rho_c^{(k)})$ . Isto faz com que a restauração, não atrapalhe a descida  $\Delta L_c^{(k)}$ , para  $\rho_c^{(k)}$  “pequeno”, porém “suficientemente grande”.

Do lema da descida suficiente, e de P3 de XCOR, obtemos constantes positivas  $\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \bar{\xi}_3$ , tais que:

$$\begin{aligned} -\Delta L_H^{(k)} &= |L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)}) - L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)})| \\ &\geq \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \min\{\bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|, \bar{\xi}_2 \rho_{max}^{(k) 1/2} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^{1/2}, \bar{\xi}_3 \Delta_{min}\} \end{aligned} \quad (2.91)$$

Lembramos que, sob  $\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$  e HC, o lema da restauração 2.4.3 garante

$$\|x_c^{(k+1)} - x^{(k+1)}\| = O(\|h(x^{(k+1)})\|) \quad (2.92)$$

Usando o lema do valor médio, HC, H $\lambda$ , HDIF e (2.92), obtemos:

$$\begin{aligned} |\Delta L_V^{(k)}| &= |L(x_c^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}) - L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)})| \\ &\leq |L(x_c^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}) - L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)})| + |(\lambda^{(k+1)} - \lambda^{(k)})^T h(x^{(k+1)})| \\ &= O(\|h(x^{(k+1)})\|) = O(\rho_c^{(k)}) \end{aligned}$$

Seja então  $\xi_4 > 0$  tal que

$$|\Delta L_V^{(k)}| \leq \xi_4 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \quad (2.93)$$

Veja que, se

$$|\Delta L_V^{(k)}| < -\frac{1}{2} \Delta L_H^{(k)}, \quad (2.94)$$

então o critério em P4.a de CDR, garante que não haverá diminuição em  $\rho_{max}^{(k)}$ , na  $k$ -ésima iteração. Observe que, se

$$\begin{aligned}\xi_\rho &= \frac{1}{2} \min\{\bar{\xi}_1/\xi_4, (\bar{\xi}_2/\xi_4)^2\} \\ \xi_5 &= \frac{\bar{\xi}_3}{2\xi_4} \Delta_{min} \\ \rho_{max}^{(k)} &< \min\{\xi_\rho \|\mathcal{P}_c^k\|, \xi_5\}\end{aligned}\quad (2.95)$$

então (2.94) fica atendida para  $k$ , garantindo a primeira parte do lema.

A segunda parte do lema se baseia igualmente em (2.94), porém as hipóteses aqui assumidas nos permitirão melhorar (2.93), e partir de:

$$|\Delta L_V^{(k)}| = O(\rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2) \quad (2.96)$$

Para demonstrar (2.96), começamos observando que  $\Sigma_\varphi$  fechado,  $\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$  e HDIF nos garantem  $\lambda_{LS}(x)$  de classe  $C^1$ , numa vizinhança de  $\bar{Z}$ . Como HC garante  $\bar{Z}$  compacto, isto significa que  $\lambda_{LS}(x)$  e  $gp(x)$  são de classe  $C^1$ , numa vizinhança de  $\bar{Z}$ , e portanto Lipschitz no compacto  $\bar{Z}$ .<sup>¶</sup>

$$\|\lambda_{LS}(x_c^{(k+1)}) - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|x_c^{(k+1)} - x_c^{(k)}\|) \quad (2.97)$$

$$\|gp(x_c^{(k+1)}) - gp(x_c^{(k)})\| = O(\|x_c^{(k+1)} - x_c^{(k)}\|) \quad (2.98)$$

De Taylor, (2.85–2.86), (2.92), (2.97–2.98):

$$\begin{aligned}\Delta L_V^{(k)} &= L(x_c^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}) - L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)}) \\ &= L(x_c^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k+1)})) - L(x^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k+1)})) + (\lambda^{(k+1)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k+1)}))^T h(x_c^{(k+1)}) + \\ &+ (\lambda_{LS}(x_c^{(k+1)}) - \lambda_{LS}(x_c^{(k)}))^T h(x^{(k+1)}) + (\lambda_{LS}(x_c^{(k)}) - \lambda^{(k)})^T h(x^{(k+1)}) \\ &= -gp(x_c^{(k+1)})^T (x^{(k+1)} - x_c^{(k+1)}) + O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \rho_c^{(k)}) = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \rho_c^{(k)})\end{aligned}\quad (2.99)$$

Como  $\rho_c^{(k)} = O(\rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|)$ , HC e (2.99) nos garantem a existência de  $\xi_5$ , tal que

$$|\Delta L_V^{(k)}| \leq \xi_5 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2 \quad (2.100)$$

(2.91) e (2.100) nos permitem garantir (2.94), com

$$G = \sup\{\|\nabla f(x^{(k)})\| : 1 \leq k \leq \infty\} \quad (2.101)$$

$$\rho_{max}^{(k)} < \min\left\{\frac{\bar{\xi}_1}{2\xi_5}, \frac{\bar{\xi}_2^2}{2\xi_5^2 G}, \frac{\bar{\xi}_3 \Delta_{min}}{2\xi_5 G}\right\} \quad (2.102)$$

□

<sup>¶</sup> Observe que se  $F$  é de classe  $C^1$  numa vizinhança de um compacto  $V \subset \mathbb{R}^n$ , um argumento “standard, tipo” número de Lebesgue, nos garante  $K > 0$  e  $\delta > 0$ , tais que  $|f(x) - f(y)| < K\|x - y\|$ , caso  $\|x - y\| < \delta$  e  $x, y \in V$ . Como  $|F(x) - F(y)|$  é uniformemente limitada em  $V$ , fica fácil concluir neste caso que  $F$  também é Lipschitz em  $V$ .

### DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 2.4.6

Suponhamos que

$$\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset \quad (2.103)$$

Pelo teorema 2.4.4, XCOR será sempre bem sucedido. Se encontrar algum ponto estacionário, ou seja,  $\bar{Z}^{(k)} \cap \Sigma_{KT} = \emptyset$ , para algum  $k$ , não há o que demonstrar. Portanto, podemos supor, sem perda de generalidade, que CDR não tem terminação finita, e que para todo  $k > 0$ ,  $x_c^{(k)} \notin \Sigma_{MRI}$ .

O lema anterior nos garante  $k_0$ , tal que  $\rho_{max}^{(k)} \geq \rho_{max}^{(k_0)}$ , em duas situações, ou seja, quando se garante (2.85–2.86) a priori e, também, caso  $\liminf \varphi_c^{(k)} \geq b > 0$ , para algum  $b$ . Isto faz com que, para demonstrar o teorema, essencialmente nos baste mostrar que, se  $\rho_{max}^{(k)}$  estaciona, então todos os pontos de acumulação gerados serão estacionários, ou seja:

*Se existe  $k_0$ , tal que para todo  $k \in N$  tenhamos  $\rho_{max}^{(k)} \geq \rho_{max}^{(k_0)}$ , então*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \varphi_c^{(k)} = 0 \quad (2.104)$$

Para vê-lo, suponhamos  $\rho_{max}^{(k)} \geq \rho_{max}^{(k_0)}$  e que, *por contradição*,  $\|\varphi_c^{(k_i)}\| \geq b > 0$ , para alguma subsequência infinita de índices  $\{k_i\}$ . Neste caso, (2.23) nos garante, para  $k > k_0$ ,

$$\begin{aligned} L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) - L(x_c^{(k_0)}, \lambda^{(k_0)}) &= \sum_{\ell=k_0}^{k-1} \Delta L_c^{(\ell)} \\ &\leq \frac{1}{4} \sum_{\ell=k_0}^{k-1} \Delta L_H^{(\ell)} \leq -n_k \bar{\xi}_1, \text{ onde} \\ \bar{\xi}_1 &= \frac{1}{4} \xi_1 b \min\{\xi_2 b, \xi_3 \tilde{b}^{1/2}, \Delta_{min}\} > 0 \end{aligned}$$

e  $n_k$  é o número de índices, entre  $k_0$  e  $k-1$ , para os quais  $\|gp(x_c^{(k_i)})\| \geq b > 0$ . Como há uma infinidade de tais índices maiores que  $k_0$ , obtemos  $\lim_{k \rightarrow \infty} L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) = -\infty$ , o que contradiz  $HC + HDIF + H\lambda$ , convalidando (2.104).

O lema 2.4.7.ii, (2.104), HC e o controle dinâmico nos garantem a segunda parte do teorema. A primeira parte resulta de ver, por absurdo, que se nenhuma subsequência de  $\varphi_c^{(k)}$  converge a zero, então a primeira parte do lema 2.4.7 nos garante que  $\rho_{max}^{(k)}$  estaciona em algum  $k_0$ , e a afirmação em *itálico* produz daí a contradição procurada.  $\square$

### OBSERVAÇÃO 2.4.2 - SOBRE AS CONDIÇÕES (2.85–2.86)

- i – (2.85) corresponde a uma condição bastante natural de se impor, caso estejamos preocupados em garantir propriedades de convergência local razoáveis, a “bons minimizadores” de MRI. Veja que se  $B^{(k)}$  for suficientemente positivo-definida na direção tangente às restrições, tanto os passos de Cauchy, quanto os quasi-Newton na direção tangente, também satisfazem (2.85) automaticamente, e portanto qualquer passo de des-

cida “razoável”, neste caso, idem.

Conforme veremos no próximo capítulo, se supomos que toda a sequência  $x_c^{(k)}$  converge para um bom minimizador  $x^*$ , o controle dinâmico,  $\|h(x_c^{(k)})\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|)$ , corresponde a dizer que

$$\|x_c^{(k)} - x^*\| \approx \|gp(x_c^{(k)})\| \quad (2.105)$$

Em particular, neste caso basta que a convergência se dê sem oscilações excessivamente bruscas, no sentido que

$$\|x_c^{(k+1)} - x^*\| = O(\|x_c^{(k)} - x^*\|) \quad (2.106)$$

para que asseguremos (2.85). É fácil vê-lo, combinando a equivalência (2.105) com o lema da restauração 2.4.3.ii e o controle dinâmico em:

$$\|x^{(k+1)} - x_c^{(k)}\| \leq \|x^{(k+1)} - x_c^{(k+1)}\| + \|x_c^{(k+1)} - x^*\| + \|x_c^{(k)} - x^*\| \quad (2.107)$$

A única restrição a esta hipótese, está no fato de poder sugerir passos excessivamente curtos, perto de pontos de Kuhn-Tucker que não sejam minimizadores do problema. No entanto, nos parece que este tipo de dificuldades, em qualquer abordagem que se faça, no limite, terá de ser tratada como uma questão de implementação, com salvaguardas específicas se as quisermos levar em conta.

Olhando de outro ângulo para a mesma questão, se estivéssemos preocupados com estratégias para minimização global, nosso interesse maior estaria voltado para se livrar dos minimizadores locais, e neste caso a preocupação iria no sentido inverso, ou seja, de não atender (2.85), para poder escapar deles. Ainda assim, nosso resultado fornece pontos estacionários para o problema, desde que o algoritmo não “fracasse” ( $\bar{\mathcal{Z}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ ).

ii— Apontaremos uma escolha para CDR, que garante (2.85–2.86), no caso de usarmos aproximações hessianas  $B^{(k)}$  coercivamente positivo-definidas, no sentido de existir  $\bar{\xi}$  tal que, para todo  $k \in \mathbb{N}$  e  $\delta \in \mathbb{R}^n$ , tenhamos:

$$\|B^{(k)}\delta\| \geq \bar{\xi}\|\delta\| \quad (2.108)$$

Definimos o passo horizontal  $\delta_H^{(k)} = x^{(k+1)} - x_c^{(k)}$ , como o minimizador do modelo quadrático  $q^{(k)}(\delta) = g(x_c^{(k)})^T \delta + .5\delta^T B^{(k)}\delta$ , na região de confiança de raio  $\Delta^{(k)}$ , e o multiplicador de Lagrange  $\lambda^{(k)}$ , usado para avaliar o passo horizontal, como o multiplicador associado à solução do problema quadrático que forneceu  $\delta_H^{(k)}$ . As condições de Kuhn-Tucker para o problema quadrático

$$\operatorname{argmin}\{q^{(k)}(\delta) : A_c^{(k)}\delta = h'(x_c^{(k)})\delta = 0 \text{ e } \delta \leq \Delta_c^{(k)}\}$$

podem se escrever como:

$$\begin{aligned} \delta_H^{(k)} &= -(B^{(k)} + \mu^{(k)})^{-1}(g(x_c^{(k)}) + A_c^{(k)T} \lambda^{(k)}) \\ &= -(B^{(k)} + \mu^{(k)})^{-1}(gp(x_c^{(k)}) + A_c^{(k)T} \Delta\lambda^{(k)}) \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$\begin{aligned} \Delta\lambda^{(k)} &= \lambda^{(k)} - \lambda_{\text{LS}}(x_c^{(k)}) \\ &= -(A_c^{(k)}(B^{(k)} + \mu^{(k)})^{-1}A_c^{(k)T})^{-1}A_c^{(k)}(B^{(k)} + \mu^{(k)})^{-1}gp(x_c^{(k)}) \end{aligned} \quad (2.110)$$

$$\mu^{(k)} \geq 0$$

Como estamos supondo  $B^{(k)}$  coercivamente positivo-definida, (2.109–2.110) garantem que, se  $\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$  então  $\delta_H^{(k)}$  e  $\Delta\lambda^{(k)} = \lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})$  satisfarão às condições (2.85–2.86).

Como  $\rho_{max}^{(k)}$  permanece longe de 0, o lema da descida suficiente 2.4.5 nos complementa (2.85), garantindo  $\|gp(x_c^{(k)})\| \approx \|\delta_H^{(k)}\|$ . Isto nos sugere a possibilidade de pensar alternativas para CDR, como a que proporemos a seguir, nas quais se imponha um “controle dinâmico da factibilidade”, sem ter que, necessariamente, calcular  $gp(x_c^{(k)})$  explicitamente, em todas as iterações.

### OBSERVAÇÃO 2.4.3 - UMA ALTERNATIVA PARA CDR

Uma alternativa que pode ser interessante para CDR, corresponde a fazer o “controle dinâmico da factibilidade”, impondo que

$$\rho_c^{(k)} = O(\rho_c^{(k-1)}) \quad (2.111)$$

ao invés de  $\rho_c^{(k)} = O(\rho_c^{(k)})$ . XCOR seria, neste caso, dispensável, e CDR sofreria modificações apenas no seu primeiro passo. Ele ficaria bem mais simples, na medida que  $\rho_c^{(k)}$  ficaria definido no começo da  $k$ -ésima iteração de CDR, em função dos dados da iteração anterior. Lhe daríamos, explícita ou implicitamente, dois parâmetros adicionais,  $0 < \nu_1 < \nu_2$  e o passo 1 nesta alternativa se definiria por:

**Passo 1.** Atualização de  $x_c$ ,  $\rho_c$  e do modelo quadrático associado:

a) Escolha

$$\rho_c = \rho_c^{(k)} = \nu \frac{\|\mathcal{P}_c^{(k-1)}\|}{\|g(x_c^{(k-1)})\| + 1} \rho_{max}^{(k-1)}$$

onde  $\nu_1 < \nu < \nu_2$ .

b) Se  $\|h(x_c^{(k)})\| < \rho_c$ , faça  $x_c = x_c^{(k)}$ . Senão aplique REST a  $x_c$ ,  $\rho_c$ , para obter  $\|h(x_c)\| < \rho_c$ .

c) Escolha uma matriz simétrica  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  e considere:

$$q(\delta) = g_c^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta \quad (2.112)$$

Os demais passos ficariam idênticos. Na medida que afrouxamos o “controle dinâmico”, é natural esperar que, a “descida suficiente” conquistada, não piore, porém que tenhamos mais dificuldades para evitar que  $\Delta L_V^{(k)}$  atrapalhe a descida suficiente, conquistada com  $\Delta L_H^{(k)}$ .

Com um pouco de boa vontade, dá para aceitar, sob a hipótese de gerarmos uma sequência uniformemente afastada de  $\Sigma_\varphi$ , que a variação do Larangeano  $\Delta L_c^{(k)}$ , se decomponha em  $\Delta L_H^{(k)} + \Delta L_V^{(k)}$ , respeitando:

$$\begin{aligned} -\Delta L_H^{(k)} &\geq \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \min\{\bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|, \bar{\xi}_2 (\rho_c^{(k)})^{1/2}, \bar{\xi}_3 \Delta_{min}\} \\ |\Delta L_V^{(k)}| &= O(\rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k-1)}\|) \end{aligned}$$

Em particular, isto nos garante pelo menos um ponto estacionário, do mesmo jeito que antes, embora talvez percamos a garantia de manter  $\rho_{max}^{(k)}$  afastado de zero, com condições

como (2.85–2.86). Isto significaria abrir mão de poder garantir, teoricamente, que todo ponto de acumulação seja estacionário, com os argumentos da segunda parte do teorema 2.4.6.

Uma primeira motivação que nos move a propor esta alternativa, está no fato dela ser mais simples, e possivelmente menos exigente, em número de atualizações de  $h'(x)$ . Pelo menos a necessidade, ou não, de uma restauração, fica definida ao iniciar cada iteração. Além disto, “longe” da solução podemos esperar que  $\mathcal{P}_c^{(k)}$  não sofra variações bruscas. Isto nos parece apontar para diferenças relativamente pequenas no comportamento das duas alternativas, longe da solução. Como localmente CDR nos parece claramente superior, temos aí a possibilidade de combinar as duas estratégias.

Uma segunda motivação que nos faz sugerir esta alternativa está na possibilidade de não precisar calcular  $\mathcal{P}_c^{(k)}$  em cada iteração aproveitando implementações que gerem implicitamente passos na forma

$$\|\delta_H^{(k)}\| \approx \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \quad (2.113)$$

Este seria o caso de implementações como a que está esboçada na observação 2.4.2.ii acima ( pelo menos se conseguirmos manter  $\rho_{max}^{(k)}$  afastado de zero também aqui). Neste caso obtemos (2.113) sem precisar calcular  $\lambda_{LS}(x_c^{(k)})$  e  $gp(x_c^{(k)})$  explicitamente. A idéia aqui é fixar  $0 < \nu'_1 < \nu'_2$  e no passo 1.a definir

$$\rho_c^{(k)} = \nu \|\delta_H^{(k-1)}\| \rho_{max}^{(k-1)}$$

para algum  $\nu'_1 < \nu < \nu'_2$ .

(2.113) garante a condição colocada para  $\rho_c^{(k)}$  no passo 1 para  $0 < \nu_1 < \nu_2$  definidos implicitamente. Ou seja, temos aí uma possibilidade de fazer o “controle dinâmico da factibilidade” sem calcular  $\mathcal{P}_c^{(k)}$  explicitamente.

## 2.5 CDRIN

Para resolver problemas de otimização não linear de grande porte, uma estratégia importante corresponderia a tratar, de forma *inexata*, os subproblemas lineares envolvidos nos algoritmos criados, em particular evitando fatorações de matrizes. Note-se que algumas das equações lineares envolvidas em CDR, como as de REST, e parte das equações que definem o passo candidato em DS, estão tratadas de forma *inexata* na estratégia “descida suficiente para os passos candidatos”, mas não aquelas que envolvem a condição de  $\delta_i$  e  $g$  serem tangentes às restrições. Em termos de implementação, isto essencialmente corresponde a ter que admitir fatorações de matrizes. Observamos que tem aparecido na literatura PQS para MRI, algoritmos que se preocupam em flexibilizar a resolução do passo em direção à otimalidade, mas que, de uma forma ou de outra, exigem, em algum momento, passos “exatamente tangentes”, sugerindo, implicitamente, algum tipo de fatoração de  $h'(x)$  em cada iteração. (Vide [Fon 90], [DEM ]).

Dembo-Eisenstat-Steihaug em [DES 82], propuseram um *método de Newton inexato*, para resolver  $F(x) = 0$  que basicamente consiste em:

DESDado  $x^{(0)}$ Ache  $s^{(k)}$  tal que  $r^{(k)} = F'(x^{(k)})s^{(k)} + F(x^{(k)})$ Faça  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$ 

Entre outras coisas mostram que, DES tem convergência local linear (numa norma adequada), desde que  $\|r^{(k)}\|/\|F'(x^{(k)})\| < \eta_{max} < 1$  e superlinear sss  $r^{(k)} = o(f(x^{(k)}))$ . Nosso objetivo nesta seção é apontar *uma maneira de tratar, de forma inexata, todas as equações lineares a serem resolvidas*, do ponto de vista da convergência global, e de forma que possamos desembocar, naturalmente, numa teoria de convergência local nos marcos de [DES 82], bem como igualmente conveniente para métodos secantes.

Yabe, Yamaki e Takahashi em [YYT 91], tratam da convergência global de um método PQS, com resolução inexata de todas as equações lineares envolvidas. Demonstram que, ao relaxar a resolução das equações de Kuhn-Tucker para o problema, dentro de determinadas folgas teóricas, apontadas no artigo, as propriedades de convergência global do método se mantêm. Nossa abordagem será bem diferente, na medida que nossa preocupação é com a construção de uma estratégia de ajuste, que nos pareça adequada a uma implementação, e na qual, igualmente se garanta propriedades de convergência global, como as obtidas para CDR.

Chamaremos de CDRIN ao algoritmo *INexato* obtido. Ele será construído de forma que CDR resulte como um caso particular.

**2.5.1 PARA UM TRATAMENTO INEXATO DE MRI**

Na realidade, há duas equações que devemos flexibilizar em CDR, pensando em  $A = h'(x_c)$ :

$$A\varphi = A(g + A^T \lambda) = 0 \quad \text{em XCOR} \quad (2.114)$$

$$A\delta_t = 0 \quad \text{em DS} \quad (2.115)$$

Além destas duas, uma terceira se imporá naturalmente para  $\delta_{soc}$ , como veremos adiante.

CDRIN será obtido, incorporando a CDR tres parâmetros,  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$  e  $\eta_{soc}$ . Eles representarão a precisão com a qual resolveremos, de forma *inexata*, tres equações. A saber:

IN1 – Equação que garante  $\delta_t$  tangente às restrições

Queremos flexibilizar a equação (2.115), de forma a obter

$$\|A\delta_t\| \leq \eta_t \|A\| \|\delta_t\| \quad (2.116)$$

IN2 – Equação do gradiente projetado  $\varphi = g + A^T \lambda_{LSI}$

Queremos resolver, de forma aproximada, a equação (2.114) de modo a obter:

$$\|A\varphi\| \leq \eta_\lambda \|A\| \|\varphi\| \quad (2.117)$$

$$\|\varphi\| \leq \|g\| \quad (2.118)$$

IN3 – Resolução inexata de  $A\delta_{soc} + \Delta h = 0$ 

A resolução *inexata* de  $\varphi$  e  $\delta_t$  pode gerar direções de subida para a  $f$ . A forma que temos para compensar isto, é forçando uma correção (*inexata*)  $\delta_{soc} \in R(A^T)$ , ao passo tangente obtido em DS, para compor o passo candidato  $x_+$  do algoritmo principal, e satisfazendo

$$\delta_{soc} = A^T \mu_{soc} \quad (2.119)$$

$$\Delta h = h(x_c + \delta_t) - h(x_c) \quad (2.120)$$

$$\|A\delta_{soc} + \Delta h\| \leq \eta_{soc} \|\Delta h\| \quad (2.121)$$

Veremos adiante, com uma generalização do lema de Taylor de segunda ordem para o caso *inexato*, que uma tal correção pode ter um efeito compensador importante, no sentido de evitar direções de subida da  $f$  que possam surgir da flexibilização de (2.116). Além disto, contribue para que se possa dar passos maiores, sem sair de um dado cilindro de confiança.

**OBSERVAÇÃO 2.5.1** SOBRE  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$  e  $\eta_{soc}$ –

Para esclarecer melhor os formatos propostos em (2.116), (2.117), (2.121), suponhamos que  $A = h'(x_c)$  tenha posto máximo. Neste caso:

- i – Ao decompor  $\delta_t$  nas suas componentes tangencial ( $P(x_c)\delta_t$ ), e normal, ( $A^T\mu$ ) às restrições, ou seja, fazendo  $\delta_t = P(x_c)\delta_t + A^T\mu$ , obtemos de (2.116):

$$\sigma_{min} \|A^T\mu\| \leq \|AA^T\mu\| \leq \|A\delta_t\|$$

Portanto,

$$\frac{\|A^T\mu\|}{\|\delta_t\|} \leq K_2(A)\eta_t \quad (2.122)$$

Podemos entender  $A^T\mu$  como um *erro* gerado na direção normal às restrições, ao permitirmos  $A\delta_t \neq 0$ . (2.122) significa que,  $\eta_t$  controla o ângulo entre  $\delta_t$  e o espaço tangente às restrições, causado pelo *erro*. Este significado geométrico, é o que orienta a definição em IN1.

- ii – Como  $\varphi$  deve ser, em cada  $x_c$ , uma aproximação de  $gp(x_c) = \operatorname{argmin}\{\|g + A^T\lambda\| : \lambda \in \mathbb{R}^m\}$ , e  $g = \nabla f(x_c)$  já é uma primeira aproximação de  $gp(x_c)$  disponível, (2.118) se impõe naturalmente. De um ponto de vista estritamente formal, seria suficiente supor  $\varphi = O(\|g\|)$ , em vez de (2.117). Por não termos mais  $A\delta_t = 0$ , nos parece natural escolher, como modelo quadrático,  $q(\delta) = \varphi^T\delta + \frac{1}{2}\delta_t^T B\delta_t$ , e tomar  $\varphi$  como a direção de Cauchy. Para que o passo de Cauchy,  $\delta_{pc}$ , seja uma escolha possível em  $DS(x_c, q, \varphi, \Delta, A, \eta_t)$ , devemos ter

$$\|A\varphi\| \leq \eta_t \|A\| \|\varphi\|$$

Isto significa que, dado IN1, IN2 se impõe naturalmente, como opção, com  $\eta_\lambda \leq \eta_t$

- iii– (2.121) é uma escolha natural para resolver, *inexatamente*, a equação  $AA^T\mu_{soc} + \Delta h = 0$ , ao exigir que para aceitar  $\delta_{soc} = A^T\mu_{soc}$ , se garanta para o resíduo  $AA^T\mu_{soc} + \Delta h$ , uma redução, na sua norma, de um valor inicial  $\|\Delta h\|$  para menos de  $\eta_{soc}\|\Delta h\|$ .

iv - Para fixar um pouco mais as coisas, suporemos daqui em diante (sem perda de generalidade) que

$$0 \leq \eta_\lambda \leq \eta_t \leq 1 \quad (2.123)$$

$$0 \leq \eta_{soc} \leq 1 \quad (2.124)$$

Note-se que  $\eta_{soc} = 1$ , corresponde a permitir que se tome  $\delta_{soc} = 0$ .

v -  $\delta_{soc}$  deixa de ser uma correção de segunda ordem, no sentido estrito  $\delta_{soc} = O(\|\delta_t\|^2)$ . No entanto cometeremos um pequeno abuso, mantendo a notação. Uma atenuante para tal abuso, pode ser buscada no lema a seguir, onde veremos que se  $x_c$  é um ponto regular de  $h$ , no lugar de  $\delta_{soc} = O(\|\delta_t\|^2)$ , obtemos  $\delta_{soc} = O(\|\eta_t \delta_t\|)$ . Portanto,  $\delta_{soc}$  será de segunda ordem com relação à  $\delta_t$ , caso  $\eta_t = O(\|\delta_t\|)$ .

Notação para esta seção A cada  $(x, \delta_t, \mu_{soc}, \lambda_{LSI}) \in \mathbb{R}^{(2n+2m)}$ , associaremos:

N.i -  $A = h'(x)$

N.ii -  $\delta_{soc} = A^T \mu_{soc}$ ,  $\delta_+ = \delta_t + \delta_{soc}$ ,  $x_+ = x + \delta_+$

N.iii -  $\Delta h = h(x + \delta_t) - h(x)$ ,  $\Delta h_+ = h(x + \delta_t + \delta_{soc}) - h(x)$

N.iv -  $g = \nabla f(x) + A^T \lambda_{LSI}$

N.v -  $W_{LSI}(x) = \nabla^2 f(x) + \lambda_{LSI}^T \nabla^2 h(x) = \nabla^2 f(x) + \sum_{i=1}^m (\lambda_{LSI})_i \nabla^2 h_i(x)$

N.vi -  $K_2(A)$  - número de condição de  $A$  na norma 2.

**LEMA 2.5.1** *Suponhamos que  $V \subset \mathbb{R}^n$  seja um compacto, no qual  $h$  é regular. Então, em*

$$U = \{(x, \delta_t, \mu_{soc}, \eta_t, \eta_{soc}) : x \in V, \text{ e valem (2.116), (2.119-2.121), (2.123-2.124)}\} \quad (2.125)$$

*podemos garantir:*

$$\mu_{soc} = K_2(A)^2 \{O(\eta_t \|\delta_t\|) + O(\|\delta_t\|^2)\} \quad (2.126)$$

$$\delta_{soc} = K_2(A) \{O(\eta_t \|\delta_t\|) + O(\|\delta_t\|^2)\} \quad (2.127)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Veja que, ao supor  $(AA^T)$  inversível, (2.116) e (2.119-2.121) podemos escrever:

$$\mu_{soc} = (AA^T)^{-1} [A\delta_t + (\Delta h - A\delta_t)] \quad (2.128)$$

$$\delta_{soc} = A^T (AA^T)^{-1} [A\delta_t + (\Delta h - A\delta_t)] \quad (2.129)$$

(2.126-2.127) resultam diretamente de (2.128-2.129), da decomposição de  $A = h'(x)$  em valores singulares, de  $h$  ser de classe  $C^1$ , bem como de sua regularidade no compacto  $V$ .  $\square$

### OBSERVAÇÃO 2.5.2 QUESTÃO TEÓRICA COLOCADA PARA CDRIN

*Resolver de forma inexata um subproblema linear, na prática corresponde a usar métodos iterativos para resolvê-los, cujas iterações sejam "relativamente baratas" computacionalmente. A questão teórica que nos parece colocada para CDRIN, neste contexto, é como permitir um ajuste dos parâmetros  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$ ,  $\eta_{soc}$ , com suficiente flexibilidade, de modo a poder economizar no número de iterações dos subproblemas lineares, sem perder as propriedades teóricas de convergência obtidas em CDR.*

Para explicitar o ajuste a ser proposto, precisamos de uma versão “inexata” do lema de Taylor de segunda ordem para MRI. No caso “exato” (vide (1.4.1)), se supomos  $A\delta_{soc} + \Delta h = 0$ , e  $B = W_{LSI}$ , obtemos  $q(\delta_t) = \mathbf{g}^T \delta_t + \frac{1}{2} \delta_t^T B \delta_t$  como a aproximação até segunda ordem da  $f$ , no sentido que  $\Delta f_+ = f(x_+) - f(x) = q(\delta_t) + o(\|\delta_t\|^2)$ , bem como  $\Delta h_+ = h(x_+) - h(x) = o(\|\delta_t\|^2)$ . Ao flexibilizarmos  $A\delta_t = 0$  e  $A\delta_{soc} + \Delta h = 0$ , obteremos:

**LEMA 2.5.2 (VERSÃO “INEXATA” DO LEMA DE TAYLOR)** *Sejam  $f$  e  $h$  de classe  $C^2$ , e  $V$  um compacto no qual  $h$  é regular. Seja, na notação explicitada em N.i–N.vi,*

$$U = \{ (x, \delta_t, \mu_{soc}, \lambda_{LSI}, \eta_t, \eta_\lambda, \eta_{soc}, B) : x \in V, B \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ é simétrica e} \\ (2.116\text{--}2.121), (2.123\text{--}2.124) \text{ se verificam} \} \quad (2.130)$$

Então, para  $q(\delta) = \mathbf{g}^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta$ , obtemos em  $U$ :

$$\Delta f_+ = q(\delta_t) + \mathbf{g}^T \delta_{soc} - \lambda_{LSI}^T (A\delta_{soc} + \Delta h) + \frac{1}{2} \delta_t^T (\nabla^2 L(x_c, \lambda_{LSI}) - B) \delta_t + \\ [O(\eta_t \|\delta_t\|^2) + o(\|\delta_t\|^2)] K_2(A)^2 \quad (2.131)$$

$$\Delta h_+ = A\delta_{soc} + \Delta h + [O(\|\eta_t \|\delta_t\|^2) + o(\|\delta_t\|^2)] K_2(A)^2 \quad (2.132)$$

$$\mathbf{g}^T \delta_{soc} = \eta_\lambda \|\mathbf{g}\| [O(\eta_t \|\delta_t\|) + O(\|\delta_t\|^2)] K_2(A)^2 \quad (2.133)$$

$$A\delta_{soc} + \Delta h = \eta_{soc} [O(\eta_t \|\delta_t\|) + O(\|\delta_t\|^2)] \quad (2.134)$$

$$\lambda_{LSI} = O(K_2(A)) \quad (2.135)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Supondo  $f$  e  $h$  de classe  $C^2$ ,  $x \in V$ , obtemos de (2.127), do fato que  $h$  é regular no compacto  $V$ , e dos desenvolvimentos de Taylor de segunda ordem para  $f$  e  $h$  em  $V$ :

$$\Delta f_+ = f(x_+) - f(x_c) = \mathbf{g}^T (\delta_t + \delta_{soc}) + \frac{1}{2} (\delta_t + \delta_{soc})^T \nabla^2 f(x_c) (\delta_t + \delta_{soc}) + o(\|\delta_t + \delta_{soc}\|^2) \\ = \mathbf{g}^T \delta_t + \mathbf{g}^T \delta_{soc} - (A^T \lambda_{LSI})^T (\delta_{soc} + \delta_t) - \frac{1}{2} \delta_t^T (\lambda_{LSI}^T \nabla^2 h(x_c)) \delta_t + \\ + \frac{1}{2} \delta_t^T (\lambda_{LSI}^T \nabla^2 h(x_c)) \delta_t + \frac{1}{2} \delta_t^T \nabla^2 f(x_c) \delta_t + O(\|\delta_{soc}\| \|\delta_t\| + \|\delta_{soc}\|^2) + o(\|\delta_t\|^2) K_2(A)^2 = \\ = \mathbf{g}^T \delta_t + \mathbf{g}^T \delta_{soc} - \lambda_{LSI}^T (A\delta_{soc} + \Delta h) + \frac{1}{2} \delta_t^T \nabla^2 L(x_c, \lambda_{LSI}) \delta_t \\ + (O(\eta_t \|\delta_t\|^2) + o(\|\delta_t\|^2)) K_2(A)^2 \quad (2.136)$$

$$\Delta h_+ = h(x_+) - h(x_c) = A(\delta_t + \delta_{soc}) + \frac{1}{2} \delta_t^T \nabla^2 h(x_c) \delta_t \\ + O(\|\delta_{soc}\| \|\delta_t\| + \|\delta_{soc}\|^2) + o(\|\delta_t + \delta_{soc}\|^2) \quad (2.137)$$

(2.131–2.132) resultam de (2.127) e (2.136–2.137).

De  $\mathbf{g}^T \delta_{soc} = (A\mathbf{g})^T \mu_{soc}$ ,  $h$  regular em  $V$ , (2.117) e (2.126) obtemos (2.133)

De (2.116), (2.121), e (2.127) resulta (2.134).

Como  $h$  é regular e de classe  $C^1$  no compacto  $V$ , (2.135) resulta de (2.118).  $\square$

Olhando para (2.131 – 2.134), definimos

$$\mathcal{E}_{\mathbf{g}} = \mathbf{g}^T \delta_{soc} = (A\mathbf{g})^T \mu_{soc} \quad (2.138)$$

$$\mathcal{E}_{soc} = A\delta_{soc} + \Delta h \quad (2.139)$$

Analogamente ao que se fez em CDR para ajudar na avaliação do passo Horizontal, escolheremos um multiplicador de Lagrange  $\lambda_+ \in \mathbb{R}^m$ , para a função de mérito, que pode ser  $\lambda_{LSI}$  ou não. Teremos para  $L(\cdot, \lambda_+)$ , a variação Horizontal valendo

$$\Delta L_H^+ = L(x_+, \lambda_+) - L(x, \lambda_+) = \Delta f_+ + \lambda_+^T \Delta h_+ \quad (2.140)$$

Definimos

$$\hat{\lambda}_+ = \lambda_+ - \lambda_{LSI} \quad (2.141)$$

e, correspondentemente, consideremos sempre U como no lema (2.5.2), ampliado com esta variável  $\lambda_+$ . Podemos substituir (2.131 – 2.132), (2.138–2.139) e (2.141), em (2.140), obtendo, em U:

$$\begin{aligned} \Delta L_H^+ &= q(\delta_t) + \mathcal{E}_p + \hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc} + \frac{1}{2} \delta_t^T (\nabla^2 L(x_c, \lambda_{LSI}) - B) \delta_t + \\ &\quad [O(\eta_t \|\delta_t\|) + o(\|\delta_t\|)] K_2(A)^2 \end{aligned} \quad (2.142)$$

Considerando apenas os termos de primeira ordem, de (2.132–2.135), (2.142) e supondo  $\lambda_+ = O(K_2(A))$ , obtemos em U:

$$\Delta L_H^+ = q(\delta_t) + \mathcal{E}_p + \hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc} + O(\|\delta_t\|) K_2(A)^2 \quad (2.143)$$

$$\Delta h_+ = \mathcal{E}_{soc} + O(\|\delta_t\|) K_2(A)^2 \quad (2.144)$$

$$\mathcal{E}_p = \eta_\lambda \|\mathcal{P}\| [O(\eta_t \|\delta_t\|) + O(\|\delta_t\|)] K_2(A)^2 \quad (2.145)$$

$$\hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc} = \eta_{soc} [O(\eta_t \|\delta_t\|) + O(\|\delta_t\|)] K_2(A)^2 \quad (2.146)$$

(2.145 – 2.146) nos informam, que  $\mathcal{E}_p$  e  $\mathcal{E}_{soc}$  determinam as principais diferenças entre (2.143-2.144) e seu análogo para o caso exato (2.69-2.68), podendo ser interpretadas como:

- $\mathcal{E}_p$  - Erro de primeira ordem em  $\Delta L_H^+$ , provocado pelo resíduo  $A\mathcal{P}$  gerado, ao se admitir soluções inexatas de  $A\mathcal{P} = 0$ . Note que, se  $A\mathcal{P} = 0$ , isto nos dá  $\mathcal{E}_p = 0$ .
- $\mathcal{E}_{soc}$  - Erro de primeira ordem em  $\Delta h_+$ , proveniente do resíduo  $\mathcal{E}_{soc} = A\delta_{soc} + \Delta h$ , gerado ao se admitir soluções inexatas de  $A\delta_{soc} + \Delta h = 0$ . A opção mais natural para a escolha de  $\lambda_+$  é tomá-lo como  $\lambda_{LSI}$ . Isto tornaria nulo, o erro  $\hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc}$  em  $\Delta L_H^+$ , proveniente do resíduo  $\mathcal{E}_{soc}$ . Já que pensamos em admitir outras possibilidades, como por exemplo, tomar  $L = f$ , admitiremos também a possibilidade de um erro de primeira ordem  $\hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc}$  em  $\Delta L_H^{(k)}$ .

A convergência global de CDR a pontos estacionários, é garantida por um argumento "tipo" *descida suficiente*, quantificada no lema (2.4.5). A análise lá feita, se baseia no fato que, dado um ponto candidato  $x_+ = x_c + \delta_t + \delta_{soc}$ , as variações de  $L(\cdot, \lambda)$  e  $h$  podem se escrever como em (2.68–2.69), reproduzidas a seguir:

$$\Delta L_H^+ = q(\delta_t) + o(\|\delta_t\|) \quad (2.69)$$

$$\Delta h_+ = o(\|\delta_t\|) \quad (2.68)$$

A partir de (2.68–2.69), dá para ver que, se um passo candidato for rejeitado em P3 de CDR porque  $L(\cdot, \lambda_+)$  não desce uma fração significativa de  $q(\delta_t)$ , podemos interpretar que a

região de confiança está grande demais, permitindo que a parte não linear de  $L(\cdot, \lambda)$ , simbolizada em  $O(\|\delta_t\|^2)$ , pese desfavoravelmente. Ao reduzirmos  $\delta_t$  suficientemente, isto deixará de acontecer. Algo parecido acontece com  $\Delta h$ , e o lema 2.4.5 quantifica isto, numa cota inferior para a descida de  $L(\cdot, \lambda)$  em (2.66).

O ajuste que promoveremos nos parâmetros  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$  e  $\eta_{soc}$ , tenta adaptar esta análise à nova situação, e tem por fundamento ( 2.143 – 2.146 ), a desempenhar, para CDRIN, um papel inteiramente análogo ao que (2.68–2.69) desempenham para CDR

As presenças de  $\mathcal{E}_\varphi$  e  $\mathcal{E}_{soc}$  em (2.143) e (2.144) *quantificam*, numa forma muito *barata* de se medir, possibilidades que não existiam em CDR para a interpretação de um fracasso ao testar  $x_+$ , no que diz respeito à adequação entre  $\Delta L_H^+$  e o modelo quadrático, numa dada região de confiança. Esta *quantificação* aponta claramente estratégias para a redução de  $\eta_t$ ,  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_{soc}$  e  $\Delta$ , em caso de fracasso do candidato  $x_+$ . Explicitaremos uma destas estratégias no procedimento AJUST, a ser usado em CDRIN.

Para compreender a descrição de AJUST, considere que se  $x_+$  for rejeitado em CDRIN, então de forma inteiramente análoga ao que acontece em CDR, isto se deverá a:

$$\|h_+\| = \|h(x_+)\| > 2\rho_c \quad \text{ou} \quad r = \frac{\Delta L_H^+}{q(\delta_t)} < 10^{-4}$$

A AJUST são dados  $\Delta L_H^+$ ,  $\|A\delta_t\|$ ,  $\mathcal{E}_\varphi$ ,  $\mathcal{E}_{soc}$ ,  $q(\delta_t)$ ,  $\hat{\lambda}_+$ ,  $\|h_+\|, \rho_c, r = \frac{\Delta L_H^+}{q(\delta_t)}$ ,  $\eta_t$ ,  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_{soc}$  e  $\Delta$ :

### AJUST

Atualize-se  $\eta_t$ ,  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_{soc}$  e  $\Delta$ , de tal modo que,  $0 \leq \eta_\lambda \leq \eta_t$ ,  $0 \leq \eta_{soc} \leq 1$  e se consiga, com a atualização feita, garantir os seguintes pontos:

a – Se  $\|h_+\| > 2\rho_c$  então

a.1 Se  $\eta_{soc}\|A\delta_t\| > \rho/2$ , então  $\eta_{soc}$  se reduziu à metade.

a.2 Se  $\eta_{soc}\|A\delta_t\| \leq \rho/2$ , então  $\Delta$  se reduziu à metade.

b – Se  $r < 10^{-4}$  e  $\Delta L_H^+ - (\mathcal{E}_\varphi + \hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc}) > \frac{1}{2}q(\delta_t)$ , então  $\Delta$  se reduziu à metade.

c – Se  $r < 10^{-4}$  e  $\mathcal{E}_\varphi + \hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc} > -\frac{1}{2}q(\delta_t)$ , então

c.1– Se  $\hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc} > -\frac{1}{4}q(\delta_t)$ , então:

c.1.a Se  $\eta_{soc}\|\hat{\lambda}_+\| \|A\delta_t\| > -\frac{1}{8}q(\delta_t)$ , então  $\eta_{soc}$  se reduziu à metade.

c.1.b Se  $\eta_{soc}\|\hat{\lambda}_+\| \|A\delta_t\| < -\frac{1}{8}q(\delta_t)$ , então  $\Delta$  se reduziu à metade.

c.2– Se  $\mathcal{E}_\varphi > -\frac{1}{4}q(\delta_t)$ , então  $\eta_\lambda$  se reduziu à metade. Opcionalmente, se permite uma redução de  $\Delta$  à metade, neste caso.

d– Opcionalmente, reduziu-se  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$  e  $\eta_{soc}$ , de tal forma que continuem não negativos. Se  $\eta_\lambda$  foi alterado, então reduziu-se pelo menos à metade.

## OBSERVAÇÃO 2.5.3 -

1- A forma como exploramos (2.143-2.146), para definir AJUST, pode ser explicada por:

A - O item a de AJUST, trata do caso no qual  $x_+$  sai do cilindro de confiança de raio  $2\rho_c$ . Note que

$$\|\mathcal{E}_{soc}\| = \|A\delta_{soc} + \Delta h\| \leq \eta_{soc}\|A\delta_t\| + \eta_{soc}O(\|\delta_t\|^2) \quad (2.147)$$

propicia uma razoável separação em  $\mathcal{E}_{soc}$ , entre “erros de primeira ordem em  $\delta_t$  controlados por  $\eta_{soc}\|A\delta_t\|$ , e os de ordem superior. Na medida que reduções em  $\eta_{soc}\eta_t$  podem se fazer à vontade, desde que haja rejeição do ponto candidato  $x_+$ , a estratégia apontada no item a.i de AJUST, correspondente ao caso no qual  $\eta_{soc}\|A\delta_t\|$  seja relativamente grande, é de primeiro continuarmos a resolver  $A\delta_{soc} + \Delta h \approx 0$ , e opcionalmente também  $A\delta_t \approx 0$ , com precisão cada vez maior, até que  $\eta_{soc}\|A\delta_t\| \leq \rho/2$ . Se isto for ineficaz para atender  $\|h_+\| < 2\rho_c$ , é porque os termos de ordem superior estão pesando muito aí, e a indicação feita em a.2, é para que se reduza o raio da região de confiança.

B - Se  $r < 10^{-4}$  e  $\Delta L_H^+ - (\mathcal{E}_\varphi + \hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc}) > .5q(\delta_t)$ , isto significa, por (2.143), que

$$|-.5q(\delta_t)| = -.5q(\delta_t) < \Delta L_H^+ - q(\delta_t) - (\mathcal{E}_\varphi + \hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc}) = O(\|\delta_t\|^2)K_2(A)^2$$

A relação acima indica, que os termos de segunda ordem em  $\Delta L_H^+$  podem estar pesando, tornando aconselhável reduzir o raio da região de confiança  $\Delta$ . Além disto, opcionalmente, pode-se reduzir também  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$  ou  $\eta_{soc}$  conforme se faculta em AJUST.d.

C - Caso  $r < 10^{-4}$  e  $\mathcal{E}_\varphi + \hat{\lambda}_+^T \mathcal{E}_{soc} > -.5q(\delta_t)$ , podemos entender que os erros devidos à imprecisão na resolução de (2.117) e/ou (2.121), saíram do limite do razoável, sendo então corrigidos a partir de c.1 e c.2.

Em c.1, a estratégia de ajuste proposta para o caso no qual  $\hat{\lambda}^T \mathcal{E}_{soc}$  fica relativamente grande, é idêntica a que foi colocada no item a.

Para o ajuste apontado em c.2, relativo ao caso no qual há rejeição de  $x_+$ , e o “erro”  $\mathcal{E}_\varphi$  fica relativamente grande, infelizmente não disporemos, computacionalmente, de uma separação tão nítida, entre termos de primeira ordem e de ordem superior em  $\|\delta_t\|$ . A estratégia aqui se fundamenta na observação, segundo a qual a presença de  $\|\varphi\|\|\delta_t\|$  no desenvolvimento até primeira ordem de  $\mathcal{E}_\varphi$ , nos propiciará uma limitação, a priori, em cada iteração de CDRIN, para o número de vezes que seríamos obrigados a reduzir  $\eta_\lambda$  em c.2, conforme ficará claro na subseção 2.5.3. Isto é o que nos permite uma escolha livre, entre reduzir ou não  $\Delta$ , com o objetivo de controlar de maneira mais fina os termos de ordem superior em (2.145), sem prejuízo para as propriedades teóricas obtidas para CDR. Pela observação 2.5.2, isto atende plenamente, ao que descrevemos como, *questão teórica colocada para a definição dos ajustes* a serem feitos, e empurra, para a implementação, a decisão entre reduzir ou não  $\Delta$  nesta situação.

D - Sempre que houver uma rejeição do passo candidato, pode ser interessante, além do que foi exigido AJUST.a-AJUST.c, reduzir  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$  e  $\eta_{soc}$ , de forma a exigir mais precisão na resolução de (2.116), (2.117), (2.121). Apenas se exige que  $\eta_\lambda$  só sofra reduções, caso sejam significativas, o que, aliás, é algo óbvio a ser feito

em qualquer implementação. Queremos evitar com isto, a possibilidade teórica de se ter infinitos retornos a *XCORIN*, para resolver de forma cada vez mais precisa (2.117), sem que necessariamente  $A\mathbf{p} \rightarrow 0$ . Se o método usado para resolver  $A\mathbf{p} = 0$ , *inexatamente*, tiver taxa de convergência linear, isto fica automaticamente garantido.

- 2 – Veja que AJUST nos dá liberdade para estabelecer uma dinâmica compensatória, entre deixar algumas inequações correrem mais frouxas, e apertar outras. Por exemplo, podemos ser menos exigentes com (2.116), ( mais cara ), desde que mais rigorosos com (2.121) e (2.117).
- 3– Observe que, ao usar AJUST no caso exato, ( $\eta_\lambda = 0$  e  $\eta_t = 0$ ), obteremos essencialmente a atualização proposta em CDR, com pequenas nuances em relação à correção  $\delta_{soc}$ . Elas ficam atendidas, caso escolhamos  $\delta_{soc} = 0$  e fixemos  $\eta_{soc} = 1$  em AJUST, ou  $\delta_{soc} = -A^T(AA^T)^{-1}\Delta h$  e, neste caso, tanto faz o que usemos como  $\eta_{soc}$  em AJUST.

## 2.5.2 DESCRIÇÃO DE CDRIN

A forma que usaremos para descrever CDRIN, consiste em destacar, apenas, os pontos nos quais sua descrição difere da que foi feita para CDR.

Veja que DS e *REST* já estão formulados de modo a permitir uma abordagem *inexata*.

Em XCOR temos uma única equação *exata* a resolver, qual seja, a procura de  $\lambda_{LS}$  que fornece  $\mathbf{p}$  em (2.117). Denotaremos por XCORIN, à versão *inexata* de XCOR. Como XCORIN só difere de XCOR no passo de atualização P1, e na admissão de  $\eta_\lambda$  como parâmetro inicial, descreveremos apenas o passo 1 de XCORIN, reiterando que os demais permanecem idênticos.

### P1 – Atualização de $A$ e $\mathbf{p}$

a – Faça  $h \rightarrow h(x)$ ;  $A \rightarrow h'(x)$  e  $g \rightarrow g(x)$

b – Ache  $\lambda_{LSI} \in \mathbb{R}^n$ , tal que  $\mathbf{p} = g + A^T\lambda_{LSI}$  e  $n_{\mathbf{p}} = \frac{\|\mathbf{p}\|}{\|g\| + 1}$  satisfaçam  $\|\mathbf{p}\| \leq \|g\|$ , bem como, uma das tres alternativas:

$$\|\mathbf{p}\| \leq \min\{\varepsilon_{tol}, \frac{\delta_{tol}}{10^3 \rho_{max}}\} \quad (2.148)$$

$$10^3 n_{\mathbf{p}} \rho_{max} < \|h(x)\| \quad (2.149)$$

$$\|A\mathbf{p}\| \leq \eta_\lambda \|A\| \|\mathbf{p}\| \quad (2.150)$$

## OBSERVAÇÃO

- i Para ver como funciona a alteração proposta, podemos pensar que estamos empregando qualquer método iterativo para resolver  $A\mathbf{p} = 0$ , que se acumule em alguma solução.

Afirmamos que P1 está bem definido, no sentido que, se  $\eta_\lambda > 0$ , então ou bem  $x$  é estacionário, ou se encontra  $\lambda_{LSI}$  satisfazendo uma das tres alternativas, num conjunto finito de iterações do referido método. Basta verificar o caso  $\varepsilon_{tol} = 0$ . Caso contrário, obtemos  $\|A\mathfrak{p}\| < \eta_\lambda \|A\| \varepsilon_{tol}$  num conjunto finito de iterações, o que significaria satisfazer (2.148) ou (2.150).

Supondo  $\varepsilon_{tol} = 0$ , se  $\|P(x)g(x)\| \neq 0$ , então (2.150) é satisfeito num conjunto finito de iterações. Caso contrário, se  $h(x) \neq 0$ , (2.149) é resolvido num conjunto finito de iterações. Portanto,  $x$  estacionário é o único caso, que pode requerer um conjunto infinito de iterações.

Observe ainda, que a formulação foi feita de maneira que, se  $\mathfrak{p}$  satisfaz (2.148) antes de satisfazer (2.149), então chegamos a um ponto de Kuhn-Tucker, dentro da precisão  $\delta_{tol}$  e  $\varepsilon_{tol}$ . Se satisfizer (2.149) antes, então uma restauração será exigida em P3 de XCORIN.

ii- Em particular, com esta formulação, XCORIN está bem definido, no sentido do teorema (2.4.1). Ou seja, exatamente os mesmos argumentos usados anteriormente, garantirão, igualmente, que cada chamada a XCORIN tenha terminação finita, a menos que convirja para um ponto estacionário de  $MRI$ , ou tenha pontos de acumulação em  $\Sigma_\varphi$ .

Passamos a descrever CDRIN. Os dados iniciais da  $k$ -ésima iteração são os mesmos colocados para CDR, acrescidos de

$$\begin{aligned} 0 &\leq \eta_\lambda \leq \eta_t \leq 1 \\ 0 &\leq \eta_{soc} \leq 1 \end{aligned}$$

Como CDRIN difere de CDR (por pouca coisa às vezes) em quase todos os passos, descreveremos abaixo a  $k$ -ésima iteração de CDRIN na íntegra, partindo da descrição feita para CDR, e ressaltando em **negrito** as modificações introduzidas.

Passo 1. Atualização de  $x_c, \rho_c$  e do modelo quadrático associado:

a)

Obtenha  $\rho_c, x_c, A_c, \mathfrak{g}_c, \lambda_{LSI}$  e  $\mathfrak{p}_c$ , aplicando **XCORIN** a  $x^{(k)}$ ,  $\rho_c, \rho_{max}, A_c, \rho_{tol}, \varepsilon_{tol}$  e  $\eta_\lambda$ .

Se XCORIN retornou no Passo 2, pare, aceitando  $x_c$  como solução.

b) Escolha uma matriz simétrica,  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , e considere:

$$q(\delta) = \mathfrak{p}_c^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta$$

Passo 2. Definição do ponto candidato  $x_+$

a) Ache  $\delta_t$ , aplicando DS a  $(x_c, q, \mathfrak{p}_c, \Delta, A_c, \eta_t)$ , e escolha  $\lambda_+ \in \mathbb{R}^m$

b) Faça  $\Delta h = h(x_c + \delta_t) - h(x_c)$

c) Escolha  $\delta_{soc} = A_c^T \mu_{soc}$ , de tal modo que

$$\|A\delta_{soc} + \Delta h\| \leq \eta_{soc} \|\Delta h\|$$

d) Faça  $\delta_+ = \delta_t + \delta_{soc}$  e  $x_+ = x_c + \delta_+$

Passo 3. Testando  $x_+$ :

a) - Faça

$$\Delta L_H^+ = L(x_+, \lambda_+) - L(x_c, \lambda_+) \quad (2.151)$$

$$r = \frac{\Delta L_H^+}{q(\delta_t)} \quad (2.152)$$

b)-Se

$$\|h(x_+)\| > 2\rho_c \text{ ou } r < 10^{-4} \quad (2.153)$$

b.i) - Use AJUST para atualizar  $\eta_t, \eta_\lambda, \eta_{soc}$  e  $\Delta$ .

b.ii) - Se  $\|A\varphi_c\| \geq \eta_\lambda \|A\| \|\varphi\|$ , vá para P1.b de XCORIN.

b.iii) - Vá para P1.b de CDRIN

Passo 4. Atualização

Faça  $\Delta L_V^- = L(x_c, \lambda_+) - L(x^{(k)}, \lambda^{(k-1)})$

a) Se

$$\Delta L_V^- \geq \frac{1}{2}(L_c^- - L(x^{(k)}, \lambda^{(k-1)})) \quad (2.154)$$

então faça  $\rho_{max} \leftarrow \rho_{max}/2$ ,

b) Se

$$\Delta L_V^- > -\frac{1}{2}\Delta L_H^- \quad (2.155)$$

faça  $L_c^- = L(x_c, \lambda_+)$ .

c)Faça  $k \leftarrow k + 1$ ;  $x^{(k)} \leftarrow x_+$ ;  $\lambda^{(k)} \leftarrow \lambda_+$ ;  $\Delta L_H^- \leftarrow \Delta L_H^+$

d)Escolha  $\Delta \geq \Delta_{min}$  e vá para o Passo 1.

### 2.5.3 CONVERGÊNCIA GLOBAL DE CDRIN

A convergência global de CDRIN será obtida, de forma praticamente idêntica à de CDR. Nossa tarefa, neste caso, se reduz a apontar tres pequenas modificações, a serem feitas nas formulações da seção 2.4, para estender os resultados lá obtidos para CDR.

Uma primeira modificação reside nas hipóteses básicas, pois HSOC deixou de fazer sentido. Do mesmo jeito que na seção 2.4, estamos assumindo até o fim desta seção as demais hipóteses básicas. Igualmente fixamos uma dada aplicação de CDRIN, gerando, como lá, seqüências  $\mathcal{Z}^{(k)}$  e  $\mathcal{Z}$  obtidas em *REST*.

A segunda, corresponde ao fato que, em CDR a primeira etapa de cada iteração é realizada em uma única chamada de *XCOR*, enquanto em CDRIN, podemos ter, na primeira etapa, várias chamadas a *XCORIN* numa mesma iteração. Isto sucederá, caso venhamos a reduzir  $\eta_\lambda$  significativamente, de modo que a solução aproximada de  $\|A\mathbf{p}\| \leq \eta_\lambda \|A\| \|\mathbf{p}\|$  deixe de se verificar, em P3.b.ii de CDRIN.

Podemos definir como *primeira etapa da iteração k*:

- i- Toda a iteração, caso  $\mathcal{Z}^{(k)}$  não seja finito, ou nela tenhamos infinitos retornos a *XCORIN*.
- ii- Caso contrário, tudo o que é definido antes do último retorno de *XCORIN*, em  $x_c^{(k)} = z^{(k,j_k)}$ . Neste caso, dizemos também, que a *primeira parte* da  $k$ -ésima iteração, tem terminação finita.

Em particular, no caso de terminação finita da iteração, definimos os *valores correntes*  $\mathbf{p}_c^{(k)}$  e  $\rho_c^{(k)}$ , do gradiente projetado aproximado e do raio da região de confiança, como aqueles obtidos no retorno da última chamada a *XCORIN*.

Ao retornar a *XCORIN*, vindo de CDRIN, numa chamada posterior à primeira, o fazemos para tentar obter uma solução melhor de  $A\mathbf{p} \approx 0$ , continuando, exatamente, no mesmo ponto onde estávamos no instante em que havíamos aceitado  $\mathbf{p}$ , na chamada anterior a *XCORIN*. Isto significa que não se alterou nenhum dado usado em *XCORIN*, exceto  $\eta_\lambda$ . Podemos entender que tudo se passa, como se a primeira etapa do algoritmo se confundisse com uma única chamada a *XCORIN*, feita com o valor final de  $\eta_\lambda$  (no caso de um numero finito de chamadas a *XCORIN*), ou com  $\eta_\lambda = 0$  no caso de infinitos retornos a *XCORIN*. Em particular, podemos manter a definição anterior, para *sucesso na primeira etapa*.

Dizemos que a *primeira etapa é bem sucedida*, caso:

- i -  $\mathcal{Z}^{(k)}$  é finita e  $x_c^{(k)} \notin \Sigma_\varphi$
- ii -  $\mathcal{Z}^{(k)}$  é infinita, e  $x^* = \lim_{j \rightarrow \infty} z^{(k,j)}$  é estacionário.

Afirmamos poder estender para cá, o teorema (2.4.1) que caracteriza fracasso em *XCOR*, e reafirmar também para CDRIN, que se a *primeira etapa da k-ésima iteração não for bem sucedida*, então  $\mathcal{Z}^{(k)}$  encontra  $\Sigma_\varphi$ , ou seja,  $\overline{\mathcal{Z}^{(k)}} \cap \Sigma_\varphi \neq \emptyset$ .

A demonstração desta afirmação, consiste de duas partes:

- a -  $\mathcal{Z}^{(k)}$  é infinita  
Neste caso, podemos usar exatamente os mesmos argumentos de antes, para garantir
- ii.

- b -  $\mathcal{Z}^{(k)}$  é finita

Neste ponto, temos uma questão nova, qual seja a possibilidade de um ciclo infinito de retornos a *XCORIN*, numa mesma iteração, inviabilizando a terminação finita da primeira etapa. Veremos que um tal ciclo não pode acontecer, a menos que  $x_c^{(k)} \in \Sigma_{\text{MRI}}$ , dentro da generalização para CDRIN que faremos do lema da descida suficiente (2.4.5).

A terceira modificação a ser introduzida, é tecnicamente mais trabalhosa, e diz respeito à “*Descida Suficiente*”.

No lema (2.4.5) para CDR, se mostrava que, se  $\mathcal{Z}^{(k)}$  é finita, e  $x_c^{(k)} \notin \Sigma_{\text{MRI}}$ , a descida  $\Delta L_H^{(k)}$  no Lagrangeano, obtida com o passo Horizontal, admitia uma cota inferior, a depender do gradiente projetado  $\mathfrak{p}_c^{(k)}$ , e do raio do cilindro de confiança  $\rho_c^{(k)}$ , mas não do número de condição de  $h'(x_c^{(k)})$ . Em CDRIN, já não nos parece possível conseguir exatamente a mesma coisa, pois agora  $\delta_{\text{soc}}$  e  $\lambda_{\text{LSI}}$  dependerão do número de condição de  $h'(x_c^{(k)})$ . O enunciado do lema de Taylor, para o caso inexato (2.5.2), sugere que as variações de L e h, dependem deste número de condição. A adequação à CDRIN, do lema de *Descida Suficiente* que enunciamos a seguir, difere da sua versão para CDR, essencialmente pela incorporação desta dependência.

