



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA
DOUTORADO EM MATEMÁTICA

Atécio Alves

**Métodos unidimensionais aplicados ao problema da
mochila não-linear**

Teresina - 2023

Atécio Alves

Tese:

**Métodos unidimensionais aplicados ao problema da mochila
não-linear**

Tese de Doutorado submetida ao Programa de Pós Graduação em Matemática, nível Doutorado, da Universidade Federal do Piauí, como parte do requisito para obtenção de título de Doutor em Matemática.

Orientador:

Prof. Dr. Paulo Sergio Marques dos Santos.

Co-orientadora:

Profa. Dra. Sissy da Silva Souza.

Teresina - 2023

Dedico este trabalho:
ao meu filho,
Arthur Carvalho Alves;
à minha esposa,
Aline de Carvalho Silva;
e aos meus pais,
Aldenora Alves Lima (*In Memoriam*) e
Nilo Alves de Sousa.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus, por sempre nos dá força para continuar lutando, até que alcancemos a vitória.

Agradeço à minha esposa, Aline de Carvalho Silva (Minha Mozão), pelo companherismo, pela compreensão e pelo incentivo desde o dia que nos conhecemos até os dias atuais.

Agradeço ao meu filho, Arthur de Carvalho Alves, por ser o motivo de toda conquista a partir do seu concebimento.

Agradeço aos meus pais, Nilo Alves de Sousa e Aldenora Alves Lima (*In Memoriam*), por todo o sacrifício feito em minha causa e por acreditarem que a Educação é o bem maior. Agradeço aos meus irmãos, Marcos Jadiel Alves e Márcia Naiane Alves, por todos incentivos e os momentos em que vivenciamos e vivenciaremos juntos.

Agradeço aos meus cunhados Jéssyca, Arianna e Ismael.

Agradeço aos meus sobrinhos João Emanuel, Matias e Álvaro.

Agradeço às minhas avós, Maria José e Iranez, paterna e materna, respectivamente.

Agraceço à Tia Luziene, ao Tio Júnior Mota e a todos que foram meus professores no colégio Educandário Sagado Coração de Jesus, pois foram eles que me ensinaram a ler e a escrever.

Agradeço aos meus professores do ensino fundamental.

Agradeço aos meus professores do ensino médio, em especial ao professor Paulo Bola.

Agradeço aos meus professores da graduação em matemática: Jurandir, Mário Gomes, Gilvan Lima, João Benício (*In Memoriam*), Marcondes Clarck, Marcos Vinícios. Agradeço também ao professor Antônio José e outros tantos que aqui eu tenha deixado de citar.

Agradeço aos meus professores durante o mestrado em matemática: Roger Peres, Liane,

Newnton Santos, Carlos Humberto, João Xavier, Marcos Vinicio, Isaias.

Agradeço aos meus professores durante o doutorado em matemática: Rondinelle, Gleison, Halysen, Isaias e João Carlos. Agradeço também a todos os professores que compõem a Pós-Graduação em matemática da UFPI.

Agradeço, em especial, ao Professor Paulo Sérgio (Paulinho), meu orientador nos projetos de iniciação científica, mestrado e doutorado.

Agradeço, em especial, à professora Sissy, por todo apoio a mim despendido e co-orientação.

Agradeço ao professor Luís Carlos Matioli por compor a banca de defesa de doutorado.

Agradeço à Dona Rosário por todo o apoio, pelos almoços e jantares promovidos e por ter me dado moradia quando precisei.

Agradeço aos meus compadres George e Lucilane, Igor e Laís, Lucas e Dani, e Patrícia.

Agradeço aos meus amigos conterrâneos: André, Janilson, Junior Bibiçã, Juniel, Railson, Jarin, Amaury, Galdino Bola, Nilvânia e Kátia.

Agradeço aos meus amigos do ensino médio Ytalo, Jaelson, Denylson e Maria Izabel.

Agradeço à Dona Glória e ao Seu João, pais na minha esposa.

Agradeço aos meus amigos que a UFPI me deu: Elianderson, João Neto, Magari, Manário, Naftaly, Jailson, Narielle, Suiany, Rui Balizinha, Jordan, Carlos Adriano, W. Bruno, Antônio Aguiar (Veludim), Sandoel, Rodolfo, Miguel, Rafael (Gordiniz), Ray, Edilson, Edimilson, João Santos, Alexandre, Bruno, Christopher, Erisvaldo, João Viniccius e Jefferson.

Agradeço aos meus tios e primos.

Agradeço a todos os que tive a oportunidade de conhecer e de conviver.

Agradeço à UFPI e ao IFPI pelo apoio financeiro.

O autismo não limita as pessoas. Mas o preconceito
sim, ele limita a forma com que as vemos e o que
achamos que elas são capazes.

(Leticia Butterfield)

Resumo

Nesta tese, estudamos o Problema da Mochila não-linear e propomos dois algoritmos de busca de raiz de uma função unidimensional para resolver sua formulação dual. O primeiro é um algoritmo de ponto fixo, este é mais direto que métodos existentes e competitivo. Apresentamos resultados de convergência parcial do algoritmo e os testes numéricos mostrando sua superioridade em problemas de médio e grande porte. O segundo algoritmo é do tipo-Newton, e usa aproximação suave da função dual do problema e possui convergência global. Os testes numéricos ilustraram sua eficiência com dois tipos de aproximações suaves.

Palavras-chave: Aproximação suave; Método tipo-Newton; Método de ponto fixo; Problema da mochila; Otimização convexa.

Abstract

In this thesis, we study the nonlinear knapsack problem and proposed two root-find algorithms to resolver dual formulation. The first is an fixed-point algorithm, this is more direct and competitive than methods existent. we presented results partial convergence of algorithm and the numerical tests shown superiority in medium and larger problems. The second algorithm is the Newton-type and used smooth approximation of dual function of problem and has global convergence. The numerical tests illustrate efficiency with two types of smooth approximations.

Keywords: Smooth approximation; Newton-type method; Fixed-point method; Knapsack problem; Convex optimization.

Sumário

1	Introdução	1
2	Noções Preliminares	3
2.1	Funções contínuas	3
2.2	Noções de Otimização restrita	5
2.2.1	Funções convexas	6
2.2.2	Condições de otimalidade de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)	8
3	Algoritmo de ponto fixo	11
3.1	Fomulação de ponto fixo	11
3.2	O algoritmo de ponto fixo e análise de convergência	15
3.3	Experimentos numéricos	19
4	Algoritmo tipo-Newton	23
4.1	Reformulação do problema	23
4.2	Aproximação suave da função $g(\lambda)$	28
4.3	Um método tipo-Newton e resultados de convergência	34
4.3.1	Método tipo-Newton	34
4.3.2	Análise de convergência	36
4.4	Experimentos numéricos	38
4.4.1	Um problema de posicionamento de sensores	39
5	Considerações finais	42
	Referências	44

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho desenvolveremos dois métodos unidimensionais desenvolvidos para resolver o problema da mochila quadrático não-linear contínuo com restrição de caixa, onde a função objetivo é quadrática e convexa. O problema é dado por

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) := \frac{1}{2}x^T P x - a^T x \\ \text{S. a} \quad & b^T x = c, \\ & \ell \leq x \leq u, \end{aligned} \tag{1.1}$$

onde x é um vetor de decisões de n variáveis, a , b , ℓ , $u \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$ e P é uma matriz diagonal $n \times n$ definida positiva, $P = \text{diag}(p)$, com $p > 0$. Os vetores ℓ e u são chamados de limite inferior e limite superior, respectivamente, podendo $\ell_i = -\infty$ ou $u_i = +\infty$ para todo $i = 1, 2, \dots, n$.

O problema (1.1) é bastante estudado devido a sua aplicabilidade em diversas áreas, tais como: teoria da pesquisa (Koopman, [25]), economia (Markowitz, [27]), amostragem estratificada (Bretthauer, Ross e Shetty, [7]; Münnich, Sachs e Wagner [28]), sistemas de estoques (Maloney e Klein, [26]) e enfileirando redes de manufaturas (Bitran e Tirupati, [6]).

Muitos estudos numéricos do problema (1.1) foram realizados como podem ser vistos em Bitran e Hax [5], Nielsen e Zenios [29], Robinson, Jiang e Lemke [33], Kodialam e Luss [24], Kiwiel [21, 22, 23], Patriksson [30] e Patriksson e Strömberg [31].

Através das condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) ou de simples argumentos de dualidade o problema da mochila quadrático pode ser transformado em um problema de equação não linear de uma variável. [11, 21] apresentam algoritmos baseados na busca de breakpoints, enquanto em [6, 23, 35], são desenvolvidos algoritmos baseados na fixação de variáveis. Dai e Fletcher [14] propuseram um algoritmo com duas fases, fase de colchetes e fase secante. Inspirado em Münnich, Sachs e Wagner [28], desenvolvemos um algoritmo

de ponto fixo para resolver o problema (1.1), ou seja, cada iterada é da forma

$$\lambda_{k+1} = F(\lambda_k).$$

Por outro lado, a função real resultante na reformulação do problema é linear por partes e não diferenciável. Ser não diferenciável dificulta a utilização de métodos que precisam que a função seja diferenciável.

Problemas de otimização não diferenciável são geralmente difíceis de resolver. Bertsekas [3], resolve problemas não diferenciáveis via aproximação em que aparecem termos do tipo $\max(0, f_i(x_i))$. Chen e Harker [12], apresentam uma classe de aproximações suaves para problema de complementaridade, nestes também ocorrem o aparecimento da função $\max(0, \cdot)$. Essas funções serão utilizadas no Capítulo 4 desta tese. Venceslau [34], utiliza técnica de suavização hiperbólica e em caso particular mostra uma equivalência com ϵ -subgradientes.

Baseado no método de Newton não suave, proposto por Cominetti, Mascarenhas e Silva e Silva em [13], desenvolvemos uma método tipo-Newton utilizando estratégias de suavização de um função real, esta tem como partes não diferenciáveis devido a presença da função $r(\lambda) = \max(0, \lambda)$, na qual substituímos o quociente da iterada de Newton pela derivada de uma função aproximação suave, ficando da forma

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{g(\lambda_k)}{g'_\phi(\lambda_k)}$$

onde a função g é não diferenciável e g_ϕ é uma função aproximação suave.

No Capítulo 2, apresentamos as propriedades básicas de funções reais, funções convexas e condições de otimalidade que serão essenciais para o entendimento desta tese.

No Capítulo 3, desenvolvemos a nossa primeira contribuição para a tese, em que baseamos nas condições de otimalidade de KKT e formularemos o algoritmo de ponto fixo, apresentaremos resultados de convergência e comparamos o algoritmo proposto com outros quatro através de experimentos numéricos gerados aleatoriamente.

No Capítulo 4, desenvolvemos a nossa segunda contribuição para a tese em que obteremos uma função contínua, linear por partes, não decrescente e não diferenciável, na qual utilizaremos funções aproximações suaves da função máximo para obter uma função aproximação suave da função dual e a partir daí descrevemos o método tipo-Newton, mostaremos a convergência e resolveremos um problema comparando os resultados obtidos com outros dois métodos propostos na literatura.

No Capítulo 5, apresentamos considerações a respeito deste trabalho de tese e também sobre possíveis trabalhos futuros.

Capítulo 2

Noções Preliminares

Neste capítulo, serão apresentadas algumas definições e resultados básicos de funções contínuas e diferenciáveis em um intervalo real, apresentaremos o problema de otimização, funções convexas e as condições de otimalidade no caso restrito, com base em [10, 15, 19, 32], que serão essenciais para o desenvolvimento desta tese.

2.1 Funções contínuas

Nesta seção, apresentaremos as definições de função contínua, de função diferenciável e alguns resultados importantes.

Definição 2.1.1. *Seja $I \subset \mathbb{R}$ um intervalo real. Uma função $f : I \rightarrow \mathbb{R}$, diz-se contínua no ponto $a \in I$ quando,*

$$\forall \epsilon > 0 \exists \delta > 0, \text{ tais que } x \in I, |x - a| < \delta \Rightarrow |f(x) - f(a)| < \epsilon.$$

Diz-se que $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua quando f é contínua em todos os pontos $a \in I$.

Teorema 2.1.2. *Dada uma função $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. A função f é contínua no ponto $a \in I$ se, e somente se, para toda sequência de pontos $x_n \in I$ com $\lim x_n = a$, se tenha $\lim f(x_n) = f(a)$.*

Demonstração. Ver [15]. □

Definição 2.1.3. *Diz-se que uma função $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável no ponto $a \in I$ se o seguinte limite existir*

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a + h) - f(a)}{h} = f'(a).$$

Quando existe $f'(x)$, para todo $x \in I$, diz-se que $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável em I ou, simplesmente, diferenciável.

Teorema 2.1.4. *Se uma função $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável no ponto a , então é contínua em a .*

Demonstração. Ver [15]. □

Uma função pode ser contínua em todo ponto do seu domínio e essa função não ser diferenciável. Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dada por $f(x) = |x|$. Temos que f é contínua em \mathbb{R} , mas não é diferenciável no ponto $a = 0$. De fato,

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{f(x) - f(0)}{x - 0} = 1 \text{ e } \lim_{x \rightarrow 0^-} \frac{f(x) - f(0)}{x - 0} = -1.$$

Logo não existe o limite $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{f(x) - f(0)}{x - 0}$. Portanto, f não é diferenciável no ponto $a = 0$.

Teorema 2.1.5. (Teorema do valor médio) *Seja $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ contínua. Se f é diferenciável em (a, b) , então existe um $c \in (a, b)$, tal que $f(b) - f(a) = f'(c)(b - a)$.*

Demonstração. Ver [15]. □

O próximo resultado relaciona a derivada de uma função diferenciável e seu crescimento.

