UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA E DE COMPUTAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

**Novas Abordagens Determinísticas de Otimização para
Resolução do Problema de Fluxo de Potência Ótimo**

DIEGO NUNES DA SILVA

São Carlos
2019

DIEGO NUNES DA SILVA

**Novas Abordagens Determinísticas de Otimização para
Resolução do Problema de Fluxo de Potência Ótimo**

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências, Programa de Engenharia Elétrica.

Área de Concentração: Sistemas Elétricos de Potência.

Orientador: Prof. Dr. Geraldo R. M. da Costa.

São Carlos
2019

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da
EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

S586n Silva, Diego Nunes da
Novas Abordagens Determinísticas de Otimização
para Resolução do Problema de Fluxo de Potência Ótimo /
Diego Nunes da Silva; orientador Geraldo Roberto
Martins da Costa. São Carlos, 2019.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica e Área de Concentração em Sistemas
Elétricos de Potência -- Escola de Engenharia de São
Carlos da Universidade de São Paulo, 2019.

1. Fluxo de potência ótimo. 2. Newton-PL. 3.
Pontos interiores. 4. Região de confiança. 5.
Rescalamento não-linear. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Licenciado **DIEGO NUNES DA SILVA**.

Título da tese: "Novas abordagens determinísticas de otimização para resolução do problema de fluxo de potência ótimo".

Data da defesa: 06/09/2019

Comissão Julgadora:

Prof. Titular **Geraldo Roberto Martins da Costa**
(Orientador)
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Profa. Dra. **Edilaine Martins Soler**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP – Bauru)

Prof. Dr. **José Roberto Sanches Mantovani**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP – Ilha Solteira)

Profa. Dra. **Marina Andretta**
(Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação/ICMC)

Prof. Associado **Eduardo Nobuhiro Asada**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica:
Prof. Titular **Ivan Nunes da Silva**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Titular **Murilo Araujo Romero**

Resultado:

Aprovado

Aprovado

Aprovado

Aprovado

APROVADO

*Dedico aos meus pais, Darci e Eunice,
pelo apoio e amor incondicional.*

Agradecimentos

À Deus, por me dar saúde, perseverança e sabedoria para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Professor Dr. Geraldo Roberto Martins da Costa, pela orientação e confiança em mim depositada. Agradeço por sua paciência e positividade inabaláveis, mesmo diante de todos os percalços, e pelos preciosos ensinamentos sobre a pesquisa e a vida.

Ao meu pai e à minha mãe, que sempre fizeram tudo que estava ao alcance para que eu pudesse prosseguir com meus estudos.

Aos meus familiares, em especial meu irmão, cunhada e sobrinhos que, mesmo à distância, apoiaram-me durante esta jornada.

Aos professores membros das bancas de qualificação e defesa, pelos ensinamentos e sugestões que enriqueceram este trabalho.

À Professora Dra. Edméa Cássia Baptista, da UNESP - Bauru, pelos ensinamentos e por me indicar o artigo sobre o método Newton-PL.

Aos colegas do Laboratório de Análise de Sistemas de Energia Elétrica (LASEE), em especial ao Professor Dr. Benvindo Rodrigues Pereira Junior, por toda a ajuda e amizade desenvolvida ao longo do doutorado.

Às minhas irmãs de trinca, Elis e Gabriela. Obrigado por me suportarem durante esses anos e não me deixarem desanimar diante das adversidades. Apesar da distância e obrigações da vida, vocês permanecerão para sempre em meu coração.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação de Engenharia Elétrica da USP - São Carlos e da UNESP - Bauru, e aos professores da Licenciatura em Matemática da UNESP - Bauru, por seu papel fundamental em minha formação acadêmica.

Aos funcionários do Departamento de Engenharia Elétrica (SEL) da Escola de Engenharia de São Carlos (EESC), pela presteza e atenção concedida.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela credibilidade e apoio financeiro.

“Todas as vitórias ocultam uma abdicação.”

Simone de Beauvoir

Resumo

SILVA, D. N. **Novas Abordagens Determinísticas de Otimização para Resolução do Problema de Fluxo de Potência Ótimo**. 2019. 251 f. Tese (Doutorado em Ciências, Programa de Engenharia Elétrica) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

Em um problema de Fluxo de Potência Ótimo (FPO), o objetivo é determinar um ponto de operação para o sistema elétrico de potência que atenda suas restrições físicas e operacionais, ao mesmo tempo em que se otimiza algum critério de desempenho da rede. O problema de FPO é modelado matematicamente como um problema de Programação Não-Linear Inteira Mista (PNLIM). O objetivo deste trabalho é a investigação e proposição de novas abordagens para resolução do problema de Fluxo de Potência Ótimo Reativo (FPOR), visando a minimização das perdas de potência ativa na transmissão. Três abordagens determinísticas, baseadas em métodos com teoria de convergência desenvolvida, foram investigadas, modificadas e aplicadas. Na primeira abordagem, o sistema restrito de equações não-lineares advindo das condições necessárias de otimalidade de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) é resolvido através de um método do tipo Newton recentemente proposto na literatura. Em contraste com o método de Newton clássico, esta abordagem, denominada Newton com Programação Linear (Newton-PL), é capaz de resolver sistemas restritos de equações não-lineares que também possuem equações de complementaridade. Os resultados numéricos para esta abordagem foram obtidos apenas para a relaxação contínua do problema de FPOR, porém uma possível modificação para sua aplicação em problemas com variáveis discretas é apresentada. Na segunda e terceira abordagens propostas, as variáveis discretas são tratadas como contínuas através de funções penalidade senoidais que são incorporadas à função objetivo, penalizando-a quando as variáveis discretas assumem valores não discretos. Estas duas propostas diferenciam-se pela abordagem de otimização contínua utilizada para resolução dos subproblemas penalizados. Na segunda abordagem, as restrições de desigualdade são tratadas por meio de uma função de rescalamento não-linear, baseada na função barreira logarítmica modificada com extrapolação quadrática. A sequência de problemas de rescalamento não-linear e penalidade com apenas restrições de igualdade é resolvida por meio de um método de

programação quadrática sequencial com região de confiança, cujo passo tentativo é calculado através da soma de um passo normal, que busca atender às restrições linearizadas da melhor maneira possível, e um passo tangencial, que busca reduzir o modelo da função objetivo. Na terceira abordagem, cada problema penalizado é resolvido através de um método primal-dual de pontos interiores com região de confiança. Entretanto, esta abordagem diferencia-se dos métodos de região de confiança clássicos, no sentido de que o passo tentativo não é obtido através da resolução de subproblemas quadráticos. Em vez disso, o passo tentativo é obtido através da combinação convexa de uma direção de Newton e uma direção de máxima descida de referência, que são calculadas a partir de sistemas lineares similares aos tipicamente resolvidos em métodos de pontos interiores. Experimentos numéricos com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras foram conduzidos, e os resultados indicam que as abordagens propostas são robustas.

Palavras-chave: Fluxo de Potência Ótimo, Newton-PL, Pontos Interiores, Região de Confiança, Rescalamento Não-Linear.

Abstract

SILVA, D. N. **New Deterministic Optimization Approaches to Solve the Optimal Power Flow Problem.** 2019. 251 f. Tese (Doutorado em Ciências, Programa de Engenharia Elétrica) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

In an Optimal Power Flow problem (OPF), the goal is to determine a power system operating point that satisfies its physical and operating constraints and, at the same time, optimizes a network performance measure. The mathematical model for the Optimal Power Flow problem is a Mixed Integer Nonlinear Programming problem (MINLP). The goal of this work is to investigate and propose new approaches to solve the Reactive Optimal Power Flow (ROPF) problem, in order to minimize the active power losses. Three deterministic approaches, based on methods with well-established convergence theories, were investigated, modified and applied. In the first approach, the constrained nonlinear system of equations that arises from the KKT necessary optimality conditions is solved by a Newton-type method which has been recently proposed in the literature. In contrast with the classical Newton's method, this approach, called Linear Programming Newton's method (LP-Newton), is able to solve constrained nonlinear systems of equations which include complementarity equations. The numerical results for this approach were obtained only for the continuous relaxation of the ROPF problem, but a possible modification to deal with discrete variables is presented. In the second and third approaches, the discrete variables are treated as continuous by introducing sinusoidal penalty functions in the objective function, penalizing it when discrete variables assume non-discrete values. These two proposals differ by the continuous optimization approach employed to solve the penalty subproblems. In the second approach, inequality constraints are treated by means of a nonlinear rescaling function, based on the modified logarithmic barrier function with quadratic extrapolation. The sequence of nonlinear rescaling penalty problems is solved by a sequential quadratic programming method with a trust region, whose trial step is decomposed in a normal step, that tries to satisfy the linearized constraints as best as possible, and a tangential step, which seeks to minimize the objective function model. In the third approach, each penalty problem is solved by a trust region primal-dual interior

point method. However, this approach is conceptually different of the classical trust region methods, because the trial step is not obtained by solving a quadratic subproblem. Instead, the trial step is obtained as the convex combination of a Newton's direction and a reference steepest descent direction, which are calculated from linear systems that are similar to those of standard interior point methods. Numerical experiments with IEEE 14, 30, 57, 118 and 300-bus test systems were performed, and the results show that the proposed approaches are robust.

Keywords: Optimal Power Flow, LP-Newton, Interior Point, Trust Region, Nonlinear Rescaling.

Lista de Figuras

4.1	Condição de Armijo.	87
4.2	O ponto de Cauchy.	94
4.3	Trajectoria de soluções ótimas para um subproblema de região de confiança, em função do raio.	96
4.4	Método <i>Dogleg</i> : caso em que a solução aproximada coincide com o passo de Newton.	97
4.5	Método <i>Dogleg</i> : caso em que a solução aproximada coincide com o ponto de Cauchy.	98
4.6	Método <i>Dogleg</i> : caso em que a solução aproximada se situa no segmento com extremidades d_1^k e d_N^k	98
4.7	Passo de Newton ($\square$) e solução quase-exata ($\circ$) para um subproblema de região de confiança com modelo quadrático não-convexo.	100
4.8	Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo em que o modelo é convexo.	105
4.9	Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo em que o modelo é não-convexo.	107
4.10	Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo do <i>hard case</i>	108
4.11	Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo, para diferentes valores da primeira coordenada de g , $g_1 = \varepsilon$	109
5.1	IEEE de 14 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.	136
5.2	IEEE de 14 barras: magnitudes de tensão.	138
5.3	IEEE de 30 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.	139
5.4	IEEE de 30 barras: magnitudes de tensão.	141
5.5	IEEE de 57 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.	142
5.6	IEEE de 57 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	143
5.7	IEEE de 57 barras: magnitudes de tensão.	144
5.8	IEEE de 118 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.	146
5.9	IEEE de 118 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	147

5.10	IEEE de 118 barras: magnitudes de tensão.	148
5.11	IEEE de 300 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.	149
5.12	IEEE de 300 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	150
5.13	IEEE de 300 barras: magnitudes de tensão.	151
6.1	Incompatibilidade entre a restrição de região de confiança e as restrições de igualdade linearizadas.	158
6.2	IEEE de 14 barras: magnitudes de tensão.	183
6.3	IEEE de 30 barras: magnitudes de tensão.	185
6.4	IEEE de 57 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	187
6.5	IEEE de 57 barras: susceptâncias <i>shunt</i> equivalentes.	187
6.6	IEEE de 57 barras: magnitudes de tensão.	188
6.7	IEEE de 118 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	190
6.8	IEEE de 118 barras: susceptâncias <i>shunt</i> equivalentes.	190
6.9	IEEE de 118 barras: magnitudes de tensão.	191
6.10	IEEE de 300 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	193
6.11	IEEE de 300 barras: susceptâncias <i>shunt</i> equivalentes.	193
6.12	IEEE de 300 barras: magnitudes de tensão.	194
7.1	IEEE de 14 barras: magnitudes de tensão.	223
7.2	IEEE de 30 barras: magnitudes de tensão.	225
7.3	IEEE de 57 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	226
7.4	IEEE de 57 barras: susceptâncias <i>shunt</i> equivalentes.	226
7.5	IEEE de 57 barras: magnitudes de tensão.	227
7.6	IEEE de 118 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	228
7.7	IEEE de 118 barras: susceptâncias <i>shunt</i> equivalentes.	229
7.8	IEEE de 118 barras: magnitudes de tensão.	229
7.9	IEEE de 300 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	231
7.10	IEEE de 300 barras: susceptâncias <i>shunt</i> equivalentes.	231
7.11	IEEE de 300 barras: magnitudes de tensão.	232

Lista de Tabelas

5.1	Método Newton-PL: parâmetros utilizados nos experimentos numéricos. . .	135
5.2	IEEE de 14 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν	137
5.3	IEEE de 14 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	137
5.4	IEEE de 14 barras: susceptâncias <i>shunt</i> das barras.	137
5.5	IEEE de 30 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν	140
5.6	IEEE de 30 barras: <i>taps</i> dos transformadores.	140
5.7	IEEE de 30 barras: susceptâncias <i>shunt</i> das barras.	140
5.8	IEEE de 57 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν	143
5.9	IEEE de 57 barras: susceptâncias <i>shunt</i> das barras.	144
5.10	IEEE de 118 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν	146
5.11	IEEE de 118 barras: susceptâncias <i>shunt</i> das barras.	147
5.12	IEEE de 300 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν	150
5.13	IEEE de 300 barras: susceptâncias <i>shunt</i> das barras.	151
6.1	Algoritmo Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC): parâmetros utilizados nos experimentos numéricos.	180
6.2	Processo de convergência: IEEE de 14 barras – relaxação contínua. . . .	182
6.3	Processo de convergência: IEEE de 14 barras – discreto.	182
6.4	Processo de convergência: IEEE de 30 barras – relaxação contínua. . . .	184
6.5	Processo de convergência: IEEE de 30 barras – discreto.	185
7.1	Algoritmo Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança e Penalidade Discreta: parâmetros utilizados nos experimentos numéricos. . .	221
7.2	Processo de convergência: IEEE de 14 barras – relaxação contínua. . . .	222
7.3	Processo de convergência: IEEE de 14 barras – discreto.	222
7.4	Processo de convergência: IEEE de 30 barras – relaxação contínua. . . .	224

7.5	Processo de convergência: IEEE de 30 barras – discreto.	224
7.6	Comparação das abordagens implementadas para a relaxação contínua do problema de FPOR.	233
7.7	Comparação das abordagens implementadas para o problema de FPOR discreto.	233

Lista de Siglas

ANEEL Agência Nacional de Energia Elétrica

CCEE Câmara de Comercialização de Energia Elétrica

DE Despacho Econômico

FC Fluxo de Carga

FPO Fluxo de Potência Ótimo

FPOR Fluxo de Potência Ótimo Reativo

KKT Karush-Kuhn-Tucker

MPI Métodos de Pontos Interiores

MRN Método de Rescalamento Não-Linear

Newton-PL Newton com Programação Linear

ONS Operador Nacional do Sistema

PAG Problema de Autovalores Generalizado

PDPIRC Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança

PLIM Programação Linear Inteira Mista

PLS Programação Linear Sequencial

PNL Programação Não-Linear

PNLIM Programação Não-Linear Inteira Mista

PL Programação Linear

PQ Programação Quadrática

PQS Programação Quadrática Sequencial

PSD Programação Semi-Definida

PSO *Particle Swarm Optimization*

RCE Região de Confiança Exterior

RNRC Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança

SEP Sistema Elétrico de Potência

SUMT *Sequential Unconstrained Minimization Technique*

Sumário

1	Introdução	27
2	O Problema de Fluxo de Potência Ótimo	35
2.1	Definição do problema de FPO	35
2.2	Modelo para o problema de FPOR	36
2.2.1	Notação	37
2.2.2	Modelo Matemático	38
2.3	Revisão Bibliográfica	40
2.3.1	Variáveis discretas no problema de FPO	57
3	Métodos de Otimização Restrita	67
3.1	Método Dual-Lagrangiano	69
3.2	Método de Newton-Lagrangiano	71
3.3	Método de Penalidade	73
3.4	Método de Barreira	75
3.5	Método de Rescalamento Não-Linear	78
3.5.1	Função Barreira Logarítmica Modificada	81
3.6	Dificuldades Computacionais	83
4	Método de Região de Confiança	85
4.1	Região de Confiança em Problemas Irrestritos	86
4.1.1	Busca Linear e Região de Confiança	86
4.1.2	Algoritmo Básico de Região de Confiança	88
4.2	Resolução dos Subproblemas de Região de Confiança	92
4.2.1	Ponto de Cauchy	93
4.2.2	Métodos Aproximados	95
4.2.2.1	Método <i>Dogleg</i>	96
4.2.2.2	Método do Gradiente Conjugado de Steihaug	99
4.2.3	Métodos Quase-Exatos	103
4.2.3.1	Soluções exatas na norma Euclidiana	104
4.2.3.2	Método Problema de Autovalores Generalizado (PAG) . .	110

5	Método de Newton com Programação Linear	119
5.1	Método Newton-PL	120
5.1.1	Descrição Geral do Método	121
5.1.2	Busca Unidimensional	123
5.1.3	Aspectos Práticos	124
5.2	Aplicação a Sistemas KKT	126
5.3	Investigações Futuras	128
5.3.1	Tratamento de Variáveis Discretas	128
5.3.2	Condições Necessárias de Fritz-John	131
5.3.3	Região de Confiança	133
5.4	Resultados Numéricos	134
5.4.1	Sistema IEEE de 14 Barras	135
5.4.2	Sistema IEEE de 30 Barras	138
5.4.3	Sistema IEEE de 57 Barras	141
5.4.4	Sistema IEEE de 118 Barras	144
5.4.5	Sistema IEEE de 300 Barras	148
5.4.6	Análise dos Resultados	151
6	Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança	155
6.1	Região de Confiança em Problemas com Restrições de Igualdade	156
6.1.1	Subproblema Normal	159
6.1.2	Subproblema Tangencial	161
6.1.3	Aspectos Práticos	164
6.1.3.1	Multiplicadores de Lagrange	164
6.1.3.2	Função de Mérito, Parâmetro de Penalidade e Aceitação do Passo	165
6.1.3.3	Correção de Segunda Ordem	168
6.1.3.4	Atualização do Raio da Região de Confiança	169
6.1.4	Algoritmo do Método de Região de Confiança para Problemas com Restrições de Igualdade	170
6.2	Penalidade Discreta	171
6.3	Rescalamento Não-Linear	173
6.4	Método de Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC) . .	174
6.4.1	Ciclo Interno	174
6.4.1.1	Vetor Gradiente $\nabla\varphi(x^k)$	175
6.4.1.2	Matriz Hessiana B_k	175
6.4.1.3	Critério de Parada do Ciclo Interno	176
6.4.2	Ciclo Externo	177
6.4.2.1	Critério de Parada do Ciclo Externo	177

6.4.2.2	Atualização de Parâmetros	177
6.4.3	Algoritmo do Método de RNRC	179
6.5	Resultados Numéricos	180
6.5.1	Sistema IEEE de 14 Barras	181
6.5.2	Sistema IEEE de 30 Barras	183
6.5.3	Sistema IEEE de 57 Barras	185
6.5.4	Sistema IEEE de 118 Barras	188
6.5.5	Sistema IEEE de 300 Barras	191
6.5.6	Análise dos Resultados	194
7	Pontos Interiores com Região de Confiança	197
7.1	Método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança (PDPIRC)	199
7.1.1	Ciclo Externo	199
7.1.2	Ciclo Interno: Resolução do Problema de Barreira	202
7.1.2.1	Função de Mérito e Direção de Referência	202
7.1.2.2	Cálculo do Passo para Atualização das Variáveis	207
7.1.3	Aspectos Práticos	210
7.1.3.1	Parâmetro da Combinação Convexa	210
7.1.3.2	Correção de Inércia	210
7.1.3.3	Cálculo do Comprimento de Passo	213
7.1.3.4	Cálculo da Direção de Referência	216
7.1.3.5	Parâmetros de Penalidade da Função de Mérito	216
7.1.3.6	Atualização dos Multiplicadores de Lagrange	217
7.1.3.7	Atualização do Parâmetro de Barreira	217
7.1.3.8	Critério de Parada	217
7.1.4	Tratamento das Variáveis Discretas	218
7.2	Resultados Numéricos	220
7.2.1	Sistema IEEE de 14 Barras	221
7.2.2	Sistema IEEE de 30 Barras	223
7.2.3	Sistema IEEE de 57 Barras	225
7.2.4	Sistema IEEE de 118 Barras	227
7.2.5	Sistema IEEE de 300 Barras	229
7.2.6	Análise dos Resultados	232
8	Conclusões e Perspectivas Futuras	235

Capítulo 1

Introdução

O planejamento e operação de um Sistema Elétrico de Potência (SEP) é uma atividade complexa realizada pelo Operador Nacional do Sistema (ONS). Tendo em vista a importância da eletricidade para a sociedade moderna, o principal objetivo do operador do sistema é garantir que a rede elétrica opere em segurança, de modo a atender à demanda e aos padrões de qualidade da energia definidos pelos órgãos reguladores – no caso brasileiro, estabelecidos pela Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL). Apesar de ser um produto consumido em grande escala, a energia elétrica está sujeita a determinadas leis físicas e restrições que usualmente não se aplicam a outros produtos. Por exemplo, o armazenamento de grandes quantidades de energia elétrica é economicamente inviável, de modo que a eletricidade deve ser gerada e transmitida em função da demanda. Adicionalmente, a transmissão de energia elétrica não ocorre da mesma maneira que a de outros produtos, para os quais um trajeto pode ser escolhido de acordo com as necessidades, mas regida pelas leis de Kirchhoff (GÓMEZ-EXPÓSITO ET AL., 2011).

Além das características intrínsecas da eletricidade, as reformas do setor elétrico ocorridas em diversos países a partir da década de 1990, visando a desverticalização, descentralização e o fim do monopólio estatal, tornaram a tarefa de gerenciar o SEP ainda mais desafiadora. Neste ambiente de mercado, em que as companhias geradoras recebem investimentos privados e visam maximizar seus lucros, o operador de mercado – uma entidade sem fins lucrativos que, no Brasil, é representada pela Câmara de Comercialização de Energia Elétrica (CCEE) – comunica o despacho ao ONS o qual, por sua vez, verifica a factibilidade do despacho do ponto de vista da segurança e confiabilidade do sistema, redespachando as unidades geradoras, caso necessário (CONEJO ET AL., 2010).

Excetuando-se pela competição e impossibilidade de exclusividade, as empresas de distribuição não foram impactadas de maneira significativa pela introdução do ambiente descentralizado de mercado. Em contrapartida, por determinar as condições operacionais que restringem os atacadistas de mercado, o segmento de transmissão teve de sofrer maiores mudanças (GÓMEZ-EXPÓSITO ET AL., 2011). As pressões do livre mercado, baseadas

no princípio de redução de custos, têm feito com que o sistema de transmissão opere cada vez mais próximo de seus limites operacionais (ROSEHART, 2002; LAGE, 2013). Diante deste novo paradigma, em que tanto estruturas centralizadas e verticalizadas quanto mercados desregulamentados e competitivos podem coexistir (GABRIEL ET AL., 2012), as ferramentas computacionais têm desempenhado um papel fundamental na tomada de decisões.

Diante de uma situação em que os limites operacionais do sistema elétrico são violados, o operador do sistema precisa adotar as medidas corretivas necessárias, ajustando as variáveis de controle de modo a restaurar o estado normal de operação. Em determinadas situações, a experiência do operador do sistema é suficiente para efetuar os ajustes necessários. Entretanto, a utilização de algoritmos que apresentem uma nova configuração para as variáveis de controle pode ser necessária a fim de evitar erros por parte do operador e garantir que a rede elétrica volte a operar em seu estado normal em tempo hábil. Uma forma de determinar o estado da rede elétrica em regime permanente é a resolução do problema de Fluxo de Carga (FC), que consiste em um sistema de equações e inequações não-lineares associadas, respectivamente, às leis de Kirchhoff e aos limites operacionais da rede elétrica. Tipicamente este problema é resolvido aplicando o método de Newton às equações não-lineares. Se a solução obtida viola algum limite técnico-operacional imposto pelas desigualdades, um passo externo ao algoritmo realiza ajustes nas variáveis de controle, tais como a injeção de reativos por elementos *shunt* e a posição dos *taps* dos transformadores em-fase, e o método de Newton é executado novamente (MONTICELLI, 1983). Este procedimento continua até que uma solução seja obtida, caso exista.

A resolução do problema de FC utilizando o método de Newton, contudo, apresenta algumas dificuldades. A primeira delas está relacionada à inicialização do método, já que a escolha inadequada de um ponto inicial pode levar à sua divergência. Outra dificuldade diz respeito à violação dos limites operacionais a que algumas variáveis estão submetidas. Nestas situações, a convergência geralmente é mais lenta e há a possibilidade de divergência devido à interferência entre controles que são eletricamente próximos. A introdução dos dispositivos de controle na modelagem do sistema também aumenta a frequência de soluções múltiplas para o problema (MONTICELLI, 1983). Desta maneira, quando o número de controles a serem ajustados é elevado, o uso do FC se torna um exaustivo processo de tentativas e erros (LAGE, 2013). Recentemente, BIEHL (2012) propôs a conversão do problema de FC em um problema de factibilidade não-linear, o qual é resolvido através de um método de região de confiança com filtros para problemas de mínimos quadrados não-lineares. Esta abordagem permite contornar as dificuldades mencionadas anteriormente, devido ao tratamento simultâneo das equações da rede elétrica e inequações vinculadas aos limites operacionais do problema de FC, além de possibilitar o ajuste discreto de variáveis de controle, como os *taps* dos transformadores.

A resolução do problema de FC permite obter um estado factível da rede, mas os

ajustes efetuados podem não ser os melhores de acordo com algum critério estabelecido pelo operador, por exemplo, em termos do custo de geração ou das perdas elétricas. Assim, do ponto de vista operacional, é desejável que as variáveis de controle sejam ajustadas de modo a obter um ponto de operação que otimize algum critério de desempenho do sistema, ao mesmo tempo em que as restrições de igualdade e desigualdade sejam satisfeitas. Este problema de otimização, conhecido como FPO, foi proposto no início da década de 1960 por CARPENTIER (1962) e pode ser caracterizado matematicamente como um problema de PNLIM, não-convexo, de grande porte, com restrições de igualdade e desigualdade. Tendo em vista o aumento da demanda em sistemas elétricos cuja rede de transmissão funciona cada vez mais próxima de seus limites operacionais, o problema de FPO tem recebido bastante atenção do mercado e de pesquisadores devido à necessidade de se manter um perfil de tensão adequado sob diferentes situações de carga e operação (SOUSA, 2006).

Desde sua formulação nos anos 1960, diversos modelos matemáticos e metodologias de resolução – determinísticas, heurísticas e híbridas – foram propostas para o problema de FPO. Dentre as extensões para os modelos de FPO, podem-se citar: o FPO Multi-período, no qual as variáveis do sistema elétrico devem ser calculadas para um horizonte de planejamento, sendo acopladas por restrições intertemporais (ALGUACIL & CONEJO, 2000; GOPALAKRISHNAN ET AL., 2013); o FPO Discreto, no qual a natureza discreta de determinadas variáveis de controle, como *taps* de transformadores em-fase e injeção de potência reativa por elementos *shunt*, é levada em consideração (CAPITANESCU & WEHENKEL, 2010b; SOLER ET AL., 2012, 2013); o FPO com Restrição de Segurança, que se preocupa com a operação adequada do SEP diante da possibilidade de ocorrência de um conjunto de contingências, como a perda de linhas de transmissão ou de unidades geradoras (CAPITANESCU ET AL., 2011; CAPITANESCU & WEHENKEL, 2013; CAPITANESCU, 2016); o FPO Probabilístico, o qual leva em consideração a estocasticidade de algumas variáveis e parâmetros, tais como variações da carga e intermitência de fontes renováveis de geração (YU & ROSEHART, 2012; SEBASTIÁN ET AL., 2014); o FPO com Limites no Número de Controles, o qual pode ser aplicado para determinar o menor número de ações de controle para atingir um estado de operação segura ou restringir o número de ações de controle devido ao tempo necessário para sua execução (CAPITANESCU & WEHENKEL, 2010a, 2011; MAZZINI ET AL., 2015; MURRAY ET AL., 2015). Neste trabalho, em particular, estamos interessados em desenvolver uma metodologia robusta para a resolução do problema de FPO com variáveis contínuas e discretas.