Além disto, em CDR a primeira etapa ter terminação finita, significava dizer que a sequência  $\mathcal{Z}^{(k)}$  é finita. Aqui poderia acontecer, aparentemente, um ciclo infinito de retornos a XCORIN numa mesma iteração, inviabilizando a terminação finita da primeira etapa. Para dizer que  $x^{(k+1)}$  está bem definido, sob as mesmas condições colocadas para CDR, teremos que verificar que um tal ciclo não pode acontecer, a menos que  $x_c^{(k)} \in \Sigma_{\text{MRI}}$ .

**LEMA 2.5.3 ( DESCIDA SUFICIENTE PARA CDRIN )** *Se  $\mathcal{Z}^{(k)}$  for finita, e  $x_c^{(k)} = z^{(k,jk)} \notin \Sigma_{\text{MRI}}$ , então  $x^{(k+1)}$  está bem definido. Em particular, a primeira etapa terá tido terminação finita, com  $\mathfrak{p}_c^{(k)} \neq 0$ .*

*Além disto, existem constantes positivas  $\xi_1^{(k)}$ ,  $\xi_2^{(k)}$  e  $\xi_3^{(k)}$ , tais que :*

i –

$$-\Delta L_H^{(k)} = L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) - L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)}) \geq \xi_1^{(k)} \|\mathfrak{p}_c^{(k)}\| \min\{\xi_2^{(k)} \|\mathfrak{p}_c^{(k)}\|, \xi_3^{(k)} (\rho_c^{(k)})^{1/2}, \Delta_{\min}\} \quad (2.156)$$

ii – *Se a primeira etapa sempre tiver terminação finita, com  $\mathfrak{p}_c^{(k)} \neq 0$ , e  $\{x_c^{(k)}\}$  não se acumula em  $\Sigma_\rho$ , então podemos encontrar tais constantes positivas independentemente de k, ou seja, fazer  $\xi_1^{(k)} = \xi_1$ ,  $\xi_2^{(k)} = \xi_2$  e  $\xi_3^{(k)} = \xi_3$ , para todo k.*

**DEMONSTRAÇÃO** A demonstração segue, de perto, a que foi feita para CDR, e por isto “economizaremos” alguns dos argumentos já apresentados. Omitiremos o índice superscrito k, sempre que não houver confusão possível. Em particular *nunca omitiremos o índice superscrito k, nas constantes tipo  $\xi_j$  e  $\bar{\xi}_j$ , a não ser para aquelas que, de fato, independam de k.*

Suponhamos que  $x_c = x_c^{(k)} = z^{(k,jk)} \notin \Sigma_{\text{MRI}}$ . Isto significa dizer que

$$A = h'(x_c) = h'(x_c^{(k)})$$

tem posto máximo, e que  $x_c$  não é estacionário. Ao forçarmos, através P3.b.ii, soluções cada vez menos “*inexatas*” de  $A\mathfrak{p} \approx 0$ , na k-ésima iteração de CDRIN, estaremos gerando sequências de multiplicadores  $\{\lambda_i\}_{1 \leq i < i_k+1}$ , e de raios de “cilindros de confiança”  $\{\rho_i\}_{1 \leq i < i_k+1}$ , em  $x_c$ , com  $1 \leq i_k \leq \infty$ , e tais que

$$\mathfrak{p}_i = g + A^T \lambda_i \quad (2.157)$$

$$\|A\mathfrak{p}_i\| \leq \eta_{\lambda_i} \|A\| \|\mathfrak{p}_i\| \quad (2.158)$$

$$\|A\mathfrak{p}_i\| \geq \eta_{\lambda_{i+1}} \|A\| \|\mathfrak{p}_i\| \quad (2.159)$$

$$\eta_{\lambda_{i+1}} \leq \frac{1}{2} \eta_{\lambda_i} \quad (2.160)$$

(2.160) fica por conta de havermos incluído esta exigência em *AJUST*.

Note que, se  $\|A\mathbf{p}_1\| \leq \eta_\lambda \|A\| \|\mathbf{p}_1\|$ , para todo valor de  $\eta_\lambda$ , atualizado em *AJUST*, nesta  $k$ -ésima iteração de CDRIN, teremos  $i_k = 1$ , indicando que só tivemos uma chamada a XCORIN nesta iteração de CDRIN. Como queremos garantir que a primeira etapa teve terminação finita, precisaremos mostrar que  $i_k < \infty$ .

Considere ainda para  $1 \leq i < i_k + 1$ , os modelos quadráticos do Lagrangeano em  $(x_c, \lambda_i)$ , definidos na presente iteração, como

$$q_i(\delta) = \mathbf{p}_i^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B_i \delta$$

e  $x_+ = x_c + \delta_t + \delta_{soc}$ , um passo candidato, definido ao aplicar DS a  $(x_c, q_i, \mathbf{p}_i, A, \Delta, \eta_t)$ , para algum  $i < i_k + 1$  e  $\Delta > 0$ .

De HDIF, HC, (2.143–2.146) e (2.120–2.121), existem constantes positivas  $\bar{\xi}_1^{(k)}, \dots, \bar{\xi}_5^{(k)}$ , tais que

$$\Delta L_H^+ \leq q_i(\delta_t) + \mathcal{E}_{\mathbf{p}_i} + \hat{\lambda}_i^T \mathcal{E}_{soc} + \bar{\xi}_1^{(k)} K_2(A)^2 \|\delta_t\|^2 \quad (2.161)$$

$$\|h_+\| \leq \rho_i + \mathcal{E}_{soc} + \bar{\xi}_2^{(k)} K_2(A)^2 \|\delta_t\|^2 \quad (2.162)$$

$$|\mathcal{E}_{\mathbf{p}_i}| \leq [\bar{\xi}_3^{(k)} \eta_\lambda \eta_t \|\mathbf{p}_i\| \|\delta_t\| + \bar{\xi}_4^{(k)} \|\delta_t\|^2] K_2(A)^2 \quad (2.163)$$

$$\|\mathcal{E}_{soc}\| \leq \eta_{soc} \|A\delta_t\| + \bar{\xi}_5^{(k)} K_2(A)^2 \|\delta_t\|^2 \quad (2.164)$$

$$|\hat{\lambda}_i^T \mathcal{E}_{soc}| \leq \|\hat{\lambda}_i\| \eta_{soc} \|A\delta_t\| + \bar{\xi}_5^{(k)} K_2(A)^2 \|\delta_t\|^2 \quad (2.165)$$

Além disto, o lema de Taylor “inexato” 2.5.2, nos garante que as constantes positivas  $\bar{\xi}_1^{(k)} \dots \bar{\xi}_5^{(k)}$  independem de  $k$ , sob HC e a hipótese sobre  $\{x_c^k\}$  feita em ii, ou seja:

$$\overline{\{x_c^k\}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset \quad (2.166)$$

Analogamente ao que se faz em CDR, conseguimos controlar os termos quadráticos de  $\Delta L_H^+$ , bem como manter  $x_+$  dentro do cilindro de confiança desejado, com  $\Delta_i$  talvez pequeno, porém *suficientemente grande*, neste caso encontrando via (2.161 – 2.165) e DS, constantes positivas  $\bar{\xi}_6^{(k)}$  e  $\bar{\xi}_7^{(k)}$ , igualmente independentes de  $k$ , caso (2.166) se verifique, e tais que se

$$\bar{\xi}_8^{(k)} = \frac{\bar{\xi}_6^{(k)}}{K_2(A^{(k)})^2} \quad (2.167)$$

$$\bar{\xi}_9^{(k)} = \frac{\bar{\xi}_7^{(k)}}{K_2(A^{(k)})^2} \quad (2.168)$$

$$\bar{\Delta}_i = \min\{\bar{\xi}_8^{(k)} \|\mathbf{p}_i\|, \bar{\xi}_9^{(k)} \sqrt{\rho_i}, \Delta_{min}\} \quad (2.169)$$

e  $\Delta < 2\bar{\Delta}_i$ , então

$$-q_i(\delta_t) \geq \frac{1}{20} \|\mathbf{p}_i\| \Delta \quad (2.170)$$

$$\bar{\xi}_\ell^{(k)} K_2(A^{(k)})^2 \|\delta_t\|^2 < \min\left\{\frac{1}{160} \|\mathbf{p}_i\| \Delta, \frac{1}{8} \rho_i\right\}, \quad \text{para } \ell = 1, 2, 4, 5 \text{ e } 6 \quad (2.171)$$

Levando (2.170 – 2.171) em (2.161 – 2.165), conseguimos eliminar todos os termos de segunda ordem em  $\|\delta_t\|^2$ , e ficar com:

$$\Delta L_H^+ < \frac{5}{8} q_i(\delta_t) + \overline{\xi_3} \eta_\lambda \eta_t \|\mathbf{g}_i\| \|\delta_t\| + \|\hat{\lambda}_i\| \eta_{soc} \|A^{(k)} \delta_t\| \quad (2.172)$$

$$\|h_+\| \leq \frac{3}{2} \rho_i + \eta_{soc} \|A^{(k)} \delta_t\| \quad (2.173)$$

Verificaremos agora, que a primeira etapa tem terminação finita, mostrando que  $i_k < \infty$ .

Suponhamos  $i_k = \infty$ , por absurdo.

Então (2.158) e (2.160) nos garantem que  $\|A \mathbf{g}_i\| \rightarrow 0$ . Como  $A = h'(x_c)$  tem posto máximo, por hipótese, isto implica:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \lambda_i = \lambda_{LS}(x_c) \quad (2.174)$$

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \mathbf{g}_i = gp(x_c) \quad (2.175)$$

$$\|gp(x_c)\| \leq \|\mathbf{g}_i\|, \quad \text{para todo } i \in \mathbb{N} \quad (2.176)$$

Afirmamos que  $gp(x_c) \neq 0$ . Para vê-lo observe que:

- i – Se  $h(x_c) = 0$ , não há o que demonstrar, já que  $x_c$  não é estacionário, por hipótese.
- ii – Se  $h(x_c) \neq 0$ , P3 de XCORIN e (2.175) garantem que  $n_{gp(x_c)} > 10^{-3} \|h(x_c)\| / \rho_{max}$ .

Sejam:

$$\rho_c^* = 10^{-3} n_{gp(x_c)} \rho_{max} \quad (2.177)$$

$$\overline{\Delta}^{(k)} = \min\{\overline{\xi_8}^{(k)} \|gp(x_c)\|, \overline{\xi_9}^{(k)} \sqrt{\rho_c^*}, \Delta_{min}\} \quad (2.178)$$

$$\eta_{\lambda_*}^{(k)} = \frac{1}{160 \overline{\xi_3}^{(k)} K_2(A^{(k)})^2} \quad (2.179)$$

$$\eta_{soc_*}^{(k)} = \min\left\{ \frac{\|gp(x_c)\|}{320 \|\lambda_{LS}(x_c)\| \|A^{(k)}\|}, \frac{\sqrt{\rho_c^*}}{8 \overline{\xi_9}^{(k)} \|A^{(k)}\|}, \frac{\rho_c^*}{2 \|A^{(k)}\| \Delta_{min}} \right\} \quad (2.180)$$

(2.174) nos autoriza a supor  $i$  suficientemente grande, de forma que

$$\|\lambda_i\| \leq 2 \|\lambda_{LS}(x_c)\| \quad (2.181)$$

Para um tal  $i$ , (2.172–2.173) e (2.177–2.181), nos asseguram que se

$$\Delta < 2 \overline{\Delta}^{(k)} \quad (2.182)$$

$$\eta_\lambda < \eta_{\lambda_*}^{(k)} \quad (2.183)$$

$$\eta_{soc} < \eta_{soc_*}^{(k)} \quad (2.184)$$

então  $\rho_c^* \leq \rho_i$ ,  $\Delta < \Delta_i$ ,  $\Delta L_H^+ < \frac{1}{4} q_i(\delta_t)$  e  $\|h_+\| < 2\rho_i$  para todo  $i < \infty$ , e, neste caso, a  $k$ -ésima iteração termina com  $\Delta > \overline{\Delta}^{(k)}/2$ . É fácil verificar que AJUST foi definido de forma que, (2.161–2.169), (2.172–2.173), e (2.176–2.181) implicam que, se houver uma rejeição de  $x_+$ , pelo menos um dos parâmetros  $\Delta$ ,  $\eta_\lambda$  ou  $\eta_{soc}$  se reduz à metade. Além disto, se uma ou

duas das relações (2.182 – 2.184) se verificarem, qualquer rejeição de  $x_+$  implica que, pelo menos um dos parâmetros  $\Delta$ ,  $\eta_\lambda$  ou  $\eta_{soc}$  presente nas demais, terá se reduzido pelo menos a metade. Isto significa que, ou bem a  $k$ -ésima iteração terminou, definindo  $x^{(k+1)}$  antes que (2.182 – 2.184) se verifique, ou então num conjunto finito de iterações, teremos satisfeitas as relações (2.182 – 2.184). Mas isto significa  $i_k < \infty$ , ou seja, a  $k$ -ésima iteração tem terminação finita.

Sejam então  $g_c = g_{i_k}$ , e  $\rho_c = \rho_{i_k}$ .

Considere ainda o inteiro  $s^{(k)}$ , tal que  $2^{-s^{(k)}} < \eta_{\lambda_*}^{(k)} \leq 2^{-(s^{(k)}-1)}$ .

Veja que depois de  $s^{(k)}$  atualizações de  $\eta_\lambda$ , teremos garantido (2.183), e que para  $\Delta < 2\overline{\Delta}_{i_k}$ , AJUST nos diz que só teremos redução de  $\Delta$  em caráter opcional, e, mesmo assim, caso haja redução obrigatória de  $\eta_\lambda$ . Como isto só poderá ocorrer no máximo  $s^{(k)}$  vezes, teremos

$$\Delta > 2^{-s^{(k)}} \overline{\Delta}_{i_k} \quad (2.185)$$

Como a cota para a descida  $q(\delta_{PC})$ , dada por (2.71), continua válida no caso “inexato”, (2.156) segue de (2.71), (2.169), (2.185) e

$$\Delta L_H^{(k)} > -10^{-4} q_{i_k}(\delta_t) > -10^{-5} q_{i_k}(\delta_{PC})$$

Observe que, (2.166) garante  $K_2(A^{(k)})$  uniformemente limitado em  $V$ , e  $\overline{\xi}_1^{(k)} = \overline{\xi}_1 > 0 \dots \overline{\xi}_7^{(k)} = \overline{\xi}_7 > 0$ , ou seja, independentes de  $k$ . (2.167 – 2.168) garantem, neste caso, uma cota inferior positiva para  $\overline{\xi}_8^{(k)}$  e  $\overline{\xi}_9^{(k)}$ , bem como uma limitação uniforme para  $s^{(k)}$ , e portanto também a parte ii do lema.  $\square$

#### OBSERVAÇÃO 2.5.4 – BOA DEFINIÇÃO DE CDRIN

No teorema (2.4.4) mostramos a boa definição possível para a primeira etapa de CDR. Poderíamos descrevê-la dizendo que, dado  $k > 0$ , para algum  $i > k$ , uma das tres alternativas abaixo se verifica:

- i – A primeira etapa fracassa na  $i$ -ésima iteração, ou seja,  $\overline{Z}^{(i)} \cap \Sigma_\varphi \neq \emptyset$
- ii –  $Z^{(i)}$  converge para um ponto estacionário de MRI, ou então  $x_c^{(i)} = z^{(i,j_i)}$  é estacionário,
- iii –  $x^{(i)} \neq x^{(k)}$

O mesmo vale para CDRIN, e os argumentos são literalmente os mesmos que usamos para CDR, adaptados à versão inexata do lema da descida suficiente.

#### OBSERVAÇÃO 2.5.5 – CONVERGÊNCIA GLOBAL DE CDRIN

O Lema 2.4.7 que garante “espaço normal suficiente”, igualmente se generaliza para CDRIN, essencialmente, com os mesmos argumentos usados para CDR. Apenas uma pequena diferença, na segunda parte do referido lema, merece registro. Lá se garante uma cota inferior, não nula, para  $\rho_{max}^{(k)}$ , admitidas as condições (2.85–2.86). Uma adequação destas condições ao caso inexato, suficiente para garantir a desejada cota inferior para  $\rho_{max}^{(k)}$ , se escreve como

$$\|x^{(k+1)} - x_c^{(k)}\| = O(\|\varphi_c^{(k)}\|) \quad (2.186)$$

$$\|\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|\varphi_c^{(k)}\|) \quad (2.187)$$

$$\|\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|\varphi_c^{(k-1)}\|) \quad (2.188)$$

Observe que (2.186–2.187) correspondem a uma flexibilização de (2.87–2.88), para o caso inexato, na medida que  $gp(x_c^{(k)})$  não se confunde mais com  $\varphi_c^{(k)}$  como antes. Caso tenhamos  $\|gp(x_c^{(k)})\| \approx \|\varphi_c^{(k)}\|$ , é fácil ver que a condição (2.188) se verifica automaticamente, supondo (2.186–2.187). Considerando-se que não garantir  $\|gp(x_c^{(k)})\| \approx \|\varphi_c^{(k)}\|$ , é quase impensável, do ponto de vista da análise local, (2.188) é quase supérflua aí.

Lembrando que  $\varphi_c^{(k)} = g(x_c^{(k)}) + h'(x_c^{(k)})^T \lambda_{LS}^{(k)}$ , é igualmente fácil verificar que  $\lambda^{(k)} = \lambda_{LS}^{(k)}$  atende (2.187–2.188), desde que  $\delta_H^{(k)}$  satisfaça (2.186), e  $\|\varphi_c^{(k)}\| \approx \|gp(x_c^{(k)})\|$ .

*O teorema de convergência global (2.4.6) igualmente se generaliza para CDRIN, com os mesmos argumentos usados para CDR, adaptados às versões dos lemas de descida suficiente, e de espaço normal suficiente, que dispomos no caso inexato.*

Na verdade, supondo-se que a sequência gerada permanece longe de  $\Sigma_\varphi$ , obtém-se, não apenas uma subsequência  $\{x_c^{(k_j)}\}$ , tal que  $gp(x_c^{(k_j)}) \rightarrow 0$ , mas também que  $\varphi_c^{(k_j)} \rightarrow 0$ . Ou seja, não apenas obtém-se uma subsequência convergindo a um ponto estacionário, mas também garante-se seu reconhecimento pelo algoritmo. Isto acontece por que a “descida suficiente” no lema 2.5.3 se escreve em função de  $\varphi_c^{(k)}$ . Igualmente obtemos  $\varphi_c^{(k)} \rightarrow 0$  ao impormos (2.186–2.187). Como não fizemos nenhuma hipótese sobre  $\eta_\lambda$ , o fato de  $\varphi_c^{(k_j)} \rightarrow 0$ , indica que AJUST se encarrega de garantir a precisão necessária a  $\eta_\lambda$  para tanto. Tal fato, nos parece uma boa indicação de estarmos na direção correta, no que diz respeito à atualização dos parâmetros em CDRIN.

## Capítulo 3

# CONVERGÊNCIA LOCAL

O nosso objetivo neste capítulo, é estabelecer uma teoria de convergência local de CDRIN, para pontos que sejam *bons minimizadores* de MRI.

Na seção 3.1, exploramos a estrutura local existente próximo a um bom minimizador, e que servirá de suporte a toda a teoria deste capítulo.

Na seção 3.2, situamos escolhas, que nos parecem razoáveis de serem impostas sobre a construção do algoritmo, e que garantem um resultado de convergência local, em vizinhanças de bons minimizadores de MRI, com taxa linear num conjunto finito de passos. Lembramos que, nossos resultados de convergência global do capítulo anterior, nos garantem apenas, no melhor dos casos, que os pontos de acumulação obtidos sejam de Kuhn-Tucker, desde que o algoritmo seja bem sucedido em “evitar”  $\Sigma_\varphi$ .

Na seção 3.3, estabelecemos condições suficientes para a convergência superlinear em dois passos de CDRIN, com base na clássica condição de Dennis-Moré. Em particular, veremos que, se passos quasi-Newton satisfazendo uma tal condição forem testados em CDRIN, suficientemente próximos a um bom minimizador, então eles serão aceitos. Veremos ainda que, se a sequência  $\{x_c^k\}$  gerada em CDRIN convergir para um bom minimizador, para  $k$  suficientemente grande, ela pode ser identificada como proveniente de um método PQS “inexato”, associado a CDRIN. A partir desta ponte estabelecida com PQS, indicaremos maneiras de se “importar”, para CDRIN, métodos de atualização secante bem estudados em algoritmos PQS.

Na seção 3.4, formulamos um esquema conceitual ALGLOC, que descreve o comportamento de CDRIN com as escolhas efetuadas, e para o qual produzimos resultados de convergência superlinear mais finos que os obtidos na seção anterior.

Como é de praxe ao se analisar convergência local, assumimos os parâmetros de tolerância  $\varepsilon_{\text{tol}} = 0$ , e  $\rho_{\text{tol}} = 0$ . Excluiremos da análise a ser feita neste capítulo, a possibilidade de XCORIN parar num ponto de  $\Sigma_{\text{MRI}}$ , em alguma iteração de CDRIN, ou da sequência  $\mathcal{Z}$  gerada se acumular em  $\Sigma_\varphi$ . Isto nos permite concluir, do lema da restauração, da “Boa Definição de CDRIN”, descrita no teorema 2.4.3 e na observação 2.5.4, que se a primeira etapa da  $\bar{k}$ -ésima iteração de CDRIN não tiver terminação finita, então  $j_{\bar{k}} = \infty$  e  $\mathcal{Z}^{(\bar{k})} = \{z^{(\bar{k},j)} : 0 \leq j < \infty\}$  converge a um ponto de KT com taxa linear em dois passos. Esta situação é bem mais simples do que a outra, na qual CDRIN gera uma sequência infinita  $\mathcal{X}_c = \{x_c^{(k)} : 0 \leq k < \infty\}$ , e que será o principal objeto de nossa análise neste capítulo. Consideramos CDR como um caso par-

ticular de CDRIN e assumimos também, ao longo deste capítulo, que  $\mathcal{Z}$  é gerado satisfazendo todas as hipóteses assumidas no capítulo anterior, ou seja, HDIF, HB,  $H\lambda$ , HA, HPR e HC.

Gostaríamos de destacar ainda, um aspecto importante relativo à notação que usaremos. Neste capítulo, frequentemente teremos sequências referenciadas em  $\{x_c^k\}$ , como  $\{\varphi_c^{(k)}\}$ ,  $\{h(x_c^{(k)})\}$ ,  $\{\delta_V^{(k+1,j)}\}$ , mas só disporomos de informações sobre seus comportamentos para  $x_c^{(k)}$  suficientemente perto de bons minimizadores. Isto nos motiva a fixar uma notação, relativa ao conjunto dos iterados  $\{x_c^{(k)}\}$  gerados por CDRIN e subconjuntos  $U \subset \mathbb{R}^n$ , e referenciada em  $\mathcal{Z} = \{z^{(k,j)} \in \mathbb{R}^n : 0 \leq k < \bar{k} + 1, 0 \leq j < j_k + 1\}$ . Diz respeito a sequências  $\{s^{(k,j)} \subset \mathbb{R}^n, \{t^{(k,j)} \subset \mathbb{R}^n$  e  $\{w^{(k,j)} \geq 0\} \subset \mathbb{R}$ , associadas a  $\mathcal{Z}$ , no sentido que  $0 \leq k < \bar{k} + 1$  e, para cada um destes  $k$ ,  $0 \leq j < j_k + 1$ . Considere ainda o conjunto de índices  $K_I$ , para os quais  $x_c^{(k)}$  permanece em  $U$ , ou seja:

$$K_I = \{k_i : x_c^{k_i} \in U\} \quad (3.1)$$

Dizemos que  $s^{(k,j)} = t^{(k,j)} + O(w^{(k,j)})$  em  $U$ ,

- i – Se  $\{x_c^{(k)}\}$  for infinita ( $\bar{k} = \infty$ ) exigimos  $K_I$  igualmente infinito e  $s^{(k_i,j)} = t^{(k_i,j)} + O(w^{(k_i,j)})$  para as correspondentes subsequências indexadas em  $K_I$ , no sentido usual, definido na seção §1.3.1
- ii – Se  $\bar{k} < \infty$ , pelo que está firmado para este capítulo no seu início,  $z^{(\bar{k},j)}$  converge a um ponto de KT  $x^*$ . Neste caso exigimos  $x^* \in U$  e  $s^{(k,j)} = t^{(k,j)} + O(w^{(k,j)})$  no sentido usual.

Analogamente se define  $s^{(k,j)} = t^{(k,j)} + o(w^{(k,j)})$ .

Entendemos as sequências indexadas em  $(k, j)$  e associadas a  $\mathcal{Z}$ , como dotadas da ordenação *temporal* de  $\mathcal{Z}$  em CDRIN, ou seja crescentes com  $k$  e, para cada  $k$ , crescentes com  $j$ . Por exemplo, se  $\bar{k} = \infty$ , dizer que  $r^{(k,j)} = o(\|h(z^{(k,j)})\|)$  em  $U$ , significa garantir  $K_I = \{k_i : x_c^{k_i} \in U\}$  infinito, e que

$$\left\{ \frac{\|r^{(k_1,0)}\|}{\|h(z^{(k_1,0)})\|}, \dots, \frac{\|r^{(k_1,j_1)}\|}{\|h(z^{(k_1,j_1)})\|}, \frac{\|r^{(k_2,0)}\|}{\|h(z^{(k_2,0)})\|}, \dots \right\} \rightarrow 0 \quad (3.2)$$

### 3.1 ESTRUTURA LOCAL PERTO DE UM “BOM MINIMIZADOR”

Uma característica que nos parece fundamental em MRI, é a riqueza de sua estrutura local, de forte apelo geométrico numa vizinhança de um bom minimizador, em contraponto à ausência desta estrutura longe dêle. Frequentemente, resultados que dela dependem são demonstrados como lemas, associados aos métodos usados para resolver MRI, e num formato mais analítico. Na observação 1.1.1 indicamos que a chave para nossa teoria de convergência local consistiria em dispormos, perto de cada bom minimizador, de uma vizinhança tubular da variedade dual  $\mathcal{D}_{\nabla L} = \{x \in \mathbb{R}^n : \nabla_x L(x, \lambda) = 0, \text{ para algum } \lambda \in \mathbb{R}^m\}$ , cujas fibras são as superfícies de nível de  $h$ . Para facilitar a leitura deste capítulo, formalizamos tal estrutura no teorema que se segue. Conforme já apontávamos na seção 1.1, sua demonstração consiste num argumento standard de funções implícitas. Mesmo assim, optamos por apresentá-la, até por necessitarmos, em seguida, de uma parametrização da variedade dual que nela aparece.

**TEOREMA 3.1.1 ( ESTRUTURA DE  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  PERTO DE UM BOM MINIMIZADOR )**

Sejam  $f$  e  $h$  de classe  $C^2$ , e  $x^*$  um bom minimizador de MRI. Então existe vizinhança  $V^*$ , de  $x^*$ , tal que

$$\mathcal{D}^* = \mathcal{D}_{\nabla L} \cap V^*$$

é uma superfície de classe  $C^1$  e dimensão  $m$ , formada por bons minimizadores de  $f$  nos níveis vizinhos de  $\mathcal{H}_0$ . Além disto, em  $V^*$ , cada superfície de nível de  $h$ , tem um único ponto de interseção transversal com  $\mathcal{D}^*$ , e a projeção  $\Pi^* : V^* \leftarrow \mathcal{D}^*$ , definida por (1.7), qual seja

$$\Pi^*(x) = \mathcal{D}^* \cap \mathcal{H}_{h(x)}$$

está bem definida, e é de classe  $C^1$

**DEMONSTRAÇÃO**

Supondo  $x^*$  um bom minimizador, seja  $Z^*$  uma matriz cujas linhas constituam uma base do núcleo de  $A^* = h'(x^*)$ , e façamos a mudança de variáveis

$$x(z, w) = x^* + Z^{*T}z + A^{*T}w, \quad \text{onde } z \in \mathbb{R}^{n-m} \text{ e } w \in \mathbb{R}^m \quad (3.3)$$

A derivada  $J^*$ , de  $\nabla_x L(x(z, w), \lambda) : \mathbb{R}^{n+m} \rightarrow \mathbb{R}^n$  no ponto  $(0, 0, \lambda^*)$ , se escreve:

$$J^* = [\nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*)Z^{*T}, \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*)A^{*T}, A^{*T}] \quad (3.4)$$

Como  $x^*$  é um bom minimizador, obtemos

$$J^*(\mathbb{R}^{n-m}, 0, \mathbb{R}^m) = \mathbb{R}^n \quad (3.5)$$

O teorema das funções implícitas nos garante então, funções  $z(w)$  e  $\lambda(w)$  de classe  $C^1$ , definidas em alguma vizinhança  $\mathcal{M}^*$ , de  $0 \in \mathbb{R}^m$ , bem como uma vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ , tais que se  $x(z, w) \in V^*$  e  $\nabla_x L(x(z, w), \lambda) = 0$ , então  $z = z(w)$  e  $\lambda = \lambda(w)$ . Ou seja,

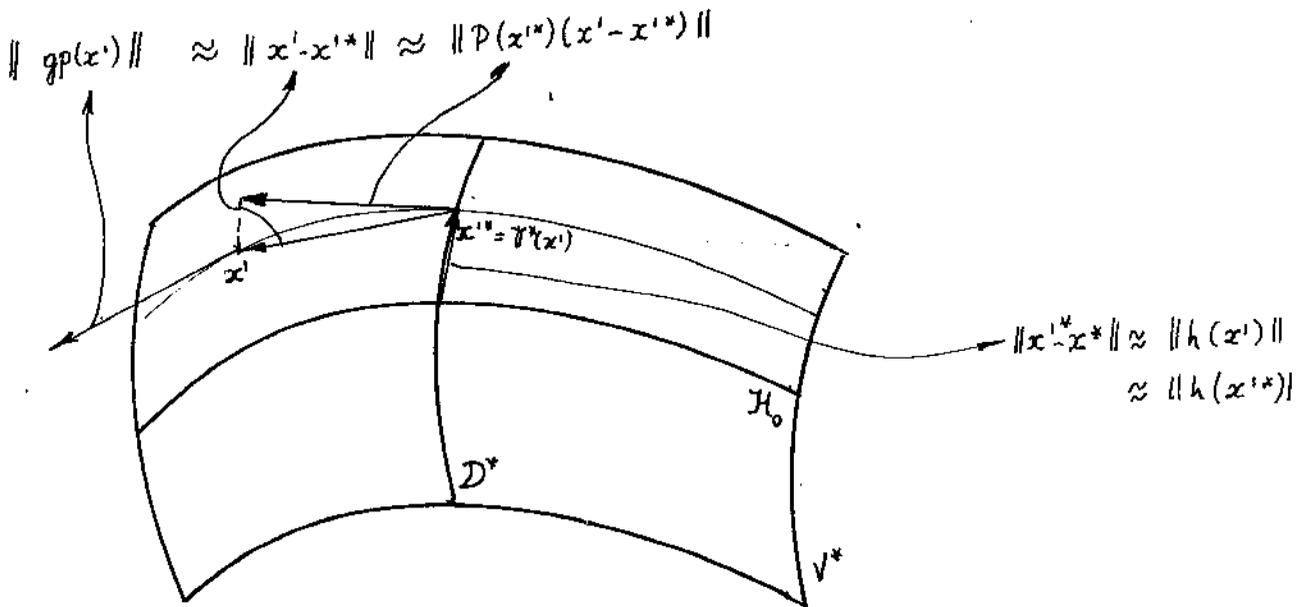
$$\mathcal{D}^* = \{x^* + Z^{*T}z(w) + A^{*T}w : w \in \mathcal{M}^*\} \quad (3.6)$$

3.6 diz que  $\mathcal{D}^*$  é o gráfico de uma função de classe  $C^1$ , definida em  $\mathcal{R}(A^{*T})$ . Portanto, se  $V^*$  for suficientemente pequena,  $\mathcal{D}^*$  será uma superfície de classe  $C^1$ , e transversal a  $\mathcal{R}(A^{*T})^\perp = \mathcal{R}(Z^{*T})$ . Daí segue a transversalidade, entre  $\mathcal{H}_{h(x)}$  e  $\mathcal{D}^*$ , em alguma vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ . Possivelmente restringindo um pouco mais  $V^*$ , obtemos a boa definição de  $\Pi^*$  em  $V^*$ .  $\Pi^*$  resulta de classe  $C^1$ , por um argumento standard com a forma local das submersões.  $\square$

A grande vantagem que vemos de olhar para uma vizinhança de  $x^*$  através de  $\Pi^*$ , reside no fato que podemos pensar a sequência  $\mathcal{Z}$ , gerada em REST e CDRIN, como alternando passos na direção *Vertical*, objetivando a factibilidade, com passos *Horizontais*, que caminham colados às fibras horizontais definidas por  $\Pi^*$ . O lema a seguir, corresponde à uma versão analítica desta estrutura, e informa sobre ordens de grandeza, dizendo basicamente que:

- $(x' - \Pi^*(x'))$  e sua projeção na direção tangente às restrições no ponto  $\Pi^*(x')$ , denotada por  $P(\Pi^*(x'))[(x' - \Pi^*(x'))]$ , assintoticamente se confundem.
- A distância entre um ponto  $x'$  e sua “projeção”  $\Pi^*(x')$  em  $\mathcal{D}^*$  é da mesma ordem de grandeza que a norma do gradiente projetado  $gp(x')$

- A distância entre  $x^*$  e a “projeção” de um ponto  $x'$  em  $\mathcal{D}^*$ , tem a ordem de grandeza da “altura”  $\|h(x')\|$ .
- A distância entre um ponto  $x'$  e  $x^*$ , pode ser medida em ordem de grandeza, por  $\|gp(x')\| + \|h(x')\|$ . Isto é o que torna esta relação atraente como função de mérito, localmente, na medida que ela dá conta de medir avanços significativos em direção a  $x^*$ , inibindo o efeito Maratos. Infelizmente, longe da solução ela não serve, mas isto não impede que a usemos localmente, desde que tenhamos como detectar, eficientemente, que estamos nos aproximando de um bom minimizador. Teoricamente, ela tem servido de base para análises de convergência local, como a que Powell empreende em [Pow 78].



Esboço geométrico das grandezas envolvidas no lema 3.1.2.

**LEMA 3.1.2 (VERSÃO ANALÍTICA DA ESTRUTURA LOCAL)**

Se  $f$  e  $h$  são de classe  $C^2$ , e  $x^*$  é um bom minimizador de MRI, então existe vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ , tal que em  $V^*$ , ( $V^* \times V^*$ , em 3.11):

$$[I - P(\Pi^*(x'))](x' - \Pi^*(x')) = o(\|x' - \Pi^*(x')\|) \tag{3.7}$$

$$P(\Pi^*(x'))(x' - \Pi^*(x')) = (x' - \Pi^*(x')) + o(\|x' - \Pi^*(x')\|) \tag{3.8}$$

$$\|gp(x')\| \approx \|x' - \Pi^*(x')\| \tag{3.9}$$

$$\|\Pi^*(x') - x^*\| \approx \|h(x')\| \tag{3.10}$$

$$\|\Pi^*(x') - \Pi^*(x'')\| = O(\|h(x') - h(x'')\|) + O(\|h(x')\|^2 + \|h(x'')\|^2) \tag{3.11}$$

$$\|x' - x^*\| \approx \|gp(x')\| + \|h(x')\| \tag{3.12}$$

$$\|x' - x^*\| \approx \|x' - \Pi^*(x')\| + \|\Pi^*(x') - x^*\| \tag{3.13}$$

**DEMONSTRAÇÃO -**

Dado um bom minimizador  $x^*$ , iniciemos com  $\Pi^*$  e uma vizinhança compacta  $V^*$ , de  $x^*$ , conforme garantidos no teorema 3.1.1. Para simplificar a notação, sejam

$$x'^* = \Pi^*(x') \text{ e } x''^* = \Pi^*(x'')$$

i – (3.7) e (3.8) dizem essencialmente a mesma coisa. Começamos demonstrando-as. Sejam:

$$\begin{aligned}\hat{\delta} &= P(x^{**})(x - x^{**}) \\ \delta_{\perp} &= (I - P(x^{**}))(x' - x^{**})\end{aligned}$$

Portanto,  $x' - x^{**} = \hat{\delta} + \delta_{\perp}$  é uma decomposição ortogonal de  $x' - x^{**}$ , nas direções normal e tangencial às restrições em  $x^{**}$ . Como  $h(x') = h(x^{**})$ , obtemos em  $V^*$

$$\begin{aligned}h(x^{**}) = h(x') &= h(x^{**}) + h'(x^{**})(\hat{\delta} + \delta_{\perp}) + o(\|\hat{\delta} + \delta_{\perp}\|) \\ \text{implicando } h'(x^{**})(\delta_{\perp}) &= o(\|\hat{\delta} + \delta_{\perp}\|)\end{aligned}\quad (3.14)$$

Como  $h'(x^{**})$  tem posto máximo e  $\delta_{\perp} \in \mathcal{R}(h'(x^{**})^T)$ , (3.14) garante (3.7–3.8)

ii– Seja  $W^{**} = \nabla_{xx}^2 L(x^{**}, \lambda_{LS}(x^{**}))$ . Então o desenvolvimento em Taylor, a propriedade Lipschitz de  $P(x)$  e  $\lambda_{LS}(x)$  em  $V^*$  e (3.8) nos dão, em  $V^*$

$$\begin{aligned}gp(x') &= P(x')\nabla L(x', \lambda_{LS}(x')) = \\ &= [P(x^{**}) + (P(x') - P(x^{**}))][W^{**}(x' - x^{**}) + h'(x^{**})^T(\lambda_{LS}(x') - \lambda_{LS}(x^{**}))] \\ &\quad + o(\|x' - x^{**}\|) \\ &= P(x^{**})W^{**}(x' - x^{**}) + o(\|x' - x^{**}\|) \\ &= P(x^{**})W^{**}P(x^{**})[P(x^{**})(x' - x^{**})] + o(\|x' - x^{**}\|)\end{aligned}\quad (3.15)$$

Como  $x^*$  é um bom minimizador, se  $V^*$  for suficientemente pequena,  $P(x^{**})W^{**}P(x^{**})$  será “suficientemente” positivo-definida, em  $P(x^{**})\mathbb{R}^n$ , de forma que (3.8) e (3.15) garantem (3.9)

iii– Como  $h$  é Lipschitz em  $V^*$ , obtemos

$$\|h(x')\| = \|h(x^{**})\| = \|h(x^{**}) - h(x^*)\| = O(\|x^{**} - x^*\|)\quad (3.16)$$

Para verificar a desigualdade 3.10 no outro sentido, considere a parametrização de  $D^*$  explicitada em (3.6), e seja  $w' \in \mathbb{R}^m$  dado pelo teorema 3.1.1, tal que:

$$x^{**} = x^* + Z^{*T}z(w') + A^{*T}w'\quad (3.17)$$

Como  $A^*A^{*T}$  tem posto máximo, temos que em  $\mathbb{R}^m$

$$\|w'\| \approx \|A^*A^{*T}w'\|\quad (3.18)$$

Como  $z(0) = 0$ , e  $z(w)$  é Lipschitz em  $V^*$ , de (3.18) encontramos  $\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2$ , (possivelmente restringindo  $V^*$ ) e tal que em  $V^*$

$$\begin{aligned}\|x^{**} - x^*\| &= \|Z^{*T}z(w') + A^{*T}w'\| \leq \bar{\xi}_1\|w'\| \\ &\leq \bar{\xi}_2\|A^*A^{*T}w'\| \\ &= \bar{\xi}_2\|A^*[Z^{*T}z(w') + A^{*T}w']\| = \bar{\xi}_2\|h(x^*) + A^*[x^{**} - x^*]\| \\ &\leq \bar{\xi}_2\|h(x^{**})\| + O(\|x^{**} - x^*\|^2) \\ &= \bar{\xi}_2\|h(x')\| + O(\|x^{**} - x^*\|^2)\end{aligned}\quad (3.19)$$

(3.16) e (3.19) garantem (3.10)

iv – Escrevamos  $x''^*$  com a mesma parametrização, ou seja

$$x''^* = x^* + Z^{*T} z(w'') + A^{*T} w'' \quad (3.20)$$

Do mesmo jeito que antes, podemos escrever para algum  $\bar{\xi}_3$ , ( possivelmente restringindo  $V^*$  ) que, em  $V^* \times V^*$

$$\begin{aligned} \|x'^* - x''^*\| &= \|Z^{*T}(z(w') - z(w'')) + A^{*T}(w' - w'')\| \\ &\leq \bar{\xi}_3 \|A^* A^{*T}(w' - w'')\| \\ &= \bar{\xi}_3 \|A^*[Z^{*T}(z(w') - z(w'')) + A^{*T}(w' - w'')]\| \\ &= \bar{\xi}_3 \|h(x^*) + A^*[x'^* - x^*] - (h(x^*) + A^*[x''^* - x^*])\| \\ &\leq \bar{\xi}_3 \|h(x'^*) - h(x''^*)\| + O(\|x'^* - x^*\|^2 + \|x''^* - x^*\|^2) \\ &\leq \bar{\xi}_3 \|h(x') - h(x'')\| + O(\|x'^* - x^*\|^2 + \|x''^* - x^*\|^2) \end{aligned} \quad (3.21)$$

(3.10) e (3.21) permitem concluir (3.11)

v – (3.12) é uma consequência imediata de (3.9–3.10), e do fato que  $gp(x)$  e  $h(x)$  são Lipschitz em  $V^*$ . (3.13) segue trivialmente de (3.9–3.12).  $\square$

## 3.2 CONVERGÊNCIA LOCAL A UM BOM MINIMIZADOR

O teorema de convergência global nos garante, na sua primeira parte, que se a sequência gerada por CDRIN não encontra a parte “ruim” do conjunto crítico do problema ( $\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \Phi$ ), então obtemos uma subsequência convergente a um ponto de Kuhn-Tucker. Com algumas hipóteses adicionais, conseguimos melhorar este resultado, para garantir que todas as subsequências convergentes tenham pontos de Kuhn-Tucker como limite. Nesta seção, discutiremos condições bastante razoáveis para garantir que o método tenha uma propriedade de convergência local a bons minimizadores de MRI, ou seja, que toda a sequência gerada, convirja a um bom minimizador  $x^*$  de MRI, desde que admita uma subsequência convergindo a  $x^*$ . Além disto, o faremos de forma a garantir que a convergência se dê com uma taxa linear em  $p$  passos, para algum inteiro  $p$ . Em particular, obteremos convergência local R-linear, a bons minimizadores. Observamos que propriedades de convergência local R-linear, nos fornecem hipóteses para resultados de convergência superlinear de métodos secantes, que independem de garantirmos, a priori, aproximações hessianas muito apuradas, perto da solução (vide os teoremas 8.8 e 8.9 de [DM 77]).

Na seção 3.2.1 situaremos as escolhas a serem assumidas, e na subseção 3.2.2 demonstramos o resultado de convergência local, decorrente das escolhas firmadas.

### 3.2.1 ESCOLHAS PARA UMA CONVERGÊNCIA LOCAL “BOA”

O objetivo principal desta subseção, é esclarecer escolhas a serem assumidas em CDRIN, que esperamos abrangentes e adequadas, no sentido de garantir a propriedade de convergência local a bons minimizadores, anunciada acima.

A segunda parte do lema 2.4.7, e a observação 2.5.5, nos fornecem uma cota inferior, não nula, a  $\rho_{max}$ , sob algumas condições dadas, e nos proporciona todos os pontos de acumulação de CDRIN serem críticos para MRI. Tendo em vista questões que esclareceremos adiante, estenderemos este resultado para uma situação que, igualmente, garante uma cota inferior para outras escolhas do Lagrangeano que auxilia na avaliação do passo “horizontal”. O faremos, de forma a incluir a própria  $f$  nestas novas possibilidades.

### CONDIÇÕES SOBRE AS PRECISÕES $\eta_t$ , $\eta_\lambda$ e $\eta_{soc}$

A primeira das hipóteses que faremos, para garantir a propriedade de convergência local perto de um bom minimizador, diz respeito às precisões  $\eta_\lambda$ ,  $\eta_t$ ,  $\eta_{soc}$ . Consideramos duas situações diferentes, conforme a escolha do multiplicador de Lagrange para a função de mérito. Em HLOC1a consideramos escolhas satisfazendo (2.187), e para as quais temos garantida uma cota inferior não nula para  $\rho_{max}^{(k)}$  (vide teorema 2.4.7 e observação 2.5.5). Em HLOC1b consideramos a situação mais geral, na qual apenas exigimos  $\lambda^{(k)}$  limitada.

#### HLOC1

Conforme a escolha do multiplicador de Lagrange  $\lambda^{(k)}$ , garanta:

a – Caso  $\|\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}^{(k)}\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|)$ :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \eta_t^{(k)} \eta_{soc}^{(k)} = 0 \quad (3.22)$$

$$|\delta_t^{(k)T} \delta_{soc}^{(k)}| \leq .9 \|\delta_t^{(k)}\| \|\delta_{soc}^{(k)}\| \quad (3.23)$$

b – No caso geral, no qual  $\lambda^{(k)}$  é apenas uniformemente limitado, faz-se a correção  $\delta_{soc}$  de tal forma que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \eta_t^{(k)} = 0 \quad (3.24)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \eta_{soc}^{(k)} = 0 \quad (3.25)$$

$$\eta_t^{(k)} \eta_{soc}^{(k)} = o(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|) \quad (3.26)$$

Além disto  $\mathcal{P}_c^{(k)}$  deve ser, nos dois casos, uma aproximação aceitável do gradiente projetado verdadeiro, no sentido de ser da mesma ordem de grandeza, em norma, que  $\|gp(x_c^{(k)})\|$ , ou seja:

$$\|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \approx \|gp(x_c^{(k)})\| \quad (3.27)$$

Raciocinando como na observação 2.5.1, é fácil ver que a condição (3.27), é satisfeita sempre que

$$\limsup \eta_\lambda^{(k)} < \liminf \frac{1}{2K_2(h'(x_c^{(k)}))} \quad (3.28)$$

Como em AJUST se estabeleceu que  $0 \leq \eta_\lambda^{(k)} \leq \eta_t^{(k)}$ , (3.24) e (3.28) garantem automaticamente (3.27) no caso b. Portanto (3.27) só representa uma restrição a mais no caso

HLOC1a. Além disto, reiteramos que o ajuste proposto em CDRIN, tende a ter um efeito de adequar  $\varphi_c^{(k)}$  a  $gp(x_c^{(k)})$ . (Vide o último parágrafo da observação 2.5.5.)

Observe que as condições colocadas em HLOC1a, são bastante pouco exigentes. Em particular, o passo de segunda ordem é dispensável neste caso, mas pode opcionalmente ser acionado caso desejemos menos precisão no passo tangente  $\delta_t$ , obtido com o modelo quadrático.

Como estamos assumindo, neste capítulo, que  $\bar{Z} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ , olhando para (2.132) e (2.134), vemos que a condição expressa em (3.22) é suficiente para garantir que  $x^{(k+1)}$  se afaste pouco, assintoticamente, do nível onde estava  $x_c^{(k)}$ , ou seja:

$$\|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| = o(\|\delta_t^{(k)}\|) \quad (3.29)$$

Já a condição (3.23), essencialmente, impede que  $\delta_t^{(k)}$  e  $\delta_{soc}^{(k)}$  fiquem numa mesma direção, caso  $\delta_{soc}^{(k)} = 0$ . Também esta é uma exigência natural, uma vez que  $\delta_{soc}^{(k)}$  está na direção normal às restrições, e  $\delta_t^{(k)}$  deveria ser “aproximadamente” tangente. Nas condições assumidas neste capítulo, (2.127) nos garante

$$\|\delta_{soc}^{(k)}\| = O(\|\delta_t^{(k)}\|) \quad (3.30)$$

(3.30) e (3.23) nos permitem concluir, facilmente, que  $\delta_H^{(k)}$  é, assintoticamente, da mesma ordem de grandeza, em norma que  $\delta_H^{(k)} = \delta_t^{(k)} + \delta_{soc}^{(k)}$ , ou seja:

$$\|\delta_t^{(k)}\| \approx \|\delta_H^{(k)}\| \quad (3.31)$$

A exigência  $\eta_t^{(k)} \rightarrow 0$ , colocada em HLOC1.b implica  $\|h'(x_c^{(k)})\delta_t^{(k)}\| = o(\|\delta_t^{(k)}\|)$ . Como estamos supondo  $\{x_c^{(k)}\}$  longe de  $\Sigma_\varphi$ , isto corresponde a forçar  $\delta_t^{(k)}$  assintoticamente tangente às restrições. Em particular, obteremos  $|\delta_t^{(k)T} \delta_{soc}^{(k)}| = o(\|\delta_t^{(k)}\| \|\delta_{soc}^{(k)}\|)$ , e portanto as relações (3.29–3.31) valem igualmente no caso HLOC1b.

Se a escolha do multiplicador de Lagrange para avaliar o mérito do passo Horizontal, ficar assintoticamente longe do multiplicador de quadrados mínimos, a sua inadequação para a análise local nos aponta a possibilidade de fenômenos da natureza do efeito Maratos, obrigando-nos a dar passos de segunda ordem com alguma precisão, para poder garantir uma propriedade de convergência local a um bom minimizador. No entanto, isto não significa que devemos descartar tais multiplicadores por causa disto. Temos em mente que pode ser interessante, longe da solução, usar como função de mérito a própria  $f$ , por exemplo, caso o Hessiano do Lagrangeano esteja facilmente disponível. Neste caso, a correção de segunda ordem pode tornar-se interessante, tanto para garantir passos grandes sem se afastar do nível corrente, longe da solução, bem como por ser, segundo o lema de Taylor para MRI 1.4.1, a melhor opção disponível para avaliar o passo obtido com o modelo quadrático, caso  $B^{(k)}$  seja uma boa aproximação de  $\nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)}))$ . Ao chegar perto da solução, isto muda de figura, e pensando um pouco na estrutura local dá para perceber que correções de segunda ordem, passam a ser um desperdício aí. A superação deste impasse, nos parece estar no ponto de vista colocado por Bertsekas, na sua análise da convergência local em [Ber 82], na qual, ele aponta para um uso de diferentes funções de mérito, dependendo de se estar “perto” ou “longe” da solução. Nos parece interessante a possibilidade de usar, inicialmente, funções de mérito adequadas aos passos a serem dados longe da solução, e, perto de um bom minimizador, tratar o problema com a riqueza de estrutura que se dispõe aí. Isto significaria, trocar a função de mérito usada até então, por uma mais adequada ao comportamento do algoritmo perto de um bom minimizador. Para tanto, a *questão teórica que nos parece colocada é a de se*

poder garantir indicações confiáveis que estamos nos aproximando de um bom minimizador. Neste nosso caso, conforme veremos na próxima seção, tais indicações estão essencialmente garantidas, no limite.

### Limitação no tamanho do passo

A segunda condição que impomos para garantir convergência local a um bom minimizador, trata de exigir uma limitação para o tamanho do passo horizontal, com relação ao gradiente projetado.

#### HLOC2

O passo dado satisfaz (2.186), ou seja,

$$x^{(k+1)} - x_c^{(k)} = O(\|\varphi_c^{(k)}\|) \quad (3.32)$$

Trata-se de uma condição bastante natural, ao pensarmos que se  $B^{(k)}$  for suficientemente positivo-definida na direção tangente às restrições, tanto os passos de Cauchy, quanto os quasi-Newton na direção tangente, satisfazem HLOC2 automaticamente, e portanto qualquer passo “decente”, neste caso, idem. Este é o caso se tomamos  $B^{(k)} = \nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)})$  supondo HLOC1.a para pontos suficientemente próximos de um bom minimizador. Condições usuais “tipo Dennis-Moré” apontam que perto de um bom minimizador isto deve acontecer se desejamos convergência superlinear. No limite sempre temos o recurso de impor uma limitação no raio da região de confiança na forma

$$\Delta \leq 10^6 \|\varphi_c^{(k)}\| / \|B^{(k)}\| \quad (3.33)$$

Dado o controle dinâmico  $\|h(x_c^{(k)})\| = O(\|\varphi_c^{(k)}\|)$ , só obtemos  $\|\varphi_c^{(k)}\|$  “pequeno” se estivermos perto de um ponto de Kuhn-Tucker. Portanto, uma tal salvaguarda, muitas vezes é até recomendável, no sentido de uma proteção contra modelos quadráticos muito mal condicionados. A não ser que,  $x_c^{(k)}$  esteja *muito próximo* de um ponto de Kuhn-Tucker, que não seja um minimizador de MRI, e do qual se deseje escapar rapidamente. Pensando assim, uma restrição a (3.33) estaria no fato de poder sugerir passos excessivamente curtos, perto de pontos de Kuhn-Tucker que não sejam minimizadores do problema. Em geral, espera-se que os iterados de algoritmos como o nosso, ao forçar descida suficiente para os passos horizontais, tendam a “fugir” de pontos de sela. De qualquer modo, nos parece que possíveis problemas com pontos de sela mal-condicionados, em qualquer abordagem que se faça, no limite, terão de ser tratados como questões de implementação, com salvaguardas específicas, se os quisermos levar em conta. \*

Demonstramos, a seguir, dois lemas que dependem de HLOC1–HLOC2, e que nos serão importantes na sequência. No primeiro deles, essencialmente registramos que a variação em  $h$  com o passo horizontal, é assintoticamente muito pequena com relação ao gradiente projetado, e que  $\|\varphi_c^{(k)}\|$  não pode crescer de forma muito brusca, de uma iteração para a outra:

#### LEMA 3.2.1 *Nas condições firmadas até aqui:*

\*Deve-se ressaltar ainda que, uma limitação no raio da região de confiança como em (3.33), poderia ter importantes contraindicações em alguns métodos secantes. Por exemplo BFGS, dada sua reconhecida capacidade de corrigir  $B^{(k)}$  próximo a um bom minimizador, conforme veremos na seção 3.3.3.

$$\|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| = o(\|gp_c^{(k)}\|) \quad (3.34)$$

$$|(h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)}))^T(\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)}))| = o(\|gp_c^{(k)}\|^2) \quad (3.35)$$

$$\|p_c^{(k+1)}\| = O(\|p_c^{(k)}\|) \quad (3.36)$$

onde  $\lambda^{(k)}$  é o multiplicador escolhido em CDRIN para auxiliar na avaliação do passo.

### DEMONSTRAÇÃO

(3.34) decorre de HLOC2, (3.29) e (3.31)

No caso HLOC1a, (3.35) decorre de (3.34) e  $\|\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|)$ .

No caso HLOC1b, (2.132), (2.134), (3.24–3.26) nos permitem melhorar (3.34) para

$$\|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| = o(\|gp_c^{(k)}\|^2) \quad (3.37)$$

(3.37) e H $\lambda$  garantem (3.35), também no caso HLOC1b.

Para estabelecer (3.36) veja que:

$$\|gp(x_c^{(k+1)})\| \leq \|gp(x_c^{(k)})\| + \|gp(x^{(k+1)}) - gp(x_c^{(k)})\| + \|gp(x_c^{(k+1)}) - gp(x^{(k+1)})\| \quad (3.38)$$

De HC, HDIF e  $\mathcal{Z} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ , obtemos  $gp(x)$  Lipschitz no compacto  $\mathcal{Z}$  (vide nota de rodapé no teorema 2.4.7). Neste contexto, (3.38), HLOC2, o lema da restauração, e o controle dinâmico garantem (3.36), através da equivalência (3.27)

□

### OBSERVAÇÃO 3.2.1 -

Veja que a variação  $\Delta L_H^{(k)}$ , do lagrangeano usado para avaliar o passo horizontal, comparada com a correspondente variação do Lagrangeano com multiplicadores de quadrados mínimos,  $\Delta L_{LS}^{(k)} = L(x^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)})) - L(x_c^{(k)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)}))$ , se escreve:

$$\Delta L_H^{(k)} = \Delta L_{LS}^{(k)} + (h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)}))^T(\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})) \quad (3.39)$$

(3.39) e (3.35) significam que, com as hipóteses HLOC1 e HLOC2, conseguimos fazer com que a variação em cada passo horizontal no lagrangeano, com um  $\lambda^{(k)}$  uniformemente limitado qualquer, se parece com a que é calculada usando  $\lambda_{LS}^{(k)}$ , a menos de um termo limitado por  $o(\|p_c^{(k)}\|^2)$ .

O próximo lema nos garante que, sob HLOC1 e HLOC2, não nos afastamos excessivamente de um bom minimizador, num conjunto finito de passos, desde que comecemos suficientemente perto dele.

**LEMA 3.2.2** *Dados  $p > 0$  e vizinhança  $\bar{V}^*$  de um bom minimizador  $x^*$ , existe vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ , tal que, se os passos dados satisfizerem HLOC1–HLOC2 e  $x_c^{(k)} \in V^*$  então  $x_c^{(k)}, x^{(k+1)}, x_c^{(k+1)}, x^{(k+2)}, \dots, x_c^{(k+p)}$ , permanecem em  $\bar{V}^*$ . Além disto, todos os  $z^{(k+i,j)} \in \mathcal{Z}$  gerados para  $0 \leq i \leq p$ , também permanecem em  $\bar{V}^*$ .*

**DEMONSTRAÇÃO-**

De HLOC1, HLOC2, (3.12), do lema da restauração 2.4.3, e do controle dinâmico obtemos, para  $x_c^k$  em alguma vizinhança de  $x^*$ :

$$\begin{aligned} \|x^{(k+1)} - x^*\| &\leq \|x^{(k+1)} - x_c^{(k)}\| + \|x_c^{(k)} - x^*\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|) + \|x_c^{(k)} - x^*\| \\ &= O(\|x_c^{(k)} - x^*\|) \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \|z^{(k+1,j)} - x^*\| &\leq \|z^{(k+1,j)} - x^{(k+1)}\| + \|x^{(k+1)} - x^*\| = O(\|h(x^{(k+1)})\|) + O(\|x_c^{(k)} - x^*\|) \\ &= O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|) + O(\|x_c^{(k)} - x^*\|) \\ &= O(\|x_c^{(k)} - x^*\|) \end{aligned} \quad (3.41)$$

(3.40–3.41) garantem o lema para  $p = 1$ . Para  $p > 1$  um argumento standard, de indução finita, completa a demonstração.  $\square$

**QUANDO RESTAURAR ANTES DE ATUALIZAR ?**

Apenas para fixar idéias, suponhamos que numa dada implementação adotemos para  $\rho$ , em P3.b de XCOR, a fórmula  $\rho = \rho^{(k,\ell)} = \rho_{max}^{(k)} n_{\mathcal{P}}(z^{(k,\ell)})$ . Além de permitida em XCOR, tal fórmula nos parece perfeitamente adequada, desde que comecemos com um  $\rho_{max}^{(0)}$  bem calibrado. Suponhamos ainda que, ao completar alguma iteração, por exemplo, a  $k$ -ésima, obtenhamos  $\|h(x^{(k+1)})\| = \rho_c^{(k)}/2$ . Veja que próximo à solução, (3.9) nos indica que cada passo horizontal dado com o objetivo de obter uma boa aproximação de  $\Sigma^*$ , tenderá a diminuir, correspondentemente, a norma do gradiente projetado. Se neste nosso exemplo, a norma do gradiente projetado,  $\|gp_c^{(k)}\|$ , diminuir sensivelmente, isto significa que muito provavelmente  $n_{\mathcal{P}}(x_c^{(k)}) = \|\mathcal{P}(x_c^{(k)})\|/(\|g(x_c^{(k)})\| + 1)$  também cairá na mesma proporção, principalmente perto de um ponto estacionário para MRI. Se  $n_{\mathcal{P}}(x_c^{(k)})$  cair a menos da metade, isto nos dará  $\|h(x^{(k+1)})\| > \rho_{max}^{(k+1)} n_{\mathcal{P}}(x_c^{(k+1)})$ , e teríamos uma nova restauração. Neste caso estaríamos queimando uma atualização dos dados, só para a restauração. Isto indica como recomendável, perto de uma solução de MRI, forçarmos na primeira iteração de XCOR, uma restauração com os dados da iteração anterior, a menos que  $\|h(x^{(k+1)})\|$  seja bem menor que  $\rho_c^{(k)}$ . Um critério bastante flexível, porém suficiente, para garantir teoricamente o que precisamos seria:

**HLOC3**

*Seja  $\alpha > 0$ . Ao iniciar XCOR numa iteração de CDRIN, utilize a opção de fazer uma restauração inicial, antes de atualizar os dados, pelo menos nos casos em que*

$$\|h(x^{(k+1)})\| \geq 10^3 \rho_{max}^{(k)} n_{\mathcal{P}}(x_c^{(k)})^{(1+\alpha)} \quad (3.42)$$

Veja que, de qualquer modo  $\|h(x^{(k+1)})\| \leq 2\rho_c^{(k)} \approx \rho_{max}^{(k)} n_{\mathcal{P}}(x_c^{(k)})$ . O argumento colocado logo acima, nos aponta que, por razões de eficiência, seria recomendável que qualquer implementação de CDRIN deveria adotar a estratégia em HLOC3, com algum  $\alpha > 0$  e, provavelmente, também com uma constante menor que  $10^3$ . Portanto, a exigência em HLOC3 corresponde a uma restrição muito suave, além de dimensionalmente correta.

**PASSOS GAUSS-NEWTON NA RESTAURAÇÃO (ASSINTOTICAMENTE)**

Uma das idéias que fundamentam nosso algoritmo, é a tão decantada robustez do método de Gauss-Newton para quadrados mínimos, na sua convergência local quadrática para pontos

regulares que anulam  $h$ . Tirando proveito disto, já que estamos supondo  $\bar{\mathcal{Z}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ , nada mais lógico do que supormos que  $\delta_V^\dagger = -A^{(k,j)\dagger}h(z^{(k,j)})$  seja sempre testado próximo da factibilidade em REST, no caso *exato*. Como estamos interessados igualmente no caso *inexato*, chegamos a:

**HLOC4** O primeiro passo  $\delta_V^\dagger = A^T \mu^+$ , testado em cada iteração de REST num ponto  $z$ , com uma aproximação  $A$  de  $h'(z)$ , satisfará em  $U = \{(z, \mu, A) : z \in \mathbb{R}^n, \mu \in \mathbb{R}^m, A \in \mathbb{R}^{m \times n}\}$ :

$$A\delta_V^\dagger + h(z) = o(\|h(z)\|) \quad (3.43)$$

Como uma restauração só é acionada em pontos nos quais  $\|h(z)\|$  “ameace” o controle dinâmico, isto significa que só seremos obrigados, por HLOC4, a dar passos próximos do passo Gauss-Newton, relativamente perto de pontos estacionários de MRI. O próximo lema trata de caracterizar o que acontece perto de um bom minimizador, caso sempre testemos inicialmente, em REST, um passo  $\delta_V^\dagger$  satisfazendo (3.43).