Teorema 2.1.6. *Sejam $I \subset \mathbb{R}$ um intervalo e $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Então, f é monótona não-decrescente (não-crescente) se, e somente se, $f'(x) \geq 0$ ($f'(x) \leq 0$) para qualquer $x \in I$.*

Demonstração. Considere f monótona não decrescente, x e $x + h$ números em I . Temos que $\frac{f(x+h) - f(x)}{h} \geq 0$ então $f'(x) \geq 0$. Por outro lado, seja $f'(x) \geq 0$ para todo $x \in I$. Sejam $a, b \in I$, com $a < b$. Sendo f diferenciável, pelo Teorema 2.1.5, existe um $c \in (a, b)$ tal que $f(b) - f(a) = f'(c) \cdot (b - a)$. Como $f'(c) \geq 0$ e $b > a$ então $f(b) \geq f(a)$. Segue que f é monótona não decrescente. □

Corolário 2.1.7. *Sejam $I \subset \mathbb{R}$ um intervalo e $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Se $f'(x) > 0$ ($f'(x) < 0$) para todo $x \in I$, então f é estritamente crescente (estritamente decrescente) em I .*

Quando a derivada de uma função f é diferenciável podemos calcular a derivada da derivada que é chamada a segunda derivada de f , ou seja, $[f'(x)]'$ que é representada por $f''(x)$. Se esta também é diferenciável a terceira derivada de f é $[f''(x)]'$ que é representada por $f'''(x)$. Quando podemos calcular a derivada por n vezes consecutivas de f a última derivada é dita a n -éssima derivada de f e é representada por $f^{(n)}(x)$.

Definição 2.1.8. Diz-se que $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função de classe C^n quando f é n vezes diferenciável e, além disso, $f^{(n)} : I \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua.

Um ponto fixo de uma função é um número que quando aplicado na função o valor obtido é igual a este número, ver [10].

Definição 2.1.9. Seja g é uma função com domínio I contido em \mathbb{R} , um ponto fixo de g é um ponto x^* , tal que $g(x^*) = x^*$.

Observe que problemas de encontrar ponto fixo de uma função são equivalentes a problemas de encontrar um zero de uma função, no seguinte sentido:

- Seja f um função e x^* um zero de f , ou seja, $f(x^*) = 0$, podemos definir uma função g com ponto fixo em x^* da seguinte maneira

$$g(x) = x - f(x);$$

- Por outro lado, se a função g tem ponto fixo em x^* , então a função definida por

$$f(x) = x - g(x)$$

tem um zero x^* .

Assim, raízes da equação $f(x) = 0$, com $f'(x) \neq 0$ para todo $x \in I$, são os pontos fixos da função $g : I \rightarrow \mathbb{R}$, definida por

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Considere o problema de determinar um zero de f , ou seja, $f(x) = 0$. Iniciando em um ponto x_0 , o processo iterativo

$$g(x_n)x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \text{ para todo } n \text{ natural}$$

é chamado de método de Newton. A função g é chamada de função de iteração no método de Newton.

2.2 Noções de Otimização restrita

Nesta seção, apresentaremos o problema de otimização, a definição de função convexa e algumas propriedades e condições de otimalidade para o problema de minimização convexa em um subconjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$.

O problema geral de otimização é dado por

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{S. a} \quad & x \in \Omega, \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função e $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Quando Ω é todo o \mathbb{R}^n dizemos que (2.1) é um problema irrestrito.

Definição 2.2.1. *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função e $x^* \in \Omega$ contido em \mathbb{R}^n . Diz-se que x^* é um minimizador local de f em Ω quando existe $\delta > 0$, tal que $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in B(x^*, \delta) \cap \Omega$. Se $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in \Omega$ diz-se que x^* é um minimizador global de f em Ω .*

No problema de otimização que abordaremos nesta tese a função f é convexa e o conjunto Ω é um conjunto convexo. A seguir definiremos funções convexas, e apresentaremos algumas caracterizações de funções convexas diferenciáveis e condições de otimalidade.

2.2.1 Funções convexas

Definição 2.2.2. *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo, diz-se que a função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em Ω quando para quaisquer $x, y \in \Omega$ e $0 \leq \alpha \leq 1$, tem-se que*

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y).$$

Se para todo $x \neq y$ e $0 < \alpha < 1$, tem-se que

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) < \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y),$$

então dizemos que f é estritamente convexa.

Uma função estritamente convexa é convexa.

Exemplo 2.2.3. *A função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = e^x$ é estritamente convexa.*

Exemplo 2.2.4. *A função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = |x|$ é convexa, mas não é estritamente convexa.*

A convexidade de uma função é importante quando se quer encontrar um ponto $x^* \in \Omega$, tal que $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in \Omega$, ou seja, se quer resolver o problema (2.1). Quando a função f é convexa e o conjunto Ω é convexo, diz-se que o problema (2.1) é um problema de minimização convexa.

Teorema 2.2.5. (Teorema de minimização convexa) *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa em Ω . Então todo minimizador local do*

problema (2.1) é global de f em Ω . Além disso, o conjunto de minimizadores é convexo. Se f é estritamente convexa, o minimizador é único.

Demonstração. Ver [19]. □

No caso em que uma função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável tem-se propriedades que caracterizam a convexidade ou não de f .

Teorema 2.2.6. *Sejam $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e aberto e $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável em Ω .*

Então as propriedades seguintes são equivalentes:

a) A função f é convexa em Ω ;

b) Para todo $x, y \in \Omega$,

$$f(y) \geq f(x) + \langle f'(x), y - x \rangle;$$

c) Para todo $x, y \in \Omega$,

$$\langle f'(y) - f'(x), y - x \rangle \geq 0.$$

Quando f é duas vezes diferenciável em Ω , as propriedades acima também são equivalentes a

d) A matriz Hessiana de f é semi-definida positiva em todo ponto de Ω , ou seja,

$$\langle f''(x)d, d \rangle \geq 0 \quad \forall x \in \Omega, \quad \forall d \in \mathbb{R}^n.$$

Demonstração. Ver [19]. □

Teorema 2.2.7. *Sejam $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e aberto e $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável em Ω .*

Então as propriedades seguintes são equivalentes:

a) A função f é estritamente convexa em Ω ;

b) Para todo $x, y \in \Omega$,

$$f(y) > f(x) + \langle f'(x), y - x \rangle;$$

c) Para todo $x, y \in \Omega$,

$$\langle f'(y) - f'(x), y - x \rangle > 0.$$

Quando f é duas vezes diferenciável em Ω , as propriedades acima também são equivalentes a

d) A matriz Hessiana de f é definida positiva em todo ponto de Ω , ou seja,

$$\langle f''(x)d, d \rangle > 0 \quad \forall x \in \Omega, \quad \forall d \in \mathbb{R}^n.$$

Demonstração. Ver [19]. □

2.2.2 Condições de otimalidade de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

Nesta seção abordaremos as condições de KKT para o problema de otimização com restrições de igualdade e desigualdade. Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $p : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ e $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ funções diferenciáveis. Para isso, considere $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p(x) = 0, q(x) \leq 0\}$,

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{S. a } \quad & \Omega \end{aligned} \tag{2.2}$$

Neste trabalho, não trataremos a abordagem que baseia-se em cones [19, 32] para a obtenção das condições de KKT e nem nos prolongaremos sobre as condições de qualificação do problema e também consideraremos a regularidade no ponto, isto é, que os gradientes das restrições ativas são linearmente independentes.

A função Lagrangiana ou, simplesmente, Lagrangiana do problema (2.2) é $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}_+^m \rightarrow \mathbb{R}$, dada por

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \langle \lambda, p(x) \rangle + \langle \mu, q(x) \rangle,$$

em que λ e μ são os multiplicadores de Lagrange associados às restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente.

O gradiente da Lagrangiana com respeito a x será denotado por $L'_x(x, \lambda, \mu)$.

Teorema 2.2.8. (Condições de Karush-Kuhn-Tucker) *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável no ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ e sejam $p : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ e $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ funções afim, ou seja, $p(x) = Ax - a$ e $q(x) = Bx - b$, onde A e B são matrizes reais de ordens $l \times n$ e $m \times n$, respectivamente, $a \in \mathbb{R}^l$ e $b \in \mathbb{R}^m$. Se x^* uma solução do problema (2.2), então existem $\lambda^* \in \mathbb{R}^l$ e $\mu^* \in \mathbb{R}_+^m$ tais que*

$$L'_x(x^*, \lambda^*, \mu^*) = 0 \tag{2.3}$$

$$\mu_i^* q_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \tag{2.4}$$

Sob a condição de independência linear dos gradientes das restrições ativas, $(\lambda^, \mu^*) \in \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^m$ que satisfaz (2.3) e (2.4) é único.*

Demonstração. Ver [19]. □

Definição 2.2.9. Diz-se que um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é um ponto estacionário do problema (2.2) ou um ponto de KKT, quando $x^* \in \Omega$ e existem $\lambda^* \in \mathbb{R}^l$ e $\mu^* \in \mathbb{R}_+^m$ tais que

$$\begin{aligned} L'_x(x^*, \lambda^*, \mu^*) &= 0 \\ \mu_i^* q_i(x^*) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{aligned}$$

Diz-se que λ^* e μ^* são os multiplicadores de Lagrange associados ao ponto estacionário x^* .

Uma caracterização de um ponto estacionário para o problema (2.2) é dada pelo seguinte sistema de equações e inequações:

$$\begin{aligned} L'_x(x, \lambda, \mu) &= 0, \\ h(x) &= 0, \\ g(x) &\leq 0, \\ \mu &\geq 0, \\ \langle \mu, g(x) \rangle &= 0 \end{aligned} \tag{2.5}$$

nas variáveis $(x, \lambda, \mu) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}_+^m$.

Existem condições em que se x^* é um ponto KKT do problema (2.2) implica que x^* é solução. Mas primeiro vejamos um problema em que uma a solução não é um ponto KKT.

Exemplo 2.2.10. Dado o problema:

$$\begin{aligned} \min \quad & x \\ \text{S. a} \quad & x^2 \leq 0. \end{aligned}$$

Observemos que o único ponto viável do problema acima é $x^* = 0$. Por outro lado, temos que a Lagrangiana é dada por $L(x, \mu) = x + \mu x^2$. Logo $L'_x(x, \mu) = 1 + 2\mu x$. Daí, o sistema que caracteriza um ponto KKT é

$$\begin{aligned} 1 + 2\mu x &= 0, \\ x^2 &\leq 0, \\ \mu &\geq 0, \\ \mu x^2 &= 0. \end{aligned}$$

Assim, $x^* = 0$ não obedece a primeira equação, para qualquer $\mu \geq 0$ e μx^2 , ou seja, $x^* = 0$ não é um ponto KKT.

Teorema 2.2.11. Seja $x^* \in \mathbb{R}^n$ um ponto KKT do problema (2.2). Sejam f e q funções convexas e seja p uma função afim. Então x^* é solução do problema (2.2).

Demonstração. Ver [19].

□

O sistema (2.5) pode ser utilizado para encontrar possíveis soluções do problema (2.1), onde primeiramente analisa-se os pontos encontrados. Esta análise será de fundamental importancia para o desenvolvimento desta tese.

Capítulo 3

Algoritmo de ponto fixo

Neste capítulo, desenvolveremos um método de ponto fixo para resolver o problema (1.1), onde assumiremos $b_i > 0$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$, pois caso $b_i < 0 \iff -b_i > 0$, para algum i , basta fazer uma mudança de variável, de acordo com [22]. Usando as condições de KKT a solução é estabelecida como um zero de uma função dual de uma variável real, linear por partes e não diferenciável. Apresentaremos uma formulação do ponto fixo, análise de convergência e experimentos numéricos.

3.1 Formulação de ponto fixo

Nesta seção, apresentaremos condições de otimalidade, a motivação para o desenvolvimento do método e o ponto de partida para o método.

Consideremos a Lagrangiana do problema (1.1) dada por

$$L(x, \lambda, \mu, \omega) = \frac{1}{2}x^T Px - a^T x + \lambda(b^T x - c) + \langle \mu, \ell - x \rangle + \langle \omega, x - u \rangle,$$

onde λ é o multiplicador associado a restrição de igualdade $b^T x - c = 0$, μ e ω são os multiplicadores associados às restrições de desigualdades $\ell - x \leq 0$ e $x - u \leq 0$, respectivamente.