Em se tratando das metodologias de resolução aplicadas ao problema de FPO, a literatura é bastante rica. Métodos determinísticos para a resolução de problemas de FPO incluem o Método do Gradiente Reduzido (DOMMEL & TINNEY, 1968), o Método de Penalidade (SASSON ET AL., 1973), o Método de Newton (SUN ET AL., 1984) e Programação Quadrática Sequencial (BURCHETT ET AL., 1984). Nos últimos anos, uma classe de algoritmos que tem obtido grande sucesso para a resolução de problemas de

FPO é a dos Métodos de Pontos Interiores (MPI), devido à sua eficiência computacional, sendo capaz de resolver problemas de grande porte, com centenas de milhares de variáveis (GRANVILLE, 1994; CAPITANESCU ET AL., 2007; CAPITANESCU & WEHENKEL, 2013). Apesar dos diversos avanços e variantes propostas para os MPI, dificuldades associadas ao controle do parâmetro de barreira e a exigência de positividade das variáveis duais e de folga durante as iterações podem causar o mal-condicionamento da matriz hessiana e encurtar o passo de Newton (ADIBI ET AL., 2003; CAPITANESCU & WEHENKEL, 2013). Estas dificuldades estimularam pesquisadores a estudar abordagens alternativas para problemas de Programação Não-Linear (PNL). Em 1997, POLYAK & TEBoulLE propuseram o Método de Rescalamento Não-Linear (MRN), no qual uma transformação não-linear parametrizada por um escalar positivo é aplicada às restrições, convertendo o problema original em outro problema que possui o mesmo conjunto de minimizadores. Diferentemente do MPI, o MRN não requer a redução ilimitada do parâmetro de reescala, o que contribui para reduzir os problemas de mal-condicionamento das matrizes hessianas. Experimentos numéricos com o MRN baseados na função barreira logarítmica modificada mostraram que esta abordagem é viável e robusta para a resolução de problemas de FPO (ADIBI ET AL., 2003; SOUSA, 2006).

Estas abordagens, entretanto, devido à necessidade de diferenciabilidade para calcular as direções de busca, assumem que as variáveis do problema de FPO são contínuas, ignorando o fato de que algumas variáveis de controle somente podem ser ajustadas por meio de passos discretos e distanciando a solução obtida daquela que deve ser implementada na prática pelo operador do sistema. Portanto, o tratamento das variáveis discretas em um problema de FPO é outro aspecto que requer metodologias de resolução particulares. Conforme apontado por CAPITANESCU ET AL. (2011), as variáveis discretas em um problema de FPO podem ser divididas em dois tipos: variáveis com passos discretos pequenos (tais como *taps* de transformadores em-fase e a potência reativa de alguns elementos *shunt*) e variáveis com passos discretos grandes (as quais podem incluir, por exemplo, alguns elementos *shunt* e variáveis binárias que representam algum estado da rede). Em trabalhos de FPO, as variáveis de controle associadas aos *taps* de transformadores em-fase e chaveamentos de bancos de capacitores e reatores *shunt* são frequentemente consideradas contínuas e, posteriormente, arredondadas para o valor discreto mais próximo. Estudos anteriores com o problema de FPO constataram que este procedimento normalmente fornece soluções de boa qualidade quando as variáveis são ajustadas por passos discretos pequenos (PAPALEXOPOULOS ET AL., 1989), mas não é satisfatório para controles com passos discretos grandes porque pode deteriorar significativamente a solução ótima obtida ou até mesmo causar infactibilidades (LIU ET AL., 1992).

Problemas de PNLIM podem ser resolvidos através de métodos combinatórios clássicos, tais como o método *Outer Approximation*, Decomposição de Benders, *Branch-and-Bound* e algoritmos de Planos de Corte. Apesar de confiáveis, a complexidade computa-

cional dos algoritmos combinatórios tende a aumentar exponencialmente com o número de variáveis discretas do problema resolvido (SOLER ET AL., 2012), demandando grande quantidade de tempo de processamento e recursos computacionais para problemas de grande porte. Quando aplicados a problemas não-convexos como o FPO, métodos combinatórios, como o *branch-and-bound*, também podem acabar eliminando boas soluções discretas porque os valores ótimos obtidos nos nós da árvore não crescem/decrecem monotonicamente, devido à obtenção de soluções ótimas locais. Outra possibilidade para resolução de problemas de PNLIM são as meta-heurísticas, as quais constituem métodos de solução que coordenam procedimentos de busca locais com estratégias de mais alto nível visando escapar de mínimos locais e realizar uma busca robusta no espaço de soluções de um problema (GENDREAU & POTVIN, 2010). Apesar de sua versatilidade e aplicabilidade na resolução de problemas com características variadas, incluindo não-diferenciabilidade e descontinuidades, métodos meta-heurísticos não possuem prova formal de convergência, além de poderem demandar um alto tempo computacional (BISKAS ET AL., 2006).

Levando em consideração os aspectos citados, SOLER ET AL. (2012, 2013) propuseram uma função penalidade para tratamento das variáveis discretas em um problema de FPO, a qual também é empregada neste trabalho. Nesta abordagem, uma função senoidal diferenciável penaliza a função objetivo do problema de FPO quando as variáveis discretas não assumem valores aceitáveis. A intensidade da penalização é controlada por um parâmetro de penalidade $\gamma > 0$, o qual define a amplitude da função senoidal, que pode ser aumentada para garantir que a discretização seja feita dentro da tolerância desejada. A vantagem desta abordagem está no fato de que as variáveis discretas são tratadas como contínuas, de modo que o problema pode ser resolvido através de métodos clássicos de otimização. Naturalmente, o desempenho deste método de penalidade depende do método para problemas de PNL utilizado para resolver os sucessivos problemas penalizados.

Métodos numéricos para problemas de PNL usualmente são divididos em duas categorias: métodos de busca linear e métodos de região de confiança. Em um algoritmo com busca linear, uma direção de descida deve ser calculada a cada iteração e o mecanismo de busca unidimensional evita o comportamento inadequado do método calculando um passo que promova progresso em direção à solução ótima na direção determinada. Por outro lado, métodos de região de confiança constituem uma abordagem mais conservadora para resolução de problemas de PNL. Métodos de região de confiança, inicialmente desenvolvidos para otimização irrestrita, baseiam-se na construção de um modelo (normalmente quadrático) para a função objetivo em uma vizinhança dos pontos ao longo do processo iterativo (SANTOS, 2014). Este modelo é, então, minimizado em uma região ao redor do ponto, denominada região de confiança, na qual se acredita que o modelo construído é uma boa aproximação para a função objetivo, a fim de calcular um vetor passo tentativo^[1].

^[1]Em métodos de região de confiança, a direção de busca e o comprimento de passo são calculados

Se este vetor passo tentativo proporcionar uma redução suficiente na função objetivo de acordo com uma função de mérito, o passo é aceito e o ponto é atualizado. Do contrário, o passo é rejeitado, a região de confiança é reduzida e o modelo é minimizado novamente. De acordo com SANTOS (2014), a robustez destes métodos está relacionada ao efeito de regularização obtido ao minimizar os modelos em regiões de tamanho predeterminado. Desta forma, enquanto métodos de busca linear recuperam-se de passos inadequados retrocedendo ao longo de uma curva paramétrica (normalmente, linear), um método de região de confiança se recupera reconsiderando todo o procedimento de cálculo do passo (GOULD & LEYFFER, 2003).

Conforme apontado por BIEHL (2012), uma das propriedades relevantes do método de região de confiança é que apenas soluções aproximadas para os subproblemas de minimização do modelo precisam ser computadas para propósitos de convergência. Outra vantagem dos métodos de região de confiança está no fato de que os subproblemas a serem resolvidos sempre possuem um conjunto factível limitado, permitindo a utilização de modelos não-convexos para aproximar a função objetivo. Esta característica, associada à regularização implícita decorrente da restrição de região de confiança, torna os algoritmos de região de confiança robustos e confiáveis, uma vez que podem ser aplicados a problemas não-convexos e mal-condicionados. Quando informações de segunda ordem são utilizadas em métodos de região de confiança os mesmos normalmente convergem para pontos estacionários de segunda ordem, enquanto métodos de busca linear podem convergir para pontos de sela (YUAN, 2015).

O objetivo principal deste trabalho é investigar, propor e implementar novas abordagens determinísticas de otimização não-linear para resolução de problemas de Fluxo de Potência Ótimo Reativo (FPOR) com variáveis contínuas e discretas. Três novas abordagens são apresentadas e aplicadas ao problema de FPOR. A primeira delas, chamada de Newton com Programação Linear (Newton-PL), se baseia na resolução do sistema restrito de equações não-lineares oriundo das condições necessárias de otimalidade de KKT do problema de otimização, através de um método do tipo Newton. Esta abordagem possui algumas características vantajosas em relação ao método de Newton clássico: a capacidade de resolver sistemas de equações não-diferenciáveis, tais como aqueles que advêm de reformulações não-diferenciáveis das condições de KKT ou de sistemas de complementaridade; sob hipóteses razoáveis, o método retém a convergência quadrática local, e é capaz de resolver algumas classes de sistemas de equações com soluções não-isoladas, superando uma das deficiências dos métodos do tipo Newton; possibilidade de resolver sistemas *restritos* de equações não-lineares, isto é, sistemas para os quais a solução também deve se situar em um conjunto especificado Ω , tipicamente descrito por desigualdades.

simultaneamente. Na literatura, esta direção com passo incluso é denominada *trial step* e, por isso, a chamaremos de *passo tentativo*, não devendo ser confundida com o escalar que representa o comprimento do passo.

Tais características fazem com que esta abordagem seja atrativa para a resolução direta de sistemas de KKT de problemas de otimização que, de modo geral, possuem equações de complementaridade e desigualdades. No que diz respeito ao algoritmo, as direções de busca são calculadas através da resolução de subproblemas de Programação Linear (PL), daí o nome Newton-PL. Em seguida, um procedimento de busca unidimensional com função de mérito é utilizado para determinar um comprimento de passo apropriado para a atualização das variáveis. Esta abordagem foi aplicada apenas à relaxação contínua do problema de FPOR, porém uma modificação para o tratamento das variáveis discretas é apresentada.

Na segunda e terceira abordagens propostas, as funções de penalidade senoidais propostas por SOLER ET AL. (2012, 2013) são incorporadas à função objetivo, de modo a tratar as variáveis discretas como contínuas. Contudo, estas duas propostas são diferentes devido à abordagem de otimização contínua utilizada para resolução dos subproblemas penalizados. Na segunda abordagem, denominada Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC), as restrições de desigualdade são tratadas por meio de uma função de rescalamento não-linear, baseada na função barreira logarítmica modificada com extrapolação quadrática. A sequência de problemas de rescalamento não-linear com penalidade para variáveis discretas e apenas restrições de igualdade é resolvida por meio de um método de programação quadrática sequencial com região de confiança e passo composto, apresentada em OMOJOKUN (1989) e LALEE ET AL. (1998). Nesta abordagem, o passo tentativo é calculado pela soma de um passo normal, que busca atender as restrições linearizadas da melhor maneira possível, com um passo tangencial, que busca reduzir o modelo da função objetivo. Diferentemente do trabalho de LALEE ET AL. (1998), no qual os subproblemas quadráticos de região de confiança são resolvidos de modo aproximado pelo método do gradiente conjugado de Steihaug (STEIHAUG, 1983), neste trabalho uma abordagem exata baseada em problemas de autovalores generalizados, que foi recentemente proposta por ADACHI ET AL. (2017), é utilizada para resolução dos subproblemas. Esta também pode ser vista como uma contribuição deste trabalho pois, apesar de ADACHI ET AL. (2017) validarem esta metodologia para resolução de subproblemas quadráticos de região de confiança gerados de modo aleatório, ela ainda não foi utilizada como parte de um algoritmo de região de confiança para problemas gerais de PNL.

Na terceira abordagem, cada problema penalizado é resolvido através de um método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança (PDPIRC), baseado no trabalho de YAMASHITA ET AL. (2005). Entretanto, esta abordagem diferencia-se dos métodos de região de confiança clássicos, no sentido de que o passo tentativo não é obtido através da resolução de subproblemas quadráticos. Em vez disso, o passo tentativo é determinado através da combinação convexa de uma direção de Newton e uma direção de máxima descida de referência, que são calculadas a partir de sistemas lineares similares aos tipicamente resolvidos em métodos de pontos interiores. Pelo fato de exigir apenas

a resolução de dois sistemas lineares a cada iteração, esta abordagem tende a ser mais rápida que os métodos de região de confiança tradicionais. Na prática, o que se observa é que esta abordagem se apropria de alguns elementos dos métodos de região de confiança, tais como a utilização de um modelo linear ou quadrático do problema e da restrição do passo a uma vizinhança dos iterandos, preservando outros aspectos dos métodos de pontos interiores tradicionais. Neste sentido, pode-se dizer que esta abordagem se aproxima das do tipo *outer trust region* apresentadas em BIRGIN ET AL. (2011), na qual uma restrição de região de confiança é adicionada a um método de Lagrangiano aumentado convencional. Em vez de utilizar a estratégia de modificação da matriz Hessiana da função Lagrangiana apresentada em YAMASHITA ET AL. (2005), neste trabalho propõe-se a adoção da heurística de correção de inércia apresentada em WÄCHTER & BIEGLER (2006), pois observou-se que esta última teve melhor desempenho numérico nos testes realizados.

Testes numéricos com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras foram realizados, a fim de verificar a eficiência e robustez das abordagens propostas. Os resultados dos experimentos indicam que as três abordagens são adequadas para a resolução de problemas de FPOR.

Este trabalho está dividido como segue. No Capítulo 2 é apresentada a formulação matemática do problema de Fluxo de Potência Ótimo, bem como uma revisão bibliográfica acerca das metodologias para sua resolução. No Capítulo 3, apresenta-se uma breve revisão de métodos de otimização restrita que fornecem subsídios teóricos para as abordagens propostas neste trabalho; são discutidos os métodos dual-Lagrangiano, Newton-Lagrangiano, penalidade, barreira e rescalamento não-linear, sendo que, neste último, enfoque especial é conferido à função barreira logarítmica modificada com extração quadrática, devido à sua importância para uma das abordagens propostas. No Capítulo 4, são discutidos os elementos básicos dos métodos de região de confiança para problemas irrestritos. Neste capítulo são apresentadas metodologias aproximadas para resolução dos subproblemas de região de confiança, tais como o método *dogleg* de Powell e gradiente conjugado de Steihaug, bem como técnicas de resolução quase-exatas, por meio de problemas de autovalores generalizados. O Capítulo 5 é dedicado à exposição do método de Newton com Programação Linear (Newton-PL) e seus resultados numéricos na resolução de problemas de FPOR contínuos. No Capítulo 6, o método de Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC) é apresentado e os resultados numéricos de sua aplicação a problemas de FPOR com variáveis contínuas e discretas são reportados. O Capítulo 7 descreve o método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança (PDPIRC), bem como os resultados dos experimentos numéricos realizados com esta abordagem na resolução de problemas de FPOR com variáveis contínuas e discretas. Finalmente, no Capítulo 8 são delineadas as conclusões deste trabalho, bem como suas perspectivas de continuidade.

Capítulo 2

O Problema de Fluxo de Potência Ótimo

Neste capítulo é apresentado um modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis contínuas e discretas. Em seguida, será apresentada uma revisão bibliográfica acerca deste problema e suas metodologias de resolução, a fim de colocar as três abordagens propostas neste trabalho em perspectiva.

2.1 Definição do problema de FPO

Em um problema de FPO, o principal objetivo é determinar o ajuste das variáveis de controle do SEP de maneira a otimizar um critério definido na operação ou planejamento do sistema, ao mesmo tempo em que as restrições físicas e operacionais da rede sejam atendidas. O critério a ser otimizado é expresso matematicamente através de uma função objetivo, podendo assumir diversas formulações dependendo da característica que se deseja otimizar. Do ponto de vista matemático, o problema de FPO é formulado como um problema de otimização não-linear, não-convexo, restrito, e com variáveis contínuas e discretas. As restrições de igualdade do problema estão relacionadas a leis físicas que regem o comportamento da rede elétrica (Leis de Kirchhoff), enquanto as restrições de desigualdade correspondem a limites operacionais, tais como a injeção de potência reativa em barras de controle de reativos e magnitudes de tensão. Quando as variáveis discretas são levadas em consideração, restrições de pertinência a conjuntos discretos para as variáveis de controle discretas também são adicionadas ao problema.

Desta maneira, um problema de FPO pode ser representado da seguinte maneira

geral:

$$\begin{aligned}
& \min && f(x, y) \\
& \text{s.a.} && g(x, y) = 0 \\
& && h(x, y) \leq 0 \\
& && y_i \in \mathcal{D}_{y_i}, \quad i = 1, \dots, n_y
\end{aligned} \tag{2.1}$$

em que:

- $x \in \mathbb{R}^{n_x}$ é o vetor das variáveis contínuas do problema, enquanto $y \in \prod_{i=1}^{n_y} \mathcal{D}_{y_i} \subset \mathbb{R}^{n_y}$ é o vetor de variáveis discretas do problema;
- $\mathcal{D}_{y_i}$ é o conjunto de valores discretos permitidos para a variável y_i ;
- $f : \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}$ é a função objetivo do problema, a qual expressa o critério operacional da rede elétrica a ser otimizado;
- $g : \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}^{n_g}$ é a função vetorial que expressa as restrições de igualdade do problema, sendo normalmente composta pelas equações de balanço de potência ativa e reativa (leis de Kirchhoff);
- $h : \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}^{n_h}$ é a função vetorial que expressa as restrições de desigualdade do problema, relacionadas aos limites operacionais do sistema, tais como limites inferiores e superiores para geração de potência reativa e magnitudes de tensão.

Na resolução do problema de FPO, a natureza discreta das variáveis y é desconsiderada em diversos trabalhos na literatura, devido à dificuldade de resolução de problemas de PNLM. Nestes casos, a relaxação contínua do problema é resolvida, isto é, substitui-se a restrição $y \in \prod_{i=1}^{n_y} \mathcal{D}_{y_i}$ por $y \in \prod_{i=1}^{n_y} [\min \mathcal{D}_{y_i}, \max \mathcal{D}_{y_i}]$.

Conforme destacado por SOUSA (2006), o termo FPO representa uma ampla classe de problemas de otimização de sistemas elétricos. Dependendo das variáveis adotadas para o problema e do critério a ser otimizado, subclasses de problemas de FPO podem ser obtidas. Neste trabalho, em particular, estamos interessados na resolução de problemas de FPOR, cuja modelagem matemática será apresentada na próxima seção.

2.2 Modelo para o problema de FPOR

Em um problema de FPOR, as variáveis de controle associadas com a potência ativa estão fixas, e o objetivo é otimizar algum critério associado ao aspecto reativo, o qual está relacionado principalmente com o controle de tensão nas barras (SOUSA, 2006). Desta forma, alguns possíveis critérios a serem otimizados podem incluir a minimização do desvio de tensão em relação a um valor desejado ou a minimização das perdas de potência ativa nos ramos do sistema. Segundo MONTICELLI & LIU (1992), a minimização das perdas

de potência ativa é considerada a função objetivo mais difícil de se tratar em problemas de FPO.

No Brasil, as unidades geradoras de energia elétrica são predominantemente hidrelétricas, as quais frequentemente estão situadas em locais distantes dos centros consumidores (LAGE, 2013). De acordo com BELATI ET AL. (2014), as perdas técnicas no sistema de transmissão variam de 4% a 8% do total de potência ativa gerada. Dessa forma, a redução dessas perdas pode levar a economias significativas na geração do sistema elétrico. Neste sentido, este trabalho visa a resolução de problemas de FPOR cujo objetivo é a minimização de perdas de potência ativa.

2.2.1 Notação

Conjuntos

Ω_k	conjunto das barras conectadas à barra k ;
$\mathcal{G}$	conjunto das barras de geração, incluindo a barra <i>slack</i> ;
$\mathcal{G}'$	conjunto das barras de geração, excluindo a barra <i>slack</i> ;
$\mathcal{C}$	conjunto das barras de carga;
$\mathcal{B}$	conjunto de todas as barras do sistema;
$\mathcal{B}^{\text{sh}}$	conjunto das barras com controle de magnitude de tensão por bancos de capacitores e reatores <i>shunt</i> ;
$\mathcal{L}$	conjunto das linhas de transmissão;
$\mathcal{T}$	conjunto dos transformadores em-fase com <i>tap</i> variável sob carga;
$\mathcal{D}_{km}^{\text{tap}}$	conjunto dos valores discretos permitidos para o <i>tap</i> do transformador em-fase no ramo (k, m) ;
$\mathcal{D}_k^{\text{sh}}$	conjunto dos valores discretos permitidos para a susceptância equivalente dos bancos de capacitores e reatores <i>shunt</i> na barra k .

Constantes

g_{km}	condutância série do ramo (k, m) ;
b_{km}	susceptância série do ramo (k, m) ;
b_{km}^{sh}	susceptância <i>shunt</i> do ramo (k, m) ;
$\underline{Q}_k^G, \overline{Q}_k^G$	geração de potência reativa mínima e máxima, respectivamente, na barra k ;
$\underline{V}_k, \overline{V}_k$	limites mínimo e máximo, respectivamente, para a magnitude de tensão na barra k ;
$\underline{t}_{km}, \overline{t}_{km}$	valores mínimo e máximo, respectivamente, para o <i>tap</i> do transformador em-fase no ramo (k, m) ;

$\underline{b}_k^{\text{sh}}, \overline{b}_k^{\text{sh}}$	valores mínimo e máximo, respectivamente, para a susceptância equivalente do banco de capacitores e reatores <i>shunt</i> na barra k ;
P_k	injeção líquida de potência ativa na barra k ;
Q_k	injeção líquida de potência reativa na barra k ;
Q_k^C	injeção (demanda) de potência reativa na barra k ;
θ_{slack}	ângulo de tensão da barra <i>slack</i> .

Variáveis e Funções

$V \in \mathbb{R}^{ \mathcal{B} }$	vetor de magnitudes de tensão;
$\theta \in \mathbb{R}^{ \mathcal{B} -1}$	vetor de ângulos de tensão;
$t \in \mathbb{R}^{ \mathcal{T} }$	vetor de <i>taps</i> variáveis dos transformadores em-fase sob carga;
$b^{\text{sh}} \in \mathbb{R}^{ \mathcal{B}^{\text{sh}} }$	vetor das susceptâncias equivalentes dos bancos de capacitores e reatores <i>shunt</i> ;
P_L	função objetivo que expressa as perdas de potência ativa nos ramos do sistema;
P_{km}	função que expressa o fluxo de potência ativa da barra k para a barra m ;
Q_{km}	função que expressa o fluxo de potência reativa da barra k para a barra m ;
Q_k^{sh}	função que expressa a injeção de potência reativa na barra k através de bancos de capacitores e reatores <i>shunt</i> ;
Q_k^G	função que expressa a potência reativa gerada na barra k .

2.2.2 Modelo Matemático

A formulação para o problema de FPOR apresentada neste trabalho considera que as variáveis do problema de otimização a ser resolvido são: a magnitude de tensão das barras; o ângulo de tensão das barras, com exceção da barra *slack*; o *tap* dos transformadores em-fase; e as susceptâncias equivalentes dos bancos de capacitores e reatores *shunt*. Desta maneira, o modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis contínuas e

discretas para minimização de perdas ativas nas linhas de transmissão é expresso por

$$\min \quad P_L(V, \theta, t) = \sum_{(k,m) \in \mathcal{L} \cup \mathcal{T}} g_{km} \left[\frac{1}{t_{km}^2} V_k^2 + V_m^2 - 2 \frac{1}{t_{km}} V_k V_m \cos(\theta_k - \theta_m) \right] \quad (2.2a)$$

$$\text{s.a.} \quad P_k - \sum_{m \in \Omega_k} P_{km}(V, \theta, t) = 0 \quad \forall k \in \mathcal{G}' \cup \mathcal{C} \quad (2.2b)$$

$$Q_k + Q_k^{\text{sh}}(V_k, b_k^{\text{sh}}) - \sum_{m \in \Omega_k} Q_{km}(V, \theta, t) = 0 \quad \forall k \in \mathcal{C} \quad (2.2c)$$

$$\underline{Q}_k^G \leq Q_k^G(V, \theta, t, b_k^{\text{sh}}) \leq \overline{Q}_k^G \quad \forall k \in \mathcal{G} \quad (2.2d)$$

$$\underline{V}_k \leq V_k \leq \overline{V}_k \quad \forall k \in \mathcal{B} \quad (2.2e)$$

$$t_{km} \in \mathcal{D}_{km}^{\text{tap}} \quad \forall (k, m) \in \mathcal{T} \quad (2.2f)$$

$$b_k^{\text{sh}} \in \mathcal{D}_k^{\text{sh}} \quad \forall k \in \mathcal{B}^{\text{sh}} \quad (2.2g)$$

É importante salientar que, no modelo apresentado, o ângulo de tensão da barra *slack*, θ_{slack} , é fixado de modo a fornecer uma referência angular para o sistema (normalmente, $\theta_{\text{slack}} = 0$). Isto significa que ao resolver o problema de FPOR, o ângulo de tensão da barra *slack* é visto como uma constante, sendo variáveis de decisão os ângulos das demais barras.

Assumindo que a barra k é a barra ao lado do *tap*, os fluxos de potência ativa e reativa podem ser calculados através das seguintes expressões gerais (LAGE, 2013):

$$P_{km}(V, \theta, t) = g_{km} \frac{1}{t_{km}^2} V_k^2 - \frac{1}{t_{km}} V_k V_m [g_{km} \cos(\theta_k - \theta_m) + b_{km} \sin(\theta_k - \theta_m)] \quad (2.3)$$

$$P_{mk}(V, \theta, t) = g_{km} V_m^2 - \frac{1}{t_{km}} V_k V_m [g_{km} \cos(\theta_m - \theta_k) + b_{km} \sin(\theta_m - \theta_k)] \quad (2.4)$$

$$Q_{km}(V, \theta, t) = - \left(b_{km} \frac{1}{t_{km}^2} + b_{km}^{\text{sh}} \right) V_k^2 + \frac{1}{t_{km}} V_k V_m [b_{km} \cos(\theta_k - \theta_m) - g_{km} \sin(\theta_k - \theta_m)] \quad (2.5)$$

$$Q_{mk}(V, \theta, t) = -(b_{km} + b_{km}^{\text{sh}}) V_m^2 + \frac{1}{t_{km}} V_k V_m [b_{km} \cos(\theta_m - \theta_k) - g_{km} \sin(\theta_m - \theta_k)] \quad (2.6)$$

Para linhas de transmissão, $t_{km} = 1$; para transformadores em-fase com *tap* variável sob carga, $b_{km}^{\text{sh}} = 0$. A geração de potência reativa nas barras de geração pode ser calculada através da seguinte expressão

$$Q_k^G(V, \theta, t, b_k^{\text{sh}}) = Q_k^C - Q_k^{\text{sh}}(V_k, b_k^{\text{sh}}) + \sum_{m \in \Omega_k} Q_{km}(V, \theta, t) \quad (2.7)$$

em que:

$$Q_k^{\text{sh}}(V_k, b_k^{\text{sh}}) = b_k^{\text{sh}} V_k^2 \quad (2.8)$$

Quando as variáveis discretas são consideradas contínuas, obtém-se o problema de FPOR clássico. Para tanto, resolve-se a relaxação contínua de (2.2), substituindo-se as

equações (2.2f) e (2.2g), respectivamente, por (2.9) e (2.10):

$$\underline{t_{km}} \leq t_{km} \leq \overline{t_{km}}, \quad \forall (k, m) \in \mathcal{T} \quad (2.9)$$

$$\underline{b_k^{\text{sh}}} \leq b_k^{\text{sh}} \leq \overline{b_k^{\text{sh}}}, \quad \forall k \in \mathcal{B}^{\text{sh}} \quad (2.10)$$

em que: $\underline{t_{km}} = \min \mathcal{D}_{km}^{\text{tap}}$, $\overline{t_{km}} = \max \mathcal{D}_{km}^{\text{tap}}$, $\underline{b_k^{\text{sh}}} = \min \mathcal{D}_k^{\text{sh}}$ e $\overline{b_k^{\text{sh}}} = \max \mathcal{D}_k^{\text{sh}}$. Entretanto, trabalhos na literatura frequentemente consideram b_k^{sh} como uma constante.