**LEMA 3.2.3** Supondo  $x^*$  um bom minimizador, HLOC1-4 e as demais hipóteses já firmadas:

- i* – Se  $\{x_c^{(k)}\}$  é finita e  $\mathcal{Z}$  converge para  $x^*$ , então a convergência é superlinear.
- ii* – Se alguma subsequência infinita de  $\{x_c^{(k)}\}$  converge para  $x^*$ , então existe vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ , tal que, os passos obtidos em REST satisfazem, em  $V^*$ :

$$\delta_V^{(k+1,j)} = -h'(z^{(k+1,j)})^\dagger h(z^{(k+1,j)}) + o(\|h(z^{(k+1,j)})\|) \quad (3.44)$$

$$\|h(z^{(k+1,j+1)})\| = o(\|h(z^{(k+1,j)})\|) \quad (3.45)$$

Ao definirmos o passo Vertical completo, na iteração  $(k+1)$ , como

$$\delta_V^{(k+1)} = x_c^{(k+1)} - x^{(k+1)} = \sum_{j=0}^{j_k-1} \delta_V^{(k+1,j)} \quad (3.46)$$

obtemos, em  $V^*$

$$h'(x_c^{(k)})\delta_V^{(k+1)} + h(x^{(k+1)}) = o(\|g_c^{(k)}\|) \quad (3.47)$$

$$h(x_c^{(k+1)}) = o(\|g_c^{(k)}\|) \quad (3.48)$$

## DEMONSTRAÇÃO

Como  $h'(x^*)$  tem posto máximo, suponhamos  $\bar{V}^*$  suficientemente pequena, de modo que,  $h'$  seja Lipschitz em  $\bar{V}^*$ , e para todo  $z \in \bar{V}^*$ ,  $h'(z)$  tenha posto máximo, bem como

$$\|h'(z)^\dagger\| < 2\|h'(x^*)^\dagger\| \quad (3.49)$$

*i* – Começamos supondo que uma aplicação de CDRIN se esgota na iteração  $\bar{k}$  e que  $\mathcal{Z}$  converge ao bom minimizador  $x^*$ . Como REST tem sempre terminação finita, a continuidade de  $h'(x)$ , HA e a convergência de  $\mathcal{Z}$  nos garantem que  $\lim_{j \rightarrow \infty} (A^{(k,j)} - h'(z^{(k,j)})) = 0$ . Como,

além disto,  $h'(\cdot)^\dagger$  é  $C^1$  em  $\bar{V}^*$  e  $h(z^{(k,j)}) \rightarrow 0$ , HLOC4 nos obriga a testar  $\delta_{V,+}^{(k,j)}$  inicialmente em cada iteração de REST, de forma a satisfazer

$$\delta_{V,+}^{(k,j)} = -A^{(k,j)\dagger} h(z^{(k,j)}) + o(\|h(z^{(k,j)})\|) = -h'(z^{(k,j)})^\dagger h(z^{(k,j)}) + o(\|h(z^{(k,j)})\|) \quad (3.50)$$

De (3.50) resulta facilmente a aceitação assintótica de  $\delta_{V,+}^{(k,j)}$ , assim como a convergência superlinear de  $\mathcal{Z}$ .

ii – *Suponhamos que alguma subsequência infinita  $\{x_c^{(k_i)}\}$  convirja para  $x^*$ .*

Por (3.12), (3.27), (3.54) e o controle dinâmico, podemos supor que, em  $V^*$ .

$$\|\mathcal{P}_c^{(k_i)}\| \approx \|gp(x_c^{(k_i)})\| \approx \|x_c^{(k_i)} - x^*\| \quad (3.51)$$

Seja  $V^* \subset \bar{V}^*$  uma vizinhança de  $x^*$ , tal que, se  $x_c^{(k_i)} \in V^*$ , então  $z^{(k_i+1,j)} \in \bar{V}^*$ , para todo  $z^{(k_i+1,j)}$  gerado na iteração  $k_i + 1$ , conforme nos é garantido pelo lema anterior.

*Suponhamos então  $\{x_c^{(k_i)}\}$  contido numa tal  $V^*$ , para  $i$  suficientemente grande.* Como temos  $z^{(k_i+1,j)} \in \bar{V}^*$ , para  $0 \leq j \leq j_k$ , HA, o lema da restauração 2.4.3, e o controle dinâmico nos dão:

$$\begin{aligned} \|A^{(k_i+1,j)} - A^{(k_i+1,0)}\| &\leq \xi_{atA} \|z^{(k_i+1,j)} - x^{(k_i+1)}\| \leq \xi_{atA} \xi_5 \|h(x^{(k_i+1)})\| \\ &= O(\|\mathcal{P}_c^{(k_i)}\|) \end{aligned} \quad (3.52)$$

$A^{(k_i+1,0)}$  vale  $h'(x^{(k_i+1)})$  ou  $h'(x_c^{(k_i)})$  e  $x^{(k_i+1)}$  também estará em  $\bar{V}^*$ , caso  $x_c^{(k_i)} \in V^*$ . Portanto, como  $h'(x)$  é Lipschitz em  $\bar{V}^*$ , lembrando ainda HLOC2, o lema da restauração 2.4.3, e o controle dinâmico, obtemos

$$\|A^{(k_i+1,0)} - h'(z^{(k_i+1,j)})\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k_i)}\|) \quad (3.53)$$

(3.52–3.53) nos dão

$$\|A^{(k_i+1,j)} - h'(z^{(k_i+1,j)})\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k_i)}\|) \quad (3.54)$$

Como tomar pseudo-inversas é uma função contínua numa vizinhança suficientemente pequena de  $h'(x^*)$ , (3.54) e a convergência a zero de  $\|\mathcal{P}_c^{(k_i)}\|$  garantem

$$\lim_{i \rightarrow \infty} (A^{(k_i+1,j)\dagger} - h'(z^{(k_i+1,j)})^\dagger) = 0 \quad (3.55)$$

*Suponhamos que  $\delta_{V,+}^{(k_i+1,j)}$  seja o primeiro passo a ser testado em REST no ponto  $z^{(k_i+1,j)}$ .* Obtemos, de  $\delta_{V,+}^\dagger \in \mathcal{R}(A^T)$ , (3.43) e (3.55)

$$\delta_{V,+}^{(k_i+1,j)} = -A^{(k_i+1,j)\dagger} h(z^{(k_i+1,j)}) + o(\|h(z^{(k_i+1,j)})\|) \quad (3.56)$$

$$= -h'(z^{(k_i+1,j)})^\dagger h(z^{(k_i+1,j)}) + o(\|h(z^{(k_i+1,j)})\|) \quad (3.57)$$

De (3.57) obtemos a aceitação assintótica de  $\delta_{V,+}^{(k_i+1,j)}$ , uma vez que, se  $V^*$  for suficientemente pequena e  $x_c^{(k_i)} \in V^*$

$$h(z^{(k_i+1,j)} + \delta_{V,+}^{(k_i+1,j)}) = o(\|h(z^{(k_i+1,j)})\|) \quad (3.58)$$

Conforme a notação estabelecida no início do capítulo, isto significa exatamente (3.44) em  $V^*$ , para as sequências  $s^{(k,j)} = \delta_V^{(k+1,j)}$ ,  $t^{(k,j)} = h'(z^{(k+1,j)})h(z^{(k+1,j)})$  e  $w^{(k,j)} = \|h(z^{(k+1,j)})\|$ . Analogamente, (3.58) implica (3.45) em  $V^*$ . Se  $j_k > 0$ , (3.44-3.45) implicam, em  $V^*$ ,

$$\|\delta_V^{(k+1,j+1)}\| = o(\|h(z^{(k+1,j)})\|) \quad (3.59)$$

(3.59) e o controle dinâmico nos dão, nesta  $V^*$ :

$$\delta_V^{(k+1)} = \delta_V^{(k+1,0)} + \sum_{j=1}^{j_k-1} \delta_V^{k+1,j} = \delta_V^{(k+1,0)} + o(h(x^{(k+1)})) = \quad (3.60)$$

$$= \delta_V^{(k+1,0)} + o(\|\varphi_c^{(k)}\|) \quad (3.61)$$

No caso em que há restauração na iteração, como  $A^{(k+1,0)} = h'(x_c^{(k)})$  ou  $A^{(k+1,0)} = h'(x^{(k+1)})$ , HLOC2, (3.43), (3.44), (3.61) e o controle dinâmico garantem (3.47) em  $V^*$ , enquanto que (3.45) junto com o controle dinâmico implicam (3.48) em  $V^*$ . Se nenhuma restauração é feita na iteração, HLOC3 garante o mesmo resultado.  $\square$

### Garantindo “Espaço Normal” assintoticamente

Observe que, sob as condições HLOC1a e HLOC2, o lema 2.4.7, na sua segunda parte, garante uma cota inferior positiva para  $\rho_{max}^{(k)}$ . Isto é mais do que suficiente como garantia de espaço normal, para efeitos de uma teoria de convergência local. No entanto, na sua primeira parte, o lema (2.4.7) nos garante apenas que  $\rho_{max}^{(k)}$  não diminua na  $k$ -ésima iteração, se  $\|\varphi_c^{(k)}\|$  ficar muito pequeno. Isto não impede que o raio do cilindro de confiança possa ficar muito pequeno em relação a  $\|\varphi_c^{(k)}\|$ , dependendo da história passada de  $\varphi_c^{(k)}$ . No entanto, se houver convergência para uma solução, com taxa R-linear suficiente, de modo a garantir  $\|\varphi_c^{(k)}\| \rightarrow 0$  com taxa R-linear inferior a 1/2, como  $\rho_{max}^{(k)}$  só diminua reduzindo-se à metade, neste caso obteremos

$$\|\varphi_c^{(k)}\| = O(\rho_{max}^{(k)}) \quad (3.62)$$

Ou seja, podemos interpretar que, sob (3.62),  $\|\varphi_c^{(k)}\|$  nunca fica assintoticamente “pequeno demais”, com relação a  $\rho_{max}^{(k)}$ , a ponto de poder inibir o espaço necessário aos passos horizontais para uma teoria de convergência local a pontos de KT. Uma condição como (3.62) nos parece *praticamente* indispensável, para podermos garantir que os passos a serem dados tenham, sempre, o espaço normal suficiente, para uma teoria de convergência local satisfatória para CDRIN. Considere, portanto

### HLOC5

$\{\varphi_c^{(k)}\}$  e  $\{\rho_{max}^{(k)}\}$  satisfazem (3.62)

O próximo lema interpretará (3.62), dizendo que (3.62) nos garante espaço normal suficiente, para que os passos dados em cada iteração, perto de um bom minimizador, não fiquem “muito” menores que o gradiente projetado, no sentido que:

**LEMA 3.2.4** *Sob HLOC1–HLOC5, se  $x^*$  é um bom minimizador, existem vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ , e números positivos  $\xi_*$ ,  $\xi'_*$  tais que, se  $x_c^{(k)} \in V^*$  e  $\delta_H^k$  é um passo aceito em P3 de CDRIN, então:*

$$\|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \leq \xi_* \|\delta_H^{(k)}\| \quad (3.63)$$

$$-\Delta L_H^{(k)} \geq \xi'_* \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2 \quad (3.64)$$

Em particular, obtemos em  $V^*$

$$\|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \approx \|\delta_H^{(k)}\| \quad (3.65)$$

### DEMONSTRAÇÃO

HLOC5 e P3 de XCOR nos garantem  $\bar{\xi}_1 > 0$  tal que

$$\rho_c^{(k)} \geq \bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2 \quad (3.66)$$

(3.62) e o lema da descida suficiente (2.5.3) nos garantem  $\bar{\xi}_2 > 0$  e  $\bar{\xi}_3 > 0$ , tais que

$$-\Delta L_H^{(k)} \geq \min\{\bar{\xi}_2 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2, \bar{\xi}_3 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|\} \quad (3.67)$$

(3.12), (3.27) e (3.67) nos garantem (3.64), numa vizinhança  $V^*$ , suficientemente pequena de  $x^*$ .

Por HDIF, H $\lambda$ , HB, (3.67) e Taylor, obtemos  $\bar{\xi}_* > 0$ , tal que, numa vizinhança possivelmente menor  $V^*$ , tenhamos:

$$\bar{\xi}'_* \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2 \leq -\Delta L_H^{(k)} \leq \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \|\delta_H^{(k)}\| + \bar{\xi}_* \|\delta_H^{(k)}\|^2 \quad (3.68)$$

A equação  $-\bar{\xi}'_* \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2 + \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| x + \bar{\xi}_* x^2 = 0$  tem uma raiz negativa e outra positiva, na forma

$$x = \frac{\sqrt{1 + 4\bar{\xi}_* \bar{\xi}'_*} - 1}{2\bar{\xi}_*} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \quad (3.69)$$

Como  $\|\delta_H^{(k)}\| \geq 0$ , (3.68–3.69) nos garantem  $x \leq \|\delta_H^{(k)}\|$ , o que equivale a (3.63). (3.65) segue de HLOC2 e (3.63).  $\square$

Sob HLOC1a e HLOC2, obtemos as condições da segunda parte do lema (2.4.7), e portanto uma cota inferior positiva para  $\rho_{max}^{(k)}$ . Em particular, isto nos garante (3.62), com bastante folga. Estamos também interessados em situações nas quais não se garante  $\|\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|)$ , como por exemplo, quando se usa a própria função objetivo  $f$  para avaliar o passo. No sentido de mostrar uma situação na qual se obtém HLOC5 neste caso, nosso próximo resultado trata de garantir condições para que HLOC5 se verifique também aqui. Para simplificar a argumentação, trataremos apenas do caso exato, ou seja, de CDR e suporemos  $h$  de classe  $C^3$ . O teorema 3.2.5, a seguir, estende para escolhas de  $\lambda^{(k)}$  que não satisfazem  $\|\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|)$ , a existência de uma cota inferior para  $\rho_{max}^{(k)}$ . Informalmente, fixemos idéias considerando o caso  $\lambda^{(k)} = 0$ , ou seja, a própria  $f$  para compor a avaliação de mérito do passo “horizontal”. Neste caso, perto da solução, cada restauração pode fazer a  $f$  subir relativamente muito, em relação à pequena descida conquistada para a  $f$  com o passo Horizontal. Isto sugere, fortemente, uma correção de segunda ordem para esta escolha de  $\lambda^{(k)} = 0$ . O resultado abaixo nos garante, neste caso, uma cota inferior não nula para  $\rho_{max}^{(k)}$ , desde que, além de adotar a correção de segunda ordem, também forcemos um pouco mais nas restaurações, no sentido apontado em (3.70). Se temos em mente os comentários feitos

logo após HLOC1 e, por razões de eficiência, adotarmos  $\lambda^{(k)} = 0$  apenas longe da solução, o resultado abaixo vai na direção de garantir espaço normal suficiente, para que possamos identificar estarmos chegando perto de alguma solução.

Reiteramos ainda, que estamos supondo satisfeitas as hipóteses formuladas no capítulo 2.5, para CDRIN. Em particular, estamos supondo  $\lambda^{(k)}$  uniformemente limitada. Veja ainda, que exigir  $\eta_t^{(k)} = \eta_{soc}^{(k)} = 0$ , é o mesmo que forçar uma correção de segunda ordem exata,  $\delta_{soc}^{(k)} = -h'(x_c^{(k)})^\dagger [h(x_c^{(k)} + \delta_t) - h(x_c^{(k)})]$ , na  $k$ -ésima iteração de CDR.

**TEOREMA 3.2.5** *Suponhamos  $h$  de classe  $C^3$ ,  $\eta_t^{(k)} = \eta_{soc}^{(k)} = 0$ , HLOC2 e que se force um pouco mais cada restauração, de modo a se obter*

$$\|h(x_c^{(k)})\| = O(\rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2), \quad (3.70)$$

caso haja uma restauração, na  $k$ -ésima iteração.

*Suponhamos ainda, que uma das duas estratégias abaixo seja adotada, ao aplicar CDRIN:*

- i – HLOC3 se verifica com  $\alpha = 1$*
- ii –  $\|\lambda^{(k+1)} - \lambda^{(k)}\| = O(\|\mathcal{P}_c^{(k)}\|)$*

*Então  $\rho_{max}^{(k)} \geq \rho_{max}^{(k_0)}$ , para algum  $k_0 \in \mathbb{N}$*

### DEMONSTRAÇÃO

Caso HLOC1a se verifique, caímos na situação já coberta pela segunda parte do lema (2.4.7). Basta, portanto, supor HLOC1b.

Lembramos que, o lema da descida suficiente nos garante  $\bar{\xi}_1$ ,  $\bar{\xi}_2$  e  $\bar{\xi}_3$  tais que

$$-\Delta L_H^{(k)} \geq \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \min\{\bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|, \bar{\xi}_2 \rho_c^{(k)1/2}, \bar{\xi}_3\} \quad (3.71)$$

Observe que, se na  $k$ -ésima iteração não há restauração, então ambas as alternativas i e ii do enunciado, juntamente com o controle dinâmico nos garantem, para  $k$  suficientemente grande,

$$|\Delta L_V^{(k)}| = |(\lambda^{(k+1)} - \lambda^{(k)})^T h(x^{(k+1)})| = O(\rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2) \quad (3.72)$$

O mesmo argumento usado na segunda parte do lema (2.4.7), garante neste caso um  $\tilde{\rho}_{max}$  tal que, se  $\rho_{max}^{(k)} \leq \tilde{\rho}_{max}$ , então

$$|\Delta L_V^{(k)}| < -\frac{1}{8} \Delta L_H^{(k)} \quad (3.73)$$

Em particular  $\rho_{max}^{(k)}$  não diminui nesta iteração.

Suponhamos agora  $k_1$  e  $k_2$  suficientemente grandes, e correspondendo a duas iterações nas quais há restaurações, porém de forma que, entre  $k_1$  e  $k_2$  não se faça nenhuma restauração adicional. Neste caso, de (2.22) e (3.73) obtemos

$$\begin{aligned} \Delta L^{(k_1, k_2)} &= L(x_c^{(k_2)}, \lambda^{(k_2)}) - L(x_c^{(k_1)}, \lambda^{(k_1)}) = \sum_{k=k_1}^{k_2-1} (\Delta L_H^{(k)} + \Delta L_V^{(k)}) \\ &\leq \frac{7}{8} \sum_{k=k_1}^{k_2-2} \Delta L_H^{(k)} + \Delta L_H^{(k_2-1)} + \Delta L_V^{(k_2-1)} \end{aligned} \quad (3.74)$$

A idéia, agora, é distribuir a compensação de uma possível subida de  $\Delta L_V^{(k_2-1)}$ , entre as  $(k_2 - k_1)$  parcelas  $\Delta L_H^{(k)}$  em (3.74). Para fazê-lo, observamos inicialmente, que HL e HC nos garantem uma condição Lipschitz,  $\xi_L$ , para  $L(\cdot, \lambda^{(k_2-1)})$  em  $\mathcal{Z}$ . Desta condição, junto com o lema da restauração 2.4.3.iii, HL, (3.70) e (3.36), obtemos constantes positivas  $\bar{\xi}_4$ ,  $\bar{\xi}_5$  e  $\bar{\xi}_6$ , tais que:

$$\begin{aligned} \Delta L_V^{(k_2-1)} &= L(x_c^{(k_2)}, \lambda^{(k_2)}) - L(x^{(k_2)}, \lambda^{(k_2-1)}) \\ &= L(x_c^{(k_2)}, \lambda^{(k_2-1)}) - L(x^{(k_2)}, \lambda^{(k_2-1)}) + (\lambda^{(k_2)} - \lambda^{(k_2-1)})^T h(x_c^{(k_2)}) \\ &\leq \xi_L \|x_c^{(k_2)} - x^{(k_2)}\| + \bar{\xi}_4 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k_2)}\|^2 \\ &\leq \bar{\xi}_5 \|h(x^{(k_2)})\| + \bar{\xi}_6 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k_2-1)}\|^2 \end{aligned} \quad (3.75)$$

Aplicaremos uma “soma telescópica” em  $\|h(x^{(k_2)})\|$ , visando usar a condição que garante (3.70) para  $\|h(x_c^{(k_1)})\|$ . Não haver restauração para  $k_1 < k < k_2$ , significa  $x_c^{(k)} = x^{(k)}$ , para  $k_1 < k < k_2$ . Nestas condições, de HLOC2, (3.70) e (3.75), obtemos  $\bar{\xi}_7 > 0$ , tal que:

$$\begin{aligned} \Delta L_V^{(k_2-1)} &\leq \sum_{k=k_1}^{k_2-1} \bar{\xi}_5 \|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| + \bar{\xi}_5 \|h(x_c^{(k_1)})\| + \bar{\xi}_6 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k_2-1)}\|^2 \\ &\leq \sum_{k=k_1}^{k_2-1} \bar{\xi}_5 \|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| + \bar{\xi}_7 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k_1)}\|^2 + \bar{\xi}_6 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k_2-1)}\|^2 \end{aligned} \quad (3.76)$$

Do mesmo jeito que para  $\Delta L_V^{(k)}$ , em (3.73) acima, possivelmente diminuindo  $\tilde{\rho}_{max}$ , conseguimos garantir que, se  $\rho_{max}^{(k)} \leq \tilde{\rho}_{max}$ , e k for suficientemente grande, então

$$\bar{\xi}_7 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k_1)}\|^2 + \bar{\xi}_6 \rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k_2-1)}\|^2 \leq -\frac{1}{8} (\Delta L_H^{(k_1)} + \Delta L_H^{(k_2-1)}) \quad (3.77)$$

Para completar a limitação procurada para  $\Delta L_V^{(k_2-1)}$ , basta mostrar que existe  $\tilde{\rho}_{max}$ , tal que, se  $\rho_{max}^{(k)} \leq \tilde{\rho}_{max}$ , então obtem-se, para todo k entre  $k_1$  e  $k_2 - 1$ , que:

$$\bar{\xi}_5 (\|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\|) \leq -\frac{1}{8} \Delta L_H^{(k)} \quad (3.78)$$

Como estamos supondo h de classe  $C^3$ , e  $\eta_t^{(k)} = \eta_{soc}^{(k)} = 0$ , HLOC2 e o lema de Taylor nos fornecem constantes positivas  $\bar{\xi}_8$  e  $\bar{\xi}_9$ , de modo que

$$\|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| \leq \bar{\xi}_8 \|\delta_t\|^3 \leq \bar{\xi}_9 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^3 \quad (3.79)$$

possa nos melhorar a estimativa (3.71), ao fornecer  $\bar{\xi}_{10} > 0$  satisfazendo

$$-\Delta L_H^{(k)} \geq \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \min\{\bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|, \bar{\xi}_{10} \rho_c^{(k)1/3}, \bar{\xi}_3\} \quad (3.80)$$

O controle dinâmico nos garante  $\bar{\xi}_{11} > 0$ , tal que

$$\bar{\xi}_5 \|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| \leq \bar{\xi}_{11} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \rho_{max}^{(k)} \quad (3.81)$$

Analisamos, a seguir, cada uma das possibilidades para

$$MIN^{(k)} = \min\{\bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|, \bar{\xi}_{10} \rho_c^{(k)1/3}, \bar{\xi}_3\}$$

$$i - MIN^{(k)} = \bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|$$

Neste caso,  $-\Delta L_H^{(k)} \geq \bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2$  e (3.79) garantem (3.78), desde que

$$\|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \leq b = \frac{\bar{\xi}_1}{8\bar{\xi}_5\bar{\xi}_9} \quad (3.82)$$

Se  $\|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \geq b$ , satisfaremos (3.78), caso

$$\rho_{max}^{(k)} \leq \tilde{\rho}_{max} = \frac{\bar{\xi}_1 b}{8\bar{\xi}_{11}} \quad (3.83)$$

$$ii - MIN^{(k)} = \bar{\xi}_{10} \rho_c^{(k)1/3}$$

Neste caso, teremos  $\bar{\xi}_{12}$  tal que

$$\bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\| \geq \bar{\xi}_{10} \rho_c^{(k)1/3} \geq \bar{\xi}_{12} (\rho_{max}^{(k)} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|)^{1/3}$$

implicando para  $\bar{\xi}_{13} = (\bar{\xi}_1/\bar{\xi}_{12})^3$

$$\rho_{max}^{(k)} \leq \frac{\bar{\xi}_1 \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^2}{\bar{\xi}_{13}} \quad (3.84)$$

$$-\Delta L_H^{(k)} \geq \bar{\xi}_{10} \rho_{max}^{(k)1/3} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^{4/3} \quad (3.85)$$

De (3.81) e (3.83–3.84), obtemos

$$\begin{aligned} \bar{\xi}_5 \|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\| &\leq \frac{\bar{\xi}_1 \bar{\xi}_{13}^{-1/6}}{\bar{\xi}_{11} \bar{\xi}_{13}} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^{4/3} \rho_{max}^{(k)5/6} \\ &\leq \frac{1}{8} \bar{\xi}_{10} \rho_{max}^{(k)1/3} \|\mathcal{P}_c^{(k)}\|^{4/3} \\ &\leq -\frac{1}{8} \Delta L_H^{(k)} \end{aligned} \quad (3.86)$$

desde que

$$\rho_{max}^{(k)} \leq \tilde{\rho}_{max} = \left( \frac{\bar{\xi}_{10}}{8\bar{\xi}_{11} \bar{\xi}_{13}^{-1/6}} \right)^2 \quad (3.87)$$

$$iii - MIN^{(k)} = \bar{\xi}_3$$

Neste caso, fazendo

$$\tilde{\rho}_{max} = \frac{\bar{\xi}_3}{8\bar{\xi}_{11}} \quad (3.88)$$

atendemos (3.78), caso  $\rho_{max}^{(k)} \leq \tilde{\rho}_{max}$

Fazendo  $\tilde{\rho}_{max}$  como o menor dos valores encontrados em (3.83), (3.87) e (3.88), obtemos (3.78). De (3.74), (3.77) e (3.78) obtemos

$$\Delta L^{(k_1, k_2)} < \frac{1}{2} \sum_{k=k_1}^{k_2-1} \Delta L_H^{(k)}$$

garantindo assim, que também quando há restauração,  $\rho_{max}^{(k)}$  não se reduz abaixo de algum valor positivo, após um conjunto finito de iterações.  $\square$

### 3.2.2 CONVERGÊNCIA LOCAL LINEAR A CADA $p$ PASSOS

Nosso resultado básico desta seção, garante convergência local linear num conjunto finito de passos, sob as condições discutidas na §3.2.1, e supondo uma subsequência convergente a um bom minimizador  $x^*$ . Na verdade, mostraremos que podemos dotar uma vizinhança  $V^*$ , de  $x^*$ , com uma função contínua  $q^*(x) \geq 0$ , da mesma ordem de grandeza, em  $V^*$ , que qualquer norma do  $\mathbb{R}^n$ , e tal que  $q^*(x)$  tem convergência linear a zero em  $x^*$ .

Sob as hipóteses firmadas no capítulo 2, se a  $k$ -ésima iteração de CDRIN não tiver terminação finita, e  $\mathcal{Z}^{(k)}$  não se acumular em  $\Sigma_\varphi$ , obteremos convergência linear em dois passos de  $\mathcal{Z}^{(k)} = \{z^{(k,j)} : 0 \leq j < \infty\}$  a um ponto de KT  $x^*$ . Se  $x^*$  for um bom minimizador, e valer também HLOC1-HLOC4, o lema 3.2.3 nos garante que a convergência é superlinear. Como estaremos analisando CDRIN, daqui para a frente, assumindo também  $\bar{\mathcal{Z}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$  e HLOC1-HLOC5, não há mais nada que nos pareça valer a pena explicitar, supondo que CDRIN se esgota em alguma iteração  $k$ . Em resumo, estamos assumindo, ao longo do resto deste capítulo, que

$\mathcal{X}_c = \{x_c^{(k)} : 0 \leq k < \infty\}$  é uma sequência gerada em CDRIN tal que, além de satisfazer às hipóteses formuladas no capítulo 2 e  $\bar{\mathcal{Z}} \cap \Sigma_\varphi = \emptyset$ , conforme indicação feita na introdução deste capítulo, igualmente satisfaz HLOC1-HLOC5.

#### TEOREMA 3.2.6 (CONVERGÊNCIA LOCAL LINEAR EM $p$ PASSOS )

Se  $\{x_c^{(k)}\}$  admitir uma subsequência convergente a um bom minimizador  $x^*$ , então existe inteiro  $p > 0$  tal que toda a sequência converge para  $x^*$ , com taxa linear em  $p$  passos. Em particular, a convergência é  $R$ -linear.

A demonstração do teorema se fará, generalizando a demonstração do mesmo resultado, no caso de minimização sem restrições. No sentido de motivar a construção a ser feita, discutiremos inicialmente este caso particular.

#### OBSERVAÇÃO 3.2.2 - CASO DE MINIMIZAÇÃO SEM RESTRIÇÕES

Pensando no caso  $m = 0$ , temos aí um algoritmo típico para minimização sem restrições, com passos de “descida suficiente”, em regiões de confiança, bem como aproximações hessianas  $B^{(k)}$  limitadas.

Seja  $x^*$  um bom minimizador de  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

O lema da descida suficiente e HLOC2, neste caso, garantiriam  $\bar{\xi}_1 > 0$  e uma vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ , tais que, se  $x^{(k)} \in V^*$ , então:

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = O(\|g(x^{(k)})\|) = O(\|x^{(k)} - x^*\|) \quad (3.89)$$

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \leq -\bar{\xi}_1 \|g(x^{(k)})\|^2 \quad (3.90)$$

Como o polinômio de Taylor quadrático da  $f$ , em torno de  $x^*$ , tem hessiana  $W^* = \nabla^2 f(x^*)$  positivo-definida, ele define uma norma  $\|\cdot\|_{W^*}$  no  $\mathbb{R}^n$ . É imediato obter daí, numa vizinhança  $V^*$ , possivelmente menor, de  $x^*$ :

$$\|x - x^*\|_{W^*}^2 = q^*(x) = (x - x^*)^T W^* (x - x^*) \approx \|g(x)\|^2 \quad (3.91)$$

Como  $q^*$  é o polinômio de Taylor de grau 2, em  $x^*$ , e  $f$  é de classe  $C^2$ , (3.89) nos dá, em  $V^*$ ,

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) = q^*(x^{(k+1)}) - q^*(x^{(k)}) + o(\|x^{(k)} - x^*\|^2) \quad (3.92)$$

(3.90–3.92) nos garantem  $\bar{\xi}_2 > 0$  tal que, possivelmente restringindo a vizinhança  $V^*$ , nela obtenhamos

$$\begin{aligned} q^*(x^{(k+1)}) - q^*(x^{(k)}) &\leq -\bar{\xi}_2 q^*(x^{(k)}) \\ \text{ou seja, } \|x^{(k+1)} - x^*\|_{W^*} &\leq \sqrt{1 - \bar{\xi}_2} \|x^{(k)} - x^*\|_{W^*} \end{aligned} \quad (3.93)$$

De (3.93) é fácil concluir uma versão do teorema 3.2.6 para MSR, ou seja :

*Se uma sequência  $\{x^{(k)}\}$  for gerada satisfazendo (3.89–3.90), e alguma subsequência convergir a um bom minimizador  $x^*$ , então toda a sequência converge para  $x^*$ , com taxa linear na norma  $\|\cdot\|_{W^*}$ . Em particular, isto garante a taxa linear num conjunto finito de passos, em qualquer norma.*

Fixemos, pelo resto do capítulo 3,  $x^*$  para denotar um bom minimizador, bem como  $(V^*, \Pi^*)$  para designar uma vizinhança tubular de  $x^*$ , como a que é fornecida no teorema (3.1.1), e com as propriedades garantidas no lema (3.1.2). Manteremos, igualmente, a notação do lema, ou seja, escreveremos  $x'^* = \Pi^*(x')$ , para  $x' \in V^*$ .

Como  $\nabla L(x'^*, \lambda_{LS}(x'^*)) = 0$ , no compacto  $V^*$ , o lema de Taylor se escreve como

$$L(x', \lambda_{LS}(x'^*)) - L(x'^*, \lambda_{LS}(x'^*)) = q^*(x') + o(\|x' - x'^*\|^2), \quad \text{onde,} \quad (3.94)$$

$$q^*(x') = \frac{1}{2} (x' - x'^*)^T \nabla_{xx}^2 L(x'^*, \lambda_{LS}(x'^*)) (x' - x'^*) + o(\|x' - x'^*\|^2) \quad (3.95)$$

A demonstração do teorema 3.2.6 generaliza a análise apontada para MSR, ao fazer, em cada nível de  $h$ , e considerando  $q^*$  definida em (3.95), essencialmente a mesma conta que fizemos no caso MSR.  $q^*$  deixa de ser um polinômio quadrático, porém pela observação (1.1.1),  $\Pi^*$  é de classe  $C^1$ . Dado HDIF,  $\nabla_{xx}^2 L(\Pi^*(x), \lambda_{LS}(\Pi^*(x)))$  resulta contínua em  $V^*$  e portanto  $q^*$  também é contínua em  $V^*$ . Como  $W^*$  é positivo-definida na direção tangente às restrições, é fácil ver de (3.7–3.9) que, possivelmente restringindo um pouco  $V^*$ , nela obtemos

$$q^*(x') \geq 0 \quad (3.96)$$

$$q^*(x') \approx \|x' - \Pi^*(x')\|^2 \approx \|gp(x')\|^2 \quad (3.97)$$

(3.96–3.97) permitem interpretar  $q^*$  como uma medida, em  $V^*$ , do quadrado da distância entre cada ponto de  $V^*$  e o minimizador, em  $V^*$ , da superfície de nível na qual ele se encontre.

Para a demonstração do teorema, precisaremos de alguns lemas preliminares. Os dois próximos lemas generalizarão para MRI, propriedades que  $q^*$  satisfaz no caso MSR. O primeiro deles se destina a verificar que  $q^*$  exerce, com relação ao Lagrangeano que ajuda a avaliar o passo horizontal  $L(x_c^{(k)} + \cdot, \lambda^{(k)})$ , um papel análogo ao que exercia com relação a função objetivo em (3.92), no caso MSR.

LEMA 3.2.7 - *Existe vizinhança  $\tilde{V}^*$  de  $x^*$  tal que em  $\tilde{V}^*$ :*

$$\Delta L_H^{(k)} = q^*(x^{(k+1)}) - q^*(x_c^{(k)}) + o(\|gp(x_c^{(k)})\|^2) \quad (3.98)$$

**DEMONSTRAÇÃO**

Dado um  $V^*$  conforme firmado acima, o lema 3.2.2 nos garante  $\tilde{V}^* \subset V^*$ , tal que, se  $x_c^{(k)} \in \tilde{V}^*$ , então  $x^{(k+1)} = x_c^{(k)} + \delta_H^{(k)} \in V^*$ . Para verificar (3.98), considere  $x_c^{(k)} \in \tilde{V}^*$ . Podemos escrever então

$$\begin{aligned} \Delta L_H^{(k)} &= L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k)}) - L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) \\ &= L(x^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) + h(x^{(k+1)})^T (\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) \\ &\quad - L(x_c^{(k)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) - h(x_c^{(k)})^T [\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x^{(k+1)*}) + \lambda_{LS}(x^{(k+1)*}) - \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})] \\ &= L(x^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) - h(x_c^{(k)})^T (\lambda_{LS}(x^{(k+1)*}) - \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) \\ &\quad - L(x_c^{(k)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) + (h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)}))^T (\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) \end{aligned} \quad (3.99)$$

Somando 0 em (3.99), na forma

$$\begin{aligned} &[-L(x^{(k+1)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) + L(x^{(k+1)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*}))] \\ &+ [-L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) + L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*}))] \end{aligned}$$

chegamos a

$$\Delta L_H^{(k)} = L(x^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) - L(x^{(k+1)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) \quad (3.100)$$

$$+ L(x^{(k+1)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) - L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) \quad (3.101)$$

$$+ L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) - h(x_c^{(k)})^T (\lambda_{LS}(x^{(k+1)*}) - \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) \quad (3.102)$$

$$- L(x_c^{(k)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) \quad (3.103)$$

$$+ (h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)}))^T (\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) \quad (3.104)$$

Por (3.94), podemos substituir a expressão no segundo membro de (3.100), em  $\tilde{V}^*$ , por

$$q^*(x^{(k+1)}) + o(\|x^{(k+1)} - x^{(k+1)*}\|^2) \quad (3.105)$$

Como  $h(x_c^{(k)}) = h(x_c^{(k)*})$ , (3.94) nos autoriza a substituir as parcelas nas linhas (3.102-3.103), em  $\tilde{V}^*$ , por

$$- q^*(x_c^{(k)}) + o(\|x_c^{(k)} - x_c^{(k)*}\|^2) \quad (3.106)$$

(3.9), HLOC2 e (3.105-3.106) nos permitem então substituir as parcelas em (3.100) e (3.102-3.103) por

$$q^*(x^{(k+1)}) - q^*(x_c^{(k)}) + o(\|gp(x_c^{(k)})\|^2) \quad (3.107)$$

Como  $\nabla L(x^{(k+1)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) = 0$ , a expressão em (3.101) fica controlada por  $O(\|x^{(k+1)*} - x_c^{(k)*}\|^2)$ , em  $V^*$ .

De (3.11), HLOC1, HLOC2, (3.34) e do controle dinâmico obtemos, em  $\tilde{V}^*$ :

$$\|x^{(k+1)*} - x_c^{(k)*}\| = O(\|h(x^{(k+1)}) - h(x_c^{(k)})\|) + O(\|gp(x_c^{(k)})\|^2) = o(\|gp(x_c^{(k)})\|) \quad (3.108)$$

Segue que, em  $\tilde{V}^*$ , (3.101) satisfaz

$$L(x^{(k+1)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) - L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x^{(k+1)*})) = o(\|gp(x_c^{(k)})\|^2) \quad (3.109)$$

Finalmente HLOC2 e  $\lambda_{\text{LS}}(\cdot)$  Lipschitz no compacto  $V^*$ , nos garantem  $\|\lambda_{\text{LS}}(x_c^{(k)}) - \lambda_{\text{LS}}(x_c^{(k+1)})\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|)$ , em  $\tilde{V}^*$ . Juntamente com (3.34–3.35), obtemos uma limitação na expressão (3.104), dada por  $o(\|gp(x_c^{(k)})\|^2)$ , em  $\tilde{V}^*$

Juntando as limitações acima comentadas obtemos (3.98) em  $\tilde{V}^*$  □

Vamos mostrar agora que, analogamente ao que se obtinha com (3.93), no caso  $m = 0$ ,  $q^*$  funciona para um passo horizontal  $\delta_H^{(k)}$ , dado em CDRIN e satisfazendo as hipóteses até aqui assumidas, provocando uma *aproximação a  $\mathcal{D}^*$  com taxa linear* no sentido que

**LEMA 3.2.8** *Existe vizinhança  $V^*$  de  $x^*$  e  $0 \leq \xi_{q^*} < 1$  tais que em  $V^*$*

$$0 \leq q^*(x^{(k+1)}) \leq \xi_{q^*} q^*(x_c^{(k)}) \quad (3.110)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Considere  $\tilde{V}^*$  como no lema anterior. (3.64), (3.96), o lema 3.2.2 e (3.98) garantem  $\bar{\xi}_1 > 0$ , bem como alguma vizinhança  $V^* \subset \tilde{V}^*$ , tal que se  $x_c^{(k)} \in V^*$  obtemos

$$0 \leq q^*(x^{(k+1)}) \leq q^*(x_c^{(k)}) - \frac{\bar{\xi}_1}{2} \|gp(x_c^{(k)})\|^2 \quad (3.111)$$

De (3.97), seja  $\bar{\xi}_2 > 0$ , tal que em  $V^*$ , possivelmente ainda menor,

$$0 \leq q^*(x_c^{(k)}) \leq \bar{\xi}_2 \|gp(x_c^{(k)})\|^2 \quad (3.112)$$

(3.111), (3.112),  $\bar{\xi}_1 > 0$  e  $\bar{\xi}_2 > 0$  nos dão (3.110), com

$$0 < \xi_{q^*} = 1 - \frac{\bar{\xi}_1}{2\bar{\xi}_2} < 1$$

□

O próximo lema nos dá uma relação importante, que devem satisfazer  $x_c^{(k)}$ ,  $x_c^{(k+1)}$  e  $x_c^{(k+2)}$ , caso  $x_c^{(k)}$  esteja suficientemente próximo de um bom minimizador  $x^*$ . Basicamente nos dirá que, a redução de  $q^*(x)$  entre  $x_c^{(k+1)}$  e  $x_c^{(k+2)}$ , com taxa linear garantida pelo lema anterior, essencialmente se mantém como tal, também entre  $x_c^{(k+1)}$  e  $x_c^{(k+2)}$ , depois de uma restauração entre  $x_c^{(k+2)}$  e  $x_c^{(k+2)}$ , possivelmente “piorada” por um termo controlado por  $o(q^*(x_c^{(k)}))$ .

**LEMA 3.2.9** *Sejam  $V^*$  e  $0 < \xi_{q^*} < 1$  como no lema anterior. Considere ainda  $\xi_{q^*} < \bar{\xi}_{q^*} < 1$ . Então existe vizinhança  $\hat{V}^* \subset V^*$  de  $x^*$  tal que em  $\hat{V}^*$*

$$q^*(x_c^{(k+2)}) = q^*(x_c^{(k+2)}) + O(\|h(x_c^{(k+2)})\| \|gp(x_c^{(k+1)})\|) + o(\|gp(x_c^{(k+1)})\|^2) \quad (3.113)$$

$$q^*(x_c^{(k+2)}) \leq \bar{\xi}_{q^*} q^*(x_c^{(k+1)}) + o(q^*(x_c^{(k)})) \quad (3.114)$$

$$q^*(x_c^{(k+2)}) = O(q^*(x_c^{(k+1)})) = O(q^*(x_c^{(k)})) \quad (3.115)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Começamos com  $V^*$ , como no lema anterior, e aplicamos o lema 3.2.2 para obter  $\hat{V}^* \subset V^*$ , de forma que, se  $x_c^{(k)} \in \hat{V}^*$  então  $x_c^{(k)}$ ,  $x_c^{(k+1)}$ ,  $x_c^{(k+1)}$ ,  $x_c^{(k+2)}$  e  $x_c^{(k+2)}$  estejam em  $V^*$ .

Suponhamos  $x_c^{(k)} \in \hat{V}^*$ , e simplifiquemos um pouco a notação para

$$\begin{aligned} W_c^{(k)*} &= \nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) \\ W^{(k)*} &= \nabla_{xx}^2 L(x^{(k)*}, \lambda_{LS}(x^{(k)*})) \end{aligned}$$

A seguir, decomposemos a expressão  $2[q^*(x_c^{(k+2)}) - q^*(x^{(k+2)})]$  em uma soma de 5 fatores, substituindo

$$(x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*}) = (x_c^{(k+2)} - x^{(k+2)}) - (x_c^{(k+2)*} - x^{(k+2)*}) + (x^{(k+2)} - x^{(k+2)*})$$

no último dos fatores à esquerda em

$$q^*(x_c^{(k+2)}) = (x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*})^T W_c^{(k+2)*} (x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*}),$$

bem como

$$(x^{(k+2)} - x^{(k+2)*}) = (x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*}) - (x_c^{(k+2)} - x^{(k+2)}) + (x_c^{(k+2)*} - x^{(k+2)*})$$

no primeiro dos fatores à esquerda de

$$q^*(x^{(k+2)}) = (x^{(k+2)} - x^{(k+2)*})^T W^{(k+2)*} (x^{(k+2)} - x^{(k+2)*}),$$

Obteremos assim,

$$2[q^*(x_c^{(k+2)}) - q^*(x^{(k+2)})] = (x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*})^T W_c^{(k+2)*} (x_c^{(k+2)} - x^{(k+2)}) \quad (3.116)$$

$$- (x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*})^T W_c^{(k+2)*} (x_c^{(k+2)*} - x^{(k+2)*}) \quad (3.117)$$

$$+ (x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*})^T (W_c^{(k+2)*} - W^{(k+2)*}) (x^{(k+2)} - x^{(k+2)*}) \quad (3.118)$$

$$+ (x_c^{(k+2)} - x^{(k+2)})^T W^{(k+2)*} (x^{(k+2)} - x^{(k+2)*}) \quad (3.119)$$

$$- (x_c^{(k+2)*} - x^{(k+2)*})^T W^{(k+2)*} (x^{(k+2)} - x^{(k+2)*}) \quad (3.120)$$

Observe que, do lema da restauração 2.4.3,  $gp(x)$  lipschitz em  $\hat{V}^*$ , HLOC2, (3.9), (3.11), (3.36), e do controle dinâmico, obtemos em  $\hat{V}^*$ :

$$\|gp(x_c^{(k+1)})\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|) \quad (3.121)$$

$$\|x^{(k+2)} - x^{(k+2)*}\| = O(\|gp(x_c^{(k+1)})\|) \quad (3.122)$$

$$\|x_c^{(k+2)} - x_c^{(k+2)*}\| = O(\|gp(x_c^{(k+1)})\|) \quad (3.123)$$

$$\|x_c^{(k+2)} - x^{(k+2)}\| = O(\|h(x^{(k+2)})\|) \quad (3.124)$$

$$\|x_c^{(k+2)*} - x^{(k+2)*}\| = O(\|h(x^{(k+2)})\|) \quad (3.125)$$

Possivelmente, restringindo um pouco mais  $\hat{V}^*$ , obtemos  $\nabla_{xx}^2 L(x, \lambda_{LS}(x))$  uniformemente contínua em  $\hat{V}^*$ . Isto significa que:

i- Os hessianos acima são uniformemente limitados em  $\hat{V}^*$ . Portanto, (3.122–3.125) e (3.12) garantem que as expressões (3.116), (3.117), (3.119) e (3.120) admitem, em  $\hat{V}^*$ , uma limitação, do tipo,  $O(\|h(x^{(k+2)})\| \|gp(x_c^{(k+1)})\|)$ .

ii- Como  $\nabla_{xx}^2 L(x, \lambda_{LS}(x))$  é uma função uniformemente contínua em vizinhanças compactas de  $x^*$ , (3.122) e (3.123) nos asseguram que (3.118) admite, em  $\hat{V}^*$ , uma limitação do tipo  $o(\|gp(x_c^{(k+1)})\|^2)$

i e ii acima nos dão (3.113), em  $\hat{V}^*$ .

(3.34), (3.48) e (3.121) nos garantem, em  $\hat{V}^*$

$$\|h(x^{(k+2)})\| = \|h(x_c^{(k+1)})\| + o(\|gp(x_c^{(k+1)})\|) = o(\|gp(x_c^{(k)})\|) \quad (3.126)$$

(3.110), (3.113), (3.121), (3.126) e a equivalência (3.97) garantem (3.114), possivelmente restringindo  $\hat{V}^*$  um pouco mais.

(3.115) é uma consequência imediata de (3.121) e da equivalência (3.97).  $\square$

Em particular, (3.114) nos informa que existe  $0 \leq \xi_{q^*} < 1$ , tal que, dado  $\omega > 0$ , então existe  $k_0 > 0$  e vizinhança  $\hat{V}^*$  de  $x^*$ , tal que se  $x_c^{(k)}$  permanecer em  $\hat{V}^*$  para *todo*  $k \geq k_0$  então  $s_k = q^*(x_c^{(k)})$  deverá satisfazer, a partir de  $k_0$ , às desigualdades

$$0 < s_{k+2} \leq \xi_{q^*} s_{k+1} + \omega s_k \quad (3.127)$$

$$s_{k+1} = O(s_k) \quad (3.128)$$

O objetivo do próximo lema é demonstrar que, uma sequência satisfazendo (3.127–3.128), para  $\omega$  suficientemente pequeno, tem uma limitação no seu comportamento que implica convergência linear num conjunto finito de passos para zero. A demonstração do teorema (3.2.6) se completará, verificando que dada vizinhança  $\hat{V}^*$  de  $x^*$  podemos encontrar uma vizinhança nela contida  $V^*$  tal que se  $x_c^{(k_0)}$  está em  $V^*$  então  $x_c^{(k)}$  não sai mais de  $\hat{V}^*$  para  $k \geq k_0$ .

**LEMA 3.2.10** *Sejam  $k_1 \leq \infty$ ,  $0 < k_0 < k_1 - 2$  e  $M > 0$ . Suponhamos que a  $k_0$  se associam  $\tilde{\xi}_{k_0}$  e  $\tilde{\omega}_{k_0} > 0$ , tais que  $0 < \tilde{\xi}_{k_0} < 1$  e  $\tilde{\omega}_{k_0}^2 < \frac{1 - \tilde{\xi}_{k_0}^2}{4}$ .*

*Suponhamos ainda que, para todo inteiro  $k$ , entre  $k_0$  e  $k_1$ , tenhamos,*

$$s_{k+1} < M s_k \quad (3.129)$$

$$s_k > 0 \quad (3.130)$$

$$s_{k+2} \leq \xi_k s_{k+1} + \omega_k s_k \quad (3.131)$$

onde,

$$0 < \xi_k \leq \tilde{\xi}_{k_0} < 1 \quad (3.132)$$

$$0 < \omega_k \leq \tilde{\omega}_{k_0} \quad (3.133)$$

Então, para todo  $\bar{k}$  e  $j \geq 2$ , tais que  $k_0 \leq \bar{k} < \bar{k} + j \leq k_1$ , obtemos

$$s_{\bar{k}+j} < 2(1+M)s_{\bar{k}}\bar{\xi}_{k_0}^{(j-1)}, \quad \text{onde} \quad (3.134)$$

$$\bar{\xi}_{k_0} = \frac{\tilde{\xi}_{k_0} + \sqrt{\tilde{\xi}_{k_0}^2 + 4\tilde{\omega}_{k_0}^2}}{2} < 1 \quad (3.135)$$

Em particular, se  $k_1 = \infty$ , então:

- i -  $s_k$  converge a zero, com taxa linear num conjunto finito de passos  $p > 0$ .
- ii - Se  $\xi_k \rightarrow 0$  e  $\omega_k \rightarrow 0$ , então a convergência é superlinear em dois passos.

### DEMONSTRAÇÃO

Sejam  $k_0 \leq \bar{k} \leq k_1 - 2$ , e considere a solução  $\tilde{s}_k$  para a equação de diferenças finitas abaixo, com condições iniciais em  $\bar{k}$  e  $\bar{k} + 1$ , dadas por,

$$\tilde{s}_{k+2} = \tilde{\xi}_{k_0}\tilde{s}_{k+1} + \tilde{\omega}_{k_0}\tilde{s}_k \quad (3.136)$$

$$\tilde{s}_{\bar{k}} = s_{\bar{k}} \quad (3.137)$$

$$\tilde{s}_{\bar{k}+1} = s_{\bar{k}+1} \quad (3.138)$$

Uma tal solução estará definida para  $k \geq \bar{k}$ . Seja ainda, para  $\bar{k} \leq k \leq k_1$

$$\hat{s}_k = s_k - \tilde{s}_k$$

Segue de (3.136–3.138) e de  $s_k > 0$ ,  $\tilde{\xi}_{k_0} > 0$ ,  $\tilde{\omega}_{k_0} > 0$ , que  $\tilde{s}_k > 0$ .

Vamos verificar agora que,  $\hat{s}_k$  também satisfaz (3.131).

Para tanto, veja que

$$\hat{s}_{k+2} - (\xi_k \hat{s}_{k+1} + \omega_k \hat{s}_k) = s_{k+2} - (\xi_k s_{k+1} + \omega_k s_k) \quad (3.139)$$

$$- [\tilde{s}_{k+2} - (\tilde{\xi}_{k_0} \tilde{s}_{k+1} + \tilde{\omega}_{k_0} \tilde{s}_k)] \quad (3.140)$$

$$+ (\xi_k - \tilde{\xi}_{k_0})\tilde{s}_{k+1} + (\omega_k - \tilde{\omega}_{k_0})\tilde{s}_k \quad (3.141)$$

O lado direito da relação acima, tem seu primeiro termo  $\leq 0$  por (3.131), o segundo nulo por (3.136) e o terceiro negativo ou nulo por (3.132–3.133) e  $\tilde{s}_k > 0$ . Isto garante a afirmação feita logo acima.

(3.137–3.138) nos dão  $\hat{s}_{\bar{k}} = 0$  e  $\hat{s}_{\bar{k}+1} = 0$ . De  $\tilde{\xi}_{k_0} > 0$ ,  $\tilde{\omega}_{k_0} > 0$  e  $\hat{s}_k$  satisfazendo (3.131), obtemos  $\hat{s}_k \leq 0$  para todo  $k$  entre  $\bar{k}$  e  $k_1$ . Isto significa que,

$$0 \leq s_{\bar{k}+j} \leq \tilde{s}_{\bar{k}+j} = C_0 \bar{\xi}_{k_0}^j + C_1 \bar{\xi}_{k_0}'^j, \quad (3.142)$$

onde  $0 < \bar{\xi}_{k_0} < 1$  e  $-\bar{\xi}_{k_0}' < \bar{\xi}_{k_0}' < 0$  são as raízes da equação característica,  $z^2 - \bar{\xi}_{k_0} z - \tilde{\omega}_{k_0} = 0$  de (3.136). As condições iniciais (3.137–3.138), nos dão

$$|C_0| = \frac{s_{\bar{k}+1} - s_{\bar{k}} \bar{\xi}_{k_0}'}{\bar{\xi}_{k_0} - \bar{\xi}_{k_0}'} < (1+M) \frac{s_{\bar{k}}}{\bar{\xi}_{k_0}} \quad (3.143)$$

$$|C_1| = \left| \frac{s_{\bar{k}+1} - s_{\bar{k}} \bar{\xi}_{k_0}'}{\bar{\xi}_{k_0} - \bar{\xi}_{k_0}'} \right| < (1+M) \frac{s_{\bar{k}}}{\bar{\xi}_{k_0}} \quad (3.144)$$

Como  $|\bar{\xi}_{k_0}'| < \bar{\xi}_{k_0} < 1$ , (3.142–3.144) nos garantem (3.134).

Em particular, se  $k_1 = \infty$

- i- (3.134) significa neste caso convergência R-linear, com taxa  $\bar{\xi}_{k_0}$ . Fazendo  $p$  tal que  $2(1+M)\bar{\xi}_{k_0}^{p-2} < 1$  obtemos, ainda de (3.134), a convergência linear em  $p$  passos, uma vez que, neste caso  $s_{\bar{k}+p} \leq \bar{\xi}_{k_0} s_{\bar{k}}$ , para todo  $\bar{k} \geq k_0$ .
- ii- Se  $\xi_k \rightarrow 0$  e  $\omega_k \rightarrow 0$ , isto garante por (3.135), a definição de  $\tilde{\xi}_{k_0}$ , de  $\tilde{\omega}_{k_0}$  a possibilidade de escolher  $\bar{\xi}_{k_0} \rightarrow 0$ , e portanto de obter  $2(1+M)\bar{\xi}_{k_0} \rightarrow 0$ . Mas então, (3.134) garante a convergência superlinear em dois passos de  $s_k$ .

□

### DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 3.2.6 -

Conforme a observação feita antes do lema anterior, dados (3.114–3.115) e o lema anterior, a demonstração do teorema consiste em verificar que, para alguma vizinhança  $\hat{V}^*$  de  $x^*$  como no lema 3.2.9, existe vizinhança  $V^* \subset \hat{V}^*$  tal que, se  $x_c^{(k_0)}$  estiver em  $V^*$ , os iterados gerados por CDRIN não abandonam mais  $\hat{V}^*$ , depois de  $k_0$ .

Dados  $\tilde{V}^*$  e  $\xi_{q^*}$ , como no lema 3.2.8 e  $\omega < \sqrt{(1-\xi_{q^*}^2)}/4$ , (3.114–3.115) nos autorizam a supor  $\bar{\xi}_1 > 0$ ,  $\hat{V}^*$  como no lema 3.2.9, e tais que, se  $x_c^{(k)} \in \hat{V}^*$ , então

$$q^*(x_c^{(k+2)}) \leq \xi_{q^*} q^*(x_c^{(k+1)}) + \omega q^*(x_c^{(k)}) \quad (3.145)$$

$$q^*(x_c^{(k+1)}) \leq \bar{\xi}_1 q^*(x_c^{(k)}) \quad (3.146)$$

(3.96–3.97) e o controle dinâmico nos permitem supor  $\hat{V}^*$  possivelmente um pouco menor, de modo que tenhamos  $0 < \bar{\xi}_2 < \bar{\xi}_3$  garantindo, em  $\hat{V}^*$

$$\bar{\xi}_2 \|x_c^{(k)} - x^*\|^2 \leq q^*(x_c^{(k)}) \leq \bar{\xi}_3 \|x_c^{(k)} - x^*\|^2 \quad (3.147)$$

Observe que, neste caso,  $\tilde{\xi}_{k_0} = \xi_{q^*}$  e  $\tilde{\omega}_{k_0} = \omega$  satisfazem às condições deles exigidas no lema anterior, desde que  $x_c^{(k_0)} \in \hat{V}^*$ . Seja então

$$\bar{\xi}_{q^*} = \frac{\xi_{q^*} + \sqrt{\xi_{q^*}^2 + 4\omega^2}}{2} \leq \frac{1 + \xi_{q^*}}{2} < 1, \quad (3.148)$$

e  $p \in \mathbb{N}$ , tal que

$$2(1 + \bar{\xi}_1)\bar{\xi}_{q^*}^{p-1} < \frac{\bar{\xi}_2}{4\bar{\xi}_3} \quad (3.149)$$

O lema 3.2.2 nos fornece um  $\varepsilon > 0$ , de tal modo que, se  $\|x_c^{(k)} - x^*\| < \varepsilon$ , então  $x_c^{(k)}$ ,  $x_c^{(k+1)}$ ,  $x_c^{(k+2)}$ , ...,  $x_c^{(k+p)}$ ,  $x_c^{(k+p+1)}$ , estão em  $\hat{V}^*$ .

Afirmamos que, se  $\|x_c^{(k)} - x^*\| < \varepsilon$ , então  $x_c^{(k')}$  e  $x^{(k')}$  permanecem em  $\hat{V}^*$ , para todo  $k' \geq k$ .

Para garantir a afirmação, dada a definição de  $\varepsilon$ , basta verificar que para todo  $m \in \mathbb{N}$

$$\|x_c^{(k+mp)} - x^*\| < \varepsilon \quad (3.150)$$

*Suponhamos*  $\|x_c^{(k)} - x^*\| < \varepsilon$ .

Neste caso, 3.150 é trivialmente válida para  $m = 0$ . Supondo (3.150) verdadeira para  $0 \leq m \leq \bar{m}$ , obtemos pela definição de  $\varepsilon$  que  $x_c^{(k')}$  e  $x^{(k'+1)}$  permanecem em  $\tilde{V}^*$ , para  $k + \bar{m}p \leq k' \leq k + (\bar{m} + 1)p$ . Da construção feita acima, (3.134) e (3.149) obtemos então

$$q^*(x_c^{(k+(\bar{m}+1)p)}) < \frac{\bar{\xi}_2}{4\bar{\xi}_3} q^*(x_c^{(k+(\bar{m})p)}) \quad (3.151)$$

De (3.147), (3.150) e (3.151) concluímos

$$\begin{aligned} \|x_c^{(k+(\bar{m}+1)p)} - x^*\|^2 &< \frac{q^*(x_c^{(k+(\bar{m}+1)p)})}{\bar{\xi}_2} \\ &< \frac{q^*(x_c^{(k+\bar{m}p)})}{4\bar{\xi}_3} < \frac{\|x_c^{(k+\bar{m}p)} - x^*\|^2}{4} \\ &< \frac{\varepsilon^2}{4} \end{aligned} \quad (3.152)$$

Pelo princípio de indução finita, isto nos dá 3.150, para todo  $m$  e, portanto, a afirmação feita em itálico. O lema 3.2.10 nos garante assim, a taxa linear de convergência, num conjunto finito de passos, de  $q^*(x_c^{(k)})$ . A equivalência (3.147) em  $\tilde{V}^*$  garante o mesmo também para  $\|x_c^{(k)} - x^*\|$ . Em particular, a convergência linear num conjunto finito de passos garante a convergência R-linear.  $\square$

### 3.3 CONVERGÊNCIA SUPERLINEAR EM DOIS PASSOS DE $\{x_c^{(k)}\}$

O nosso objetivo principal nesta seção, é estabelecer uma condição suficiente para a convergência superlinear em dois passos, da sequência  $\{x_c^{(k)} : 1 \leq k < \infty\}$ , gerada em CDRIN. Isto significa, basicamente, estabelecer condições sobre o modelo quadrático adotado e o passo Horizontal nele escolhido, em P2 de CDRIN. O faremos de forma a levar em conta a já clássica condição de Dennis-Moré para convergência superlinear, a ser melhor detalhada adiante, bem como o ponto de vista “inexato”, presente no, igualmente clássico, trabalho de Dembo-Steihaug (vide [DES 82] e o comentário sobre o algoritmo DES no começo da seção 2.5 ).

Na subseção 3.3.1 estabeleceremos a condição suficiente para convergência superlinear em dois passos, anunciada acima. Na §3.3.2, verificaremos que  $\{x_c^{(k)}\}$  satisfaz um algoritmo tipo PQS inexato associado, e que a condição suficiente por nós encontrada, guarda estreita relação com uma condição suficiente para a convergência superlinear em dois passos, estabelecida por Powell para PQS em [Pow 76]. Na §3.3.3, exploramos a relação estabelecida na subseção anterior, com o objetivo de indicar uma maneira de “importar”, para CDRIN, métodos secantes teoricamente consolidados para PQS.