Teorema 3.1.1. *Um vetor $x^* \in \mathbb{R}^n$ é uma solução do problema (1.1) se, e somente se, existem multiplicadores de Lagrange $\lambda_* \in \mathbb{R}$, $\mu^* \in \mathbb{R}_+^n$ e $\omega^* \in \mathbb{R}_+^n$ tais que*

$$p_i x_i^* - a_i + b_i \lambda_* - \mu_i^* + \omega_i^* = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.1)$$

e, além disso,

$$\mu_i^*(\ell_i - x_i^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3.2)$$

$$\omega_i^*(x_i^* - u_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.3)$$

Demonstração. Segue pelos Teoremas 2.2.8 e 2.2.11. \square

Lema 3.1.2. *Sob as hipóteses do Teorema 3.1.1. Para cada $i = 1, 2, \dots, n$, temos que (3.1) é equivalente a*

$$\left. \begin{aligned} 0 &\geq \frac{p_i u_i - a_i}{b_i} + \lambda_* \quad , \text{ se } x_i^* = u_i \\ 0 &= \frac{p_i x_i^* - a_i}{b_i} + \lambda_* \quad , \text{ se } x_i^* \in (\ell_i, u_i) \\ 0 &\leq \frac{p_i \ell_i - a_i}{b_i} + \lambda_* \quad , \text{ se } x_i^* = \ell_i. \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

Demonstração. Seja $x^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução do problema (1.1). Se $x_i^* = u_i$, por (3.2) $\mu_i^* = 0$ e $\omega_i^* \geq 0$. Por (3.1), temos

$$0 = p_i x_i^* - a_i + b_i \lambda_* - \mu_i^* + \omega_i^* = p_i u_i - a_i - b_i \lambda_* + \omega_i^* \geq p_i u_i - a_i + b_i \lambda_*.$$

Então

$$0 \geq \frac{p_i u_i - a_i}{b_i} + \lambda_*.$$

Se $x_i^* \in (\ell_i, u_i)$, por (3.2) e (3.3), $\mu_i^* = 0$ e $\omega_i^* = 0$. Por (3.1) temos

$$0 = p_i x_i^* - a_i + b_i \lambda_* - \mu_i^* + \omega_i^* = p_i x_i^* - a_i + b_i \lambda_*.$$

Então

$$0 = \frac{p_i x_i^* - a_i}{b_i} + \lambda_*.$$

Se $x_i^* = \ell_i$, por (3.3) $\omega_i^* = 0$ e $\mu_i^* \geq 0$. Por (3.1), temos

$$0 = p_i x_i^* - a_i + b_i \lambda_* - \mu_i^* + \omega_i^* = p_i \ell_i - a_i + b_i \lambda_* - \mu_i^* \leq p_i \ell_i - a_i + b_i \lambda_*.$$

Então

$$0 \leq \frac{p_i \ell_i - a_i}{b_i} + \lambda_*.$$

Assim concluímos a prova. \square

Motivado por (3.4), definimos uma função x dependendo da variável λ , como a

seguir. Seja $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\lambda \mapsto x(\lambda) = \left(x_1(\lambda), x_2(\lambda), \dots, x_n(\lambda) \right)$, com

$$x_i(\lambda) = \begin{cases} \ell_i & , \text{ se } \lambda \geq \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \\ \frac{a_i - \lambda b_i}{p_i} & , \text{ se } \frac{a_i - p_i u_i}{b_i} < \lambda < \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \\ u_i & , \text{ se } \lambda \leq \frac{a_i - p_i u_i}{b_i}, \end{cases} \quad (3.5)$$

para todo $i = 1, 2, \dots, n$.

Teorema 3.1.3. *Um vetor $x^* \in \mathbb{R}^n$ é a única solução do problema (1.1) se, e somente se, existe um multiplicador $\lambda_* \in \mathbb{R}$ tal que $x(\lambda_*)$ definido em (3.5) satisfaz*

$$b^T x(\lambda_*) = c. \quad (3.6)$$

Demonstração. Sejam $x^* \in \mathbb{R}^n$ uma solução do problema (1.1) e $\lambda_* \in \mathbb{R}$ que satisfaz (3.1), logo $b^T x^* = c$. Reciprocamente, pelo Lema 3.1.2, o par (x^*, λ_*) satisfaz (3.4). Agora, definindo $x(\lambda_*)$ como em (3.5). Assim, se $x_i^* = \ell_i$ para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, temos que

$$0 \geq \frac{p_i \ell_i - a_i}{b_i} + \lambda_* \Leftrightarrow \lambda_* \leq \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i},$$

então $x_i(\lambda_*) = \ell_i$, ou seja, $x_i^* = x_i(\lambda_*)$. Se $x_i^* \in (\ell_i, u_i)$ para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, temos

$$0 = \frac{p_i x_i^* - a_i}{b_i} + \lambda_* \Leftrightarrow x_i^* = \frac{a_i - b_i \lambda_*}{p_i},$$

$$\ell_i < \frac{a_i - b_i \lambda_*}{p_i} < u_i \Leftrightarrow \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} < \lambda_* < \frac{a_i - p_i u_i}{b_i},$$

então $x_i(\lambda_*) = \frac{a_i - b_i \lambda_*}{p_i}$, ou seja, $x_i^* = x_i(\lambda_*)$. Se $x_i^* = u_i$ para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, temos

$$0 \leq \frac{p_i u_i - a_i}{b_i} + \lambda_* \Leftrightarrow \lambda_* \leq \frac{a_i - p_i u_i}{b_i}$$

então $x_i(\lambda_*) = u_i$, ou seja, $x_i^* = x_i(\lambda_*)$. Assim concluímos que $x^* = x(\lambda_*)$, logo $b^T x(\lambda_*) = c$. Por outro lado, se para algum λ_* e $x(\lambda_*)$ definido por (3.5) satisfaz $b^T x(\lambda_*) = c$. Pelo Lema 3.1.2, o par $(x(\lambda_*), \lambda_*)$ também satisfaz (3.4). Logo, $x(\lambda_*)$ é solução do problema (1.1). \square

O Teorema 3.1.3 nos diz que resolver o problema da mochila quadrático é equivalente a resolver a equação de uma variável

$$b^T x(\lambda) = c,$$

onde cada coordenada $x_i(\lambda)$ é definida por (3.5).

Agora, considere a função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dada por

$$g(\lambda) := b^T x(\lambda) - c = \sum_{i=1}^n b_i x_i(\lambda) - c \quad (3.7)$$

onde $x_i(\lambda)$ é definida por (3.5).

Usando (3.5) definimos os seguintes conjuntos:

$$I_\ell = I_\ell(\lambda) := \left\{ i \in \{1, 2, \dots, n\} : \lambda \geq \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \right\},$$

$$I_u = I_u(\lambda) := \left\{ i \in \{1, 2, \dots, n\} : \lambda \leq \frac{a_i - p_i u_i}{b_i} \right\}, \quad (3.8)$$

$$I_{eq} = I_{eq}(\lambda) := \{1, 2, \dots, n\} \setminus (I_\ell \cup I_u).$$

Agora, considere a função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dada por

$$g(\lambda) := b^T x(\lambda) - c = \sum_{i=1}^n b_i x_i(\lambda) - c \quad (3.9)$$

onde $x_i(\lambda)$ é definida por (3.5).

Logo, podemos reescrever g da seguinte forma

$$\begin{aligned} g(\lambda) &= \sum_{i \in I_\ell} b_i x_i(\lambda) + \sum_{i \in I_u} b_i x_i(\lambda) + \sum_{i \in I_{eq}} b_i x_i(\lambda) - c \\ &= \sum_{i \in I_\ell} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}} b_i \frac{a_i - \lambda b_i}{p_i} - c \\ &= \sum_{i \in I_\ell} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}} \left(\frac{b_i a_i}{p_i} - \frac{\lambda b_i^2}{p_i} \right) - c \\ &= \sum_{i \in I_\ell} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}} \frac{b_i a_i}{p_i} - \lambda \sum_{i \in I_{eq}} \frac{b_i^2}{p_i} - c. \end{aligned}$$

Então, $g(\lambda) = 0$ se, e somente se,

$$\lambda \sum_{i \in I_{eq}} \frac{b_i^2}{p_i} = \sum_{i \in I_\ell} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}} \frac{b_i a_i}{p_i} - c.$$

Assim, temos

$$\lambda = \frac{\sum_{i \in I_\ell} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}} \frac{b_i a_i}{p_i} - c}{\sum_{i \in I_{eq}} \frac{b_i^2}{p_i}} \quad (3.10)$$

Então, definimos a seguinte função

$$F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R},$$

$$\lambda \mapsto F(\lambda) = \frac{\sum_{i \in I_\ell(\lambda)} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u(\lambda)} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}(\lambda)} \frac{b_i a_i}{p_i} - c}{\sum_{i \in I_{eq}(\lambda)} \frac{b_i^2}{p_i}}. \quad (3.11)$$

Observa-se que um ponto λ_* é um zero de g se, e somente se, é um ponto fixo de F , ou seja, $g(\lambda_*) = 0 \iff \lambda_* = F(\lambda_*)$.

Observação 3.1.4. A equação (3.10) aparece em [23] como um passo intermediário do algoritmo de variável-fixa. Além disso, seguindo [23], podemos assumir que para todo $k \in \mathbb{N}$, se $I_{eq}(\lambda_k) \neq \emptyset$, então $I_{eq}(\lambda_{k+1}) \neq \emptyset$.

3.2 O algoritmo de ponto fixo e análise de convergência

Ao implementarmos um algoritmo é necessário tomarmos um ponto inicial. Para isso, e seguindo [13, 23, 28], começamos assumindo o problema (1.1) sem restrição de caixa, então temos

$$p_i x_i^* - a_i + \lambda_* b_i = 0 \iff p_i x_i^* b_i - a_i b_i + \lambda_* b_i^2 = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

logo

$$x_i^* b_i - \frac{a_i b_i}{p_i} + \lambda_* \frac{b_i^2}{p_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Somando e usando que $b^T x^* = c$, obtemos

$$\sum_{i=1}^n x_i^* b_i - \sum_{i=1}^n \frac{a_i b_i}{p_i} + \lambda_* \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i} = 0 \iff c - \sum_{i=1}^n \frac{a_i b_i}{p_i} + \lambda_* \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i} = 0.$$

Então, concluímos que

$$\lambda_* = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{a_i b_i}{p_i} - c}{\sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i}}.$$

Assim, vamos considerar o ponto inicial como sendo

$$\lambda_0 = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{a_i b_i}{p_i} - c}{\sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i}}. \quad (3.12)$$

Agora, descrevemos formalmente o algoritmo baseado em ponto fixo, que chamaremos FPA, que vem do inglês *Fixed-Point Algorithm*. Por uma questão de simplicidade, para todo $k \in \mathbb{N}$, denotemos $I_\ell(\lambda_k) := I_\ell^k$, $I_u(\lambda_k) := I_u^k$ e $I_{eq}(\lambda_k) := I_{eq}^k$.

Algoritmo 3.2.1. (Algoritmo FPA)

Passo 0: Faça $k = 0$ e tome $\lambda_k \in \mathbb{R}$ dado por (3.12).

Passo 1: Para cada $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, considere o intervalo $\left[\frac{a_i - p_i u_i}{b_i}, \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \right]$ e calcule I_ℓ^k , I_u^k , I_{eq}^k , dados por (3.8).

Passo 2: Calcule

$$\lambda_{k+1} = \frac{\sum_{i \in I_\ell^k} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u^k} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i a_i}{p_i} - c}{\sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i^2}{p_i}}$$

Passo 3: Se $|\lambda_{k+1} - \lambda_k| < \epsilon$, então faça x_i de acordo com (3.5) e PARE. Caso contrário, faça $k := k + 1$ e volte ao **Passo 1**.

Kim e Wu [20] propuseram uma melhoria caracterizada pela eliminação de cálculos de todas as variáveis primárias, assim como ocorre em [13] e [23]. A formulação natural do algoritmo FPA a partir de (3.5) conduz a uma melhoria do algoritmo proposto em [20]. Além disso, o algoritmo FPA não necessita de uma etapa de fixação de variáveis como em outros métodos propostos na literatura, embora possamos implementá-los. Com isso, nosso objetivo é a simplicidade do método e sua extensão melhorando o seu desempenho.

A seguir apresentaremos resultados sobre a convergência do Algoritmo FPA. Faremos em duas partes, quando a sequência gerada for finita e quando for infinita. O resultado a seguir é um critério de parada do algoritmo.

Proposição 3.2.2. *Se o Algoritmo FPA gerar uma sequência finita, então o último ponto é uma solução do problema (1.1).*

Demonstração. Vamos supor que $\lambda_{k+1} = \lambda_k \in \mathbb{R}$ é o último ponto obtido pelo algoritmo proposto. Assim, temos que

$$\lambda_k = \frac{\sum_{i \in I_\ell^k} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u^k} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i a_i}{p_i} - c}{\sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i^2}{p_i}}$$

e

$$\sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i^2}{p_i} \lambda_k = \sum_{i \in I_\ell^k} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u^k} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i a_i}{p_i} - c.$$

Isso implica que

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i \in I_\ell^k} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u^k} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i a_i}{p_i} - \sum_{i \in I_{eq}^k} \frac{b_i^2}{p_i} \lambda_k - c \\ &= g(\lambda_k). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Portando, $x(\lambda_k)$, com x_i dada por (3.5) para todo $i = 1, 2, \dots, n$, é solução do problema (1.1). \square

A partir de agora, assumimos que o algoritmo FPA gera uma sequência infinita denotada por $\{\lambda_k\}$, e apresentamos as seguintes propriedades importantes.

Proposição 3.2.3. *A sequência $\{\lambda_k\}$ é limitada, isto é, existe $M > 0$, tal que $|\lambda_k| \leq M$ para todo $k \in \mathbb{N}$.*

Demonstração. Para todo $k \in \mathbb{N}$, temos

$$\begin{aligned} |\lambda_k| &= \left| \frac{\sum_{i \in I_\ell^{k-1}} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u^{k-1}} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}^{k-1}} \frac{b_i a_i}{p_i} - c}{\sum_{i \in I_{eq}^{k-1}} \frac{b_i^2}{p_i}} \right| \\ &\leq \left| \frac{\sum_{i \in I_\ell^{k-1}} b_i \ell_i + \sum_{i \in I_u^{k-1}} b_i u_i + \sum_{i \in I_{eq}^{k-1}} \frac{b_i a_i}{p_i} - c}{\min \left\{ \frac{b_i^2}{p_i} : 1 \leq i \leq n \right\}} \right| \end{aligned}$$

$$\leq \frac{\|b\|(\|\ell\| + \|u\|) + \left| n. \max \left\{ \frac{b_i a_i}{p_i} : 1 \leq i \leq n \right\} \right| + |c|}{\min \left\{ \frac{b_i^2}{p_i} : 1 \leq i \leq n \right\}}$$

=: M .

□

Como em [28], no próximo resultado, assumimos que as desigualdades usadas nas definições de $I_\ell(\lambda)$ e $I_u(\lambda)$ são estritas. Então, mostraremos que pequenas perturbações de λ_* não muda os conjuntos de índices. Isso significa que se a iteração de ponto fixo converge, então a iteração termina depois de uma quantidade finita de iteradas com a solução exata λ_* , porque o conjunto de índices não se alteram mais.