Conforme destacado por SOLER (2011), o problema de FPOR expresso pelo modelo (2.2) é de difícil solução devido às características não-lineares e não-convexas das funções envolvidas, bem como a presença de variáveis discretas e contínuas. A função objetivo (2.2a), que representa as perdas ativas totais na transmissão, é não-separável e não permite simplificações. A seguir, é apresentada uma revisão bibliográfica acerca dos modelos e das metodologias de resolução propostos para o problema de FPO.

2.3 Revisão Bibliográfica

O problema de FPO foi proposto por CARPENTIER (1962), visando incorporar as equações do fluxo de potência ao problema de Despacho Econômico (DE). Historicamente, o problema de DE era resolvido pelo critério de custos incrementais iguais, o qual era útil para determinar o despacho ativo das unidades geradoras de modo a atender a demanda com custo mínimo. Entretanto, os modelos de despacho desconsideravam aspectos importantes do sistema elétrico, como a transmissão e seus limites de operação. Com a introdução do problema de FPO, estes aspectos foram incluídos no modelo e o problema de DE passou a ser visto como um caso particular do problema de FPO. Como proposta de resolução, CARPENTIER propôs a utilização da função Lagrangiana, de modo a converter o problema de FPO em um problema irrestrito. As condições de otimalidade de primeira ordem foram, então, aplicadas à função Lagrangiana e o sistema de equação não-lineares obtido resolvido pelo método de Gauss-Seidel. Uma solução ótima é atingida quando as condições de KKT forem satisfeitas com a tolerância especificada.

O método do Gradiente Reduzido para a resolução de problemas de FPO, introduzido por DOMMEL & TINNEY (1968), propôs a divisão das variáveis do problema em dois tipos: variáveis dependentes e variáveis de controle. As restrições de canalização das variáveis dependentes e as restrições funcionais de desigualdade são incorporadas à função objetivo através de penalidades quadráticas. Ao problema penalizado associa-se uma função Lagrangiana, mediante a utilização de multiplicadores de Lagrange para as restrições de igualdade relacionadas ao balanço de potência ativa e reativa. As condições necessárias de primeira ordem são aplicadas à função Lagrangiana, originando um sistema de equações não-lineares, que é resolvido em etapas. Primeiramente, um valor inicial é atribuído às variáveis de controle. Em seguida, o valor das variáveis dependentes e o estado da rede

são determinados pela execução de um fluxo de carga, utilizando o método de Newton. Isto significa que uma solução que satisfaz as restrições de igualdade do problema de FPO é encontrada. Após a execução do fluxo de carga, os multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade são calculados a partir das equações relacionadas às derivadas parciais da função Lagrangiana em relação às variáveis dependentes. Os multiplicadores de Lagrange são, então, utilizados para calcular o gradiente da função Lagrangiana em relação às variáveis de controle. Caso o critério de parada baseado no gradiente da função Lagrangiana em relação às variáveis de controle não seja atendido, as variáveis de controle são ajustadas. Este ajuste é feito na direção oposta ao do gradiente da função Lagrangiana em relação às variáveis de controle. O tamanho do passo é determinado por um procedimento de busca unidimensional. As restrições violadas das variáveis de controle são tratadas através de projeções, fixando-se o valor da variável de controle no respectivo limite violado. A partir do novo valor das variáveis de controle, as variáveis dependentes são recalculadas através de um fluxo de carga e o procedimento é repetido iterativamente, até que o critério de convergência seja verificado. Uma das desvantagens do método é o cálculo do tamanho do passo, determinado pela busca unidimensional, que requer a execução de um fluxo de carga para cada valor de passo a ser testado. Valores pequenos para o passo podem ocasionar lentidão no processo de convergência e o aumento no número de iterações. Por outro lado, passos grandes podem causar dificuldades de convergência devido ao efeito de “zigue-zague” em torno da solução ótima.

Em SASSON (1969), o método de Powell para problemas restritos foi combinado com a técnica de minimização irrestrita de Fletcher-Powell, para resolver o problema de FPO. O método de Powell efetua a minimização sequencial irrestrita de uma função auxiliar. Cada restrição de igualdade e desigualdade violada é acrescentada à função auxiliar através de duas variáveis auxiliares extras, as quais são fixas em cada subproblema. Estas variáveis auxiliares são atualizadas no ciclo externo do método. As minimizações internas são realizadas pelo método de Fletcher-Powell, no qual aproximações para a inversa da matriz Hessiana são calculadas a partir do vetor gradiente. Um procedimento de busca unidimensional que utiliza interpolação cúbica é aplicado para calcular o comprimento do passo. Uma das dificuldades deste método reside no fato de que a matriz Hessiana inversa da função auxiliar é densa, o que pode dificultar a convergência para sistemas de grande porte.

No trabalho de SASSON ET AL. (1973), foi proposto um método de penalidade para resolução do problema de FPO. Para tanto, as restrições de igualdade e desigualdade são introduzidas na função objetivo através de parâmetros de penalidade, de modo a obter um problema irrestrito. Os autores observaram que o método de Fletcher-Powell apresentado em SASSON (1969) tende a ser pouco eficiente quando o problema possui mais que 100 variáveis, pois as aproximações para a inversa da matriz Hessiana falham em produzir direções de busca que reduzem a função penalidade. Além disso, o número

de iterações e o tempo do método de Fletcher-Powell, quando utilizado nas iterações internas, aumenta com a dimensão do problema. Visando superar as deficiências do método de Fletcher-Powell quando aplicado a problemas de grande porte, além de evitar a utilização da inversa da matriz Hessiana da função penalizada, a qual geralmente é cheia, os autores propuseram a utilização do método de Newton para calcular as direções de busca. Na abordagem apresentada, a matriz Hessiana da função penalizada é computada diretamente. A principal vantagem desta escolha é que, para problemas de FPO, esta matriz frequentemente é esparsa. O sistema de direções foi resolvido por eliminação Gaussiana, explorando a esparsidade da matriz. Caso o método não tenha convergido ao resolver um subproblema de penalidade, os fatores de penalidade são aumentados e o problema é resolvido novamente; este esquema iterativo é repetido até que a convergência seja atingida. Apesar da esparsidade da matriz Hessiana da função penalizada, os valores da mesma são influenciados pelos parâmetros de penalidade, podendo sofrer de problemas de mal-condicionamento.

ALSAC & STOTT (1974) propuseram restrições para o problema de FPO, a fim de obter uma solução que permita a operação segura do sistema diante da possibilidade de ocorrência de contingências. A solução obtida deve permitir que o sistema opere dentro dos limites de segurança especificados e atenda à demanda em uma situação pós-contingência, no período de tempo em que dispositivos de controle de ação rápida atuam, mas antes que dispositivos de atuação lenta tenham respondido. Para tanto, os autores acrescentaram restrições de igualdade e desigualdade ao modelo, chamadas restrições de segurança. Cada contingência é caracterizada por um novo conjunto de restrições de igualdade relacionadas ao balanço de potência na situação de contingência, em que as variáveis de controle são as mesmas do caso-base de operação, por restrições de desigualdade relacionadas aos limites das usinas e do sistema de transmissão. A fim de resolver o modelo proposto, os autores utilizaram o método do gradiente reduzido proposto por DOMMEL & TINNEY (1968). Testes numéricos foram conduzidos com o sistema IEEE de 30 barras, considerando 33 contingências envolvendo a perda de ramos do sistema. Os resultados mostraram que o modelo apresentado permite a resolução do problema de FPO de maneira a aumentar a segurança na operação do sistema elétrico, mas os autores enfatizaram a necessidade de desenvolver métodos que sejam mais adequados para sistemas de grande porte e que permitam a redução do tempo de processamento.

No trabalho de LIPOWSKI & CHARALAMBOUS (1981), o problema de FPO foi resolvido através de um método de Programação Quadrática Sequencial (PQS) modificado. Em um método de PQS, a direção de busca é escolhida como a solução ótima de um subproblema quadrático, obtido ao representar a função objetivo por uma aproximação quadrática e pela linearização das restrições. Entretanto, a PQS clássica pode falhar nas situações em que o conjunto factível determinado pela linearização do conjunto de restrições é vazio, mesmo que exista uma solução factível para o conjunto original de restrições.

Por outro lado, o método proposto é capaz de resolver problemas em que isto ocorre através de uma modificação nos subproblemas quadráticos a serem resolvidos, de modo a obter subproblemas que sempre possuam conjunto factível não-vazio. Outra vantagem é a facilidade de se determinar um vértice da região factível do subproblema modificado para inicialização de métodos de conjunto ativo.

Em BURCHETT ET AL. (1982), o problema de FPO foi resolvido através de um método de Lagrangiana aumentada, implementado no *solver* MINOS. Nesta abordagem, a função objetivo é aumentada por um termo de função Lagrangiana que se anula na solução através de multiplicadores de Lagrange, e por um termo de penalidade quadrática que auxilia na presença de não-convexidades. Cada ciclo externo gera um subproblema de minimização desta função Lagrangiana aumentada, sujeita ao conjunto de restrições linearizadas. Os subproblemas foram resolvidos através do método do gradiente reduzido. A principal vantagem desta abordagem está relacionada ao fato de não ser necessário forçar o atendimento das restrições durante todas iterações, pois o método converge para as restrições durante o processo iterativo.

Dois anos depois, SUN ET AL. (1984) propuseram a resolução do problema de FPO através do método de Newton. Na metodologia apresentada, os autores incorporam as restrições de igualdade e desigualdade ativas à função objetivo, por meio de multiplicadores de Lagrange, obtendo um problema irrestrito. Os limites relacionados a variáveis e funções especiais (tais como limites para o fluxo de potência nas linhas de transmissão) são tratados através de penalidades. A resolução do sistema de equações não-lineares obtido ao aplicar as condições necessárias de primeira ordem a este problema irrestrito foi realizada pelo método de Newton. Este procedimento pode ser feito de duas maneiras: acoplada, a qual corresponde ao método de Newton clássico aplicado ao sistema de equações, de modo que a direção de busca para todas as variáveis é calculada ao mesmo tempo; e desacoplada, em que dois subsistemas, relacionados à parte ativa e reativa, são resolvidos para atualizar as variáveis. Os autores destacam que a abordagem pelo método de Newton permite a resolução de problemas de FPO de maneira eficiente e robusta. Uma solução ótima é determinada quando as condições de otimalidade de KKT são satisfeitas e as restrições de FC atendidas dentro da tolerância especificada. A principal dificuldade do método é a identificação do conjunto de restrições ativas e o critério para escolha das restrições que devem ser acrescentadas ou removidas do conjunto ativo.

Em BURCHETT ET AL. (1984) um método de PQS foi apresentado para a resolução de problemas de FPO, utilizando diversas funções objetivo. No ciclo externo do método, checka-se o critério de parada, o qual consiste em verificar se a norma do gradiente reduzido é menor que a tolerância especificada, se as equações de FC são atendidas e se todas as desigualdades são satisfeitas. Caso o critério de parada não seja verificado, a direção de busca é calculada a partir da resolução de um subproblema quadrático, cuja função objetivo é uma aproximação quadrática para a função Lagrangiana do problema original

e cujas restrições correspondem às linearizações das restrições originais. Os autores destacam que uma solução obtida a partir de um FC não é necessária para inicializar o método, de modo que o algoritmo é capaz de lidar com sistemas para os quais normalmente há problemas de convergência. Cada ciclo interno exige a resolução de um problema de programação quadrática restrito que, para sistemas de grande porte, é bastante esparsos, e cujo tempo de solução aumenta com a dimensão do problema. Entretanto, os autores destacam que, desde que implementada adequadamente, a solução do subproblema quadrático pode ser obtida com um esforço computacional que não é significativamente maior que o necessário para resolução de um problema de programação linear.

No trabalho de SANTOS ET AL. (1988), o método da função Lagrangiana aumentada foi aplicado na resolução de problemas de FPO. Nesta abordagem a função Lagrangiana clássica é utilizada tanto para as restrições de igualdade quanto para as restrições de desigualdade. Em seguida, esta função é aumentada por termos de penalidade para todas as restrições. O problema irrestrito obtido é, então, minimizado nas variáveis primais através do método de Newton. Uma fórmula explícita permite a atualização dos multiplicadores de Lagrange, visando a maximização da função dual. A principal vantagem desta abordagem é que, por combinar a função Lagrangiana clássica com o método de penalidade, o parâmetro de penalidade não precisa atingir valores muito altos para obter a convergência, além de não ser necessário determinar o conjunto das restrições ativas. Os autores apontam que a abordagem proposta pode ser vista como um aperfeiçoamento do método apresentado em SASSON ET AL. (1973), uma vez que evita o problema de mal-condicionamento da matriz Hessiana por utilizar parâmetros de penalidade menores. A convergência é obtida quando as restrições de igualdade e desigualdade são satisfeitas com a tolerância especificada.

O problema de FPO foi resolvido por VAN AMERONGEN (1988) através de um método de PQS reduzido. O algoritmo é baseado em linearizações das condições necessárias de primeira ordem de KKT, e da observação de que as expressões obtidas são equivalentes às condições de KKT de um problema quadrático. Assim, a direção de busca é calculada mediante a resolução deste problema quadrático. O autor enfatiza, entretanto, que podem ocorrer situações nas quais o problema quadrático a ser resolvido é infactível, o que impossibilitaria a obtenção de uma direção de busca. Nestes casos, medidas que garantam a recuperação do algoritmo devem ser adotadas. Por exemplo, pode-se permitir a violação das restrições através da introdução de tolerâncias, que devem ser reduzidas ao longo do processo iterativo. A fim de tornar o algoritmo mais eficiente na resolução de problemas com um maior número de variáveis, o autor utiliza eliminação Gaussiana parcial no conjunto de restrições de KKT linearizadas, obtendo um problema quadrático de dimensão reduzida. Após a resolução do problema quadrático reduzido, as demais direções são calculadas por substituição.

Um método dual-Newton para resolução de problemas de FPO foi proposto no

trabalho de COSTA (1990), o qual pode ser visto como uma associação das propostas de SUN ET AL. (1984) e SANTOS ET AL. (1988). A principal diferença é que, no método dual-Newton, as restrições de igualdade são tratadas pela função Lagrangiana clássica, enquanto as restrições de desigualdade são tratadas por meio da função Lagrangiana aumentada. A solução do problema é obtida através da resolução de uma sequência de problemas irrestritos com variáveis duais fixas, seguidos da atualização das variáveis duais e dos parâmetros de penalidade. As vantagens desta proposta incluem: sua característica de convergência quadrática; a capacidade de inicialização através de pontos infactíveis; e o condicionamento da matriz Hessiana que não é afetado significativamente, devido ao crescimento lento dos fatores de penalidade.

No trabalho de GRANVILLE (1994) um método primal-dual de pontos interiores foi apresentado, sendo considerado um dos pioneiros na aplicação desta classe de métodos em problemas de FPO. Em seu trabalho, o autor transforma as restrições de desigualdade em restrições de igualdade através da introdução de variáveis de folga e de excesso. Em seguida, a condição de não-negatividade das variáveis de folga e de excesso é tratada por meio da função barreira logarítmica, a qual é incorporada à função objetivo através de um parâmetro de barreira. As condições necessárias de primeira ordem de KKT são aplicadas ao problema de barreira, conduzindo a um sistema não-linear que é resolvido pelo método de Newton. No processo iterativo, dois passos de atualização distintos – um para as variáveis primais e outro para as variáveis duais – são calculados, de modo a preservar a positividade das folgas e dos multiplicadores de Lagrange associados às restrições de desigualdade. Uma solução é obtida quando as restrições forem satisfeitas e o parâmetro de barreira for menor que uma tolerância predeterminada. Apesar dos bons resultados, o autor aponta que problemas de mal-condicionamento podem ocorrer quando os iterandos se aproximam da solução ótima e o parâmetro de barreira se aproxima de zero. Assim, a inicialização e atualização apropriada do parâmetro de barreira são aspectos fundamentais para o bom desempenho do método.

A variante do tipo preditor-corretor do método primal-dual de pontos interiores foi aplicada em problemas de FPO por WU ET AL. (1994). Nesta abordagem, resíduos não-lineares que envolvem as direções de busca e aparecem na linearização das condições necessárias de primeira ordem são levados em consideração em um procedimento de duas etapas: no procedimento preditor, uma estimativa das direções de busca é calculada resolvendo o sistema de direções para a direção primal-dual afim; em seguida, no procedimento corretor, a direção do procedimento preditor é utilizada para recalcular os resíduos, estimar dinamicamente o valor do parâmetro de barreira e determinar a nova direção de busca. A matriz de coeficientes do sistema de direções é a mesma para os procedimentos preditor e corretor, permitindo que uma única fatoração seja utilizada nas duas etapas. Os resultados numéricos apresentados mostram que a utilização da variante do tipo preditor-corretor pode reduzir o tempo de processamento e o número de iterações

em relação ao método primal-dual de pontos interiores puro.

TORRES & QUINTANA (1998) propuseram a resolução do problema de FPO utilizando uma modelagem em coordenadas retangulares, através de um método primal-dual de pontos interiores. Experimentos computacionais realizados mostraram que as soluções obtidas através do modelo em coordenadas polares e retangulares apresentam comportamento numérico similar no que diz respeito ao número de iterações realizadas pelo método. A principal vantagem da formulação em coordenadas retangulares é que, excetuando-se pelos termos que envolvem os *taps* dos transformadores, todas as funções na minimização de perdas de potência ativa são quadráticas. Consequentemente, a menos de ramos com transformadores, a função objetivo tem matriz Hessiana constante. A principal desvantagem da formulação retangular é que os limites para as magnitudes de tensão precisam ser representados através de restrições funcionais, enquanto que no modelo em coordenadas polares tais limites são representados por simples canalizações de variáveis.

No trabalho de CHEN ET AL. (1998), um método de substituição de restrições para problemas de FPO foi apresentado. Esta abordagem é focada na resolução de problemas em que o número de restrições de desigualdade é elevado e baseia-se no princípio da máxima entropia. Através de uma transformação envolvendo a função exponencial, as restrições de desigualdade são convertidas em uma única restrição de desigualdade, controlada por um parâmetro T . O problema obtido é, então, resolvido pelo método de Newton. Os autores observaram, empiricamente, que a abordagem proposta apresenta melhor desempenho quando o número de restrições ativas na solução ótima do problema de FPO é baixo, e que o método se torna menos competitivo em relação a outras abordagens convencionais quando o número de restrições de desigualdade ativas na solução ótima é elevado. Também se notou que o método pode convergir para soluções infactíveis em sistema elétricos com mais de 500 barras, se a solução inicial não estiver na região interior às restrições de desigualdade. Apesar disso, o desempenho do método geralmente melhora consideravelmente se um ponto interior é escolhido como solução inicial.

Um método de complementaridade não-linear foi proposto em TORRES & QUINTANA (1999) para resolução de problemas de FPO. A restrição de complementaridade resultante da aplicação das condições necessárias de otimalidade de primeira ordem a um problema de otimização é, normalmente, a responsável por causar dificuldades numéricas durante a execução do método de Newton. Em métodos de pontos interiores, esta restrição é relaxada por meio do parâmetro de barreira, o qual é reduzido ao longo do processo iterativo. Na abordagem apresentada pelos autores, a restrição de complementaridade é transformada através de uma função de complementaridade não-linear, conforme proposto por CHEN & HARKER (1993) e KANZOW (1996). Esta função também depende de um parâmetro de continuação que é reduzido, de modo similar ao parâmetro de barreira em métodos de pontos interiores. Porém, diferentemente dos métodos de pontos interiores, não é necessário garantir a positividade das folgas e multiplicadores de Lagrange relaci-

onados às restrições de desigualdade ao longo das iterações. A não-negatividade de tais variáveis é assegurada na solução ótima devido às propriedades da função de complementaridade não-linear, sem a necessidade de nenhuma restrição adicional. Uma função de mérito e a busca unidimensional de Armijo são utilizadas para determinar um tamanho de passo apropriado. Os autores apontam que a função de mérito garante apenas que um ponto estacionário da função Lagrangiana seja obtido, o qual não é necessariamente um ponto de mínimo local do problema de PNL, mas que em todos os testes realizados pontos de mínimo local foram alcançados.

No trabalho de YAN & QUINTANA (1999), os problemas de DE com restrição de segurança e FPOR foram resolvidos através da associação do método de Programação Linear Sequencial (PLS) e do método primal-dual de pontos interiores do tipo preditor-corretor. Nesta abordagem, a partir de uma solução que satisfaz as equações de fluxo de potência, o problema de FPO é linearizado e a direção de busca é calculada a partir da resolução de um subproblema de programação linear. A resolução de cada subproblema é feita através do método primal-dual de pontos interiores para programação linear. Uma vez calculada a direção de busca, as variáveis são atualizadas e um fluxo de carga é executado novamente. O procedimento de linearização e atualização das variáveis é repetido até que a norma da direção calculada seja menor que uma tolerância especificada. Como a aproximação linear da função objetivo somente é válida em uma vizinhança do ponto de linearização, os autores observam que as direções devem ser restritas a certos limites. Nas iterações iniciais, a utilização de passos grandes permite acelerar o processo de convergência. Entretanto, à medida em que os iterandos se aproximam da solução ótima, a utilização de passos grandes pode causar o comportamento oscilatório do método. Neste sentido, os autores propuseram uma heurística para redução do tamanho do passo, quando a direção de busca causa um aumento na função objetivo. Os autores também propuseram a atualização dinâmica da tolerância do método de pontos interiores. Nas iterações iniciais, a tolerância para a solução de cada subproblema pode ser maior e, então, reduzida ao longo das iterações de modo a obter soluções mais precisas.

Em COSTA ET AL. (2000), três abordagens de otimização para resolução de problemas de FPO foram apresentadas e comparadas numericamente: o método de conjunto ativo e penalidade, o método primal-dual e o método primal-dual barreira logarítmica. Na abordagem de conjunto ativo e penalidade, as restrições de desigualdade violadas são penalizadas. Em seguida a função Lagrangiana associada ao problema penalizado é determinada através da identificação do conjunto ativo, e o método de Newton aplicado para calcular as direções de busca a partir do sistema não-linear relacionado às condições necessárias de otimalidade. No método primal-dual apresentado, uma função Lagrangiana aumentada é definida e a ela são aplicadas as condições necessárias de otimalidade para calcular as direções de busca. Finalmente, o método primal-dual barreira logarítmica apresentado se assemelha ao introduzido por GRANVILLE (1994). O desempenho dos três

métodos foi comparado em termos das perdas ativas na transmissão, geração de potência reativa, número de iterações e tempo computacional. Os resultados obtidos indicaram que cada método possui vantagens e desvantagens, de modo que é recomendável a utilização de uma abordagem mista, que explore as qualidades de cada um.

NEJDAWI ET AL. (2000) propuseram um método de PQS associado a métodos de pontos interiores para resolução do problema de FPO, similarmente ao trabalho de YAN & QUINTANA (1999). O algoritmo está estruturado em um ciclo externo em que linearizações das condições de otimalidade são efetuadas, e um ciclo interno de otimização, no qual um problema quadrático é resolvido para calcular as direções de busca. O algoritmo utilizado para resolver os problemas em cada ciclo interno é o método primal-dual de pontos interiores para programação quadrática. Tendo em vista a resolução de problemas de FPO reais, nos quais há um grande número de restrições de desigualdade, os autores propõem uma relaxação das restrições, de modo a se resolver o problema quadrático com um número reduzido de restrições de desigualdade. Nesta estratégia, o problema quadrático é resolvido com as restrições de igualdade originais e um subconjunto das restrições de desigualdade. Caso a solução obtida seja factível para o problema quadrático original com todas as restrições, a solução ótima foi obtida e a direção de busca computada. Caso contrário, as restrições violadas são identificadas e acrescentadas ao conjunto das restrições de desigualdade do problema. Quando uma restrição é violada, o ponto atual obtido como solução não é factível. Para recuperar a factibilidade, uma variável artificial é acrescentada às restrições violadas e um termo de penalidade relacionado à variável artificial adicionado à função objetivo, de modo a forçar a variável artificial a se tornar nula. Os autores apontam que se a variável artificial não se anula, este é um indicativo de que o problema quadrático é infactível, porém não esclarecem o que deve ser feito nesta situação. Os resultados numéricos obtidos indicam que a abordagem apresentada é mais eficiente em termos do número de operações em ponto flutuante do que a aplicação direta de um método de pontos interiores para um sistema elétrico de 118 barras.

Um método de pontos interiores com múltiplas correções de centralidade foi proposto no trabalho de TORRES & QUINTANA (2001) para resolução do problema de FPO. Esta proposta é uma extensão do método desenvolvido por GONDZIO (1996) para problemas de programação linear. A abordagem é inspirada nos métodos de pontos interiores do tipo preditor-corretor, no qual a direção de busca é calculada resolvendo dois sistemas lineares com vetores independentes distintos, mas que possuem a mesma matriz de coeficientes. Desta forma, uma única fatoração matricial precisa ser efetuada para resolver os dois sistemas. A eficiência do método preditor-corretor está associada ao fato do mesmo considerar termos de ordem maior para o cálculo das direções. GONDZIO (1996) observou que a redução do desempenho dos métodos de pontos interiores normalmente é consequência das diferenças dos produtos de complementaridade; assim, quando um ponto é mal centralizado, isto é, as ordens de magnitude dos produtos de complementaridade são

diferentes, então os coeficientes independentes do sistema de direções são mal escalados. Consequentemente, passos pequenos acabam sendo dados, uma vez que a direção calculada pelo método de Newton se concentra na redução dos produtos maiores. A técnica de múltiplas correções de centralidade leva as ideias da variante do tipo preditor-corretor mais longe: utilizando a direção do procedimento preditor, um ou mais termos de correção são calculados visando obter iterandos mais bem centralizados e aumentar o comprimento dos passos. Ao obter pontos mais centralizados, a chance de um passo maior ser dado na iteração seguinte aumenta, enquanto que a utilização de passos maiores acelera a redução das infactibilidades. Apesar do custo maior por iteração, os resultados numéricos obtidos para os problemas de FPO mostram que a redução no número de iterações atingido pela técnica de múltiplas correções de centralidade permitiu a redução do tempo total de processamento, quando comparada ao método primal-dual de pontos interiores puro ou preditor-corretor.

Em JABR ET AL. (2002), o problema de FPO ativo foi resolvido através de um método primal-dual de pontos interiores do tipo preditor-corretor. O principal objetivo dos autores foi apresentar duas modificações que podem melhorar o processo de convergência destes métodos. A primeira delas é a utilização da técnica de filtros como critério para escolha do comprimento do passo, a qual foi inicialmente proposta no trabalho de FLETCHER & LEYFFER (1997). O principal objetivo desta modificação é evitar a necessidade de utilizar uma função de mérito, devido às dificuldades que podem surgir na escolha do parâmetro de penalidade associado a ela. A segunda modificação proposta é uma direção de busca alterada a fim de evitar a convergência para pontos estacionários que não são mínimos locais. Para tanto, uma perturbação diagonal é feita através da soma de um múltiplo da matriz identidade à matriz do sistema normal de equações, de modo a torná-la definida positiva. Esta modificação, de acordo com o autor, permite obter direções de descida para a função barreira. O preço pago por essa modificação é que podem ocorrer situações em que a infactibilidade dual falha em ser reduzida, mesmo que se utilize passos pequenos. A escolha do fator que multiplica a matriz identidade é determinado através de um método de bissecção. Os resultados numéricos obtidos mostraram que a perturbação na matriz era praticamente necessária para a convergência de problemas de FPO com transformadores reguladores, devido ao maior número de falhas quando o algoritmo não a utilizava.

A literatura sobre problemas de FPO também apresenta uma ampla variedade de abordagens metaheurísticas. Dentre elas, um algoritmo de otimização por enxame de partículas – do inglês *Particle Swarm Optimization* (PSO) – foi utilizado por ABIDO (2002) para a resolução de problemas de FPO na otimização de diversos critérios, tais como minimização de custos e de desvios do perfil de tensão desejado. O PSO é uma metaheurística inspirada no comportamento de seres vivos, tais como bandos de aves. De acordo com o autor, diferentemente de outras heurísticas, o PSO tem um mecanismo

flexível para aperfeiçoamento e adaptação, visando explorar o espaço de busca. Tal como em outras metaheurísticas, no PSO uma busca é conduzida utilizando uma população de partículas, que são os indivíduos, e que representam potenciais candidatas à solução. O algoritmo busca incorporar o conhecimento coletivo e individual para produzir novos indivíduos utilizando, respectivamente, a melhor posição conhecida até o momento pelo conjunto de partículas e a melhor posição visitada de cada partícula. Os resultados numéricos mostraram que a metaheurística proposta é robusta e capaz de obter soluções de boa qualidade. Entretanto, como a maioria das metaheurísticas, o PSO pode demandar um tempo computacional elevado para resolução de sistemas de grande porte, além de não possuir garantias de que a solução encontrada é um ótimo local.