#### 3.3.1 CDRIN E A CONDIÇÃO DE DENNIS-MORÉ

Uma idéia que vem fundamentando nossa construção, é a de estabelecer um vínculo entre o passo Horizontal em direção a otimalidade e o passo Vertical, através do controle dinâmico, mas desacoplar a resolução dos correspondentes subproblemas quadráticos, em cada passo. Ou seja, cada passo horizontal  $\delta_H$  é pensado como um passo que faz a  $f$  descer na superfície de nível atual, enquanto que os passos  $\delta_V$  são passos nos quais a preocupação se restringe a tentar chegar mais próximo da factibilidade. A estrutura local perto de um bom minimizador, apontada na seção 3.1, nos indica que, se desejamos uma boa taxa de convergência, é bastante razoável que numa vizinhança de um bom minimizador  $x^*$ , o objetivo seja partir de  $x_c^{(k)}$ , e fazer com que  $x^{(k+1)} = x_c^{(k)} + \delta_H^{(k)}$  chegue “bem perto” de  $\Pi^*(x_c^{(k)})$ . (3.110), (3.114-3.115), junto com (3.96) e o controle dinâmico nos indicam que, se  $\{x_c^{(k)}\}$  converge a um bom minimizador  $x^*$ , e conseguimos garantir bons passos horizontais, no sentido que  $q^*(x^{(k+1)}) = o(q(x_c^{(k)}))$  em  $V^*$ , então obtemos convergência superlinear em dois passos.

Observamos ainda que, numa vizinhança  $V^*$  como a dada pelo teorema 3.1.1,  $x_c^{k*} = \Pi^*(x_c^{(k)})$  é a solução de:

$$g(x) + h'(x)^T \lambda = 0 \quad (3.153)$$

$$h(x) = h(x_c^{(k)}) \quad (3.154)$$

Dennis-Moré em [DM 74] caracterizaram uma condição necessaria e suficiente para convergência local superlinear de um algoritmo quasi-Newton, que vise resolver o sistema de equações não lineares  $F(x) = 0$ , perto de um ponto regular  $x^*$ , sendo a  $F$  de classe  $C^1$ . Essencialmente supõem sequências  $x^{(k)} \rightarrow x^*$  e  $B^{(k)}$  de aproximações hessianas inversíveis tais que o passo quasi-Newton  $s_{QN}^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$  seja dado por

$$s_{\text{QN}}^{(k)} = -B^{(k)-1}F(x^{(k)})$$

Denotaremos o passo Newton para resolver  $F(x) = 0$  em cada  $x^{(k)}$  por

$$s_N^{(k)} = -F'(x^{(k)})^{-1}F(x^{(k)})$$

A condição, por eles demonstrada como necessária e suficiente para convergência superlinear, exige que  $s_{\text{QN}}^{(k)}$  e  $s_N^{(k)}$  se confundam assintoticamente, no sentido que :

$$s_{\text{QN}}^{(k)} - s_N^{(k)} = o(\|s_{\text{QN}}^{(k)}\|) \quad (3.155)$$

Pensando informalmente o passo  $\delta_H^{(k)}$ , nos parece lógico traduzir (3.155), exigindo que o passo Horizontal  $\delta_H^{(k)}$  se confunda, assintoticamente, com o passo Newton para resolver (3.153–3.154). Observe que, se supomos disponível, em  $x_c^{(k)}$ , um multiplicador de Lagrange  $\bar{\lambda}^{(k)}$ , satisfazendo

$$\bar{\lambda}^{(k)} \rightarrow \lambda^* = \lambda_{\text{LS}}(x^*)$$

isto significa que, o passo Newton para (3.153–3.154), a partir de  $(x_c^{(k)}, \bar{\lambda}^{(k)})$ , pode se escrever como

$$P_c^{(k)}(\nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \bar{\lambda}^{(k)})\delta_N^{(k)} + g(x_c^{(k)})) = 0 \quad (3.156)$$

$$h'(x_c^{(k)})^T \delta_N^{(k)} = 0, \quad (3.157)$$

onde  $P_c^{(k)} = P(x_c^{(k)})$ , denota a projeção ortogonal em  $\mathcal{N}(h'(x_c^{(k)}))$ . Um passo quasi-Newton para (3.153–3.154), satisfará:

$$P_c^{(k)}(B^{(k)}\delta_H^{(k)} + g(x_c^{(k)})) = 0 \quad (3.158)$$

$$h'(x_c^{(k)})\delta_H^{(k)} = 0 \quad (3.159)$$

Em particular, (3.156–3.159) permitem reescrever a condição de Dennis-Moré (3.155), para as equações (3.153–3.154), num outro formato, ou seja:

$$P_c^{(k)}(B^{(k)} - \nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \bar{\lambda}^{(k)}))\delta_H^{(k)} = o(\|\delta_H^{(k)}\|) \quad (3.160)$$

$$h'(x_c^{(k)})^T \delta_H^{(k)} = 0 \quad (3.161)$$

Como estamos igualmente interessados em resoluções inexatas dos subproblemas lineares, tanto (3.155) e (3.160–3.161), como a teoria estabelecida em [DES 82], nos parecem indicar a substituição de (3.158–3.159) por uma formulação sobre os resíduos admissíveis assintoticamente, ou seja:

$$r_L^{(k)} = P_c^{(k)}(B^{(k)}\delta_H^{(k)} + g(x_c^{(k)})) = o(\|\delta_H^{(k)}\|) \quad (3.162)$$

$$r_A^{(k)} = h'(x_c^{(k)})^T \delta_H^{(k)} = o(\|\delta_H^{(k)}\|) \quad (3.163)$$

Consistentemente com o ponto de vista “inexato”, estamos relaxando a condição (3.161) para (3.163). Como estamos “supondo”  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$  e  $\bar{\lambda}^{(k)} \rightarrow \lambda^*$ , é fácil ver que ao substituir  $\nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \bar{\lambda}^{(k)})$  por  $W^* = \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*)$  em (3.160), isto induz uma condição equivalente à (3.160), num formato até mais usual na literatura, ou seja

$$P_c^{(k)}(B^{(k)} - W^*)\delta_H^{(k)} = o(\|\delta_H^{(k)}\|) \quad (3.164)$$

(3.162–3.163) podem ser interpretadas como uma condição “quasi-Newton inexata” com respeito a  $B^{(k)}$  para promover a aproximação de  $\mathcal{D}^*$  perto do nível corrente. (3.164) nos dá uma condição “tipo Dennis-Moré” para esta aproximação. †

Na subseção seguinte veremos que (3.164) está naturalmente associada à uma condição, demonstrada por Powell como suficiente, para convergência local superlinear em dois passos de métodos PQS, com passos quasi-Newton.

Nosso resultado principal desta subseção consiste em estabelecer que, se  $\{x_c^{(k)}\}$  converge a um bom minimizador  $x^*$  e passos satisfazendo (3.162–3.164) tiverem sido testados, suficientemente perto de  $x^*$ , então a convergência se dá com taxa superlinear em dois passos.

Para evitar complicações secundárias, trataremos formalmente, apenas, do caso HLOC1.a. Ou seja, suporemos que a sequência de multiplicadores  $\{\tilde{\lambda}^{(k)}\}$ , que auxilia na avaliação dos passos candidatos, satisfaz

$$\|\tilde{\lambda}^{(k)} - \lambda_{LS}\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|) \quad (3.165)$$

Ao final da seção indicaremos sucintamente como tratar o caso HLOC1.b.

A demonstração de tal resultado tem dois momentos. Primeiro precisamos mostrar que, se uma sequência  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$  foi gerada por CDRIN de tal forma que, em iterações com  $k$  suficientemente grande, uma sequência  $\tilde{\delta}_H^{(k)} = \tilde{\delta}_t^{(k)} + \tilde{\delta}_{soc}^{(k)}$ , satisfazendo (3.162–3.164), foi sempre obtida inicialmente em P2, e testada em P3 com multiplicadores satisfazendo (3.165), então  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$  terá sido aceito a partir de algum  $\bar{k}$ .

Uma vez garantida a aceitação assintótica de uma tal sequência  $\{\tilde{\delta}_H^{(k)}\}$ , a aproximação de  $x^{(k+1)}$  a  $\mathcal{D}^*$  se revelará na forma  $q^*(x^{(k+1)}) = o(q^*(x_c^{(k)}))$ . O lema 3.2.9 nos garantirá, então, a convergência superlinear em dois passos, de  $\{q^*(x_c^{(k)})\}$  a zero. O controle dinâmico, a estrutura local de  $x^*$  e  $q(x') \approx \|x' - x^*\|^2$  numa vizinhança de  $x^*$ , assegurarão a mesma propriedade para  $\|x_c^{(k)} - x^*\|$ .

Começamos com dois lemas, indicando o efeito da estrutura local discutida na §3.1, sobre uma sequência  $\{\tilde{\delta}_H^{(k)}\}$  satisfazendo (3.162–3.164). Suporemos  $\{\tilde{\delta}_H^{(k)}\}$  avaliada a partir de qualquer sequência  $\{y^{(k)}\}$ , desde que convirja a um bom minimizador  $x^*$ . Nosso interesse maior, reside em casos nos quais  $y^{(k)}$  é uma subsequência de  $x_c^{(k)}$ . Vamos manter a notação da seção anterior, relativa a  $\Pi^*$ , ou seja  $y^* = \Pi(y^{(*)})$ , para  $y$  suficientemente próximo de  $x^*$ .

†(3.163) corresponde a caracterizar  $\delta_H^{(k)}$  como um passo Horizontal. Dadas as hipóteses firmadas para CDRIN até aqui, (3.34) junto com (3.65) já implicam (3.163). Ou seja, (3.163) teria de ser exigida de qualquer jeito para que, sob as hipóteses HLOC1–HLOC5,  $\delta_H^{(k)}$  pudesse coincidir com o passo horizontal  $x^{(k+1)} - x_c^{(k)}$  para todo  $k$  suficientemente grande.

**LEMA 3.3.1** *Se  $y^{(k)}$  converge a um bom minimizador  $x^*$  e  $\{\tilde{\delta}_H^{(k)}\}$  satisfaz (3.162–3.164) com  $y^{(k)}$  no lugar de  $x_C^{(k)}$  e  $B^{(k)} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  simétrica então*

$$\tilde{\delta}_H^{(k)} = P(y^{(k)})\tilde{\delta}_H^{(k)} + o(\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\|) \quad (3.166)$$

$$\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\| \approx \|gp(y^{(k)})\| \approx \|y^{(k)} - y^{(k)*}\| \quad (3.167)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Como  $h'(x^*)$  tem posto máximo e, por hipótese,  $y^{(k)}$  converge a um bom minimizador, para  $k$  suficientemente grande (3.166) pode ser obtida de (3.163) e de

$$(I - P(y^{(k)}))\tilde{\delta}_H^{(k)} = h'(y^{(k)})^T (h'(y^{(k)})h'(y^{(k)})^T)^{-1} h'(y^{(k)})\tilde{\delta}_H^{(k)} \quad (3.168)$$

(3.162), (3.164), (3.166), e a continuidade uniforme de  $P(x)$  numa vizinhança compacta suficientemente pequena de  $x^*$ , garantem

$$P^*W^*P^*\tilde{\delta}_H^{(k)} + gp(y^{(k)}) = o(\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\|) \quad (3.169)$$

Em particular, como  $W^*$  é positivo-definida no espaço tangente às restrições, (3.9), (3.166) e (3.169) nos dão (3.167).  $\square$

O lema a seguir verifica formalmente, que a idéia fundadora da escolha em (3.162–3.164) se mantém para  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$ , ou seja, assintoticamente  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$  se confunde com  $y^{(k)*} - y^{(k)}$ .

**LEMA 3.3.2** *Nas condições colocadas no lema anterior para  $y^{(k)}$  e  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$ , obtemos:*

$$\tilde{\delta}_H^{(k)} = y^{(k)*} - y^{(k)} + o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|) \quad (3.170)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Usaremos como notação,  $P^{(k)} = P(y^{(k)})$ ,  $P^{(k)*} = P(y^{(k)*})$ ,  $W_{LS}^{(k)*} = \nabla_{xx}^2 L(y^{(k)*}, \lambda_{LS}(y^{(k)*}))$ .  $\bar{W}^* = P^*W^*P^*$  e  $\bar{W}^{(k)*} = P^{(k)*}W_{LS}^{(k)*}P^{(k)*}$  representarão as restrições das hessianas  $W^*$  e  $W_{LS}^{(k)*}$ , às respectivas direções tangentes.

Como  $P(x)$  é uniformemente contínua, suficientemente perto de  $x^*$ , e  $y^{(k)}$  converge a um bom minimizador, (3.7), (3.166) e (3.167) implicam, para a componente de  $y^{(k)*} - y^{(k)} - \tilde{\delta}_H^{(k)}$  na direção normal às restrições, que:

$$(I - P^*)(y^{(k)*} - y^{(k)} - \tilde{\delta}_H^{(k)}) \doteq (I - P^{(k)*})(y^{(k)*} - y^{(k)}) - (I - P^{(k)})\tilde{\delta}_H^{(k)} + o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|) \quad (3.171)$$

$$= o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|) \quad (3.172)$$

Para completar o argumento, falta mostrar uma limitação semelhante para a componente tangencial,  $P^*(y^{(k)*} - y^{(k)} - \tilde{\delta}_H^{(k)})$ .

Observe que a continuidade uniforme de  $P(x)$  e  $\nabla_{xx}^2 L(x, \lambda_{LS}(x))$ , numa vizinhança compacta suficientemente pequena de  $x^*$ , (3.7), e o lema de Taylor para  $-\nabla L(y^{(k)*} + \cdot, \lambda_{LS}(y^{(k)*}))$  nos garantem em alguma vizinhança  $V^*$  de  $x^*$ :

$$\begin{aligned}
\bar{W}^*(y^{(k)*} - y^{(k)}) &= \bar{W}_c^{(k)*}(y^{(k)*} - y^{(k)}) + o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|) \\
&= P^{(k)*}W_c^{(k)*}(y^{(k)*} - y^{(k)}) + o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|) \\
&= -gp(y^{(k)}) + o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|)
\end{aligned} \tag{3.173}$$

(3.167) e (3.169), a continuidade uniforme de  $P(x)$  em  $V^*$  e (3.162–3.167) nos asseguram:

$$-\bar{W}^*\delta_H^{(k)} = gp(y^{(k)}) + o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|) \tag{3.174}$$

De (3.173–3.174) obtemos

$$\begin{aligned}
\|\bar{W}^*P^*(y^{(k)*} - y^{(k)} - \tilde{\delta}_H^{(k)})\| &= \|\bar{W}^*(y^{(k)*} - y^{(k)} - \tilde{\delta}_H^{(k)})\| \\
&= o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|)
\end{aligned} \tag{3.175}$$

Como a restrição de  $\bar{W}^*$  a  $P^*(R^n)$  é positivo-definida, obtemos:

$$\|P^*(y^{(k)*} - y^{(k)} - \tilde{\delta}_H^{(k)})\| = o(\|y^{(k)*} - y^{(k)}\|) \tag{3.176}$$

(3.171) e (3.176) implicam (3.170).  $\square$

### OBSERVAÇÃO 3.3.1 COMPATIBILIDADE ENTRE (3.162-3.164) E CDRIN

Suponhamos  $B^{(k)}$  satisfazendo HB, e suficientemente positivo-definida, para  $k$  suficientemente grande. Suponhamos ainda, que seja possível escolher  $\delta_t^{(k)}$  de modo a satisfazer (3.162–3.164). Como estamos assumindo  $\Delta \geq \Delta_{min}$  no início de cada iteração  $\ddagger$ , é fácil concluir que  $\tilde{\delta}_t^{(k)}$  será de descida suficiente, para  $q^{(k)}(\delta) = \varphi_c^{(k)}\delta + .5\delta B^{(k)}\delta$ , perto de um bom minimizador. Note que (3.163) praticamente equivale a impor  $\eta_t^{(k)} \rightarrow 0$ . Supondo  $\eta_t^{(k)} \rightarrow 0$ , (2.127) praticamente nos impõe,  $\tilde{\delta}_{soc}^{(k)} = o(\|\tilde{\delta}_t^{(k)}\|)$ . Desta forma,  $\tilde{\delta}_H^{(k)} = \tilde{\delta}_t^{(k)} + \tilde{\delta}_{soc}^{(k)}$ , igualmente satisfaz (3.162–3.164). Se usamos (3.165) para testar  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$  e ele for aceito, HLOC1.a estará automaticamente atendido e portanto também HLOC5. HLOC2, numa vizinhança de um bom minimizador, é uma consequência imediata de (3.167). As demais hipóteses de implementação para CDRIN, não impõem restrições adicionais à escolha de  $B^{(k)}$ , nem tampouco de um candidato satisfazendo (3.162–3.164).

O lema da aceitação a seguir, nos dirá que, passos satisfazendo (3.162–3.164), terão sido aceitos assintoticamente, desde que testados com um multiplicador satisfazendo (3.165). Trata-se de um lema crucial para estabelecer nosso resultado principal desta seção. Em particular, nas condições da observação acima, o lema da aceitação nos garantirá que, se testarmos passos  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$ , como os que acima estão descritos, em P3 de CDRIN, suficientemente perto de um bom minimizador, então eles serão aceitos e as demais hipóteses exigidas para CDRIN estarão satisfeitas.

$\ddagger$ Tendo em vista uma certa artificialidade na exigência de se começar, a priori, cada iteração com  $\Delta \geq \Delta_{min}$ , reforçamos aqui o conteúdo da observação 2.3.2.D. Ou seja, é natural se obter neste tipo de algoritmos, com funções de classe  $C^2$ , que estratégias “decentes” de atualização para  $\Delta$  igualmente gerem, assintoticamente e de forma espontânea, raios das regiões de confiança suficientemente grandes para comportar estratégias satisfazendo (3.162–3.164).

**LEMA 3.3.3 ( LEMA DA ACEITAÇÃO )** – *Suponhamos que  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$ , satisfazendo as hipóteses até agora assumidas para CDRIN. Suponhamos, ainda, que  $\{\tilde{\delta}_H^{(k)} = \tilde{\delta}_t^{(k)} + \tilde{\delta}_{soc}^{(k)}\}$  satisfazendo (3.162–3.164) seja testada em P3 de CDRIN, para todo  $k$  suficientemente grande, e que  $\tilde{\lambda}^{(k)}$  satisfaça (3.165). Então  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$  terá sido aceito, a partir de algum  $\bar{k}$ .*

### DEMONSTRAÇÃO

Como  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$ , P3 de CDRIN e (3.167) nos garantem que, *uma condição suficiente para garantir a aceitação de  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$ , para todo  $k$  suficientemente grande, é dada por:*

$$\|\Delta \tilde{h}^{(k)}\| = \|h(x_c^{(k)} + \tilde{\delta}_H^{(k)}) - h(x_c^{(k)})\| \leq \rho_c^{(k)} \quad (3.177)$$

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{L}_H^{(k)} &= L(x_c^{(k)} + \tilde{\delta}_H^{(k)}, \tilde{\lambda}^{(k)}) - L(x_c^{(k)}, \tilde{\lambda}^{(k)}) \\ &= q^{(k)}(\tilde{\delta}_H^{(k)}) + o(|q^{(k)}(\tilde{\delta}_H^{(k)})|) \end{aligned} \quad (3.178)$$

A primeira das relações acima nos garante que  $x_c^{(k)} + \tilde{\delta}_H^{(k)}$ , assintoticamente, permaneceu nos cilindros de confiança correspondentes. Como  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$ , (3.167) nos garante  $\tilde{\delta}_H^{(k)} \rightarrow 0$  e, portanto, também teremos  $q^{(k)}(\tilde{\delta}_H^{(k)}) \rightarrow 0$ . Sendo assim, (3.178) claramente garante, assintoticamente, a passagem de  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$  no teste da “otimalidade”, em P3 de CDRIN.

*A demonstração do lema se concretizará com a demonstração das relações (3.177–3.178). Começamos verificando (3.177):*

Como HLOC1a implica  $\rho_{max}^{(k)}$  longe de “zero”, P3 de XCOR nos dá, neste caso,  $\|gp(x_c^{(k)})\| = O(\rho_c^{(k)})$ . Por outro lado, (3.163) e 3.167 nos garantem, neste caso, (3.177) ao assegurar

$$\|\Delta \tilde{h}^{(k)}\| = o(\|\delta_H^{(k)}\|) = o(\|gp(x_c^{(k)})\|) \quad (3.179)$$

*Para ver (3.178) mostraremos que, tanto  $\Delta \tilde{L}_H^{(k)}$  quanto  $q^{(k)}(\tilde{\delta}_H^{(k)})$ , assintoticamente, se confundem com  $-q^*(x_c^{(k)})$ .*

Para verificar (3.178), começamos verificando que:

$$\Delta \tilde{L}_H^{(k)} = -q^*(x_c^{(k)}) + o(q^*(x_c^{(k)})) \quad (3.180)$$

Observe que, somando e subtraindo  $L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*}))$  em  $L(x_c^{(k)} + \tilde{\delta}_H^{(k)}, \tilde{\lambda}^{(k)}) - L(x_c^{(k)}, \tilde{\lambda}^{(k)})$ , chegamos a:

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{L}_H^{(k)} &= [L(x_c^{(k)} + \tilde{\delta}_H^{(k)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) - L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*}))] \\ &+ [L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) - L(x_c^{(k)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*}))] \\ &+ (\tilde{\lambda}^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)*}))^T (h(x_c^{(k)} + \tilde{\delta}_H^{(k)}) - h(x_c^{(k)})) \end{aligned}$$

Veja que o primeiro dos tres termos à direita da igualdade acima considerada, é limitado por  $o(\|x_c^{(k)} - x_c^{(k)*}\|^2)$  devido à (3.170),  $\nabla_x L(x_c^{(k)*}, \lambda_{LS}(x_c^{(k)*})) = 0$  e HDIF. A mesma limitação é garantida ao terceiro termo, por (3.163), (3.167) e (3.165). (3.94) nos diz que a segunda linha vale  $-q^*(x_c^{(k)}) + o(\|x_c^{(k)} - x_c^{(k)*}\|^2)$ , e a equivalência (3.97) completa a verificação de (3.180).

A relação que completa a última afirmação em itálico acima, seria:

$$q^{(k)}(\tilde{\delta}_H^{(k)}) = -q^*(x_c^{(k)}) + o(q^*(x_c^{(k)})) \quad (3.181)$$

De (3.162) e (3.166-3.167) e lembrando que  $P_c^{(k)} = P_c^{(k)T}$ , obtemos

$$\begin{aligned} \varphi_c^{(k)T} \tilde{\delta}_H^{(k)} &= \tilde{\delta}_H^{(k)T} P_c^{(k)T} g(x_c^{(k)}) + o(\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\|^2) = -\tilde{\delta}_H^{(k)T} P_c^{(k)} B^{(k)} \tilde{\delta}_H^{(k)} + o(\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\|^2) \\ &= -\tilde{\delta}_H^{(k)T} B^{(k)} \tilde{\delta}_H^{(k)} + o(\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\|^2) \end{aligned} \quad (3.182)$$

Como  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$ , obtemos  $W_c^{(k)*} \rightarrow W^*$ . De (3.182), (3.164-3.167) e (3.170), obtemos

$$\begin{aligned} q^{(k)}(\tilde{\delta}_H^{(k)}) &= \varphi_c^{(k)T} \tilde{\delta}_H^{(k)} + \frac{1}{2} \tilde{\delta}_H^{(k)T} B^{(k)} \tilde{\delta}_H^{(k)} \\ &= -\frac{1}{2} \tilde{\delta}_H^{(k)T} B^{(k)} \tilde{\delta}_H^{(k)} + o(\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\|^2) \end{aligned} \quad (3.183)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{2} \tilde{\delta}_H^{(k)T} W_c^{(k)*} \tilde{\delta}_H^{(k)} + o(\|\tilde{\delta}_H^{(k)}\|^2) \\ &= -\frac{1}{2} (x_c^{(k)*} - x_c^{(k)})^T W_c^{(k)*} (x_c^{(k)*} - x_c^{(k)}) + o(\|x_c^{(k)*} - x_c^{(k)}\|^2) \end{aligned} \quad (3.184)$$

A definição de  $q^*$ , (3.97) e (3.184) garantem (3.181). Portanto, também (3.178).  $\square$

**TEOREMA 3.3.4** *Dentro das hipóteses até agora estabelecidas para CDRIN, se  $x_c^{(k)}$  converge para um bom minimizador  $x^*$ , e candidatos satisfazendo (3.162-3.164), tiverem sido testados em P3 de CDRIN, para  $k$  suficientemente grande, com  $\tilde{\lambda}^{(k)}$  satisfazendo (3.165), então a convergência é superlinear em dois passos.*

**DEMONSTRAÇÃO** Suponhamos  $\{\tilde{\delta}_H^{(k)}\}$  satisfazendo as condições do teorema tenha sido testada, para  $k$  suficientemente grande, e portanto aceita assintoticamente, como estabelece o lema anterior. Em particular, (3.97), (3.98) e (3.180) nos dão

$$q^*(x_c^{(k+1)}) = o(q^*(x_c^{(k)})) \quad (3.185)$$

Levando (3.185) em (3.110) e (3.114-3.115) verificamos

$$q^*(x_c^{(k+2)}) = o(q^*(x_c^{(k)})) \quad (3.186)$$

A equivalência (3.97), o controle dinâmico e (3.13) nos dão

$$q^*(x_c^{(k)}) \approx \|gp(x_c^{(k)})\|^2 \approx \|gp(x_c^{(k)})\|^2 + \|h(x_c^{(k)})\|^2 \approx \|x_c^{(k)} - x^*\|^2 \quad (3.187)$$

(3.186-3.187) garantem  $\|x_c^{(k+2)} - x^*\| = o(\|x_c^{(k)} - x^*\|)$ , completando assim o argumento.  $\square$

O corolário a seguir, estabelece condições para a convergência superlinear em dois passos de  $\{x_c^{(k)}\}$ , ao escolhermos para  $B^{(k)}$  o hessiano do lagrangeano, com multiplicadores que converjam para o multiplicador  $\lambda^*$  da solução.

**COROLÁRIO 3.3.5** *Sob as hipóteses até agora assumidas, se  $B^{(k)} = \nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)})$ ,  $\lambda^{(k)} \rightarrow \lambda^*$ , e uma sequência  $\{\tilde{\delta}_H^{(k)}\}$  satisfazendo (3.162–3.163) tiver sido testada no início de cada iteração, com  $\tilde{\lambda}^{(k)}$  satisfazendo (3.165) e suficientemente perto de um bom minimizador, então a sequência tem convergência superlinear em dois passos.*

**DEMONSTRAÇÃO** Para poder aplicar o teorema anterior, basta, portanto, verificar também (3.164). Veja que, neste caso

$$P_c^{(k)}(B^{(k)} - W^*)\tilde{\delta}_H^{(k)} = P_c^{(k)}(\nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)}) - \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*))\tilde{\delta}_H^{(k)} \quad (3.188)$$

Como  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$  e  $\lambda^{(k)} \rightarrow \lambda^*$ , a continuidade de  $\nabla^2 L_{xx}$  numa vizinhança de  $x^*$  garante assim (3.164).  $\square$

Usualmente teremos  $\lambda^{(k)}$  satisfazendo também (3.165), e não apenas  $\lambda^{(k)} \rightarrow \lambda^*$ . Ou seja, no caso do corolário acima, a escolha  $\tilde{\lambda}^{(k)} = \lambda^{(k)}$  se imporá naturalmente, na prática.

### OBSERVAÇÃO 3.3.2 – GLOBALIZAÇÃO E COMPATIBILIDADE DE (3.162–3.164)

O teorema 3.3.4 vai no sentido de dizer que se desejamos obter convergência superlinear em dois passos, devemos dispor de um método para atualizar  $B^{(k)}$ ,  $\delta_H^{(k)}$  com  $\lambda^{(k)}$  satisfazendo (3.165), e que faça duas coisas: :

- i – Suficientemente perto de um bom minimizador garanta (3.164), desde que o passo horizontal  $\delta_H^{(k)} = \delta_t^{(k)} + \delta_{soc}^{(k)}$  satisfaça (3.162–3.163).
- ii- “O globalize dentro ” de CDRIN, no sentido de garantir que, perto de cada bom minimizador, seja possível testar passos satisfazendo (3.162–3.163) e, ao mesmo tempo, compatível com as demais hipóteses assumidas para CDRIN.

A questão de como globalizar um dado método de atualização de  $B^{(k)}$ , com boas propriedades locais, pode ter diferentes respostas para cada método, e às vezes corresponde a uma questão bastante difícil de se responder, se desejamos formas eficientes de fazê-lo. Tentaremos situar este ponto na próxima subseção, quando falaremos de “métodos secantes”. A dificuldade maior, nestes casos, está em garantir  $\bar{B}^{(k)} = P_c^{(k)} B^{(k)} P_c^{(k)}$  suficientemente positivo-definida em  $\mathcal{N}(h'(x_c^{(k)}))$ .

Já no caso do corolário 3.3.5, ao tomarmos  $B^{(k)} = \nabla^2 L(x_c^{(k)}, \lambda^{(k)})$ , com  $\|\lambda^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|)$ , é bastante simples fazer uma globalização compatível em CDRIN. Neste caso, por exemplo, poderíamos definir  $\tilde{\delta}_H^{(k)}$  na forma indicada na observação 3.3.1. Um exemplo concreto de tal estratégia, corresponde à implementação de CDR que testamos e registramos no capítulo 4. Nela, enquanto a região de confiança permanece ativa, tomamos para candidato em P2 de cada iteração, uma “boa” aproximação do minimizador do polinômio de Taylor de segunda ordem para  $L(x_c^{(k)} + \cdot, \lambda_{LS}(x_c^{(k)}))$  restrito ao espaço tangente  $\mathcal{N}(h'(x_c^{(k)}))$ , e à região de confiança corrente. Mantemos a própria  $L(x_c^{(k)} + \cdot, \lambda_{LS}(x_c^{(k)}))$  como função de mérito, para auxiliar na avaliação do passo Horizontal. Quando a região de confiança deixa de ficar ativa, o algoritmo de Moré-Sorensen (vide [MoSo 83]), que empregamos para definir o passo Horizontal, automaticamente passa a devolver, como candidato, o passo Newton do modelo quadrático restrito a  $\mathcal{N}(h'(x_c^{(k)}))$ .

**OBSERVAÇÃO 3.3.3** RELAXANDO  $\|\tilde{\lambda}^{(k)} - \lambda_{LS}(x_c^{(k)})\| = O(\|gp(x_c^{(k)})\|)$

Se quisermos usar um multiplicador de Lagrange para avaliar o passo Horizontal, que seja limitado, mas evitando ter que atender (3.165), teremos que fazer algumas exigências a mais. Basicamente, teríamos que enquadrar  $\tilde{\delta}_H^{(k)} = \tilde{\delta}_t^{(k)} + \tilde{\delta}_{soc}^{(k)}$  em HLOC1.b, ou seja:

Comp.1 –  $\tilde{\delta}_t^{(k)}$  foi assintoticamente aceito em DS, ou seja, é um passo de descida suficiente para o modelo quadrático.

Comp.2 –  $\tilde{\delta}_t^{(k)}$  e  $\tilde{\delta}_{soc}^{(k)}$  satisfazem HLOC1.b.

Além de Comp, para conseguirmos demonstrar um lema da aceitação, neste caso, precisamos também de alguma garantia com relação a espaço normal suficiente para passos na direção Horizontal. Pelo menos HLOC5, seria necessário. Por exemplo, ao assumirmos HLOC1.b e  $\{x_c^{(k)}\} \rightarrow x^*$ , uma possibilidade é estarmos usando uma estratégia para a restauração e para HLOC3 (ou, alternativamente, para  $\lambda^{(k)}$ ), como as prescritas no teorema (3.2.5). Nestes casos, conseguiríamos uma cota inferior não nula para  $\rho_{max}^{(k)}$ , suficiente para o lema da aceitação também aqui.

### 3.3.2 CDRIN E PQS “INEXATO”

O objetivo desta subseção é verificar que, sob as hipóteses assumidas até aqui, se  $\{x_c^{(k)}\}$  for gerada com passos quasi-Newton  $\delta_H^{(k)}$ , satisfazendo (3.162–3.163), então igualmente satisfaz um algoritmo PQS, resolvido de forma *inexata*, e gerado por  $P_c^{(k)}B^{(k)}P_c^{(k)}$ . A partir daí, veremos como os resultados obtidos na seção anterior, se relacionam com resultados estabelecidos para métodos PQS. Em particular, se  $\delta_H^{(k)}$  também satisfizer a condição (3.164), adaptada para CDRIN a partir da condição de Dennis-Moré,  $\{x_c^{(k)}\}$  igualmente satisfará uma condição análoga, que Powell determinou como suficiente para convergência superlinear em dois passos, de PQS com resolução exata dos subproblemas quadráticos. Um resultado de Dembo-Tulowitski, enunciado em [DT 85] sobre PQS com resolução inexata dos subproblemas quadráticos, nos permitiria concluir, por este caminho, a convergência superlinear em dois passos de  $x_c^{(k)}$  a  $x^*$ , desde que assumida a aceitação do passo quasi-Newton. Isto, em si, não nos traz resultados novos, e nem mesmo uma nova maneira de provar a mesma coisa, já que uma boa parte da garantia de convergência superlinear em dois passos, obtida na seção anterior, consistia em demonstrar a aceitação assintótica dos passos quasi-Newton. Já aqui, precisamos supor esta aceitação como hipótese. No entanto, entendemos ser importante estabelecer esta ponte entre PQS inexato e CDRIN. O objetivo maior, é tentar construir mecanismos que nos permitam “importar” para CDRIN, parte da farta literatura sobre métodos secantes, existente para MRI em PQS.

Conforme veremos adiante, mesmo que trabalhemos em CDR, ou seja, com resolução exata dos subproblemas, ainda assim não obteríamos, em geral,  $\{x_c^{(k)}\}$  associado a um PQS com resolução exata, mas tão somente inexata.

**PQSLOC**

Chamaremos de PQSLOC, ao método PQS, sem avaliação de mérito do passo, usualmente apresentado para estudar suas propriedades de convergência local, a um *bom minimizador* de MRI. Corresponde, basicamente, a dar passos quasi-Newton para resolver  $\nabla L(x, \lambda) = 0$ . Supondo dada, em cada ponto  $x^{(k)}$ , uma matriz  $B^{(k)} \in R^{n \times n}$ , descrevemos PQSLOC por

$$\begin{aligned} \delta^{(k)} &= \operatorname{argmin}\{\nabla f((x^{(k)}))^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B^{(k)} \delta, \text{ s. a. } h'(x^{(k)}) \delta + h(x^{(k)}) = 0\} \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} + \delta^{(k)} \end{aligned} \quad (3.189)$$

Uma generalização da condição de Dennis-Moré para MRI, foi obtida por Boggs-Tolle-Wang em [BTW 82] caracterizando, sob determinadas hipóteses, como necessária e suficiente para convergência superlinear, em um só passo, de um método PQS, a condição :

$$P^{(k)}(W^* - B^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = o(\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|), \quad (3.190)$$

onde  $P^{(k)} = P(x^{(k)})$ .

Um resultado muito útil é o de Powell [Pow 78], segundo o qual, supondo convergência, estabelece como condição suficiente para convergência superlinear em dois passos

$$P^{(k)}(W^* - B^{(k)})P^{(k)}(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = o(\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|) \quad (3.191)$$

O resultado de Powell aponta para que se trate algoritmos PQSLOC, como algoritmos “tipo” *Horizontal-Vertical*, no sentido que:

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = \delta_H^{(k)} + \delta_V^{(k)}, \quad (3.192)$$

onde  $\delta_H$  é tangente e  $\delta_V$  normal às restrições em  $x^{(k)}$ .

Veja que a condição de Powell (3.191), exige acuidade na aproximação de  $B^{(k)}$  a  $W^*$ , apenas na direção  $\delta_H^{(k)}$ , ou seja

$$P^{(k)}(W^* - B^{(k)})\delta_H^{(k)} = o(\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|), \quad (3.193)$$

enquanto que (3.190) exige o mesmo para o passo na direção  $\delta_H^{(k)} + \delta_V^{(k)}$ . Já a condição de  $x^*$  ser um bom minimizador, é uma condição sobre  $W^*$  na direção tangente às restrições, apenas. De fato, temos a impressão que uma boa parte dos métodos secantes para MRI, que não fazem penalização na função objetivo diretamente, (embora quase sempre usem funções de mérito com penalização), acabam de uma maneira, ou de outra, garantindo (3.191), mas não (3.190) (vide [Pow 78], [CC 84], [NO 85], [FON 88]).

A condição de Powell guarda grande afinidade formal com a condição (3.164), que resultou na convergência superlinear em dois passos para CDRIN, embora aparentemente, ambas se refiram a sequências geradas em processos distintos. Nosso objetivo nesta seção, é mostrar que, *num sentido inexato*, sequências geradas em CDRIN, também podem ser tratadas como se tivessem sido geradas por PQSLOC.

Podemos igualmente considerar métodos PQS, com resolução inexata do subproblema quadrático. Um resultado que tomamos como referência, é o de Dembo-Tulowitski. Em [DT 85], eles enunciam:

**TEOREMA 3.3.6 (DT)** *Se um método PQS é localmente convergente, com uma taxa superlinear em um ou em dois passos, então o método correspondente a aceitar, em  $x^{(k)}$ , uma solução inexata  $\delta^{(k)}$  do subproblema quadrático, herda a respectiva propriedade assintótica se e só se*

$$\|\delta^{(k)} - \delta_*^{(k)}\| = o(\|\delta^{(k)}\|), \quad (3.194)$$

onde  $\delta_*^{(k)}$  seria o passo “exato”, dado a partir de  $x^{(k)}$

Vamos agora caracterizar  $\{x_c^{(k)}\}$  satisfazendo (3.162–3.164), para  $k$  suficientemente grande, como sendo obtida por um método PQS com resolução inexata do subproblema (3.189), satisfazendo a condição de Powell, e de forma a garantir (3.194). Para tanto, decomponemos o passo entre  $x_c^{(k)}$  e  $x_c^{(k+1)}$ , na soma do passo horizontal  $\delta_H^{(k)}$  dado em CDRIN a partir de  $x_c^{(k)}$ , com o passo vertical  $\delta_V^{(k+1)} = x_c^{(k+1)} - x^{(k+1)}$ , já antecipado em (3.47). Note que, para manter a coerência com a notação da seção 3.2, vamos descrever um algoritmo PQS decompondo sua  $k$ -ésima iteração  $\delta^{(k)}$  na forma, talvez pouco usual,

$$\delta^{(k)} = \delta_H^{(k)} + \delta_V^{(k+1)} \quad (3.195)$$

Para cada  $B^{(k)}$  considere

$$\tilde{B}^{(k)} = P_c^{(k)} B^{(k)} P_c^{(k)} \quad (3.196)$$

**LEMA 3.3.7** – *Suponhamos que  $\{x_c^{(k)}\}$  converge para um bom minimizador, e é gerada por CDRIN, satisfazendo as hipóteses até aqui assumidas, bem como as condições quasi-Newton para  $B^{(k)}$ , em (3.162–3.163). Então  $\{x_c^{(k)}\}$  coincide com uma sequência gerada de forma inexata por PQSLOC, com aproximações hessianas  $\tilde{B}^{(k)}$ . Ou seja, neste caso, a sequência gerada em CDRIN satisfaz:*

$$P_c^{(k)} [\tilde{B}^{(k)} \delta^{(k)} + g(x_c^{(k)})] = o(\|\delta^{(k)}\|) \quad (3.197)$$

$$h'(x_c^{(k)}) \delta^{(k)} + h(x_c^{(k)}) = o(\|\delta^{(k)}\|) \quad (3.198)$$

$$x_c^{(k+1)} = x_c^{(k)} + \delta^{(k)} \quad (3.199)$$

Se além disto também valer (3.164) então igualmente se verifica a condição de Powell (3.191) para  $\{x_c^{(k)}\}$

## DEMONSTRAÇÃO

Do lema 3.43 e da equivalência (3.65), obtemos

$$\delta_V^{(k+1)} = -h'(x_c^{(k)})^\dagger h(x^{(k+1)}) + o(\|\delta_H^{(k)}\|) \quad (3.200)$$

(3.3.7) e (3.166), por sua vez, nos asseguram

$$P_c^{(k)}(\delta_H^{(k)} + \delta_V^{(k+1)}) = \delta_H^{(K)} + o(\|\delta_H^{(k)}\|) \quad (3.201)$$

Nas condições do enunciado, de (3.162), (3.196) e (3.201), obtemos:

$$\begin{aligned} P_c^{(k)}[\tilde{B}^{(k)}(x_c^{(k+1)} - x_c^{(k)}) + g(x_c^{(k)})] &= P_c^{(k)}(B^{(k)}P_c^{(k)}(\delta_H^{(k)} + \delta_V^{(k+1)} + g(x_c^{(k)})) \\ &= P_c^{(k)}(B^{(k)}\delta_H^{(k)} + g(x_c^{(k)})) + o(\|\delta_H^{(k)}\|) \\ &= o(\|\delta_H^{(k)}\|) \end{aligned} \quad (3.202)$$

De (3.34), (3.47) e (3.65) obtemos

$$\begin{aligned} h'(x_c^{(k)})(x_c^{(k+1)} - x_c^{(k)}) + h(x_c^{(k)}) &= h'(x_c^{(k)})\delta_V^{(k+1)} + h(x^{(k+1)}) \\ &+ h'(x_c^{(k)})\delta_H^{(k)} + [h(x_c^{(k)}) - h(x^{(k+1)})] \\ &= o(\|\delta_H^{(k)}\|) \end{aligned} \quad (3.203)$$

(3.163) e (3.200) nos dizem que,  $\delta_H^{(k)}$  e  $\delta_V^{(k)}$  são “assintoticamente ortogonais”, garantindo

$$\|\delta_H^{(k)}\| = O(\|x_c^{(k+1)} - x_c^{(k)}\|) \quad (3.204)$$

Levando esta desigualdade em (3.202–3.203), obtemos (3.197–3.198).

(3.164), (3.166) e (3.200) e (3.204) garantem a condição de Powell (3.191) para  $\{x_c^{(k)}\}$ .  $\square$

#### OBSERVAÇÃO 3.3.4 -

Se  $\{x_c^{(k)}\}$  é uma sequência gerada por PQSLOC inexato, satisfazendo (3.197–3.198), converge para um bom minimizador e satisfaz a condição de Powell, é fácil verificar que satisfaz igualmente as condições do teorema 3.3.6. Neste caso o teorema 3.3.6, junto com o fato da condição de Powell ser suficiente para a convergência superlinear de PQSLOC com resolução exata, nos forneceria uma outra prova da convergência superlinear em dois passos de  $\{x_c^{(k)}\}$ . No entanto, para poder fazê-lo, estamos implicitamente supondo a aceitação assintótica de  $\delta_H^{(k)}$  satisfazendo (3.162–3.164), enquanto que uma parte importante do resultado da subseção anterior, consiste em demonstrar o lema da aceitação (3.3.3). O sentido da identificação feita acima, é o de tentar transferir para CDRIN, resultados válidos para métodos bem sucedidos em PQS, com convergência superlinear garantida. Os candidatos naturais disponíveis, são métodos que geram  $B^{(k)}$  com atualizações secantes, e que, além disto, estejam num formato tipo  $B = \tilde{B} = P_c B P_c$ . Este é o assunto da nossa próxima subseção .

### 3.3.3 ATUALIZAÇÃO SECANTE

Muita coisa tem sido escrita nestes últimos 20 anos, sobre métodos quasi-Newton, com atualização secante, para PQS (vide [Pow 78], [CC 84], [NO 85], [FST 87], [Fon 88], [Ta 88], [Fon 90], [Byrd 90]). Nosso objetivo, nesta subseção, é o de mostrar uma maneira de fazer atualização secante em CDRIN, utilizando a teoria já estabelecida para PQS, através da relação entre CDRIN e PQSLOC inexato identificada na seção anterior. Conforme seria de se esperar, estamos particularmente interessados em “importar” métodos para atualização secante, em PQS, que igualmente ao nosso, desacoplem as resoluções dos passos Horizontal e Vertical em cada iteração, tendo em perspectiva atender à condição de Powell (3.191). Tais métodos geralmente se desenvolvem a partir de *modelos reduzidos* (vide [CC 84] e [NO 85]), conforme esclareceremos a seguir. Não nos interessa desenvolver, aqui, uma teoria exaustiva sobre métodos secantes para CDRIN, mas tão somente, apontar uma direção por onde se pode introduzi-los, naturalmente, em CDRIN. Neste sentido, nos concentraremos sobre um método desenvolvido por Coleman e Conn em [CC 84].

O desenvolvimento de métodos secantes para minimização, tem sido um dos temas mais exaustivamente abordados na otimização dos últimos 30 anos. Sua consolidação teórica para minimização sem restrições se dá em meados da década de 70, e gostaríamos de destacar aqui, em rápidas pinceladas, uns poucos resultados que nos servem como referência teórica.

Um método quasi-Newton, para minimização de uma  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , de classe  $C^2$ , com busca linear, pode se definir por

**QNBL** Dados  $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ , bem como uma matriz simétrica e inversível  $B^{(k)}$ , obtenha  $x^{(k+1)}$ , escolhendo  $0 < \lambda^{(k)} \leq 1$  em:

$$s^{(k)} = -B^{(k)-1} \nabla f(x^{(k)}) \quad (3.205)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} s^{(k)} \quad (3.206)$$

Denominamos de QNLOC, a um método QNBL no qual  $\lambda^{(k)} = 1$ . A taxa de convergência local de um método, geralmente, é estudada com QNLOC. No contexto de MSR, QNBL corresponde à tentativa de globalizar, através técnicas que utilizam buscas lineares, algum método QNLOC com boas propriedades de convergência local. O que diferencia dois métodos QNLOC, é a escolha da aproximação hessiana  $B^{(k)}$ . Um método é denominado *secante*, se faz, em cada passo, uma atualização, que satisfaça à *equação secante* definida por:

$$B^{(k)} s^{(k)} = y^{(k)} \quad (3.207)$$

onde

$$s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} \quad (3.208)$$

$$y^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}) \quad (3.209)$$

Evidentemente, em dimensão maior que 1, a equação secante pode dar origem a diversos métodos diferentes. Os métodos secantes mais “populares”, resultam de se impor a condição de minimizar a distância entre  $B^{(k+1)}$  e  $B^{(k)}$ , em alguma norma adequada, sujeita a garantir a simetria para  $B^{(k)}$  e a equação secante. Para simplificar a exposição nesta seção, vamos nos concentrar num deles, apenas, e que acabou resultando ser o mais “popular” na prática. Trata-se da atualização

conhecida como BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno). Ela se faz com uma matriz de posto 2, e pode ser definida pela fórmula  $\mathcal{B}_{\text{BFGS}}$ , a seguir:

$$B^{(k+1)} = \mathcal{B}_{\text{BFGS}}(B^{(k)}, s^{(k)}, y^{(k)}) = B^{(k)} + \frac{y^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}} - \frac{B^{(k)}s^{(k)}B^{(k)}s^{(k)T}}{s^{(k)T}B^{(k)}s^{(k)}} \quad (3.210)$$

Uma propriedade básica de  $\mathcal{B}_{\text{BFGS}}$ , é que se  $B^{(k)}$  for positivo-definida, então  $B^{(k+1)}$  também é, sempre que

$$s^{(k)T}y^{(k)} > 0 \quad (3.211)$$

Uma boa parte da teoria sobre atualização BFGS, se refere a algoritmos nos quais se faz busca linear numa direção quasi-Newton. Em métodos secantes, um método de busca linear importante, consiste em aceitar  $\alpha_k > 0$ , numa dada direção  $d_k$ , caso satisfaça:

$$f(x_k + \alpha_k) \leq f(x_k) + \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k \quad (3.212)$$

$$g(x_k + \alpha_k)^T d_k \geq \sigma_2 g(x_k)^T d_k \quad (3.213)$$

onde  $0 < \sigma_1 < \sigma_2$ . A primeira das relações diz que o passo deve ter descida suficiente. Já a segunda, evita que seja pequeno demais, bem como garante (3.211). Daí sua importância para métodos secantes, pois permite manter as atualizações BFGS positivo-definidas, independentemente da  $f$  ser convexa na região considerada. É fácil ver que se  $d_k$  é uma direção de descida da  $f$  em  $x_k$ ,  $f$  é  $C^1$  e limitada inferiormente, na semireta  $\{x_k + \alpha d_k : \alpha \geq 0\}$ , então sempre existem passos satisfazendo (3.212–3.213) (vide [Wol 69] e [Wol 71]), assim como algoritmos que asseguram encontrar um tal  $\alpha_k$ , num conjunto finito de iterações (vide [Fle 87]). (3.212–3.213) são conhecidas como condições de Wolfe.

Gostaríamos de destacar alguns resultados importantes, nesta teoria para métodos quasi-Newton com atualização BFGS em MSR, *sem a preocupação de enunciá-los em toda a sua generalidade, e ressaltando apenas seus aspectos que mais nos interessam*. As hipóteses que assumimos em comum para eles, nos garantem  $f$  de classe  $C^2$  num domínio convexo  $D$ ,  $x^*$  um bom minimizador de  $f$ , e que a superfície de nível  $\mathcal{L}_{f(x_0)} = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$  é compacta. Supomos ainda que, para  $x$  em alguma vizinhança de  $x^*$ , valha a seguinte condição de Lipschitz

$$\|\nabla_{xx}^2 f(x) - \nabla^2 f(x^*)\| = O(\|x - x^*\|) \quad (3.214)$$

Começamos com um resultado de natureza estritamente local sobre QNLOC, devido a Broyden, Dennis e Moré, e que pode ser encontrado em [BDM 73].

**TEOREMA 3.3.8** *Suponhamos  $\{x^{(k)}\}$  gerado por QNLOC com atualização BFGS. Sob as hipóteses descritas no parágrafo anterior, se  $x^{(0)}$  estiver suficientemente próximo de  $x^*$ , e  $B^{(0)}$  suficientemente próximo de  $\nabla_{xx}^2 f(x^*)$ , então  $x^{(k)}$  converge a  $x^*$  com taxa superlinear.*

O segundo resultado que apontamos, corresponde aos teoremas 8.8 e 8.9 em [DM 77], e pode ter leituras com destaques diferenciados, conforme o interesse. Do ponto de vista das nossas preocupações, uma de suas características mais importantes, corresponde a não exigir que a sequência  $x_k$  seja gerada por QNBL, nem tampouco a incômoda hipótese sobre  $x^{(0)}$  e  $B^{(0)}$  presentes no resultado anterior, mas tão somente que  $x^{(k)}$  convirja a  $x^*$ , dentro de determinadas condições. Como resultado obtém-se que atualizações BFGS, satisfazendo (3.208–3.210), permanecem uniformemente bem condicionadas, supondo apenas (3.211), bem como  $B^{(0)}$  simétrica e positivo-definida.

**TEOREMA 3.3.9** *Suponhamos que  $f$  e  $x^*$  satisfazem às hipóteses colocadas acima, e que  $\{x^{(k)}\}$  é uma sequência gerada, de tal forma que satisfaça*

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|x^{(k)} - x^*\| < \infty \quad (3.215)$$

*Suponhamos ainda que  $\{s^{(k)}\}$ ,  $\{y^{(k)}\}$ ,  $\{B^{(k)}\}$  satisfaçam (3.208–3.211), e que  $B^{(0)} \in L(R^n)$  seja positivo-definida e simétrica.*

*Então  $B^{(k)}$  é sempre positivo-definida, com número de condição uniformemente limitado. Além disto,*

$$\|(B^{(k)} - \nabla^2 f(x^*))s^{(k)}\| = o(\|s^{(k)}\|) \quad (3.216)$$

*Em particular, se  $x_k$  for gerada por QNLOC, a convergência de  $x^{(k)}$  a  $x^*$  é superlinear.*

Este segundo resultado é interessante, quando a estratégia de globalização de BFGS adotada garante convergência local, satisfazendo (3.215), assim como uma busca linear de tal modo que  $\alpha^{(k)} = 1$  seja assintoticamente aceita, sempre que testada. (Veja que, em CDR sob HLOC1–HLOC5 e convergência a um bom minimizador, a condição (3.215) fica garantida, como consequência da convergência linear num conjunto finito de passos obtida no teorema 3.2.6.) Note-se que (3.211) fica automaticamente garantida, num domínio convexo onde  $f$  seja estritamente convexa, por um argumento simples, tipo teorema do valor médio para  $y^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})$ . Em particular, perto de um bom minimizador  $x^*$ , (3.211) se verifica sob (3.215), pois neste caso fica garantido  $s^{(k)} \rightarrow 0$ .

Por outro lado, no que diz respeito às garantias de convergência global, há muita coisa importante, que ainda hoje não se sabe. Conforme Nocedal aponta, em [Noc 91], era, e parece que continua sendo até hoje, uma questão em aberto, saber se QNBL com atualização BFGS e buscas lineares, satisfazendo as condições de Wolfe, garantem  $\liminf \|g(x_k)\| = 0$ . Nesta direção, resultados parciais importantes se conseguem, supondo  $f$  convexa. Vários autores trabalharam sobre diferentes buscas lineares em QNBL, com atualização secante, (vide ([Pow 71], [Pow 72], [Dix 72], [Sto 75], [Pow 76], [Wer 78], [BN 89])). Gostaríamos de ressaltar dois deles, no caso particular onde  $f$  é estritamente convexa, e  $\{x : f(x) \leq f(x_0)\}$  é compacto. O resultado em [Pow 76] assegura que, neste caso, com buscas garantindo a condição de Wolfe, obtemos convergência global e superlinear ao minimizador  $x^*$ . O trabalho de Powell é importante, não só pelo resultado, mas também pela técnica desenvolvida que explicita *características fortemente autoreguladoras, para a adequação de  $B^{(k)}$  a  $W^*$ , já visíveis no teorema (3.3.9)*. O segundo resultado está em [BN 89], e nele Byrd e Nocedal avançam na compreensão das referidas *características fortemente autoreguladoras de  $B^{(k)}$* . Em particular, garantem para  $\alpha_k$  obtido apenas com backtracking, começando com  $\alpha_{(k,0)} = 1$ , que QNBL com atualização BFGS tem convergência global e superlinear a  $x^*$ .

Voltando para MRI, quem é positivo-definida num bom minimizador  $x^*$ , é  $\bar{W}^* = P^*W^*P^*$ . Neste sentido, a condição de Powell é muito útil, pois induz a que, apenas nos preocupemos em aproximar  $B^{(k)}$  de  $W^*$  no espaço tangente às restrições. Esta é também uma boa razão para que tantos trabalhos sobre métodos de atualização secante, em PQS, tenham sido publicados usando técnicas de trazer para *modelos reduzidos* no  $R^{n-m}$ , o problema de achar um passo quasi-Newton na direção Horizontal. Detalhando melhor, suponhamos que  $Z^{(k)}$  seja uma matriz  $(n-m) \times n$ , cujas linhas constituam uma base ortonormal do espaço tangente às restrições  $\mathcal{N}(h'(x^{(k)}))$ . Neste caso,  $Z^{(k)T} : R^{n-m} \rightarrow \mathcal{N}(h'(x^{(k)}))$ , dada por  $s \rightarrow Z^{(k)T}s$ , constitui uma parametrização isométrica de  $\mathcal{N}(h'(x^{(k)}))$ . Assim, o subproblema quadrático em  $x^{(k)}$ , dado por

$$\delta_t^{(k)} = \operatorname{argmin}\{q^{(k)}(\delta) = g(x^{(k)})^T(\delta) + \frac{1}{2}\delta^T B^{(k)}\delta : h'(x^{(k)})\delta = 0 \text{ e } \|\delta_t\| \leq \Delta\} \quad (3.217)$$

pode descer para o  $R^{n-m}$  como

$$\begin{aligned} s^{(k)} &= \operatorname{argmin}\{q^{(k)}(Z^{(k)T}s) = g(x_c^{(k)})^T(Z^{(k)T}s) + \frac{1}{2}(Z^{(k)T}s)^T B^{(k)}Z^{(k)T}s : s \in R^{n-m} \\ &\quad \text{e } \|s\| \leq \Delta\} \\ &= \operatorname{argmin}\{\bar{q}^{(k)}(s) = \bar{g}^{(k)T}s + \frac{1}{2}s^T \bar{B}^{(k)}s : s \in R^{n-m} \text{ e } \|s\| \leq \Delta\} \end{aligned} \quad (3.218)$$

onde  $\bar{g}^{(k)} = Z^{(k)}g(x^{(k)})$  e  $\bar{B}^{(k)} = Z^{(k)}B^{(k)}Z^{(k)T}$  funcionam como o gradiente e a aproximação Hessiana reduzidos, no modelo reduzido  $\bar{q}^{(k)}$  em  $R^{n-m}$ . Para “voltar”, é só observar que  $\delta_t^{(k)} = Z^{(k)T}s^{(k)}$ . O que torna esta técnica de modelo reduzido atraente, para fazer atualização secante, é que o espaço tangente pode estar variando, mas agora  $\bar{B}^{(k)}$  opera no  $R^{n-m}$ . Além disto, perto de  $x^*$  obteremos  $\bar{W}^*$  sempre positivo-definida, permitindo-nos aplicar a  $\bar{B}^{(k)}$  fórmulas como a BFGS, desde que tomemos alguns cuidados importantes com as escolhas de  $Z^{(k)}$ , e que comentaremos adiante. Vários métodos diferentes podem se definir por aí, a depender das escolhas de  $s^{(k)}$  e  $y^{(k)}$  (vide [NO 85]). Nos fixaremos, daqui para a frente, no método desenvolvido por Coleman e Conn em [CC 84], muito embora acreditemos que qualquer outro deva funcionar igualmente, para efeitos do que desejamos ilustrar. O método de Coleman-Conn tem a vantagem de tornar a exposição mais simples, por não exigir salvaguardas adicionais, como por exemplo os métodos sugeridos em [NO 85] ou [Pow 78]. Tem a desvantagem de pedir duas avaliações do jacobiano das restrições por iteração, embora exija fatoração apenas de um deles.

Descrevemos a seguir o algoritmo de Coleman-Conn (ALGCC) apresentado em [CC 84,§3], entendendo  $A^{(k)} = h'(x^{(k)})$ , e que as linhas de  $Z^{(k)}$  constituem uma base ortonormal de  $\mathcal{N}(A^{(k)})$ . Dados  $x^{(k)} \in R^n$  e  $\bar{B}^{(k)} \in R^{(n-m) \times (n-m)}$  e simétrica,  $x^{(k+1)}$  se obtém da seguinte forma:

$$\delta_H^{(k)} \leftarrow -Z^{(k)T}\bar{B}^{(k)-1}Z^{(k)}g(x^{(k)}) \quad (3.219)$$

$$x_+^{(k)} \leftarrow x^{(k)} + \delta_H^{(k)} \quad (3.220)$$

$$s^{(k)} \leftarrow Z^{(k)T}\delta_H^{(k)} \quad (3.221)$$

$$y^{(k)} \leftarrow Z^{(k)T}[\nabla L(x_+^{(k)}, \lambda_{LS}(x^{(k)})) - \nabla L(x^{(k)}, \lambda_{LS}(x^{(k)})] \quad (3.222)$$

$$\bar{B}^{(k+1)} \leftarrow \mathcal{B}_{\text{BFGS}}(\bar{B}^{(k)}, s^{(k)}, y^{(k)}) \quad (3.223)$$

$$\delta_V^{(k)} \leftarrow -A^{(k)\dagger}h(x_+^{(k)}) \quad (3.224)$$

$$x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + \delta_V^{(k)} \quad (3.225)$$

### OBSERVAÇÃO 3.3.5 –

- i- Do mesmo jeito que em MSR, se  $x^{(k)}$  permanece suficientemente perto de um bom minimizador  $x^*$ , e  $\bar{B}^{(0)}$  for positivo-definida, então todos os  $B^{(k)}$  serão positivo-definidos, e o algoritmo fica bem definido nestas condições. Na prática, êle pressupõe alguma técnica, para torná-lo viável globalmente.

ii- Conforme observa Byrd em [Byr 90], ALGCC não é um algoritmo PQSLOC no sentido usual, visto que não satisfaz  $h'(x^{(k)})\delta_V^{(k)} + h(x^{(k)}) = 0$ . Por esta razão Byrd não o considera como um algoritmo PQS, e o denomina de algoritmo “horizontal-vertical”

Coleman e Conn ressaltam em seu artigo que poderíamos substituir (3.224), por  $\delta_V^{(k)} \leftarrow -A^{(k)\dagger}h(x^{(k)})$ , e os resultados obtidos permaneceriam válidos. Vale observar ainda que, ALGCC é claramente um algoritmo PQSLOC inexato, para  $B^{(k)} = Z^{(k)T}\bar{B}^{(k)}Z^{(k)}$ , satisfazendo  $r_V^{(k)} = h'(x^{(k)})\delta_V^{(k)} + h(x^{(k)}) = o(\|\delta_H^{(k)}\|)$ .

É fácil perceber, que o algoritmo de Coleman-Conn depende das escolhas a serem feitas para  $Z^{(k)}$ . Em particular, cada aproximação hessiana reduzida  $\bar{B}^{(k)}$ , corresponde a uma aproximação  $B^{(k)} = Z^{(k)T}\bar{B}^{(k)}Z^{(k)}$ , de  $P^*\nabla_{xx}^2L(x^*, \lambda^*)P^*$ . Se, para um dado  $Z^{(k)}$ , obtemos uma boa aproximação, ao trocá-lo por um  $\hat{Z}^{(k)}$  bem diferente, podemos destruir esta boa aproximação. Uma questão crucial, para se obter boas propriedades de convergência local com algoritmos que usam *modelos reduzidos*, reside na obtenção de  $Z^{(k)} = Z(x^{(k)})$  variando “continuamente”.<sup>§</sup>

Coleman e Sorensen mostram em [CS 84], que numa vizinhança de um ponto regular de  $h$ , é possível obter  $Z(x)$  Lipschitz contínua de uma forma eficientemente computável, e tal que

$$Z(x)Z(x)^T = I \quad (3.226)$$

$$h'(x)Z(x) = 0 \quad (3.227)$$

Assumindo que  $Z^{(k)} = Z(x^{(k)})$  e que  $Z(x)$  é Lipschitz contínua, satisfazendo (3.226–3.227), Coleman-Conn conseguem adaptar as técnicas usadas por Broyden, Dennis e Moré, de modo a estender os teoremas 3.3.8 e 3.3.9 para sequências geradas por seu algoritmo. Ou seja, supondo  $Z(x)$  Lipschitz contínua, numa vizinhança de um bom minimizador  $x^*$ , demonstram que:

A - Se  $x^{(0)}$  estiver suficientemente próximo de  $x^*$ , e  $\bar{B}^{(0)}$  suficientemente próximo de  $\bar{W}^*$ , então, lembrando que  $s^{(k)} = Z^{(k)}\delta_H^{(k)}$  é o passo obtido no modelo reduzido, obtemos

$$\|(\bar{B}^{(k)} - \bar{W}^*)s^{(k)}\| = o(\|s^{(k)}\|) \quad (3.228)$$

Em particular, a convergência de  $x^{(k)}$  a  $x^*$  resulta superlinear em dois passos. Byrd, em [Byr 90], melhora este resultado, dizendo que, nas mesmas condições, a sequência  $x^{(k)} + \delta_H^{(k)}$  tem convergência superlinear a  $x^*$  (num só passo).