Lema 3.2.4. *Seja $\lambda_* \in \mathbb{R}$, tal que $\lambda_* \notin \left\{ \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i}, \frac{a_i - p_i u_i}{b_i} \right\}$, para todo $i = 1, \dots, n$. Então, existe $\epsilon > 0$ tal que, para todo λ , com $|\lambda - \lambda_*| < \epsilon$, tem-se*

$$I_\ell(\lambda) = I_\ell(\lambda_*), \quad I_u(\lambda) = I_u(\lambda_*).$$

Demonstração. Das suposições assumidas, sejam

$$I_\ell(\lambda_*) = \left\{ i \in \{1, 2, \dots, n\} : \lambda_* > \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \right\}$$

$$I_u(\lambda_*) = \left\{ i \in \{1, 2, \dots, n\} : \lambda_* < \frac{a_i - p_i u_i}{b_i} \right\}.$$

Agora, definimos

$$\epsilon := \min \left\{ \left| \lambda_* - \frac{a_i - p_i u_i}{b_i} \right|, \left| \lambda_* - \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \right| : i = 1, \dots, n \right\}.$$

Como $|\lambda - \lambda_*| < \epsilon \iff \lambda_* - \epsilon < \lambda < \lambda_* + \epsilon$. Pela definição de ϵ , temos

$$\epsilon \leq \left| \lambda_* - \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \right|, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n.$$

Se $i \in I_\ell(\lambda_*)$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, ou seja, $\lambda_* > \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i}$, temos

$$\lambda > \lambda_* - \epsilon \geq \lambda_* - \left(\lambda_* - \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} \right) = \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i}.$$

Então $I_\ell(\lambda_*) \subset I_\ell(\lambda)$. Por outro lado, se $i \notin I_\ell(\lambda_*)$ para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, ou seja,

$\lambda_* \leq \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i}$, temos

$$\lambda < \lambda_* + \epsilon \leq \lambda_* + \left(\frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i} - \lambda_* \right) = \frac{a_i - p_i \ell_i}{b_i},$$

então, $I_\ell(\lambda) \subset I_\ell(\lambda_*)$. Portanto, $I_\ell(\lambda) = I_\ell(\lambda_*)$, para todo $\lambda \in (\lambda_* - \epsilon, \lambda_* + \epsilon)$.

De maneira análoga, conclui-se que $I_u(\lambda) = I_u(\lambda_*)$. De fato, temos que

$$\epsilon \leq \left| \lambda_* - \frac{a_i - p_i u_i}{b_i} \right|, \forall i = 1, \dots, n.$$

Se $i \in I_u(\lambda_*)$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, ou seja, $\lambda_* < \frac{a_i - p_i u_i}{b_i}$, temos

$$\lambda < \lambda_* + \epsilon \leq \lambda_* + \left(\frac{a_i - p_i u_i}{b_i} - \lambda_* \right) = \frac{a_i - p_i u_i}{b_i},$$

Então $I_u(\lambda_*) \subset I_u(\lambda)$. Por outro lado, Se $i \notin I_u(\lambda_*)$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, ou seja, $\lambda_* \geq \frac{a_i - p_i u_i}{b_i}$, temos

$$\lambda > \lambda_* - \epsilon \geq \lambda_* - \left(\lambda_* - \frac{a_i - p_i u_i}{b_i} \right) = \frac{a_i - p_i u_i}{b_i}.$$

então, $I_u(\lambda) \subset I_u(\lambda_*)$. Portanto, $I_u(\lambda) = I_u(\lambda_*)$, para todo $\lambda \in (\lambda_* - \epsilon, \lambda_* + \epsilon)$. Assim concluímos a prova. \square

3.3 Experimentos numéricos

Nesta seção, apresentamos diversos experimentos numéricos utilizando o algoritmo FPA. O algoritmo proposto é simples e pode ser usado para resolver diferentes formas do problema da mochila quadrático.

Comparamos o algoritmo FPA com outros algoritmos conhecidos na literatura: método baseado em Newton [13], fixação de variáveis [23], método baseado em secante [14] e busca de mediana [22].

Implementamos os métodos em C e os compilamos com sinalizadores de otimização `-march=native-O3-fast-math` em GCC versão 12.2.0. Todos os experimentos foram realizados em um PC Desktop Ubuntu com processador Intel Core i5 CPU 2,9 GHz com 16GB de RAM.

Os problemas resolvidos foram gerados randomicamente com tamanhos de médio e grande porte, com dimensões de $n = 500,000$ a $n = 50,000,000$. Como em [9] e [13], os problemas foram divididos em quatro classes:

1. Não correlacionadas: $a_i, b_i, p_i \in [10, 25]$;
2. Fracamente correlacionadas: $b_i \in [10, 25]$, $a_i, p_i \in [b_i - 5, b_i + 5]$;
3. Fortemente correlacionadas: $b_i \in [10, 25]$, $a_i = p_i = b_i + 5$;
4. Fluxo: $p_1 = 1$, $p_n = 10^4$, $p_i \sim U[d_1, d_n]$ para $i = 2, \dots, n - 1$, e $a_i \sim U[-1000, 1000]$, $b_i = 1$, $\ell_i = 0$, $u_i \sim U[0, 1000]$ para todo $i = 1, \dots, n$ enquanto c foi selecionado uniformemente em $[b^T \ell, b^T u]$.

Para as classes de problemas 1, 2 e 3, também fazemos ℓ_i, u_i como em [13], que foram escolhidos uniformemente em $[4, 18]$ e $c \in [b^T \ell, b^T u]$.

Nas tabelas seguintes a coluna erro corresponde ao número de experimentos com falhas, se o número for zero significa que não ocorreu falha em nenhum experimento. É considerado falha o experimento que:

- Alcançar o número máximo de 100 iterações;
- O resíduo relativo não é pequeno suficiente ($1e^{-8}$);
- O valor ótimo, quando o problema é visto como uma D-projeção, não é aproximadamente igual aos dos outros solvers.

A partir das Tabelas 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4, podemos ver os resultados do algoritmo de busca FPA, Newton, Secante, Fixação de variável e Busca de mediana, com o tempo em milissegundos, ao longo de 50 testes gerados randomicamente para cada dimensão e classe. Cada teste aleatório foi repetido 20 vezes em loop para obter uma estimativa confiável para o tempo de execução. Relatamos o tempo médio de cada teste aleatório. O critério de parada usado para o algoritmo FPA está de acordo com o critério

$$|\lambda - \lambda_*| < \epsilon,$$

onde ϵ é um número real positivo pequeno maior que 0 e o valor escolhido foi $\epsilon = 10e^{-12}$, como em [13].

Tabela 3.1: Testes não correlacionados

Dimensão	Iterações			Tempo (seg)			Erro	Iterações			Tempo (seg)			Erro
	avg	max	min	avg	max	min		avg	max	min	avg	max	min	
n	FPA						—	Newton						—
500000	5.3	8	4	0.011	0.020	0.010	0	5.3	8	4	0.018	0.023	0.015	0
1000000	5.5	10	4	0.023	0.036	0.020	0	5.5	10	4	0.038	0.047	0.030	0
10000000	5.4	10	4	0.416	0.482	0.377	0	5.2	10	4	0.434	0.535	0.346	0
50000000	5.3	8	3	2.078	2.360	1.904	0	5.2	7	3	2.181	2.649	1.555	0
	Secante							Fixação de variável						
500000	8.7	14	7	0.020	0.028	0.014	0	8.8	11	8	0.022	0.025	0.021	0
1000000	8.6	13	6	0.041	0.059	0.029	0	9.0	12	7	0.047	0.053	0.041	0
10000000	8.5	14	7	0.443	0.658	0.285	0	9.3	12	8	0.539	0.622	0.468	0
50000000	8.5	12	6	2.323	3.254	1.426	0	9.5	11	8	2.718	3.065	2.377	0
	Busca de mediana													
500000	19.9	20	19	0.037	0.040	0.032	0							
1000000	20.8	21	20	0.077	0.085	0.067	0							
10000000	24.3	25	24	0.895	1.010	0.785	0							
50000000	26.7	27	26	4.562	5.059	4.189	0							

Tabela 3.2: Testes fracamente correlacionados

Dimensão	Iterações			Tempo (seg)			Erro	Iterações			Tempo (seg)			Erro
	avg	max	min	avg	max	min		avg	max	min	avg	max	min	
n	FPA						—	Newton						—
500000	5.2	8	4	0.011	0.021	0.010	0	5.1	8	4	0.019	0.024	0.015	0
1000000	5.2	9	4	0.023	0.043	0.020	0	5.2	9	4	0.037	0.050	0.032	0
10000000	5.2	10	3	0.419	0.483	0.369	0	5.1	10	3	0.419	0.501	0.318	0
50000000	5.3	7	4	2.085	2.434	1.927	0	5.1	7	3	2.105	2.476	1.721	0
	Secante							Fixação de variável						
500000	8.5	13	7	0.021	0.037	0.012	0	8.2	11	7	0.022	0.025	0.019	0
1000000	8.4	13	6	0.039	0.066	0.023	0	8.5	11	7	0.046	0.053	0.040	0
10000000	8.3	14	6	0.417	0.658	0.235	0	9.0	12	8	0.534	0.589	0.483	0
50000000	8.4	12	6	2.236	3.186	1.094	0	9.1	10	8	2.610	2.911	2.372	0
	Busca de mediana													
500000	19.9	20	19	0.039	0.049	0.033	0							
1000000	20.9	21	20	0.078	0.098	0.066	0							
10000000	24.2	25	24	0.916	1.049	0.787	0							
50000000	26.8	27	26	4.478	4.891	4.031	0							

Tabela 3.3: Testes fortemente correlacionados

Dimensão	Iterações			Tempo (seg)			Erro	Iterações			Tempo (seg)			Erro
	avg	max	min	avg	max	min		avg	max	min	avg	max	min	
n	FPA						—	Newton						—
500000	4.9	8	3	0.011	0.020	0.009	0	4.9	8	3	0.017	0.021	0.013	0
1000000	5.2	8	4	0.023	0.041	0.020	0	5.1	8	4	0.036	0.045	0.031	0
10000000	5.2	10	4	0.418	0.507	0.383	0	5.0	10	4	0.407	0.494	0.359	0
50000000	5.0	9	4	2.016	2.305	1.883	0	4.9	9	4	1.961	2.345	1.757	0
	Secante							Fixação de variável						
500000	8.1	12	6	0.018	0.032	0.012	0	8.2	10	7	0.021	0.024	0.019	0
1000000	8.5	11	7	0.037	0.064	0.025	0	8.4	10	7	0.045	0.049	0.040	0
10000000	8.3	12	6	0.382	0.637	0.239	0	8.9	12	8	0.517	0.573	0.482	0
50000000	7.9	11	6	1.927	3.082	1.016	0	9.0	12	8	2.542	2.695	2.338	0
	Busca de mediana													
500000	19.9	20	19	0.037	0.040	0.034	0							
1000000	21.0	21	20	0.075	0.082	0.068	0							
10000000	24.3	25	24	0.896	1.042	0.790	0							
50000000	26.7	27	26	4.375	4.570	3.893	0							

Tabela 3.4: Testes Fluxos

Dimensão	Iterações			Tempo (seg)			Erro	Iterações			Tempo (seg)			Erro
	n	avg	max	min	avg	max		min	—	avg	max	min	avg	
	FPA							Newton						
500000	6.2	8	5	0.011	0.021	0.009	0	6.1	8	4	0.017	0.022	0.010	0
1000000	6.5	9	5	0.024	0.046	0.020	0	6.5	9	5	0.036	0.048	0.025	0
10000000	6.4	11	4	0.438	0.531	0.369	0	6.1	10	4	0.403	0.507	0.258	0
50000000	6.5	9	5	2.135	2.351	1.925	0	6.2	9	5	1.978	2.604	1.542	0
	Secante							Fixação de variável						
500000	14.4	16	9	0.018	0.022	0.013	0	6.2	8	5	0.015	0.021	0.010	0
1000000	14.6	19	11	0.040	0.052	0.029	0	6.5	9	5	0.033	0.044	0.022	0
10000000	14.3	21	10	0.425	0.791	0.283	0	6.5	11	4	0.376	0.467	0.223	0
50000000	14.2	17	9	2.026	3.088	1.511	0	6.6	9	5	1.860	2.395	1.340	0
	Busca de mediana													
500000	20.0	20	19	0.030	0.034	0.028	0							
1000000	20.9	21	20	0.061	0.068	0.057	0							
10000000	24.3	25	24	0.750	0.825	0.715	0							
50000000	26.6	27	26	3.657	4.012	3.507	0							

O algoritmo FPA foi superior aos outros métodos apenas para problemas fracamente correlacionados e não correlacionados com um grande número de variáveis, por exemplo, $n=10,000,000$ e $n=50,000,000$. Para os demais problemas, o FPA não apresenta melhor desempenho que o algoritmo de Newton.

Os resultados mostram ainda que todos os algoritmos resolveram todos os problemas corretamente.

Capítulo 4

Algoritmo tipo-Newton

Neste capítulo, usaremos um método tipo-Newton para resolver o problema (1.1). Primeiramente reformularemos o problema (1.1) obtendo uma função não diferenciável. A partir da suavização dessa função propomos um método tipo-Newton, apresentaremos análise de convergência e experimentos numéricos.

4.1 Reformulação do problema

Pelo Teorema 2.2.11, um ponto KKT $x^* \in \mathbb{R}^n$ é uma solução do problema (1.1).

A Lagrangiana $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^n \times \mathbb{R}_+^n \rightarrow \mathbb{R}$ associada ao problema (1.1) tem a forma

$$L(x, \lambda, \mu, \omega) = \frac{1}{2}x^T Px - a^T x + \lambda(c - b^T x) + \langle \mu, \ell - x \rangle + \langle \omega, x - u \rangle,$$

onde λ é o multiplicador associado a restrição de igualdade $c - b^T x = 0$, μ e ω são os multiplicadores associados às restrições de desigualdades $\ell - x \leq 0$ e $x - u \leq 0$, respectivamente.