No trabalho de SOUSA ET AL. (2003), um método de Newton melhorado foi apresentado, o qual se baseia na combinação de métodos de penalidade e barreira para o tratamento das restrições de desigualdade. As restrições de desigualdade relacionadas a canalizações de variáveis, tais como as magnitudes de tensão e *taps* dos transformadores são incorporadas à função objetivo através de penalidades. Folgas são adicionadas às restrições funcionais de desigualdade, tais como aquelas relacionadas à injeção de potência reativa, transformando-as em restrições de igualdade. A condição de positividade de tais folgas é tratada por meio da função barreira. A função Lagrangiana associada a este problema com restrições de igualdade é construída mediante introdução de variáveis duais. As condições necessárias de primeira ordem são aplicadas à função Lagrangiana, gerando um sistema não-linear que é resolvido pelo método de Newton e pela atualização dos termos de penalidade e de barreira. Resultados numéricos com os sistemas CESP 53 barras e IEEE 118 mostraram a viabilidade da abordagem.

Baseados na proposta da função barreira modificada de POLYAK (1992) e no método primal-dual de pontos interiores de GRANVILLE (1994), SOUSA ET AL. (2004) propuseram a utilização da função Lagrangiana barreira modificada para a resolução de problemas de FPO. Em contraste com a função barreira clássica, a função barreira modificada e suas derivadas estão definidas na solução ótima, para qualquer valor do parâmetro de barreira. De modo similar aos métodos primais-duais de pontos interiores, variáveis de folga são acrescentadas às restrições de desigualdade. A principal diferença é que a condição de positividade destas variáveis é tratada através da função barreira logarítmica modificada. Multiplicadores de Lagrange são introduzidos e a função Lagrangiana associada ao problema de barreira modificada é construída. As direções de busca são determinadas pelo método de Newton aplicado ao sistema não-linear proveniente das condições necessárias de otimalidade. Resultados numéricos com sistemas de até 162 barras mostraram que o método é robusto e possui convergência rápida.

No trabalho de MIN & SHENGSONG (2005), o problema de FPO foi resolvido através de um método de região de confiança com pontos interiores. A abordagem proposta utiliza o método primal-dual de pontos interiores com múltiplas correções de centralidade para

resolver uma sequência de subproblemas de região de confiança linearizados. O método desenvolvido se baseia nas ideias de programação linear sequencial, porém se diferencia por incluir uma restrição de região de confiança para controle do passo. A região de confiança evita que passos inadequados sejam calculados, para os quais o modelo linear não é uma boa aproximação do problema original. A restrição de região de confiança é definida em termos da norma ℓ_∞ , de modo que cada subproblema de região de confiança é linear e pode ser resolvido pelo método de pontos interiores. A fim de evitar possíveis infactibilidades na resolução de cada subproblema de região de confiança, os autores propuseram a utilização de um subproblema linear modificado através da introdução de uma variável extra e um termo de penalidade, sem alterar significativamente a estrutura do subproblema de região de confiança. Experimentos numéricos realizados com sistemas elétricos de até 662 barras mostraram que a abordagem é eficiente. Também se verificou que a resolução dos subproblemas pelo método de pontos interiores com múltiplas correções de centralidade foi mais rápida do que com a utilização da variante do tipo preditor-corretor.

Em BAPTISTA ET AL. (2006) o método de Lagrangiana aumentada foi combinado ao método de pontos interiores para minimizar as perdas de potência ativa em problemas de FPO. Nesta abordagem, variáveis de folga são acrescentadas às restrições de desigualdade relacionadas aos limites de magnitudes de tensão e *taps* dos transformadores em-fase. Em seguida, tais variáveis de folga são incorporadas à função objetivo através da função barreira logarítmica. As demais restrições de desigualdade são tratadas pelo método da função Lagrangiana aumentada. Variáveis duais são associadas às restrições de igualdade e as condições necessárias de otimalidade de primeira ordem são aplicadas. O sistema não-linear obtido foi resolvido pelo método de Newton. Experimentos numéricos com um sistema de 162 barras e o sistema Sul-Sudeste brasileiro de 810 barras mostraram a eficiência da proposta.

No trabalho de WANG ET AL. (2007), os autores discutiram a utilização do problema de FPO no contexto dos mercados de eletricidade desregulados. Neste contexto, as ferramentas de FPO ideais devem possuir as seguintes características desejáveis: convergência determinística, cálculo preciso dos preços nodais, capacidade de tratar funções suaves, não-suaves ou descontínuas que expressam o custo de vários recursos e serviços (tais como potência ativa, potência reativa, suporte de tensão através de injeção de reativos), modelagem completa dos fluxos de potência ativa e reativa para sistemas de grande porte e desempenho de pior caso satisfatório visando o despacho em tempo real. Considerando estes aspectos, os autores propuseram: um método de Lagrangiana aumentada com regiões de confiança, um método primal-dual de pontos interiores com passo controlado, além de uma reformulação do modelo de FPO. No método de Lagrangiana aumentada com regiões de confiança, o problema restrito é convertido em uma sequência de problemas irrestritos através da função Lagrangiana aumentada. Cada subproblema de Lagrangiana aumentada é resolvido através de um método de região de confiança para

otimização irrestrita. De acordo com os autores, comparado ao método de Newton, que era amplamente adotado nos algoritmos de FPO, métodos de região de confiança são mais robustos no tratamento de sistemas de grande porte a partir de soluções iniciais aleatórias. O método primal-dual de pontos interiores com controle de passo busca superar as dificuldades dos métodos de pontos interiores clássicos na resolução de problemas de FPO com função custo não-diferenciável e definida por partes, monitorando a precisão da aproximação quadrática da função Lagrangiana durante as iterações e encurtando o passo de Newton, se mudanças abruptas nas derivadas resultarem em aproximações imprecisas.

No trabalho de CAPITANESCU ET AL. (2007), os métodos primal-dual de pontos interiores puro, preditor-corretor e com múltiplas correções de centralidade foram comparados na resolução de problemas de FPO com diversos objetivos: minimização dos custos de geração, minimização das perdas de potência ativa, maximização do carregamento do sistema elétrico e minimização do corte de carga. Os modelos resolvidos utilizaram uma formulação de FPO em coordenadas retangulares. Os experimentos computacionais conduzidos mostraram que o método do tipo preditor-corretor normalmente supera o método primal-dual puro em termos de tempo computacional nos problemas de grande porte. O oposto pode ocorrer algumas vezes, especialmente nos problemas de menor dimensão. Os resultados obtidos também mostraram que o método com múltiplas correções de centralidade é uma alternativa viável ao método preditor-corretor. Os autores apontam, entretanto, que a principal dificuldade associada ao método com múltiplas correções de centralidade está associada ao número máximo de correções permitidas, de modo a garantir que reduções no tempo computacional sejam obtidas.

Um método de pontos interiores com região de confiança, implementado no *solver* KNITRO foi utilizado por KAROUI ET AL. (2008) para resolver problemas de FPO com restrições de segurança. Os autores apontam que a relação entre as variáveis de controle pré-contingência e pós-contingência definem dois tipos de estratégia de segurança: preventiva e corretiva. Na segurança preventiva, não há reajuste das variáveis de controle pós-contingência, sendo que a mudança nas variáveis de controle ocorre apenas como resposta do controle automático do sistema de potência. Na segurança corretiva, as variáveis de controle podem ser reajustadas para corrigir quaisquer limites de operação violados em uma situação pós-contingência. O *solver* KNITRO utilizado para a resolução do problema é uma implementação de um método de pontos interiores para PNL, consistindo na resolução de uma sequência de subproblemas de barreira. Cada subproblema de barreira é resolvido por um método de PQS com região de confiança, e utiliza uma função de mérito para promover a convergência. O algoritmo não requer a factibilidade dos iterandos com relação às restrições de desigualdade, mas as variáveis de folga devem permanecer positivas de modo similar aos métodos de pontos interiores clássicos. Os resultados numéricos obtidos mostraram que o método é robusto, sendo capaz de resolver o problema para um sistema elétrico de 2351 barras com 15 contingências, visando maximizar a capacidade

total de transferência entre duas áreas do sistema elétrico.

BAI ET AL. (2008) propuseram a utilização de uma técnica baseada em Programação Semi-Definida (PSD) para a resolução do problema de FPO. De acordo com os autores, dentre as vantagens desta abordagem estão o fato de que a relaxação da PSD é convexa, e que métodos de pontos interiores baseados em PSD não requerem o cálculo de matrizes Jacobianas e matrizes Hessianas para cada problema particular. Desta forma, os autores apresentaram uma reformulação do problema de FPO em coordenadas retangulares de modo a transformá-lo em um problema de PSD. O problema resultante é convexo e sua solução pode ser obtida através de métodos de pontos interiores para PSD, os quais possuem convergência superlinear. Os resultados numéricos apresentados mostraram que a reformulação via PSD permite a obtenção de soluções para o FPO com a mesma qualidade das obtidas através de métodos para PNL. Os autores destacaram, entretanto, que à época de publicação do artigo, o método proposto não podia competir com métodos clássicos de PNL na resolução do problema de FPO em termos de tempo computacional e que não foi possível resolver problemas de grande porte devido às limitações computacionais. Assim, enfatizaram que futuros estudos em PSD devem explorar algoritmos que sejam mais eficientes.

Uma variante do tipo preditor-corretor para o método da função barreira modificada foi proposto no trabalho de SOUSA ET AL. (2009). Nesta abordagem, as restrições de desigualdade são transformadas em igualdades pela introdução de variáveis de folga auxiliares. A condição de positividade das folgas é tratada por meio da função barreira modificada. Ao problema de barreira modificada é associada uma função Lagrangiana. As condições necessárias de otimalidade de primeira ordem são aplicadas e o sistema não-linear obtido é resolvido pelo método de Newton. Baseados nas ideias da variante do tipo preditor-corretor para pontos interiores, os autores apresentaram um procedimento preditor-corretor para o método da função barreira modificada, através da introdução de termos não-lineares de segunda ordem no vetor de resíduos. Testes numéricos com sistemas de 30 a 2256 barras mostraram que a abordagem do tipo preditor-corretor desenvolvida permite a redução do tempo computacional quando comparada ao método primal-dual preditor-corretor de pontos interiores e o método da função barreira modificada puro.

Em JIANG & GENG (2010) um método de pontos interiores com redução de dimensão foi proposto para a resolução de problemas de FPO com restrições de estabilidade transitória. O modelo de FPO para o problema com restrições de estabilidade transitória possui restrições de igualdade e desigualdade expressas por equações diferenciais. Tais equações diferenciais são discretizadas de modo a se obter um conjunto de restrições algébricas. Cada instante da discretização possui restrições de estabilidade transitórias baseadas nos ângulos dos rotores com relação ao centro de inércia. Desta forma, quanto menor o passo da discretização, maior é o número de variáveis do problema a ser resolvido.

Devido ao elevado número de variáveis, os autores propuseram a utilização de um método de pontos interiores com redução de dimensão para resolução do problema. O foco da técnica de redução de dimensão é o sistema primal-dual que deve ser resolvido a cada iteração de um método primal-dual de pontos interiores. Ela é adequada especialmente para problemas de PNL de grande porte com poucos graus de liberdade – ou seja, nos quais a diferença entre o número de variáveis primais e restrições de igualdade é pequeno. A ideia principal deste método é construir duas bases, uma para a imagem e outra para o núcleo da matriz Jacobiana das restrições de igualdade, o que permite decompor a direção de busca das variáveis primais em dois espaços. Os resultados obtidos mostraram que a técnica proposta leva à reduções significativas de tempo computacional, em especial para sistemas elétricos de grande porte, e foi capaz de resolver instâncias que o método primal-dual preditor-corretor de pontos interiores não conseguiu devido às limitações de memória ou tempo máximo de processamento.

Um método de região de confiança com pontos interiores foi apresentado no trabalho de SOUSA ET AL. (2011). Os autores apontam que existem duas maneiras de globalizar métodos de otimização: através de busca linear ou através de regiões de confiança. A escolha pelo método de região de confiança está relacionada à sua robustez na resolução de problemas de FPO. A abordagem proposta se baseia nos trabalhos de BYRD ET AL. (2000) e OMOJOKUN (1989) e pode ser vista como um método de PQS com região de confiança. Ela decompõe cada subproblema quadrático restrito em dois subproblemas menores que possuem apenas a restrição de região de confiança. O método de região de confiança pode ser associado a métodos de pontos interiores de duas maneiras: aplicando o método de região de confiança ao problema de barreira logarítmica a fim de globalizar sua solução, ou aplicar o método de pontos interiores para resolver os subproblemas de região de confiança. A proposta apresentada seguiu a segunda estratégia: primeiramente, a técnica de região de confiança de Byrd-Omojokun é aplicada para decompor o problema de região de confiança em dois subproblemas menores; em seguida, um método primal-dual de pontos interiores é utilizado para resolver os dois subproblemas quadráticos. A norma ℓ_∞ é utilizada para definir a região de confiança de modo que todas as restrições dos subproblemas são lineares. Uma função de mérito não-diferenciável é utilizada como critério para aceitação do passo, e correções de segunda ordem são adotadas para evitar o efeito Maratos. Os resultados numéricos indicaram que o método foi robusto para a resolução de problemas de FPO de difícil convergência, sendo capaz de resolver instâncias que o método primal-dual de pontos interiores puro e preditor-corretor falharam.

Em TORRES (2011) um algoritmo de região de confiança com funções de complementaridade foi utilizado para resolver o problema de FPO. Nesta abordagem, as condições necessárias de otimalidade são aplicadas ao PNL, sendo que as equações relacionadas à complementaridade são substituídas por funções de complementaridade não-linear, de modo similar ao trabalho de TORRES & QUINTANA (1999). O sistema de equações

não-lineares é, então, convertido em um problema de otimização irrestrito de mínimos quadrados, que é resolvido através de um método de região de confiança para otimização irrestrita. O método *dogleg* de Powell foi utilizado para resolver cada subproblema de região de confiança devido ao seu baixo custo computacional. Testes computacionais com três tipos de funções de complementaridade foram conduzidos para verificar as suas influências no desempenho do método. Também foram testadas quatro formas de inicialização: a solução de um fluxo de carga, ponto médio entre os limites inferiores e superiores das variáveis, *flat start* e solução aleatória dentro dos limites. No caso de soluções aleatórias, foram testadas 50 soluções iniciais, sendo que o método proposto foi capaz de convergir em todos os casos, mostrando a robustez do método de região de confiança. Em contrapartida, o método primal-dual de pontos interiores falhou em 6 das 50 inicializações aleatórias para o sistema IEEE de 300 barras.

O método da função Lagrangiana barreira modificada foi aplicado por SOUSA ET AL. (2012) para a resolução do problema de FPOR. Nesta abordagem, as restrições de desigualdade são tratadas pelo método da função barreira modificada. De acordo com os autores, a função barreira modificada tem uma propriedade de convergência finita, de modo que a fronteira do conjunto factível pode ser atingida na solução ótima. Além disso, o parâmetro de barreira não precisa ser reduzido para zero a fim de atingir a solução, o que melhora o condicionamento da matriz Hessiana. A fim de realizar uma análise comparativa, o condicionamento numérico da matriz Hessiana é calculado tanto para o método da função barreira modificada quanto para o método de pontos interiores tradicional. Os resultados numéricos obtidos mostraram que a abordagem da função barreira modificada é atrativa em termos de tempo computacional, número de iterações e condicionamento numérico quando comparada ao método de pontos interiores.

Em LAVAEI & LOW (2012) foi mostrado que apesar do problema de FPO ser NP-difícil, é possível obter um algoritmo de tempo polinomial para encontrar a solução ótima global para uma ampla classe de sistemas de potência, explorando as propriedades físicas dos sistemas elétricos. Para tanto, propuseram a resolução do dual de uma forma equivalente do problema de FPO, ao invés de resolvê-lo diretamente. Este problema dual é um problema de PSD convexo, que pode ser resolvido em tempo polinomial. Entretanto, o valor ótimo do problema dual é apenas um limitante inferior para o valor ótimo do problema de FPO original, podendo existir um *gap* de dualidade. Uma solução ótima global do problema de FPO pode ser recuperada a partir da solução dual se o *gap* de dualidade for nulo. Neste sentido, os autores investigam condições necessárias e suficientes para a ocorrência do *gap* nulo. Tais condições se verificam para sistemas-teste do IEEE frequentemente utilizados na literatura, desde que valores pequenos de resistência sejam adicionados aos transformadores que originalmente possuem resistência nula. Os autores apontaram que algoritmos de busca local ainda possuem convergência mais rápida que algoritmos para PSD. Entretanto, a formulação via PSD pode ser útil para resolver

problemas de FPO em que é necessário determinar uma solução ótima global.

No trabalho de MOLZAHN ET AL. (2013) alguns avanços de modelagem e algorítmicos para a utilização de PSD em problemas de FPO de grande porte foram propostos. Uma relaxação via PSD para o problema de FPO foi apresentada, a qual permite a inclusão de múltiplos geradores em uma mesma barra e linhas paralelas. Os autores apontaram que o avanço das técnicas de decomposição de grandes matrizes, que frequentemente estão restritas a serem semidefinidas positivas na PSD, em várias matrizes menores tornou a resolução de problemas de FPO via PSD para sistemas maiores computacionalmente tratável. Três avanços em técnicas de decomposição foram apresentados: um algoritmo de combinação de matrizes para redução do tempo de processamento, uma modificação em uma técnica de decomposição já existente de modo a estender sua aplicabilidade a redes elétricas gerais, e um método para obtenção do perfil ótimo de tensão a partir da solução de um problema de PSD decomposto.

Em SIMONI & TORRES (2014), um método de região de confiança para resolução de problemas de FPO foi desenvolvido, visando reduzir o esforço computacional do algoritmo de SOUSA ET AL. (2011). O algoritmo proposto emprega uma abordagem de programação quadrática sequencial ℓ_1 ($S\ell_1QP$), no lugar da técnica de Byrd-Omojokun. Assim, ao invés de resolver dois subproblemas quadráticos por iteração, na abordagem $S\ell_1QP$ um único problema quadrático de dimensão maior é resolvido. Para atingir este propósito, uma penalidade exata na norma ℓ_1 , relacionada às restrições linearizadas do problema, é introduzida na função objetivo do problema de região de confiança, tornando-a não-diferenciável. Esta dificuldade é contornada por meio de uma mudança de variável e a introdução de duas variáveis auxiliares, de modo que se obtém um problema de programação quadrática, que é resolvido através de um método primal-dual de pontos interiores. Os resultados mostraram que a abordagem é mais robusta que o método primal-dual de pontos interiores para PNL e apresenta menor tempo computacional em relação à técnica de Byrd-Omojokun.

No trabalho de ALMEIDA & KOCHOLIK (2016), uma nova abordagem para resolução de problemas de FPO baseada nas condições de otimalidade de Fritz-John foi apresentada. A maioria das abordagens para problemas de FPO que se baseiam nas condições de otimalidade do problema de otimização utilizam as condições de KKT. Contudo, quando os gradientes das restrições do problema são (quase) linearmente dependentes, as condições de KKT podem não ser as mais adequadas, uma vez que diversos algoritmos ficam sujeitos a problemas de mal-condicionamento. Considerando este aspecto, os autores propuseram a utilização das condições necessárias de otimalidade de Fritz-John como alternativa, uma vez que esta é válida quando os gradientes do problema são linearmente dependentes. A fim de obter um algoritmo apropriado, os autores primeiramente utilizaram uma função barreira logarítmica para tratar as variáveis de folga adicionadas às restrições de desigualdade. Em seguida, escreveram as condições necessárias de Fritz-John para o problema de

barreira obtido. Entretanto, a aplicação direta das condições de Fritz-John ao problema de barreira conduz a um sistema não-linear em que há uma incógnita a mais que o número de equações. A fim de contornar este problema, adiciona-se uma equação de normalização extra ao sistema, envolvendo os multiplicadores de Lagrange. O sistema não-linear é, então, resolvido pelo método de Newton, de modo similar ao método de pontos interiores. Os resultados numéricos obtidos indicaram que a abordagem baseada nas condições de Fritz-John tem desempenho similar à baseada nas condições de KKT, sendo capaz de resolver alguns casos críticos nos quais o método primal-dual de pontos interiores puro falhou.

Em SAMPATH ET AL. (2018), uma abordagem de região de confiança baseada em PLS para resolução de problemas de FPO foi apresentada. Nesta abordagem, um modelo linear da função objetivo e restrições é construído a cada iteração, seguido da adição de uma região de confiança para controle da validade do modelo linear. Entretanto, a utilização das linearizações e adição da região de confiança pode ocasionar a infactibilidade do modelo linear. Nas situações em que o modelo linearizado é infactível, o algoritmo proposto entra em uma fase de restauração, na qual as restrições não-lineares originais são utilizadas para determinar um ponto factível, através de um subproblema de PNL. As condições necessárias de otimalidade de KKT são utilizadas como critério de parada. O algoritmo proposto foi comparado com os *solvers* KNITRO e IPOPT em sistemas de até 3012 barras, tendo desempenho favorável nos casos de maior porte. A tolerância de convergência inicialmente utilizada pelos autores foi de 10^{-2} . Na análise de sensibilidade à essa tolerância, observa-se que ao utilizar uma tolerância de 10^{-3} , o número de iterações e tempo computacional do método aumentam de 2 a 7 vezes. Apesar dos autores indicarem que as tolerâncias originais são boas o bastante para alcançar uma solução, este fato pode indicar uma possível limitação da utilização de modelos lineares em métodos de região de confiança.

2.3.1 Variáveis discretas no problema de FPO

Algumas dificuldades associadas à resolução de problemas de FPO, visando sua aplicação na operação real de sistemas elétricos, foram apresentadas no trabalho de TINNEY ET AL. (1988). Três deficiências principais são apontadas: os equivalentes utilizados na resolução de problemas de FPO podem causar grandes erros nas soluções do problema; os métodos para tratamento das variáveis discretas em algoritmos de FPO produzem soluções com custos significativamente maiores do que as soluções ótimas contínuas; e o número de ações de controle usadas na resolução de problemas de FPO frequentemente é muito grande para ser executada em sistemas reais. Destacam ainda que, apesar de reduzirem a precisão e utilidade das aplicações de FPO, estas questões receberam pouca atenção porque diversos aspectos fundamentais do problema de FPO foram ignorados.

Estas deficiências são especialmente importantes em problemas de FPO que utilizam funções objetivo não-separáveis. No que diz respeito às variáveis de controle discretas em um FPO, os autores apontaram que, ainda que o procedimento para discretização resulte em soluções subótimas, ao menos deve-se garantir que a solução discreta obtida seja factível. Deixar que os ajustes de controles discretos sejam realizados a critério do usuário é quase sempre insatisfatório, pois os ajustes executados podem facilmente causar a violação das restrições de desigualdade, que não podem ser corrigidas completamente apenas com o ajuste das variáveis contínuas.

Em LIU ET AL. (1992) um método de penalidade foi apresentado para o ajuste das variáveis discretas relacionadas a bancos de capacitores e reatores *shunt*, evitando assim procedimentos de busca combinatórios que podem ser lentos para a aplicação em tempo real, devido à tendência de aumento exponencial da complexidade computacional com o número de variáveis discretas. Os autores ainda indicam que o procedimento de arredondamento comumente utilizado para determinar os valores para as variáveis discretas fornecem soluções aceitáveis desde que os passos discretos sejam suficientemente pequenos, como ocorre com os *taps* de transformadores em-fase e ângulos de transformadores defasadores. Entretanto, capacitores e reatores *shunt* com tamanhos de passos maiores podem ter um grande impacto no processo de otimização. Na abordagem proposta, as variáveis discretas são tratadas através de uma função penalidade, que é acrescentada à função objetivo por meio de um parâmetro de penalidade. Uma função Lagrangiana é associada ao problema de FPO penalizado, por meio de multiplicadores de Lagrange. As condições necessárias de otimalidade são aplicadas, e as direções de busca são calculadas pelo método de Newton considerando todas as variáveis contínuas. A fim de evitar não-convexidades, a função penalidade aplicada consiste em uma aproximação linear da função penalidade quadrática, a qual é atualizada ao longo do processo iterativo para preservar a natureza quadrática da penalidade utilizada para discretização. Como a função penalidade é linear, ela altera apenas o vetor gradiente da função Lagrangiana, sem alterar a matriz Hessiana. À medida em que uma variável discreta se aproxima de um valor discreto permitido, esta se torna fixa. O algoritmo converge quando as restrições do problema forem satisfeitas e as variáveis de controle discretas assumirem valores discretos. Os autores enfatizam que o sucesso do método depende do desenvolvimento de uma estratégia para determinar quando e como aplicar a função penalidade.

Diversas metaheurísticas para a resolução de problemas de FPO com variáveis contínuas e discretas também foram propostas na literatura. Um exemplo é o algoritmo genético aperfeiçoado proposto por BAKIRTZIS ET AL. (2002). Nesta abordagem, um conjunto aleatório de candidatas à soluções para o problema é gerado (população inicial), de modo que as variáveis de controle atendam aos limites mínimos e máximos se forem contínuas e assumam valores discretos caso sejam discretas. Os pontos da população inicial, entretanto, não precisam atender às demais restrições do problema de FPO, as quais

são incluídas em uma função de aptidão através de penalidades. O objetivo da função de aptidão é avaliar a qualidade de cada solução candidata. As operações de seleção, cruzamento e mutação típicas de algoritmos genéticos estão incluídas no algoritmo, sendo que os indivíduos mais aptos possuem maior probabilidade de cruzamento. Operadores concebidos especificamente para o problema de FPO são incorporados ao algoritmo, o que permite a resolução de problemas de maior dimensão. Os autores obtiveram resultados numéricos para sistemas de até 242 barras e 500 variáveis de controle, mostrando que os operadores específicos permitiram uma melhora de desempenho. Destaca-se, porém, que por sua natureza estocástica, a solução obtida não possui garantias de otimalidade. Outra desvantagem é que o tempo computacional e a qualidade das soluções tende a se deteriorar com o aumento da dimensão do problema de FPO, de modo que a aplicabilidade destes algoritmos a problemas com várias centenas de barras ainda precisa ser avaliada.

Uma abordagem que combina o método primal-dual de pontos interiores e funções penalidade foi desenvolvida no trabalho de LIU ET AL. (2002), para a resolução de problemas de FPO com variáveis contínuas e discretas. A função penalidade desenvolvida é definida por partes, em uma vizinhança de cada valor discreto, de modo que o vértice de cada quadrática coincide com os valores discretos, chamados de centros de vizinhança. Por ser definida desta forma, a função penalidade proposta é não-diferenciável no ponto médio entre dois valores discretos consecutivos. Uma função Lagrangiana é associada ao problema com penalidade, e as condições necessárias de primeira ordem são aplicadas, originando um sistema não-linear. As direções de busca que permitem a atualização das variáveis são calculadas através do método de Newton. A penalidade associada às variáveis discretas é introduzida quando o valor do *gap* de complementaridade é menor que uma tolerância preestabelecida. Quando as mudanças nas variáveis discretas entre duas iterações consecutivas é menor que uma fração do passo discreto, a introdução da penalidade pode ajudar a prevenir a variação frequente dos centros de vizinhança. Durante o processo de otimização, as restrições de desigualdade devem ser satisfeitas antes da aplicação da penalidade discreta, isto é, o valor da penalidade deve ser nulo sempre que os limites inferiores ou superiores das variáveis discretas são violados. Nestas situações, cabe à função barreira forçar as variáveis a retornarem a suas devidas regiões factíveis. Os autores apontaram que a introdução da penalidade deve ser feita de maneira criteriosa: se for usada antecipadamente a perturbação na função objetivo pode levar a soluções não ótimas; por outro lado, se for usada quando o método já convergiu para a solução contínua, o processo iterativo é afetado e mais iterações são necessárias para atingir uma solução discreta. Testes realizados com sistemas elétricos de até 538 barras mostraram que a abordagem obtém soluções de boa qualidade em um tempo computacional aceitável.