B - Se  $\sum_{k=0}^{\infty} \|x^{(k)} - x^*\| < \infty$ ,  $\|x^{(k+1)} - x^*\| = O(\|x^{(k)} - x^*\|)$ ,  $(s^{(k)})^T y^{(k)} > 0$  e  $B^{(0)}$  for positivo-definida então, igualmente, se obtem (3.228) e a convergência superlinear em dois passos de  $x^{(k)}$ .

Na verdade, nos parece haver uma certa imprecisão, na formulação do resultado B, no artigo de Coleman-Conn. Eles omitem no enunciado do resultado B, a condição  $(s^{(k)})^T y^{(k)} > 0$ , para todo  $k > 0$ , mas usam-na implicitamente. Nos parece claramente falso que, por si só, as demais hipóteses formuladas no caso B, garantam  $(s^{(k)})^T y^{(k)} > 0$  nas primeiras iterações, embora após um conjunto finito de iterações isto seja verdade, já que  $x^{(k)} \rightarrow x^*$  e  $P^*W^*P^*$  é positivo-definida. No nosso caso, como estamos interessados em “importar” ALGCC de forma a globalizá-lo em CDR, nossa estratégia corresponderá a garantir  $B^{(k)}$  sempre positivo-definida, por algum mecanismo, e de forma que nas iterações finais possamos cair em iterações que, “num sentido inexato” imitem ALGCC. Colocaremos em SEC, escolhas *trivialmente compatíveis* com as demais hipóteses formuladas para CDR até o momento, e que caracterizam um contexto, no qual podemos analisar a importação de ALGCC para CDR.

<sup>§</sup> Uma alternativa a isto, corresponde a tratar intrinsecamente a atualização secante, de forma que a aproximação Hessiana reduzida independa da escolha de  $Z^{(k)}$ . Uma tal abordagem pode se encontrar em [BS 92]

**SEC**

Para cada  $k \in N$ , considere dada uma matriz  $Z^{(k)} \in R^{(n-m) \times n}$ , cujas linhas constituam uma base ortonormal do espaço tangente às restrições em  $x_c^{(k)}$ . Considere ainda que:

$$s^{(k)} = Z^{(k)T}(x^{(k+1)} - x_c^{(k)}) \quad (3.229)$$

$$y^{(k)} = Z^{(k)T}[\nabla L(x^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x^{(k)})) - \nabla L(x_c^{(k)}, \lambda_{LS}(x^{(k)}))] \quad (3.230)$$

Para cada bom minimizador  $x^*$ , de MRI, existe vizinhança  $V^*$ , e função Lipschitziana  $Z : V^* \rightarrow R^{(n-m) \times n}$  satisfazendo (3.226–3.227), tal que, se  $x_c^{(k)} \in V^*$  então:

SEC1 –  $Z^{(k)} = Z(x_c^{(k)})$

SEC2 –  $\bar{B}^{(k)} = Z^{(k)}B^{(k)}Z^{(k)T}$  é uma matriz simétrica positivo-definida.

SEC3 –  $\bar{B}^{(k+1)} = \mathcal{B}_{\text{BFGS}}(B^{(k)}, s^{(k)}, y^{(k)})$ .

SEC4– Considere o passo quasi-Newton na direção tangente às restrições

$$\delta_{\text{QN}}^{(k)} = -Z^{(k)T}\bar{B}^{(k)-1}Z^{(k)}g(x^{(k)}) \quad (3.231)$$

Se  $x_c^{(k)} + \delta_{\text{QN}}^{(k)}$  estiver dentro da região de confiança inicial da  $k$ -ésima iteração, então deve ser o primeiro ponto candidato a ser testado, nesta iteração de CDR.

Observe que SEC1 independe das escolhas feitas até agora para CDR. Além disto SEC2 e SEC3 ficam garantidos, numa vizinhança de cada bom minimizador, caso adotemos SEC3 sempre que  $(s^{(k)})^T y^{(k)} > 0$ , com alguma salvaguarda que garanta  $B^{(k)}$  uniformemente limitada, de modo a satisfazer HB, bem como fazendo qualquer escolha positivo-definida para  $B^{(k)}$ , satisfazendo HB, em caso contrário. Isto, em si, não representa restrições complicadas às hipóteses firmadas para CDR. A dificuldade real está em fazer com que, o passo quasi-Newton em (3.231) seja assintoticamente aceito, e de forma que se possa igualmente garantir HLOC2.

Veja que, se  $B^{(k)}$  for “suficientemente” bem condicionada, supondo  $x_c^{(k)} \rightarrow x^*$ , então buscas lineares na direção quasi-Newton, proporcionarão passos com descida suficiente, HLOC2 e portanto também (3.215). Supondo que o teorema 3.3.9 se generaliza também para cá, isto nos garantiria (3.228). Como o passo quasi-Newton é sempre testado, o lema da aceitação (3.3.3) nos asseguraria a afirmação em itálico logo acima. Em resumo, compatibilizar CDR com SEC, aparentemente está ligado a chegar perto de um bom minimizador, com  $B^{(k)}$  “suficientemente” bem condicionado, e aí reside nossa dificuldade principal. Veja que, garantir  $B^{(k)}$  “suficientemente” bem condicionado em QNBL, com atualização BFGS, e buscas como as que satisfazem às condições de Wolfe (garantindo, portanto, sempre  $(s^{(k)})^T y^{(k)} > 0$ ), corresponde a assegurar propriedades de convergência global, que ainda hoje constituem questões em aberto para tais métodos, em MSR, conforme apontamos acima. Isto significa que não podemos esperar obter grandes resultados aqui. Na verdade o que nos propomos a fazer agora, é muito mais situar o problema de globalizar métodos secantes, do que desenvolver soluções satisfatórias para êle.

Vamos discutir a seguir duas formas de se pensar como importar ALGCC ( vale dizer impor SEC1–SEC4 ), e globalizá-lo em CDR. Acompanhamos, em linhas gerais, as idéias esboçadas por Martinez e Santos, em [MS 95, alg. 6.3.1], a propósito da globalização de métodos secantes para MSR. Essencialmente, propõem que se faça backtracking na direção quasi-Newton, desde que ela faça um ângulo uniformemente afastado de 90 graus com a direção negativa do gradiente, e seu tamanho não seja “pequeno demais”, comparado com a norma do gradiente. Caso contrário, essencialmente propõem que se garanta um passo de descida suficiente, fazendo backtracking numa direção de descida, para a qual se tenha um ângulo uniformemente afastado de 90 graus com a direção de Cauchy.

### GLOBALIZAÇÃO A

O objetivo desta primeira forma de globalização não consiste em propor um método eficiente, mas apenas mostrar como é possível usar o resultado de Coleman-Conn, descrito em A, para “globalizá-lo” em CDRIN. O faremos, impondo SEC1–SEC4, junto com as demais hipóteses de CDR, de forma a garantir passos de descida suficiente satisfazendo HLOC2. A idéia é atualizar  $B^{(k)}$ , usando BFGS sempre que  $(s^{(k)})^T y^{(k)} > 0$ , com duas salvaguardas:

SALV1 –  $B^{(k+1)}$  é o Hessiano verdadeiro  $\nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k+1)}))$ , sempre que o mal-condicionamento de  $B^{(k)}$  estiver “atrapalhando a descida suficiente” do passo Gauss-Newton, e tenhamos indicações que  $x_c^{(k)}$  está se aproximando de algum ponto de Kuhn-Tucker.

SALV2 –  $B^{(k)} = O(1)$ .

Para detalhar mais SALV1–SALV2, seja  $\Theta^{(k)}$  o coseno do ângulo entre  $\delta_{PC}^{(k)}$  e  $\delta_{QN}^{(k)}$ , isto é:

$$\Theta^{(k)} = \cos \theta_{QN}^{(k)} = \frac{(\delta_{PC}^{(k)})^T \delta_{QN}^{(k)}}{\|\delta_{PC}^{(k)}\| \|\delta_{QN}^{(k)}\|} \quad (3.232)$$

É fácil ver que, se  $-1/K < \Theta^{(k)} < 0$ , ou  $\|\delta_{QN}^{(k)}\|/\|\delta_{PC}^{(k)}\| > K$ , então  $K_2(\bar{B}^{(k)}) > K$ . Com base nisto, supondo SEC1 atendida, e  $s^{(k)}$ ,  $y^{(k)}$  como em (3.229–3.230), propomos que se imponha:

GA.1 – Salvaguarda para  $B^{(k)}$  mal condicionada com  $gp(x_c^{(k)})$  “pequeno”:

Se

$$n_{p_c^{(k)}} < .01 \text{ e} \quad (3.233)$$

$$\Theta^{(k)} > -10^{-4} \text{ ou } \frac{\|\delta_{QN}^{(k)}\|}{\|\delta_{PC}^{(k)}\|} > 10^4 \quad (3.234)$$

então garanta

$$\bar{B}^{(k+1)} = Z^{(k)} \nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k+1)}, \lambda_{LS}(x_c^{(k+1)})) Z^{(k)T} \quad (3.235)$$

GA.2 – Passo na direção quasi-Newton para  $B^{(k)}$ 

Senão

i – Faça busca linear em CDR, na direção  $\delta_{\text{QN}}^{(k)}$ , começando com um passo  $\|\mu\delta_{\text{QN}}^{(k)}\| = \min\{\Delta, \|\delta_{\text{QN}}^{(k)}\|\}$ .

ii – Se

$$(s^{(k)})^T y^{(k)} > 0 \quad \text{e} \quad (3.236)$$

$$\|\mathcal{B}_{\text{BFGS}}(\bar{B}^{(k)}, s^{(k)}, y^{(k)})\| < 10^6 \|\bar{B}^{(0)}\| \quad (3.237)$$

então

$$\bar{B}^{(k+1)} = \mathcal{B}_{\text{BFGS}}(\bar{B}^{(k)}, s^{(k)}, y^{(k)}) \quad (3.238)$$

Senão, escolha para  $\bar{B}^{(k)}$ , qualquer matriz positivo-definida, satisfazendo

$$\|\bar{B}^{(k)}\| < 10^6 \|\bar{B}^{(0)}\| \quad (3.239)$$

Observamos inicialmente, que as únicas exigências sobre CDR efetivamente impostas, correspondem a fazer atualizações  $B^{(k)}$  conforme indicado, e que o passo candidato seja sempre escolhido na direção quasi-Newton, sob determinadas condições. Isto atende obviamente a SEC1–SEC4. A busca linear, onde foi imposta, essencialmente corresponde a um backtracking numa direção satisfazendo  $\Theta^{(k)} \leq -10^{-4}$  e  $\|\delta_{\text{QN}}^{(k)}\|/\|\delta_{\text{PC}}^{(k)}\| \leq 10^4$ . Isto claramente garante “descida suficiente” (vide observação 2.3.2.C), bem como HLOC2 sob HDIF nestas condições. De resto, há várias formas óbvias de se complementar as escolhas a serem feitas, de modo a garantir as hipóteses colocadas até agora para CDR. Veja que, se  $x_c^{(k)}$  converge para um bom minimizador, como temos HLOC2 assegurado, obtemos assintoticamente (3.236).

*Nossa argumentação daqui em diante, nesta seção segue uma linha bem mais informal, ou seja, evitamos explicitar, formalmente, resultados que nos parecem poder ser provados. Apenas indicaremos, informalmente, o que nos parece razoável se obter, com globalizações como as que propomos.*

Num certo sentido, o teorema 3.3.8 carrega um “defeito teórico”, qual seja, de só garantir convergência superlinear pressupondo, não apenas uma boa aproximação inicial, com relação a um bom minimizador, mas, igualmente, da aproximação Hessiana inicial. Ao tomar como referência em GA, um resultado de convergência local como o teorema 3.3.8, acabamos “herdando” este “defeito”, na forma de admitir atualizações de  $B^{(k)}$  pelo Hessiano verdadeiro, sempre que  $B^{(k)}$  estiver mal condicionado perto de um bom minimizador. No entanto, com o lema da deterioração limitada (vide [BDM 73] e [CC 84]) conseguimos suavizar um pouco esta situação e garantir que, se  $P^*W^*P^*$  tiver um número de condição inferior a  $10^4$  então, *suficientemente perto de  $x^*$ , não precisaremos mais atualizar  $B^{(k)}$  por  $\nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k+1)}, \lambda_{\text{LS}}(x_c^{(k+1)}))$ .*

Conforme indicamos anteriormente, os principais resultados obtidos por Coleman-Conn, essencialmente estendem para CDR os teoremas 3.3.8 e 3.3.9. No nosso caso, precisamos de um pouco mais do que eles já que não estamos assumindo a priori que  $\delta_{\text{QN}}$  seja aceite sempre. Além disto tampouco estamos assumindo que  $x^{(k+1)} - x_c^{(k)}$  satisfaça ALGCC num sentido exato, já que nosso passo vertical satisfaz (3.47) mas não (3.224). Ou seja, mesmo que obtenhamos, assintoticamente, o passo “horizontal exato”  $\delta_{\text{QN}}^{(k)}$ , conseguimos satisfazer todas as relações (3.219-3.225) (com  $x^{(k)} \leftarrow x_c^{(k)}$  e  $x_+^{(k)} \leftarrow x^{(k+1)}$ ), exceto (3.224), que só é atendida num sentido inexato. Desta forma, a análise em [CC 84] não se aplica diretamente, e teria que ser adequada a esta situação de ALGCC “inexato”. Contudo, esta segunda, nos parece uma tarefa que pode se realizar mecanicamente, sem nenhuma questão adicional relevante. Evitando entrar em detalhes, nos parece razoável aceitar que o teorema 3.3.9, igualmente se estenda para esta situação, com os mesmos argumentos que geraram o resultado de Coleman-Conn que enunciamos em B, e nos garanta, para uma sequência gerada em CDR desta forma, a obtenção de um resultado equivalente a (3.216). No nosso caso, isto corresponderia a obter a condição “tipo” Dennis-Moré (3.164). Além disto, como estamos supondo que a região de confiança começa com raio maior que  $\Delta_{\min}$ , em cada iteração, e estamos impondo GA2, isto nos dá que  $\delta_{\text{QN}}^{(k)}$  assintoticamente será sempre testado, e, neste caso, o lema 3.3.3 garante sua aceitação assintótica. O teorema 3.3.4 nos diz então que, neste caso, a convergência seria superlinear em dois passos.

### OBSERVAÇÃO 3.3.6 – POR UMA GLOBALIZAÇÃO QUE NÃO PASSE O TRATOR...

A característica fundadora de métodos secantes, pode ser pensada a partir da equação secante,

$$B^{(k+1)}s^{(k)} = y^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}) \approx \nabla^2 f(x^{(k)})s^{(k)}$$

como forçando que se produza uma correção na aproximação hessiana  $B^{(k+1)}$ , no sentido de aproximar o valor do hessiano verdadeiro na direção do passo  $s^{(k)}$ . Em particular, trabalhos como [Pow 76] e [BN 89] a que nos referimos acima, comprovam que esta idéia fundadora, estabelece uma forte capacidade auto-reguladora no número de condição de  $\bar{B}^{(k)}$ , numa região onde a função é estritamente convexa. Neste sentido, o que fizemos na proposta de globalização anterior é bastante grosseiro, uma vez que, ao detectar  $x_c^{(k)}$  se aproximando de um ponto de Kuhn-Tucker, com  $\bar{B}^{(k)}$  mal-condicionado, ao invés de tentarmos trabalhar no sentido de aproveitar a capacidade “autoreguladora” do método, “passamos um trator” e atualizamos  $\bar{B}^{(k)}$  pelo Hessiano verdadeiro. Além disto, como bem aponta Nocedal, em [Noc 91], ao comentar que atualizações BFGS podem gerar  $B^{(k)}$  mal condicionadas,

“... é difícil determinar se isto é algo indesejável, ou se as matrizes estão aproximando bem uma matriz Hessiana mal-condicionada. Para decidí-lo, precisamos informações sobre o problema que não possuímos. Nós aprendemos que é preferível não interferir com o método BFGS, e deixar as matrizes  $B^{(k)}$  evoluírem livremente, porque usualmente se obtém convergência com taxa superlinear”.

No texto acima, Nocedal se referia implicitamente a métodos que usam buscas lineares de forma a garantir  $s^{(k)T}y^{(k)} > 0$ , num contexto no qual a alternativa seria dar um passo na direção de Cauchy, caso o ângulo entre a direção quasi-Newton e a de Cauchy ficasse perigosamente

próxima de  $\Pi/2$ . Diz ainda Nocedal, que o melhor argumento contra este procedimento é, de longe, o fato que os melhores métodos, testados em implementações consagradas, não o utilizam. No entanto, admite ao mesmo tempo, que alguns tipos de salvaguardas podem ser efetivos. Na mesma direção, Martínez e Santos também citam a possibilidade de se recorrer à direção de Cauchy como salvaguarda, mas sugerem que “em casos particulares, correções mais inteligentes podem ser tentadas.”

Em MSR, podemos continuar esperando que alguém prove bons resultados de convergência global, com buscas lineares eficientes e atualização BFGS. Isto seria ótimo! Em MRI isto talvez seja um pouco mais difícil ainda, mas, afinal, a esperança deve ser sempre a última a morrer! No entanto, enquanto isto não acontece, achamos que vale a pena procurar salvaguardas para garantir “descida suficiente” em cada iteração, sem perder de vista a exploração da tão decantada propriedade autoreguladora do método, qual seja a de ir corrigindo automaticamente direções de curvatura muito pequena, ou excessivamente grande, em regiões nas quais a função já seja estritamente convexa. Até mesmo por não estarmos convencidos, que o fato de serem “teoricamente corretos”, garanta mais eficiência a métodos que fazem todas as buscas na direção quasi-Newton, do que a métodos que as fazem na direção quasi-Newton apenas assintoticamente. O que temos em mente, corresponde a manter SALV2, mas alterar SALV1 no sentido de não ter que atualizar  $B^{(k)}$  pelo hessiano verdadeiro, e apostar na capacidade autoreguladora de BFGS, perto de um bom minimizador. Ou seja, manteríamos GA2, mas alteraríamos GA1, no sentido de mudar a salvaguarda a ser acionada para direções quasi-Newton muito ruins, relativamente perto de pontos de KT. Porém esta mudança seria “pequena”, e de forma a garantir

$$\hat{\theta}^{(k)} = \cos \hat{\theta}_{\text{QN}}^{(k)} = \frac{(\delta_{\text{PC}}^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\delta_{\text{PC}}^{(k)}\| \|d^{(k)}\|} < -10^{-4} \tag{3.240}$$

Por exemplo, caso (3.234) se verifique, poderíamos fazer busca linear na direção

$$d^{(k)} = -\mu_k \frac{gp_c^{(k)}}{\|gp_c^{(k)}\|} + (1 - \mu_k) \frac{\delta_{\text{QN}}^{(k)}}{\|\delta_{\text{QN}}^{(k)}\|} \tag{3.241}$$

onde  $10^{-4} \leq \mu_k \leq 10^{-2}$ .

Com este tipo de salvaguarda, garantimos a descida suficiente em cada iteração, de modo a satisfazer às hipóteses de CDR e, em última instância, às condições do teorema B de Coleman-Conn, desde que  $x_c^{(k)}$  chegue suficientemente perto de um bom minimizador. Por outro lado *esperamos* por aí conseguir que, ao se obter um ponto  $x_c^{(k)}$  suficientemente próximo de um bom minimizador, se a aproximação hessiana  $\bar{B}^{(k)}$  calculada em  $Z^{(k)}\delta_H^{(k)}$  acusa uma “curvatura” muito pequena (excessivamente grande), com relação ao menor autovalor (maior autovalor) de  $Z^{(k)}\nabla_{xx}^2 L(x_c^{(k)}, \lambda_{\text{LS}}(x_c^{(k)}))Z^{(k)T}$ , ao atualizarmos  $B^{(k)}$ , com  $d^{(k)}$  numa direção relativamente próxima a  $\delta_H^{(k)}$  se produza uma correção em  $B^{(k)}$ , “suficiente” para estabelecer que, assintoticamente, a salvaguarda para a direção do passo introduzida em GB permaneça inativa. Isto nos colocaria na mesma situação a que chegamos na proposta de globalização GA, caso o número de condição da Hessiana reduzida  $P^*W^*P^*$  seja menor que  $10^4$ . Ou seja, as iterações finais se dariam, neste caso, como num “*ALGCC inexato*”, satisfazendo (3.197–3.198), e à condição de Powell (3.191). Só que, neste caso, sem nunca precisar atualizar  $B^{(k)}$  pela Hessiana verdadeira.

### 3.4 CDRLOC

Nesta seção, apresentaremos uma nova abordagem sobre a convergência local de CDRIN, visando melhorar nossos resultados sobre a convergência superlinear, bem como tratar de forma mais adequada suas especificidades. Em particular, estabelecemos condições para convergência superlinear em um só passo de  $\{x^{(k)}\}$ , gerado em CDRIN. Na subseção 3.4.1 apresentamos o esquema CDRLOC, que descreve as iterações finais de CDRIN, quando bem sucedido. Na subseção seguinte, demonstramos propriedades sobre as taxas de convergência local de CDRLOC.

#### 3.4.1 DESCRIÇÃO DE CDRLOC

Formularemos um algoritmo, a se denominar CDRLOC, e que *descreverá o comportamento esperado para CDRIN, perto de um bom minimizador, com as escolhas firmadas até o momento*. Em particular, CDRLOC deve descrever o que acontece se  $x_c^{(k)}$  converge a um bom minimizador, sob (HLOC1–HLOC5) e  $\{\delta_H^{(k)}\}$  satisfaz (3.162–3.164).

CDRIN gera a sequência  $\mathcal{Z}$ , que tem nos servido de referência, a saber,  $\mathcal{Z} = \{z^{(k,j)} : 0 \leq j < j_k + 1, 0 \leq k < i_k + 1\}$ .  $\mathcal{Z}$  contém todos os pontos gerados em REST, e em CDRIN (lembrando que  $z^{(k,0)} = x^{(k)}$ ). Para a análise local que desejamos fazer, nos convém reescrever  $\mathcal{Z}$  como  $\mathcal{Z}_{\text{LOC}}$ , com um índice de referência  $i$  apenas, crescente com  $k$  e para cada  $k$ , crescente com  $j$ . Ou seja,

$$\mathcal{Z}_{\text{LOC}} = \{z_{\text{LOC}}^{(i)} : 1 \leq i < \infty\} \quad (3.242)$$

e  $z_{\text{LOC}}^{(i+1)} = z_{\text{LOC}}^{(i)} + \delta_H^{(i)} + \delta_V^{(i)}$ , onde, ou bem  $\delta_H^{(i)} = 0$  é um passo Horizontal obtido em CDR e  $\delta_V^{(i)} = 0$ , ou  $\delta_H^{(i)} = 0$  e  $\delta_V^{(i)} = 0$  é um passo “Vertical” obtido em REST.

Consideramos ainda, a seguinte partição dos naturais,

$$\mathbb{N} = I_H \cup I_V \quad (3.243)$$

de tal forma que,  $I_H$  corresponda às iterações nas quais os passos dados são Horizontais, e  $I_V$  àquelas, cujos passos sejam Verticais.

A DINâmica LOCAL de CDRIN com as hipóteses formuladas acima, e numa vizinhança suficientemente pequena de um bom minimizador  $x^*$ , poderia ser descrita em termos de  $\mathcal{Z}_{\text{LOC}}$ , por:

DINLOC.1 – Sempre que os dados são atualizados, calcula-se  $\rho^{(i)} \approx \rho_{\text{max}}^{(i)} \|P^{(i)}g^{(i)}\|$ . Caso  $\|h(z^{(i)})\| > \rho^{(i)}$ , XCOR manda fazer uma restauração, ou seja, obtemos  $z^{(i+1)} = z^{(i)} + \delta_V^{(i)}$  e, caso contrário, teremos  $z^{(i+1)} = z^{(i)} + \delta_H^{(i)}$

DINLOC.2 – Após um passo Horizontal, XCOR permite que se opte entre, manter  $A^{(i)} = A^{(i-1)}$  e fazer  $z^{(i+1)} = z^{(i)} + \delta_V^{(i)}$ , ou atualizar os dados e proceder como em DINLOC.1. (3.27) e HLOC3 nos garantem a existência de  $\alpha > 0$  e  $\xi_\alpha > 0$  tais que, se dois passos consecutivos forem horizontais, e  $z^{(i_h)}$  for o ponto entre eles, então

$$\|h(z^{(i_h)})\| < \xi_\alpha \|gp(z^{(i_h-1)})\|^{1+\alpha} \quad (3.244)$$

DINLOC.3 – (3.58) nos indica que, sob HLOC4, assintoticamente, REST só faz uma iteração, a cada chamada. Isto significa que, após cada passo vertical, os dados são sempre atualizados automaticamente em XCOR, suficientemente perto de  $x^*$ .

DINLOC.4 – Se  $x_c^{(k)}$  converge a um bom minimizador  $x^*$ , satisfazendo HLOC1–HLOC5 e uma sequência  $\bar{\delta}_H^{(k)}$  satisfazendo (3.162–3.164) for testada, então o lema da aceitação 3.3.3 garante que, assintoticamente, será aceita. De (3.162–3.164) obtemos, para a subsequência indexada em  $I_H$ :

$$r_L(\delta_H^{(i_h)}) = P(z^{(i_h)})(g^{(i_h)} + W^* \delta_H^{(i_h)}) = o(\|\delta_H^{(i_h)}\|) \quad (3.245)$$

$$r_A(\delta_H^{(i_h)}) = A^{(i_h)} \delta_H^{(i_h)} = o(\|\delta_H^{(i_h)}\|) \quad (3.246)$$

DINLOC.5 – No lema 2.4.7, na observação 2.5.5 e no teorema 3.2.5, conseguimos garantir uma cota inferior, não nula, para  $\rho_{max}^{(k)}$ , a depender de algumas condições lá assumidas. Nos demais casos, HLOC5 nos dá  $\|gp_c^{(k)}\| = O(\rho_{max}^{(k)})$ . Dados P3 de XCOR e o controle dinâmico, isto nos garante a existência de  $0 < \xi_1 < \xi_2$  tais que, para  $i$  suficientemente grande :

$$\xi_1 \|gp_c^{(k)}\|^\beta \leq \rho_c^{(k)} \leq \xi_2 \|gp_c^{(k)}\|, \quad (3.247)$$

onde a primeira possibilidade corresponde a  $\beta = 1$  e a segunda a  $\beta = 2$ .

DINLOC.1–DINLOC.5 nos conduz a afirmar que, se  $Z_{LOC}$  for gerado em CDRIN de forma a convergir a um bom minimizador, satisfazendo HLOC1–HLOC5 e (3.162–3.164), satisfará igualmente ao esquema CDRLOC, que apresentamos a seguir, para alguma escolha adequada dos parâmetros  $\alpha$ ,  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  e  $\beta$ . DINLOC.5 sugere duas versões diferentes para CDRLOC, concretizadas nas alternativas  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$ , correspondentes às escolhas que imporemos para  $\rho^{(i)}$ , em P1.b de CDRLOC.

### CDRLOC

Dados  $z^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ,  $\alpha > 0$ ,  $0 < \xi_1 < \xi_2$ ,  $\beta = 1$  ou 2:

#### P1 – ATUALIZAÇÃO

- a – Considere  $A^{(i)} \leftarrow h'(z^{(i)})$ ,  $g^{(i)} \leftarrow \nabla f(z^{(i)})$ ,  $h^{(i)} \leftarrow h(z^{(i)})$
- b – Escolha  $\rho^{(i)} > 0$ , de forma a atender (3.247)
- c – Se  $\|h(z^{(i)})\| > \rho^{(i)}$ , vá para P3.

#### P2– “PASSO HORIZONTAL” $\delta_H$

- a – Considere  $\delta_H^{(i)} \in \mathbb{R}^n$  satisfazendo (3.245–3.246)
- b – Considere  $z^{(i+1)} \leftarrow z^{(i)} + \delta_H^{(i)}$ ,  $i \leftarrow i + 1$ ,  $h^{(i)} \leftarrow h(z^{(i)})$
- c – Opte entre ir para P1.a ou para P3.a, de modo a atender (3.244).

P3 – “PASSO VERTICAL”

a – Considere  $\delta_V^{(i)} \in \mathcal{R}((A^{(i)})^T)$ , tal que,

$$r_V(\delta_V^{(i)}) = A^{(i)}\delta_V^{(i)} + h^{(i)} = o(\|h^{(i)}\|) \quad (3.248)$$

b – Considere  $z^{(i+1)} \leftarrow z^{(i)} + \delta_V^{(i)}$ ,  $i \leftarrow i + 1$  e vá para P1.

Se CDRLOC vem de CDRIN, veja que P1 e P2.c são tarefas executadas por XCOR, P2.a e P2.b por CDRIN, P3.a por REST, P3.b por REST e XCOR.

**OBSERVAÇÃO 3.4.1** –

Podemos substituir  $W^*$  por  $\nabla_{zz}^2 L(z^{(i)}, \lambda^{(i)})$  em CDRLOC, onde  $\lambda^{(i)}$  é qualquer escolha do multiplicador que convirja para  $\lambda^*$ , e pensar nele como um algoritmo implementável (localmente), independentemente de CDRIN.

No restante desta seção 3.4, denotaremos por  $\{z^{(i)}\}$  a uma sequência infinita, que supomos gerada por CDRLOC. Assumimos ainda, que ela converge a um bom minimizador  $x^*$ , com variedade dual  $\mathcal{D}^*$ , definida em alguma vizinhança tubular  $V^*$ , como no lema 3.1.2.

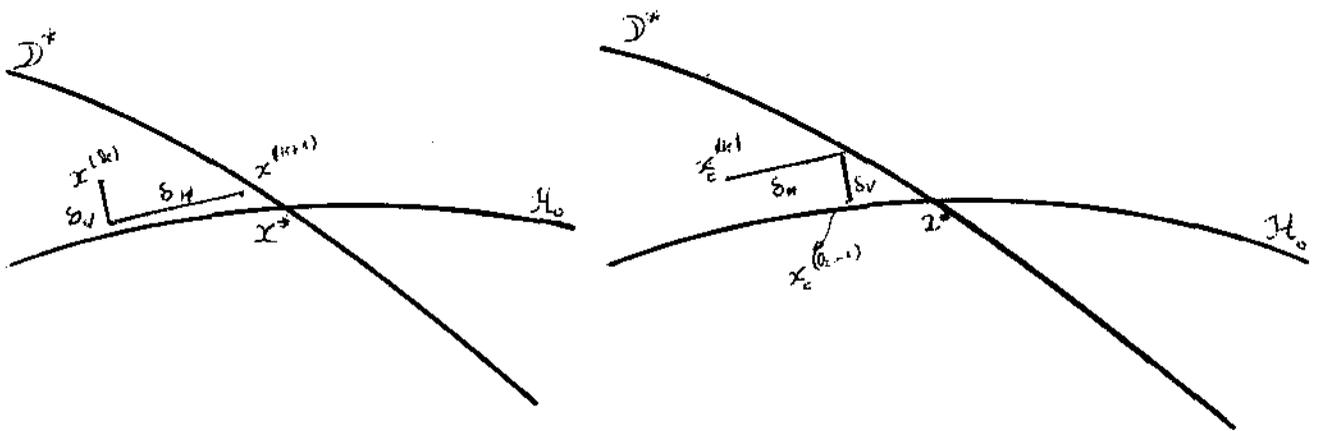
**3.4.2 TAXAS DE CONVERGÊNCIA DE CDRLOC**

Na subseção 3.3.1 mostramos que as escolhas até então assumidas, nos garantiam convergência superlinear em dois passos para a sequência  $\mathcal{X}_c$ . No entanto podemos obter resultados melhores que isto em quatro aspectos:

A1– Numa das versões do algoritmo Horizontal–Vertical apresentado em [CC 84], o passo vertical  $\delta_V$  é definido por (3.248), ou seja,  $A\delta_V + h(x_c + \delta_H) = 0$ , ao invés de  $A\delta_V + h(x_c) = 0$ , como seria exigido num método PQSLOC com resolução *exata* dos subproblemas lineares. Byrd mostra em [Byr 90], que nesta versão se consegue obter  $\{x^{(k)} + \delta_H^{(k)}\}$  com convergência superlinear a  $x^*$ . Nossa teoria de convergência local, nesta seção, igualmente terá por base estabelecer uma taxa superlinear de aproximação a  $x^*$ , para os passos compostos por um passo vertical seguido de um horizontal em CDRLOC.

Por outro lado Byrd [Byr 85] e Yuan [Yua 85] mostram exemplos de métodos PQS, nos quais se tem (3.191), mas nos quais a convergência superlinear, garantidamente, não se obtém em um só passo. Nos parece razoável esperar que  $\mathcal{X}_c$  possa apresentar este tipo de comportamento. Neste sentido, achamos que não vale a pena tentar obter convergência superlinear a partir de  $x_c^{(k)}$ , ou seja,  $\|x_c^{(k+1)} - x_*\| = o(\|x_c^{(k)} - x_*\|)$ . Uma explicação heurística possível, para o fato de obtermos taxas superlineares para passos tipo VH, mas não esperarmos conseguí-la para passos tipo HV, em algoritmos que, como o nosso, desacoplam a solução do passo horizontal daquela obtida para o passo vertical, pode ser feita (vide figura abaixo), tendo em mente a estrutura de uma vizinhança tubular como  $V^*$ . Observe que, ao dar um passo na direção vertical, conseguimos nos aproximar de forma superlinear de  $\mathcal{H}_0$ . Ao complementá-lo com um passo horizontal, nos aproximamos de forma superlinear da variedade dual  $\mathcal{D}^*$ . Contudo, isto não “destrói” a aproximação superlinear da factibilidade conquistada com o passo vertical, já que o

passo horizontal caminha “paralelamente” ao nível  $\mathcal{H}_0$ . Já ao dar um passo vertical, após um horizontal, como o passo vertical não caminha paralelo à variedade dual, num certo sentido, ele parece “destruir”, parcialmente, a aproximação de  $\mathcal{D}^*$  obtida no passo horizontal.



Passo VH X Passo HV

- A2- Ao analisar o comportamento de CDRIN, considerando  $\mathcal{X}_c$ , em vez de  $\mathcal{Z}_{LOC}$ , perdemos informação importante ao colapsar os passos verticais num único passo, principalmente no caso  $\beta = 1$ . Neste caso, verificaremos que, se em P2 de CDRLOC, obtivermos infinitos pares de passos verticais seguidos, então cada par consecutivo deles promove uma taxa superlinear de aproximação a  $x^*$ . Aqui reside uma diferença interessante, com relação aos algoritmos da família PQS, na medida que, em CDRIN, é permitido não dar um passo horizontal após cada vertical, desde que estejamos suficientemente próximos da variedade dual. Porém, isto se faz de tal forma que, os passos dados promovam uma aproximação superlinear à  $x^*$ . Como os passos horizontais são geralmente a parte cara da iteração, isto pode ser vantajoso numa implementação. No caso  $\beta = 2$ , para conseguirmos obter um resultado semelhante, precisamos forçar uma aproximação mais fina na restauração, ou seja, em (3.248).
- A3- Se, em CDRLOC, obtivermos infinitos pares de passos horizontais seguidos em P1, então o primeiro deles obedece a uma taxa superlinear.
- A4- CDRLOC tem convergência superlinear em tres passos no caso HLOC1.a. Se  $\mathcal{Z}_{LOC}$  for gerado em CDRIN, isto significa um pouco mais que a convergência superlinear em dois passos, obtida na seção 3.3.1. Pela observação em A1, não podemos esperar um resultado melhor do que convergência superlinear em tres passos de  $\mathcal{Z}$ , na medida que não esperamos convergência superlinear em um só passo de  $\{x_c^{(k)}\}$ . A convergência de  $\mathcal{Z}$  passa a ser superlinear em dois passos, caso a opção, em P2.c de CDRLOC, seja sempre forçar uma restauração, antes de atualizar os dados. Ou ainda, mediante a introdução de uma pequena modificação em P1.c, conforme veremos no corolário final desta seção. Se  $\mathcal{Z}_{LOC}$  for gerado em CDRIN, isto corresponde à convergência superlinear de  $\{x^{(k)}\}$  num passo só.

Damos precisão às afirmações acima com:

### TEOREMA 3.4.1 (TAXAS DE CONVERGÊNCIA EM CDRLOC)

Suponhamos que  $Z_{\text{LOC}}$  seja gerada por CDRLOC, e convirja para o bom minimizador  $x^*$ .

#### A – CASO TODAS AS ITERAÇÕES FINAIS SEJAM VERTICAIS

Se para algum  $i_0$ , tivermos  $z^{(i+1)} = z^{(i)} + \delta_V^{(i)}$ , para todo  $i \geq i_0$ , então a convergência é superlinear.

#### B – CASO HAJA INFINITOS PASSOS HORIZONTAIS

B.i – Infinitos passos tipos VH.

Se  $I_{VH} = \{i_h : z^{(i_h+1)} = z^{(i_h-1)} + \delta_V^{(i_h-1)} + \delta_H^{(i_h)}\}$  não for finito

$$\lim_{i_h \rightarrow \infty} \frac{\|z^{(i_h+1)} - x^*\|}{\|z^{(i_h-1)} - x^*\|} = 0 \quad (3.249)$$

B.ii – Infinitos passos tipos VV.

Aqui há duas situações a considerar:

B.ii.1 – Caso  $\beta = 1$

Se  $I_{VV} = \{i_v : z^{(i_v+1)} = z^{(i_v-1)} + \delta_V^{(i_v-1)} + \delta_V^{(i_v)}\}$  não for finito, então

$$\lim_{i_v \rightarrow \infty} \frac{\|z^{(i_v)} - x^*\|}{\|z^{(i_v-1)} - x^*\|} = 0 \quad (3.250)$$

B.ii.2 – Caso  $\beta = 2$  e infinitos passos tipo VVV

Se  $I_{VVV} = \{i_v : z^{(i_v+2)} = z^{(i_v-1)} + \delta_V^{(i_v-1)} + \delta_V^{(i_v)} + \delta_V^{(i_v+1)}\}$  não for finito e

$$r_V(\delta_V^{(i)}) = A\delta_V^{(i)} + h^{(i)} = O(\|h^{(i)}\|^2) \quad (3.251)$$

então

$$\lim_{i_v \rightarrow \infty} \frac{\|z^{(i_v+1)} - x^*\|}{\|z^{(i_v-1)} - x^*\|} = 0 \quad (3.252)$$

B.iii – Infinitos passos tipo HH.

B.iii.1 – Se  $I_{HH} = \{i_h : z^{(i_h+1)} = z^{(i_h-1)} + \delta_H^{(i_h-1)} + \delta_H^{(i_h)}\}$  não for finito, então

$$\lim_{i_h \rightarrow \infty} \frac{\|z^{(i_h)} - x^*\|}{\|z^{(i_h-1)} - x^*\|} = 0 \quad (3.253)$$

B.iii.2 - Se, além disto existirem  $\xi > 0$  e  $\theta > 0$ , tais que, para todo  $i$  suficientemente grande, sempre se obtiver para tais pontos  $z^{(i_h)}$ , entre passos horizontais consecutivos, que

$$\|h(z^{(i_h)})\| < \xi \|gp(z^{(i_h)})\|^{(1+\theta)} \quad (3.254)$$

então

$$\lim_{i_h \rightarrow \infty} \frac{\|z^{(i_h+1)} - x^*\|}{\|z^{(i_h)} - x^*\|} = 0 \quad (3.255)$$

A demonstração do teorema depende basicamente de dois lemas. Neles formalizamos a compreensão esboçada em A1, das razões pelas quais se pode esperar, de um passo “tipo” VH, que êle promova uma aproximação superlinear da solução  $x^*$ , mas o mesmo não se pode esperar de passos “tipo” HV. Ou seja, se o passo dado na  $i$ -ésima iteração de CDRLOC for Horizontal, êle promove uma brusca redução no gradiente projetado  $\|gp(z^{(i)})\|$ , e uma alteração em  $\|h(z^{(i)})\|$  “bem pequena” com relação a  $\|gp(z^{(i)})\|$ . Se ele for Vertical, a aproximação da factibilidade passa a ser “brusca”, enquanto que, para o gradiente projetado  $gp(z^{(i)})$ , o melhor que conseguimos garantir, é uma variação sob o controle de  $O(\|h(z^{(i)})\|)$ .

**LEMA 3.4.2** *Suponhamos  $\mathcal{Z}_{loc}$  como no teorema (3.4.1), e  $I_H$  infinito, ou seja, que  $\{z^{(i)}\}$  seja gerado, admitindo uma infinidade de passos horizontais  $z^{(i_h+1)} - z^{(i_h)}$ . Então para todo  $i_h \in I_H$*

$$\|gp(z^{(i_h+1)})\| = o(\|gp(z^{(i_h)})\|) \quad (3.256)$$

$$\|h(z^{(i_h+1)})\| = \|h(z^{(i_h)})\| + o(\|gp(z^{(i_h)})\|) \quad (3.257)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Como  $x^*$  é um bom minimizador, podemos considerar  $gp(x)$  de classe  $C^1$  e, portanto, Lipschitz em  $V^*$ , ou seja,

$$gp(z^{(i_h+1)}) = gp(z^{(i_h)*}) + O(\|z^{(i_h+1)} - z^{(i_h)*}\|) \quad (3.258)$$

Observe que as condições do lema garantem as hipóteses dos lemas 3.3.1 e 3.3.2 com  $y^{(h)} = z^{(i_h)}$  e  $B^{(h)} = W^*$ . (3.170) significa que

$$z^{(i_h+1)} - z^{(i_h)*} = o(\|z^{(i_h)} - z^{(i_h)*}\|) \quad (3.259)$$

Levando (3.9) e (3.259) em (3.258), obtemos (3.256).

(3.257) segue de (3.167), (3.246) e do lema de Taylor.  $\square$

**LEMA 3.4.3** *Suponhamos  $\mathcal{Z}_{loc}$  como no teorema (3.4.1) e admitindo uma infinidade de passos verticais. Ou seja, que  $\mathcal{I}_V = \{i_v : z^{(i_v+1)} = z^{(i_v)} + \delta_V^{(i_v)}\}$  seja um conjunto infinito. Então*

$$\|gp(z^{(i_v+1)})\| = \|gp(z^{(i_v)})\| + O(\|h(z^{(i_v)})\|) \quad (3.260)$$

$$\|h(z^{(i_v+1)})\| = o(\|h(z^{(i_v)})\|) \quad (3.261)$$

### DEMONSTRAÇÃO

Por (3.248),

$$z^{(i_v+1)} - z^{(i_v)} = -h'(z^{(i_v)})^\dagger h(z^{(i_v)}) + o(h(z^{(i_v)})) \quad (3.262)$$

Como  $h'(x^*)$  tem posto máximo, e  $z^{(i_v)} \rightarrow x^*$ , 3.262 e o lema de Taylor, aplicados a  $gp(z + \cdot)$  e  $h(z + \cdot)$ , garantem (3.260) e (3.261).  $\square$

### DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA (3.4.1)

O pano de fundo para a demonstração do teorema, está na relação (3.12), que em nosso caso se escreve:

$$\|gp(z^{(i)})\| + \|h(z^{(i)})\| \approx \|z^{(i)} - x^*\| \quad (3.263)$$

Como veremos a seguir, (3.263) nos permite transferir para  $\|z^{(i)} - x^*\|$ , propriedades que sabemos demonstrar para  $\|gp(z^{(i)})\| + \|h(z^{(i)})\|$ .

A – *Começamos supondo  $I_H$  finito, ou seja, que no final só há passos verticais.*

Como estamos supondo que  $z^{(i)} \rightarrow x^*$  e  $x^*$  é um bom minimizador, (3.262) nos dá  $M > 0$ , tal que, para  $i$  suficientemente grande,

$$\|z^{(i+1)} - x^*\| \leq \sum_{j=i+1}^{\infty} \|z^{(j+1)} - z^{(j)}\| \leq M \sum_{j=i+1}^{\infty} \|h(z^{(j)})\| \quad (3.264)$$

(3.261) e (3.264) nos garantem  $\|z^{(i+1)} - x^*\| = o(\|h(z_i)\|)$ . Portanto, (3.263) nos permite concluir  $\|z^{(i+1)} - x^*\| = o(\|z^{(i)} - x^*\|)$ .

B – *Suponhamos  $I_H$  infinito, ou seja, que haja infinitos passos horizontais.*  
Temos aqui tres casos a considerar:

B.i – Infinitos passos tipos VH.

Neste caso, há infinitos  $i_h \in I_H$ , ou seja, tais que  $z^{i_h+1} = z^{(i_h-1)} + \delta_V^{i_h-1} + \delta_H^{i_h}$ . (3.256–3.257) e (3.260–3.261), neste caso, significam

$$\|gp(z^{(i_h+1)})\| = o(\|gp(z^{(i_h)})\|) \quad (3.265)$$

$$\|gp(z^{(i_h)})\| = \|gp(z^{(i_h-1)})\| + O(\|h(z^{(i_h-1)})\|) \quad (3.266)$$

$$\|h(z^{(i_h+1)})\| = \|h(z^{(i_h)})\| + o(\|gp(z^{(i_h)})\|) \quad (3.267)$$

$$\|h(z^{(i_h)})\| = o(\|h(z^{(i_h-1)})\|) \quad (3.268)$$

Combinando estas quatro relações, obtemos facilmente

$$\|gp(z^{(i_h+1)})\| + \|h(z^{(i_h+1)})\| = o(\|gp(z^{(i_h-1)})\| + \|h(z^{(i_h-1)})\|) \quad (3.269)$$

e (3.263) nos permite concluir (3.249).

B.ii – Infinitos passos tipo VV.

Suponhamos  $z^{(i_v+1)} = z^{i_v-1} + \delta_V^{(i_v)} + \delta_V^{(i_v-1)}$ . Em particular, a restauração em  $z^{(i_v)}$  se dá imediatamente depois da atualização dos dados em P1. Portanto, temos negada a condição em P1.c, ou seja

$$\|h(z^{(i_v)})\| \geq \rho^{(i_v)} \geq \xi_1 \|gp(z^{(i_v)})\|^\beta \quad (3.270)$$

B.ii.1 – Se  $\beta = 1$ , obtemos de (3.261) e (3.270)

$$\|gp(z^{(i_v)})\| + \|h(z^{(i_v)})\| = O(\|h(z^{(i_v)})\|) = o(h(z^{(i_v-1)})) \quad (3.271)$$

(3.263) e (3.271) nos garantem (3.250) .

B.ii.2 – Se  $\beta = 2$  e temos tres passos verticais seguidos, (3.270) só nos fornece

$$\|gp(z^{i_v})\| = O(\|h(z^{i_v})\|^{1/2}) \quad (3.272)$$

Em compensação, a hipótese (3.251) nos permite dizer que

$$\|h(z^{i_v})\|^{1/2} = O(\|h(z^{i_v-1})\|) = O(\|h(z^{i_v-2})\|^2) \quad (3.273)$$

(3.270) e (3.273) nos garantem

$$\|gp(z^{i_v})\| + \|h(z^{i_v})\| = O(\|h(z^{i_v-2})\|^2) \quad (3.274)$$

(3.263) permite concluir (3.252), a partir de (3.274)

B.iii – Infinitos passos tipo HH

B.iii.1 – Neste caso  $z^{(i_h+1)} = z^{(i_h-1)} + \delta_H^{(i_h)} + \delta_H^{(i_h-1)}$ . Como na iteração  $i_h$  não houve restauração, (3.244) e (3.256) nos garantem

$$\|gp(z^{(i_h)})\| + \|h(z^{(i_h)})\| = o(\|gp(z^{(i_h-1)})\|) \quad (3.275)$$

(3.275) e (3.263) nos garantem (3.253).

B.iii.2 – Neste caso (3.256-3.257) e (3.254) nos garantem

$$\|gp(z^{(i_h+1)})\| + \|h(z^{(i_h+1)})\| = o(\|gp(z^{(i_h)})\|) + O(\|h(z^{(i_h)})\|) = o(\|gp(z^{(i_h)})\|) \quad (3.276)$$

(3.276) e (3.263) nos garantem (3.255)

□

O teorema acima nos diz que, no caso  $\beta = 1$ , só não conseguimos garantir taxa superlinear para seqüências de pares de passos em CDRLOC, caso eles sejam do tipo HV. No caso  $\beta = 2$  isto também pode acontecer com passos tipo VV. Em particular temos o seguinte corolário:

**COROLÁRIO 3.4.4** *Nas condições do teorema 3.4.1, se  $\beta = 1$ , então  $\mathcal{Z}_{\text{LOC}}$  tem convergência superlinear em tres passos. Se  $\beta = 2$  e (3.251) se verifica, então  $\mathcal{Z}_{\text{LOC}}$  tem convergência superlinear em quatro passos.*

### DEMONSTRAÇÃO

De (3.256-3.257) e (3.260-3.261) segue que

$$\|gp(z^{(i+1)})\| + \|h(z^{(i+1)})\| = O(\|gp(z^{(i)})\| + \|h(z^{(i)})\|) \quad (3.277)$$

Observe que, a cada tres passos seguidos de CDRLOC, uma das tres alternativas abaixo se verificará:

- i – Dois passos verticais seguidos.
- ii – Um passo vertical seguido de um horizontal.
- iii – Dois passos horizontais seguidos.

(3.249), (3.250), (3.253) e (3.277) garantem então, no caso  $\beta = 1$

$$\|gp(z^{(i+3)})\| + \|h(z^{(i+3)})\| = o(\|gp(z^{(i)})\| + \|h(z^{(i)})\|) \quad (3.278)$$

Do mesmo modo, a cada quatro passos seguidos de CDRLOC, ou bem há tres passos verticais seguidos, ou então uma das alternativas ii ou iii, logo acima. Neste caso, (3.249), (3.251), (3.252), (3.253) e (3.277), garantem

$$\|gp(z^{(i+4)})\| + \|h(z^{(i+4)})\| = o(\|gp(z^{(i)})\| + \|h(z^{(i)})\|) \quad (3.279)$$

(3.263) nos permite concluir o argumento a partir de (3.277) e (3.278).  $\square$

Nosso segundo corolário permite reobter a convergência superlinear em dois passos de  $\{x_c^{(k)}\}$ , para bons minimizadores de MRI, quando gerada por CDRIN, satisfazendo as hipóteses firmadas nos capítulos anteriores, bem como (3.162–3.164). Além disto diz que, sob certas condições, se obtém convergência superlinear em um só passo de  $\{x^{(k)}\}$ .

**COROLÁRIO 3.4.5** *Se CDRIN gera  $\mathcal{X}_c = \{x_c^{(k)} : 1 \leq k < \infty\}$ , convergente a um bom minimizador, e termina como CDRLOC, então a convergência é superlinear em dois passos. Além disto, a convergência de  $\{x^{(k)}\}$  será superlinear num só passo, em dois casos:*

- i – Sempre forcemos, em XCOR, uma restauração após cada passo horizontal, antes de atualizar os dados.*
- ii – Se adicione a P1.c de CDRLOC, uma exigência de restauração caso (3.254) não se verifique após um passo horizontal, dados  $\xi > 0$  e  $\theta > 0$  prefixados. Correspondentemente, o mesmo deve ser feito em CDR.*

### DEMONSTRAÇÃO

Como entre  $x_c^{(k)}$  e  $x_c^{(k+2)}$  há sempre dois passos horizontais, isto significa que sempre teremos passos tipo VH ou tipo HH em  $\mathcal{Z}_{\text{LOC}}$ , entre os dois. Os mesmos argumentos do lema anterior nos permitem concluir daí, que  $\|x_c^{(k+2)} - x^*\| = o(\|x_c^{(k)} - x^*\|)$ .

Se sempre forcamos uma restauração em  $x^{(k+1)}$ , teremos sempre entre  $x^{(k)}$  e  $x^{(k+1)}$ , passos seguidos tipo VH. Isto igualmente nos garante a convergência superlinear de  $x^{(k)}$  por B.i do teorema. Se impusermos a estratégia apontada em ii, estaremos garantindo a condição em B.iii.2 do teorema, entre dois passos horizontais, e, portanto, também 3.255. Juntando com (3.249), obtemos a convergência superlinear de  $\{x^{(k)}\}$  a  $x^*$ .  $\square$

# Capítulo 4

## TESTES NUMÉRICOS

Pretendemos apresentar, neste capítulo, resultados de alguns testes realizados com o método apresentado nos capítulos anteriores. Conforme destacamos na introdução, trata-se de resultados preliminares de um trabalho, que está sendo desenvolvido juntamente com Francisco Gomes. Temos em mente, neste momento, a verificação de objetivos bem delimitados na aplicação dos testes, e que serão expostos na seção §4.1. Para realizá-los, nos pareceu suficiente, no momento, utilizar a mesma bateria de problemas usada por Boggs e Tolle em [BT 89], e por Shanno e Phua em [SP 89]. Na seção §4.4, um pouco como apêndice do capítulo, reproduzimos os enunciados dos problemas utilizados. Na seção §4.2, detalhamos as principais opções feitas na nossa implementação, escrita em Fortran. Além disto, comentamos alguns aspectos da bateria de testes escolhida, bem como apresentamos e analisamos os resultados numéricos colhidos, em função dos objetivos a que nos propusemos. Na seção §4.3, apresentamos uma implementação do algoritmo PQS, para região de confiança, sugerido em [DEM], com o objetivo de observar que, andar com um algoritmo PQS “longe da factibilidade” pode ser ineficiente.

### 4.1 OBJETIVOS

Neste trabalho, concentramos nossos objetivos com a realização dos testes numéricos em tres pontos:

Obj.1 - Robustez

Conforme já explicitamos anteriormente, há problemas em MRI para os quais qualquer método falha. No entanto, há problemas relativamente simples, como o exemplo 2.1, em situações nas quais permitimos aos iterados caminhar relativamente longe do conjunto factível, e que se constituem em armadilhas evitáveis, para métodos como o nosso ou tipo PQS. Heuristicamente, correspondem ao fato que, passos tipo Gauss-Newton, usualmente muito eficientes para restaurar pontos próximos do conjunto factível, podem se tornar altamente ineficazes, relativamente longe das restrições. Ou seja, a direção normal às restrições, frequentemente, “enxerga muito mal” o conjunto factível. Para piorar o quadro, o passo dado na direção tangente, em função de “melhorar a otimalidade”, muitas vezes acaba contribuindo para dificultar a aproximação dos iterados ao conjunto factível. Esta situação, que constatamos no referido exemplo, parece ocorrer significativamente na prática. Por exemplo, a depender da implementação e de se começar suficientemente longe do conjunto factível, este parece ser o caso dos problemas

2 e 13, da lista de problemas usada por Boggs-Tolle em [BT 89] e por Shanno-Phua em [SP 89], que reproduzimos na §4.4. Em função disto, a “relativa robustez” do método nos parece ser uma questão central aqui, por entendermos se tratar de uma das vantagens importantes de métodos de pontos factíveis. Garantí-la, igualmente, para esta flexibilização que estamos empreendendo, nos parece uma questão fundamental. Em particular constatamos que nosso método torna-se consideravelmente mais robusto, quando utilizamos alguma salvaguarda, para situações nas quais a redução de  $\|h(x)\|$ , a cada iteração, torna-se muito ineficiente. Observamos que, embora em menor escala, também o método PQS aparenta ficar mais robusto, quando usado com salvaguardas contra este tipo de situações. Pretendemos detalhar isto melhor na seção §4.3.

#### Obj.2 – Calibragem de $\rho_{max}$

Uma questão central neste método, diz respeito a como “flexibilizar a factibilidade”. Algoritmicamente, isto se traduz na calibragem de  $\rho_{max}$  em cada iteração, considerando-se que o raio do cilindro de confiança deve obedecer à restrição em P3.b de XCOR. Na presente implementação, adotaremos a fórmula:

$$\rho = \rho_{max} * n_g = \rho_{max} \frac{\|g(x_c)\|}{\|g(x_c)\| + n_{gsal}}, \quad (4.1)$$

onde  $n_{gsal}$  é alguma salvaguarda, fixada em função da escala do problema.

Há dois pontos a se considerar aí:

#### – Valor inicial de $\rho_{max}$

Esta é uma questão decisiva para o método. Conforme já seria de se esperar, pudemos constatar, também numericamente, que valores iniciais de  $\rho_{max}$  excessivamente grandes, ou excessivamente pequenos, podem tornar o método muito ineficiente. Neste sentido, uma possibilidade corresponde a “adivinhar” um “bom” valor para  $\rho_{max}^{(0)}$ , e pensar nas iterações iniciais do método como restaurações, realizadas para obrigar uma redução de  $\|h(x)\|$ , a alguma fração adequada deste valor inicial. Ou seja, teríamos aí configurada uma fase inicial, na qual usaríamos, sempre que necessário, a restauração descrita na seção §2.2.2, para forçar uma redução em  $\|h(x)\|$ , até uma fração do valor inicial de  $\rho_{max}$  para, só então, inicializar verdadeiramente o método descrito no capítulo II. Na verdade, *poderíamos usar na fase inicial, qualquer outro método disponível para reduzir significativamente  $\|h(x)\|$ , e esta nos parece uma possibilidade muito interessante de se explorar.*

Um outro dado da questão, corresponde a observar que, devemos esperar serem os valores de  $\rho_{max}^{(0)}$ , que tornam o método mais eficiente, fortemente dependentes da escala de  $\|h(x)\|$ . Neste sentido, nos parece razoável que as primeiras iterações do método devam ser usadas para fazer uma calibragem inicial de  $\rho_{max}$ , adequada a cada problema. O critério para se obter uma tal calibragem inicial nos parece ser *eficiência no passo Gauss-Newton para resolver  $h(x) = 0$ , dentro do cilindro de confiança inicial*, conforme as idéias esboçadas no segundo parágrafo da seção §1.2. A forma específica de fazê-lo, será detalhada na próxima seção .

Isto nos conduz a considerar a implementação que faremos do método proposto, como *constituída de duas fases*. Na primeira, se usa um algoritmo qualquer, para determinar um  $\rho_{max}^{(0)}$  inicial adequado (pode ser inclusive prefixado), bem como um ponto inicial  $x$ , com  $\|h(x)\|$  convenientemente menor que  $\rho_{max}^{(0)}$ . Na fase final, aplica-se CDR a  $x$ .

- Calibragem de  $\rho_{max}$  na fase final do método.

Esta calibragem parece ser menos decisiva que a calibragem inicial do método, desde que usemos uma correção de segunda ordem, sempre que o candidato a passo na direção tangente ameace sair do cilindro de confiança, e reduzamos, sensivelmente, o valor de  $\rho_{max}$ , cada vez que a descida do Lagrangeano, entre dois iterados não corresponda ao esperado no teste realizado em P4 de CDR. A fórmula que adotamos para uma tal calibragem, na prática, é:

$$\rho_{max} \leftarrow \min\{\sqrt{\rho_{max}}, \rho_{max}/4\} \quad (4.2)$$

Admitiremos ainda uma redução importante em  $\rho_{max}$ , sempre que na fase final, for necessário usar uma salvaguarda como a que é descrita em Obj.1. Se  $\rho_{max}$  estiver bem calibrado inicialmente, isto raramente se fará necessário. De qualquer modo, nada disto altera a análise de convergência feita no capítulo II, uma vez que, se o conjunto factível é um nível regular de  $h$ , então, para  $\rho_{max}$  suficientemente pequeno, uma tal salvaguarda nunca é acionada. Além disto, usar (4.2) é, teoricamente, equivalente a  $\rho_{max} \leftarrow \rho_{max}/2$ .

### Obj.3 - Eficiência na Restauração

O passo Horizontal sempre é calculado após a atualização da matriz jacobiana. Como estamos admitindo a possibilidade de fazer restaurações, após a atualização da matriz jacobiana, haveria, deste modo, a possibilidade de fazermos duas ou mais atualizações da matriz jacobiana por iteração. No caso da implementação que estamos considerando, isto seria muito ineficiente, pois implicaria em duas ou mais fatorações da matriz jacobiana, por iteração. Tivemos a preocupação de definir o algoritmo, de forma a permitir que se iniciasse uma iteração fazendo restaurações, sem ter que atualizar a jacobiana usada na iteração anterior. Ao testar este aspecto do algoritmo, pudemos constatar que ele se mostrou eficaz, para evitar duplicar atualizações da matriz jacobiana, em cada iteração na fase final, desde que  $\rho_{max}^{(0)}$  esteja bem calibrado.

## 4.2 IMPLEMENTAÇÃO REALIZADA

Como nosso objetivo consiste em realizar apenas testes preliminares com o algoritmo, e nossa primeira preocupação é com sua robustez, secundarizamos a preocupação com o tempo de execução de cada iteração. Nossa principal preocupação relativa à eficiência, se concentra nos números de iterações do algoritmo e de fatorações das matrizes. As principais escolhas definidoras da fase final na implementação realizada foram, além do processo de definição de  $\rho_{max}^{(0)}$ :

- Para dar os passos horizontais procuramos, em cada iteração, obter os pontos candidatos como minimizadores do polinômio de Taylor, de grau 2, do Lagrangeano

$L(x_c + \cdot, \lambda_{LS}(x_c))$ , em regiões de confiança, atualizadas de forma habitual. Escolhemos tais minimizadores com o algoritmo que Moré e Sorensen propuseram em [MoSo 83], aplicado a uma redução do problema quadrático ao espaço tangente às restrições. Para tanto, construímos bases ortogonais do espaço tangente às restrições, usando uma fatoração QR associada à matriz jacobiana das restrições. Correspondentemente, a função de mérito utilizada para o passo Horizontal em cada iteração, é  $L(x_c + \cdot, \lambda_{LS}(x_c))$ .