Logo, a derivada parcial da Lagrangiana na variável x_i é dada por

$$L'_{x_i}(x, \lambda, \mu, \omega) = x_i p_i - a_i - \lambda b_i - \mu_i + \omega_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

As condições de otimalidade de KKT para o problema (1.1), são:

$$\sum_{i=1}^n b_i x_i = c, \quad (4.1)$$

$$\ell_i \leq x_i \leq u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.2)$$

$$x_i p_i - a_i - \lambda b_i - \mu_i + \omega_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.3)$$

$$\mu_i(\ell_i - x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.4)$$

$$\omega_i(x_i - u_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.5)$$

$$\mu_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.6)$$

$$\omega_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.7)$$

Consideremos os multiplicadores de Lagrange μ_i e ω_i como função do multiplicador de Lagrange λ , definidos da forma

$$\mu_i(\lambda) = \max\{0, \ell_i p_i - \lambda b_i - a_i\}, \quad \omega_i(\lambda) = \max\{0, \lambda b_i + a_i - u_i p_i\} \quad (4.8)$$

e

$$x_i(\lambda) = \text{proj}_{[\ell_i, u_i]} \bar{x}_i(\lambda), \quad (4.9)$$

a projeção de $\bar{x}_i(\lambda)$ no intervalo $[\ell_i, u_i]$, onde $\bar{x}_i(\lambda) = \frac{\lambda b_i + a_i}{p_i}$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$.

Tomando $\mu_i(\lambda)$, $\omega_i(\lambda)$ e $x_i(\lambda)$, dadas em (4.8) e (4.9), respectivamente, é imediato que satisfazem as condições (4.2), (4.6) e (4.7), para todo $i = 1, 2, \dots, n$. Vejamos agora que $\mu_i(\lambda)$, $\omega_i(\lambda)$ e $x_i(\lambda)$ também satisfazem as condições (4.3), (4.4) e (4.5).

Proposição 4.1.1. *Se $\mu_i(\lambda)$, $\omega_i(\lambda)$ e $x_i(\lambda)$ são definidos por (4.8) e (4.9), respectivamente, então satisfazem a condição (4.4).*

Demonstração. Se $x_i(\lambda) = \ell_i$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, temos que

$$\mu_i(\lambda) \left(\ell_i - x_i(\lambda) \right) = 0,$$

pois $\ell_i - x_i(\lambda) = 0$. Por outro lado, se $x_i(\lambda) \neq \ell_i$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, temos $\ell_i < x_i(\lambda)$ e conseqüentemente

$$\ell_i < \frac{\lambda b_i + a_i}{p_i} \iff \ell_i p_i - \lambda b_i - a_i < 0.$$

Logo, $\mu_i(\lambda) = 0$. Então,

$$\mu_i(\lambda) \left(\ell_i - x_i(\lambda) \right) = 0.$$

Portanto, (4.4) é satisfeita. □

Proposição 4.1.2. Se $\mu_i(\lambda)$, $\omega_i(\lambda)$ e $x_i(\lambda)$ são definidos por (4.8) e (4.9), respectivamente, então satisfazem a condição (4.5).

Demonstração. Se $x_i(\lambda) = u_i$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, temos que

$$\omega_i(\lambda) \left(x_i(\lambda) - u_i \right) = 0,$$

pois $x_i(\lambda) - u_i = 0$. Por outro lado, se $x_i(\lambda) \neq u_i$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, temos $x_i(\lambda) < u_i$ e consequentemente

$$\frac{\lambda b_i + a_i}{p_i} < u_i \iff \lambda b_i + a_i - u_i p_i < 0.$$

Logo, $\omega_i(\lambda) = 0$. Assim,

$$\omega_i(\lambda) \left(x_i(\lambda) - u_i \right) = 0.$$

Portanto, (4.5) é satisfeita. □

Proposição 4.1.3. Se $\mu_i(\lambda)$, $\omega_i(\lambda)$ e $x_i(\lambda)$ são definidos por (4.8) e (4.9), respectivamente, então satisfazem a condição (4.3).

Demonstração. Se $x_i(\lambda) = \ell_i$, logo $x_i(\lambda) \neq u_i$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Temos que

$$\frac{\lambda b_i + a_i}{p_i} \leq \ell_i \iff \ell_i p_i - \lambda b_i - a_i \geq 0.$$

Logo, $\mu_i(\lambda) = \ell_i p_i - \lambda b_i - a_i$ e $\omega_i(\lambda) = 0$. Substituindo em (4.3), temos

$$\ell_i p_i - a_i - \lambda b_i - (\ell_i p_i - \lambda b_i - a_i) + 0 = \ell_i p_i - a_i - \lambda b_i - \ell_i p_i + \lambda b_i + a_i = 0.$$

Se $x_i(\lambda) = u_i$, logo $x_i(\lambda) \neq \ell_i$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Temos que

$$\frac{\lambda b_i + a_i}{p_i} \geq u_i \iff \lambda b_i + a_i - u_i p_i \geq 0.$$

Logo, $\omega_i(\lambda) = \lambda b_i + a_i - u_i p_i$ e $\mu_i(\lambda) = 0$. Substituindo em (4.3), temos

$$u_i p_i - a_i - \lambda b_i - 0 + \lambda b_i + a_i - u_i p_i = 0.$$

Se $x_i(\lambda) = \frac{\lambda b_i + a_i}{p_i}$, logo $\ell_i < x_i(\lambda) < u_i$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Temos que,

$$\ell_i p_i - \lambda b_i - a_i < 0$$

e

$$\lambda b_i + a_i - u_i p_i < 0.$$

Logo, $\mu_i(\lambda) = 0$ e $\omega_i(\lambda) = 0$. Substituindo em (4.3), temos

$$\frac{\lambda b_i + a_i}{p_i} p_i - a_i - \lambda b_i - 0 + 0 = \lambda b_i + a_i - a_i - \lambda b_i = 0.$$

Portanto, (4.3) é satisfeita. □

Dessa forma, $\mu_i(\lambda)$, $\omega_i(\lambda)$ e $x_i(\lambda)$ satisfazem todas as condições de KKT (4.2) - (4.7), exceto a condição (4.1). Então

$$x(\lambda) = \left(x_1(\lambda), x_2(\lambda), \dots, x_n(\lambda) \right), \quad (4.10)$$

onde $x_i(\lambda)$ é definido por (4.9) é uma solução do problema (1.1) se, e somente se, satisfaz

$$b^T x(\lambda) = c. \quad (4.11)$$

O problema n -dimensional é transformado em um problema unidimensional, o qual consiste que em determinar uma solução de uma equação não linear de uma variável real.

Considere $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida por

$$g(\lambda) = b^T x(\lambda) - c = \sum_{i=1}^n b_i x_i(\lambda) - c = \text{proj}_{[\ell_i, u_i]}^{\bar{x}_i(\lambda)} - c. \quad (4.12)$$

Resolver o problema (1.1) é equivalente a encontrar uma raiz da função real g definida por (4.12).

Temos que, a função g é contínua, linear por partes, não decrescente e não diferenciável. Os possíveis pontos em que g é não diferenciável são os *breakpoint* $\frac{\ell_i p_i - a_i}{b_i}$ e $\frac{u_i p_i - a_i}{b_i}$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$. Além disso, a função é constante até o menor *breakpoint* $\bar{\lambda}_m = \min \left\{ \frac{p_i \ell_i - a_i}{b_i}, \frac{u_i p_i - a_i}{b_i} : i = 1, 2, \dots, n \right\}$ e a partir do maior *breakpoint* $\bar{\lambda}_M = \max \left\{ \frac{p_i \ell_i - a_i}{b_i}, \frac{u_i p_i - a_i}{b_i} : i = 1, 2, \dots, n \right\}$.

Exemplo 4.1.4. Seja $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$. Consideremos o seguinte problema da mochila quadrático:

$$\begin{cases} \min_x & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) - (x_1 - x_2) \\ \text{S.a} & x_1 + 2x_2 = 10, \\ & 1 \leq x_1 \leq 10 \\ & 1 \leq x_2 \leq 5 \end{cases}$$

A função g dada na equação (4.12) para o problema é dada por

$$g(\lambda) = \text{proj}_{[1,10]}^{1+\lambda} + 2\text{proj}_{[1,5]}^{2\lambda-1} - 10.$$

Seus *breakpoint* são os números reais 0, 1, 3 e 9. A figura 4.1 mostra a representação gráfica da função g gerada a partir do Exemplo 4.1.4 e onde formam “bicos” no gráfico são os pontos em que as abscissas são iguais aos *breakpoint* e onde g não é diferenciável.

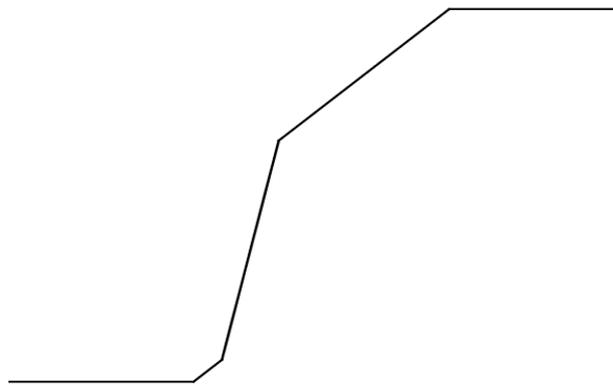


Figura 4.1: Gráfico de g para o Exemplo 4.1.4.

A não diferenciabilidade de g torna desafiador o uso de métodos de busca de zeros que necessitam da derivada. Então, procuraremos aproximações suaves de (4.12) para superar esta dificuldade.

Primeiramente, reformularemos o operador projeção em um intervalo. Observamos a seguinte identidade

$$\text{proj}_{[\ell,u]}(x) = \max(\ell, \min(x, u)). \quad (4.13)$$

Agora, relembremos algumas identidades entre o máximo e o mínimo entre dois números reais $a, b \in \mathbb{R}$. Temos que,

$$\min(a, b) = -\max(-a, -b). \quad (4.14)$$

E também, podemos calcular o máximo de dois números reais a e b da seguinte forma:

$$\max(a, b) = a + \max(0, b - a). \quad (4.15)$$

As identidades (4.13), (4.14) e (4.15) são de fácil verificação.

Usando (4.14) e (4.15), de maneira adequada, em (4.13), temos:

$$\begin{aligned}
 \text{proj}_{[\ell, u]}(x) &= \max(\ell, -\max(-x, -u)) \\
 &= \ell + \max(0, -\ell - \max(-x, -u)) \\
 &= \ell + \max(0, -\ell - (-x + \max(0, -u - (-x)))) \\
 &= \ell + \max(0, x - \ell - \max(0, x - u)),
 \end{aligned}$$

logo

$$\text{proj}_{[\ell, u]}(x) = \ell + \max(0, x - \ell - \max(0, x - u)). \quad (4.16)$$

Definindo $r(\lambda) = \max(0, \lambda)$ e usando (4.16), podemos reescrever (4.9) da seguinte forma

$$x_i(\lambda) = \ell_i + r\left(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i)\right). \quad (4.17)$$

Portanto, (4.12) é equivalente a

$$g(\lambda) = \sum_{i=1}^n b_i \left(\ell_i + r(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i)) \right) - c, \quad (4.18)$$

com $\bar{x}_i(\lambda) = \frac{\lambda b_i + a_i}{p_i}$ para todo $i = 1, 2, \dots, n$.

Em busca de uma aproximação suave da função g , dada em (4.18), vamos pegar uma classe de funções aproximação suave paramétrica da função $\max(0, \lambda)$ sob certas condições.

4.2 Aproximação suave da função $g(\lambda)$

Nesta seção, tomaremos uma classe de funções aproximações suaves paramétricas ou, simplismente, aproximações suaves da função $r(\lambda) = \max(0, \lambda)$, essa classe de funções suaves fazem parte das funções suaves dada em [12]. Substituiremos, em (4.18), a função $r(\lambda)$ por uma aproximação suave $\phi(\lambda, \tau)$ e utilizaremos a diferenciabilidade da função obtida para encontrar um zero de g dada na equação (4.18).

Primeiramente, definiremos $\phi(\lambda, \tau)$ uma aproximação suave de $r(\lambda)$, baseado em [12].

Definição 4.2.1. *Seja $\phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ uma função suave paramétrica. Dizemos que $\phi(\lambda, \tau)$ é uma aproximação suave da função $r(\lambda)$ se existir uma função contínua estritamente crescente $v : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$, com $v(0) = 0$, tal que*

$$|\phi(\lambda, \tau) - r(\lambda)| \leq v(\tau), \text{ para todo } \lambda \in \mathbb{R} \text{ e } \tau > 0. \quad (4.19)$$

Por (4.19), a função $\phi(\lambda, \tau)$ aproxima-se de $r(\lambda)$ quando $\tau > 0$ aproxima-se de 0.

Para a classe de funções aproximações suaves $\phi(\lambda, \tau)$, assumiremos algumas propriedades sobre a primeira e segunda derivada de $\phi(\lambda, \tau)$ em relação a λ . São elas:

- (i) $\phi' : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow [0, 1]$;
- (ii) $\phi'(\lambda, \tau) \in C^1$ em relação a λ ;
- (iii) $\phi''(\lambda, \tau) > 0$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$, ou seja, $\phi'(\lambda, \tau)$ é estritamente crescente para cada $\tau > 0$;
- (iv) $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \phi'(\lambda, \tau) = 0$ e $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \phi'(\lambda, \tau) = 1$.