Em ADIBI ET AL. (2003) o método da função Lagrangiana aumentada barreira modificada foi aplicado na resolução de problemas de FPO em que os *taps* dos transformadores são considerados variáveis discretas. A princípio, a natureza discreta dos *taps* é ignorada

e a relaxação contínua do problema de FPO é resolvida. Na abordagem proposta, as restrições de desigualdade do problema original são transformadas por meio da função barreira modificada, e as restrições transformadas são incorporadas à função Lagrangiana por meio de multiplicadores de Lagrange e um parâmetro de barreira-penalidade. As restrições de igualdade são incorporadas à função Lagrangiana por meio de multiplicadores de Lagrange e por termos de penalidade, resultando em uma função Lagrangiana aumentada. Uma iteração do método proposto consiste na minimização da função Lagrangiana aumentada barreira modificada com multiplicadores de Lagrange e parâmetro de barreira-penalidade fixos, utilizando o método de Newton. Após a convergência do método de Newton, um novo ponto é obtido e as variáveis duais são atualizadas por meio de uma fórmula explícita, de modo semelhante aos métodos de Lagrangiana aumentada tradicionais. Se o critério de parada não for satisfeito, a função Lagrangiana aumentada barreira modificada é minimizada novamente. Os autores apontaram que não é necessário aumentar o parâmetro de barreira-penalidade para obter a convergência, de modo que os problemas de mal-condicionamento são evitados. Nos passos finais do algoritmo, os valores contínuos de *taps* são arredondados para seus valores discretos mais próximos, e o problema de FPO é resolvido novamente com os *taps* fixos a fim de atualizar as demais variáveis. Resultados numéricos com um sistema elétrico de 160 barras mostraram a viabilidade da abordagem.

Uma técnica de programação evolutiva aperfeiçoada híbrida foi proposta no trabalho de YAN ET AL. (2004) para a resolução de problemas de FPOR. Esta metaheurística foi combinada ao método primal-dual de pontos interiores de modo a obter um método híbrido mais eficiente. Inicialmente, o método de pontos interiores é utilizado para obter uma solução ótima contínua para o problema de FPO, cujas variáveis discretas são posteriormente arredondadas. Esta solução arredondada é, então, introduzida na população inicial do método de programação evolutiva, de modo a acelerar o processo evolutivo. Na população inicial, todos os indivíduos são gerados aleatoriamente, com exceção do indivíduo obtido a partir do método de pontos interiores. O principal motivo para a utilização deste indivíduo particular é que ele normalmente está mais próximo de soluções ótimas do que aqueles gerados aleatoriamente, mesmo após o procedimento de arredondamento. Melhorias foram propostas para a metaheurística de modo a incorporar práticas comuns na operação de sistemas elétricos e reduzir o número de operações aleatórias de mutação, ao mesmo tempo em que se preservam as características estocásticas e de busca global do algoritmo de programação evolutiva. Resultados numéricos com sistemas de 118 e 161 barras mostraram que a técnica proposta é mais rápida que o método de programação evolutiva convencional.

Um método de pontos interiores com planos de corte foi apresentado no trabalho de DING ET AL. (2004) para a resolução de problemas de FPO com variáveis de controle discretas. No modelo apresentado, as variáveis discretas do problema são os *taps* dos

transformadores em-fase. Na abordagem proposta, sucessivas linearizações do problema de FPO são resolvidas. Nos métodos de planos de corte tradicionais, os problemas de PL são resolvidos pelo método simplex, enquanto que no método apresentado eles são resolvidos por um método de pontos interiores. Inicialmente, uma solução para o problema de FPO é calculada considerando os *taps* fixos. Em seguida, o problema de FPO é linearizado na vizinhança da solução obtida, dando origem a um problema de PL. Se o problema de PL for infactível, o algoritmo é finalizado pois o problema de FPO é infactível. Caso contrário, o problema de PL é resolvido pelo método de pontos interiores. Cortes podem ser acrescentados iterativamente ao problema de PL até que uma solução com variáveis discretas seja obtida. Quando isto ocorre, o problema de FPO é novamente resolvido com as variáveis discretas obtidas fixas, e o processo é repetido até que o critério de parada baseado na diferença da função objetivo entre duas soluções consecutivas seja atendido. Os autores ainda apresentaram detalhes dos procedimentos utilizados para gerar os planos de corte sem utilizar o tableau do método simplex, como identificar uma base para o método de pontos interiores com planos de corte e como gerar planos de corte no contexto do método de pontos interiores se o problema for inteiro misto. Resultados numéricos obtidos para sistemas elétricos com até 300 barras mostraram que a abordagem proposta é mais rápida do que os métodos de planos de corte que utilizam o método simplex na resolução dos problemas linearizados.

Em LIN ET AL. (2004) um algoritmo baseado na teoria de otimização ordinal foi apresentado para a resolução do problema de FPO com variáveis de controle discretas. O objetivo desta proposta é reduzir o número de soluções candidatas a serem verificadas no espaço composto por todas as variáveis discretas e obter uma solução de boa qualidade com alta probabilidade, a qual não é necessariamente a solução ótima. O algoritmo é baseado em um procedimento de busca dividido em três etapas. Na primeira etapa, o problema de FPO é relaxado e uma solução contínua é obtida. Assim, determina-se um conjunto de soluções candidatas composto por todas as possíveis combinações de arredondamento de cada variável discreta para os valores discretos inferior e superior mais próximos. Em seguida, uma heurística baseada no teorema da sensibilidade, é utilizada para fixar o valor de algumas variáveis discretas, reduzindo o número de combinações, e obtém-se um novo subconjunto de soluções candidatas representativas do espaço de busca discreto. O número de variáveis a serem fixadas depende do número de soluções candidatas desejadas no novo subconjunto. Na segunda etapa, um modelo simplificado é utilizado para estimar o desvio na função objetivo em relação à solução ótima contínua, para cada elemento do conjunto representativo obtido no primeiro passo. As soluções candidatas são ordenadas da menor para a maior sensibilidade em relação ao valor ótimo do caso contínuo. As melhores soluções de acordo com essa ordenação – isto é, com menor sensibilidade em relação ao valor ótimo da relaxação contínua – formam um novo subconjunto, composto pelas soluções realmente boas com alta probabilidade. Na terceira etapa, um

modelo quadrático para o problema de FPO, similar ao utilizado em métodos de PQS, é utilizado para calcular uma solução aproximada para cada valor discreto do último subconjunto determinado. Cada solução aproximada é, então, avaliada de acordo com a função objetivo, o que permite ordenar o último subconjunto determinado. Finalmente, o problema de FPO é resolvido de maneira exata para as soluções mais promissoras de acordo com o modelo quadrático. Foram realizados testes com sistemas de 118 e 244 barras, obtendo-se soluções satisfatórias. A desvantagem desta proposta é que a solução obtida não é uma solução ótima, sendo apenas uma solução de boa qualidade com alta probabilidade dentre aquelas que podem ser obtidas combinando as soluções obtidas por arredondamento das variáveis na solução do problema contínuo.

Uma comparação entre duas metaheurísticas e dois métodos de otimização clássica na resolução de problemas de FPO com variáveis contínuas e discretas foi realizada no trabalho de BISKAS ET AL. (2006). As metaheurísticas escolhidas para comparação foram um algoritmo genético aperfeiçoado e um algoritmo PSO. O algoritmo de Lagrangiana aumentada projetada implementada no *solver* MINOS e o método de gradiente reduzido generalizado do *solver* CONOPT foram os métodos clássicos utilizados. A solução discreta pelos métodos determinísticos é computada através do arredondamento na solução ótima da relaxação contínua e, em seguida, o problema é resolvido novamente com os valores discretos fixados. O algoritmo genético aperfeiçoado possui as operações de seleção, cruzamento e mutação comuns em algoritmos genéticos, além de outros operadores avançados e específicos para o problema de FPO discreto, conforme em BAKIRTZIS ET AL. (2002). Quanto ao PSO, apesar de seu desempenho satisfatório nas iterações iniciais, o processo evolutivo tende a estagnar nas iterações finais do algoritmo. Visando superar esta dificuldade, os autores propuseram um PSO Dissipativo, o qual introduz um elemento de caos adicional na velocidade e localização das partículas, permitindo que o mesmo tenha melhor desempenho que o PSO clássico. No PSO Dissipativo, a posição e velocidade para as variáveis de controle discretas são tratadas utilizando valores discretos, sendo arredondados para o valor discreto mais próximo quando necessário. Testes numéricos foram realizados utilizando os sistemas elétricos IEEE 24 barras e IEEE 118 barras, além de sistemas maiores de até 708 barras, obtidos pela replicação dos dois primeiros. Os resultados mostraram que as metaheurísticas possuem comportamento satisfatório para sistemas de menor porte, mas têm a robustez reduzida em sistemas de maior porte, o que é evidenciado pelo aumento no tempo de processamento e diminuição da qualidade das soluções obtidas.

Em ALRASHIDI & EL-HAWARY (2007) um algoritmo PSO Híbrido (HPSO) foi apresentado para a resolução de problemas de FPO com variáveis contínuas e discretas. As variáveis discretas consideradas foram os *taps* dos transformadores e a injeção de potência reativa devido a bancos de capacitores. O método utiliza o PSO para a alocação ótima das variáveis de controle enquanto o algoritmo de Newton-Raphson minimiza os

mismatches de potência ativa e reativa. Os autores ainda propuseram um mecanismo para tratamento das restrições de desigualdade que preserva apenas soluções factíveis e explora o elemento de memória presente em algoritmos de PSO, de modo que o atendimento das restrições é enfatizado sem a necessidade de utilização de fatores de penalidade ou aumento da função objetivo. A população é inicializada aleatoriamente, de modo que as variáveis contínuas estejam dentro dos limites preestabelecidos. O arredondamento é utilizado de modo a garantir a factibilidade das variáveis discretas, tanto durante a inicialização quanto durante o processo iterativo. Experimentos numéricos foram conduzidos utilizando o sistema IEEE de 30 barras, visando a minimização do custo de geração, emissão de poluentes e perdas de potência ativa. Os autores observaram que o desempenho do método é altamente dependente da escolha adequada dos parâmetros e das características da função objetivo.

Um algoritmo de evolução diferencial foi proposto no trabalho de VARADARAJAN & SWARUP (2008), para a resolução de problemas de FPOR. As variáveis discretas estão associadas aos *taps* dos transformadores em-fase e à injeção de potência reativa por elementos *shunt*, e o objetivo é a minimização das perdas de potência ativa. Na abordagem proposta, as restrições de desigualdade são tratadas por um esquema de penalização sem parâmetros. Soluções factíveis não são penalizadas, enquanto que soluções infactíveis são penalizadas de acordo com o valor da função objetivo na pior solução factível da população somada ao valor de suas respectivas violações. Este procedimento possui a vantagem de que não é necessário determinar um parâmetro de penalidade adequado, além de não exigir a avaliação da função objetivo para os indivíduos infactíveis. O algoritmo proposto incorpora o método de Newton-Raphson a fim de garantir o atendimento das equações de balanço de potência para cada indivíduo da população. Durante a etapa de seleção: qualquer solução factível é preferível a qualquer solução infactível; entre duas soluções factíveis, aquela com melhor valor na função objetivo é priorizada; entre duas soluções infactíveis, aquela com menor violação das restrições é preferível. As variáveis discretas são arredondadas para os valores discretos mais próximos ao longo do processo iterativo. Resultados numéricos com sistemas elétricos de até 118 barras verificaram a viabilidade da proposta.

Em LIU ET AL. (2009) foi proposto um método de pontos interiores com planos de corte aperfeiçoado para a resolução do problema de FPO com variáveis contínuas e discretas, semelhante ao desenvolvido em DING ET AL. (2004). Inicialmente, uma solução contínua para o problema de FPO é calculada. Em seguida, o problema é linearizado nesta solução. O problema de PL é resolvido através de um método de pontos interiores e, caso na solução obtida as variáveis discretas não assumam valores discretos, planos de corte de Gomory são gerados e o problema é resolvido novamente. Um aspecto crucial desta abordagem é a determinação da base ótima, que é utilizada para a geração dos planos de corte. Entretanto, falhas podem ocorrer na geração dos planos de corte se o método

de pontos interiores convergir para uma solução degenerada ou para uma solução que é combinação convexa de vértices ótimos, no caso de existirem múltiplas soluções. Tendo esta dificuldade em vista, os autores apresentaram um novo método para identificação da base ótima que supera as dificuldades causadas por múltiplas soluções. Os resultados obtidos para sistemas elétricos IEEE de 5, 14, 24, 30, 57, 118 e 300 barras mostraram que a abordagem é robusta e fornece soluções em tempo computacional aceitável.

Uma proposta de técnica de arredondamento foi apresentada no trabalho de MACFIE ET AL. (2010), visando a obtenção de boas soluções para o problema de FPO com variáveis contínuas e discretas de grande porte. As variáveis discretas consideradas foram os *shunts* de bancos de capacitores e reatores. Duas abordagens para tratamento das variáveis discretas foram apresentadas. A primeira delas é uma técnica probabilística que fixa um subconjunto das variáveis discretas no valor discreto mais próximo a cada iteração. A probabilidade de fixar uma variável discreta depende da proximidade entre o valor da variável ao resolver a relaxação contínua e o valor discreto permitido mais próximo. Quando o valor contínuo da variável discreta está próximo a um valor discreto, há uma probabilidade maior de fixá-la; por outro lado, se o valor contínuo estiver mais próximo ao ponto intermediário entre dois valores discretos consecutivos, a chance de fixação da variável é baixa. A segunda abordagem é uma técnica de limitante adaptativo, na qual a variável discreta é fixada se seu valor obtido ao resolver a relaxação contínua estiver a uma distância especificada do discreto mais próximo. Conforme o processo iterativo avança, este valor, expresso como uma porcentagem do passo discreto, é aumentado para garantir a discretização de todos os controles discretos. Em ambas técnicas, cada vez que um subconjunto de variáveis discretas é fixado o problema contínuo é resolvido novamente e a técnica reaplicada a fim de fixar outras variáveis. Resultados obtidos para sistemas elétricos de até 3587 barras mostraram que a abordagem probabilística permite a obtenção de soluções melhores que as obtidas por arredondamento comum ou pela abordagem de limitante adaptativo. A técnica também se mostrou capaz de calcular soluções de boa qualidade para sistemas de grande porte, para os quais um método do tipo *branch-and-bound* para PNL não foi capaz de obter solução.

Um algoritmo do tipo *branch-and-bound* para PNL foi proposto no trabalho de ESTEVAM ET AL. (2010), a fim de resolver o problema de planejamento e despacho de reativos em um sistema elétrico. O problema de PNLIM é relaxado, e o problema de cada nó da árvore *branch-and-bound* é resolvido através de um método primal-dual de pontos interiores para PNL. Tendo em vista as características não-lineares e multimodais do problema, um critério de sondagem especial foi proposto para o algoritmo *branch-and-bound*. Para tanto, os critérios de sondagem tradicionais foram redefinidos, adicionando-se uma margem de segurança ao valor da solução incumbente, de modo que nem todos os nós com valor da função objetivo maior que o valor incumbente são sondados. O objetivo desta mudança é evitar que nós que contenham soluções de mínimo local causem a sondagem de

nós que precisam ser explorados para atingir o ótimo global ou outra solução ótima local de melhor qualidade. Resultados numéricos para sistemas elétricos de até 300 barras, com diferentes níveis de carga, mostraram que o método é robusto e fornece soluções em tempo computacional razoável.

Três abordagens baseadas em sensibilidade foram propostas em CAPITANESCU & WEHENKEL (2010b) para o tratamento das variáveis discretas em problemas de FPO. Na primeira delas, a relaxação contínua do problema de FPO é resolvida e, em seguida, as sensibilidades da função objetivo e restrições de desigualdade em relação às variáveis discretas são calculadas utilizando as matrizes Jacobianas. Estas informações são incorporadas a um problema de programação inteira-mista, o qual é resolvido por um algoritmo *branch-and-cut* e cuja solução fornece valores para as variáveis discretas do problema de FPO. O problema de FPO é, então, resolvido com valores fixos para as variáveis discretas, otimizando-se apenas nas variáveis contínuas. Se a variação no valor da função objetivo em relação ao valor da iteração anterior for menor que uma tolerância, a solução discreta não pode ser melhorada significativamente e o algoritmo termina. Do contrário, o valor das sensibilidades é calculado novamente e o procedimento é repetido. A segunda abordagem é similar à primeira, porém o problema de programação linear inteira-mista é substituído por um procedimento baseado em função de mérito. Finalmente, a terceira abordagem proposta utiliza o valor dos multiplicadores de Lagrange associados aos limites de controle das variáveis discretas. Tais multiplicadores são calculados resolvendo um problema de FPO modificado, no qual assume-se que as variáveis de controle discretas podem variar em um pequeno intervalo em torno dos valores discretos da solução atual. Os resultados obtidos indicaram que a utilização da função de mérito para tratamento das variáveis discretas foi mais adequada do ponto de vista de qualidade da função objetivo, confiabilidade e tempo computacional, enquanto que a utilização dos multiplicadores de Lagrange, apesar do apelo teórico, não foi adequada para o ajuste das variáveis discretas.

Nos trabalhos de SOLER ET AL. (2012, 2013), uma função penalidade para discretização das variáveis de controle discretas em problemas de FPO foi apresentada. A ideia desta abordagem é resolver uma sequência de problemas de PNL, nos quais as variáveis discretas são representadas através de variáveis contínuas e a função objetivo é modificada pela adição da função penalidade, a qual penaliza as variáveis de controle discretas quando estas não assumem valores discretos. A função penalidade proposta tem forma senoidal e, diferentemente de outras penalidades utilizadas até então para resolver o problema de FPO, é diferenciável. Esta propriedade de diferenciabilidade é fundamental para a resolução dos subproblemas penalizados através de métodos clássicos de otimização, especialmente para a convergência daqueles que se baseiam no cálculo do gradiente. A cada ciclo externo o parâmetro de penalidade é atualizado e um novo problema modificado é resolvido, aproveitando a solução da iteração anterior como solução inicial. O processo termina quando todas as variáveis discretas assumirem valores discretos permiti-

dos, dentro de uma tolerância predeterminada. Os problemas penalizados são resolvidos através de um método primal-dual de pontos interiores. Experimentos numéricos foram realizados com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 118 e 300 barras, e os resultados obtidos comparados com os *solvers* comerciais DICOPT e BONMIN, desenvolvidos para a resolução de problemas de PNLIM, e com a técnica de arredondamento. Verificou-se que a abordagem proposta foi eficiente para tratamento das variáveis discretas, obtendo soluções de boa qualidade para sistemas em que outros métodos falharam ou precisaram de alto tempo de processamento para atingir a solução ótima.

Ainda na vertente das funções penalidade, MAZZINI & ASADA (2014) propuseram a utilização de uma função polinomial definida por partes e diferenciável para a discretização de variáveis em um problema de FPO. Assim como no trabalho de SOLER ET AL. (2013), após a introdução dos termos de penalidade, uma sequência de problemas de PNL contínuos é resolvida, para valores crescentes dos parâmetros de penalidade. Os autores ainda propuseram uma estratégia para inicialização dos parâmetros de penalidade com base em informações do gradiente da função objetivo. A ideia dessa estratégia de inicialização é garantir que no início do processo de otimização os parâmetros de penalidade sejam pequenos o suficiente para garantir uma superfície de resposta unimodal, evitando a parada prematura do método em valores discretos distantes do ótimo. Cada subproblema de penalidade foi resolvido através de dois *solvers* para PNL: IPOPT e CONOPT. Os resultados numéricos obtidos para os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras foram comparados aos obtidos por arredondamento, mostrando que a penalidade polinomial tem bom desempenho na resolução do problema de FPO com variáveis contínuas e discretas.

Em MAZZINI ET AL. (2018), o problema multiobjetivo de FPOR, visando a minimização das perdas de potência ativa e do número de ações de controle foi resolvido. Para tanto os autores aplicaram a abordagem de soma ponderada, a fim de transformar o problema multiobjetivo em um conjunto de problemas mono-objetivo. As variáveis binárias do modelo adotado são tratadas como contínuas, utilizando uma função sigmoideal parametrizada. O parâmetro desta função é atualizado a cada iteração, de modo a garantir a convergência para os valores binários. Uma heurística para melhorar a velocidade de convergência do algoritmo foi projetada, principalmente para as situações em que o aumento do parâmetro da função sigmoideal causa problemas de mal-condicionamento. Experimentos numéricos foram realizados com os sistemas IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras, mostrando que a combinação do solver CONOPT com a função sigmoideal é vantajosa quando comparada aos *solvers* DICOPT e KNITRO para PNLIM, especialmente para os sistemas elétricos de maior porte.

Capítulo 3

Métodos de Otimização Restrita

Apesar de rudimentos de otimização existirem desde a antiguidade, foi somente com a introdução do cálculo diferencial, por Newton e Leibniz, que o corpo teórico sobre otimização pôde começar a se formar. Outro passo fundamental foi dado por Lagrange, ao introduzir os multiplicadores de Lagrange, no estudo da estática, quando buscava determinar equações gerais de equilíbrio para problemas com restrições (BUSSOTTI, 2003). Do ponto de vista prático, contudo, a aplicação da otimização ainda era bastante limitada. Esta situação viria a mudar somente na década de 1940, com a invenção dos computadores, os quais permitiram que uma ampla gama de problemas matemáticos de origem prática pudessem ser resolvidos numericamente. Neste cenário, um marco histórico foi o desenvolvimento do método simplex para a resolução de problemas de PL, por Dantzig, em 1947. Os avanços tecnológicos bem como de variantes do método simplex levaram à criação das implementações modernas desse método, que são capazes de resolver problemas de grande porte de maneira extremamente eficiente.

Conforme apontado por WRIGHT (2005), por vários anos a teoria de otimização linear se desenvolveu de maneira independente da teoria de otimização não-linear, ainda que a primeira possa ser vista como um tópico da última. Os anos 60 representam um período fundamental para a otimização não-linear, devido ao desenvolvimento de métodos para otimização irrestrita. Consequentemente, neste período também começou a florescer a ideia de converter problemas de PNL restritos em problemas irrestritos ou sequências de subproblemas irrestritos. O livro de Fiacco & McCormick (1990), cuja primeira edição foi publicada em 1968 e ganhou o prêmio de melhor trabalho da *Operations Research Society of America*, foi um dos pioneiros na exposição de detalhes teóricos e computacionais dos métodos de barreira (pontos interiores) e penalidade (pontos exteriores) para PNL. Entretanto, dificuldades numéricas relacionadas a problemas de mal-condicionamento fizeram estes métodos serem abandonados, em especial os métodos de pontos interiores. Métodos de Lagrangiana aumentada incorporaram funções penalidade e, juntamente aos métodos de PQS, se tornaram populares, sendo importantes até os dias atuais.

Alguns anos mais tarde, KARMARKAR (1984) propôs um método de pontos interiores com transformação projetiva para resolução de problemas de PL, que possuía complexidade computacional polinomial, causando grande entusiasmo entre os pesquisadores da área. Dentre os motivos para este entusiasmo, pode-se destacar o fato de que, apesar de seu excelente desempenho prático, o método simplex possui complexidade computacional exponencial, além de se alegar que o novo método era significativamente mais rápido. Assim, os pesquisadores da área se depararam com um algoritmo de tempo polinomial que tinha chances de competir com o método simplex, porém sem resultados numéricos que confirmassem seu desempenho. A confirmação somente veio com os experimentos computacionais do método dual-afim, uma variante do método de Karmarkar aplicado ao problema dual, apresentados por ADLER ET AL. (1986), os quais mostraram que o método era competitivo com o simplex, superando-o em diversos problemas. No mesmo período, GILL ET AL. (1986) rapidamente reconheceram que o método de pontos interiores projetivo de Karmarkar era equivalente ao método de barreira logarítmica de FIACCO & MCCORMICK (1990) aplicado à PL, para uma escolha particular do parâmetro de barreira (SHANNO, 2012; BIXBY, 2012). Com este resultado, os trabalhos anteriores sobre o método de barreira logarítmica foram retomados, e métodos de pontos interiores para PNL tornaram-se um campo ativo de pesquisa (BENSON, 2001). A partir de então, métodos para PL e PNL passaram a ser vistos de uma maneira unificada.

Mais recentemente, visando superar os problemas de mal-condicionamento que podem ocorrer ao utilizar a função barreira logarítmica, POLYAK (1992) apresentou a teoria e método da função barreira modificada, a qual pode ser vista como uma Lagrangiana aumentada interior. De acordo com o autor, esta função combina as melhores propriedades da função Lagrangiana clássica e da função barreira logarítmica clássica, ao mesmo tempo em que é livre da maioria de suas desvantagens. O método da função barreira modificada foi, posteriormente, incorporado a uma metodologia mais geral, denominada rescalamento não-linear, através de uma sequência de trabalhos (POLYAK & TEBoulLE, 1997; POLYAK, 2002). GRIVA (2004) propôs uma combinação dos métodos primais-duais de pontos interiores e de rescalamento não-linear, no qual o método de rescalamento não-linear é utilizado no final do processo de otimização, quando o método de pontos interiores falha em atingir a precisão desejada.

O objetivo deste capítulo é apresentar uma revisão de métodos de otimização que são utilizados na resolução de problemas de PNL restritos, e embasam as metodologias propostas neste trabalho. A conversão de problemas restritos em irrestritos por meio da função Lagrangiana, bem como os métodos de penalidade, barreira e rescalamento não-linear, são apresentados de maneira sucinta devido à sua importância na resolução de problemas de otimização não-linear, em particular problemas de FPO.

3.1 Método Dual-Lagrangiano

Para apresentar as ideias básicas do método dual-Lagrangiano, consideremos o seguinte problema de PNL, chamado problema primal:

$$\begin{aligned} \text{(PP)} \quad & \min f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) \leq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (3.1)$$

em que $x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, com Ω um subconjunto aberto, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ($m < n$) e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ são funções de classe C^2 que constituem, respectivamente, a função objetivo, restrições de igualdade e restrições de desigualdade do problema.

A este problema, podemos associar a seguinte função Lagrangiana:

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \pi) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j h_j(x) \quad (3.2)$$

em que $\lambda \in \mathbb{R}^m$ e $\pi \in \mathbb{R}^p$ são, respectivamente, os multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade e desigualdade.

Por meio da função Lagrangiana, pode-se definir o problema dual-Lagrangiano:

$$\begin{aligned} \text{(PD)} \quad & \max d(\lambda, \pi) \\ \text{s.a.} \quad & \pi_j \geq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (3.3)$$

em que $d : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ é denominada função dual-Lagrangiana e é dada por:

$$d(\lambda, \pi) = \inf \{ \mathcal{L}(x, \lambda, \pi) \mid x \in \Omega \} \quad (3.4)$$

Desta forma, a função Lagrangiana é obtida acomodando as restrições na função objetivo pela introdução de variáveis duais ou multiplicadores de Lagrange, em um processo denominado dualização. Como o problema dual consiste na maximização do ínfimo da função $\mathcal{L}(x, \lambda, \pi)$, ele também é conhecido como problema max-min (BAZARAA ET AL., 2006).

Sob determinadas hipóteses, os problemas primal e dual possuem importantes relações matemáticas, expressas através de diversos teoremas. Vários destes teoremas permitem desenvolver metodologias de resolução para problemas de otimização. Dentre eles, os Teoremas de Dualidade Fraca e Forte, e o Teorema do Ponto de Sela estão entre os mais conhecidos.

O Teorema de Dualidade Fraca indica que se (λ, π) é uma solução factível para o problema dual (3.3), e x é uma solução factível para o problema primal (3.1), então $d(\lambda, \pi) \leq f(x)$. Isto é, uma solução dual factível permite obter um limitante inferior para o valor da função objetivo em qualquer ponto primal factível. Do Teorema da Dualidade Fraca pode-se concluir que o valor ótimo do problema dual é menor ou igual ao valor ótimo primal. Se a desigualdade for estrita na solução ótima, diz-se que existe um *gap* de dualidade. O Teorema da Dualidade Forte, por sua vez, mostra que sob determinadas hipóteses de convexidade e qualificação de restrições, então o valor ótimo das funções

objetivo dos problemas primal e dual são iguais.

A seguir enuncia-se o Teorema do Ponto de Sela, o qual é de grande importância para a idealização do método dual-Lagrangiano, conforme BAZARAA ET AL. (2006).