- Os passos de restauração são obtidos tentando reduzir significativamente  $\|h(x)\|^2$ , com um “backtracking duplo” nas direções GN ( $-h'(x)^+h(x)$ ), e de máxima descida ( $-h'(x)^T h(x)$ ) para  $\|h(x)\|^2$ . Caso o passo na direção GN fique menor que o passo de Cauchy para  $\|h(x)\|^2$ , passamos a fazer a busca linear a partir do passo de Cauchy  $-\mu_{PC} h'(x)^T h(x)$ .

Preferimos escolher problemas para testes que já tivessem sido usados anteriormente. Daí nossa escolha recair sobre a bateria usada por Boggs e Tolle, em [BT 89], para testar um algoritmo quasi-Newton para MRI que propunham na ocasião, bem como também por Shanno e Phua em [SP 89], para comparar diferentes algoritmos quasi-Newton, para MRI. Compõe-se de 13 testes, com poucas variáveis cada um (no máximo 5), muitos deles frequentemente usados na literatura da área. Cada um é testado com diferentes valores para a posição inicial, via de regra, crescentes com  $\|h(x^{(0)})\|$ . Os reproduzimos, na seção final deste capítulo. Sua formulação original encontra-se no referido artigo de Boggs e Tolle, que contempla, inclusive, uma indicação para as soluções que teriam encontrado. Uma dificuldade com relação a usar esta bateria de testes, é que sua versão publicada em [BT 89] contem muitos erros de natureza tipográfica. No entanto nos pareceu possível reconstituí-la razoavelmente, seja a partir dos valores apresentados como soluções dos problemas, seja pelo que se descreve no texto, ou ainda, por constituírem problemas já anteriormente utilizados na literatura. Comentaremos estes detalhes, em cada um dos problemas, ao descrevê-los na seção §4.4.

Shanno e Phua usaram a lista para testar cinco algoritmos com atualização secante para MRI. Incluem ainda, o algoritmo de Boggs e Tolle nos seus testes, e declaram que ele teria se mostrado mais eficiente que os demais, na bateria de testes realizada. Na tabela 4.1a, reproduzimos a tabela V em [SP 89], que compara as performances destes 5 algoritmos, nos 10 primeiros problemas da lista de Boggs-Tolle. Na tabela 4.1b, complementamos a tabela anterior, com dados da aplicação do algoritmo de Boggs-Tolle aos 13 problemas, retirados da tabela I em [BT 89]. Nos nossos testes incluímos ainda, no problema 13, testes com pontos iniciais afastados do conjunto factível, e que não estavam presentes em [BT 89], bem como o problema descrito no exemplo 2.1.

Não faz sentido compararmos, em termos de desempenho, os dados por nós obtidos, com os registros nas tabelas 4.1, uma vez que os dados em [SP 89] e [BT 89] se referem a métodos quasi-Newton, muito mais econômicos, por iteração, que a opção por nós escolhida. Ou seja, é de se esperar que tenham um desempenho ligeiramente pior, em número de iterações e de fatorações da matriz jacobiana, embora tal desempenho tenda a ser compensado, em tempo de computação, pelo seu menor custo por iteração (pelo menos em problemas de grande porte). Além disto, pelo menos num dos casos, nos quais consta, em [BT 89], uma discrepância entre a solução lá apontada, e o problema correspondente, não nos foi possível reconstituir o problema por eles testado na prática. Mesmo assim, a vantagem de estarmos usando uma bateria de testes já amplamente utilizada anteriormente, consiste em constatarmos, ainda que apenas subjetivamente, uma certa consistência nos nossos resultados, com relação aos obtidos para outros algoritmos.

**TABELA 4.1a**

Reproduz a tabela V em [SP 89], comparando as performances de 5 algoritmos PQS com atualização secante para MRI rodados com 10 dos 13 problemas da bateria de testes em [BT 89].

Table V. Comparative Performance

Problem	Start	NPSLVR4 evaluation			NPSLVR5 evaluation			Boggs and Tolle evaluation			POWY1 evaluation			POWY2 evaluation		
		f	g	$\nabla f/\nabla g$	f	g	$\nabla f/\nabla g$	f	g	$\nabla f/\nabla g$	f	g	$\nabla f/\nabla g$	f	g	$\nabla f/\nabla g$
1	1	6	7	6	8	9	13	6	6	6	12	13	9	18	19	12
2	1	6	7	6	7	7	13	11	11	7	9	9	8	8	9	14
	2	16	16	15	24	24	20	18	18	15	15	15	15	19	19	31
3	55	55	41	117†	117	9	87	87	31	101†	101	39	103†	107	89	
3	1	10	10	8	19	19	11	9	9	8	6	6	6	8	8	13
	2	8	8	7	8	8	11	9	9	8	8	8	7	10	10	14
	3	8	8	7	9	9	13	9	9	8	9	9	8	11	11	16
4	1	10	10	9	10	10	15	12*	12	12	13	13	10	19	19	23
	2	12	12	10	101†	101	25	16*	16	16	17	17	12	12	12	21
	3	25	25	20	16††	16	28	12*	12	12	28	28	15	19	19	22
5	1	8	8	7	7	7	13	9	9	8	8	8	7	8	8	13
	2	10	11	10	17	18	25	11	12	11	9	10	9	10	11	16
	3	12	13	12	12	13	19	14	15	14	11	12	11	12	13	18
6	1	11	11	10	11	11	18	20	20	17	11	11	10	11	11	19
	2	69	69	60	80	80	113	28	28	21	90	90	73	101†	101	91
7	1	53	56	36	24††	31	24	53	55	23	33	37	22	33	33	57
	2	57	58	39	79*	79	73	191**	35	47	102†	103	52	102†	102	130
8	1	9	9	9	9	9	15	10	10	10	7	7	7	7	7	13
	2	12	12	12	12	12	21	13	13	13	11	11	11	11	11	19
9	1	17	17	15	38	38	21	12	12	12	26	26	20	23	23	28
	2	42	65	37	34	39	28	21	21	19	45	60	38	38	47	43
	3	34	45	32	111	122	59	34	34	25	46	80	43	41	57	49
10	1	6	6	6	6	6	7	6	6	6	6	6	6	6	6	6
	2	12	12	12	12	12	12	13	13	13	12	12	12	12	12	12
	3	14	14	14	14	14	15	15	15	15	14	14	14	14	14	14

† Allowable function evaluations exceeded.  
 †† Overflow occurred at that iteration.  
 \* Maximum function evaluations exceeded.  
 \*\* Failed to converge.

**TABELA 4.1b**

Reprodução de parte da tabela 1 em [BT 89]

Problem	Start	d adjusted				
		Conv.	Evaluations			
			f	g	$\nabla f$	$\nabla g$
1	1	2	6	6	6	6
2	1	2	11	11	7	7
	2	1	18	18	15	15
	3	1	37	37	27	27
3	1	2	9	9	8	8
	2	2	9	9	8	8
	3	1	9	9	8	8
4	1	1	12	12	12	12
	2	1	16	16	16	16
	3	1	12	12	12	12
5	1	1	9	9	8	8
	2	1	11	12	11	11
	3	1	14	15	14	14
6	1	1	20	20	17	17
	2	1	28	28	21	21
7	1	1	43	44	27	27
	2	8	88	114	58	58
8	1	2	10	10	10	10
	2	2	13	13	13	13
9	1	1	12	12	12	12
	2	2	21	21	19	19
	3	1	34	34	25	25
10	1	1	6	6	6	6
	2	2	13	13	13	13
	3	2	15	15	15	15
11	1	1	10	10	9	9
	2	1	32	32	24	24
	3	1	37	38	28	28
12	1	1	22	22	19	19
	2	1	19	19	17	17
	3	1	19	19	17	17
13	1	2	29	29	13	13

Organizamos a exposição e análise dos dados, colhidos com CDR em 4 subseções. Na primeira, discutimos o efeito de se usar uma salvaguarda, caso a restauração fique muito ineficiente. Na subseção seguinte, discutimos o efeito da correção de segunda ordem. Na subseção §4.2.3, analisamos dados relativos à calibragem inicial de  $\rho_{max}^{(0)}$ , bem como questões relacionadas à escala de  $\|h(x)\|$ . Na última subseção, comparamos diferentes estratégias para a fase inicial. Os dados que registramos de cada teste, nas tabelas 4.2-4.6 são:

- AtA - Número de atualizações da matriz jacobiana
- itT - Número total de iterações realizadas, ( soma das iterações na fase 1, com as da fase final e com as possíveis iterações do algoritmo SALVREST).
- itM - Número de iterações, nas quais o passo candidato é obtido com o algoritmo de Moré-Sorensen. Exceto nas duas últimas baterias de testes apresentadas na tabela 4.6, bem como no problema 10, na prática, difere muito pouco do número de iterações na fase final do algoritmo.
- itS - Número de iterações do algoritmo SALVREST.
- Res - Número de restaurações realizadas.
- # h - Número de avaliações das restrições  $h(x)$ .
- sa - Número que indica qual saída se obteve. Caso  $sa = 1$ , isto significa convergência a um ponto de KT, com tolerância  $\|h(x)\| < 10^{-5}$  e  $\|gp(x)\| < 10^{-5}$ .  $sa = 5$  indica fracasso, ao se atingir um limite de 100 iterações e  $sa = 6$  indica fracasso nas restaurações, na fase final (apenas verificável na tabela 4.2).
- $\rho_{max}^{(0)}$  - Valor inicial de  $\rho_{max}$  na fase final do algoritmo, (apenas nas tabelas 4.4' e 4.5).
- $\rho_{max}^f$  - Valor final de  $\rho_{max}$ , (apenas nas tabelas 4.4' e 4.5).

O problema 3 da lista, é um problema quadrático e o 10 corresponde a encontrar um ponto factível, pois seu número de variáveis é igual ao de restrições. Os dados colhidos com estes problemas mantêm-se monotonamente idênticos, essencialmente independentes das variáveis testadas. Como não contribuem em nada para a análise de CDR, os omitiremos a partir da tabela 4.4, com o objetivo de simplificá-las, visualmente.

### 4.2.1 SALVREST

Na tabela 4.2 registramos o efeito de se usar uma salvaguarda, que denominamos SALVREST, para reduzir significativamente  $\|h(x)\|^2$ , sempre que tivermos obtido  $x_R$  a partir de  $x$ , num passo de REST, e tal que

$$\|h(x_R)\| > .95\|h(x)\| \quad (4.3)$$

SALVREST poderia ser qualquer algoritmo eficiente para resolver o sistema  $h(x) = 0$ . Como neste caso podemos nos deparar com problemas muito difíceis de minimização global, isto coloca alternativas interessantes para construir algoritmos mais robustos para MRI. O que fizemos, nesta implementação, foi simplesmente definir SALVREST como um algoritmo para minimização sem restrições, com região de confiança, tomando para modelo quadrático o

polinômio de grau 2 de  $\|h(x)\|^2$ . Usamos o algoritmo de Moré e Sorensen para obter os pontos candidatos, como minimizadores do modelo quadrático na região de confiança. Na verdade, só acionamos a salvaguarda depois que (4.3) tenha se verificado por duas vezes.

Na tabela 4.2, prefixamos  $\rho_{max}^{(0)} = 10$ , e comparamos os dados obtidos, aplicando CDR com SALVREST, e sem. Conforme podemos verificar na tabela 4.2, sem a salvaguarda o algoritmo deixa de convergir a um ponto estacionário, sendo interrompido após realizar mais de 100 restaurações nos testes 2.3, 13.1, 13.3 e 14. Além disto, CDR fica mais eficiente ao utilizarmos a salvaguarda nos testes 9 e 12. Se observamos a tabela 4.1, vemos que tres dos cinco algoritmos PQS, analisados por Shanno e Phua, também fracassam no problema 2.3. Nos parece que, provavelmente, algum tipo de salvaguarda contra dificuldades em se aproximar da factibilidade, igualmente funcionaria alí.

Em função disto, passamos a incorporar SALVREST em todos os testes a serem feitos com CDR, daqui para a frente.

**TABELA 4.2 - TESTANDO SALVREST COM  $\rho_{max}^0 = 10$**

		COM SALVREST							SEM SALVREST						
Prob.	xo	AtA	itT	itM	itQ	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itQ	Res	#h	sa
1	1	6	2	1	0	4	8	1	6	2	1	0	4	8	1
2	1	7	7	5	0	3	11	1	7	7	5	0	3	11	1
2	2	17	16	8	0	6	22	1	17	16	8	0	6	22	1
2	3	34	34	10	5	3	42	1	101	101	-1	0	0	112	5
3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1
3	2	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1
3	3	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1
4	1	13	12	11	0	7	23	1	13	12	11	0	7	23	1
4	2	15	15	14	0	8	29	1	15	15	14	0	8	29	1
4	3	14	12	11	0	8	24	1	14	12	11	0	8	24	1
5	1	6	5	3	0	4	10	1	6	5	3	0	4	10	1
5	2	10	9	3	0	4	14	1	10	9	3	0	4	14	1
5	3	13	12	3	0	4	19	1	13	12	3	0	4	19	1
6	1	13	12	9	0	5	18	1	13	12	9	0	5	18	1
6	2	29	29	18	0	10	42	1	29	29	18	0	10	42	1
7	1	20	13	12	0	17	40	1	20	13	12	0	17	40	1
7	2	23	13	9	0	18	40	1	23	13	9	0	18	40	1
8	1	17	13	12	0	15	29	1	17	13	12	0	15	29	1
8	2	17	12	8	0	12	29	1	17	12	8	0	12	29	1
9	1	22	14	12	0	16	42	1	22	14	12	0	16	42	1
9	2	30	24	4	4	9	46	1	45	28	9	0	26	96	1
9	3	44	32	12	6	20	86	1	79	60	9	0	28	132	1
10	1	7	2	0	0	5	7	1	7	2	0	0	5	7	1
10	2	13	8	0	0	5	13	1	13	8	0	0	5	13	1
10	3	15	10	0	0	5	15	1	15	10	0	0	5	15	1
11	1	9	8	6	0	4	12	1	9	8	6	0	4	12	1
11	2	16	15	9	0	7	25	1	16	15	9	0	7	25	1
11	3	26	26	9	0	6	37	1	26	26	9	0	6	37	1
12	1	28	28	12	9	7	40	1	37	35	13	0	8	53	1
12	2	29	28	12	10	9	44	1	44	39	16	0	21	85	1
12	3	26	26	12	8	8	38	1	37	34	16	0	16	71	1
13	1	27	16	12	3	19	98	1	115	10	9	0	114	660	6
13	2	19	18	5	3	2	24	1	173	96	12	0	88	569	1
13	3	28	27	2	7	1	36	1	101	101	-1	0	0	118	5
14	1	30	20	13	4	18	120	1	121	9	6	0	118	***	6
14	2	43	24	15	4	30	190	1	115	11	6	0	109	***	6

### 4.2.2 CORREÇÃO DE SEGUNDA ORDEM

Na tabela 4.3 colocamos os resultados obtidos em 4 aplicações da bateria de testes, com o objetivo de registrar o papel da correção de segunda ordem. Nas duas primeiras colunas da tabela 4.3, estão os dados obtidos ao aplicar o algoritmo original, com um valor inicial prefixado em  $\rho_{max}^{(0)} = 0.01$ . Ou seja, a fase inicial é, neste caso, exatamente o algoritmo REST, usado até que se dê o primeiro passo na direção tangente. No teste registrado na primeira coluna, não se usam correções de segunda ordem. No que corresponde à segunda coluna, usamos uma correção de segunda ordem sempre que o passo candidato  $x^+$  ameace sair do cilindro de confiança no sentido que

$$\|h(x^+)\| > \|h(x_c)\| + .3\rho, \quad (4.4)$$

onde  $\rho$  é o raio do cilindro de confiança.

Nas colunas 3 e 4 fizemos o mesmo que nas duas primeiras para  $\rho_{max}^{(0)} = 10$ .

Comparando-se as colunas 1 e 2, fica evidente que para  $\rho_{max}^{(0)} = 0.01$  a correção de segunda ordem tem um efeito decisivo na performance do algoritmo. No caso  $\rho_{max}^{(0)} = 10$ , a correção de segunda ordem melhora a performance nos problemas 4 e 12, fazendo pouca diferença nos demais. O fato que, para pequenos valores do raio do cilindro de confiança, a correção de segunda ordem consegue evitar desastres maiores na aplicação do algoritmo, é importante para a calibragem do  $\rho_{max}$ . Nos permite adotar uma calibragem exigente para sair da fase 1, ou então forçar reduções significativas em  $\rho_{max}$ , sempre que CDR indicar a necessidade de reduzi-lo. Mesmo que “erremos um pouco na dose”, isto não chega a ser devastador, dentro de determinados limites, desde que estejamos usando a correção de segunda ordem. Por outro lado, ela tem que ser usada com algum cuidado, para não consumir avaliações de  $h(x)$  desnecessariamente.

Em consequência disto, incluiremos também a correção de segunda ordem, com a estratégia apontada acima, nos demais testes com CDR.

TABELA 43 - TESTA O EFEITO DA CORREÇÃO DE SEGUNDA ORDEM COM  $\rho_{\max}^0 = .01$  E  $\rho_{\max}^0 = 10$ :

Prob.	xo	$\rho_{\max}^0 = .01$ COM CORREÇÃO							$\rho_{\max}^0 = .01$ SEM CORREÇÃO							$\rho_{\max}^0 = 10$ COM CORREÇÃO							$\rho_{\max}^0 = 10$ SEM CORREÇÃO						
		ATA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	ATA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	ATA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	ATA	itT	itM	itS	Res	#h	sa
1	1	11	10	6	0	7	29	1	11	10	6	0	7	28	1	6	2	1	0	4	8	1	6	2	1	0	4	8	1
2	1	8	7	3	0	2	12	1	9	9	5	0	4	16	1	7	7	5	0	3	11	1	7	7	5	0	3	11	1
2	2	30	30	19	0	10	68	1	94	94	83	0	46	186	1	16	16	8	0	4	21	1	17	16	8	0	6	22	1
2	3	58	58	34	5	15	122	1	124	124	100	5	56	217	5	34	34	10	5	2	44	1	34	34	10	5	3	42	1
3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1
3	2	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1
3	3	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1	3	3	1	0	0	3	1
4	1	16	15	14	0	10	47	1	52	51	50	0	12	142	1	8	8	7	0	4	20	1	13	12	11	0	7	23	1
4	2	21	20	19	0	10	56	1	85	84	83	0	20	219	1	10	8	7	0	4	17	1	15	15	14	0	8	29	1
4	3	17	17	16	0	10	53	1	91	91	90	0	20	243	1	9	7	6	0	4	16	1	14	12	11	0	8	24	1
5	1	7	6	2	0	3	12	1	7	6	2	0	3	12	1	6	5	3	0	4	11	1	6	5	3	0	4	10	1
5	2	10	10	2	0	2	15	1	15	15	7	0	3	29	1	10	9	3	0	4	15	1	10	9	3	0	4	14	1
5	3	13	12	2	0	3	20	1	13	12	2	0	3	20	1	12	11	2	0	3	18	1	13	12	3	0	4	19	1
6	1	15	15	9	0	6	34	1	29	29	23	0	12	58	1	13	12	9	0	5	18	1	13	12	9	0	5	18	1
6	2	54	54	40	0	29	135	1	114	114	100	0	54	208	5	31	30	19	0	11	67	1	29	29	18	0	10	42	1
7	1	17	17	3	3	3	27	1	17	17	3	3	3	27	1	20	13	12	0	17	49	1	20	13	12	0	17	40	1
7	2	19	18	2	4	2	29	1	19	18	2	4	2	29	1	23	13	9	0	18	44	1	23	13	9	0	18	40	1
8	1	17	9	4	0	11	39	1	17	9	4	0	11	30	1	17	13	12	0	15	31	1	17	13	12	0	15	29	1
8	2	16	12	3	0	4	16	1	16	12	3	0	4	16	1	17	12	8	0	12	33	1	17	12	8	0	12	29	1
9	1	15	14	7	0	3	24	1	15	14	7	0	3	24	1	20	13	11	0	15	45	1	22	14	12	0	16	42	1
9	2	26	26	4	2	3	38	1	27	26	4	2	3	38	1	30	24	4	4	9	47	1	30	24	4	4	9	46	1
9	3	31	31	7	4	3	46	1	31	31	7	4	3	46	1	35	27	7	6	11	55	1	35	27	7	6	11	54	1
10	1	7	6	0	0	1	7	1	7	6	0	0	1	7	1	7	2	0	0	5	7	1	7	2	0	0	5	7	1
10	2	13	12	0	0	1	13	1	13	12	0	0	1	13	1	13	8	0	0	5	13	1	13	8	0	0	5	13	1
10	3	15	14	0	0	1	15	1	15	14	0	0	1	15	1	15	10	0	0	5	15	1	15	10	0	0	5	15	1
11	1	8	8	4	0	2	12	1	9	9	5	0	4	14	1	9	8	6	0	4	12	1	9	8	6	0	4	12	1
11	2	30	30	21	0	14	76	1	92	92	83	0	41	178	1	14	13	7	0	5	23	1	16	15	9	0	7	25	1
11	3	46	46	27	0	20	107	1	119	119	100	0	55	221	5	26	25	8	0	6	39	1	26	26	9	0	6	37	1
12	1	56	56	41	7	23	135	1	115	115	100	7	36	232	5	24	21	7	7	8	54	1	27	27	13	7	9	41	1
12	2	55	55	38	9	22	126	1	117	117	100	9	46	215	5	25	22	7	9	7	55	1	27	26	11	9	9	42	1
12	3	54	54	41	6	23	132	1	113	113	100	6	37	228	5	20	19	7	6	6	45	1	25	24	12	6	8	37	1
13	1	67	66	65	0	40	196	1	101	101	100	0	56	173	5	28	18	14	3	18	124	1	27	16	12	3	19	98	1
13	2	30	29	6	4	5	67	1	32	31	8	4	6	67	1	23	19	6	3	5	40	1	23	19	6	3	5	40	1
13	3	28	28	3	7	3	40	1	29	29	4	7	4	43	1	28	27	2	7	1	36	1	28	27	2	7	1	36	1
14	1	16	14	5	1	5	41	1	16	14	5	1	5	41	1	30	20	13	4	18	127	1	30	20	13	4	18	120	1
14	2	19	17	6	1	5	27	1	19	17	6	1	5	27	1	43	24	15	4	29	200	1	43	24	15	4	30	190	1

### 4.2.3 CALIBRAGEM INICIAL DE $\rho_{max}$

As tres tabelas que apresentamos nesta subsecção, essencialmente correspondem a pequenas variações sobre a tabela 4.4. Nas quatro primeiras colunas da tabela 4.4, registramos o que acontece ao prefixarmos diferentes valores iniciais para  $\rho_{max}^{(0)}$ , respectivamente, .01, 10,  $10^3$  e  $10^5$ .

Como já seria de se esperar, o melhor valor prefixado de  $\rho_{max}^{(0)}$  para se operar varia muito conforme o problema, não só em função das não-linearidades do conjunto factível, bem como da escala de  $\|h(x)\|$ . Na tabela 4.4,  $\rho_{max}^{(0)} = .01$  é a melhor opção nos problemas 7,9 e 14 e a pior nos problemas 1,2,4,6,11.2,11.3,12 e 13.1. Já  $\rho_{max}^{(0)} = 10$  é a melhor opção nos problemas 1,4,11 e 13. Nos problemas 1,6 e 12, a melhor opção parece ser  $\rho_{max}^{(0)} = 10^3$ . Até  $\rho_{max}^{(0)} = 10^5$ , parece ser uma boa opção em problemas como os de número 1,6 e 8. Alguns problemas como os de números 1,4,5, 6 e 8 são pouco sensíveis ao valor de  $\rho_{max}^{(0)}$ , dentro de alguma faixa bastante ampla de possíveis prefixações para  $\rho_{max}^{(0)}$ , enquanto outros como 7,9,11,12 e 14, funcionam visivelmente melhor para um dos quatro valores de  $\rho_{max}^{(0)}$ .

O que nos interessa ressaltar aqui, é a *dificuldade de se pensar num valor adequado para  $\rho_{max}^{(0)}$  prefixado*. Claramente, em cada um dos problema, os valores de  $\rho_{max}^{(0)}$  prefixado, que correspondem às melhores performances de CDR, dependem fortemente da escala de  $\|h(x)\|$ . Isto ficará mais evidente ainda, ao analisarmos os dados da tabela 4.5, destinada a explicitar o efeito de mudanças de escala nos problemas.

A forte dependência da performance de CDR com a escala na qual se escreve  $h(x)$ , indica que devemos tentar uma maneira de encontrar  $\rho_{max}^{(0)}$ , que traga embutida alguma forma de aferição desta escala. Os dados da quinta coluna correspondem a esta tentativa. Nela registramos o que acontece, ao tentarmos aplicar, na primeira fase, um método autoajustável para encontrar o valor de  $\rho_{max}^{(0)}$ , com o qual se inicie a fase final do algoritmo. A forma que encontramos para traduzir o princípio de *buscar com que o passo Gauss-Newton seja eficaz, na sua tarefa de aproximar os iterandos da factibilidade dentro dos cilindros de confiança na fase final*, consiste em ajustar  $\rho_{max}^{(0)}$  através:

- i - Aceitar o fim da fase inicial quando obtivermos, por duas vezes

$$q_v = \frac{\|h(x + \delta_V)\|}{\|h(x)\|} < .2 ,$$

onde  $\delta_V$  é um passo Vertical, dado na direção normal às restrições em  $x$ . Adotamos ainda uma salvaguarda, para evitar valores iniciais de  $\rho_{max}^{(0)}$  muito pequenos, necessária em casos nos quais os iterados convergem para pontos factíveis nos quais  $h'(x)$  seja singular, ou esteja muito mal condicionada, como é o caso do problema 8.

- ii - Fixar  $\rho_{max}^{(0)}$  como o valor de  $\|h(x)\|$ , na primeira vez que obtemos  $q_v < .3$  na fase inicial, desde que nunca volte a ficar maior que .4 depois. Caso  $q_v < .3$  em todas as iterações da primeira fase, fixamos  $\rho_{max}^{(0)} = 10^4$  nos testes realizados.

Com a exceção do problema 2.c, *os resultados registrados na quinta coluna da tabela 4.4 correspondem, para cada problema, aos bons resultados obtidos dentre os que registramos ao prefixar  $\rho_{max}^{(0)}$* , no sentido que, se não for o melhor deles, pelo menos dele se aproxima “razoavelmente”. Estamos “medindo” a performance do algoritmo, apenas olhando para os parâmetros AtA, itM e itS, que indicam as fatorações de matrizes realizadas. No sentido de complementar este ponto crucial para o método, apresentamos também as tabelas 4.4' e 4.5.

TABELA 4.4 - TESTA DIFERENTES VALORES DE  $\rho_{\max}^0$  PREFIXADOS CONTRA UM MÉTODO DE AJUSTE PARA  $\rho_{\max}^0$ :

Prob. no	$\rho_{\max}^0 = .01$							$\rho_{\max}^0 = 10$							$\rho_{\max}^0 = 10^3$							$\rho_{\max}^0 = 10^5$							$\rho_{\max}^0$ ajustado							
	AtA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itQ	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	
1	1	11	10	6	0	7	29	1	6	2	1	0	4	8	1	6	2	1	0	4	8	1	6	2	1	0	4	8	1	7	7	3	0	3	16	1
2	1	8	7	3	0	2	12	1	7	7	5	0	3	11	1	10	9	8	0	4	14	1	12	9	8	0	4	14	1	8	8	4	0	3	12	1
2	2	30	30	19	0	10	68	1	16	16	8	0	4	21	1	14	11	6	0	7	22	1	18	13	12	0	11	34	1	20	19	9	0	5	25	1
2	3	58	58	34	5	15	122	1	34	34	10	5	2	44	1	24	24	12	0	6	31	1	25	21	12	0	11	33	1	54	54	30	5	19	118	1
4	1	16	15	14	0	10	47	1	8	8	7	0	4	20	1	6	5	4	0	4	10	1	8	7	6	0	5	12	1	9	8	6	0	6	18	1
4	2	21	20	19	0	10	56	1	10	8	7	0	4	17	1	12	11	10	0	5	17	1	12	12	11	0	5	17	1	10	9	7	0	5	19	1
4	3	17	17	16	0	10	53	1	9	7	6	0	4	16	1	9	8	7	0	6	15	1	8	7	6	0	5	12	1	11	9	7	0	5	19	1
5	1	7	6	2	0	3	12	1	6	5	3	0	4	11	1	6	6	5	0	5	12	1	8	8	7	0	6	15	1	6	6	2	0	2	11	1
5	2	10	10	2	0	2	15	1	10	9	3	0	4	15	1	9	6	3	0	6	13	1	12	11	10	0	9	21	1	10	10	3	0	3	14	1
5	3	13	12	2	0	3	20	1	12	11	2	0	3	18	1	12	10	4	0	6	19	1	12	9	8	0	11	22	1	12	12	3	0	3	18	1
6	1	15	15	9	0	6	34	1	13	12	9	0	5	18	1	12	12	11	0	6	19	1	15	15	14	0	6	22	1	14	14	9	0	4	19	1
6	2	54	54	40	0	29	135	1	31	30	19	0	11	67	1	23	23	16	0	5	28	1	25	23	20	0	10	33	1	32	31	17	0	11	47	1
7	1	17	17	3	3	3	27	1	20	13	12	0	17	49	1	15	12	11	0	12	45	1	18	10	9	0	15	42	1	17	17	3	3	3	27	1
7	2	19	18	2	4	2	29	1	23	13	9	0	18	44	1	26	17	14	2	21	77	1	58	21	18	2	52	188	1	19	19	2	4	1	29	1
8	1	17	9	4	0	11	39	1	17	13	12	0	15	31	1	15	11	10	0	13	24	1	15	11	10	0	13	24	1	16	12	2	0	5	36	1
8	2	16	12	3	0	4	16	1	17	12	8	0	12	33	1	17	12	11	0	16	35	1	16	13	12	0	14	27	1	16	16	3	0	0	16	1
9	1	15	14	7	0	3	24	1	20	13	11	0	15	45	1	31	19	13	5	19	89	1	44	21	11	9	28	104	1	14	14	7	0	3	23	1
9	2	26	26	4	2	3	38	1	30	24	4	4	9	47	1	38	12	6	2	31	88	1	36	18	10	7	24	90	1	26	26	4	2	3	36	1
9	3	31	31	7	4	3	46	1	35	27	7	6	11	55	1	34	18	7	4	19	64	1	37	22	12	8	20	73	1	31	31	7	4	3	46	1
11	1	8	8	4	0	2	12	1	9	8	6	0	4	12	1	12	10	9	0	5	15	1	14	11	10	0	5	16	1	10	10	7	0	2	12	1
11	2	30	30	21	0	14	76	1	14	13	7	0	5	23	1	20	18	16	0	11	35	1	18	15	14	0	9	27	1	14	14	6	0	6	22	1
11	3	46	46	27	0	20	107	1	26	25	8	0	6	39	1	32	28	18	0	13	57	1	33	23	20	0	20	60	1	27	27	9	0	6	37	1
12	1	56	56	41	7	23	135	1	24	21	7	7	8	54	1	17	9	8	0	13	40	1	26	16	11	4	16	74	1	23	23	8	7	5	45	1
12	2	55	55	38	9	22	126	1	25	22	7	9	7	55	1	24	14	13	0	17	56	1	26	20	19	0	17	67	1	28	27	10	9	5	52	1
12	3	54	54	41	6	23	132	1	20	19	7	6	6	45	1	14	8	7	0	12	27	1	17	10	9	0	13	38	1	21	21	8	6	5	42	1
13	1	67	66	65	0	40	196	1	28	18	14	3	18	124	1	38	21	9	11	19	139	1	27	23	10	12	5	55	1	34	29	19	9	11	133	1
13	2	30	29	6	4	5	67	1	23	19	6	3	5	40	1	22	17	7	9	8	82	1	27	23	10	12	5	55	1	31	29	6	4	6	63	1
13	3	28	28	3	7	3	40	1	28	27	2	7	1	36	1	45	28	12	11	20	145	1	59	38	13	24	28	257	1	29	29	3	7	2	40	1
14	1	16	14	5	1	5	41	1	30	20	13	4	18	127	1	22	16	9	6	10	95	1	34	30	17	12	8	76	1	18	16	7	1	8	53	1
14	2	19	17	6	1	5	27	1	43	24	15	4	29	200	1	23	18	10	6	8	90	1	38	33	20	12	9	102	1	22	19	8	1	8	45	1

TABELA 4.4' - IDÊNTICA À TABELA 4.4, EXCETO QUANTO A MOSTRAR  $\rho^f_{max}$  EM CADA CHAMADA, BEM COMO  $\rho^o_{max}$  NA ÚLTIMA:

Prob.	xo	$\rho^o_{max} = .01$					$\rho^o_{max} = 10$					$\rho^o_{max} = 10^3$					$\rho^o_{max} = 10^5$					$\rho^o_{max}$ ajustado					
		AtA	itT	itM	its	$\rho^f_{max}$	AtA	itT	itM	its	$\rho^f_{max}$	AtA	itT	itM	its	$\rho^f_{max}$	AtA	itT	itM	its	$\rho^f_{max}$	AtA	itT	itM	its	$\rho^f_{max}$	$\rho^o_{max}$
1	1	11	10	6	0	.10E-01	6	2	1	0	.10E+02	6	2	1	0	.10E+04	6	2	1	0	.10E+06	7	7	3	0	.79E+00	.79E+00
2	1	8	7	3	0	.10E-01	7	7	5	0	.10E+02	10	9	8	0	.10E+04	12	9	8	0	.10E+06	8	8	4	0	.95E+00	.95E+00
2	2	30	30	19	0	.10E-01	16	16	8	0	.10E+02	14	11	6	0	.32E+02	18	13	12	0	.42E+01	20	19	9	0	.14E+02	.14E+02
2	3	58	58	34	5	.10E-01	34	34	10	5	.10E+02	24	24	12	0	.10E+04	25	21	12	0	.32E+03	54	54	30	5	.10E-01	.10E-01
4	1	16	15	14	0	.10E-01	8	8	7	0	.10E+02	6	5	4	0	.10E+04	8	7	6	0	.18E+02	9	8	6	0	.10E+03	.10E+05
4	2	21	20	19	0	.10E-01	10	8	7	0	.10E+02	12	11	10	0	.14E+01	12	12	11	0	.42E+01	10	9	7	0	.10E+03	.10E+05
4	3	17	17	16	0	.10E-01	9	7	6	0	.10E+02	9	8	7	0	.10E+04	8	7	6	0	.32E+03	11	9	7	0	.10E+05	.10E+05
5	1	7	6	2	0	.10E-01	6	5	3	0	.10E+02	6	6	5	0	.10E+04	8	8	7	0	.32E+03	6	6	2	0	.42E+01	.42E+01
5	2	10	10	2	0	.10E-01	10	9	3	0	.10E+02	9	6	3	0	.10E+04	12	11	10	0	.10E+06	10	10	3	0	.33E+03	.33E+03
5	3	13	12	2	0	.10E-01	12	11	2	0	.10E+02	12	10	4	0	.10E+04	12	9	8	0	.10E+06	12	12	3	0	.24E+04	.24E+04
6	1	15	15	9	0	.10E-01	13	12	9	0	.10E+02	12	12	11	0	.10E+04	15	15	14	0	.32E+03	14	14	9	0	.17E+02	.17E+02
6	2	54	54	40	0	.10E-01	31	30	19	0	.25E+01	23	23	16	0	.10E+04	25	23	20	0	.32E+03	32	31	17	0	.10E+01	.10E+01
7	1	17	17	3	3	.10E-01	20	13	12	0	.24E-02	15	12	11	0	.88E-01	18	10	9	0	.66E-01	17	17	3	3	.40E-01	.40E-01
7	2	19	18	2	4	.10E-01	23	13	9	0	.24E-02	26	17	14	2	.16E-02	58	21	18	2	.51E-01	19	19	2	4	.20E+00	.20E+00
8	1	17	9	4	0	.10E-01	17	13	12	0	.10E+02	15	11	10	0	.10E+04	15	11	10	0	.10E+06	16	12	2	0	.10E+01	.10E+01
8	2	16	12	3	0	.10E-01	17	12	8	0	.10E+02	17	12	11	0	.10E+04	16	13	12	0	.10E+06	16	16	3	0	.37E+02	.37E+02
9	1	15	14	7	0	.10E-01	20	13	11	0	.39E-01	31	19	13	5	.54E-01	44	21	11	9	.89E-02	14	14	7	0	.10E+00	.10E+00
9	2	26	26	4	2	.10E-01	30	24	4	4	.95E-01	38	12	6	2	.62E-01	36	18	10	7	.11E-03	26	26	4	2	.11E+00	.11E+00
9	3	31	31	7	4	.10E-01	35	27	7	6	.94E-01	34	18	7	4	.94E-01	37	22	12	8	.30E+00	31	31	7	4	.84E-01	.84E-01
11	1	8	8	4	0	.10E-01	9	8	6	0	.10E+02	12	10	9	0	.56E+01	14	11	10	0	.18E+02	10	10	7	0	.10E+05	.10E+05
11	2	30	30	21	0	.10E-01	14	13	7	0	.10E+02	20	18	16	0	.56E+01	18	15	14	0	.18E+02	14	14	6	0	.34E+01	.34E+01
11	3	46	46	27	0	.10E-01	26	25	8	0	.10E+02	32	28	18	0	.56E+01	33	23	20	0	.26E+00	27	27	9	0	.16E+01	.65E+01
12	1	56	56	41	7	.10E-01	24	21	7	7	.10E+02	17	9	8	0	.56E+01	26	16	11	4	.33E+01	23	23	8	7	.36E+01	.36E+01
12	2	55	55	38	9	.10E-01	25	22	7	9	.10E+02	24	14	13	0	.35E+00	26	20	19	0	.11E+01	28	27	10	9	.15E+01	.15E+01
12	3	54	54	41	6	.10E-01	20	19	7	6	.10E+02	14	8	7	0	.14E+01	17	10	9	0	.11E+01	21	21	8	6	.38E+01	.38E+01
13	1	67	66	65	0	.10E-01	28	18	14	3	.70E-02	38	21	9	11	.14E-03	27	23	10	12	.18E+03	34	29	19	9	.51E+02	.10E+05
13	2	30	29	6	4	.10E-01	23	19	6	3	.21E+00	22	17	7	9	.84E+01	27	23	10	12	.18E+03	31	29	6	4	.22E-01	.22E-01
13	3	28	28	3	7	.10E-01	28	27	2	7	.10E+02	45	28	12	11	.19E-01	59	38	13	24	.26E-01	29	29	3	7	.11E+00	.11E+00
14	1	16	14	5	1	.25E-02	30	20	13	4	.91E-02	22	16	9	6	.14E+02	34	30	17	12	.12E+02	18	16	7	1	.14E-01	.57E-01
14	2	19	17	6	1	.10E-01	43	24	15	4	.30E-03	23	18	10	6	.14E+02	38	33	20	12	.15E+03	22	19	8	1	.77E-03	.49E-01

TABELA 4.5 - TAMBÉM TESTA  $\rho_{\max}^0$  PREFIXADO CONTRA AUTOAJUSTADO, COM A DIFERENÇA DE MUDAR A ESCALA AO FAZER  $h(x) \leftarrow K \cdot h(x)$ .

Prob. no	$\rho_{\max}^0 = .01; K = 10^3$						$\rho_{\max}^0 = 10; K = 10^3$						$\rho_{\max}^0 = 10^4; K = 10^3$						$\rho_{\max}^0$ ajustado; $K = 10^3$						$\rho_{\max}^0$ ajustado; $K = 1$					
	AtA	itT	itm	its	$\rho_{\max}^f$		AtA	itT	itm	its	$\rho_{\max}^f$		AtA	itT	itm	its	$\rho_{\max}^f$		AtA	itT	itm	its	$\rho_{\max}^f$	$\rho_{\max}^0$	AtA	itT	itm	its	$\rho_{\max}^f$	$\rho_{\max}^0$
1	1	38	37	32	0	.10E-01	11	10	6	0	.10E+02		6	2	1	0	.10E+05		7	7	3	0	.79E+03	.79E+03	7	7	3	0	.79E+00	.79E+00
2	1	15	15	10	0	.10E-01	8	7	3	0	.10E+02		8	7	5	0	.10E+05		8	8	4	0	.95E+03	.95E+03	8	8	4	0	.95E+00	.95E+00
2	2	112	112	100	0	.10E-01	30	30	19	0	.10E+02		16	16	8	0	.10E+05		21	19	9	0	.14E+05	.14E+05	20	19	9	0	.14E+02	.14E+02
2	3	124	124	100	5	.10E-01	58	58	34	5	.10E+02		35	34	10	5	.10E+05		124	124	100	5	.15E+00	.15E+00	54	54	30	5	.10E-01	.10E-01
4	1	77	77	75	0	.10E-01	16	15	14	0	.10E+02		8	8	7	0	.10E+05		9	9	7	0	.10E+05	.10E+05	9	8	6	0	.10E+03	.10E+05
4	2	88	87	85	0	.10E-01	21	20	19	0	.10E+02		10	8	7	0	.10E+05		12	10	7	0	.10E+05	.10E+05	10	9	7	0	.10E+03	.10E+05
4	3	84	84	82	0	.10E-01	17	17	16	0	.10E+02		9	7	6	0	.10E+05		11	10	8	0	.10E+05	.10E+05	11	9	7	0	.10E+05	.10E+05
5	1	14	14	9	0	.10E-01	7	6	2	0	.10E+02		6	5	3	0	.10E+05		6	6	2	0	.42E+04	.42E+04	6	6	2	0	.42E+01	.42E+01
5	2	18	18	9	0	.10E-01	10	10	2	0	.10E+02		10	9	3	0	.10E+05		10	10	3	0	.33E+06	.33E+06	10	10	3	0	.33E+03	.33E+03
5	3	20	20	9	0	.10E-01	13	12	2	0	.10E+02		12	11	2	0	.10E+05		12	12	3	0	.10E+07	.10E+07	12	12	3	0	.24E+04	.24E+04
6	1	72	72	65	0	.10E-01	15	15	9	0	.10E+02		13	12	9	0	.10E+05		14	14	9	0	.17E+05	.17E+05	14	14	9	0	.17E+02	.17E+02
6	2	116	116	100	0	.10E-01	54	54	40	0	.10E+02		40	37	26	0	.10E+03		32	31	17	0	.10E+04	.10E+04	32	31	17	0	.10E+01	.10E+01
7	1	17	17	3	3	.10E-01	20	13	12	0	.24E-02		17	13	12	0	.98E-02		17	17	3	3	.40E-01	.40E-01	17	17	3	3	.40E-01	.40E-01
7	2	19	18	2	4	.10E-01	23	13	9	0	.24E-02		29	22	21	0	.16E+00		19	19	2	4	.20E+00	.20E+00	19	19	2	4	.20E+00	.20E+00
8	1	20	14	4	0	.10E-01	17	9	4	0	.10E+02		17	13	12	0	.10E+05		26	17	2	0	.10E+04	.10E+04	16	12	2	0	.10E+01	.10E+01
8	2	21	17	3	0	.10E-01	21	12	3	0	.10E+02		22	13	9	0	.10E+05		37	28	10	0	.92E+04	.92E+04	16	16	3	0	.37E+02	.37E+02
9	1	15	15	7	0	.10E-01	15	14	7	0	.10E+02		20	11	9	0	.10E+02		14	14	7	0	.10E+03	.10E+03	14	14	7	0	.10E+00	.10E+00
9	2	28	28	5	2	.10E-01	26	26	4	2	.10E+02		31	23	3	4	.20E+02		26	26	4	2	.11E+03	.11E+03	26	26	4	2	.11E+00	.11E+00
9	3	32	32	7	4	.10E-01	31	31	7	4	.10E+02		35	27	7	6	.19E+02		31	31	7	4	.84E+02	.84E+02	31	31	7	4	.84E-01	.84E-01
11	1	13	13	8	0	.10E-01	8	8	4	0	.10E+02		9	8	6	0	.10E+05		9	9	6	0	.10E+05	.10E+05	10	10	7	0	.10E+05	.10E+05
11	2	110	110	100	0	.10E-01	30	30	21	0	.10E+02		14	13	7	0	.10E+05		14	14	6	0	.34E+04	.34E+04	14	14	6	0	.34E+01	.34E+01
11	3	120	120	100	0	.10E-01	46	46	27	0	.10E+02		26	25	8	0	.10E+05		27	27	9	0	.81E+02	.65E+04	27	27	9	0	.16E+01	.65E+01
12	1	116	116	100	7	.10E-01	56	56	41	7	.10E+02		24	21	7	7	.10E+05		23	23	8	7	.36E+04	.36E+04	23	23	8	7	.36E+01	.36E+01
12	2	117	117	100	9	.10E-01	55	55	38	9	.10E+02		25	22	7	9	.10E+05		28	27	10	9	.15E+04	.15E+04	28	27	10	9	.15E+01	.15E+01
12	3	114	114	100	6	.10E-01	54	54	41	6	.10E+02		20	19	7	6	.10E+05		21	21	8	6	.38E+04	.38E+04	21	21	8	6	.38E+01	.38E+01
13	1	101	101	100	0	.10E-01	67	66	65	0	.10E+02		21	13	10	2	.55E+01		21	13	10	2	.55E+01	.10E+05	34	29	19	9	.51E+02	.10E+05
13	2	65	65	42	4	.10E-01	30	29	6	4	.10E+02		25	19	6	3	.25E+01		31	29	6	4	.22E+02	.22E+02	31	29	6	4	.22E-01	.22E-01
13	3	33	33	7	7	.10E-01	28	28	3	7	.10E+02		29	27	2	7	.10E+05		29	29	3	7	.11E+03	.11E+03	29	29	3	7	.11E+00	.11E+00
14	1	21	21	12	1	.10E-01	16	14	5	1	.25E+01		29	18	11	4	.15E+01		18	16	7	1	.75E+01	.57E+02	18	16	7	1	.14E-01	.57E-01
14	2	20	20	9	1	.10E-01	19	17	6	1	.10E+02		30	18	10	3	.10E+01		22	19	8	1	.44E+00	.49E+02	22	19	8	1	.77E-03	.49E-01

Tabela 4.4' - Reproduz os mesmos dados da tabela 4.4, apenas substituindo o registro de Res, # h e sa por  $\rho_{max}^f$  (valor final de  $\rho_{max}$ ) e, no caso autoajustável, acrescentando ainda  $\rho_{max}^{(0)}$ . Começamos destacando que o valor de  $\rho_{max}^{(0)}$ , encontrado de forma autoajustada, é razoavelmente “conservador”, no sentido de praticamente corresponder ao valor final de  $\rho_{max}$ . As exceções ficam por conta dos problemas 4.a, 4.b e 13.a, que começam, praticamente, em pontos factíveis (nestes casos arbitramos  $\rho_{max}^{(0)} = 10^4$ ) e do 14 que “gosta” de andar com  $\rho_{max}$  bem pequeno. O problema 14 é o único no qual  $\rho_{max}$  ainda é diminuído na fase final, abaixo de um valor prefixado em .01, conforme se registra na primeira coluna. Nos casos de problemas como o 7,9 e 14, que “gostam” de cilindros de confiança menores, o método encontra valores relativamente baixos para  $\rho_{max}^{(0)}$  e, *essencialmente*, reproduz a performance obtida ao se prefixar  $\rho_{max}^{(0)} = .01$ . Nos demais casos se obtém, com poucas exceções, valores iniciais para  $\rho_{max}^{(0)}$ , próximos a valores de  $\rho_{max}$  nos quais o algoritmo parece operar bem com  $\rho_{max}^{(0)}$  prefixado. A exceção 2.c, corresponde a um exemplo no qual a direção do gradiente projetado na direção tangente às restrições coincide ser, longe das restrições, uma boa direção de descida de  $\|h(x)\|$  em iterados nos quais a direção normal não o é. Isto acaba produzindo um valor de  $\rho_{max}^{(0)}$  excessivamente baixo. Ao adotarmos outras estratégias para a fase 1, este efeito se atenua bastante.

Tabela 4.5 - A tabela 4.5 destina-se a registrar os efeitos de uma mudança de escala, ao se substituir  $h(x) = 0$  por  $K * h(x) = 0$ . As tres primeiras colunas correspondem a prefixar  $\rho_{max}^{(0)}$  em .01,  $K * .01$  e  $K * 10$ . As duas últimas correspondem a se utilizar o método de autoajuste para encontrar  $\rho_{max}^{(0)}$ . Adotamos  $K = 1000$  nas quatro primeiras colunas. Na quinta repetimos os dados da quinta coluna da tabela 4.4', ou seja, correspondentes a  $K = 1$ .

A primeira observação a se fazer aí é que, com pequenas nuances, os resultados obtidos com  $K = 1000$ , para  $\rho_{max}^{(0)} = K * .01$  e  $\rho_{max}^{(0)} = K * 10$ , são essencialmente os mesmos obtidos na tabela anterior respectivamente para  $\rho_{max}^{(0)} = .01$  e  $\rho_{max}^{(0)} = 10$  no caso  $K = 1$ . O principal ponto a destacar na tabela 4.5 é que, com a exceção dos problemas 2.c, 8 e 13.a, nos demais há uma notável coincidência entre as performances obtidas para  $K = 1$  e  $K = 1000$  no caso onde  $\rho_{max}^{(0)}$  é autoajustado, conforme se pode ver comparando as duas últimas colunas. Isto indica que *na grande maioria dos problemas, o efeito da calibragem, adotada na fase inicial para ajustar  $\rho_{max}^{(0)}$ , parece funcionar independentemente de  $K$ .*

Não estamos com isto dizendo que temos uma maneira de enfrentar problemas mal escalados em geral. Mas pelo menos no que diz respeito a mudanças de escala do tipo  $h(x) \leftarrow K * h(x)$  acreditamos que nossos dados apontam uma forma autoregulável para encontrar um  $\rho_{max}^{(0)}$  conveniente.

Em resumo, nos parece que na grande maioria dos problemas testados, o método autoajustável *encontra um valor para  $\rho_{max}^{(0)}$ , econômico em termos das “iterações caras” na direção tangente, sem aumentar significativamente o menor número de iterações feitas pelo algoritmo, com relação a testes que utilizam diferentes valores prefixados de  $\rho_{max}^{(0)}$ . Isto indica um critério viável para caracterizar, dinamicamente, a proximidade do conjunto factível.*

#### 4.2.4 ESTRATÉGIAS PARA A FASE 1

Na tabela 4.6 comparamos quatro diferentes estratégias para a fase 1. A primeira, essencialmente, é a mesma registrada na quinta coluna da tabela 4.4. Nas demais procuramos dar passos na direção tangente às restrições, após cada passo na direção normal, e de modo a não comprometer a descida de  $\|h(x)\|$  conquistada. Usamos tres novas opções para fazê-lo. Uma iteração típica da fase 1 começa em  $x$ , com a atualização da matriz jacobiana no ponto, e dá um passo *vertical* para encontrar  $x_v$ , com o objetivo de reduzir  $\|h(x)\|$ . O passo vertical é dado com um algoritmo como REST, e usamos ainda um raio para a região de confiança do passo vertical. As diferentes opções se diferenciam na forma de escolher um passo na direção *Horizontal*. A idéia da segunda opção para a fase inicial, é aproveitar que a fatoração de  $h'(x)$  já está feita, e definir o passo *Horizontal* na direção de  $-gp(x)$ . A forma de fazê-lo é bem despretenciosa, e corresponde a usar um segundo raio de confiança para o tamanho inicial do passo Horizontal, a ser atualizado em cada iteração. O passo  $x^+$ , assim obtido, é recusado em duas situações:

- Se  $\|h(x^+)\|$  for maior que a média aritmética entre  $\|h(x)\|$  e  $\|h(x_v)\|$ .
- Se  $f(x^+)$  não reduzir significativamente  $f(x_v)$ , até um limite de duas recusas deste tipo por iteração.

Ou seja, a idéia aqui é não “gastar muito” para tentar diminuir a  $f$ , longe das restrições. Se após duas rejeições do passo Horizontal, não encontramos um candidato  $x^+$  aceitável, omitimos o passo Horizontal e reduzimos a região de confiança do passo Horizontal, para a iteração seguinte. A atualização do raio da região de confiança do passo Horizontal, é feita de forma a aumentá-lo ou diminuí-lo, conforme o passo dado ameaça, ou não, deixar de satisfazer um dos dois pontos colocados logo acima.

As outras duas opções que registramos na tabela 4.6, correspondem a apostar mais em melhorar a aproximação da variedade dual  $\mathcal{D}^*$ , na fase 1, no sentido de um maior esforço para dar um bom passo na direção Horizontal. Uma forma de fazê-lo, corresponde a construir o mesmo modelo quadrático que na fase final, para dar o passo Horizontal, usando o algoritmo de Moré-Sorensen para encontrar um candidato  $x^+ = x_v + \delta_t + \delta_{soc}$ , onde  $\delta_t$  é obtido a partir do minimizador do modelo quadrático reduzido. A diferença entre as duas opções, é que na terceira usamos a matriz jacobiana das restrições obtida em  $x$ , sem atualizá-la em  $x_v$ , ao passo que na quarta, fazemos a atualização de  $h'(x)$  em  $x_v$ . Destacamos duas observações:

- A primeira e a segunda opções parecem claramente superiores às demais. Como seria de se esperar, as duas últimas opções gastam muito mais, em termos de iterações do algoritmo de Moré-Sorensen, do que as duas primeiras. Para que valessem à pena, teria que acontecer uma substancial redução no número de iterações. Mas isto visivelmente não ocorre. Mesmo que comparemos apenas pelo número de iterações itT, não nos parece detectável, globalmente, uma redução deste número nas opções 3 e 4, com relação aos dados da segunda opção. Ou seja o que nos parece observável aí, é que as diferenças no número itT entre as opções 2 e as opções 3 e 4, além de serem relativamente pequenas, se distribuem equilibradamente, ora num sentido, ora no outro. Algo semelhante observaremos adiante, ao comparar os dados da aplicação de um método PQS puro, e de outro, no qual o mesmo algoritmo PQS vem precedido de uma fase 1 como a que colocamos nas opções 1 ou 2.

- A comparação entre os dados da primeira e segunda opções, não nos dá elementos suficientes para afirmar que uma das duas seria, claramente, superior à outra. Para tanto, talvez fosse necessário trabalhar num conjunto bem mais amplo de testes. No entanto, nos parece haver, nesta bateria de testes, uma diferença pequena, porém visível, em favor da segunda opção, expressa nos testes de número 2, 6 e 8. Nos demais há pequenas oscilações para lá e para cá nos resultados (sempre pensados em termos de AtA, itM e itS).

#### OBSERVAÇÃO 4.2.1 SOBRE O CUSTO DAS RESTAURAÇÕES

Observamos que, a diferença entre o número de atualizações da matriz jacobiana AtA e o número de iterações itT, é devida ao número de restaurações realizadas na fase final que consomem uma ou mais atualizações adicionais da matriz jacobiana, com consequentes fatorações. O que se pode destacar na tabela 4.6 é que, em termos do número de fatorações de matrizes, este gasto adicional com restaurações na fase final é quase insignificante, no caso onde  $\rho_{max}^{(0)}$  é autoajustado. Só para fixar idéias, veja que, nas duas primeiras opções da tabela 4.6, dos trinta testes realizados em cada opção, mais da metade não precisou gastar nenhuma fatoração a mais. Nos demais, gastou-se apenas uma fatoração adicional, com a exceção de dois ou tres testes. *Com  $\rho_{max}^{(0)}$  prefixado, como já seria de se esperar, constata-se na tabela 4.4 que o número de fatorações da jacobiana por iteração, na fase final, é igualmente muito próximo de 1, para  $\rho_{max}^{(0)} = .01$  e tende a crescer com  $\rho_{max}^{(0)}$ .*

TABELA 4.6 - TESTA DIFERENTES ESTRATÉGIAS PARA A FASE 1:

Passo tang. na fase 1	Nenhum							Cauchy							Minimiz. da quadrática							Minimiz. da quad. c/ atualiz. de h'(x)							
	Prob.	no	AtA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itS	Res	#h	sa	AtA	itT	itM	itS	Res	#h
1	1	7	7	3	0	3	16	1	7	7	3	0	3	19	1	7	7	6	0	3	18	1	9	7	6	0	3	19	1
2	1	8	8	4	0	3	12	1	7	7	3	0	2	13	1	5	5	4	0	1	9	1	8	6	5	0	2	11	1
2	2	20	19	9	0	5	25	1	16	16	6	0	3	31	1	17	17	16	0	3	28	1	32	19	19	0	4	38	1
2	3	54	54	30	5	19	118	1	26	25	8	0	7	59	1	25	24	23	0	3	50	1	62	35	34	0	4	75	1
4	1	9	8	6	0	6	18	1	8	8	6	0	4	13	1	8	8	7	0	4	13	1	9	9	8	0	5	17	1
4	2	10	9	7	0	5	19	1	13	13	11	0	5	19	1	13	13	12	0	5	19	1	11	10	9	0	4	16	1
4	3	11	9	7	0	5	19	1	10	9	7	0	5	15	1	10	9	8	0	5	15	1	10	8	7	0	5	16	1
5	1	6	6	2	0	2	11	1	7	7	3	0	3	15	1	6	6	5	0	2	11	1	8	6	5	0	2	11	1
5	2	10	10	3	0	3	14	1	10	10	3	0	3	21	1	10	10	9	0	3	23	1	14	9	8	0	2	17	1
5	3	12	12	3	0	3	18	1	15	14	3	0	3	33	1	15	14	13	0	4	32	1	19	12	11	0	3	26	1
6	1	14	14	9	0	4	19	1	10	10	5	0	3	17	1	11	11	10	0	3	18	1	15	12	11	0	3	19	1
6	2	32	31	17	0	11	47	1	14	14	3	0	2	31	1	20	20	19	0	4	34	1	30	20	19	0	3	34	1
7	1	17	17	3	3	3	27	1	17	17	3	3	3	40	1	14	14	13	0	3	34	1	27	18	14	3	5	50	1
7	2	19	19	2	4	1	29	1	22	21	7	0	8	56	1	20	20	19	0	3	46	1	34	20	15	4	2	45	1
8	1	16	12	2	0	5	36	1	10	10	0	0	0	11	1	10	10	9	0	0	11	1	18	10	9	0	0	11	1
8	2	16	16	3	0	0	16	1	14	14	1	0	1	43	1	20	20	19	0	0	57	1	26	14	13	0	0	18	1
9	1	14	14	7	0	3	23	1	17	17	7	0	3	38	1	21	21	16	4	3	48	1	23	12	11	0	1	27	1
9	2	26	26	4	2	3	36	1	25	25	8	2	4	55	1	26	26	22	3	4	59	1	33	19	14	4	1	41	1
9	3	31	31	7	4	3	46	1	35	34	6	7	4	80	1	32	32	26	5	3	73	1	86	50	42	7	3	118	1
11	1	10	10	7	0	2	12	1	8	7	4	0	2	10	1	9	9	8	0	2	12	1	9	8	7	0	3	12	1
11	2	14	14	6	0	6	22	1	16	16	9	0	4	28	1	14	14	13	0	2	21	1	19	14	13	0	3	22	1
11	3	27	27	9	0	6	37	1	27	27	14	0	6	51	1	19	19	18	0	4	33	1	35	22	21	0	2	40	1
12	1	23	23	8	7	5	45	1	25	25	8	8	4	56	1	25	24	16	7	4	59	1	60	35	32	2	5	100	1
12	2	28	27	10	9	5	52	1	26	25	9	4	6	68	1	25	24	16	7	5	60	1	30	21	17	3	4	55	1
12	3	21	21	8	6	5	42	1	25	23	6	6	4	58	1	25	24	17	6	7	62	1	23	18	12	5	4	42	1
13	1	34	29	19	9	11	133	1	34	29	19	9	11	133	1	34	29	19	9	11	133	1	14	12	8	3	6	63	1
13	2	31	29	6	4	6	63	1	16	16	2	4	1	35	1	16	16	11	4	1	36	1	25	18	12	5	2	41	1
13	3	29	29	3	7	2	40	1	27	27	3	9	2	63	1	36	33	22	10	5	106	1	28	19	11	7	1	37	1
14	1	18	16	7	1	8	53	1	21	20	7	4	4	50	1	30	23	17	5	15	104	1	23	19	15	3	4	44	1
14	2	22	19	8	1	8	45	1	26	22	4	6	7	97	1	22	22	17	4	3	54	1	28	19	14	4	3	53	1

### 4.3 TESTES COM PQS

As implementações dos algoritmos PQS, em geral, não se preocupam em explicitar um tratamento diferenciado para pontos que estejam próximos do conjunto factível, com relação a pontos dele distantes. A idéia é que, a função de mérito, ao penalizar fortemente possíveis afastamentos do conjunto factível, implicitamente se encarregaria disto. Num certo sentido, isto é tratado como uma vantagem dos algoritmos PQS, que teriam, desta forma, mais liberdade para procurar a variedade dual  $\mathcal{D}_{\nabla L}$ , mesmo estando longe do conjunto factível. Longe da variedade dual  $\mathcal{D}^*$ , a função de mérito atuaria como uma espécie de “freio autoregulável” a permitir avanços em direção à variedade dual, proporcionados por direções de descida definidas num modelo quadrático, na medida que não venham a provocar aumentos excessivos na “distância” do iterando ao conjunto factível. Em vários casos, a estratégia de se preocupar fortemente com a aproximação da variedade dual, longe do conjunto factível, pode ser adequada. Em muitos, nos parece que não. Nosso objetivo é levantar dados numéricos, no sentido de questionar, em caráter bem *preliminar*, este tipo de estratégia. Para tanto, aplicaremos a mesma bateria de testes anterior, para comparar uma implementação típica de um algoritmo PQS, que usa região de confiança, com outras que se fazem preceder por uma fase inicial, como as que utilizamos nas duas primeiras baterias registradas na tabela 4.6. Acreditamos poder detectar, deste modo, fenômenos parecidos com os que verificávamos no nosso algoritmo, no que diz respeito à eficiência e, em menor escala, também à robustez.