Considerando a propriedade (iii), pelo Teorema 2.2.7, temos que $\phi(\lambda, \tau)$ é estritamente convexa, com $\tau > 0$. Foi mostrado em [12] (Proposição 2.1), que se $\phi(\lambda, \tau)$ é uma aproximação suave de $r(\lambda)$ e é estritamente convexa então $0 < \phi'(\lambda, \tau) < 1$.

Abaixo segue dois exemplos de funções aproximações suaves, onde é de fácil verificação as propriedade (i)-(iv):

Exemplo 4.2.2. *Função de suavização de rede neural*

$$\phi_1(\lambda, \tau) = \tau \ln(1 + e^{\frac{\lambda}{\tau}}), \quad \tau > 0,$$

onde $v(\tau) = \tau \ln 2$.

Exemplo 4.2.3. *Função de suavização de pontos internos*

$$\phi_2(\lambda, \tau) = \frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 + \tau}}{2}, \quad \tau > 0,$$

onde $v(\tau) = \frac{\sqrt{\tau}}{2}$.

Nas figuras 4.2 e 4.3, são apresentados os gráficos das aproximações suaves $\phi_1(\lambda, 1)$ e $\phi_2(\lambda, 1)$, onde $\tau = 1$, dos Exemplos 4.2.2 e 4.2.3, respectivamente.

Substituindo $r(\lambda)$ por $\phi(\lambda, \tau)$ em (4.17), temos

$$x_{i_\phi}(\lambda, \tau) = \ell_i + \phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau). \quad (4.20)$$

Seja $g_\phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ uma função, definida por

$$g_\phi(\lambda, \tau) = \sum_{i=1}^n b_i \left(\ell_i + \phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau) \right) - c, \quad (4.21)$$

onde ϕ é uma aproximação suave e $\tau > 0$.

Sendo ϕ uma função suave, logo g_ϕ também é uma função suave. Veremos a seguir que g_ϕ é uma aproximação suave de g .

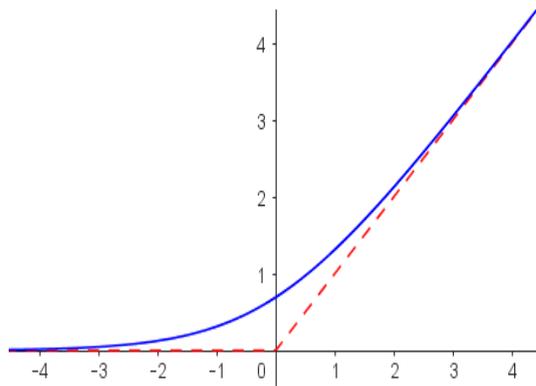


Figura 4.2: Gráfico de $\phi_1(\lambda, 1)$.

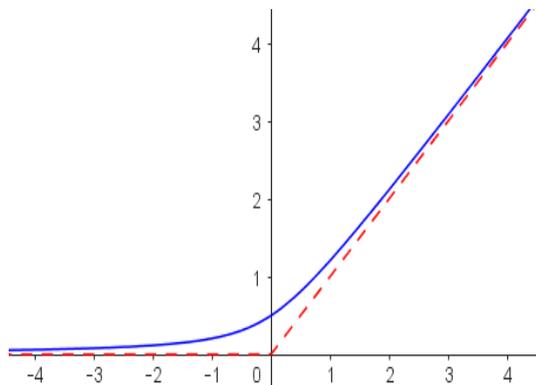


Figura 4.3: Gráfico de $\phi_2(\lambda, 1)$.

Lema 4.2.4. *Sejam $\phi: \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ uma aproximação suave de $r(\lambda)$, $v: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ uma função de acordo com a Definição 4.2.1, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$. Se $|\alpha - \beta| \leq v(\tau)$, então*

$$|\phi(\alpha, \tau) - \phi(\beta, \tau)| \leq 3v(\tau). \quad (4.22)$$

Demonstração. Temos que

$$\begin{aligned} |\phi(\alpha, \tau) - \phi(\beta, \tau)| &= |\phi(\alpha, \tau) - r(\alpha) + r(\alpha) - r(\beta) + r(\beta) - \phi(\beta, \tau)| \\ &\leq |\phi(\alpha, \tau) - r(\alpha)| + |r(\alpha) - r(\beta)| + |r(\beta) - \phi(\beta, \tau)|. \end{aligned}$$

É de fácil verificação que vale a desigualdade $|r(\alpha) - r(\beta)| \leq |\alpha - \beta|$ e por (4.19), temos

$$|\phi(\alpha, \tau) - \phi(\beta, \tau)| \leq 3v(\tau).$$

□

Proposição 4.2.5. *Sejam x_i e x_{i_ϕ} dadas por (4.17) e (4.20), respectivamente. Para todo $\lambda \in \mathbb{R}$, $\tau > 0$ e $i = 1, 2, \dots, n$, vale*

$$|x_{i_\phi}(\lambda, \tau) - x_i(\lambda)| \leq 4v(\tau) \quad (4.23)$$

Demonstração. Por (4.19), temos que

$$|\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau) - (\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i))| \leq v(\tau).$$

Agora por (4.22), temos que

$$|\phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau) - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i), \tau)| \leq 3v(\tau).$$

Logo,

$$\begin{aligned} |x_{i_\phi}(\lambda, \tau) - x_i(\lambda)| &= |\phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau) - r(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i))| \\ &\leq |\phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau) - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i), \tau)| \\ &\quad + |\phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i), \tau) - r(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - r(\bar{x}_i(\lambda) - u_i))| \\ &\leq 4v(\tau). \end{aligned}$$

□

Por (4.23), temos que $x_{i_\phi}(\lambda, \tau) \rightarrow x_i(\lambda)$ quando $\tau \rightarrow 0^+$.

Proposição 4.2.6. *Sejam g e g_ϕ dadas por (4.18) e (4.21), respectivamente. Existe uma constante $C > 0$, tal que*

$$|g_\phi(\lambda, \tau) - g(\lambda)| \leq C \cdot v(\tau), \text{ para todo } \lambda \in \mathbb{R} \text{ e } \tau > 0. \quad (4.24)$$

Demonstração. Temos que

$$\begin{aligned} |g_\phi(\lambda, \tau) - g(\lambda)| &= \left| \sum_{i=1}^n b_i (x_{i_\phi}(\lambda, \tau) - x_i(\lambda)) \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^n |b_i| \cdot |(x_{i_\phi}(\lambda, \tau) - x_i(\lambda))|. \end{aligned}$$

Por (4.23), temos

$$|g_\phi(\lambda, \tau) - g(\lambda)| \leq \sum_{i=1}^n |b_i| \cdot 4 \cdot v(\tau).$$

Fazendo $C = 4 \sum_{i=1}^n |b_i|$, temos (4.24). □

Pela Proposição 4.2.6, temos que $g_\phi(\lambda, \tau)$ é uma aproximação suave de $g(\lambda)$, ou seja, $g_\phi(\lambda, \tau) \rightarrow g(\lambda)$ quando $\tau \rightarrow 0^+$.

Tomando $\tau = 1$, ϕ_1 e ϕ_2 as aproximações suaves dos Exemplos 4.2.2 e 4.2.3, respectivamente, temos que as funções g_{ϕ_1} e g_{ϕ_2} para o Exemplo 4.1.4 são

$$g_{\phi_1}(\lambda) = \ln(1 + e^{\lambda - \ln(1 + e^{\lambda - 9})}) + 2 \ln(1 + e^{2\lambda - 2 - \ln(1 + e^{2\lambda - 6})}) - 7$$

$$g_{\phi_2}(\lambda) = \frac{5\lambda - \sqrt{(\lambda - 9)^2 + 1} + \sqrt{(\lambda + 9 - \sqrt{(\lambda - 9)^2 + 1})^2 + 4} - 2\sqrt{(2\lambda - 6)^2 + 1} + 2\sqrt{(2\lambda + 2 - \sqrt{(2\lambda - 6)^2 + 1})^2 + 4} - 15}{4}.$$

As figuras 4.4 e 4.5 mostram os gráficos das funções g_{ϕ_1} e g_{ϕ_2} .

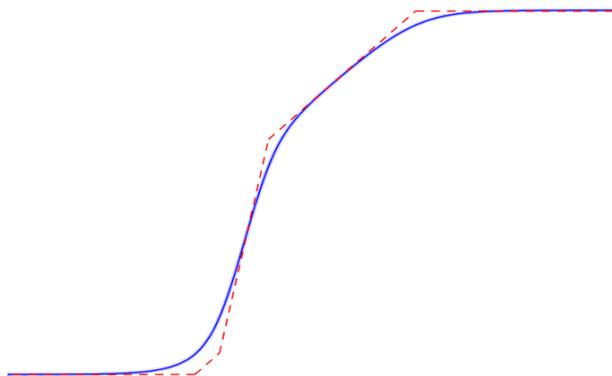


Figura 4.4: Gráfico de g_{ϕ_1} para o Exemplo 4.1.4, com $\tau = 1$.

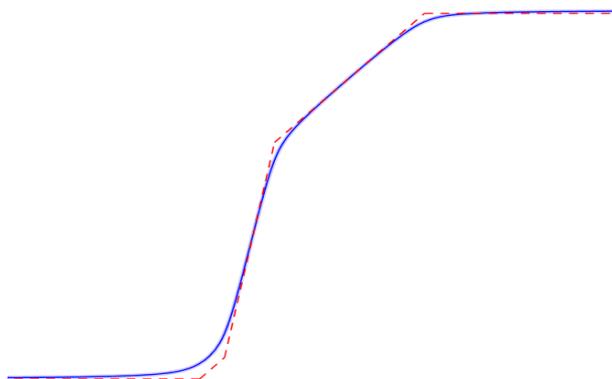


Figura 4.5: Gráfico de g_{ϕ_2} para o Exemplo 4.1.4, com $\tau = 1$.

Agora veremos que uma sequência de zeros de funções aproximações de g converge para um zero de g . Para cada $k \in \mathbb{N}$ tomemos $\tau_k > 0$ e $\phi_k(\lambda, \tau_k) := \phi(\lambda, \tau_k)$, com $\phi(\lambda, \tau)$ uma aproximação suave de $r(\lambda)$.

Proposição 4.2.7. *Seja $\{\tau_k\}$ uma sequência de números reais estritamente decrescente, tal que $\tau_k \rightarrow 0^+$. Se existe $\tilde{\lambda}_k$, tal que $g_{\phi_k}(\tilde{\lambda}_k, \tau_k) = 0$ para cada $k \in \mathbb{N}$, então*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g(\tilde{\lambda}_k) = 0$$

Demonstração. Por hipótese, para cada $k \in \mathbb{N}$, temos que $g_{\phi_k}(\tilde{\lambda}_k, \tau_k) = 0$ e por (4.24), temos

$$|g(\tilde{\lambda}_k)| = |g(\tilde{\lambda}_k) - g_{\phi_k}(\tilde{\lambda}_k, \tau_k)| \leq Cv(\tau_k)$$

Passando ao limite, na desigualdade acima, com $k \rightarrow \infty$, temos que $Cv(\tau_k) \rightarrow 0$, pois $\tau_k \rightarrow 0^+$. Logo

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |g(\tilde{\lambda}_k)| = 0.$$

Portanto,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g(\tilde{\lambda}_k) = 0.$$

□

Corolário 4.2.8. *Sob as hipóteses da Proposição 4.2.7. Seja $\tilde{\lambda}_*$ um ponto de acumulação da sequência $\{\tilde{\lambda}_k\}$, então*

$$g(\tilde{\lambda}_*) = 0.$$

Demonstração. Sem perda de generalidade, suponhamos que $\tilde{\lambda}_k \rightarrow \tilde{\lambda}_*$. Pela continuidade da função g e pela Proposição 4.2.7, temos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g(\tilde{\lambda}_k) = 0 \Rightarrow g\left(\lim_{k \rightarrow \infty} \tilde{\lambda}_k\right) = 0 \Rightarrow g(\tilde{\lambda}_*) = 0.$$

□

O próximo resultado mostra que a primeira derivada de g_ϕ , dada por (4.21), é estritamente positiva, em relação a λ , ou seja, $g'_\phi(\lambda, \tau) > 0$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$.

Proposição 4.2.9. *Para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$, tem-se*

$$0 < g'_\phi(\lambda, \tau) < \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i}. \quad (4.25)$$

Além disso, $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} g'_\phi(\lambda, \tau) = \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} g'_\phi(\lambda, \tau) = 0$

Demonstração. Usando as regras de derivação para derivar $g_\phi(\lambda, \tau)$, temos que

$$g'_\phi(\lambda, \tau) = \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i} \phi'(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau) (1 - \phi'(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau)).$$

Sendo $0 < \phi'(\lambda, \tau) < 1$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$, temos que $1 - \phi'(\lambda, \tau) < 1$. Logo

$$0 < g'_\phi(\lambda, \tau) < \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i}.$$

Agora, sejam $I_+ = \{i \in \{1, 2, \dots, n\} \mid b_i > 0\}$ e $I_- = \{i \in \{1, 2, \dots, n\} \mid b_i < 0\}$. Primentamente, tomemos $\lambda \rightarrow +\infty$. Se $i \in I_+$, temos que $\bar{x}_i(\lambda) \rightarrow +\infty$. Logo $\phi'(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau) \rightarrow 1 \Rightarrow (1 - \phi'(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau) \rightarrow 0)$ e $\phi'(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau)$ é limitada, então

$$\phi'(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau)(1 - \phi'(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau)) \rightarrow 0, \quad \forall i \in I_+.$$

Agora, se $i \in I_-$, temos que $\bar{x}_i(\lambda) \rightarrow -\infty \Rightarrow \bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau) \rightarrow -\infty$. Logo $\phi'(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau) \rightarrow 0$ e $(1 - \phi'(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau))$ é limitada, então

$$\phi'(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i - \phi(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau), \tau)(1 - \phi'(\bar{x}_i(\lambda) - u_i, \tau)) \rightarrow 0, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

Portanto, $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} g'_\phi(\lambda, \tau) = 0$. Para mostrar que $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} g'_\phi(\lambda, \tau) = 0$ é análogo. Assim, concluímos a prova. \square

Pelo Corolário 2.1.7, tem-se que g_ϕ é estritamente crescente. Além disso, $g'_\phi(\lambda, \tau) \neq 0$, para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$, nos motivou a propor um método tipo-Newton.