Teorema. (*Teorema do Ponto de Sela*) Uma solução (x^*, λ^*, π^*) com $x^* \in \Omega$ e $\pi^* \geq 0$ é um ponto de sela da função Lagrangiana $\mathcal{L}(x, \lambda, \pi) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j h_j(x)$, isto é,

$$\mathcal{L}(x^*, \lambda, \pi) \leq \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \pi^*) \leq \mathcal{L}(x, \lambda^*, \pi^*), \text{ para todo } x \in \Omega \text{ e todo } (\lambda, \pi), \text{ com } \pi \geq 0 \quad (3.5)$$

se, e somente se,

1. $\mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \pi^*) = \min\{\mathcal{L}(x, \lambda^*, \pi^*) \mid x \in \Omega\}$,
2. $g(x^*) = 0$, $h(x^*) \leq 0$, e
3. $\pi_j^* h_j(x^*) = 0$, $j = 1, \dots, p$.

Além disso, (x^*, λ^*, π^*) é um ponto de sela se, e somente se, x^* e (λ^*, π^*) são, respectivamente, soluções ótimas para os problemas primal e dual, com *gap* de dualidade nulo, isto é, $f(x^*) = d(\lambda^*, \pi^*)$.

O critério de ponto de sela também possui relações com as condições de KKT. De fato, pode-se mostrar que, sob certas hipóteses de convexidade, se x^* é um ponto satisfazendo as condições de KKT, então os multiplicadores de Lagrange correspondentes também servem como multiplicadores de Lagrange no critério do ponto de sela. Inversamente, os multiplicadores de Lagrange que satisfazem as condições do ponto de sela são os multiplicadores de Lagrange das condições de KKT (BAZARAA ET AL., 2006).

O Teorema do Ponto de Sela indica que se (x^*, λ^*, π^*) satisfaz as condições de sela, então x^* minimiza $\mathcal{L}(x, \lambda^*, \pi^*)$ em x , enquanto (λ^*, π^*) maximiza $\mathcal{L}(x^*, \lambda, \pi)$ em (λ, π) . Dessa forma, este resultado também sugere um procedimento numérico alternado para a resolução de problemas de PNL, que é a base do método dual-Lagrangiano: dadas estimativas para os multiplicadores de Lagrange, minimiza-se a função Lagrangiana em relação às variáveis primais; em seguida, utiliza-se a solução primal obtida para atualizar os multiplicadores de Lagrange. Este processo é repetido até que um critério de parada seja verificado, e é apresentado no Algoritmo 1, conforme descrito em LAGE (2013).

Algoritmo 1 Método Dual-Lagrangiano

- 1: Dado o problema primal (3.1), construa a função Lagrangiana (3.2).
- 2: Faça $k = 0$.

 Inicialize as variáveis primais $x^0 \in \Omega$, e duais $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$, $\pi \in \mathbb{R}_+^p$.

- 3: Resolva o seguinte problema Lagrangiano, utilizando um método de otimização irrestrita, com λ^k e π^k fixos, determinando o ponto x^{k+1} :

$$\min_{x \in \Omega} \mathcal{L}(x, \lambda^k, \pi^k) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^k g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j^k h_j(x)$$

- 4: Se x^{k+1} satisfaz as condições de KKT, retorne x^{k+1} como solução.
Caso contrário vá para o passo 5.
- 5: Atualize os multiplicadores de Lagrange aplicando uma heurística, determinando λ^{k+1} e π^{k+1} .
Faça $k = k + 1$, e volte para o passo 3.
-

Um aspecto importante no algoritmo dual-Lagrangiano e que não é apresentado explicitamente no Algoritmo 1 é a atualização dos multiplicadores de Lagrange no passo 5. Para x^k fixo, a função Lagrangiana torna-se linear nas variáveis duais. Assim, qualquer tentativa de maximizar essa função diretamente teria altas chances de fracasso, uma vez que se qualquer restrição do problema for violada em x^k , o problema linear obtido é ilimitado. Em vez disso, pode-se utilizar o algoritmo do gradiente para gerar a sequência de correções para os multiplicadores, de acordo com a expressão:

$$\begin{pmatrix} \lambda^{k+1} \\ \pi^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda^k \\ \pi^k \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} g(x^{k+1}) \\ s \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

em que α é determinado através de uma busca unidimensional e s é expresso por:

$$s_j = \begin{cases} h_j(x^{k+1}), & \text{se } \pi_j^k > 0 \\ \max\{0, h_j(x^{k+1})\}, & \text{se } \pi_j^k = 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

para $j = 1, \dots, p$.

3.2 Método de Newton-Lagrangiano

O método de Newton-Lagrangiano consiste na aplicação do método de Newton para sistemas de equações a fim de resolver o sistema não-linear obtido ao se impor as condições necessárias de otimalidade de primeira ordem à função Lagrangiana. É especialmente eficiente quando o conjunto ativo na solução ótima é conhecido. Por este motivo, apresenta desempenho melhor para problemas apenas com restrições de igualdade, uma vez que o conjunto de desigualdades ativas frequentemente é desconhecido. Assim, no que segue, o método de Newton-Lagrangiano é exposto considerando o seguinte problema de PNL com apenas restrições de igualdade:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \end{aligned} \quad (3.8)$$

A função Lagrangiana associada a este problema é expressa por:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) \quad (3.9)$$

Aplicando-se as condições necessárias de otimalidade à função Lagrangiana, tem-se que:

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = 0 \\ \nabla_\lambda \mathcal{L}(x, \lambda) = 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

em que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = \nabla f(x) + Jg(x)^T \lambda \quad (3.11a)$$

$$\nabla_\lambda \mathcal{L}(x, \lambda) = g(x) \quad (3.11b)$$

$\nabla f(x)$ denota o vetor gradiente de f calculado em x e $Jg(x)$ é a matriz Jacobiana de g calculada em x .

O método de Newton resolve o sistema não-linear (3.10) iterativamente, utilizando uma aproximação de Taylor de primeira ordem em torno de um ponto (x^k, λ^k) :

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) \Delta x^k + \nabla_{x\lambda}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) \Delta \lambda^k = 0 \\ \nabla_\lambda \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) + \nabla_{\lambda x}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) \Delta x^k + \nabla_{\lambda\lambda}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) \Delta \lambda^k = 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

Este sistema pode ser reescrito na seguinte forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) & Jg(x^k)^T \\ Jg(x^k) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x^k \\ \Delta \lambda^k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) \\ \nabla_\lambda \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

e é resolvido para obter as direções de busca $(\Delta x^k, \Delta \lambda^k)$, que permitem obter um novo ponto como estimativa de solução:

$$x^{k+1} = x^k + \Delta x^k \quad (3.14a)$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \Delta \lambda^k \quad (3.14b)$$

Nota-se que a matriz do sistema linear (3.13) é a matriz Hessiana da função Lagrangiana, e possui uma estrutura dividida em quatro submatrizes: a matriz Hessiana da função Lagrangiana em relação às variáveis primais, $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}$, duas submatrizes envolvendo a matriz Jacobiana das restrições, Jg , e uma submatriz de elementos nulos.

Uma solução para o problema é obtida quando as equações do sistema não-linear são satisfeitas dentro da tolerância determinada, o que equivale a dizer que os valores de x e λ satisfazem as condições de KKT para o problema original com a precisão desejada. Sendo assim, o Algoritmo 2 apresenta um esboço do método de Newton-Lagrangiano.

Algoritmo 2 Método de Newton-Lagrangiano

1: Dado o problema (3.8), construa a função Lagrangiana (3.9).

2: Faça $k = 0$.

 Inicialize as variáveis primais $x^0 \in \Omega$, e duais $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$.

3: Se x^k e λ^k satisfazem as condições de KKT, retorne x^k como solução.

 Caso contrário, vá para o passo 4.

- 4: Resolva o sistema linear (3.13) e atualize as variáveis conforme (3.14).
Faça $k = k + 1$ e volte para o passo 3.
-

3.3 Método de Penalidade

Consideremos o problema de PNL representado em (3.1), o qual é apresentado novamente a seguir para facilidade de exposição:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) \leq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (3.15)$$

Conforme apontado em BAZARAA ET AL. (2006), métodos de penalidade se baseiam na ideia de transformar um problema restrito em um único problema irrestrito ou em uma sequência de problemas irrestritos. Espera-se que, no limite, as soluções para os problemas irrestritos converjam para a solução ótima do problema restrito. Os problemas irrestritos envolvem uma função objetivo auxiliar, composta pela soma da função objetivo original com termos de penalidade que medem a violação das restrições, e impõem um custo aos pontos infactíveis. Os termos de penalidade são ponderados através de um ou mais parâmetros de penalidade, que determinam a importância das restrições na função auxiliar^[1]. Através da mudança apropriada destes parâmetros, uma sequência de problemas é gerada, nos quais o efeito das restrições se torna cada vez mais pronunciado (GRIVA ET AL., 2009).

Como as funções penalidade normalmente estão definidas no exterior da região factível, o processo iterativo do método de penalidade tipicamente ocorre através de uma sequência de pontos infactíveis. Entretanto, o aumento gradual do parâmetro de penalidade ao longo das iterações torna a penalização mais severa, e força os iterandos a se aproximarem do conjunto viável, de modo que a solução final seja factível.

Uma função penalidade apropriada deve produzir uma penalização positiva para pontos infactíveis e não penalizar pontos factíveis. Assim, se $\mathcal{X}$ for o conjunto factível para um problema de otimização, uma função penalidade para este problema é uma função contínua $\mathcal{P} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$ com a propriedade de que:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(x) &= 0, & \text{se } x \in \mathcal{X} \\ \mathcal{P}(x) &> 0, & \text{caso contrário.} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Em particular, para o caso do PNL com restrições de igualdade e desigualdade em (3.15), pode-se considerar uma função penalidade da forma:

$$\mathcal{P}(x) = \sum_{i=1}^m \phi(g_i(x)) + \sum_{j=1}^p \psi(h_j(x)) \quad (3.17)$$

^[1]Neste texto, por simplicidade de exposição, consideramos um único parâmetro de penalidade.

em que $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ e $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ são funções contínuas tais que:

$$\begin{aligned} \phi(y) &= 0 \quad \text{se } y = 0 & \text{e} & \quad \phi(y) > 0 \quad \text{se } y \neq 0 \\ \psi(y) &= 0 \quad \text{se } y \leq 0 & \text{e} & \quad \psi(y) > 0 \quad \text{se } y > 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Assim, a função ϕ penaliza as restrições de igualdade violadas, enquanto a função ψ penaliza as restrições de desigualdade violadas. Exemplos de funções penalidade para restrições de igualdade e desigualdade são, respectivamente:

$$\phi(y) = |y|^r \quad \text{e} \quad \psi(y) = (\max\{0, y\})^r \quad (3.19)$$

em que r é um inteiro positivo. Uma das penalidades mais discutidas na literatura é a quadrática, que pode ser obtida quando $r = 2$.

Uma vez determinada a função penalidade, pode-se construir a função auxiliar:

$$\mathcal{A}(x, \omega) = f(x) + \omega \mathcal{P}(x) \quad (3.20)$$

na qual $\omega > 0$ é o parâmetro de penalidade.

O método de penalidade tradicional consiste, portanto, em resolver uma sequência de problemas de minimização irrestritos da forma:

$$\min_{x \in \Omega} \mathcal{A}(x, \omega^k) = f(x) + \omega^k \mathcal{P}(x) \quad (3.21)$$

para uma sequência crescente $\{\omega^k\}$ de parâmetros de penalidade positivos, tendendo ao infinito.

Suponha que x^{k+1} seja a solução de um problema de penalidade com parâmetro de penalidade ω^k . Espera-se que, quando $k \rightarrow \infty$, então $\omega^k \mathcal{P}(x^{k+1}) \rightarrow 0$, de modo que o produto $\omega^k \mathcal{P}(x^{k+1})$ pode ser utilizado como critério de parada para um procedimento numérico. Caso $\omega^k \mathcal{P}(x^{k+1})$ não seja menor que uma tolerância $\varepsilon > 0$ predeterminada, o parâmetro ω_k é atualizado por um fator $\kappa > 1$, e o problema de penalidade (3.21) é resolvido novamente. Sob hipóteses apropriadas, pode-se provar que quando $k \rightarrow \infty$, a sequência de mínimos locais irrestritos da função auxiliar se aproxima de um mínimo local restrito x^* do problema original (FIACCO & MCCORMICK, 1990). Assim, conforme apresentado em BAZARAA ET AL. (2006), os passos do método de penalidade são delineados no Algoritmo 3.

Algoritmo 3 Método de Penalidade

1: Dado o problema (3.15), construir a função penalidade (3.17).

2: Faça $k = 0$.

 Inicialize as variáveis primais $x^0 \in \Omega$ e o parâmetro de penalidade $\omega^0 > 0$.

 Escolha um fator de atualização de penalidade $\kappa > 1$ e uma tolerância $\varepsilon > 0$.

3: Resolva o problema de penalidade (3.21) com ω^k fixo, determinando o ponto x^{k+1} .

4: Se $\omega^k \mathcal{P}(x^{k+1}) \leq \varepsilon$, retorne x^{k+1} como solução.

 Caso contrário, atualize o parâmetro de penalidade por $\omega^{k+1} = \kappa \omega^k$, faça $k = k + 1$ e volte para o passo 3.

Segundo GRIVA ET AL. (2009) é possível garantir que, sob certas hipóteses, o método de penalidade converge e que a sequência de minimizadores para os problemas de penalidade define uma trajetória contínua. Nesta situação, é possível obter estimativas dos multiplicadores de Lagrange na solução ótima. Por exemplo, considerando um problema com apenas restrições de igualdade e utilizando a penalidade quadrática, a função auxiliar é dada por:

$$\mathcal{A}(x, \omega) = f(x) + \omega \sum_{i=1}^m [g_i(x)]^2 \quad (3.22)$$

Denotando por $x(\omega)$ o mínimo da função auxiliar em (3.22), então a condição necessária de otimalidade de primeira ordem deve ser satisfeita, isto é:

$$\nabla_x \mathcal{A}(x(\omega), \omega) = \nabla f(x(\omega)) + 2\omega \sum_{i=1}^m \nabla g_i(x(\omega)) g_i(x(\omega)) = 0 \quad (3.23)$$

Definindo $\lambda_i(\omega) = 2\omega g_i(x(\omega))$, então a expressão anterior pode ser escrita como:

$$\nabla f(x(\omega)) + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\omega) \nabla g_i(x(\omega)) = 0 \quad (3.24)$$

Se $x(\omega)$ converge para uma solução ótima x^* que é um ponto regular das restrições, então $\lambda(\omega)$ converge para o vetor de multiplicadores de Lagrange ótimo λ^* associado a x^* . Assim, nota-se que apesar do método de penalidade funcionar minimizando apenas no espaço primal, se determinadas hipóteses forem atendidas, as variáveis duais associadas à solução ótima podem ser recuperadas.

Uma das vantagens do método de penalidade é sua capacidade de resolver problemas não-convexos na presença do *gap* de dualidade, o qual pode causar dificuldades para o método Lagrangiano. Além disso, métodos de penalidade são mais convenientes para problemas com restrições de igualdade, pois as funções penalidade para problemas com restrições de desigualdade geralmente não possuem derivadas de segunda ordem contínuas. Por este motivo, os métodos de barreira da seção a seguir são preferíveis para tratamento das restrições de desigualdade.

3.4 Método de Barreira

Consideremos o seguinte problema de PNL com apenas restrições de desigualdade:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & h_j(x) \geq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (3.25)$$

no qual se assume que as funções envolvidas são de classe C^2 .

De modo similar aos métodos de penalidade, métodos de barreira convertem um problema restrito em irrestrito através de termos de barreira que são incorporados à função objetivo, originando uma função auxiliar. Entretanto, os métodos de barreira produzem uma sequência de iterandos que são estritamente factíveis, isto é, estão no

interior da região factível. Por esta razão, também são conhecidos como métodos de pontos interiores ou de penalidade interior.

Seja $\mathcal{X} = \{x \in \Omega \mid h_j(x) \geq 0, j = 1, \dots, p\}$ o conjunto factível do problema (3.25). Métodos de barreira partem do pressuposto de que o interior de $\mathcal{X}$, é não-vazio, ou seja,

$$\overset{\circ}{\mathcal{X}} = \{x \in \Omega \mid h_j(x) > 0, j = 1, \dots, p\} \neq \emptyset \quad (3.26)$$

Assume-se que é possível se aproximar arbitrariamente de qualquer ponto da fronteira de $\mathcal{X}$ por pontos de $\overset{\circ}{\mathcal{X}}$, isto é, os pontos de fronteira são pontos de acumulação de $\overset{\circ}{\mathcal{X}}$.

Os termos de barreira utilizados para incorporar as restrições de desigualdade à função objetivo preservam a factibilidade dos iterandos pela criação de uma barreira que os mantém distantes da fronteira da região factível. A intensidade com que os pontos são mantidos distantes da fronteira é regida por um parâmetro de barreira, $\mu > 0$. Uma das vantagens do método de barreira é que, por gerar uma sequência contida em $\overset{\circ}{\mathcal{X}}$, a solução obtida será factível, mesmo que o método pare prematuramente (BAPTISTA, 2001).

Na maioria dos problemas práticos a solução ótima se encontra na fronteira da região factível, isto é, existe pelo menos uma restrição de desigualdade ativa. Assim, é importante que o parâmetro de barreira seja gradualmente reduzido, de modo a atenuar o efeito da função barreira no processo de otimização e permitir que os iterandos se aproximem da fronteira, se necessário.

Uma função barreira $\mathcal{B} : \overset{\circ}{\mathcal{X}} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua, tal que $\mathcal{B}(x) \geq 0$ para todo $x \in \overset{\circ}{\mathcal{X}}$, e se $\{x^k\} \subset \overset{\circ}{\mathcal{X}}$ é uma sequência tal que $h_j(x^k) > 0$ para todo k , e $\lim_{k \rightarrow \infty} h_j(x^k) = 0$ para algum $j \in \{1, \dots, p\}$, então $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{B}(x^k) = \infty$. Isto é, uma função barreira é uma função não-negativa e contínua em $\overset{\circ}{\mathcal{X}}$, e que tende ao infinito conforme a solução se aproxima da fronteira, a partir do interior.

Em particular, para problemas de PNL com restrições de desigualdade da forma (3.25), pode-se considerar uma função barreira da forma:

$$\mathcal{B}(x) = \sum_{j=1}^p \phi(h_j(x)) \quad (3.27)$$

em que $\phi : \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua em $\{y \in \mathbb{R} \mid y > 0\}$, tal que:

$$\phi(y) \geq 0 \quad \text{se } y > 0 \quad \text{e} \quad \lim_{y \rightarrow 0^+} \phi(y) = \infty \quad (3.28)$$

Exemplos de funções ϕ utilizadas em métodos de barreira são:

$$\phi(y) = \frac{1}{y} \quad (3.29)$$

$$\phi(y) = -\ln(\min\{1, y\}) \quad (3.30)$$

Nota-se que a função apresentada em (3.30) não é diferenciável, devido à presença do termo $\min\{1, y\}$. Entretanto, conforme destacado por BAZARAA ET AL. (2006), as propriedades (3.28) apenas precisam ser satisfeitas na vizinhança de $y = 0$, de modo que

podemos tomar:

$$\phi(y) = -\ln(y) \quad (3.31)$$

Apesar da função em (3.31) não ser não-negativa e resultar em funções barreira que também não satisfazem tal propriedade, ela pode ser utilizada como barreira sem nenhum prejuízo, se o conjunto $\mathcal{X}$ for limitado (MARTÍNEZ & SANTOS, 1995). A função barreira que utiliza (3.29) foi introduzida por CARROLL & FIACCO (1961) e é denominada barreira clássica ou inversa, enquanto que a que utiliza (3.31) é chamada barreira logarítmica e foi proposta por FRISCH (1955).

Escolhida a função barreira, constrói-se a função auxiliar:

$$\mathcal{A}(x, \mu) = f(x) + \mu\mathcal{B}(x) \quad (3.32)$$

na qual $\mu > 0$ é o parâmetro de barreira.

Dessa forma, no método de barreira é resolvida uma sequência de problemas de minimização irrestritos da forma:

$$\min_{x \in \overset{\circ}{\mathcal{X}}} \mathcal{A}(x, \mu^k) = f(x) + \mu^k\mathcal{B}(x) \quad (3.33)$$

para uma sequência decrescente $\{\mu^k\}$ de parâmetros de barreira positivos tendendo a zero.

À medida em que μ decresce, $\mu\mathcal{B}(x)$ se aproxima da função barreira ideal, isto é, uma função que possui valor zero em $\overset{\circ}{\mathcal{X}}$ e infinito em sua fronteira.

Analogamente ao método de penalidade, se x^{k+1} é a solução de um problema de barreira com parâmetro de penalidade μ^k , quando $k \rightarrow \infty$, então $\mu^k\mathcal{B}(x^{k+1}) \rightarrow 0$, isto é, o produto $\mu^k\mathcal{B}(x^{k+1})$ pode ser utilizado como um critério de parada para implementações computacionais. Se $\mu^k\mathcal{B}(x^{k+1})$ não for menor que a tolerância especificada $\varepsilon > 0$, o parâmetro de barreira é atualizado por um fator $\tau \in (0, 1)$, e o problema de barreira é resolvido novamente.

Cabe salientar que, pelo processo iterativo se dar pelo interior da região factível, o método de otimização irrestrita utilizado para resolver os problemas de barreira deve monitorar o procedimento de atualização das variáveis, de modo a garantir que a condição $h(x) > 0$ não seja violada, o que pode ser feito, por exemplo, através de uma busca unidimensional. O Algoritmo 4 sumariza os passos básicos do método de barreira.

Algoritmo 4 Método de Barreira

1: Dado o problema (3.25), construir a função barreira (3.27).

2: Faça $k = 0$.

 Inicialize as variáveis primais $x^0 \in \overset{\circ}{\mathcal{X}}$ e o parâmetro de barreira $\mu^0 > 0$.

 Escolha um fator de atualização de barreira $\tau \in (0, 1)$ e uma tolerância $\varepsilon > 0$.

3: Resolva o problema de barreira (3.33) com μ^k fixo, determinando o ponto x^{k+1} .

4: Se $\mu^k\mathcal{B}(x^{k+1}) \leq \varepsilon$, retorne x^{k+1} como solução.

 Caso contrário, atualize o parâmetro de barreira por $\mu^{k+1} = \tau\mu^k$.

Faça $k = k + 1$ e volte para o passo 3.

3.5 Método de Rescalamento Não-Linear

Métodos primais-duais de pontos interiores para PL constituem uma classe de algoritmos que apresenta bom desempenho computacional para diversos problemas. O progresso dos métodos de pontos interiores para PL incentivou pesquisadores a estenderem esta abordagem para problemas de PNL. Entretanto, em PNL, mesmo os mais avançados métodos primais-duais de pontos interiores ocasionalmente apresentam dificuldades numéricas (POLYAK & GRIVA, 2004).

A teoria e métodos da função barreira modificada foram inicialmente propostos no trabalho de POLYAK (1992), como uma alternativa aos métodos de barreira clássicos para o tratamento de restrições de desigualdade. Da mesma forma que os métodos de barreira apresentados anteriormente, o método da função barreira modificada se baseia na resolução de uma sequência de problemas de minimização irrestritos, de modo a gerar uma sequência de iterandos que converge para a solução ótima do problema restrito original. Esta abordagem pode ser vista como um método de Lagrangiana aumentada interior, que combina as melhores propriedades da função Lagrangiana clássica e função barreira logarítmica.

Alguns anos mais tarde, POLYAK & TEBoulLE (1997) apresentaram uma generalização para esta abordagem, denominada Método de Rescalamento Não-Linear (MRN). No MRN, uma transformação é aplicada na função objetivo e/ou restrições do problema de otimização, de modo a transformá-lo em um problema equivalente, isto é, com o mesmo conjunto de soluções ótimas (POLYAK & TEBoulLE, 1997). Em contraste com a função Lagrangiana aumentada de Powell-Hestenes-Rockafellar (POWELL, 1969; HESTENES, 1969; ROCKAFELLAR, 1973), as transformações do MRN utilizam penalidades não-quadráticas.

As transformações utilizadas no MRN são funções suaves e controladas por um parâmetro de rescalamento, sendo chamadas de funções de rescalamento. Os passos do MRN se assemelham aos de métodos de Lagrangiana aumentada: alternam-se a minimização da função Lagrangiana do problema transformado nas variáveis primais com a atualização dos multiplicadores de Lagrange e do parâmetro de rescalamento. A convergência do método, entretanto, pode ser atingida com o parâmetro de rescalamento fixo, atualizando-se apenas os multiplicadores de Lagrange, o que contribui para a redução de problemas de mal-condicionamento da matriz Hessiana, quando comparado aos métodos de pontos interiores (GRIVA & POLYAK, 2006).

Para apresentar as ideias básicas do MRN, consideremos o seguinte problema de

PNL com apenas restrições de desigualdade:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & h_j(x) \geq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (3.34)$$

POLYAK & GRIVA (2004) definem uma função de rescalamento como sendo uma função $\psi : (a_0, a_1) \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^2 , com $-\infty \leq a_0 < 0 < a_1 \leq \infty$, que cumpre as seguintes propriedades:

- (P1) $\psi(0) = 0$ e $\psi'(0) = 1$;
- (P2) $\psi'(t) > 0$, para todo $t \in (a_0, a_1)$, isto é, ψ é uma função estritamente crescente;
- (P3) $\psi''(t) < 0$, para todo $t \in (a_0, a_1)$, isto é, ψ é uma função estritamente côncava;
- (P4) existe $a > 0$ tal que $\psi(t) \leq -at^2$, para $t \leq 0$;
- (P5) existem $b > 0$ e $c > 0$ tais que $\psi'(t) \leq bt^{-1}$ e $-\psi''(t) \leq ct^{-2}$, para $t > 0$.

O conjunto das funções de rescalamento é denotado por Ψ . Alguns exemplos de funções $\psi \in \Psi$ são:

- a transformação exponencial (KORT & BERTSEKAS, 1972): $\psi(t) = 1 - e^{-t}$;
- a função barreira inversa modificada (POLYAK & TEBoulLE, 1997): $\psi(t) = \frac{t}{t+1}$;
- a função barreira logarítmica modificada (POLYAK & TEBoulLE, 1997): $\psi(t) = \ln(t+1)$.

Neste trabalho, estamos interessados particularmente na função barreira logarítmica modificada, por ter se mostrado eficiente na resolução de problemas de FPO (LAGE, 2013; SOUSA ET AL., 2012), a qual será explorada mais adiante.

As transformações supracitadas podem ser modificadas através de uma extrapolação quadrática, de modo a obter funções $\bar{\psi}$ definidas para todo $t \in \mathbb{R}$ que ainda atendem as propriedades de uma função de rescalamento. Para tanto, seja $\beta \in (-1, 0)$ o ponto de extrapolação. Então, a função $\bar{\psi}$ é definida por:

$$\bar{\psi}(t) = \begin{cases} \psi(t), & \text{se } t \geq \beta \\ p(t) = \frac{1}{2}p_2t^2 + p_1t + p_0, & \text{se } t < \beta \end{cases} \quad (3.35)$$

em que os coeficientes da função quadrática p são determinados de modo que $\psi(\beta) = p(\beta)$, $\psi'(\beta) = p'(\beta)$ e $\psi''(\beta) = p''(\beta)$. Disto, conclui-se que $p_2 = \psi''(\beta)$, $p_1 = \psi'(\beta) - \beta\psi''(\beta)$ e $p_0 = \psi(\beta) - \beta\psi'(\beta) + \frac{1}{2}\beta^2\psi''(\beta)$. Esta modificação foi utilizada com sucesso para resolver diversos problemas de PNL (BENDSØE ET AL., 1994; BREITFELD & SHANNO, 1996). A vantagem de se utilizar esta extrapolação está no fato de que a função de rescalamento está definida para qualquer valor de t , e não é necessário se preocupar com a possibilidade da direção de busca conduzir a pontos em que ela não é definida.