É possível enquadrar PQS precedido de uma fase inicial, conforme o apresentaremos, como uma das muitas possíveis variantes de PQS. Contudo, nos parece que isto já não corresponde ao que usualmente se espera como implementação de PQS. O algoritmo PQS escolhido, foi o que está em [DEM], por ser um algoritmo que, igualmente ao nosso, usa regiões de confiança para definir um passo horizontal. As principais opções que fizemos, para implementá-lo, foram:

- i – Ao iniciar uma iteração típica em  $x_c$ , definimos, como modelo quadrático, o polinômio de Taylor de grau dois de  $L(x_c + \cdot, \lambda)$ , onde  $\lambda$  é determinado na resolução do subproblema quadrático. Dispomos ainda de uma avaliação do raio  $\Delta$ , de uma região de confiança na qual se buscará passos candidatos na forma  $\delta_+ = \delta_V + \delta_H$
- ii – O passo *Vertical*  $\delta_V$  é essencialmente um passo na direção GN ( $-h'(x_c)^\dagger h(x_c)$ ). Visa minimizar a linearização das restrições em norma ( $\|h(x_c) + h'(x_c)^T \delta\|$ ), nesta direção GN, e numa região de raio  $\Delta_V = 0.8\Delta$ . Caso  $\Delta_V$  fique menor que o *passo de Cauchy Vertical* ( $-\mu_{PC} h'(x_c)^T h(x_c)$ ), então passa-se a escolher o passo *Vertical* na direção de Cauchy Vertical.
- iii – O passo *Horizontal*  $\delta_H$  é o minimizador do modelo quadrático, restrito a  $\mathcal{N}(h'(x_c)) + \delta_V$  e à região de confiança de raio  $\Delta_H = [(\Delta^2 - \|\delta_V\|^2)]^{.5}$ . A técnica empregada para encontrar  $\delta_H$  é, essencialmente, a mesma usada em CDR.  $\delta_H$  é escolhido com o mesmo algoritmo de Moré e Sorensen, através de uma redução ao espaço tangente, igualmente obtida de uma fatoração QR de  $h'(x_c)^T$ .
- iv – O passo candidato  $\delta_+$  é testado pela função de mérito proposta em [DEM]. Trata-se de um lagrangeano aumentado, na forma  $\Phi(x_c, \lambda, \rho) = L(x_c + \cdot, \lambda) + \rho \|h(x_c)\|^2$ . Em linhas bem gerais, a estratégia para definir  $\rho$  corresponde a aumentá-lo, cada vez que  $\delta_+$  deixe de produzir descida suficiente num modelo quadrático que aproxima  $\Phi$ .

A primeira das duas tabelas que apresentamos, tem como objetivo observar o efeito de uma correção de segunda ordem, preconizada por alguns autores (vide [ Fle 87], §12.4), para evitar que se dê passos muito pequenos perto da solução. Tal fenômeno leva o nome de *efeito Maratos*, na literatura. A correção de segunda ordem  $\delta_{soc}$  adotada, é a usual em PQS, ou seja, corresponde a exigir  $\delta_{soc} = h'(x_c)^T \mu_{soc}$  tal que  $h'(x_c)\delta_{soc} + h(x_+) = 0$ . Para que ela seja adotada, exigimos, num passo candidato  $x_+ = x_c + \delta_V + \delta_H$ ,

$$\|h(x_+)\| \geq \|h(x_c)\| \quad (4.5)$$

$$h'(x_c)\delta_V + h(x_c) = 0 \quad (4.6)$$

$$\|h(x_+ + \delta_{soc})\| \leq \frac{\|h(x_c)\| + \|h(x_+)\|}{2} \quad (4.7)$$

$$\|h(x_c)\| \leq \sigma_{cor} \quad (4.8)$$

As duas primeiras condições se impõem, naturalmente, para evitar desperdícios. (4.5) e (4.7) conferem à  $\delta_{soc}$ , um mínimo de eficácia na sua tarefa restauradora. A quarta condição, corresponde a só acionar a correção, desde que  $x_c$  esteja adequadamente próximo do conjunto factível. Na tabela 4.7, testamos a correção de segunda ordem, fazendo  $\sigma_{cor}$  variar desde  $\sigma_{cor} = 0$  até  $\sigma_{cor} = \infty$ . O principal ponto a se observar, é que a correção de segunda ordem não causa diferenças muito significativas na performance do algoritmo, com a exceção do teste 11.2. Ainda assim, temos mais dois pontos a destacar, na tabela apresentada:

- Comparando os dados obtidos sem a correção de segunda ordem ( $\sigma_{cor} = 0$ ), com os demais, torna-se visível nos problemas 1, 4, 11.2 e 12, algo da natureza do efeito Maratos. Observa-se aí, sobretudo no problema 11.2, uma redução do número de iterações nestes problemas, a medida que admitimos correções de segunda ordem com  $\sigma_{cor}$  crescente, embora às custas de um aumento no número de avaliações de  $h(x)$ .
- Podemos perceber que, a partir de  $\sigma_{cor} = 1$ , os resultados praticamente não se alteram, o que nos indica uma certa consistência nas tres primeiras exigências (4.5–4.7), e sugere a supressão da exigência (4.8). Em particular isto nos aponta condições para se dar um passo de segunda ordem *independentemente da escala* de  $\|h(x)\|$ . Para os testes registrados na tabela seguinte, *adotaremos uma correção de segunda ordem satisfazendo (4.5-4.7)*.

A tabela 4.8 tenta traduzir o objetivo a que nos propusemos nesta seção, e contem dados da aplicação de tres baterias de testes. A primeira corresponde ao algoritmo PQS com as opções acima explicitadas. Nas outras duas, o precedemos de uma fase inicial com SALVREST, como as que usamos nas duas primeiras baterias da tabela 4.6. Também aqui não faz sentido uma comparação quantitativa entre os resultados obtidos e aqueles colhidos por Shanno-Phua, pelas mesmas razões de antes. Ainda assim podemos constatar que estão consistentes com o que poderíamos esperar obter, tendo em vista os dados da tabela 4.1a. Dos dados registrados na tabela 4.8, podemos concluir para esta bateria de testes:

- i - PQS sem fase 1 falha no problema 14.2 e gasta muitas iterações em 13.3 e 14.1. O fenômeno que ocorre aí é análogo ao que aparece na tabela 4.2 na subseção §4.2.1, embora com menor intensidade. Ao colocarmos a fase 1 com SALVREST obtemos resultados satisfatórios para todos os problemas, inclusive estes. Deve-se ressaltar, no entanto, que do ponto de vista da robustez, nesta bateria de testes, PQS parece depender menos de SALVREST que CDR.

- ii – Igualmente ao que ocorria antes, em termos do número de iterações, qualitativamente parece haver um certo equilíbrio entre as tres opções. No entanto, do mesmo modo que antes, o custo das iterações para o algoritmo sem fase 1, deve ser consideravelmente maior, já que, nesta opção, se realizam bem mais iterações nas quais o passo horizontal é obtido de forma computacionalmente cara. O que nos parece importante chamar a atenção aqui, é a relativamente *baixa influência de um passo horizontal mais acurado no sentido de diminuir significativamente o número de iterações a ser dado*.

Fazemos questão de reiterar que entendemos estes dados *muito preliminares*, exclusivamente, como uma forma de trazer à tona esta discussão sobre possíveis vantagens e/ou desvantagens a se obter, caso obriguemos os iterandos de um algoritmo a caminharem “dinamicamente próximos” do conjunto factível. Para se poder dizer algo em bases mais sólidas, precisaríamos de muito mais elementos. Até porque, nos parece óbvio que andar próximo ao conjunto factível não deve ser a melhor opção em alguns casos, conforme já comentamos no item F1 da seção 2.1.1. Ainda assim, nossa intuição é que para algoritmos destinados a abordar MRI de forma abrangente, privilegiar andar *dinamicamente perto* do conjunto factível, tende a se confirmar como uma estratégia adequada, pelo menos entre os algoritmos que não usam penalização na função objetivo. Conforme já esboçamos anteriormente, a motivação para tal intuição corresponde a pensar que, *enquanto as restaurações não forem eficientes, passos de descida para o Lagrangeano muito acurados na direção tangente às restrições, frequentemente terão pouco significado enquanto aproximação da componente conexa de  $\mathcal{D}_{\nabla L}$  que interessa. Além disto, podem atrapalhar uma concentração de esforços, por vezes necessária, para se encontrar pontos nos quais passos na direção normal às restrições sejam eficientes, no sentido de promover uma aproximação do conjunto factível*.

Não nos arriscamos a comparar as implementações realizadas para CDR e PQS, já que suas performances não diferem globalmente de maneira suficientemente significativa, no que diz respeito ao número de iterações e de atualizações de matrizes jacobianas. Com relação às iterações “caras”, ou seja, àquelas que são realizadas com candidatos obtidos pelo algoritmo Moré-Sorensen, como minimizadores da quadrática, vale a mesma observação que fizemos acima em ii. Ou seja, PQS sem fase 1, igualmente precisará calcular muito mais minimizadores de modelos quadráticos do que CDR.

#### OBSERVAÇÃO 4.3.1 Divergência em PQS num problema com f própria

Chamamos a atenção para um fenômeno interessante acontecendo no problema 6.b da tabela 4.8, ao se usar fase 1 sem passo tangente (e com autoajuste), para definir um ponto inicial para PQS. Do ponto de vista de PQS, isto corresponde apenas a tomar um novo ponto inicial *controladamente próximo* ao conjunto factível para rodá-lo. O interessante é que, além disto, a função objetivo do problema 6 é própria, ou seja tem superfícies de nível compactas. Ainda assim, *aparentemente, os iterados estão escapando para infinito*. Ao que tudo indica, aproveitando o fato que o multiplicador de Lagrange, por alguma coincidência neste exemplo, acaba tornando o valor de  $\lambda^{(k)T} h(x^{(k)})$  muito negativo, a ponto de enganar a função de mérito. Note-se que a performance de CDR piora significativamente, neste caso, ao inicializarmos CDR no mesmo ponto gerado por uma tal fase 1. A convergência se dá em 32 iterações contra 14, quando se usa em CDR a outra estratégia para a fase 1, neste problema 6.b. Ou seja, o ponto inicial gerado por esta fase 1 parece ser mesmo mais difícil. CDR também encontra mais dificuldades neste problema, mas converge.

TABELA 4.7 - TESTA A CORREÇÃO DE SEGUNDA ORDEM NUM ALGORITMO PQS, VARIANDO O PARÂMETRO  $\sigma_{cor}$ :

Prob.	xo	$\sigma_{cor} = 0.$			$\sigma_{cor} = 0.003$			$\sigma_{cor} = 1.0$			$\sigma_{cor} = 100.$			$\sigma_{cor} = \infty$		
		itT	#h	sa	itT	#h	sa	itT	#h	sa	itT	#h	sa	itT	#h	sa
1	1	10	19	1	10	19	1	7	21	1	7	21	1	7	21	1
2	1	7	9	1	7	9	1	7	9	1	7	9	1	7	9	1
2	2	13	13	1	13	13	1	13	13	1	13	13	1	13	13	1
2	3	21	21	1	21	21	1	21	21	1	21	21	1	21	21	1
4	1	12	19	1	9	18	1	7	21	1	7	21	1	7	21	1
4	2	13	19	1	13	19	1	9	19	1	8	19	1	8	19	1
4	3	13	22	1	10	20	1	6	18	1	6	18	1	6	18	1
5	1	8	9	1	8	9	1	8	9	1	8	9	1	8	9	1
5	2	11	12	1	11	12	1	11	12	1	11	12	1	11	12	1
5	3	14	17	1	14	17	1	14	17	1	14	17	1	14	17	1
6	1	11	12	1	11	12	1	11	18	1	11	18	1	11	18	1
6	2	20	20	1	20	22	1	20	22	1	20	22	1	20	22	1
7	1	13	15	1	13	15	1	13	15	1	13	15	1	13	15	1
7	2	22	36	1	22	36	1	22	38	1	22	46	1	25	44	1
8	1	21	37	1	23	45	1	22	44	1	22	44	1	22	44	1
8	2	22	39	1	22	39	1	22	39	1	22	39	1	22	39	1
9	1	14	20	1	14	20	1	14	20	1	14	20	1	14	20	1
9	2	31	46	1	31	46	1	31	46	1	31	46	1	31	46	1
9	3	36	57	1	36	57	1	36	57	1	36	57	1	36	57	1
11	1	7	7	1	7	7	1	7	7	1	7	7	1	7	7	1
11	2	62	78	1	36	80	1	26	96	1	26	96	1	26	96	1
11	3	33	45	1	33	45	1	31	89	1	31	89	1	31	89	1
12	1	15	24	1	15	24	1	15	24	1	13	31	1	13	31	1
12	2	20	33	1	20	33	1	16	37	1	14	30	1	14	30	1
12	3	17	25	1	17	25	1	16	29	1	12	25	1	12	25	1
13	1	21	50	1	21	50	1	21	50	1	20	66	1	20	66	1
13	2	37	67	1	37	67	1	37	67	1	37	67	1	37	67	1
13	3	76	134	1	76	134	1	76	134	1	76	134	1	76	134	1
14	1	57	93	4	71	210	1	71	210	1	71	210	1	71	210	1
14	2	101	179	5	101	179	5	101	179	5	101	179	5	101	179	5

TABELA 4.8 - TESTA PQS SEM FASE 1, CONTRA PQS PRECEDIDO DE FASE 1:

Prob.	no	SEM FASE 1					SEM PASSO TANG. NA FASE 1					COM PASSO TANG. NA FASE 1				
		itT	itm	itQ	#h	sa	itT	itm	itQ	#h	sa	itT	itm	itQ	#h	sa
1	1	7	6	0	21	1	8	4	0	16	1	9	5	0	17	1
2	1	7	6	0	9	1	8	4	0	11	1	7	3	0	8	1
2	2	13	12	0	13	1	19	9	0	28	1	15	5	0	20	1
2	3	21	20	0	21	1	40	15	6	62	1	26	9	0	42	1
4	1	7	6	0	21	1	7	6	0	21	1	7	6	0	21	1
4	2	8	7	0	19	1	9	7	0	20	1	12	10	0	24	1
4	3	6	5	0	18	1	6	5	0	18	1	6	5	0	18	1
5	1	8	7	0	9	1	7	3	0	10	1	8	4	0	11	1
5	2	11	10	0	12	1	10	3	0	13	1	13	5	0	17	1
5	3	14	13	0	17	1	14	5	0	17	1	16	5	0	23	1
6	1	11	10	0	18	1	14	9	0	29	1	10	5	0	17	1
6	2	20	19	0	22	1	114	100	0	171	5	14	3	0	14	1
7	1	13	12	0	15	1	16	2	4	25	4	18	3	3	29	1
7	2	25	24	0	44	1	18	2	5	26	1	18	9	0	25	1
8	1	22	21	0	44	1	16	10	0	27	1	12	6	0	26	1
8	2	22	21	0	39	1	18	9	0	18	1	17	8	0	25	1
9	1	14	13	0	20	1	14	7	0	14	1	17	7	0	27	1
9	2	31	30	0	46	1	26	4	2	34	1	22	5	3	35	1
9	3	36	35	0	57	1	29	3	3	36	1	39	3	3	68	1
11	1	7	6	0	7	1	8	5	0	8	1	7	4	0	7	1
11	2	26	25	0	96	1	17	9	0	31	1	15	8	0	28	1
11	3	31	30	0	89	1	28	10	0	42	1	37	22	0	86	1
12	1	13	12	0	31	1	25	8	9	53	1	31	13	10	73	1
12	2	14	13	0	30	1	26	9	10	53	1	36	9	2	86	1
12	3	12	11	0	25	1	23	8	8	50	1	28	10	8	66	1
13	1	20	19	0	66	1	20	19	0	66	1	20	19	0	66	1
13	2	37	36	0	67	1	25	14	3	43	1	18	7	3	33	1
13	3	76	75	0	134	1	33	5	7	54	1	33	4	10	64	1
14	1	71	70	0	210	1	23	14	1	46	1	17	5	4	38	1
14	2	101	100	0	179	5	16	5	1	21	1	18	5	5	41	1

## 4.4 OS PROBLEMAS TESTADOS

Conforme comentamos na seção 4.3, um problema com a lista de Boggs-Tolle apresentada em [BT 89] são os erros, que julgamos de natureza tipográfica, nela existentes. Como lá estão registradas as soluções supostamente obtidas, é fácil constatar que nos problemas 4,5,6,9,10,11,12 e 13, da lista, as soluções apontadas não são pontos de KT dos correspondentes problemas. O problema maior com os erros da lista é que nos de números 5, 9 e 13, as sequências geradas divergem para  $\infty$ , e pouco acrescentam numa bateria de testes. Em 7 dos 8 problemas, pequenas variações em uma das restrições, produzem problemas, cujas soluções incluem as apontadas por Boggs-Tolle, com precisão nos cinco algarismos significativos por eles expostos. Além disto, dois destes problemas “corrigidos” fazem parte de outras listas, e um terceiro tem, no texto do artigo, indicações bastante precisas de qual deve ter sido o problema efetivamente testado. Como tudo indica que a lista efetivamente usada em [BT 89] e [SP 89] seja a lista com as correções, a adotamos também. Apresentamos a lista a seguir, com as soluções por nós encontradas até 5 algarismos, desde que significativos, na bateria de testes apresentada na tabela 4.4. Nos problemas 4,5,6 e 7 encontramos mais de uma solução. A primeira delas coincide com a solução editada em [BT 89]. Em seguida, explicitamos as correções que fizemos na lista em [BT 89], e aproveitamos para apresentar uma tabela rodada com 7 dos 8 problemas “errados”, conforme constam da lista editada em [BT 89]. Como não conseguimos resgatar o problema de número 12, ele fica de fora desta bateria, uma vez que já o rodamos nas nossas baterias de testes, tal qual está editado na lista em [BT 89], (provavelmente não corresponde ao mesmo problema rodado por Boggs e Tolle).

Pr.1 -  $n = 2; m = 1$

$$\begin{aligned} f(x) &= -x_1 + 10(x_1^2 + x_2^2 - 1) \\ h(x) &= x_1^2 + x_2^2 - 1 \end{aligned}$$

Ponto inicial:  $x_1 = 0.08, x_2 = 0.06$

Solução:  $x^* = (1.0000, 0.0000)$

Pr.2 -  $n = 3; m = 1$

$$\begin{aligned} f(x) &= (x_1 - 1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^4 \\ h(x) &= x_1(1 + x_2^2) + x_3^4 - 4 - 3\sqrt{2} \end{aligned}$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 1, \quad i = 1, 2, 3$$

$$2 - x_i = 10, \quad i = 1, 2, 3$$

$$3 - x_i = 100, \quad i = 1, 2, 3$$

Solução:  $x^* = (1.1049, 1.1967, 1.5353)$

Pr.3 -  $n = 5; m = 3$

$$\begin{aligned} f(x) &= (x_1 - x_2)^2 + (x_2 + x_3 - 2)^2 + (x_4 - 1)^2 + (x_5 - 1)^2 \\ h_1(x) &= x_1 + 3x_2 \\ h_2(x) &= x_3 + x_4 - 2x_5 \\ h_3(x) &= x_2 - x_5 \end{aligned}$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 2, \quad i = 1, \dots, 5$$

$$2 - x_i = 20, \quad i = 1, \dots, 5$$

$$3 - x_i = 200, \quad i = 1, \dots, 5$$

Solução:  $x^* = (-.76744, .25581, .62791, -.11628, .25581)$

Pr.4 -  $n = 3 ; m = 2$

$$f(x) = x_1 - x_2 + x_3^2$$

$$h_1(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 25$$

$$h_2(x) = x_1 + x_2 + x_3 - 1$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_1 = 3.1494, \quad x_2 = 1.4523, \quad x_3 = -3.6017$$

$$2 - x_1 = 3.122, \quad x_2 = 1.489, \quad x_3 = -3.611$$

$$3 - x_1 = -0.94562, \quad x_2 = -2.35984, \quad x_3 = 04.30546$$

Soluções:  $x^* = (4.0382, -2.9470, -.09115)$  e  $x^{**} = (-3.0332, 3.9744, .05877)$

Pr.5 -  $n = 3 ; m = 2$

$$f(x) = 1000 - x_1^2 - x_1x_2 - x_1x_3 - 2x_2^2 - x_3^2$$

$$h_1(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 25$$

$$h_2(x) = 8x_1 + 14x_2 + 7x_3 - 56$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 2, \quad i = 1, 2, 3$$

$$2 - x_i = 20, \quad i = 1, 2, 3$$

$$3 - x_i = 80, \quad i = 1, 2, 3$$

Soluções:  $x^* = (3.5121, .21699, 3.5522)$  e  $x^{**} = (.33200, 4.6776, -1.7347)$

Pr.6 -  $n = 5 ; m = 2$

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_3 - 1)^2 + (x_4 - 1)^4 + (x_5 - 1)^6$$

$$h_1(x) = x_4x_1^2 + \sin(x_4 - x_5) - \sqrt{8}$$

$$h_2(x) = x_2 + x_3^4 * x_4^2 - 8 - \sqrt{2}$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 2, \quad i = 1, \dots, 5$$

$$2 - x_i = 20, \quad i = 1, \dots, 5$$

Soluções:  $x^* = (1.1662, 1.1821, 1.3803, 1.5060, .61092)$  e

$$x^{**} = (1.0890, 1.1777, -1.2814, 1.7478, .891203)$$

Pr.7 -  $n = 5 ; m = 3$

$$f(x) = 100. * (x_1^2 - x_2)^2 + (1. - x_1)^2$$

$$h_1(x) = x_1x_2 - x_3^2 - 1.$$

$$h_2(x) = x_1 + x_2^2 - x_4^2$$

$$h_3(x) = x_1 + x_5^2 - .5$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_1 = -2, x_i = 1, i = 2, \dots, 5$$

$$2 - x_1 = -20, x_2 = 10, x_i = 1, i = 3, \dots, 5$$

$$\text{Soluções: } x^* = (-.79212, -1.2624, .00000, -.89532, 1.1367) \text{ e}$$

$$x^{**} = (.50000, 2.0000, 0.00000, \mp 2.1213, .00000)$$

Pr.8 -  $n = 5 ; m = 2$ 

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

$$h_1(x) = x_1 - x_4^2 - 1$$

$$h_2(x) = x_1^2 + x_2^2 - x_5^2 - 1$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_1 = 1, x_2 = 1, x_3 = 1, x_4 = 0, x_5 = 0$$

$$2 - x_1 = 7, x_2 = 7, x_3 = 7, x_4 = 0, x_5 = 0$$

$$\text{Solução: } x^* = (1.0000, .000, .00000, .00, .00000)$$

Pr.9 -  $n = 4 ; m = 2$ 

$$f(x) = -x_1$$

$$h_1(x) = x_2 - x_1^3 - x_3^2$$

$$h_2(x) = x_1^2 - x_2 - x_4^2$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 2, i = 1, \dots, 5$$

$$2 - x_i = 20, i = 1, \dots, 5$$

$$3 - x_i = 50, i = 1, \dots, 5$$

$$\text{Solução: } x^* = (1.0000, 1.0000, 0.00000, 0.00000)$$

Pr.10 -  $n = 2 ; m = 2$ 

$$f(x) = -x_1$$

$$h_1(x) = x_2 - x_1^3$$

$$h_2(x) = x_1^2 - x_2$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 2, i = 1, \dots, 5$$

$$2 - x_i = 20, i = 1, \dots, 5$$

$$3 - x_i = 50, i = 1, \dots, 5$$

$$\text{Solução: } x^* = (1.0000, -.00000)$$

Pr.11 -  $n = 5 ; m = 3$ 

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_2)^2 + (x_4 - x_3)^4 + (x_5 - x_4)^4$$

$$h_1(x) = x_1 + x_2^2 + x_3^3 - 2. - \sqrt{18}.$$

$$h_2(x) = x_2 - x_3^2 + x_4 + 2. - \sqrt{8}.$$

$$h_3(x) = x_1 x_5 - 2.$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 2, i = 1, \dots, 5$$

$$2 - x_i = 10, \quad i = 1, \dots, 5$$

$$3 - x_i = 50, \quad i = 1, \dots, 5$$

Solução:  $x^* = (1.1911, 1.3626, 1.4728, 1.6350, 1.6791)$

Pr.12 -  $n = 5 ; m = 3$

$$f(x) = .01x_1^2 + x_2^2$$

$$h_1(x) = x_1 + x_2 - x_3^2 - 25.$$

$$h_2(x) = x_1^2 + x_2^2 - x_4^2 - 25.$$

$$h_3(x) = x_1 - x_5^2 - 2$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 2, \quad i = 1, \dots, 5$$

$$2 - x_i = 1, \quad i = 1, \dots, 5$$

$$3 - x_i = 3, \quad i = 1, \dots, 5$$

Soluções:  $x^* = (24.752, .24753, .00000, \pm 24.243, 4.7700)$

Pr.13 -  $n = 5 ; m = 2$

$$f(x) = x_5$$

$$h(x) = x_1 + (x_1 - 2x_2)^2 + (x_2 - 3x_3)^2 + (x_3 - 4x_4)^2 - x_5$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_i = 1, \quad i = 1, \dots, 2, \quad x_5 = 228.$$

$$2 - x_i = 1, \quad i = 1, \dots, 2, \quad x_5 = -1.$$

$$3 - x_i = 1, \quad i = 1, \dots, 2, \quad x_5 = -100.$$

Solução:  $x^* = (0.00000, 0.00000, 0.00000, 0.00000, 0.00000)$

Pr.14 -  $n = 2 ; m = 2$

$$f(x) = x_2$$

$$h(x) = x_2 - 100(x_1 + x_2)^2$$

Pontos iniciais:

$$1 - x_1 = 1, \quad x_2 = -.15$$

$$2 - x_1 = -1, \quad x_2 = -2.$$

Solução:  $x^* = (0.00000, 0.00000)$

#### OBSERVAÇÃO 4.4.1 CORREÇÕES NA LISTA DE BOGGS-TOLLE

A seguir, apresentamos as correções feitas, com breves comentários. Frisamos que, em todos os casos, os pontos apontados como solução em [BT 89], não são pontos de KT dos problemas correspondentes, e que as correções feitas, reproduzem as soluções apontadas no artigo, como pontos de KT com precisão nos cinco algarismos lá editados.

Pr.4' -  $f(x) = x_1 - x_2 + x_3^2$ , em vez de  $x_1 - x_2 + x_2^2$  e  $h_1(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 25$ , em vez de  $x_1^2 + x_2^2 + x_3^3 - 25$ .

Pr.5' -  $h_1(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 25$  em vez de  $x_1^2 + x_2^2 - x_3^2 - 25$ .  
Como está no original, os iterandos divergem para  $\infty$ .

Pr.6' -  $h_2(x) = x_2 + x_3^4 * x_4^2 - 8 - \sqrt{2}$ , em vez de  $x_2 + x_3^4 * x_2^2 - 8 - \sqrt{2}$ .

O problema 6 que utilizamos, foi igualmente usado em [Bet 77], [Den 79] e [MRH 89]. Em [MRH 89] tem lá indicada a mesma solução  $x^*$ , que consta em Boggs-Tolle.

Pr.9' -  $h_2(x) = x_1^2 - x_2 - x_4^2$  em vez de  $x_1^2 + x_2 - x_4^2$ .

Na forma original, gera sequências cujos iterandos divergem para  $\infty$ . A correção feita, consta como sugestão no pacote de testes CUTE, de Conn-Gould-Toint.

Pr.10' -  $h_2(x) = x_1^2 - x_2$  em vez de  $x_1^2 + x_2$ .

Este é um problema onde  $m=n=2$ , e basicamente corresponde a procurar um ponto factível. Ele acaba discriminando muito pouco, na medida que, sendo nulo o passo horizontal, seus passos acabam usualmente coincidindo com o passo GN, apenas. Note-se que na tabela 4.1a, os 5 algoritmos testados têm performances praticamente idênticas, neste problema. O problema 10', editado em [BT 89], tem seus iterados convergindo para o ponto (0,0), que é singular, e sua performance igualmente não varia, para estratégias que testem inicialmente o passo GN, porém consome significativamente mais iterações de um algoritmo típico, do que as registradas na tabela de Shanno e Phua.

Pr.11' -  $h_3(x) = x_1x_5 - 2$  em vez de  $x_1 - x_5 - 2$ .

Na forma que apresentamos, consta de [MLC 71], [Bet 77], [Den 79] e [MRH 89]. Em [MRH 89], a solução apresentada também coincide com  $x^*$ .

Pr.13' -  $h(x) = x_1 + (x_1 - 2x_2)^2 + (x_2 - 3x_3)^2 + (x_3 - 4x_4)^2 - x_5$  em vez de  $x_1 + (x_1 - 2x_2)^2 + (x_2 - 3x_3)^2 + (x_3 - 4x_4)^2 - x_5^2$ .

O problema 13', com o termo  $-x_5^2$  como está no artigo, gera sequências divergindo para  $\infty$ . Ao comentar o problema, seus autores dizem que, para seus propósitos, ele é "interessante, porque equivale a um problema de minimização irrestrita de uma quadrática..." Esta observação, junto com a solução apresentada, praticamente impõe a correção feita.

Apresentamos, a seguir, uma tabela rodada com estes problemas, tal qual apresentados no artigo de Boggs-Tolle, com as mesmas condições iniciais que na tabela 4.4. Ou seja, na tabela 4.9 testamos prefixar  $\rho_{max}^{(0)}$  contra o método de autoajuste da mesma forma que na tabela 4.4, nos problemas "errados" 4',5',6',9',10',11',13'. Além dos principais dados registrados na tabela 4.4, nesta tabela monitoramos também a norma de  $x$  na iteração  $it$ , na qual o algoritmo pára, ou seja,  $\|x^{(it)}\|$ . Nos problemas 5',9' e 13', aparentemente as sequências geradas divergem para  $\infty$ , ou perdem a possibilidade de restaurar a factibilidade, em pontos relativamente bastante afastados da posição inicial. No problema 4', igualmente encontramos sequências que aparentam divergir para  $\infty$ , ao se prefixar  $\rho_{max}^{(0)} = 10^3$  e  $\rho_{max}^{(0)} = 10^5$ . Nos demais, essencialmente mantêm-se as observações anteriores. Observamos que nos problemas 5' e 13', há casos nos quais o algoritmo não consegue restaurar a factibilidade, nem com Salvrest, para iterandos  $x^{(k)}$  relativamente afastados de sua posição inicial. Neste casos, sempre podemos usar o recurso de voltar ao ponto inicial, diminuir significativamente  $\rho_{max}^{(0)}$ , e rodar de novo. Nos problemas 5' e 13', isto apenas nos daria mais segurança que de fato os iterados tendem a escapar para  $\infty$ , enquanto que se fizermos o mesmo, nos casos cujos iterados escapam do minimizador com norma  $\approx 4.9$ , no problema 4', isto nos daria convergência ao minimizador.

TABELA 4.9 - TESTA O MESMO QUE NA TABELA 4.4, USANDO A LISTA DE PROBLEMAS "ERRADOS".

Prob.	xo	$\rho_{\max}^{\circ} = .01$					$\rho_{\max}^{\circ} = 10$					$\rho_{\max}^{\circ} = 1000$					$\rho_{\max}^{\circ} = 100000$					$\rho_{\max}^{\circ}$ ajustado					$\rho_{\max}^{\circ}$
		AtA	itT	itm	its	$\ x^{(itT)}\ $	AtA	itT	itm	its	$\ x^{(itT)}\ $	AtA	itT	itm	its	$\ x^{(itT)}\ $	AtA	itT	itm	its	$\ x^{(itT)}\ $	AtA	itT	itm	its	$\ x^{(itT)}\ $	
4	1	12	11	4	0	.49E+01	9	9	4	0	.49E+01	102	101	100	0	.97E+04	104	101	100	0	.71E+04	10	10	4	0	.49E+01	.79E+01
4	2	11	10	3	0	.49E+01	9	8	3	0	.49E+01	102	101	100	0	.97E+04	104	101	100	0	.23E+04	9	9	3	0	.49E+01	.92E+01
4	3	30	30	25	0	.49E+01	11	9	6	0	.49E+01	10	8	7	0	.49E+01	11	9	8	0	.49E+01	12	10	6	0	.49E+01	.61E+02
5	1	105	105	100	0	.22E+04																					
5	2	106	106	100	0	.17E+04																					
5	3	106	106	100	0	.30E+05																					
6	1	16	16	10	0	.28E+01	14	13	10	0	.28E+01	14	13	12	0	.28E+01	15	14	13	0	.28E+01	15	15	10	0	.28E+01	.17E+02
6	2	44	44	30	0	.28E+01	29	29	18	0	.28E+01	25	25	18	0	.28E+01	26	25	22	0	.28E+01	30	30	17	0	.28E+01	.88E+01
9	1	105	105	100	0	.70E+02	103	102	100	0	.35E+04	101	101	100	0	.48E+05	101	101	100	0	.69E+06	106	104	100	0	.18E+04	.29E+01
9	2	109	109	100	0	.89E+02	108	107	100	0	.36E+04	105	104	100	0	.49E+05	104	101	100	0	.57E+04	108	108	100	0	.15E+05	.15E+03
9	3	111	111	100	0	.52E+02	110	109	100	0	.35E+04	108	107	100	0	.52E+05	104	102	100	0	.77E+06	110	110	100	0	.38E+05	.62E+03
10	1	12	7	0	0	.24E-02	12	2	0	0	.24E-02	12	1	0	0	.24E-02	12	1	0	0	.24E-02	12	12	0	0	.24E-02	.10E-01
10	2	17	13	0	0	.32E-02	17	7	0	0	.32E-02	17	4	0	0	.32E-02	17	1	0	0	.32E-02	17	17	0	0	.32E-02	.10E-01
10	3	20	15	0	0	.19E-02	20	10	0	0	.19E-02	20	6	0	0	.19E-02	20	2	0	0	.19E-02	20	20	0	0	.19E-02	.10E-01
11	1	10	9	5	0	.28E+01	8	6	4	0	.28E+01	9	7	6	0	.28E+01	10	10	9	0	.28E+01	9	9	5	0	.28E+01	.81E+01
11	2	32	31	20	0	.28E+01	17	14	7	0	.28E+01	16	13	11	0	.28E+01	17	13	12	0	.28E+01	19	18	7	0	.28E+01	.72E+00
11	3	94	93	73	0	.28E+01	32	29	10	0	.41E+01	26	23	12	0	.28E+01	18	14	11	0	.28E+01	40	32	12	0	.41E+01	.93E+01
13	1	105	105	100	0	.90E+01	104	104	100	0	.57E+06	104	103	100	0	.56E+07											
13	2	104	104	100	0	.18E+03	103	103	100	0	.43E+05																
13	3	105	105	100	0	.25E+03	104	104	100	0	.55E+04	103	103	100	0	.44E+06						103	103	100	0	.66E+07	.13E+05

Obs: Os testes nos quais itT > 100, a parada com norma de  $x^{(k)}$  relativamente grande sugere divergência para  $\infty$ . Em alguns dos testes rodados com os problemas 5 e 13, o algoritmo não consegue mais restaurar em pontos nos quais a norma de  $x^{(k)}$  igualmente já se encontra relativamente grande. Ou seja, o algoritmo morre num loop em Salvrest. Correspondem aos testes sem explicitação de dados de saída nas tabelas acima.

## Capítulo 5

# MRIC E CONCLUSÕES

Este capítulo final se destina a resumir o que fizemos neste trabalho, e quais seriam seus principais desdobramentos. A primeira seção está dedicada a uma questão central para o desdobramento desta tese. Trata-se da introdução de restrições de desigualdades, sem as quais qualquer método de minimização com restrições perde muito na prática. Para simplificar a exposição, as introduziremos na forma de restrições de canalização. Por um lado, sempre é possível usar variáveis de folga, para tratar um problema geral de minimização com restrições de desigualdade (MRD), como um problema de minimização com restrições de igualdade e de canalização (MRIC). Acreditamos ainda, ser possível enunciar o método num formato MRD, mas deixaremos isto para um outro momento. Na seção §5.1, apenas situaremos o problema, apresentando, em linhas bem gerais, as idéias que conduzem à formulação de dois algoritmos para atacar MRIC. Eles generalizam, de forma natural, as características presentes em CDR. No apêndice à tese, detalharemos um deles. Na segunda seção deste capítulo apresentamos um resumo do que se fez, as principais conclusões a que chegamos, bem como possíveis desdobramentos deste trabalho.

### 5.1 MRIC

Não apresentaremos nesta tese um algoritmo para desigualdades minimamente testado, no qual possamos apostar com mais segurança. Nossas convicções são sobretudo teóricas e heurísticas. Neste sentido, esta seção tem um caráter essencialmente introdutório, e seu principal objetivo consiste em situar o problema de generalizar CDR, de forma a incluir restrições de canalização, bem como apontar, em linhas bem gerais, duas possibilidades de fazê-lo. Remetemos, para um apêndice da tese, a descrição formal de uma delas.

Como nossas restrições de desigualdade se apresentam na forma de canalizações, elas definem a *caixa*

$$\Omega = \{x : l_i \leq x_i \leq u_i, i = 1, \dots, n\} \quad (5.1)$$

Fixamos  $\Omega$  com dimensão  $n$  ( $l_i < u_i$  para todo  $i$ ), porém permitimos  $l_i = -\infty$ , ou  $u_i = \infty$ , em (5.1). Consideremos o problema MRIC, definido numa vizinhança de uma tal  $\Omega$  por

$$\text{Minimizar } f(x), \text{ sujeito a } h(x) = 0 \text{ e } x \in \Omega \quad \text{MRIC}$$

Começamos com algumas definições básicas:

**DEFINIÇÃO** Resíduos das Canalizações  $r_i$ :

Para cada  $1 \leq i \leq 2n$ ,  $r_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  é dado por:

$$r_i(x) = \begin{cases} x_i - \ell_i, & \text{se } 1 \leq i \leq n \\ u_{(i-n)} - x_{(i-n)}, & \text{se } n < i \leq 2n \end{cases}$$

Veja que  $x \in \Omega$  sss  $r_i(x) \geq 0$ , para todo  $1 \leq i \leq 2n$ .

**DEFINIÇÃO** - Restrições Laterais  $h_{\mathcal{I}}$ , Conjunto  $h_{\mathcal{I}}$ -Factível  $R_{\mathcal{I}}$ :

A cada  $\mathcal{I} = \{i_1 < i_2 < \dots < i_s\} \subset \{1, \dots, 2n\}$ , podemos associar  $h_{\mathcal{I}} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{m+s}$  e  $R_{\mathcal{I}} \subset \Omega$ , dados por:

$$\begin{aligned} h_{\mathcal{I}}(x) &= (h(x), r_{i_1}(x), \dots, r_{i_s}(x)) \text{ e} \\ R_{\mathcal{I}} &= \{x \in \Omega : h_{\mathcal{I}}(x) = 0\} = \{x \in \bar{F}_{\mathcal{I}} : h(x) = 0\} \end{aligned}$$

Observe que se  $i$  e  $i+n$  estão em  $\mathcal{I}$ , então  $R_{\mathcal{I}} = \emptyset$ , para qualquer  $h$ . Diremos que  $\mathcal{I}$  é consistente, caso isto não ocorra. Convencionamos ainda, que todos os subconjuntos de índices tratados nesta tese são consistentes.

Usualmente definimos uma face aberta de  $\Omega$ , em função de algum conjunto consistente de índices,  $\mathcal{I}$ , por

$$F_{\mathcal{I}} = \{x \in \Omega : r_i(x) = 0, \text{ se } i \in \mathcal{I}; \quad r_i(x) > 0, \text{ caso contrário}\}$$

Denotamos ainda por  $[F_{\mathcal{I}}]$ , à menor variedade linear que contem  $F_{\mathcal{I}}$ .  $L_{\mathcal{I}}$  denota o subespaço vetorial paralelo a  $[F_{\mathcal{I}}]$ .  $\bar{F}_{\mathcal{I}}$  representa uma face fechada de  $\Omega$ .

Coerentemente com a abordagem MRIC, consideraremos  $\|\cdot\|$  como a norma  $\|\cdot\|_{\infty}$ . Para  $x \in \mathbb{R}^n$ , denotaremos por  $B_{\Delta}(x)$  à bola

$$\{x' : \|x' - x\| < \Delta\} = \{x : |x'_i - x_i| < \Delta, \quad i = 1, 2, \dots, n\}$$

Sempre que  $K \subset \mathbb{R}^n$  for um conjunto convexo fechado,  $P_K : \mathbb{R}^n \rightarrow K$  denotará a projeção usual sobre  $K$ , ou seja:

$$P_K(x) = \operatorname{argmin}\{\|x - x'\|_2 : x' \in K\} \quad (5.2)$$

Suponhamos que  $x^*$  seja uma solução de MRIC, com restrições ativas  $\mathcal{A}^* = \{i : r_i(x^*) = 0\}$ . Note que, neste caso,  $x^*$  também será solução do problema sem canalizações:

$$\text{Minimize } f(x) \text{ s.a. } h_{\mathcal{A}^*}(x) = 0 \quad (5.3)$$

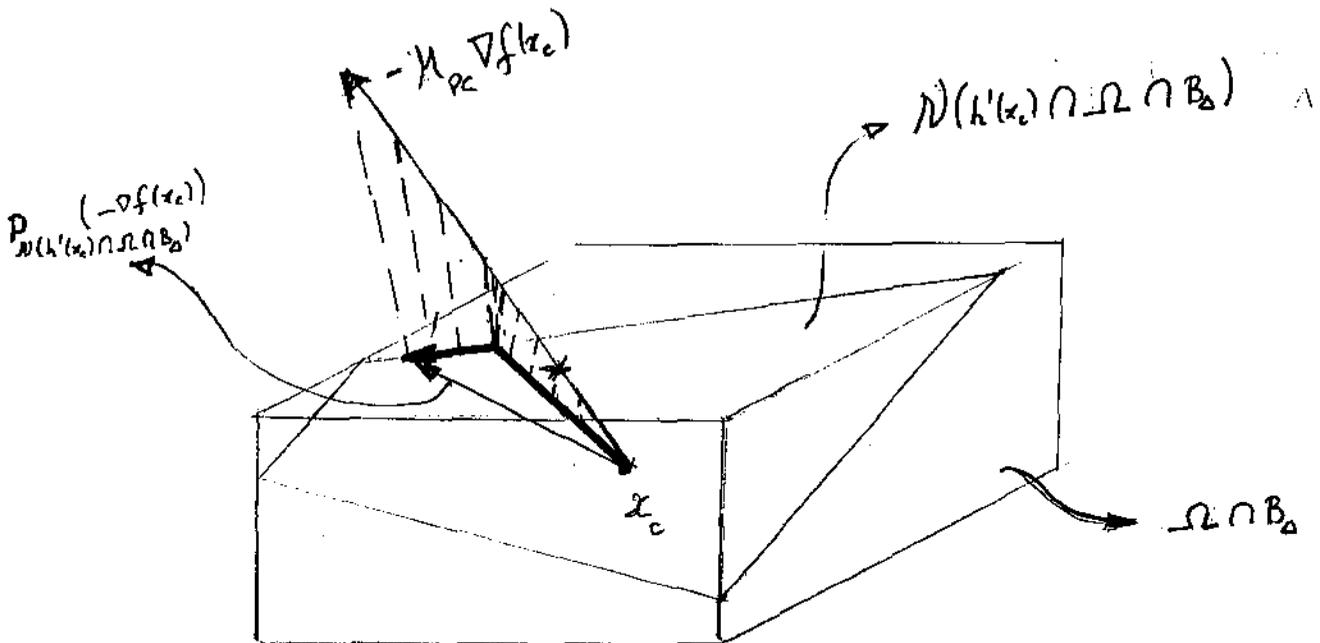
A idéia para resolver MRIC, é usar um algoritmo hábil para identificar restrições ativas  $\mathcal{A}^*$ , em alguma solução  $x^*$  de MRI, de forma que, nas iterações finais, se esteja resolvendo (5.3) com CDR. Em linhas gerais, pensamos em algoritmos para MRIC cujos iterados se mantenham dentro de  $\Omega$ , e que imitem o procedimento adotado para resolver MRI, no sentido que cada iteração típica se constitua de:

- i – Na primeira parte da iteração encontra-se um ponto  $x_c$  e um “raio”  $\rho_c$ , para o *cilindro de confiança*, de tal forma que  $\|h(x_c)\| < \rho_c = O(\rho_{\max} n_{\text{Cau}})$ .  $\rho_{\max}$  teria, aqui, um papel análogo ao que desempenha em CDR, sendo reduzido sempre que algo indicasse estarmos “perigosamente” afastados do conjunto factível  $\mathcal{H}_0$ .  $n_{\text{Cau}}$  representa o controle dinâmico, e será explicitado no momento oportuno.
- ii – Obtem-se em  $x_c$ , um modelo quadrático  $q(\delta)$  para o passo “horizontal”, como aproximação de algum lagrangeano da  $f$  em  $x_c$ , e um raio  $\Delta$  para a região de confiança correspondente.
- iii – Define-se um *Passo de Cauchy Generalizado*  $\delta_{\text{PC}}$ , no sentido de proporcionar uma “descida suficiente” para  $q(\delta)$ , em  $x_c$ .
- iv – Fixa-se um *Conjunto de Trabalho* consistente  $\mathcal{W} \in \{1, 2, \dots, 2n\}$ , correspondente a algumas das restrições ativas em  $x_c + \delta_{\text{PC}}$ , e procura-se um *passo candidato*  $x_+ = x_c + \delta_+$ , de forma a manter ativas as restrições associadas a  $\mathcal{W}$ , bem como a garantir, para  $q(\delta_+)$ , uma redução de, pelo menos, uma fração prefixada da descida  $q(\delta_{\text{PC}})$ . Em particular,  $x_+$  pode ser procurado com qualquer algoritmo que reduza  $q(\delta_{\text{PC}} + \cdot)$  em  $\bar{F}_{\mathcal{W}} \cap \mathcal{N}(A)$ , e dentro da região de confiança considerada.
- v – Testa-se  $x_+$ , de forma a garantir  $\|h(x_+)\| < 2\rho_c$  e, para multiplicadores de Lagrange adequadamente escolhidos, que o Lagrangeano igualmente desça, entre  $x_+$  e  $x_c$ , mais que alguma fração de  $q(\delta_+)$ .

As diferenças conceituais importantes entre procedimentos que satisfaçam (i – v), correspondem à atualização de  $\rho_c$  em cada iteração, bem como às definições do conjunto de trabalho  $\mathcal{W}$  e do passo de Cauchy generalizado  $\delta_{\text{PC}}$ . Apontamos aí, duas possibilidades:

Em linhas bem gerais, na primeira delas poderíamos manter  $\rho_c = \rho_{\max}$ , até que se identifiquem bons candidatos a restrições ativas na solução. Começamos a segunda parte de uma iteração típica com  $\|h(x_c)\| < \rho_c$ , definindo  $\delta_{\text{PC}}$  como o primeiro ponto de mínimo, sobre a poligonal obtida pela projeção de  $-\nabla f(x_c)$  no politopo  $\mathcal{N}(h'(x_c)) \cap \Omega \cap B_{\Delta}$ . O conjunto de trabalho  $\mathcal{W}$  seria, neste caso, o conjunto das restrições ativas em  $x_c + \delta_{\text{PC}}$ . A partir do momento que o conjunto de trabalho  $\mathcal{W}$  estabiliza, passa-se a definir o passo horizontal restrito a  $F_{\mathcal{W}}$ , com CDR. Na figura abaixo, ilustramos um passo de Cauchy típico, obtido desta maneira. Como estamos suprimindo o fator dinâmico da definição de  $\rho$ , enquanto o conjunto de trabalho não estabiliza, a primeira parte da iteração se escreveria de forma relativamente simples, usando uma restauração que poderia ser feita com técnicas standard para reduzir  $\|h(x)\|$  em  $\Omega$ , ou talvez numa de suas faces fechadas  $\bar{F}_{\mathcal{W}}$ , e que garantam *passos de tamanho controlado* para a restauração, no sentido de (2.8). Uma alternativa para introduzir o controle dinâmico um pouco antes, corresponderia a forçar  $\rho = O(\rho_{\max} \|\delta_{\text{PC}}\|)$ , a partir do momento no qual a região de confiança ficasse inativa. Acreditamos que seja perfeitamente possível detalhar um procedimento com estas características, e que conserve as boas propriedades teóricas obtidas para CDR. A projeção de  $-\nabla f(x_c)$  no politopo  $\Omega$  parece ser reconhecida como um “bom identificador de restrições ativas” na solução, no sentido de [CM 87], [CGT 88], [BM 88] e [MT 89]. É de se esperar que o mesmo aconteça no caso MRIC. A idéia de se definir um passo com busca linear, na direção do gradiente projetado em  $\Omega$ , surgiu, primeiramente, no contexto de minimização com restrições de desigualdade convexas (vide [Gol 64], [LP 66], [Ber 76]). Em [CGT 88], a projeção de  $-\nabla f(x_c)$  em  $\Omega$  é usada num método com região de confiança para MRC, com o objetivo de definir um passo de Cauchy que, *essencialmente, garanta descida*

suficiente ao passo candidato, definido de maneira análoga à que fizemos acima. Em [GMM 95, ALG 6.1], encontramos num algoritmo PQS para MRIC, com região de confiança, uma generalização do passo horizontal utilizado em [CGT 88], resultando num passo de Cauchy como o que descrevemos acima.



Passo de Cauchy sobre a poligonal  $P_{N(h'(x_c) \cap \Omega \cap B_\Delta)}(-\nabla f(x_c))$

Uma segunda possibilidade corresponde a uma estratégia para a definição de  $\mathcal{W}$  e do *passo de Cauchy (generalizado)*, que nos parece conceitualmente mais adequada ao controle dinâmico da factibilidade, conforme o organizamos em CDR para MRI. No apêndice faremos uma descrição detalhada de um algoritmo para MRIC nesta outra concepção, e indicaremos sucintamente como se estendem, para MRIC, resultados teóricos obtidos anteriormente para MRI. Afim de situá-lo em linhas gerais, começamos descrevendo como ele funciona no caso MRC, ou seja, apenas com restrições de canalização. A idéia aqui, é começar a segunda parte de uma iteração típica num ponto  $x_c$  admitindo *folgas de tamanho  $\rho$*  para as restrições ativas, dentro das quais consideramos  $\rho$ -ativas as restrições para as quais  $r_i(x) \leq \rho$ . Na verdade, isto corresponde a uma ligeira modificação no ponto iv do programa (i-v), correspondente a flexibilizar a exigência de  $\mathcal{W}$  ser um conjunto de trabalho formado por restrições ativas em  $x_c + \delta_+$ , de modo a permitir que elas sejam apenas  $\rho$ -ativas. Formalmente definimos as restrições  $\rho$ -ativas em  $x_c \in \Omega$  por

$$\mathcal{A}(x_c, \rho) = \{i : r_i(x) \leq \rho\} \tag{5.4}$$

Observe que se  $\rho < \frac{1}{2} \min\{u_i - l_i, i = 1, 2, \dots, n\}$  então  $\mathcal{A}(x_c, \rho)$  é consistente.

O objetivo é escolher o passo de Cauchy (generalizado), desprezando a região de  $\Omega$  que fica “atrás” de  $x_c$ , relativamente às restrições  $\rho$ -ativas. Isto nos motiva a definir um cone de Cauchy associado a um subconjunto consistente de índices  $\mathcal{A}$ , como

$$C_{\mathcal{A}}(x_c) = \{v : r_i(x_c + \mu v) \geq r_i(x), \text{ para algum } \mu \geq 0 \text{ e todo } i \in \mathcal{A}\} \quad (5.5)$$

Veja ainda que, dar um passo de Cauchy numa direção em  $C_{\mathcal{A}}(x_c)$ , corresponde a “desprezar” os pontos de  $\Omega$  “entre”  $x_c$  e as faces  $F_i$ , para cada restrição  $i$  que seja  $\rho$ -ativa (vide ilustração na figura a seguir).

Para cada  $x_c \in \Omega$  e  $\mathcal{A}$  consistente, podemos definir:

- Projeção de  $-\nabla f(x_c)$  no cone de Cauchy relativo a  $\mathcal{A}$ , em  $x_c$ .

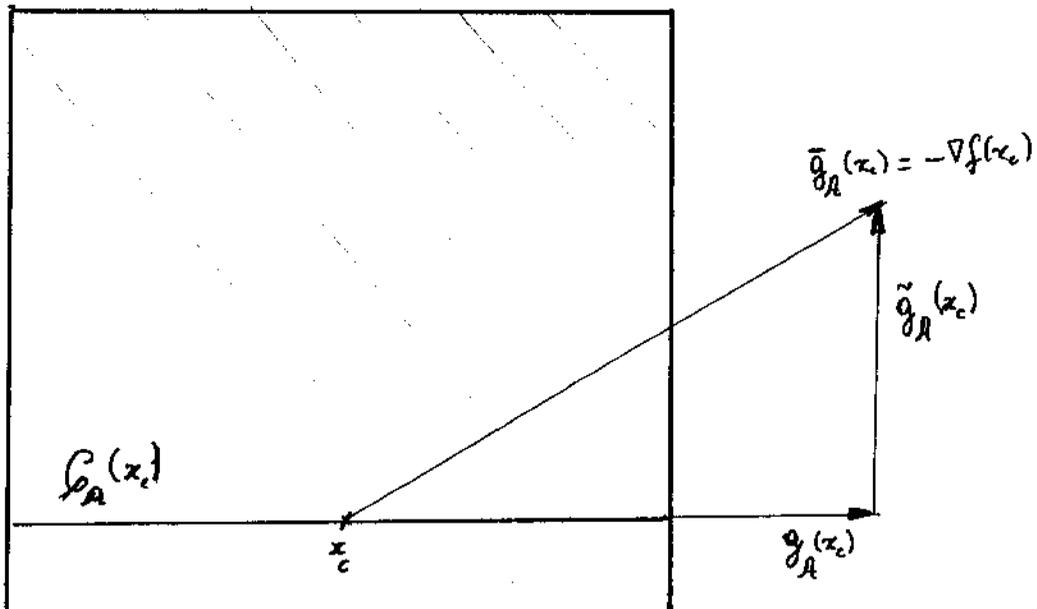
$$\bar{g}_{\mathcal{A}}(x_c) = P_{C_{\mathcal{A}}(x_c)}(-\nabla f(x_c)) \quad (5.6)$$

- Projeção ortogonal de  $-\nabla f(x_c)$  em  $L_{\mathcal{A}}$ .

$$g_{\mathcal{A}}(x_c) = P_{L_{\mathcal{A}}}(-\nabla f(x_c)) \quad (5.7)$$

- Projeção ortogonal de  $\bar{g}_{\mathcal{A}}(x_c)$  na direção normal a  $L_{\mathcal{A}}$ , ou seja, aponta para dentro de  $C_{\mathcal{A}}(x_c)$  numa direção ortogonal a  $L_{\mathcal{A}}$ . Em [FM 89],  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)$  recebeu o nome de “chopped gradient”.

$$\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c) = \bar{g}_{\mathcal{A}}(x_c) - g_{\mathcal{A}}(x_c) \quad (5.8)$$



Exemplo de decomposição  $\bar{g}_{\mathcal{A}}(x_c) = \tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c) + g_{\mathcal{A}}(x_c)$  para MRC em  $R^2$ , com  $\mathcal{A}(x_c, \rho) = \{2\}$ .

Nosso objetivo, caso  $\|\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)\| \ll \|g_{\mathcal{A}}(x_c)\|$ , é manter ativas as restrições em  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_c, \rho)$ , ou seja, deixar  $\mathcal{A}(x_c, \rho)$  contido no conjunto de trabalho  $\mathcal{W}$ , e fazer

$$g_{\text{PC}} = g_{\mathcal{A}}(x_c), \quad (5.9)$$

Caso contrário, relaxamos algumas das restrições  $\rho$ -ativas em  $x_c$ , de forma a poder dar o passo de Cauchy na direção “chopada”, ou seja, fazemos

$$g_{\text{PC}} = \tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c). \quad (5.10)$$

Note-se que a condição para  $x^* \in \Omega$  ser um ponto de KT, com restrições ativas indexadas em  $\mathcal{A}^*$ , é :

$$\tilde{g}_{\mathcal{A}^*}(x) = 0 \quad (5.11)$$

(5.11) nos indica amarrar o controle dinâmico na forma

$$\rho \approx \rho_{\max} \|\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x)\| / (\|g(x)\| + 1) \quad (5.12)$$

Neste caso, a restauração seria muito simples, e corresponderia a um passo na direção ortogonal a  $L_{\mathcal{W}}$ , vale dizer, na forma  $\theta x + (1 - \theta)P_{\bar{F}_{\mathcal{W}}}(x)$ .

A idéia de utilizar um método de restrições ativas, cuja direção de Cauchy (generalizada) e a definição do conjunto de trabalho se baseiam na relação  $\|\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)\|/\|g_{\mathcal{A}}(x_c)\|$  de forma análoga a que definimos acima, se encontra em [FM 89], [FM 94], [BFGMR 95] e [Dos 95], num contexto de programação quadrática em caixas. Uma abordagem para MRC em geral, se encontra numa versão preliminar, num trabalho esboçado em colaboração com J. M. Martinez e S. A. Santos.

A idéia de flexibilizar as restrições ativas com um parâmetro  $\rho$  se inspira em [Ber 82, §1.5]. No livro de Bertsekas,  $\rho$  é apresentado como uma variável “tipicamente pequena”, cujo tamanho se altera dinamicamente de forma análoga à que propusemos acima. O objetivo explicitado por Bertsekas corresponde a evitar descontinuidades no conjunto das restrições ativas, que se produzem na passagem de uma sequência de iterandos no interior de uma das faces, a um ponto limite na sua fronteira. Com  $\rho > 0$ ,  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x)$ , bem como suas componentes  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x)$  e  $g_{\mathcal{A}}(x)$ , ficam contínuas em  $F_{\mathcal{A}}$ , diferentemente do que ocorre no caso  $\rho = 0$ . No nosso caso, uma tal estratégia nos facilita tratar as restrições laterais como envolvidas em cilindros de confiança laterais. No caso MRIC, podemos pensar que temos os conjuntos  $h_{\mathcal{A}}$ -factíveis envolvidos em *cilindros de confiança laterais de raio  $\rho$* , e que a segunda parte de cada iteração começa com  $x_c$  num destes cilindros laterais

$$\mathcal{C}_{\mathcal{A}} = \{x : \|h_{\mathcal{A}}(x)\| < \rho\}, \quad (5.13)$$

correspondente às restrições  $\rho$ -ativas  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_c, \rho)$ . Inclue-se aí  $\mathcal{A} = \emptyset$ , para dar conta da situação na qual não há restrições  $\rho$ -ativas.

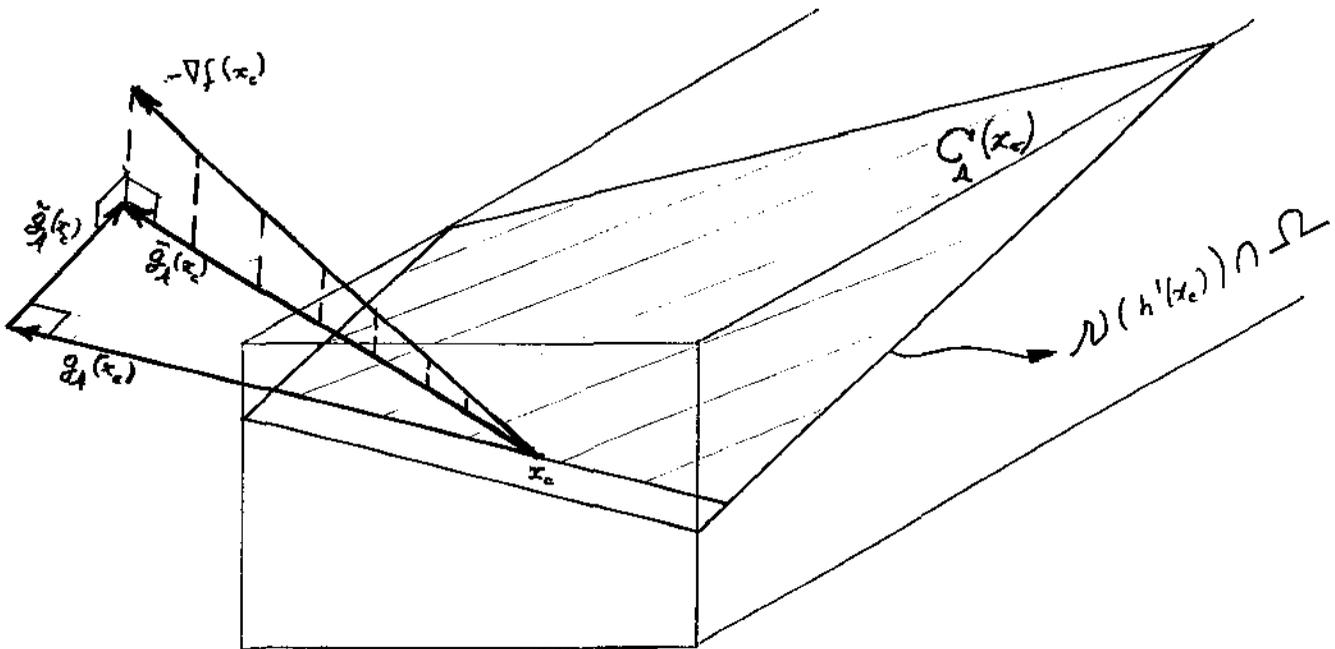
O passo Horizontal, neste caso, deve estar no espaço tangente às restrições de igualdade  $\mathcal{N}(h'(x_c))$ . Sua descrição se dá exatamente como em MRC, desde que redefinamos o cone de Cauchy, substituindo (5.5) por

$$C_{\mathcal{A}}(x_c) \leftarrow C_{\mathcal{A}} \cap \mathcal{N}(h'(x_c)) \quad (5.14)$$

A projeção de  $-\nabla f(x_c)$  no novo cone de Cauchy se escreve com a mesma fórmula (5.6) anterior, significando aqui a projeção no cone anterior, restrito a  $\mathcal{N}(h'(x_c))$ . Se substituirmos  $L_{\mathcal{A}}$  por  $L_{\mathcal{A}}(x_c) = L_{\mathcal{A}} \cap \mathcal{N}(h'(x_c))$ , podemos redefinir a projeção  $g_{\mathcal{A}}(x_c)$  como

$$g_{\mathcal{A}}(x_c) = P_{L_{\mathcal{A}}(x_c)}(-\nabla f(x_c)) \quad (5.15)$$

Analogamente, ao redefinirmos  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)$  com a mesma fórmula (5.8), obtemos uma decomposição de  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)$  em componentes tangente e normal às restrições  $\rho$ -ativas, como enxergadas dentro do espaço tangente às restrições de igualdade. Com isto podemos decidir o passo de Cauchy e o conjunto de trabalho, em função de  $\|\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)\|/\|g_{\mathcal{A}}(x_c)\|$ , da mesma forma que para MRC. Abaixo esboçamos o cone  $C_{\mathcal{A}}(x_c)$  e a decomposição proposta, num exemplo onde  $m=1$ ,  $n=3$ , e  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_c, \rho)$  corresponde a duas restrições ativas.