4.3 Um método tipo-Newton e resultados de convergência

Nesta seção, propomos um método do tipo-Newton para resolver um caso particular do Problema (1.1), apenas com limite inferior na restrição de caixa e mostraremos que esse método tem convergência global.

4.3.1 Método tipo-Newton

A partir de agora, consideramos $b_i > 0$ e $u_i = +\infty$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$, temos que x_i , dada por (4.17) e as funções g e g_ϕ , dadas por (4.18) e (4.21), respectivamente, se resumem da seguinte forma:

$$x_i(\lambda) = \ell_i + r(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i), \tag{4.26}$$

$$g(\lambda) = \sum_{i=1}^n b_i r(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i) + \sum_{i=1}^n b_i \ell_i - c, \tag{4.27}$$

$$g_\phi(\lambda, \tau) = \sum_{i=1}^n b_i \phi(\bar{x}_i(\lambda) - \ell_i) + \sum_{i=1}^n b_i \ell_i - c, \tag{4.28}$$

onde $\bar{x}_i(\lambda) = \frac{b_i \lambda + a_i}{p_i}$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$.

A função g , definida em (4.27), é não decrescente, sendo constante até o menor breakpoint $\bar{\lambda}_m$ e estritamente crescente a partir de $\bar{\lambda}_m$ e convexa. Já a função g_ϕ , definida em (4.28), com $\tau > 0$, é estritamente crescente e estritamente convexa para todo $\lambda \in \mathbb{R}$. De fato, derivando duas vezes $g_\phi(\lambda, \tau)$, em relação a λ , temos

$$g_\phi''(\lambda, \tau) = \sum_{i=1}^n \frac{b_i^3}{p_i^2} \phi''\left(\frac{b_i \lambda + a_i}{p_i} - \ell_i\right) > 0.$$

Como a derivada segunda de g_ϕ é estritamente positiva, pelo Teorema 2.2.7, segue que g_ϕ é estritamente convexa. Vamos também modificar a desigualdade (4.19) para a seguinte forma:

$$0 \leq \phi(\lambda, \tau) - r(\lambda) \leq v(\tau), \text{ para todo } \lambda \text{ e } \tau \geq 0, \quad (4.29)$$

onde $v(\tau)$ é de acordo com a Definição 4.2.1.

Proposição 4.3.1. *Assumindo que valem as hipóteses (4.29) e (iii). Então*

$$\phi(\lambda, \tau) > r(\lambda) \geq 0, \quad (4.30)$$

para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$.

Demonstração. Ver [12]. □

Pela desigualdade (4.30), obtém-se a seguinte desigualdade:

$$g(\lambda) < g_\phi(\lambda, \tau), \text{ para todo } \lambda \text{ e } \tau > 0. \quad (4.31)$$

Agora vamos definir o algoritmo tipo-Newton. Inicialmente, escolhamos três números reais, ou seja, um $\tau > 0$ suficientemente pequeno, $\epsilon > 0$ e um ponto inicial λ_0 . Esse algoritmo é baseado no Método de Newton para limite simples (Algoritmo 1, [13]), onde substituímos a derivada lateral pela derivada de uma aproximação suave.

Algoritmo 4.3.2. (Método tipo-Newton)

Passo 0. *Escolhe-se $\lambda_0 \in \mathbb{R}$, $\epsilon > 0$ e $\tau > 0$ suficientemente pequeno.*

Passo 2. *Calcule*

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{g(\lambda_k)}{g'_\phi(\lambda_k, \tau)}. \quad (4.32)$$

Passo 3. *Se $|g(\lambda_{k+1})| < \epsilon$, então faça x_i de acordo com (4.26) e PARE. Caso contrário, faça $k := k + 1$ e volte ao **Passo 1**.*

Pela Proposição 4.2.9, o Algoritmo 4.3.2 está bem definido, visto que $g'_\phi(\lambda, \tau) \neq 0$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$.

4.3.2 Análise de convergência

Nesta seção, mostraremos que o método tipo-Newton converge. Primeiramente, mostraremos que, sob certas condições, existe uma sequência crescente que converge para um zero da função dada g dada na equação (4.27). O resultado seguinte mostra que se uma sequência gerada pelo método tipo-Newton converge, então seu limite é um zero de g .

Lema 4.3.3. *Sob as hipóteses da Proposição 4.2.7. A sequência $\{\tilde{\lambda}_k\}$ possui uma sub-sequência crescente que converge para um zero de (4.27).*

Demonstração. Definindo $y_k = g(\tilde{\lambda}_k)$, para cada $k \in \mathbb{N}$. Pela Proposição 4.2.7, $\{y_k\}$ é convergente, logo é limitada, ou seja, existe uma constante positiva $A > 0$, tal que $-A < y_k < A$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Pela desigualdade (4.31), temos que $y_k = g(\tilde{\lambda}_k) < 0$, para todo $k \in \mathbb{N}$, visto que $g_\phi(\tilde{\lambda}_k, \tau_k) = 0$. Assim, temos

$$-A < y_k < 0,$$

para todo $k \in \mathbb{N}$. Pelo Teorema de Bolzano-Weierstrass, temos que $\{y_k\}$ tem uma sub-sequência crescente convergente $\{y_{k_j}\}$, isto é, $y_{k_j} < y_{k_{j+1}}$ para todo $j \in \mathbb{N}$, e $y_{k_j} \rightarrow 0$, pois $y_k \rightarrow 0$. Como g é uma função monótona não-decrescente, temos

$$g(\tilde{\lambda}_{k_j}) < g(\tilde{\lambda}_{k_{j+1}}) \Rightarrow \tilde{\lambda}_{k_j} < \tilde{\lambda}_{k_{j+1}}, \quad \forall j \in \mathbb{N}.$$

Logo $\{\tilde{\lambda}_{k_j}\}$ é uma sequência crescente. Para cada k_j , $j \in \mathbb{N}$, $\tau_{k_j} > 0$ e $\tilde{\lambda}_{k_j}$, tal que $g_{\phi_{k_j}}(\tilde{\lambda}_{k_j}, \tau_{k_j}) = 0$, por (4.31) e supondo que $g(\lambda_*) = 0$, segue que

$$\begin{aligned} g(\lambda_*) &< g_{\phi_{k_j}}(\lambda_*, \tau_{k_j}) \\ 0 &< g_{\phi_{k_j}}(\lambda_*, \tau_{k_j}) \\ g_{\phi_{k_j}}(\tilde{\lambda}_{k_j}, \tau_{k_j}) &< g_{\phi_{k_j}}(\lambda_*, \tau_{k_j}). \end{aligned}$$

Como $g_\phi(\lambda, \tau)$ é estritamente crescente para qualquer que seja $\tau > 0$, então

$$\tilde{\lambda}_{k_j} < \lambda_*, \text{ para todo } j \in \mathbb{N}.$$

Assim, $\{\tilde{\lambda}_{k_j}\}$ é uma sequência crescente e limitada, então é convergente. Seja $\tilde{\lambda}_*$ o limite da sequência $\{\tilde{\lambda}_{k_j}\}$. Passando ao limite na última desigualdade, com $j \rightarrow \infty$, temos

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \tilde{\lambda}_{k_j} \leq \lambda_* \Rightarrow \tilde{\lambda}_* \leq \lambda_*.$$

Pelo Corolário 4.2.8, temos que $g(\tilde{\lambda}_*) = 0$. □

Proposição 4.3.4. *Se a sequência gerada pelo Algoritmo 4.3.2 é convergente, então o seu limite é um zero da função g dada na equação (4.27).*

Demonstração. Seja uma sequência $\{\lambda_k\}$ gerada por (4.32) e seja λ_* seu limite, ou seja, $\lambda_k \rightarrow \lambda_*$. Passando ao limite em (4.32), com $k \rightarrow \infty$, pela continuidade de $g(\lambda)$ e $g'_\phi(\lambda, \tau)$, temos que

$$\lambda_* = \lambda_* - \frac{g(\lambda_*)}{g'_\phi(\lambda_*, \tau)} \iff g(\lambda_*) = 0.$$

□

Teorema 4.3.5. *Sejam $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ e $g_\phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ funções definidas por (4.27) e (4.28), respectivamente. Consideremos que existe um $\tau_0 > 0$, tal que a equação*

$$g_\phi(\lambda, \tau) = 0 \tag{4.33}$$

tem solução, para todo $\tau \in (0, \tau_0]$. Seja $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ um ponto inicial, se $g(\lambda_0) > 0$, então existe $\tau > 0$ suficientemente pequeno, tal que a sequência gerada por (4.32) é convergente.

Demonstração. Denotamos por λ_* um zero da função g dada na equação (4.27). Escolhendo um número real β , com $0 < \beta < 1$. Definindo $\tau_{k+1} = \beta\tau_k$ e seja $\{\tilde{\lambda}_k\}$ uma sequência, onde

$$g_\phi(\tilde{\lambda}_k, \tau_k) = 0,$$

para cada $k \in \mathbb{N}$. Pelo Lema 4.3.3, $\{\tilde{\lambda}_k\}$ possui uma subsequência crescente convergente, onde seu limite é uma raiz de g . Sem perda de generalidade, Assumindo que $\{\tilde{\lambda}_k\}$ é uma sequência crescente e que $\tilde{\lambda}_k \rightarrow \lambda_*$.

Mostraremos por indução que $\{\lambda_k\}$ gerada por (4.32), para algum $\tau > 0$ suficientemente pequeno, é uma sequência monótona decrescente e limitada.

Por hipótese, $0 = g(\lambda_*) < g(\lambda_0) \Rightarrow \lambda_* < \lambda_0$. Supondo que $\lambda_* \leq \lambda_k$. Pela desigualdade (4.31), temos que

$$g(\lambda_k) + (\lambda_* - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_n) < g_\phi(\lambda_k, \tau_n) + (\lambda_* - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_n),$$

somando e subtraindo o termo $\tilde{\lambda}_n g'_\phi(\lambda_k, \tau_n)$ no lado direito da última desigualdade, temos

$$g(\lambda_k) + (\lambda_* - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_n) < g_\phi(\lambda_k, \tau_n) + (\tilde{\lambda}_n - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_n) + (\lambda_* - \tilde{\lambda}_n)g'_\phi(\lambda_k, \tau_n), \tag{4.34}$$

para qualquer $\tilde{\lambda}_n$ e $\tau_n > 0$, com $g_\phi(\tilde{\lambda}_n, \tau_n) = 0$.

Sendo $\lambda_* - \tilde{\lambda}_n \geq 0$, para todo $n \in \mathbb{N}$ e pela desigualdade (4.2.9), obtemos a seguinte desigualdade:

$$g(\lambda_k) + (\lambda_* - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_n) < g_\phi(\lambda_k, \tau_n) + (\tilde{\lambda}_n - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_n) + (\lambda_* - \tilde{\lambda}_n) \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i}. \tag{4.35}$$

Pela definição de limite, para todo $\epsilon > 0$ existe $n_0 \in \mathbb{N}$, tal que para todo $n \geq n_0 \Rightarrow$

$|\lambda_* - \tilde{\lambda}_n| < \epsilon$. Como $\tilde{\lambda}_n$ depende de τ_n , logo em (4.35), temos

$$g(\lambda_k) + (\lambda_* - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0}) < g_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0}) + (\tilde{\lambda}_{n_0} - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0}) + \epsilon \cdot \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i}.$$

Tomando $\epsilon > 0$ suficientemente pequeno, temos

$$g(\lambda_k) + (\lambda_* - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0}) \leq g_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0}) + (\tilde{\lambda}_{n_0} - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0}). \quad (4.36)$$

Como $g_\phi(\lambda, \tau)$ é uma função diferenciável e convexa em relação a λ , para cada $\tau > 0$, pelo Teorema 2.2.6, temos

$$g_\phi(\tilde{\lambda}, \tau) \geq g_\phi(\lambda, \tau) + (\tilde{\lambda} - \lambda)g'_\phi(\lambda, \tau), \text{ para todo } \lambda, \tilde{\lambda} \text{ e } \tau > 0.$$

Em particular, fazendo $\tau = \tau_{n_0}$, $\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}_{n_0}$ e $\lambda = \lambda_k$ na última desigualdade e usando a propriedade da transitividade com a desigualdade (4.36), então

$$g(\lambda_k) + (\lambda_* - \lambda_k)g'_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0}) \leq g_\phi(\tilde{\lambda}_{n_0}, \tau_{n_0}) = 0.$$

Daí, temos que

$$\lambda_* \leq \lambda_k - \frac{g(\lambda_k)}{g'_\phi(\lambda_k, \tau_{n_0})} = \lambda_{k+1}, \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Portando, $\lambda_* \leq \lambda_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

Agora, se $\lambda_* < \lambda_k$ então $g(\lambda_k) \geq 0$, pois $g(\lambda)$ é monótona não decrescente. Logo,

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{g(\lambda_k)}{g'_\phi(\lambda_k, \tau)} \leq \lambda_k.$$

Portanto, a sequência $\{\lambda_k\}$ gerada por (4.32) é monótona não crescente e limitada, logo é convergente. Pela Proposição 4.3.4, seu limite é um zero de g . \square

Observemos que se escolhermos um ponto inicial λ_0 , tal que $g(\lambda_0) < 0$, a sequência $\{\lambda_k\}$ gerada por (4.32) é crescente com λ_* sendo uma cota superior. Caso contrário, existe um $k' \in \mathbb{N}$ tal que $g(\lambda_{k'}) > 0$. Pelo Teorema 4.3.5, com ponto inicial $\lambda_{k'}$ a sequência gerada por (4.32) é convergente. Portanto, para qualquer ponto inicial $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ e $\tau > 0$ suficientemente pequeno o Algoritmo 4.3.2 converge para um zero de g .