Um problema de otimização equivalente pode ser obtido utilizando uma função de rescalamento ψ . Para tanto, observa-se que, como ψ é estritamente crescente e $\psi(0) = 0$, então $\psi(t) \geq 0$ se, e somente se, $t \geq 0$. Adotando um parâmetro de rescalamento $\mu > 0$, tem-se que $h_j(x) \geq 0$ se, e somente se, $\mu\psi\left(\frac{1}{\mu}h_j(x)\right) \geq 0$, para todo $j = 1, \dots, p$. Assim, o seguinte problema transformado é equivalente ao problema original:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & -\mu\psi\left(\frac{1}{\mu}h_j(x)\right) \leq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (3.36)$$

Aos problemas original (3.34) e transformado (3.36) podemos associar, respectivamente, as seguintes funções Lagrangianas:

$$\mathcal{L}(x, \pi) = f(x) - \sum_{j=1}^p \pi_j h_j(x) \quad (3.37)$$

$$\mathcal{L}_\mu(x, \sigma) = f(x) - \mu \sum_{j=1}^p \sigma_j \psi\left(\frac{1}{\mu}h_j(x)\right) \quad (3.38)$$

em que $\pi, \sigma \in \mathbb{R}_+^p$ são os vetores de multiplicadores de Lagrange relacionados às restrições de desigualdade dos problemas original e transformado, respectivamente.

A resolução do problema de PNL através do MRN é semelhante aos métodos de Lagrangiana aumentada tradicionais, consistindo de um ciclo interno, no qual a função Lagrangiana do problema transformado (3.38) é minimizada em relação às variáveis primais, com multiplicadores de Lagrange, σ , e parâmetro de rescalamento, μ , fixos; e de um ciclo externo, no qual σ e μ são atualizados. Assim, assumindo que os valores estimados dos multiplicadores de Lagrange e parâmetro de rescalamento são σ^k e μ^k , respectivamente, em cada ciclo interno do MRN resolve-se o problema:

$$\min_{x \in \Omega} \mathcal{L}_{\mu^k}(x, \sigma^k) = f(x) - \mu^k \sum_{j=1}^p \sigma_j^k \psi\left(\frac{1}{\mu^k}h_j(x)\right) \quad (3.39)$$

Um aspecto crucial na utilização do MRN é a regra de atualização dos multiplicadores de Lagrange, σ . As condições necessárias de otimalidade, aplicadas à função Lagrangiana do problema modificado (3.38), resultam em:

$$\nabla_x \mathcal{L}_\mu(x, \sigma) = \nabla f(x) - \sum_{j=1}^p \left[\sigma_j \psi'\left(\frac{1}{\mu}h_j(x)\right) \nabla h_j(x) \right] \quad (3.40)$$

Conforme indicado em POLYAK & TEBoulLE (1997), a expressão (3.40) sugere a seguinte regra de atualização para os multiplicadores de Lagrange:

$$\sigma_j^{k+1} = \sigma_j^k \psi'\left(\frac{1}{\mu^k}h_j(x^{k+1})\right), \quad j = 1, \dots, p \quad (3.41)$$

É interessante notar que, desde que se inicialize $\sigma^0 > 0$, a regra de atualização (3.41) e a propriedade (P2) garantem que a sequência de multiplicadores $\{\sigma^k\}$ é sempre positiva. Assim, no MRN, a sequência primal pode ser interior ou exterior, mas a sequência dual é sempre interior.

Adicionalmente, em decorrência das propriedades (P2) e (P5), tem-se que $\lim_{t \rightarrow \infty} \psi'(t) = 0$. Quando uma restrição de desigualdade h_j é inativa na solução ótima, isto é, $h_j(x^*) > 0$, espera-se que $\frac{1}{\mu^k} h_j(x^{k+1}) \rightarrow \infty$, de modo que $\sigma_j^k \psi' \left(\frac{1}{\mu^k} h_j(x^{k+1}) \right) \rightarrow 0$. Assim, esta regra de atualização de multiplicadores também faz com que os multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade inativas convirjam para zero, o que condiz com as condições necessárias de otimalidade. De fato, POLYAK & TEBoulLE (1997) mostraram que a sequência de multiplicadores de Lagrange obtidas através desta regra de atualização converge para o vetor de multiplicadores de Lagrange ótimo do problema original, sob determinadas hipóteses. Com base no que foi exposto, pode-se delinear o Algoritmo 5 para o MRN.

Algoritmo 5 Método de Rescalamento Não-Linear

- 1: Dado o problema (3.34), construir a função Lagrangiana transformada (3.38).
 - 2: Faça $k = 0$.
 Inicialize as variáveis primais $x^0 \in \Omega$, duais $\sigma \in \mathbb{R}_+^{*p}$ e o parâmetro de rescalamento $\mu^0 > 0$.
 Escolha um fator de atualização $\tau \in (0, 1)$ e uma tolerância $\varepsilon > 0$.
 - 3: Resolva o problema de rescalamento (3.39) com μ^k e σ^k fixos, determinando o ponto x^{k+1} .
 - 4: Se x^{k+1} e σ^k satisfazem as condições de KKT, retorne x^{k+1} como solução.
 Caso contrário, vá para o passo 5.
 - 5: Atualize os multiplicadores de Lagrange, determinando σ^{k+1} por (3.41), atualize o parâmetro de rescalamento por $\mu^{k+1} = \tau \mu^k$, faça $k = k + 1$ e volte para o passo 3.
-

3.5.1 Função Barreira Logarítmica Modificada

Neste trabalho, especial atenção é conferida à função de rescalamento baseada na função barreira logarítmica modificada expressa por:

$$\psi(t) = \ln(t + 1) \quad (3.42)$$

O motivo para isto é o fato de que a função barreira logarítmica modificada se assemelha à função barreira logarítmica clássica utilizada em métodos de pontos interiores, os quais apresentam bom desempenho numérico na resolução de problemas de FPO. A função barreira logarítmica modificada também já foi testada na resolução de problemas de FPO (SOUSA ET AL., 2004, 2009; LAGE, 2013), verificando-se que a mesma tem desempenho computacional satisfatório, além de reduzir os problemas de mal-condicionamento.

Denotemos por $\mathcal{M}_\mu(x, \sigma)$ a função Lagrangiana (3.38) que utiliza a função barreira logarítmica modificada como função de rescalamento. De acordo com NASH ET AL. (1994), se a solução primal ótima for x^* e se σ^* for o vetor de multiplicadores de Lagrange associado a x^* , então as seguintes propriedades são verificadas para qualquer $\mu > 0$:

$$(M1) \quad \mathcal{M}_\mu(x^*, \sigma^*) = f(x^*);$$

$$(M2) \quad \nabla_x \mathcal{M}_\mu(x^*, \sigma^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{j=1}^p \sigma_j^* \nabla h_j(x^*) = 0.$$

Quando o problema é convexo, uma decorrência de (M2) é que

$$(M3) \quad x^* = \arg \min \{ \mathcal{M}_\mu(x, \sigma^*) \}, \text{ para qualquer } \mu > 0.$$

Desta forma, se o multiplicador de Lagrange ótimo σ^* for conhecido, o problema original pode ser resolvido através de um único problema irrestrito independentemente do valor do parâmetro de rescalamento. Por outro lado, ainda que o problema original seja não-convexo, se as condições suficientes de segunda-ordem e a complementaridade estrita são satisfeitas na solução ótima x^* , então existe um valor $\bar{\mu} > 0$ de modo que o menor autovalor de $\nabla_{xx}^2 \mathcal{M}_\mu(x^*, \sigma^*)$ é positivo para $\mu < \bar{\mu}$. Neste caso, também é possível obter uma solução local para o problema restrito original resolvendo um único problema irrestrito, desde que o parâmetro de rescalamento seja suficientemente pequeno (NASH ET AL., 1994).

É conveniente utilizar a extrapolação quadrática apresentada anteriormente, de modo que a função de rescalamento seja definida para qualquer argumento. Assim, consideraremos a seguinte função de rescalamento não-linear baseada na função barreira logarítmica modificada extrapolada:

$$\psi(t) = \begin{cases} \ln(t+1), & \text{se } t \geq \beta \\ p(t) = \frac{1}{2}p_2t^2 + p_1t + p_0, & \text{se } t < \beta \end{cases} \quad (3.43)$$

em que $\beta \in (-1, 0)$ é o ponto de extrapolação. Os coeficientes p_2 , p_1 e p_0 são calculados por:

$$p_2 = -\frac{1}{(1+\beta)^2} \quad (3.44)$$

$$p_1 = \frac{1+2\beta}{(1+\beta)^2} \quad (3.45)$$

$$p_0 = \ln(1+\beta) - \frac{\beta(2+3\beta)}{2(1+\beta)^2} \quad (3.46)$$

Neste caso, os multiplicadores de Lagrange são atualizados através da seguinte expressão:

$$\sigma_j^{k+1} = \begin{cases} \frac{\sigma_j^k \mu^k}{h_j(x^{k+1}) + \mu^k} & \text{se } h_j(x^{k+1}) \geq \beta \mu^k \\ \sigma_j^k \left[\frac{p_2}{\mu^k} h_j(x^{k+1}) + p_1 \right] & \text{se } h_j(x^{k+1}) < \beta \mu^k \end{cases} \quad (3.47)$$

A aplicação do MRN já foi realizada em alguns trabalhos de FPO, tais como ADIBI ET AL. (2003), SOUSA ET AL. (2004, 2009) e LAGE (2013). Contudo, todos estes trabalhos investigaram a aplicação do MRN determinando a direção de busca e um comprimento de passo apropriado através de um procedimento de busca linear. Uma nova família de penalidades para métodos de Lagrangiana aumentada foi apresentada por MATIOLI

& GONZAGA (2008), sendo que atenção especial foi dada a uma variante da função barreira logarítmica modificada. Os autores conduziram experimentos computacionais com esta variante, denominada M^2BF , utilizando problemas com apenas restrições de desigualdade. Cada subproblema irrestrito foi resolvido por um método de região de confiança para problemas irrestritos.

Uma das propostas deste trabalho é a investigação e aplicação do MRN, baseado na função barreira logarítmica modificada com extrapolação quadrática, na resolução de problemas de FPO, utilizando um método de região de confiança para calcular o passo de atualização das variáveis. Nesta abordagem, apresentada no Capítulo 5, as variáveis discretas do problema de FPO serão tratadas como contínuas através de funções penalidade acrescentadas à função objetivo, conforme proposto por SOLER ET AL. (2013).

3.6 Dificuldades Computacionais

A aplicação prática do método dual-Lagrangiano é bastante limitada, uma vez que a ocorrência do *gap* de dualidade pode levar à divergência ou soluções diferentes da ótima. Outra desvantagem é o aumento do número de variáveis no método pela introdução dos multiplicadores de Lagrange. Apesar disso, a função Lagrangiana tem um papel crucial no desenvolvimento de outros métodos de otimização, os quais têm desempenho computacional significativamente melhor que o método dual-Lagrangiano.

Por ser uma aplicação do método de Newton para sistemas não-lineares às condições necessárias de otimalidade de primeira ordem para a função Lagrangiana, o método de Newton-Lagrangiano requer que a estimativa inicial esteja próxima de x^* e λ^* o que, muitas vezes, pode inviabilizar o método, pois não existe garantia de convergência. Adicionalmente, não há garantia de obtenção de pontos de mínimo local, uma vez que o método apenas busca pontos estacionários da função Lagrangiana, que também podem ser pontos de máximo ou de sela.

No método de penalidade, a solução $x(\omega)$ para um problema de penalidade com ω fixo pode ser feita tão próxima quanto se queira da solução ótima x^* , desde que se adote um parâmetro de penalidade suficientemente grande. Entretanto, ao se tentar resolver o problema de penalidade com um valor inicial muito alto para ω , podem ocorrer dificuldades computacionais devido ao mal-condicionamento da matriz Hessiana. Por este motivo, a maioria das abordagens baseadas em penalidade resolvem uma sequência de problemas com valores crescentes de parâmetros de penalidade, sendo que cada problema é inicializado com a solução ótima do problema anterior. Esta abordagem é conhecida como *Sequential Unconstrained Minimization Technique* (SUMT). Para valores grandes de ω , a ênfase é colocada no atendimento das restrições e a maioria dos métodos para otimização irrestrita se move rapidamente na direção de um ponto factível, porém não

ótimo, causando a parada prematura do método.

Uma das dificuldades na utilização do método de barreira é a escolha de um ponto inicial x^0 que esteja no interior da região factível, $\mathcal{X}^\circ$. Para muitos problemas, isto pode ser trabalhoso. De fato, GRIVA ET AL. (2009) apontam que um ponto inicial às vezes pode ser obtido resolvendo um problema de otimização auxiliar, similar ao método duas-fases utilizado em PL. Assim como no método de penalidade, alguns métodos de otimização irrestrita podem ter dificuldades de convergência devido a problemas de mal-condicionamento e erros de arredondamento para valores pequenos do parâmetro de barreira, em especial quando se aproximam da solução ótima. Adicionalmente, a escolha adequada do parâmetro de barreira inicial, μ^0 , e de seu fator de atualização, τ , são determinantes para o sucesso do método.

Capítulo 4

Método de Região de Confiança

Problemas de FPO são ferramentas úteis para a operação e o planejamento dos SEPs. Entretanto, restrições físicas e operacionais reais, tais como a natureza discreta de variáveis de controle, têm tornado sua resolução uma tarefa bastante desafiadora. Ao mesmo tempo, a reestruturação do setor elétrico, visando a desverticalização e descentralização necessárias ao ambiente de mercado, incentivaram a proposição de novos modelos de FPO (WANG ET AL., 2007), exigindo a constante atualização dos métodos computacionais para sua resolução. Desta forma, o desenvolvimento de algoritmos robustos para solucionar estes problemas se tornou um importante campo de pesquisa.

Um dos objetos de estudo deste trabalho é uma classe de algoritmos conhecida como métodos de região de confiança, devido ao seu sucesso na globalização de diversos algoritmos para problemas de PNL. A robustez destes algoritmos está relacionada ao efeito regularizador ao minimizar modelos, normalmente quadráticos, em regiões de tamanho predeterminado (SANTOS, 2014). Além da robustez, outra motivação para a investigação destes métodos está relacionada ao fato de que trabalhos utilizando métodos de região de confiança para resolução de problemas de FPO ou no contexto do MRN apresentado no capítulo anterior ainda são relativamente escassos, e seu desempenho numérico ainda precisa ser verificado.

Os estudos iniciais sobre métodos de região de confiança se iniciaram há várias décadas, e remontam ao trabalho de LEVENBERG (1944), no qual um método de Gauss-Newton modificado para resolução de problemas de mínimos quadrados é apresentado. Anos mais tarde, o trabalho de MARQUARDT (1963) mostrou a ligação entre o “amortecimento” da matriz Hessiana pela adição de um múltiplo da identidade e a redução do comprimento do passo. Provou-se, ainda, que a minimização do modelo com amortecimento corresponde à minimização do modelo original em uma região restrita. Assim, a partir dos anos 1970, os métodos de região de confiança se tornaram objeto ativo de pesquisa (CONN ET AL., 2000). Cabe ressaltar, entretanto, que o nome região de confiança somente surgiu alguns anos mais tarde, no trabalho de DENNIS (1977).

Neste capítulo, as ideias básicas dos métodos de região de confiança são expostas. Discute-se a utilização dos métodos de região de confiança para problemas irrestritos, e suas diferenças em relação aos métodos de busca linear. Em seguida, alguns métodos aproximados e quase-exatos utilizados para a resolução de problemas de região de confiança são apresentados.

4.1 Região de Confiança em Problemas Irrestritos

Nesta seção, consideramos problemas irrestritos da forma

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (4.1)$$

em que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função continuamente diferenciável.

Métodos para resolução de problemas de PNL da forma (4.1) são, naturalmente, iterativos. Tais algoritmos requerem uma estimativa inicial de solução $x^0 \in \mathbb{R}^n$, a partir da qual é gerada uma sequência de soluções $\{x^k\}_{k=0}^{\infty}$ que, idealmente, converge para um ponto crítico de primeira ordem do problema que é um mínimo local. Do ponto de vista prático, a sequência de pontos é finita, parando quando não é mais possível obter progresso em direção à solução ou quando a solução foi atingida com a precisão desejada. Neste contexto, a estratégia de decisão sobre como se mover de um ponto x^k para um ponto x^{k+1} tem grande importância.

Na maioria dos métodos iterativos, o que se faz é determinar um passo ou direção^[1] d^k , de modo que $x^{k+1} = x^k + d^k$. A direção d^k não é arbitrária: ela é escolhida de modo a garantir o progresso em direção a um ponto de mínimo local do problema, o qual normalmente é medido através de uma função de mérito. No caso de problemas irrestritos, uma função de mérito natural é a própria função objetivo. Assim, neste caso, a direção de busca calculada deve propiciar uma redução na função objetivo. De acordo com NOCEDAL & WRIGHT (2000), existem duas estratégias fundamentais para escolha do passo d^k : busca linear (ou busca unidimensional) e região de confiança. Ambas determinam o passo d^k com a ajuda de um modelo, tipicamente quadrático, da função objetivo, mas utilizam o modelo de maneira diferente.

4.1.1 Busca Linear e Região de Confiança

Métodos clássicos de otimização utilizam, em sua maioria, busca linear. Em algoritmos com busca linear, uma direção de busca p^k é calculada a partir de x^k . Esta direção deve ser uma direção de descida, isto é, $\langle p^k, \nabla f(x^k) \rangle < 0$, de modo que o teorema de Taylor garante que, para pequenos passos ao longo de p^k , é possível reduzir a função objetivo.

^[1]Conforme já apontado anteriormente, a literatura de região de confiança normalmente chama d^k de passo, enquanto que em métodos com busca linear o nome mais comum é direção.

Em seguida, uma busca é conduzida nesta direção visando determinar um comprimento de passo $\alpha^k > 0$ que possibilite um decréscimo suficiente na função objetivo.

Conforme apontado por GOULD & LEYFFER (2003), trabalhos iniciais em otimização sugeriam que isto fosse feito através da resolução do seguinte problema de otimização em uma única variável:

$$\min_{\alpha > 0} f(x^k + \alpha p^k) \quad (4.2)$$

Esta forma de cálculo do comprimento do passo, conhecida como busca exata, pode ser computacionalmente cara e desnecessária, sendo pouco utilizada. Implementações de busca linear modernas preferem utilizar uma busca inexata, de modo a calcular comprimentos de passo que não resultem em passos muito longos ou muito curtos. Neste caso, a escolha do passo deve ser feita com base em alguma condição que garanta o decréscimo suficiente da função objetivo. Um exemplo é a condição de Armijo, expressa por:

$$f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k) + \alpha^k \xi \langle p^k, \nabla f(x^k) \rangle \quad (4.3)$$

para algum $\xi \in (0, 1)$. Assim, como $\langle p^k, \nabla f(x^k) \rangle < 0$, quanto maior o passo, maior o decréscimo esperado para a função objetivo. A Figura 4.1 ilustra a condição de Armijo, em que um comprimento de passo máximo $\bar{\alpha}$ pode ser dado, de modo a garantir a redução suficiente. Qualquer passo no intervalo de passos aceitáveis seria adequado pela condição de Armijo.

Figura 4.1: Condição de Armijo.

Uma vez calculado um comprimento de passo α^k adequado, o passo final é dado por $d^k = \alpha^k p^k$. Conforme apontado por NOCEDAL & WRIGHT (2000), o sucesso da estratégia de busca unidimensional depende de escolhas adequadas para a direção de descida p^k e comprimento de passo α^k . De acordo com GOULD & LEYFFER (2003), métodos de busca linear são naturalmente “otimistas”, uma vez que essencialmente metade das direções de

busca em um ponto são de descida e podem ser utilizadas, cabendo ao procedimento de busca linear evitar o comportamento inadequado do método.

Em contrapartida, métodos de região de confiança podem ser vistos como uma abordagem mais conservadora para a resolução de problemas de PNL. Esta classe de algoritmos se baseia em um modelo (normalmente quadrático) da função objetivo em uma vizinhança do iterando corrente, na qual se confia que o modelo é uma representação adequada, chamada região de confiança. Um passo tentativo é obtido minimizando o modelo nesta região de confiança, de modo que o comprimento do passo e direção são calculados simultaneamente. Então, uma medida da concordância entre os valores da função original e do modelo, calculados através de uma função de mérito, é utilizada para decidir se o passo tentativo é aceitável. Se o passo for aceito, a estimativa de solução é atualizada e a região de confiança é, possivelmente, ampliada. Se o passo for rejeitado, a região de confiança é reduzida e um novo passo tentativo é calculado. Portanto, enquanto um método de busca linear se recupera de um comprimento de passo inadequado retrocedendo ao longo de uma curva paramétrica (geralmente linear), um método de região de confiança se recupera reconsiderando todo o procedimento de cálculo do passo.

4.1.2 Algoritmo Básico de Região de Confiança

Em um método de região de confiança, a cada iteração k é determinado um passo tentativo, d^k , que minimiza o modelo da função objetivo dentro de uma região em que se confia no modelo. O ponto “teste” $x^+ = x^k + d^k$ é aceito se fornece uma redução suficiente na função objetivo ou, do contrário, é rejeitado. Nesta subseção, os principais detalhes do algoritmo de região de confiança são apresentados. Em particular, é importante definir o que é uma redução suficiente no contexto do método de região de confiança, bem como as estratégias adotadas para modificar o tamanho da mesma quando necessário.

O tamanho da região de confiança tem um papel crucial no desempenho do método. Se a região for muito pequena, pode-se perder a chance de dar um passo substancial em direção a um minimizador da função. Por outro lado, se a região for muito grande, o modelo poderá não representar fielmente a função original, e passos que não permitem a redução suficiente no modelo poderão ser obtidos. Neste último caso, é necessário reduzir o raio da região de confiança e obter um novo passo.

A fim de apresentar as ideias básicas do método de região de confiança, seja x^k a estimativa de solução corrente, e consideremos o seguinte modelo quadrático para a função f em torno de x^k :

$$m_k(x) = f_k + g_k^T(x - x^k) + \frac{1}{2}(x - x^k)^T B_k(x - x^k) \quad (4.4)$$

em que: $f_k = f(x^k)$, $g_k = \nabla f(x^k)$ e B_k é uma matriz $n \times n$ simétrica, podendo ser uma

aproximação da Hessiana ou a Hessiana exata $\nabla^2 f(x^k)$. Quando $B_k = \nabla^2 f(x^k)$, o método é chamado de método de Newton com região de confiança. Na prática, a abordagem de região de confiança é bastante geral e requer pouco da matriz B_k : apenas simetria e limitação uniforme no índice k (NOCEDAL & WRIGHT, 2000).

O modelo quadrático m_k somente representa a função f adequadamente para valores de x suficientemente próximos de x^k , de modo que faz sentido confiar no modelo apenas numa vizinhança de x^k , isto é, a bola fechada:

$$B(x^k, \Delta^k) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^k\| \leq \Delta^k\} \quad (4.5)$$

em que $\Delta^k > 0$ é o raio da região de confiança na iteração k e $\|\cdot\|$ é uma norma arbitrária em $\mathbb{R}^n$. Neste texto será utilizada a norma Euclidiana, ℓ_2 , a menos que explicitamente especificado o contrário.

Espera-se que uma solução x^+ para o problema:

$$\begin{aligned} \min \quad & m_k(x) \\ \text{s.a.} \quad & \|x - x^k\| \leq \Delta^k \end{aligned} \quad (4.6)$$

seja uma boa aproximação para o minimizador de f na bola $B(x^k, \Delta^k)$.

Como o passo de região de confiança $d^k = x^+ - x^k$ pode mudar de acordo com o ponto x^k escolhido para definir o modelo e com o raio Δ^k , podemos denotar $d^k = d(x^k, \Delta^k)$. Por simplicidade, entretanto, denotaremos o passo por apenas d^k . O problema de região de confiança (4.6) pode ser reescrito utilizando uma vizinhança centrada na origem, em termos do passo d , considerando que $d = x - x^k$:

$$\begin{aligned} \min \quad & q_k(d) \\ \text{s.a.} \quad & \|d\| \leq \Delta^k \end{aligned} \quad (4.7)$$

em que

$$\begin{aligned} q_k(d) &= m_k(d + x^k) \\ &= f_k + g_k^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \end{aligned} \quad (4.8)$$

A única diferença é que ao resolver (4.7) encontramos o passo tentativo d^k em vez do ponto x^+ , bastando fazer $x^+ = x^k + d^k$ para obter o ponto. De agora em diante, sempre consideraremos o problema de região de confiança na forma (4.7), em termos do passo.

Observa-se, portanto, que o cálculo do passo em um método de região de confiança é feito resolvendo um problema de otimização em que a função objetivo é quadrática, com uma restrição quadrática (quando se utiliza a norma Euclidiana). Analisando o modelo q_k , se B_k for uma matriz definida positiva, tem-se que seu minimizador irrestrito é o passo de Newton $-B_k^{-1}g_k$, chamado passo completo. Neste caso, para $\|B_k^{-1}g_k\| \leq \Delta^k$, a solução ótima do problema (4.7) coincide com a solução do problema irrestrito. Em outros casos a solução do problema de região de confiança pode não ser tão simples. Felizmente, soluções aproximadas para o problema de região de confiança podem ser calculadas sem muito esforço, sendo suficientes para propósitos de convergência.

Uma vez calculado o passo tentativo, d^k , e o ponto candidato a nova estimativa de solução, x^+ , deve-se decidir se o ponto obtido fornece uma redução suficiente na função objetivo e se o raio da região de confiança deve ser atualizado. Para tanto, define-se a redução predita devida ao passo d^k por:

$$\begin{aligned}\text{pred}(d^k) &= m_k(x^k) - m_k(x^+) \\ &= q_k(0) - q_k(d^k)\end{aligned}\tag{4.9}$$

e a redução verdadeira por:

$$\text{ared}(d^k) = f(x^k) - f(x^+)\tag{4.10}$$

É importante notar que, como d^k é obtido minimizando q_k em uma região que contém o ponto $d = 0$, então a redução predita é sempre não-negativa. Um passo d^k é aceito se a seguinte condição de redução suficiente for satisfeita:

$$\text{ared}(d^k) \geq \rho_1 \text{pred}(d^k)\tag{4.11}$$

isto é, a redução real deve ser, no mínimo, uma fração $\rho_1 \in (0, 1)$ da redução predita. Assumindo que a redução predita não é nula, a concordância entre a função objetivo e o modelo m_k pode ser expressa pela razão:

$$\rho^k = \frac{\text{ared}(d^k)}{\text{pred}(d^k)}\tag{4.12}$$

de modo que um passo é aceito quando $\rho^k \geq \rho_1$.

Dessa forma, pode-se estabelecer os seguintes critérios para atualização do ponto e do raio da região de confiança:

- Se $\rho^k < 0$, então $f(x^+) > f(x^k)$, isto é, o passo tentativo ocasionou um aumento da função objetivo. Disto, conclui-se que a concordância entre f e o modelo m_k é pobre. Neste caso, o passo é rejeitado, o raio da região de confiança é reduzido e um novo passo é calculado.
- Se $0 \leq \rho^k < \rho_1$, a redução verdadeira obtida não foi suficiente quando comparada à redução predita. Neste caso, o passo também é rejeitado, o raio da região de confiança é reduzido e um novo passo é computado.
- Se $\rho^k \geq \rho_1$, a redução propiciada pelo passo tentativo d^k foi suficiente. Neste caso, o passo é aceito, e o ponto é atualizado por $x^{k+1} = x^+$. Dependendo do grau de sucesso do passo, duas situações podem ocorrer:
 - Se ρ^k estiver próximo ou for maior que 1, a redução verdadeira foi próxima ou superior à redução predita. Neste caso, espera-se que o modelo seja uma boa representação da função objetivo, e o raio da região de confiança é aumentado.
 - Se $\rho^k < 1$ não estiver suficientemente próximo de 1, há apenas uma concordância razoável entre o modelo e a função objetivo, de modo que o raio da região de confiança permanece inalterado.

Com base nestes critérios, pode-se estabelecer as seguintes regras de atualização para o raio da região de confiança (CONN ET AL., 2000):

$$\Delta^{k+1} \in \begin{cases} [\gamma_0 \Delta^k, \gamma_1 \Delta^k], & \text{se } \rho^k < \rho_1 \\ [\gamma_1 \Delta^k, \Delta^k], & \text{se } \rho^k \in [\rho_1, \rho_2) \\ [\Delta^k, \gamma_2 \Delta^k], & \text{se } \rho^k \geq \rho_2 \end{cases} \quad (4.13)$$

Valores típicos para os parâmetros em (4.13) são: $\rho_1 = 0,01$, $\rho_2 = 0,9$, $\gamma_0 = 0,25$, $\gamma_1 = 0,5$ e $\gamma_2 = 2$. Valores adequados, entretanto, podem ser obtidos experimentalmente para cada tipo de problema, desde que satisfaçam $0 < \rho_1 \leq \rho_2 < 1$ e $0 < \gamma_0 \leq \gamma_1 < 1 < \gamma_2$. O valor ρ_1 é estritamente positivo, mas próximo de zero, de modo que se $\rho^k < \rho_1$ o passo é rejeitado e o raio da região de confiança é reduzido. O valor ρ_2 é próximo de 1, de modo que se $\rho^k \geq \rho_2$ o passo foi muito bem-sucedido, e pode-se aumentar o raio da região de confiança.