Exemplo da decomposição  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c) = \tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c) + g_{\mathcal{A}}(x_c)$  para MRIC.

A caracterização de um ponto de KT para MRIC se generaliza com a mesma fórmula (5.11). Portanto, nada mais razoável que manter a fórmula (5.12) para  $\rho$ , também em MRIC. Essencialmente, a garantia de descida suficiente em cada passo nos será proporcionada por (5.12), desde que  $\rho_{max}$  não convirja a zero.

Algumas diferenças importantes entre as versões para MRC e MRIC seriam

- i – Há algumas questões delicadas na definição de  $\rho$ , bem como na atualização de  $\rho_{max}$ , relativas a compatibilizar as restrições de canalização com as de igualdade. Dizem respeito à possibilidade de termos que restaurar  $R_{\mathcal{A}} = \{x : h_{\mathcal{A}}(x) = 0\}$  numa situação na qual  $x$  não é um ponto regular de  $h_{\mathcal{A}}$ . Por exemplo, não podemos permitir que o número de restrições  $\rho$ -ativas em  $x_c$  supere  $n - m$ . Se isto acontecer para  $\rho$  bem pequeno, temos aí uma boa indicação de pontos singulares de  $h_{\mathcal{A}}$  no conjunto factível  $\mathcal{H}_0$ . Deixamos para discutir este tipo de questões junto com a apresentação formal do algoritmo, a ser feita no apêndice.
- ii – Conceitualmente a definição do passo candidato proposto para MRIC é a mesma que para MRC. No entanto, no caso MRC,  $\bar{g}_{\mathcal{A}}$  é trivial de ser obtido, enquanto que no caso MRIC corresponde a resolver um subproblema de programação quadrática convexa, com canalizações. Veremos, no apêndice, que frequentemente será suficiente resolvê-lo apenas num sentido aproximado. O custo computacional da projeção  $g_{\mathcal{A}}(x)$  no problema MRIC corresponde ao de calcular  $gp(x)$ , grosso modo.

## 5.2 CONCLUSÕES E DESDOBRAMENTOS

Esta seção está organizada em duas subseções. Na primeira resumimos os pontos principais deste trabalho. Na segunda apontamos os desdobramentos que consideramos mais relevantes, do ponto de vista de sua continuidade.

### 5.2.1 CONCLUSÕES

Nosso ponto de partida para este trabalho, está na percepção estabelecida na introdução, segundo a qual, grosso modo os algoritmos para resolver MRI se dividem em algoritmos de pontos factíveis, algoritmos de pontos duais (penalização) e PQS. Observamos ainda que, nos algoritmos que usam penalização na função objetivo, a aproximação da variedade dual é usualmente estabelecida de uma forma apenas aproximada, enquanto que para algoritmos de pontos factíveis, a possibilidade de se flexibilizar a factibilidade dos iterandos tem sido relativamente pouco explorada. Nossa meta principal se concentrou nesta possibilidade, com a expectativa de obter procedimentos cujo sabor seja o dos algoritmos de pontos factíveis, mas admitindo uma flexibilização da factibilidade de natureza dinâmica, ou seja, a depender da aproximação da variedade dual  $\mathcal{D}_{\nabla L} = \{x : \nabla L(x, \lambda) = 0, \text{ para algum } \lambda \in \mathbb{R}^m\}$ . Para tanto, apresentamos no capítulo 2, um algoritmo para MRI, incluindo uma versão na qual todos os subproblemas possam ser resolvidos de forma “inexata”, ou seja, sem fatorações de matrizes. Ainda no capítulo 2 nos preocupamos em estabelecer cuidadosamente hipóteses que nos parecem “razoáveis” para MRI, dentro das quais pudemos estabelecer a *boa definição* dos procedimentos propostos, bem como uma teoria de convergência global.

No capítulo 3 apresentamos uma teoria de convergência local para nosso algoritmo, baseada na exploração de uma estrutura local que estabelecemos para bons minimizadores. Tal estrutura, exposta na seção 3.1, nos parece ser de algum interesse em si mesma e conta com um forte apelo visual. Nossa abordagem para a convergência de CDRIN consistiu em estabelecer, *gradativamente*, hipóteses sobre a implementação que nos parecem razoáveis, e de forma a garantir que as sequências geradas pelo algoritmo admitam:

- i – Convergência de alguma subsequência gerada a um ponto de KT (capítulo 2).
- ii – Convergência de todas as subsequências geradas a pontos de KT (capítulo 2).
- iii – Convergência local e linear em  $p$  passos a bons minimizadores (§3.2).
- iv – Convergência local e superlinear em dois passos a bons minimizadores (§3.3).
- v – Convergência local e superlinear em um só passo a bons minimizadores (§3.4).

Na seção 3.3, além da convergência superlinear em dois passos, estabelecemos uma relação entre CDRIN e PQS *inexato*, que nos permite indicar a “importação” de métodos secantes estabelecidos para PQS. Na seção §3.4, apresentamos uma outra abordagem para a teoria de convergência local, com um modelo ALGLOC para as iterações finais de CDR num caso bem sucedido, que nos permitiu a obtenção de resultados mais finos sobre taxas de convergência, do que a convergência superlinear em dois passos a bons minimizadores estabelecida na seção 3.3. Em particular, estabelecemos condições para convergência superlinear num só passo de  $\{x^{(k)}\}$  a bons minimizadores de MRI, muito embora não se deva esperar o mesmo de  $\{x_c^{(k)}\}$ .

No capítulo 4 realizamos testes numéricos, que qualificamos de preliminares, com uma implementação de CDR. Dividimos a execução do algoritmo em duas fases. Na primeira se procura um cilindro de *confiança inicial*, e um  $x^{(0)}$  nele contido, após o que se inicia o algoritmo CDR verdadeiramente. Testando com 14 problemas, e diferentes pontos iniciais para cada um, 13 dos quais advindos de uma lista explorada em [BT 89] e [SP 89], obtivemos:

- i – A definição de um mecanismo de autoajuste para encontrar o tamanho do cilindro de *confiança inicial*, baseado na eficácia do método de Gauss-Newton para resolver localmente o problema de encontrar pontos factíveis. Nos testes numéricos tal mecanismo se revelou eficaz e, num certo sentido, essencialmente independente da escala na qual se escreve  $\|h(x)\|$ .
- ii – Que a correção de segunda ordem tem um papel a desempenhar, na medida que permite valores relativamente reduzidos de  $\rho_{max}$ , sem maiores limitações à eficiência do algoritmo.
- iii – A necessidade de salvaguardas para situações nas quais a restauração fique muito ineficiente. Em compensação, todos os problemas da lista são resolvidos ao adotá-la. Verificamos ainda que alguns dos problemas da lista não são resolvidos por alguns dos algoritmos PQS testados por Shanno e Phua em [SP 89], bem como pelo algoritmo PQS que implementamos, provavelmente também por dificuldades em se aproximar do conjunto factível.
- iv – O mecanismo empregado, para propor que restaurações pudessem ser realizadas com dados da iteração anterior, foi eficaz no sentido de economizar atualizações e fatorações de matrizes. No caso de se usar o mecanismo de autoajuste para definir  $\rho_{max}^{(0)}$ , o custo adicional devido ao cálculo de mais de uma matriz jacobiana por iteração mostrou-se desprezível.
- v – Ao testar diferentes estratégias para a fase inicial, verificamos que um passo mais acurado na direção Horizontal não parece reduzir sensivelmente o número de iterações realizadas, porém encarece bastante cada uma das iterações. O mesmo observamos na implementação do algoritmo PQS que realizamos. Com isto, temos condições de colocar em questão o sentido de se dar passos “computacionalmente caros” na direção tangente às restrições, relativamente longe do conjunto factível.

- vi – Acreditamos que os dados numéricos analisados nos testes nos parecem promissores, embora muito incipientes ainda para permitir algum prognóstico mais seguro a cerca da competitividade do método, com relação a outros métodos disponíveis.

Finalmente apresentamos no apêndice um algoritmo que generaliza naturalmente CDR para uma situação na qual contamos também com restrições de canalização. Tal algoritmo não chegou a ser testado, mas acreditamos saber provar que, no essencial, as propriedades teóricas válidas para CDR em MRI, continuam válidas na generalização feita para MRIC, sob condições naturais de se exigir em MRIC.

## 5.2.2 DESDOBRAMENTOS

Apresentamos nesta subseção alguns possíveis desdobramentos deste trabalho que nos parecem interessantes, agrupados nos itens D1-D4. Acreditamos que a tarefa mais importante, neste momento, corresponda a realizar uma implementação competitiva do algoritmo e testá-la com relação a outros algoritmos disponíveis. Até mesmo de um ponto de vista teórico, esta tarefa nos parece importante. Acreditamos que avançar, um pouco que seja, na compreensão de qual a melhor forma de se trabalhar ao inicializar um algoritmo relativamente longe da factibilidade, nos parece uma questão *teórica* relevante. Dito de um outro ângulo, nos parece relevante entender *se alguma forma de “medir a distância” ao conjunto factível como a que nos seria dada pelo eficiência do passo Gauss-Newton para  $\|h(x)\|^2$ , é, ou não, um parâmetro importante a ser levado em conta numa programação para MRI*. No entanto, o passo a ser dado no momento para abordar tal questão nos parece ser de natureza essencialmente empírica, e consiste na comparação cuidadosa e exaustiva de diferentes estratégias para atacar MRI ou MRIC, através da realização de testes numéricos.

### D1 - Tarefa Principal

Elencamos 4 passos a serem realizados, pela ordem, caso bem sucedidos.

- D1.1 – Testar o algoritmo MRIC e consolidá-lo. Acreditamos que sem incluir restrições de desigualdade o método perde muito de um ponto de vista prático.
- D1.2 – Tentar uma implementação competitiva para o método e testá-la num grande número de problemas, inclusive com “muitas” variáveis e restrições. Em particular consideramos importante comparar implementações feitas com o algoritmo inexato e outras que utilizem fatorações de matrizes usando técnicas de esparsidade, testando ainda métodos secantes para atualização da aproximação hessiana em cada iteração na fase final.
- D1.3 – Comparar cuidadosamente diferentes algoritmos, numa bateria representativa de testes com “muitas” variáveis e restrições.
- D1.4 – Se os resultados obtidos em (D1.1-D1.3) forem favoráveis, o passo natural a seguir é a disponibilização de um software com o método.

D2 – Sobre a restauração e a fase inicial

Tres tipos de questões se colocam aqui:

- D2.1 – Pode-se pensar que a fase inicial é a fase da restauração, por excelência. Falta esclarecer qual a melhor estratégia a se adotar após cada passo Vertical, na fase inicial do algoritmo. Em particular, nota-se que em alguns problemas MRI, a direção  $(-gp(x_c))$  parece corresponder a boas direções de descida para  $\|h(x)\|^2$  em  $x_c$ , enquanto que em outros é o contrário. Será possível explorar isto adequadamente?
- D2.2 – Na versão 1 de REST (vide §2.2.1), admitimos a possibilidade de não precisar atualizar a matriz jacobiana a cada passo da restauração, enquanto a restauração se processe de forma eficiente com dados da iteração anterior. Em alguns testes preliminares não ficou muito claro para nós se é possível realizá-lo de maneira eficiente. Esta questão permanece.
- D2.3 – Qual a melhor estratégia para salvaguardar a restauração? Em particular esta questão corresponde a tentar entender melhor características do conjunto crítico não factível de  $\|h(x)\|^2$  que permitam “driblá-lo”. Igualmente, achamos importante entender melhor o que faz com que algoritmos típicos de restauração por vezes fiquem tão vagarosos, mesmo longe de pontos críticos não factíveis de  $\|h(x)\|^2$ . No exemplo 2.1 descrevemos a lentidão do método Gauss-Newton relativamente longe do conjunto factível, de forma associada à atração que os iterandos pareciam sofrer por pontos de curvatura alta nas superfícies de nível e próximos da variedade dual. Será este um exemplo típico e o ponto de vista generalizável? Caso seja, haverá alguma alternativa razoável à que adotamos, ao obrigarmos os iterandos a andarem mais próximos da factibilidade? Tentar mexer na escala das variáveis independentes, seria uma possibilidade generalizável aí?

D3 – Relaxando a exigência de regularidade no conjunto factível

Confessamos não ter pesquisado o suficiente na literatura, para saber o que se tem feito teoricamente a respeito de relaxar a exigência de regularidade no conjunto factível. A impressão que temos é a de ser uma questão, cuja abordagem nos trabalhos de otimização publicados se dá de forma essencialmente empírica, quando muito. Como tratar, teórica e praticamente, o relaxamento na exigência de regularidade do conjunto factível, nos parece ser uma questão difícil e relevante.

D4 – Atualização secante

Para simplificar, situemos a questão num contexto de minimização sem restrições. No fundo, é lá que questões como a que colocaremos se resolve, ou não. Na observação 3.3.6 esboçamos uma possibilidade de estratégia quasi-Newton e atualização secante em CDR, com algumas salvaguardas para:

- B1 – Direções muito mal condicionadas da aproximação hessiana reduzida, mas que tivessem alguma chance de manter as *características fortemente autoreguladoras* do método secante, conforme a compreensão lá explicitada em (3.241).
- B2 – Crescimento excessivo da aproximação hessiana, em norma.

A questão que se coloca é saber se isto funciona, teoricamente. Em particular, suponhamos que as direções dos passos candidatos sejam obtidos com este tipo de estratégia, e as buscas lineares se façam garantindo condições para que a fórmula BFGS sempre gere matrizes positivo-definidas. Por exemplo, as condições de Wolfe. Nossa expectativa é que, neste caso, se a sequência gerada convergir para um bom minimizador então, *sob condições razoáveis, as salvaguardas fiquem inativas suficientemente perto de  $x^*$* . Como impusemos aproximações hessianas coercivamente positivo-definidas, a convergência a um bom minimizador nos garantiria convergência R-linear. O teorema 3.216 nos diria então que tal convergência seria superlinear, desde que as salvaguardas ficassem assintoticamente inativas.

# Apêndice A

## CDR para MRIC

No procedimento formulado no capítulo 2 para resolver MRI, praticamente separamos cada iteração em duas partes. Concentramos em CDR as tarefas da segunda, na qual se produzia um candidato a passo horizontal, que era em seguida submetido a um teste. XCOR era apresentado como uma espécie de mediador, a definir o momento no qual podemos parar de procurar a factibilidade com REST, e passamos a CDR para obter o passo horizontal. Suas principais tarefas poderiam ser descritas por:

XCOR.i – Obter  $x_c$  e  $\rho_c \approx \rho_{max}gp(x_c)$ , de tal forma que  $\|h(x_c)\| < \rho_c$ . O principal ingrediente aqui, é a restauração escrita em REST, se  $\|h(x_c)\| > \rho_c$ .

XCOR.ii – Atualizar os dados em  $x_c$ , entre os quais destacamos  $A = h'(x_c)$  e a direção de Cauchy  $gp(x_c)$ .

O mesmo acontecerá no algoritmo para MRIC. Concentraremos em XCORC a primeira parte, e em CDR a segunda. O programa (i - v) da seção §5.1 já indica que deve haver muito pouca diferença formal entre as descrições de CDR para MRI e para MRIC. Como veremos adiante as novidades na formulação para MRIC se concentram em XCORC. Registraremos a seguir uma descrição completa de CDR para MRIC, apenas para facilitar a leitura, na medida que as diferenças formais de redação com relação à anterior são bem pequenas. Essencialmente correspondem às menções ao conjunto de trabalho  $W$  definido em XCORC e ao uso de opções para desigualdades no procedimento DS (vide §1.4),

A  $k$ -ésima iteração de CDR para MRI dispunha inicialmente de  $\rho_{tol}$ ,  $\varepsilon_{tol}$ ,  $x^{(k)}$ ,  $\lambda^{(k-1)}$ ,  $\rho_c$ ,  $\rho_{max}$ ,  $L_c$ ,  $\Delta L_H$ ,  $A_c$ ,  $\Delta_{min}$ , e  $\Delta$ . A  $k$ -ésima iteração de CDR para MRIC disporá destas mesmas variáveis, essencialmente com os mesmos significados descritos em §2.3, adaptados para MRIC. Disporá ainda de informações sobre o conjunto de trabalho  $W$  da iteração anterior:

**Passo 1.** Atualização de  $x_c$ ,  $\rho_c$ ,  $\rho_{max}$  e do modelo quadrático associado:

a) Obtenha  $x_c$ ,  $\rho_c$ ,  $A_c$ ,  $g_c$ ,  $g_{PC}$  aplicando XCORC a  $x^{(k)}$ ,  $\rho_c$ ,  $\rho_{max}$ ,  $A_c$ ,  $\rho_{tol}$ ,  $\varepsilon_{tol}$  e  $W$ .

Se XCORC retornou no Passo 2, pare, aceitando  $x_c$  como solução

b) Escolha uma matriz simétrica  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  e considere:

$$q(\delta) = g_c^T \delta + \frac{1}{2} \delta^T B \delta \quad (\text{A.1})$$

**Passo 2.** Definição do ponto candidato  $x_+$

- a) Ache  $\delta_t$  e  $\mathcal{W}$ , aplicando DS a  $(x_c, q, g_{\text{PC}}, \Delta, A_c, \Omega, \rho_c)$  e escolha  $\lambda_+ \in \mathbb{R}^m$ . \*
- b) Escolha  $\delta_{\text{soc}} = h'_{\mathcal{W}}(x_c)^T \mu_{\text{soc}}$ , tal que  $x_+ = x_c + \delta_t + \delta_{\text{soc}} \in \Omega$ .

**Passo 3.** Testando  $x_+$ :

Faça

$$\Delta L_H = L(x_+, \lambda_+) - L(x_c, \lambda_+) \quad (\text{A.2})$$

$$r = \frac{\Delta L_H}{q(\delta_t)} \quad (\text{A.3})$$

Se

$$\|h(x_+)\| > 2\rho_c \text{ ou } r < 10^{-4} \quad (\text{A.4})$$

Então faça  $\Delta \leftarrow \Delta/2$  e vá para o Passo 2.a.

**Passo 4.** Atualização

Faça  $\Delta L_V^- = L(x_c, \lambda_+) - L(x^{(k)}, \lambda^{(k-1)})$

a) Se

$$\Delta L_V^- \geq \frac{1}{2} (L_c^- - L(x^{(k)}, \lambda^{(k-1)})) \quad (\text{A.5})$$

então faça  $\rho_{\text{max}} \leftarrow \rho_{\text{max}}/2$ ,

b) Se

$$\Delta L_V^- > -\frac{1}{2} \Delta L_H^- \quad (\text{A.6})$$

então faça  $L_c^- \leftarrow L(x_c, \lambda_+)$ .

c) Faça  $k \leftarrow k + 1$ ;  $x^{(k)} \leftarrow x_+$ ;  $\lambda^{(k)} \leftarrow \lambda_+$ ;  $\Delta L_H^- \leftarrow \Delta L_H$

d) Escolha  $\Delta \geq \Delta_{\text{min}}$  e vá para o Passo 1.

As novidades no procedimento para MRIC se concentram em XCORC. Contudo, ele continua se caracterizando como o “gerente” da transição entre a primeira parte e a segunda

\*\*\*\* Na prática, poderemos estar trabalhando em XCORC com fatorações de  $h'_{\mathcal{A}_c}(x_c)$ , que serão igualmente úteis para a obtenção de  $\delta_t$  com DS, no caso em que  $g_{\text{PC}} = g_{\mathcal{A}_c}$  e  $\mathcal{W} = \mathcal{A}_c$ , ou mesmo  $\mathcal{W} \supset \mathcal{A}_c$ . No caso de se ter  $g_{\text{PC}} = \tilde{g}_{\mathcal{A}}$ , talvez seja razoável tomar o passo em DS como o próprio  $g_{\text{PC}}$ .

do algoritmo, de forma análoga ao que acontecia anteriormente. Ainda podemos situar o esquema geral de XCORC no formato XCOR.i–XCOR.ii acima, mas agora temos que considerar também:

XCORC.1 – A direção de Cauchy (generalizada)  $g_{PC}$ , não é mais tão simples de calcular quanto  $gp(x_c)$ . Como apontamos na §5.1, será  $g_{\mathcal{A}}(x_c)$  ou  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)$ , conforme a relação  $\|g_{\mathcal{A}}(x_c)\|/\|\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x_c)\|$ . Em particular dependerá das restrições  $\rho$ -ativas  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_c, \rho_c)$ , (que podem inclusive variar com  $\rho$ ).

XCORC.2 – REST e a forma de calcular  $\rho$  se generalizam, embora de maneira natural no contexto que apresentamos. Uma complicação que pode surgir em MRIC e não existia em MRI, é relativa à compatibilização das restrições  $\rho$ -ativas com as de igualdade em função de  $\rho$ . Isto pode ocorrer caso o algoritmo tente restaurar a restrição lateral  $\mathcal{R}_{\mathcal{A}(x,\rho)}$ , num ponto  $x$  para o qual  $h_{\mathcal{A}(x,\rho)}(x)$  seja singular.

### OBSERVAÇÃO A.0.1 HIPÓTESES PARA CDR NA NOVA VERSÃO

De forma a facilitar o entendimento, situaremos já neste momento tres hipóteses simplificadoras a serem assumidas com as quais se poderá garantir *boa definição* a CDR, também nesta versão para MRIC, bem como resultados de convergência global a pontos de KT satisfatórios.

HC – Hipótese de Compacidade *Para simplificar, suporemos  $\Omega$  compacta, ou seja  $-\infty < l_i$  e  $u_i < \infty$ , para todo  $i = 1, 2, \dots, n$ .*

HR – Hipótese sobre a Regularidade de  $\mathcal{H}_0$   *$\mathcal{H}_0$  é regular no sentido apontado em [MS 95, §12.6], ou seja,  $h'_{\mathcal{A}}$  tem linhas linearmente independentes em pontos factíveis de  $F_{\mathcal{A}}$ , para todo  $\mathcal{A}$ . Equivalentemente, poderíamos exigir que, para todo subconjunto de índices  $\mathcal{A}$ , 0 seja valor regular da restrição de  $h$  a  $F_{\mathcal{A}}$ .*

HF – Hipótese sobre a Factibilidade *É possível encontrar um ponto factível para o problema.*

Simplificamos um pouco as hipóteses sob as quais vamos discutir CDR para MRIC, no sentido de nos fixarmos em descrever apenas uma situação relevante na qual garantidamente CDR gere seqüências se acumulando em pontos de KT. HC é de fato uma hipótese simplificadora. No entanto acreditamos facilitar o entendimento, e os argumentos acabam sendo conceitualmente os mesmos necessários para dar conta de uma outra formulação, possivelmente mais abrangente e na linha da que foi feita no capítulo 2. HR é a hipótese mais delicada de se assumir mas, pelo menos teóricamente, temos uma cobertura, essencialmente garantida pelo teorema de Sard. Ou seja, *genericamente HR se verifica no conjunto das funções de classe  $C^r$ , onde  $r > n - m$  (vide [soto 76], [Hir 76]).* HF é uma hipótese facilmente verificável em muitas situações relevantes (por exemplo, se o ponto inicial for factível), e óbvia de se assumir, se desejamos garantir a acumulação dos iterandos em pontos de KT para MRIC.

Passamos a descrever a restauração proposta para ajudar a resolver MRIC:

REST<sub>A</sub>

Frequentemente desejaremos, não apenas restaurar  $h(x) = 0$  s.a.  $x \in \Omega$ , mas também  $h_{\mathcal{A}}(x) = 0$  s.a.  $x \in \Omega$ . Lembramos que numa restauração de  $x$  a  $x_c$  realizada com REST no contexto para MRI, não bastava reduzir significativamente o valor de  $\|h(x)\|$ . Era igualmente *essencial obter  $x_c$  "controladamente próximo" de  $x$* . Esta proximidade buscada se expressou na relação (2.8), qual seja,  $\|x - x_c\| = O(\|h(x_c)\|)$ . O que se pode observar nos resultados do capítulo 2, é que qualquer outro algoritmo de restauração que garantisse (2.8), sempre que fosse bem sucedido em obter  $\|h(x_c)\| < \rho_c$ , garantiria para CDR os mesmos resultados teóricos de convergência. †

Aproveitando esta observação, definimos REST<sub>A</sub>( $x, \rho$ ) como qualquer algoritmo para reduzir  $h_{\mathcal{A}}(x)$  em  $\Omega$ , tal que, para algum  $\psi > 0$ , gere uma das duas alternativas :

i -  $x_c \in \Omega$  satisfazendo

$$\|h_{\mathcal{A}}(x_c)\| < \rho \quad (\text{A.7})$$

$$\|x_c - x\| \leq \psi \|h(x)\| \quad (\text{A.8})$$

ii - Uma seqüência de pontos em  $\Omega$ , se acumulando em pontos de KT não factíveis para o problema MRC, definido por

$$\text{minimizar } \|h_{\mathcal{A}}(x)\|^2 \text{ s.a. } x \in \Omega. \quad (\text{A.9})$$

Denotaremos por REST a REST <sub>$\emptyset$</sub> , isto é, à restauração relativa a  $h(x) = 0$  s. a.  $x \in \Omega$ .

Algumas alternativas interessantes para REST<sub>A</sub> seriam:

- REST.i - Os passos candidatos serem testados com buscas unidimensionais, inicialmente sobre a poligonal obtida pela projeção em  $\Omega$  da semireta saindo de  $x$  e na direção Gauss-Newton para  $\|h_{\mathcal{A}}(x)\|^2$ , vale dizer,  $P_{\Omega}(x - \mu h'_{\mathcal{A}}(x)h(x))$ . Em caso de  $\mu$  ficar muito reduzido, acionaríamos como salvaguarda a direção do gradiente, ou seja, a busca linear prosseguiria em  $P_{\Omega}(x - \mu h'_{\mathcal{A}}{}^T(x)h(x))$ .
- REST.ii - Usar CDR para MRC, com o cuidado de garantir para os candidatos  $x_+ = x + \delta_+$ , uma restrição do tipo  $\|\delta_+\| = O(\|h(x)\|)$ .
- REST.iii - Dar um passo inicial visando exclusivamente se aproximar de  $\bar{F}_{\mathcal{A}}$ , ou seja, obter inicialmente  $\tilde{x} = \theta x + (1 - \theta)P_{\bar{F}_{\mathcal{A}}}$ , para algum  $\theta$  e só depois usar algum procedimento como os descritos em REST.i e REST.ii, para reduzir  $\|h(x)\|$  na caixa  $(\{\tilde{x}\} + L_{\mathcal{A}}) \cap \Omega$
- REST.iv - Dar um passo inicial visando obter  $\tilde{x}$ , unicamente com o objetivo de reduzir  $h(x)$  em  $\Omega$  usando uma estratégia como em REST.i ou REST.ii, e depois completá-lo com um passo em  $\mathcal{N}(h'(\tilde{x}))$  cujo objetivo seja apenas a restauração de  $\bar{F}_{\mathcal{A}}$  sem abandonar  $\{\tilde{x}\} + \mathcal{N}(h'(\tilde{x}))$ .

†No caso para MRI, nos pareceu interessante a possibilidade de não atualizar  $h'(x_c)$  entre duas restaurações (corresponde ao parâmetro  $\theta_{max}$ , introduzido na versão 1 de REST - vide §2.2.2 ). No caso MRIC não vamos considerar esta possibilidade, embora mantenhamos a opção de poder realizar a primeira restauração em XCORC com os dados da iteração anterior. Isto simplificará consideravelmente a exposição.

## XCORC

Como já apontamos anteriormente, analogamente a XCOR, XCORC igualmente gerenciará  $REST_{\mathcal{A}}$ , com o objetivo de garantir  $x_c$  e  $\rho$  tais que  $\|h(x_c)\| < \rho \approx \rho_{max}\|\bar{g}_{\mathcal{A}}\|$ , bem como calcular as variáveis necessárias para executar uma iteração típica de CDR. Seu formato acompanha o de XCOR, com pequenas alterações destinadas a acomodar as novas tarefas descritas em (XCORC.1-XCORC.2). Em XCOR, os comandos correspondentes a P1.ii e P1.iii estavam em P3.i e P3.ii. Esta modificação é apenas para facilitar a leitura e deixar em P3 exclusivamente a tarefa de atualizar a direção de Cauchy  $g_{PC}$ . No último passo, inscreveremos uma salvaguarda para situações nas quais a restauração a  $h_{\mathcal{A}}(x) = 0$  fique muito ineficiente, introduzindo, inclusive, a possibilidade de redução de  $\rho_{max}$  também em XCORC. Este ponto será comentado adiante.

Além das informações sobre as funções envolvidas, quando chamado na  $k$ -ésima iteração de CDR, XCORC disporá inicialmente de  $x = x^{(k)}$ ,  $\mathcal{W} = \mathcal{W}^{(k-1)}$ ,  $\rho = \rho^{(k-1)}$ ,  $\rho_{max} = \rho_{max}^{(k)}$ ,  $h = h(x^{(k)})$ ,  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_c^{k-1}, \rho_c^{(k-1)})$ ,  $A = h'(x_c^{(k-1)})$  e dos parâmetros de tolerância para convergência  $\rho_{tol}$  e  $\varepsilon_{tol}$ . Podemos descrever uma iteração típica de XCORC por:

### P0 – INICIALIZAÇÃO

- i – Faça  $\mathcal{A} \leftarrow \mathcal{A}(x, \rho)$
- ii – Opte entre restaurar em P4 com os dados da iteração anterior, ou seguir para P1.

### P1 – ATUALIZAÇÃO DOS DADOS

- i – Faça  $A \leftarrow h'(x)$  e  $g \leftarrow -\nabla f(x)$
- ii – Escolha  $n_{Cau} \in \left[ .1 \frac{\bar{g}_{\mathcal{A}}(x)}{\|g\| + 1}, \frac{\bar{g}_{\mathcal{A}}(x)}{\|g\| + 1} \right]$
- iii – Faça  $\beta_{\rho} = \min\{10^3 n_{Cau} \rho_{max}, \rho_{max}/2\}$  e escolha  $\rho \in [10^{-3} n_{Cau} \rho_{max}, \beta_{\rho}]$
- iv – Se  $\mathcal{A}(x, \rho) - \mathcal{A}_c = \emptyset$ , faça  $\mathcal{A} \leftarrow \mathcal{A}(x, \rho)$  e volte para P1.ii.
- v – Faça  $h_{\mathcal{A}} \leftarrow h_{\mathcal{A}}(x)$

### P2 – TESTANDO A CONVERGÊNCIA DO ALGORITMO PRINCIPAL

Se  $\|h_{\mathcal{A}}\| \leq \rho_{tol}$  e  $n_{Cau} \leq \varepsilon_{tol}$ , retorne

Se  $\|h_{\mathcal{A}}\| \geq \rho_{tol}$  e  $n_{Cau} \leq \varepsilon_{tol}$ , vá para P4

### P3 – RETORNO TÍPICO

Se  $\|h_{\mathcal{A}}\| \leq \rho$  então

- a – Se  $\|g_{\mathcal{A}}(x)\| \geq .99\|\bar{g}_{\mathcal{A}}(x)\|$ , faça  $g_{PC} = g_{\mathcal{A}}(x)$  e RETORNE.

b – Se  $\|g_{\mathcal{A}}(x)\| < .99\|\bar{g}_{\mathcal{A}}(x)\|$ , faça  $g_{\text{PC}} = \bar{g}_{\mathcal{A}}(x)$  e RETORNE .

#### P4 – RESTAURANDO

i – Escolha  $\bar{\rho} \in [10^{-3}\|h(x)\|, \|h(x)\|/2]$

ii – Aplique  $\text{REST}_{\mathcal{A}}$  para obter  $x$ , de forma que  $\|h_{\mathcal{A}}(x)\| < \bar{\rho}$ .

iii – Salvaguarda caso  $\text{REST}_{\mathcal{A}}$  fique ineficiente

Caso  $\text{REST}_{\mathcal{A}}$  não seja bem sucedido, obtenha novo  $x \in \Omega$  tal que  $\|h(x)\| < \bar{\rho}$ , faça  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x, \bar{\rho})$  e reduza  $\rho_{\text{max}}$  a menos da sua metade.

iv Vá para P1.

### OBSERVAÇÃO A.0.2 SOBRE XCORC

Em MRI, XCOR precisava “casar” factibilidade com controle dinâmico, obtendo  $x_c$  tal que  $\|h(x_c)\| < \rho = O(\rho_{\text{max}}\|gp(x_c)\|)$ . Em XCORC, precisamos fazer o mesmo substituindo  $gp(x_c)$  por  $\bar{g}_{\mathcal{A}(x_c, \rho)}(x_c)$ . Deste modo, a definição de  $\rho$  passa a depender também das restrições  $\rho$ -ativas em  $x_c$ . Uma preocupação importante com relação a restauração em CDR, era a de não gastar atualizações da matriz jacobiana com restaurações. Em XCORC, cada atualização de  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_c, \rho)$  corresponde a reavaliar  $\bar{g}_{\mathcal{A}}(x_c)$ , ainda que de forma inexata. Nossa expectativa aqui é de poder implementar nosso método com as mesmas preocupações de antes, e de forma a não ter que alterar  $\mathcal{A}$  numa mesma iteração de XCORC, com poucas exceções. A forma como XCORC opera para definir  $\rho$ ,  $x_c$  e  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_c, \rho)$  corresponde a:

i – Em P0 faz-se uma primeira avaliação de  $\mathcal{A}$ . Definimos  $\mathcal{A}$ , como  $\mathcal{A}(x_c, \rho)$  com o  $\rho$  da iteração anterior, para poder garantir o conjunto de trabalho da iteração anterior dentro de  $\mathcal{A}$ , mas se poderia pensar em outras possibilidades para inicializar  $\mathcal{A}$ .

ii– Ao iniciar P1 se dispõe de um candidato a  $\mathcal{A}$ . Com base nele se atualiza  $\rho$ . Destacamos duas possibilidades aí:

ii.a –  $\mathcal{A}(x, \rho) - \mathcal{A} = \emptyset$

Neste caso  $\rho$  cresceu com relação ao seu valor anterior. Esta situação é indesejável, pois poderia corresponder a algum  $i \in \mathcal{A}(x_c, \rho) - \mathcal{A}$  para o qual a projeção de  $-\nabla f(x)$  em  $F_{\mathcal{A}} \cap \mathcal{N}(h'(x))$  tivesse uma componente relativamente grande apontando no sentido de  $F^{(i)}$ , mas para o qual  $r_i(x) < \rho$  fosse relativamente pequeno. Isto corresponderia a uma situação na qual a restrição  $i$  seria uma boa candidata a restrição ativa, e poderia conduzir a “passos de Cauchy” muito curtos. Nossa solução de refazer  $\mathcal{A}$  nestes casos se justifica por aí . Além disto, veja que depois de atualizarmos  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x, \rho)$  em P1.iv,  $\|g_{\mathcal{A}}(x)\|$  tende a diminuir, se acrescentamos restrições, ou a variar pouco, em caso de restauração. Deste modo, na prática, não precisaríamos voltar a mexer em  $\mathcal{A}$ , nesta iteração, a não ser após o uso da salvaguarda em P.4.iii. Como estamos apostando em não ter que usar a salvaguarda com frequência, e há uma certa flexibilidade na definição de  $\rho$  em P1.iii, P1.iv vai redefinir  $\mathcal{A}$  mais ou menos vezes, a depender da inicialização em P0. Vale dizer, basicamente, de como se implementará o passo em DS na iteração anterior.

ii.b –  $\mathcal{A}(x, \rho) \subset \mathcal{A}$

Também aqui há duas situações. Se  $\|h_{\mathcal{A}}(x)\| < \rho$ , P3 indica o retorno. Caso contrário haverá necessidade de restauração.

### OBSERVAÇÃO A.0.3 SOBRE A RESTAURAÇÃO

- i – A salvaguarda proposta em P4.iii pressupõe que eventuais ineficiências em  $\text{REST}_{\mathcal{A}}$ , possam ser resolvidas por procedimentos que relaxem a exigência (A.8). A estratégia de reduzir  $\rho_{max}$ , e recomeçar de qualquer ponto num cilindro de confiança de raio significativamente menor, formalmente se justifica pelas hipóteses HC, HR e HF. Observe que, ao assumir HF, garantimos que diminuindo  $\rho$  sempre poderemos obter pontos de  $\Omega$  correspondentemente próximos de  $\mathcal{H}_0$ , mesmo que não seja com um método de restauração satisfazendo (A.8). Como a aceitação de cada passo em CDR implica na sua permanência dentro de um cilindro de confiança de raio no máximo  $2\rho$ , P0.i, P1.iii, a salvaguarda P4.iii de XCORC, HR e HC nos garantem então que num conjunto finito de iterações, todas as restaurações se processarão em pontos regulares de algum  $h_{\mathcal{A}}$ , já que estamos garantindo  $\mathcal{A} \subset \mathcal{A}(x_c, \rho_{max})$  sempre. No caso onde  $\#\mathcal{A} + m > n$ , é possível saber, já em P0.i que obteremos as linhas de  $h'_{\mathcal{A}}$  linearmente dependentes. Dado que assumimos HR, isto significa  $\rho_{max}$  “perigosamente grande”. Numa implementação concreta, sequer seria necessário executar P1.ii–P3 e P4.ii. Uma restauração para  $h(x) = 0$ , com redução de  $\rho_{max}$ , possivelmente seria aconselhável logo depois de P1.i, caso atualizemos  $h'(x)$  para a restauração, e a partir de P0.i se não atualizamos a jacobiana.
- ii – Uma alternativa para a restauração em P4.ii, corresponderia a permitir que se atualize  $\mathcal{A}$  com algum  $\tilde{\mathcal{A}} \subset \mathcal{A}$  antes de aplicar  $\text{REST}_{\mathcal{A}}$  em P.4.ii, o que pode ser interessante com base em informações da iteração anterior caso  $\rho$  se reduza bastante de uma iteração para a outra.
- iii – Lembramos que a possibilidade de restaurar usando dados da iteração anterior de CDR, se mostrou eficiente nos testes realizados no capítulo 4 (vide 4.2.1). Ela permanece em CDR para MRIC, inscrita em P1.ii.
- †.

### OBSERVAÇÃO A.0.4 SOBRE A DIREÇÃO DE CAUCHY

Com o objetivo de explicitar um pouco a conta a fazer para obter a direção de Cauchy (generalizada)  $g_{PC}$ , denotamos por  $\tilde{C}_{\mathcal{A}}(x)$  ao cone dual de  $C_{\mathcal{A}}(x)$ , ou seja:

†Em MRI, havíamos também introduzido a possibilidade de não atualizar  $h'(x)$  entre duas iterações sucessivas de REST através do parâmetro  $\theta_{max}$ . Realizando alguns testes numéricos, não ficou muito claro para nós se esta estratégia conduz a resultados significativos, principalmente tendo em vista a introdução da FASE 1. Como consideramos prematuro descartar esta possibilidade, gostaríamos de observar que teria sido possível mantê-la para REST, também em CDR para MRIC. No entanto, preferimos simplificar a exposição, eliminando-a formalmente

$$\tilde{C}_{\mathcal{A}}(x) = \{w : v^T w \leq 0, \text{ para todo } v \in C_{\mathcal{A}}(x)\} \quad (\text{A.10})$$

Denotamos ainda por  $\tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x)$  a projeção de  $-\nabla f(x)$  em  $\tilde{C}_{\mathcal{A}}(x)$ , ou seja:

$$\tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x) = P_{\tilde{C}_{\mathcal{A}}(x)}(-\nabla f(x)) \quad (\text{A.11})$$

Visando definir uma caracterização muito útil do cone dual, definamos para cada  $I = \{i_1, \dots, i_s\} \subset \{1, 2, \dots, n\}$  a matriz

$$E_I^T = (\nabla r_{i_1}, \dots, \nabla r_{i_s}) = (e_{i_1} \cdots e_{i_\ell} - e_{(i_\ell+1-n)} \cdots - e_{(i_s-n)})$$

onde

$$(e_i)_j = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

Essencialmente usando argumentos como no Lema de Farkas (vide [Fle 87]), podemos garantir:

**LEMA AP.1:** Suponhamos que  $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^n$  é consistente, e que  $h'(x)$  tem posto constante em  $U \subset \Omega$ .

Então:

- i-  $\tilde{C}_{\mathcal{A}}(x) = \{h'(x)^T \lambda + E_{\mathcal{A}}^T \mu : \mu \leq 0\}$ .
- ii-  $g(x) = \bar{g}_{\mathcal{A}}(x) + \tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x) = \underline{g}_{\mathcal{A}}(x) + \tilde{g}_{\mathcal{A}}(x) + \tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x)$
- iii-  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x)^T \tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x) = 0$  e  $g_{\mathcal{A}}(x)^T \tilde{g}_{\mathcal{A}}(x) = 0$
- iv-  $g_{\mathcal{A}}(x)$ ,  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x)$  e  $\tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x)$  são contínuas em  $U$ .

Veja que, fixando  $g = -\nabla f(x)$  e  $A = h'(x)$ , obtemos:

- OBSCAU .1 -  $g_{\mathcal{A}}(x) = \operatorname{argmin} \{\|g + A_{\mathcal{A}}^T \lambda\| : \lambda \in \mathbb{R}^m\}$ , onde  $A_{\mathcal{A}}^T = [A^T \ E_{\mathcal{A}}^T]$
- OBSCAU .2 -  $\tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x) = \operatorname{argmin} \{\|g + A^T \lambda + E_{\mathcal{A}}^T \mu\| : \lambda \in \mathbb{R}^m; 0 \geq \mu \in \mathbb{R}^n\}$ .
- OBSCAU .3 -  $\|\tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x)\| = \|g - \tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x)\| \leq \|g - v\|$ , se  $v = (g + A^T \lambda + E_{\mathcal{A}}^T \mu) \in \tilde{C}_{\mathcal{A}}(x)$  i.é.  $\mu \leq 0$ .
- OBSCAU .4- OBSCAU.1 nos diz que para calcular  $g_{\mathcal{A}}(x)$  temos que resolver um problema quadrático convexo com restrições de igualdade apenas, análogo ao que precisávamos calcular para obter a direção de Cauchy  $gp(x_c)$ , no caso MRI. O lema AP.1.ii e OBSCAU.2 nos dizem que para calcular  $\tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x)$  o problema é essencialmente o mesmo, sendo que algumas restrições passam a ser de canalização. Numericamente isto poderia ser bem mais trabalhoso. No entanto, frequentemente desejamos apenas nos certificar que, para um dado  $\eta > 0$ , temos  $\|g_{\mathcal{A}}(x)\| \geq \eta \|\tilde{\bar{g}}_{\mathcal{A}}(x)\|$ . Em particular, isto deverá acontecer sempre numa vizinhança de uma solução  $x^*$  sem degenerência dual. Veja que OBSCAU.2 e OBSCAU.3 nos dizem que basta encontrar uma solução inexata  $v$  de:

$$\text{Minimize } \|g + A^T \lambda + E_{\mathcal{A}}^T \mu\|^2 \text{ s.a. } \lambda \in \mathbb{R}^m, \mu \in \mathbb{R}^n, \mu \leq 0. \quad (\text{A.12})$$

e de tal forma que  $\|g_{\mathcal{A}}(x)\| \geq \eta \|g - v\|$ .

Algo análogo acontece sempre que procuramos  $n_{\text{cav}} \in [\|\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x)\|, 10\|\bar{g}_{\mathcal{A}}(x)\|]$ .

Em função disto evitamos colocar nos algoritmos, determinações explícitas para calcular  $\tilde{g}_{\mathcal{A}}(x)$ ,  $g_{\mathcal{A}}(x)$  e  $\bar{g}_{\mathcal{A}}(x)$ . Desta forma admitimos implicitamente a possibilidade de detalhar CDR para MRIC, permitindo soluções inexatas de alguns dos subproblemas quadráticos envolvidos ao calculá-los.

### OBSERVAÇÃO A.0.5

#### BOA DEFINIÇÃO E CONVERGÊNCIA GLOBAL DE CDR PARA MRIC

Acrescentando as hipóteses HC, HR e HF às formuladas na seção 2.4.1, e adaptando os argumentos esmiuçados no capítulo 2, acreditamos saber demonstrar que:

- T1 – *CDR só pára em pontos de KT para MRIC.*
- T2 – *Os iterados gerados numa dada aplicação de CDR admitem subsequências se acumulando em pontos de KT para MRIC.*

# Bibliografia

- [AC 67] J. Abadie e J. Carpentier, "Some numerical experiments with the GRG method for nonlinear programming", Paper HR7422, Électricité de France
- [AC 69] J. Abadie e J. Carpentier, "Generalization of the Wolfe Reduced Gradient Method to the case of nonlinear constraints", em *Optimization*, editado por R. Fletcher, Academic Press, Londres e Nova York, 1969, 37-47
- [Ale 91] M. M. El-Alem "A global convergence theory for the Celis-Dennis-Tapia trust region algorithms for constrained optimization", *SIAM Journal on numerical analysis* 28 (1991), 266-290.
- [Ber 76] D. P. Bertsekas, "Constrained optimization and Lagrange multipliers methods", Academic Press, New York, 1982.
- [Ber 82] D. P. Bertsekas, "On the Goldstein-Levitin-Poljak gradient projection method", *IEEE Trans. Automat. Control* AC-21, (1976), 174-184, "Constrained optimization and Lagrange multipliers methods", Academic Press, New York, 1982.
- [Bet 77] J. T. Betts, "An accelerated multiplier method for nonlinear programming" *Journal of Optimization Theory and Applications* 21 (1977), p.137
- [BFGMR 95] R. H. Bielschowsky, A. Friedlander, F. A. M. Gomes, J. M. Martínez and M. Raydan, "An adaptive algorithm for bound constrained quadratic minimization", Technical Report, Department of Applied Mathematics, University of Campinas, Brazil, 1995. A aparecer em *Investigación Operativa* (da Sociedad Latinoamericana de Pesquisa Operacional).
- [BT 89] P. T. Boggs e J. W. Tolle "A strategy for global convergence in a sequential quadratic programming algorithm", *SIAM Journal on Numerical Analysis* 26 (1989), 600 - 623.
- [BTW 82] P. T. Boggs, J. W. Tolle e Wang, "On the local convergence of quasi-Newton methods for constrained optimization", *SIAM Journal of Control and Optimization* 20 (1982), 161-171
- [BB 89] A. A. Brown e M. C. Bartholomew-Biggs, "ODE versus SQP methods for constrained optimization", *Journal of optimization theory and applications* 62 (1989), 371-386
- [BDM 73] C. G. Broyden, J. E. Dennis e J. J. Moré, "On the local and superlinear convergence of quasi-Newton methods" *J. Inst. Math. Appl.* 7 (1973), 223-246

- [BM 88] J. V. Burke e J. J. Moré, "On the identification of active constraints", *SIAM Journal on numerical analysis* 25, (1988), 1197–1211
- [Byrd 85] R. H. Byrd, "An example of irregular convergence in some constrained optimization problems that use the projected Hessian", *Mathematical Programming* 32 (1985), 232–237.
- [Byrd 90] R. H. Byrd "On the convergence of constrained optimization methods with accurate hessian information on a subspace", *SIAM Journal on numerical analysis* 27 (1990), 141–153.
- [BN 89] R. H. Byrd e J. Nocedal "A tool for the analysis of quasi-Newton methods with application to unconstrained optimization", *SIAM Journal on numerical analysis* 26 (1989), 727–739.
- [BS 86] R. H. Byrd e R. B. Schnabel "Continuity of the null space basis and constrained optimization", *Mathematical Programming* 35 (1986), 32–41.
- [BSS 87] R. H. Byrd, R. B. Schnabel e G. A. Schultz "A trust region algorithm for nonlinearly constrained optimization" *SIAM Journal on numerical analysis* 24 (1987), 1153 – 1170.
- [Car 88] M. P. do Carmo, "Geometria riemanniana", Projeto Euclides, IMPA, CNDCT, 1988.
- [CM 88] P. H. Calamai e J. J. Moré, "Projected gradient methods for linearly constrained problems", *Mathematical Programming* 39 (1987), 93–116.
- [CC 84] T. F. Coleman e A. Conn "On the local convergence of a quasi-Newton method for the nonlinear programming problem", *SIAM Journal on numerical analysis* 21 (1984), 755–769.
- [CS 82] T. F. Coleman e D. C. Sorensen "A note for the computation of an orthonormal basis of the null space of a matrix", *Mathematical programming* 29 (1984), 234–242.
- [Col 68] A. R. Colville, "A comparative study on nonlinear programming codes", *IBM New York Scientific Center*, Report 320-2949.
- [CGT 88] A. R. Conn, N. I. M. Gould and Ph. L. Toint, "Global convergence of a class of trust region algorithms for optimization with simple bounds", *SIAM Journal on Numerical Analysis* 25 (1988) 433 - 460. See also *SIAM Journal on Numerical Analysis* 26 (1989) 764 - 767.
- [CGT 91] A. R. Conn, N. I. M. Gould and Ph. L. Toint, "A globally convergent augmented Lagrangian algorithm for optimization with general constraints and simple bounds", *SIAM Journal on Numerical Analysis* 28 (1991), 545 - 572.
- [CGT 92] A. R. Conn, N. I. M. Gould and Ph. L. Toint, "LANCELOT: a Fortran package for large-scale nonlinear optimization (Release A)", *Springer Series in Computational Mathematics* 17 (1992), Springer Verlag, Heidelberg, Berlin, New York.

- [Cou 43] R. Courant, "Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibration", *Bull. Amer. Math. Soc.* 49, (1943), 1-23.
- [DEM] J. E. Dennis, M. El-Alem and M. C. Maciel, "A global convergence theory for general trust-region-based algorithms for equality constrained optimization", a aparecer em *SIAM Journal on Optimization*.
- [Den 79] R. F. Dennemeyer, "CGS algorithms for constrained extremization of functions", *Journal of Optimization Theory and Applications* 27 (1979), 481.
- [DES 82] R. S. Dembo, S. C. Eisenstat e T. Steihaug, "Inexact Newton methods", *SIAM Journal on Numerical Analysis* 19 (1982), 400 - 408.
- [DT 84] R. S. Dembo e U. Tulowitzki, "Local convergence analysis for successive inexact quadratic programming methods", in *School of Organization and Management working paper series B # 71*, Yale University, New Haven Connecticut, 1984.
- [DT 85] R. S. Dembo e U. Tulowitzki, "Sequential truncated quadratic programming methods", in *Numerical Optimization*, edited by P. Boggs, R. Byrd and R. Schnabel, SIAM Publications, Philadelphia, Pennsylvania (1985), 83 - 101.
- [DM 74] J. E. Dennis e J. J. Moré, "A characterization of superlinear convergence and its application to quasi-Newton methods" *Mathematics of Computation* 28 (1974), 549-560.
- [DM 77] J. E. Dennis e J. J. Moré, "Quasi-Newton methods, motivation and theory", *SIAM Review* 19 (1977), 46-89.
- [DS 83] J.E.Dennis e R.B.Schnabel, *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1983.
- [Dix 72] L. C. W. Dixon, "Variable metric algorithms: Necessary and sufficient conditions for identical behaviour on nonquadratic functions" *Journal of optimization theory and applications* 10 (1972), 34-40.
- [FM 89] A. Friedlander e J. M. Martinez, "On the numerical solution of bound constrained optimization problems", *RAIRO Operations Research*, 23, (1989), 319-341.
- [FM 94] A. Friedlander e J. M. Martinez, "On the maximization of a concave quadratic function with box constraints", em *SIAM Journal on Optimization*, (1994), 177-192
- [Fon 88] R. Fontecilla, "Local convergence of secant methods for nonlinear constrained optimization", *SIAM Journal on Numerical Analysis* 25 (1988), 692 - 712.
- [Fon 90] R. Fontecilla, "Inexact secant methods for nonlinear constrained optimization", *SIAM Journal on Numerical Analysis* 27 (1988), 154-165.
- [FST 87] R. Fontecilla, T. Steihaug e R. Tapia, "A convergence theory of quasi-Newton methods for constrained optimization", *SIAM Journal on Numerical Analysis* 24 (1987), 1133-1151.

- [Gol 64] A. A. Goldstein, "Convex programming in Hilbert spaces", *Bull. Amer. Math. Soc.* 70 (1964), 709-710.
- [GL 88] G. H. Golub e C. F. van Loan, "Matrix Computations", The John Hopkins University Press, 1988.
- [GMM 95] F. A. M. Gomes, M. C. Maciel e J. M. Martínez, "Nonlinear programming algorithms using trust regions and augmented Lagrangians with nonmonotone penalty parameters", *Relatório de pesquisa RP 36/95*, Imecc, Unicamp, 1995.
- [FSL 88] Y. Fan, S. Sarkar e L. Lasdon, "Experiments with successive quadratic programming algorithms", *Journal of Optimization Theory an Applications* 56 (1988), 359-383.
- [Fle 87] R. Fletcher, *Practical methods for optimization*, John Wiley & Sons, Chichester, 1987.
- [Hag 93] W. W. Hager, "Analysis and implementation of a dual algorithm for constrained optimization", *Journal of Optimization Theory an Applications* 79 (1993), 425-462.
- [Hes 69] M. R. Hestenes, "Multiplier and gradient methods", *Journal of Optimization Theory an Applications* 4 (1969), 303-320.
- [Hir 76] M. W. Hirsch *Differential Topology*, Springer-Verlag, New York, 1976
- [LW 78] L. S. Lasdon e A. D. Waren, "Design and testing of a Generalized Reduced-Gradient Code for nonlinear programming", *Transactions on Mathematical Software* 4 (1978), 34-50.
- [Las 81] L. S. Lasdon, "Reduced gradient methods", em *Nonlinear Optimization 1981*, edited by M. J. D. Powell, Academic Press, New York, 1982, 235-242.
- [LP 66] E. S. Levitin e B. T. Poljak, "Constrained minimization problems", *U.S.S.R Comput. Math. Phys.* 6, (1966), 1-50.
- [Lima 70.A] E. L. Lima, "Análise no  $R^n$ ", Ed. Blücher, 1970.
- [Lima 70.B] E. L. Lima, "Elementos de Topologia Geral", *Coleção Elementos de Matemática*, IMPA, CNPq, Ao Livro Técnico e editora da USP, Rio de Janeiro, 1970.
- [Lue 86] D. Luenberger, "Linear and nonlinear programming", Addison-Wesley, New York, 1986.
- [Mar 96] J. M. Martínez, "A two-phase trust-region model algorithm with global convergence for nonlinear programming", *Relatório técnico*, Imecc, Unicamp, Campinas, 1996.
- [Mar 97] J. M. Martínez, "A trust-region SLCP model algorithm for non-linear programming", *Foundations of Computational Mathematics - Congresso realizado no Rio de Janeiro em 01/97*. Eds F. Cucker e M. Shub - (1997) - 246-255 - Springer-verlag

- [MS 95] J. M. Martínez e S. A. Santos, “Métodos computacionais de otimização”, *XX Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, CNDT*, Rio de Janeiro, 1995.
- [MHH 69] A. Miele, H. Y. Huang e J. C. Heideman. “Sequential Gradient-Restoration Algorithm for the minimization of constrained functions - Ordinary and Conjugate Gradient versions”, *Journal of Optimization Theory an Applications 4* (1969), 213-243.
- [MPD 70] A. Miele, R. E. Pritchard e J. N. Damoulakis, “Sequential Gradient-Restoration Algorithm for Optimal Control Problems”, *Journal of Optimization Theory and Applications 5* (1970), 235-282.
- [MLC 71] A. Miele, A. V. Levy e E. E. Cragg, “Modifications and Extensions of the Conjugate Gradient-Restoration Algorithm for Mathematical Programming Problems”, *Journal of Optimization Theory an Applications 7* (1971), 450-473.
- [MMLC 72] A. Miele, P. E. Moseley, A. V. Levy e G. M. Coggins, “On the method of multipliers for mathematical programming problems”, *Journal of Optimization Theory an Applications vol 10* (1972), 1-33.
- [MoSo 83] J. J. Moré e D. C. Sorensen, “Computing a trust region step”, *SIAM Journal on Scientific Computing 4*, (1983), 553-772.
- [MT 89] J. J. Moré e G. Torardo, “Algorithms for bound constrained quadratic programming problems”, *Numerische Mathematik 55*, (1989), 377-400.
- [MP 78] H. Mukai e E. Polak, “On the use of approximations in algorithms for optimization problems with equality and inequality constraints”, *SIAM Journal on Numerical Analysis 15* (1978), 674-693.
- [No 91] J. Nocedal, “Theory of algorithms for unconstrained optimization”, *Acta Numerica*, (1991), 1-37.
- [NO 85] J. Nocedal and M. L. Overton, “Projected Hessian updating algorithms for nonlinearly constrained optimization”, *SIAM Journal on Numerical Analysis 22* (1985), 821-850.
- [PM 78] J. Palis jr e W. Melo, “Introdução aos sistemas dinâmicos”, Projeto Euclides, IMPA, CNDCT, 1978.
- [Pow 69] M. J. D. Powell, “A method for nonlinear constraints in minimization”, em *Optimization* (Ed R.Fletcher), academic Press, London, 1969
- [Pow 71] M. J. D. Powell, “On the convergence of the variable metric algorithm” *J. Inst. Math. Appl.* 7 (1971), 21-36.
- [Pow 72] M. J. D. Powell, “Some properties of the variable metric algorithm”, in *Numerical methods for non-linear optimization*, (F. A. Lootsma, ed.), Academic Press (London).

- [Pow 76] M. J. D. Powell, "Some global convergence properties of a variable metric algorithm form minimization without exact line searches", in *Non-linear Programming, SIAM-AMS Proceedings* Vol. IX (1976) (R. W. Cottle e C. E. Lemke, eds.)
- [Pow 75] M. J. D. Powell, "Convergence properties of a class minimization algorithms", in *Nonlinear Programming 2*, edited by O. L. Mangasarian, R. R. Meyer e S. M. Robinson, Academic Press, New York, 1978, 1 - 27.
- [Pow 78] M. J. D. Powell, "The convergence of variable metric methods for nonlinearly constrained optimization calculations", in *Nonlinear Programming 3*, edited by O. L. Mangasarian, R. R. Meyer e S. M. Robinson, Academic Press, New York, 1978, 235-242.
- [PY 91] M. J. D. Powell and Y. Yuan, "A trust-region algorithm for equality constrained optimization", *Mathematical Programming* 49 (1991), 190-211.
- [RA 89.1] M. Rom e M. Avriel, "Properties of the Sequential Gradient-Restoration Algorithm (SGRA), Part1: Introduction and comparison with related methods", *Journal of Optimization Theory an Applications* 62 (1989), 77-98.
- [RA 89.2] M. Rom e M. Avriel "Properties of the Sequential Gradient-Restoration Algorithm (SGRA), Part2: Convergence Analysis", *Journal of Optimization Theory an Applications* 62 (1989), 99-125.
- [Ros 60] J. B. Rosen, "The gradient projection method for nonlinear programming, part I - Linear constraints", *SIAM Journal on Applied Mathematics* 9 (1960), 181-217.
- [Ros 61] J. B. Rosen, "The gradient projection method for nonlinear programming, part II - Nonlinear constraints", *SIAM Journal on Applied Mathematics* 10 (1960), 514-532.
- [SP 89] D. P. Shanno e K. H. Phua, "Numerical Experience with sequential quadratic programming algorithms for equality constrained nonlinear programming", *ACM Transactions on Mathematical Software* 15 (1989), 49-63.
- [Sma 61] S. Smale "On gradient dynamical systems", *Ann. of Math.* 74, 1961.
- [Soto 76] J. Sotomayor, "Singularidades de aplicações diferenciáveis", *III Escola latino americana de matemática*, IMPA (1976).
- [Sto 75] "On the convergence rate of imperfect minimization algorithms in Broyden's beta-class", *Mathematical Programming Studies* 9 (1975), 313-335.
- [Tan 77] K. Tanabe, "Geometric method in nonlinear programming", Report n. 23343-AMD-797, Brookhaven National Laboratory, 1978.
- [Tap 77] R. A. Tapia, "Diagonalized multiplier methods and Quasi-Newton methods for constrained optimization", *Journal of Optimization Theory an Applications* 22 (1977), 135-194.

- [Tap 88] R. A. Tapia, "On secant updates for use in general constrained optimization", *Mathematics of Computation* 51 (1988), 181-202.
- [Wer 78] J. Werner, "Über die globale konvergenz von Variable-Metric Verfahren mit nicht-exakter Schrittweiterbestimmung", *Numer. Math.* 31 (1978), 321-334.
- [Wil 63] R. B. Wilson , "A simplicial algorithm for concave programming", Ph. D. Disertation, Harvard University, Graduate School of Business Administration (1963].
- [Wol 63] P. Wolfe, "Methods of nonlinear programming", em *Recent Advances in mathematical Programming*, editado por R. L. Graves e P. Wolfe, McGraw Hill, New York, 67-86.
- [YYT 91] H. Yabe, N Yamaki e S. Takahashi, "Global convergence of sequential inexact QP method for constrained optimization", *SUT Journal of Mathematics* 27 (1991), 127-138.
- [Yua 85] Y. Yuan, "An only 2-step convergence example for some algorithms that use reduced hessian approximations", *Mathematical Programming* 32 (1985), 224 - 231.