4.4 Experimentos numéricos

Nesta seção, apresentamos experimentos numéricos comparando nosso método proposto tipo-Newton, também conhecido como Newton suave, com outros dois. O primeiro

iremos nos referir ao método de Newton não suave, que é um método de Newton que usa derivadas laterais o problema dual lagrangiano [13]. Chamaremos o segundo de método secante, que combina um algoritmo de colchetes na derivada dual lagrangiana e um algoritmo secante para o problema dual lagrangiano, ou seja, um algoritmo com duas fases, a primeira fase de colchetes e a segunda fase secante [14].

Os algoritmos foram escritos em C e executados em um Notebook com Core i5 dual-core de 1,6 GHz. O compilador foi Clang 13.1.6 com flags de otimização `-march=native-O3 -fast-math`. Os códigos para o método de Newton não suave e o método Secante foram extraídos de [13].

Usamos como critério de parada para o Newton suave a forma

$$|g(\lambda_{k+1})| < \epsilon,$$

de acordo com o Algoritmo 4.3.2. Para o parâmetro τ , usamos $\tau = 1$ em todos os experimentos. O ponto inicial λ_0 , foi tomado da forma

$$\lambda_0 = \frac{c - \sum_{i=1}^n \frac{a_i b_i}{p_i}}{\sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{p_i}},$$

como em [13].

Os critérios de paradas utilizados para o método de Newton não suave e o método Secante segue o mesmo apresentado em [13]. Para todos os algoritmos o ϵ foi definido como 10^{-12} .

Executamos o algoritmo proposto com uma relaxação contínua do problema de Posicionamento de Sensores apresentado em [16].

4.4.1 Um problema de posicionamento de sensores

Considere o problema de otimização de posicionar um conjunto $N = \{1, \dots, n\}$ de sensores para cobrir uma área dada, onde a implantação de um sensor tem um custo fixo mais um custo quadrático no raio da superfície coberta [16]. O problema pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 \min \quad & \sum_{i \in N} d_i x_i^2 + \sum_{i \in N} a_i y_i \\
 \text{s.t.} \quad & \sum_{i \in N} x_i = 1 \\
 & 0 \leq x_i \leq y_i \quad \forall i \in N \\
 & y_i \in \{0, 1\} \quad \forall i \in N,
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

onde x_i indica a fração da demanda alocada ao recurso i (nível de uso do recurso i), y_i é uma variável binária que indica se o recurso i está ativo ($x_i > 0 \Rightarrow y_i = 1$) ou não ativo ($x_i = 0 \Rightarrow y_i = 0$) e $d_i > 0$. A formulação acima é um problema não linear inteiro misto e, em particular, todas as restrições são lineares, com as variáveis y restritas a números inteiros.

De acordo com [2], assumindo que $a_i > 0$, no relaxamento contínuo deste problema, as variáveis y_i podem ser “projetadas” sobre x_i ; isto é, já que em otimalidade, deveríamos ter $y_i = x_i$, as y_i variáveis podem ser eliminadas. Seu termo de custo linear é deslocado para o x_i . Agora, o problema é o seguinte:

$$\begin{aligned}
 \min \quad & \sum_{i \in N} d_i x_i^2 + \sum_{i \in N} a_i x_i \\
 \text{s.t.} \quad & \sum_{i \in N} x_i = 1 \\
 & x_i \geq 0 \quad \forall i \in N.
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

Questões de complexidade dos problemas (4.38) podem ser encontrados em [1, 2, 16]. As instâncias do Problema de Posicionamento de Sensores foram geradas com o gerador disponível gratuitamente em <http://groups.di.unipi.it/optimize/Data/RDR.html>.

Geramos quatro tipos de instâncias com base em seu comprimento de acordo com a Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Nomes das instâncias e tamanhos.

Nomes das instâncias	tamanhos das instâncias
I1	$n = 1e3$
I2	$n = 1e4$
I3	$n = 1e5$
I4	$n = 1e6$

Reportaremos os resultados na Tabela 4.2. Como apresentado na Seção 4.2, a etapa de suavização do método Newton suave proposto é implementada de duas maneiras diferentes: função de suavização de rede neural e função de suavização de pontos internos,

Exemplos 4.2.2 e 4.2.3, respectivamente. Nossos resultados referem-se a cada função de suavização como NNSF e IPSF, do inglês *Neural network smoothing function* e *Interior point smoothing function*, respectivamente.

Seguindo [17], nos experimentos, apresentamos o tempo computacional necessário para resolver cada instância do problema. Apresentamos também o número total de iterações para a convergência de cada método. A tabela mostra que o algoritmo proposto é competitivo em comparação com outros algoritmos do estado da arte.

Tabela 4.2: Resultados dos experimentos

Instâncias	Newton suave com NNSF		Newton suave com IPSF		Newton não suave		Secante	
	It.	Tempo	It.	Tempo	It.	Tempo	It.	Tempo
I1	2.0	0.04	311.70	0.99	8.30	0.04	11.00	0.10
I2	2.0	0.43	312.60	10.48	9.40	0.47	14.00	0.94
I3	2.0	4.58	198.60	83.21	71.60	45.01	18.00	11.23
I4	2.0	47.10	921.00	4947.23	698.70	4850.10	21.00	129.41

A Tabela 4.2 mostra que o método Newton suave com NNSF foi superior a todos os outros métodos para todas as instâncias usadas. O método de Newton suave com IPSF não tem um bom desempenho devido ao grande número de iterações para convergir. O método Newton não suave teve uma melhor performance que o método Secante para as instâncias I1 e I2.

Capítulo 5

Considerações finais

Neste trabalho, apresentamos dois métodos para resolver o problema da mochila quadrático não linear. Usando as condições de KKT a solução é estabelecida como um zero de uma função dual de uma variável real, linear por partes e não diferenciável. No primeiro método, propomos o algoritmo FPA, onde a restrição de caixa pode ser com limite inferior e superior. Mostramos que se o algoritmo gerar uma quantidade finita de valores a última iterada é um ponto fixo da função, que a sequência gerada é limitada e que quando a função dual é diferenciável em seu ponto fixo existe um intervalo no qual a iterada de qualquer ponto pertencente ao intervalo é igual ao ponto fixo da função dual. No segundo método, propomos um algoritmo Quase-Newton suave, onde usamos a estratégia de aproximação suave da função máximo e obtemos uma aproximação suave da função dual do problema. Mostramos que uma sequência de zeros de funções aproximações tem uma subsequência que converge para o zero da função dual e considerando um subproblema, onde a restrição de caixa é apenas com limite inferior, o algoritmo Newton suave, escolhendo um parâmetro adequado, tem convergência global e converge para um zero da função dual.

Foram realizados experimentos numéricos que mostraram um bom desempenho do algoritmo FPA, sendo superior em alguns problemas e inferior em outros quando comparado com os algoritmos Newton não suave, Secante, Fixação de variável e busca de mediana. Já o algoritmo Quase-Newton suave com a função aproximação suave NNSF foi superior a todos os métodos que comparamos em todas as instâncias e com a função aproximação suave IPSF foi inferior em todos os casos devido ao grande número de iterações.

No entanto, a simplicidade dos algoritmos propostos, visto que não trás nenhuma outra estratégia de convergência, são bastantes competitivos entre os que foram comparados.

Como pesquisa futura apontamos uma expansão do método Quase-Newton suave, proposto aqui na tese, para o caso em que o limite superior das variáveis seja finito, isto aumenta e muito o escopo de problemas que podem ser resolvidos pelo método. Um outro

bom tema para pesquisas futuras é o problema da Mochila Separável e não convexo.

Referências Bibliográficas

- [1] Agnetis, Alessandro, et al. Covering a line segment with variable radius discs. *Computers & Operations Research* 36.5 (2009): 1423-1436.
- [2] Agnetis, Alessandro, Enrico Grande, and Andrea Pacifici. "Demand allocation with latency cost functions." *Mathematical programming* 132.1-2 (2012): 277-294.
- [3] Bertsekas, D., 1974, *Nondifferentiable Optimization Via Approximation*. 1 ed. Urbana, University of Illinois.
- [4] Birgin, E.G., Martínez, J.M., Raydan, M.: Nonmonotone spectral projected gradient methods for convex sets. *SIAM J. Optim.* 10(4), 1196–1211 (2000)
- [5] Bitran, G. R., Hax, A. C. Disaggregation and resource-allocation using convex knapsack-problems with bounded variables. *Management Science*, 27, 431–441 (1981).
- [6] Bitran, G. R., Tirupati, D. Tradeoff curves, targeting and balancing in manufacturing queueing networks. *Operations Research*, 37, 547–564. (1989).
- [7] Bretthauer, K. M., Ross, A., Shetty, B. Nonlinear integer programming for optimal allocation in stratified sampling. *European Journal of Operational Research*, 116, 667–680. (1999).
- [8] Bretthauer, K. M., Shetty, B. The nonlinear knapsack problem—Algorithms and applications. *European Journal of Operational Research*, 138, 459–472. (2002).
- [9] Bretthauer, K. M., Shetty, B., Syam, S.: A branch- and bound-algorithm for integer quadratic knapsack problems. *ORSA J. Comput.* 7, 109–116 (1995).
- [10] Burden, R. L., Faires, J. D.: *Numerical Analysis*, 9th edition. Thompson Brooks/Cole, Belmont, CA, USA (2011).
- [11] Calamai, P.H., Moré, J.J.: Quasi-Newton updates with bounds. *SIAM J. Numer. Anal.* 24(6), 1434–1441 (1987)
- [12] Chen, B., Harker, P. T. 1997, *P. Smooth Approximations to Nonlinear Complementarity Problems*. *SIAM J. OPTIM.*, v. 7, pp. 403-420.

- [13] Cominetti, R., Mascarenhas, W.F. and Silva, P.J.S. A Newton's method for the continuous quadratic knapsack problem. *Math. Prog. Comp.* 6, 151–169 (2014).
- [14] Dai, Y.H., Fletcher, R.: New algorithms for singly linearly constrained quadratic programs subject to lower and upper bounds. *Math. Program.* 106(3), 403–421 (2006).
- [15] Lima, Elon L.: *Análise real, Volume 1, Funções de uma variável*. 11^aed. Rio de Janeiro: IMPA, 2012.
- [16] Frangioni, Antonio, et al. "Projected perspective reformulations with applications in design problems." *Operations research* 59.5 (2011): 1225-1232.
- [17] Frangioni, Antonio, and Enrico Gorgone. "A library for continuous convex separable quadratic knapsack problems." *European Journal of Operational Research* 229.1 (2013): 37-40.
- [18] Helgason, R., Kennington, J., Lall, H.: A polynomially bounded algorithm for a singly constrained quadratic program. *Math. Program.* 18(1), 338–343 (1980)
- [19] Izmailov, A., Solodov, M. *Otimização, Volume 1*, Rio de Janeiro: IMPA, 2009.
- [20] Kim, G., and C. H. Wu. 2012. "A Pegging Algorithm for Separable Continuous Non-linear Knapsack Problems with Box Constraints." *Engineering Optimization* 44 (10): 1245–1259. doi: 10.1080/0305215X.2011.646263.
- [21] Kiwiel, K. C. On linear-time algorithms for the continuous quadratic knapsack problem. *Mathematical Programming*, 134, 149–154 (2007).
- [22] Kiwiel, K. C. Breakpoint searching algorithms for continuous quadratic knapsack problem. *Mathematical Programming*, 112, 473–491 (2008a).
- [23] Kiwiel, K. C. Variable fixing algorithms for the continuous quadratic knapsack problem. *J. Optim. Theory Appl.* 36(3), 445–458 (2008b).
- [24] Kodialam, M. S., Luss, H. Algorithms for separable nonlinear resource allocation problems. *Operations Research*, 46, 272–284 (1998).
- [25] Koopman, B. O. *Search and screening. General principles with historical applications (Reviseded)*. Alexandria, VA. (1999).
- [26] Maloney, B. M., Klein, C. M. Constrained multi-item inventory systems: An implicit approach. *Computations and Operational Research*, 20, 639–649. (1993).
- [27] Markowitz, H. M. Portfolio selection. *Journal of Finance*, 7, 77–91. (1952).
- [28] Münnich, R.T., Sachs, E.W., Wagner, M.: Numerical solution of optimal allocation problems in stratified sampling under box constraints. *ASTA Advances in Statistical Analysis*. 96(3), 435-450 (2012).

- [29] Nielsen, S. S., Zenios, S. A. Massively parallel algorithms for singly constrained convex programs. *ORSA Journal on Computing*, 4, 166–181 (1992).
- [30] Patriksson, M.: A survey on the continuous nonlinear resource allocation problem. *European Journal of Operational Research*. 185(1), 1–46 (2008).
- [31] Patriksson, M., Strömberg, C.: Algorithms for the continuous nonlinear resource allocation problem: New implementations and numerical studies. *European Journal of Operational Research*. 243(3), 703–722 (2015).
- [32] Ribeiro, Ademir Alves, Karas, Elizabeth Wegner: *Otimização contínua: aspectos teóricos e computacionais*. São Paulo: Cengage Learning, 2013.
- [33] Robinson, A. G., Jiang, N., Lemke, C. S.(1992). On the continuous quadratic knapsack problem. *Mathematical programming*, 55, 99–108.
- [34] Venceslau, Helder Manoel *Subgradiente Diferenciável via suavização hiperbólica*/Helder Manoel Venceslau. - Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.
- [35] Ventura, J.A.: Computational development of a lagrangian dual approach for quadratic networks. *Networks* 21(4), 469–485 (1991)