Alguns algoritmos de região de confiança consideram que, se um passo tentativo bem-sucedido está no interior da região de confiança, isto é, $\|d^k\| < \Delta^k$, então o raio da região de confiança não está interferindo no progresso do algoritmo e, assim, Δ^{k+1} não precisa ser alterado.

A inicialização do raio é outro aspecto que pode afetar o desempenho dos métodos de região de confiança. Frequentemente, utiliza-se alguma estratégia simples para determinar o raio inicial, tal como $\Delta^0 = 1$ ou $\Delta^0 = \frac{1}{10}\|g_0\|$, as quais são numericamente aceitáveis quando os problemas são bem escalados. Estratégias mais sofisticadas podem ser utilizadas para escolha do raio inicial. Por exemplo, quando a matriz B_k é definida positiva, pode-se escolher o raio inicial como o comprimento do passo que minimiza o modelo na direção de máxima descida (CONN ET AL., 2000). Outra possibilidade é determinar o raio máximo que garanta uma concordância apropriada entre o modelo e a função objetivo na direção $-g_0$, utilizando um procedimento iterativo, conforme descrito em SARTENAER (1997). Com base no que foi exposto, o Algoritmo 6 apresenta a estrutura básica do método de região de confiança para problemas irrestritos.

Algoritmo 6 Método de Região de Confiança

- 1: Escolha um ponto inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$, raio máximo $\bar{\Delta} > 0$, raio inicial $\Delta^0 \in (0, \bar{\Delta})$, uma tolerância $\varepsilon > 0$, e os parâmetros $0 < \rho_1 \leq \rho_2 < 1$ e $0 < \gamma_0 \leq \gamma_1 < 1 < \gamma_2$.
Faça $k = 0$.
- 2: Calcule $f(x^k)$ e $\nabla f(x^k)$.
- 3: Se $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$ pare, e retorne x^k como solução.
Caso contrário, escolha uma matriz B_k e defina o modelo q_k .
- 4: Calcule o passo d^k , resolvendo o problema (4.7).
Faça $x^+ = x^k + d^k$.
- 5: Calcule ρ^k utilizando (4.12).
- 6: Se $\rho^k \geq \rho_1$, faça $x^{k+1} = x^+$.

Caso contrário, faça $x^{k+1} = x^k$.

7: Atualize o raio da região de confiança de acordo com (4.13).

Faça $k = k + 1$ e volte ao passo 2.

4.2 Resolução dos Subproblemas de Região de Confiança

Até o momento, preocupou-se em apresentar as ideias gerais do método de região de confiança, explicitando-se condições para aceitação ou rejeição do passo, bem como a estratégia para atualização do raio da região de confiança. Um detalhe, entretanto, foi intencionalmente omitido: a resolução do subproblema de região de confiança (4.7), que permite a obtenção do passo tentativo. Nesta seção são discutidos dois métodos aproximados, o método *dogleg* de Powell e o método do gradiente conjugado de Steihaug, bem como um método quase-exato recentemente proposto por ADACHI ET AL. (2017), que utiliza problemas de autovalores generalizados, para a resolução dos subproblemas de região de confiança. A fim de apresentar estes métodos, primeiramente enunciamos o seguinte teorema, que caracteriza a solução para um subproblema de região de confiança definida na norma Euclidiana.

Teorema 4.1. Um vetor d^* é uma solução global do problema de região de confiança

$$\begin{aligned} \min_{d \in \mathbb{R}^n} \quad & q(d) = f + g^T d + \frac{1}{2} d^T B d \\ \text{s.a.} \quad & \|d\| \leq \Delta \end{aligned} \tag{4.14}$$

se, e somente se, d^* é factível e existe um escalar $\lambda^* \geq 0$ tal que as seguintes condições são satisfeitas:

$$(B + \lambda^* I) d^* = -g \tag{4.15a}$$

$$\lambda^* (\Delta - \|d^*\|) = 0 \tag{4.15b}$$

$$(B + \lambda^* I) \text{ é semidefinida positiva.} \tag{4.15c}$$

Além disso, se $(B + \lambda^* I)$ for definida positiva, então o vetor d^* é único.

Demonstração. Ver NOCEDAL & WRIGHT (2000) ou CONN ET AL. (2000). $\square$

A condição (4.15b) indica que existe uma relação de complementaridade entre os valores λ^* e $(\Delta - \|d^*\|)$. Assim, quando o passo tentativo d^* está no interior da região de confiança, deve-se ter $\lambda^* = 0$ e $Bd^* = -g$ com B semidefinida positiva. Por outro lado, se a matriz B não for semidefinida positiva, deve-se ter $\lambda^* > 0$ de modo que $(B + \lambda^* I)$ seja semidefinida positiva. Neste caso, tem-se que $(\Delta - \|d^*\|) = 0$, isto é, o passo tentativo está na fronteira da região de confiança. Geometricamente, se a matriz B não é semidefinida positiva, então existe uma direção de curvatura negativa do modelo, que permite reduzir

seu valor tanto quanto se desejar, de modo que faz sentido o passo tentativo estar na fronteira da região de confiança. Esta noção geométrica será retomada posteriormente.

Métodos para resolução do subproblema de região de confiança podem ser quase-exatos ou aproximados. As abordagens quase-exatas se baseiam na caracterização apresentada no Teorema 4.1 para obtenção do passo tentativo, buscando determinar valores próximos aos valores ótimos d^* e λ^* . O Teorema 4.1 aponta a existência de duas possibilidades: a primeira é a de que $\lambda^* = 0$ satisfaz (4.15a) e (4.15c), com $\|d^*\| \leq \Delta$. Do contrário, definindo

$$d(\lambda) = -(B + \lambda I)^{-1}g \quad (4.16)$$

busca-se um valor $\lambda > 0$ tal que

$$\|d(\lambda)\| = \Delta \quad (4.17)$$

Note que (4.17) é uma equação em uma única variável λ , que pode ser resolvida, por exemplo, através do método de Newton. De um ponto de vista numérico e prático, entretanto, a equação anterior não é a mais adequada, utilizando-se a forma equivalente:

$$\frac{1}{\|d(\lambda)\|} = \frac{1}{\Delta} \quad (4.18)$$

Dentre os algoritmos que obtêm soluções quase-exatas para o problema (4.14), o método descrito no trabalho de MORÉ & SORENSEN (1983) é um dos mais difundidos. Este método se baseia em sucessivas decomposições de Cholesky da matriz $(B + \lambda I)$ associadas ao método de Newton para resolver a equação (4.18). Estes algoritmos, entretanto, são mais indicados para problemas em que o custo da fatoração não é elevado, isto é, quando a dimensão é pequena ou a matriz B é esparsa. Conforme indicado em NOCEDAL & WRIGHT (2000), implementações práticas deste algoritmo não fazem iterações até a convergência para o valor ótimo de λ com grande precisão, satisfazendo-se com uma solução aproximada obtida em duas ou três iterações.

Apesar de uma solução exata ou quase-exata para o problema de região de confiança ser desejável, para propósitos de convergência global é suficiente encontrar uma solução aproximada, que atinja uma redução suficiente no modelo. A redução é suficiente quando fornece, no mínimo, tanta redução no modelo quanto a redução obtida pelo ponto de Cauchy.

4.2.1 Ponto de Cauchy

O ponto de Cauchy, denotado por d_C^k , nada mais é do que o minimizador do modelo q_k da equação (4.8) na direção oposta ao gradiente, $-g_k$, restrito à região de confiança. Assim, o ponto de Cauchy é dado por:

$$d_C^k = \arg \min \{q_k(d) \mid \|d\| \leq \Delta, d = -\nu g_k\} \quad (4.19)$$

O ponto de Cauchy pode ser calculado resolvendo-se o seguinte problema de otimi-

zação em uma única variável, obtido a partir de (4.19):

$$\begin{aligned} \min_{\nu \geq 0} \quad & f_k - \|g_k\|^2 \nu + \frac{1}{2}(g_k^T B_k g_k) \nu^2 \\ \text{s.a.} \quad & \nu \leq \frac{\Delta^k}{\|g_k\|} \end{aligned} \quad (4.20)$$

Analisando o sinal de $g_k^T B_k g_k$, pode-se concluir que a solução ótima ν^k deste problema é representada explicitamente por:

$$\nu^k = \begin{cases} \frac{\Delta^k}{\|g_k\|}, & \text{se } g_k^T B_k g_k \leq 0 \\ \min \left\{ \frac{\|g_k\|^2}{g_k^T B_k g_k}, \frac{\Delta^k}{\|g_k\|} \right\}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.21)$$

e o passo de Cauchy é calculado por $d_C^k = -\nu^k g_k$.

Como o método de região de confiança é globalmente convergente se o ponto de Cauchy for utilizado (NOCEDAL & WRIGHT, 2000), é adequado impor que o passo computado para o subproblema de região de confiança seja pelo menos tão bom quanto o ponto de Cauchy em termos de redução no modelo. Assim, se d^k for a solução computada para o subproblema de região de confiança (4.7), esta condição sobre o passo tentativo d^k pode ser expressa por:

$$\text{pred}(d^k) = q_k(0) - q_k(d^k) \geq q_k(0) - q_k(d_C^k) = \text{pred}(d_C^k) \quad (4.22)$$

Uma representação de um ponto de Cauchy estritamente interior à região de confiança é dada na Figura 4.2. Observa-se que a área destacada em cinza corresponde aos pontos que são tão bons quanto ou melhores que o ponto de Cauchy em termos de decréscimo no modelo, isto é, os pontos na região destacada satisfazem a condição (4.22).

Figura 4.2: O ponto de Cauchy.

O ponto de Cauchy pode ser obtido de maneira computacionalmente barata e, por isso, tem um papel fundamental na aceitação ou rejeição de uma solução aproximada para o subproblema de região de confiança. De fato, a convergência global do método de região de confiança pode ser atingida impondo apenas que a solução aproximada, d^k , do subproblema de região de confiança permita uma redução no modelo quadrático q_k de, no

mínimo, uma fração fixa do decréscimo obtido pelo ponto de Cauchy, d_C^k , isto é,

$$q_k(0) - q_k(d^k) \geq \kappa(q_k(0) - q_k(d_C^k)) \quad (4.23)$$

para algum $\kappa \in (0, 1]$.

Conforme apontado em KARAS (2002), uma estimativa para o decréscimo obtido pelo ponto de Cauchy no modelo q_k pode ser obtida através do seguinte lema:

Lema 4.1. Seja $k \in \mathbb{N}$. O ponto de Cauchy $d_C^k \in \mathbb{R}^n$, definido em (4.19), satisfaz

$$q_k(0) - q_k(d_C^k) \geq \frac{\xi}{2} \|g_k\| \min \left\{ \Delta^k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|} \right\} \quad (4.24)$$

onde $\xi > 0$ depende da norma usada na definição da região de confiança. Se a norma usada é a norma Euclidiana ou ℓ_∞ , então $\xi = 1$, e se é a norma 1, então $\xi = \frac{1}{n}$.

Demonstração. Ver KARAS (2002). □

A demonstração de convergência global do método de região de confiança se baseia nesta estimativa de decréscimo no modelo atingida pelo ponto de Cauchy (NOCEDAL & WRIGHT, 2000). Desta forma, tendo em vista (4.23) e (4.24), d^k é uma solução aproximada para o subproblema de região de confiança (4.7) se $\|d^k\| \leq \Delta^k$ e

$$q_k(0) - q_k(d^k) \geq \frac{\xi}{2} \|g_k\| \min \left\{ \Delta^k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|} \right\} \quad (4.25)$$

em que $\xi \in (0, 1]$ é uma constante dependente da norma empregada.

Apesar do ponto de Cauchy permitir uma redução suficiente no modelo para propósitos de convergência global a um baixo custo computacional, é de interesse prático determinar soluções aproximadas melhores que o ponto de Cauchy para o subproblema de região de confiança. O motivo para isto é que a utilização do ponto de Cauchy em todas iterações corresponde apenas à utilização do método de gradiente com uma escolha particular de tamanho de passo. Como é sabido, esta escolha não apresenta bom desempenho computacional, principalmente porque o método do gradiente não leva em conta as informações de curvatura do modelo, representadas na matriz Hessiana aproximada B_k .

4.2.2 Métodos Aproximados

A seguir, são apresentados alguns algoritmos que permitem a resolução do subproblema de região de confiança. Dois algoritmos aproximados, o método *dogleg* de Powell e o método do gradiente conjugado de Steihaug, são discutidos. A ideia destes métodos é iniciar a resolução calculando o ponto de Cauchy e, então, utilizar algum procedimento iterativo para melhorá-la. A estratégia de aperfeiçoamento da solução destes métodos é projetada de modo que o passo de Newton

$$d_N^k = -B_k^{-1} g_k \quad (4.26)$$

seja utilizado sempre que B_k for definida positiva e $\|d_N^k\| \leq \Delta^k$.

4.2.2.1 Método *Dogleg*

A solução dos subproblemas de região de confiança depende do raio, Δ^k , e do ponto, x^k , em que o modelo foi definido. Quando a matriz B_k é definida positiva, o minimizador irrestrito do modelo quadrático q_k corresponde ao passo de Newton $d_N^k = -B_k^{-1}g_k$. Se este ponto pertencer à região de confiança, ele será a solução desejada. Em contrapartida, quando o raio se torna suficientemente pequeno, a restrição $\|d\| \leq \Delta^k$ faz com que o efeito do termo quadrático no modelo seja reduzido, de modo que a solução do subproblema de região de confiança fique cada vez mais próxima do ponto de Cauchy d_C^k .

Assim, se denotarmos por $d^*(\Delta)$ a solução ótima de um subproblema de região de confiança para um raio Δ , pode-se definir uma função $d^* : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$ que representa a trajetória de soluções ótimas do problema em função do raio da região de confiança. Esta trajetória tem uma extremidade no ponto $d^*(0) = 0$ e outra no passo de Newton $d^*(\Delta) = -B_k^{-1}g_k$, para qualquer $\Delta \geq \|B_k^{-1}g_k\|$. Um exemplo de trajetória d^* está representado na Figura 4.3, em que as curvas de nível do modelo são as elipses tracejadas e diferentes regiões de confiança em torno de um ponto são representadas pelas circunferências concêntricas.

Figura 4.3: Trajetória de soluções ótimas para um subproblema de região de confiança, em função do raio.

Assumindo que B_k é definida positiva, no método *dogleg* a trajetória curvilínea definida por d^* é substituída por uma trajetória poligonal composta por dois segmentos. Uma solução aproximada é obtida minimizando o modelo ao longo desta trajetória poligonal, denominada trajetória *dogleg*. O primeiro segmento tem uma extremidade na origem e outra no minimizador irrestrito ao longo da direção de máxima descida, dado por:

$$d_1^k = -\frac{g_k^T g_k}{g_k^T B_k g_k} g_k \quad (4.27)$$

Evidentemente, d_1^k coincide com o ponto de Cauchy quando $\|d_1^k\| \leq \Delta^k$. O segundo segmento tem uma extremidade no ponto d_1^k e outra no passo de Newton, d_N^k . Desta

forma, a trajetória *dogleg* $\bar{d} : [0, 2] \rightarrow \mathbb{R}^n$ pode ser expressa por:

$$\bar{d}(\alpha) = \begin{cases} \alpha d_1^k, & \text{se } 0 \leq \alpha \leq 1 \\ d_1^k + (\alpha - 1)(d_N^k - d_1^k), & \text{se } 1 < \alpha \leq 2 \end{cases} \quad (4.28)$$

O método *dogleg* é bem definido porque satisfaz duas propriedades essenciais: os pontos da trajetória se afastam da origem à medida em que o parâmetro α aumenta; e o modelo quadrático q_k decresce monotonicamente ao longo da trajetória. Estas propriedades são consequência do Lema apresentado a seguir (NOCEDAL & WRIGHT, 2000).

Lema. Seja B_k definida positiva e $\| \cdot \|$ a norma Euclidiana. Então:

- (i) $\|\bar{d}(\alpha)\|$ é uma função crescente de α ;
- (ii) $q_k(\bar{d}(\alpha))$ é uma função decrescente de α .

Demonstração. Ver NOCEDAL & WRIGHT (2000) ou CONN ET AL. (2000). $\square$

Desta forma, o minimizador sobre a trajetória *dogleg* é o passo de Newton quando $\|d_N^k\| \leq \Delta^k$; ou a intersecção da trajetória com a fronteira da região de confiança, quando $\|d_N^k\| > \Delta^k$. Tendo em vista o que foi apresentado, o passo obtido pelo método *dogleg*, denotado por d_D^k , pode ser calculado analiticamente da seguinte maneira, considerando que somente existem três possibilidades:

- Se $\|d_N^k\| \leq \Delta^k$, então $d_D^k = d_N^k$, isto é, a solução obtida pelo método *dogleg* é o próprio passo de Newton (Figura 4.4);

Figura 4.4: Método *Dogleg*: caso em que a solução aproximada coincide com o passo de Newton.

- Se $\|d_1^k\| \geq \Delta^k$, a solução aproximada obtida pelo método *dogleg* é o ponto de Cauchy, d_C^k (Figura 4.5);

Figura 4.5: Método *Dogleg*: caso em que a solução aproximada coincide com o ponto de Cauchy.

- Finalmente, se $\|d_N^k\| > \Delta^k$ e $\|d_I^k\| < \Delta^k$, a solução aproximada obtida pelo método *dogleg* se situa no segmento com extremidades em d_I^k e d_N^k (Figura 4.6).

Figura 4.6: Método *Dogleg*: caso em que a solução aproximada se situa no segmento com extremidades d_I^k e d_N^k .

Nas representações gráficas apresentadas, a circunferência contínua representa a fronteira da região de confiança, enquanto que as curvas tracejadas representam algumas curvas de nível do modelo q_k . Quando a solução aproximada está no segmento unindo d_I^k e d_N^k , deve-se determinar a interseção do mesmo com a fronteira da região de confiança, isto é, deve-se determinar um valor $\bar{\alpha} \in (0, 1)$, tal que:

$$\|d_I^k + \bar{\alpha}(d_N^k - d_I^k)\| = \Delta^k \quad (4.29)$$

Felizmente, isto pode ser feito de maneira simples, observando que resolver esta equação é equivalente a determinar a raiz positiva da seguinte equação quadrática em $\bar{\alpha}$:

$$\|d_N^k - d_I^k\|^2 \bar{\alpha}^2 + 2(d_I^k)^T (d_N^k - d_I^k) \bar{\alpha} + (\|d_I^k\|^2 - \Delta^k) = 0 \quad (4.30)$$

Desta forma,

$$\bar{\alpha} = \frac{-(d_I^k)^T (d_N^k - d_I^k) + \sqrt{[(d_I^k)^T (d_N^k - d_I^k)]^2 + \|d_N^k - d_I^k\|^2 (\Delta^k - \|d_I^k\|^2)}}{\|d_N^k - d_I^k\|^2} \quad (4.31)$$

Os passos principais do método *dogleg* são apresentados no Algoritmo 7. Como se

pode perceber, o custo computacional do método é dominado pela resolução do sistema linear para obtenção do passo de Newton, d_N^k .

Algoritmo 7 Método *Dogleg*

- 1: Dados g_k , B_k definida positiva e $\Delta^k > 0$, calcule o passo de Newton d_N^k utilizando (4.26).
 Se $\|d_N^k\| \leq \Delta^k$, retorne $d_D^k = d_N^k$ como solução.
 Caso contrário, vá para o passo 2.
 - 2: Calcule o minimizador irrestrito do modelo na direção oposta ao gradiente, d_I^k , através de (4.27).
 Se $\|d_I^k\| \geq \Delta^k$, retorne $d_D^k = d_C^k$ como solução, em que d_C^k é o ponto de Cauchy (4.19).
 Caso contrário, vá para o passo 3.
 - 3: Utilizando d_N^k e d_I^k obtidos nos passos anteriores, calcule $\bar{\alpha}$ de acordo com (4.31) e retorne $d_D^k = d_I^k + \bar{\alpha}(d_N^k - d_I^k)$ como solução.
-

4.2.2.2 Método do Gradiente Conjugado de Steihaug

O método *dogleg* apresentado anteriormente é uma maneira simples e eficiente para se determinar uma solução aproximada para o subproblema de região de confiança. Sua principal desvantagem, entretanto, é a necessidade de que a matriz Hessiana, B_k , do modelo quadrático, q_k , deve ser definida positiva. Do contrário, o passo de Newton d_N^k pode não ser bem definido ou não produzir uma direção de descida. Esta situação é ilustrada na Figura 4.7, a seguir.

Na Figura 4.7, algumas curvas de nível da função $f(x_1, x_2) = (1 - x_1)^2 + (x_2 - x_1^2)^2$, estão representadas através de linhas contínuas. Escolhe-se o ponto $x^0 = (-1, 2)$ (●) para estabelecer um modelo quadrático, que deve representar a função f na região de confiança de raio $\Delta^0 = 1$, cuja fronteira está representada pela circunferência tracejada em preto. As curvas coloridas tracejadas correspondem a algumas curvas de nível do modelo quadrático em torno de x^0 . Nota-se que as mesmas são hipérboles, e que o modelo quadrático estabelecido, portanto, não possui uma matriz B_0 definida positiva.

Na figura, o passo de Newton leva ao ponto representado por □. Observa-se que a utilização do passo de Newton, mesmo que seja realizada uma busca unidimensional, sempre irá causar um aumento na função objetivo. Por outro lado, a solução quase-exata do subproblema de região de confiança leva ao ponto representado por ○, que possibilita a redução da função objetivo. O ponto $x^* = (1, 1)$, indicado por um ×, corresponde à solução ótima do problema.

Figura 4.7: Passo de Newton ($\square$) e solução quase-exata ($\circ$) para um subproblema de região de confiança com modelo quadrático não-convexo.

Assim, é de grande interesse prático que os métodos aproximados utilizados na resolução do subproblema de região de confiança também sejam capazes de tratar das situações em que o modelo é não-convexo, isto é, B_k não é definida positiva. Uma das possibilidades é a utilização de uma variante do método do gradiente conjugado, proposta por STEIHAUG (1983).

O método do gradiente conjugado clássico, para minimização irrestrita de funções quadráticas convexas em um espaço de dimensão n , se assemelha ao método *dogleg*, no sentido de que uma sequência de pontos $z_0 = 0, z_1, \dots, z_j$ é gerada, a partir da escolha adequada de comprimentos de passo α_j e direções conjugadas p_j . Os pontos z_j definem uma trajetória poligonal, sobre a qual a função quadrática é monotonicamente decrescente. A diferença é que o método *dogleg* minimiza o modelo em uma trajetória com apenas dois segmentos, enquanto que o método do gradiente conjugado o faz em uma trajetória que pode ter diversos segmentos. Em aritmética exata, é possível mostrar que se a matriz simétrica e definida positiva B_k possui ℓ autovalores distintos, então o método do gradiente conjugado clássico obtém a solução ótima $d^* = d_N^k$, isto é, o passo de Newton, em no máximo $j \leq \ell$ iterações (CONN ET AL., 2000).

No método do gradiente conjugado de Steihaug, modificações são realizadas no método do gradiente conjugado clássico, de modo a levar em consideração a restrição de região de confiança e tratar curvaturas negativas. As modificações se baseiam no fato de que, se o modelo é ilimitado inferiormente, então a única segurança na minimização do modelo é a restrição de região de confiança. Por outro lado, quando o modelo é convexo, é

desejável que as modificações realizadas não interfiram no desempenho normal do método do gradiente conjugado.

Conforme apontado em CONN ET AL. (2000), ao aplicar o método do gradiente conjugado para resolver o subproblema de região de confiança (4.7), as seguintes possibilidades podem ocorrer ao gerar um ponto $z_{j+1} = z_j + \alpha_j p_j$:

- (i) $p_j^T B_k p_j > 0$ em todas as iterações j , enquanto todos os iterandos z_j permanecem na região de confiança. Neste caso, a solução aproximada obtida pelo método do gradiente conjugado de Steihaug, d_S^k , corresponde simplesmente ao passo de Newton, pois a restrição de região de confiança não está interferindo na trajetória dos pontos;
- (ii) $p_j^T B_k p_j \leq 0$ em alguma iteração j . Neste caso, o modelo q_k não é estritamente convexo e é ilimitado inferiormente ao longo da reta $z_j + \alpha p_j$. Como se deseja minimizar o modelo, faz sentido reduzir o modelo q_k ao longo de $z_j + \alpha p_j$ o máximo possível até que a fronteira da região de confiança seja alcançada. Assim, neste caso, a solução aproximada é o ponto $d_S^k = z_j + \bar{\alpha} p_j$ tal que $\bar{\alpha}$ é a raiz positiva de $\|z_j + \bar{\alpha} p_j\| = \Delta^k$ [2].
- (iii) $\|z_{j+1}\| > \Delta_k$, isto é, apesar do modelo ser convexo ao longo de $z_j + \alpha p_j$, o valor do comprimento do passo α_j que minimiza o modelo de modo irrestrito ao longo de $z_j + \alpha p_j$ faz com que o ponto $z_{j+1} = z_j + \alpha_j p_j$ abandone a região de confiança. Neste caso, da mesma maneira que no caso anterior, faz sentido encontrar a raiz positiva $\bar{\alpha}$ de $\|z_j + \bar{\alpha} p_j\| = \Delta^k$ e retornar $d_S^k = z_j + \bar{\alpha} p_j$ como solução aproximada.

A terceira possibilidade indicada acima não é tão óbvia. De fato, é lícito questionar se apesar do ponto z_{j+1} violar a restrição de região de confiança, algum iterando subsequente poderia retornar para a região de confiança, de modo que a convergência do método seria comprometida pela interrupção prematura com um ponto na fronteira da região de confiança. O próximo teorema garante que tal situação nunca ocorre.

Teorema 4.2. Suponha que o método do gradiente conjugado é aplicado na minimização do modelo $q_k(d)$, iniciando a partir do ponto $z_0 = 0$, e que $p_j^T B_k p_j > 0$ para $0 \leq j \leq t$. Então os iterandos z_j satisfazem a desigualdade

$$\|z_j\| < \|z_{j+1}\| \quad (4.32)$$

para $0 \leq j \leq t - 1$.

Demonstração. Ver NOCEDAL & WRIGHT (2000) ou CONN ET AL. (2000). □

O Teorema 4.2 garante que, desde que somente curvaturas positivas sejam encontradas no método do gradiente conjugado, a norma dos iterandos é estritamente crescente

[2] A raiz positiva fornece o menor valor para $q_k(z_j + \alpha p_j)$ (CONN ET AL., 2000).

se o método for iniciado com $z_0 = 0$. Portanto, dado um iterando z_j que satisfaz a restrição de região de confiança, se acontecer de z_{j+1} violar a restrição de região de confiança, escolhe-se como solução aproximada para o método do gradiente conjugado o ponto no segmento com extremidades z_j e z_{j+1} que intercepta a fronteira da região de confiança, pois iterandos subsequentes se afastariam da região de confiança, violando ainda mais a restrição.

Em suma, quando o método do gradiente conjugado de Steihaug é aplicado na minimização do modelo $q_k(d)$, começando a partir do ponto $z_0 = 0$, independentemente da matriz B_k ser definida positiva ou se os iterandos permanecem na região de confiança, o método termina com um de três possíveis resultados. Primeiramente, se B_k é definida positiva, o método pode convergir para um ponto no interior da região de confiança (o passo de Newton), se os iterandos não violarem tal restrição. Em segundo lugar, se uma direção de curvatura negativa é encontrada, o método calcula uma solução aproximada útil ao longo desta direção, sobre a fronteira da região de confiança. Por fim, se em algum momento um iterando viola a restrição de região de confiança (ou está sobre a fronteira), iterandos subsequentes não retornam, de modo que não faz sentido continuar gerando novos pontos. Nesta situação, uma solução aproximada é computada intersectando a reta ao longo da direção corrente, a partir do último iterando factível, com a fronteira da região de confiança. Tendo em vista estas observações, o Algoritmo 8 descreve o método do gradiente conjugado de Steihaug.

Algoritmo 8 Método do Gradiente Conjugado de Steihaug

- 1: Escolha uma tolerância $\varepsilon > 0$, o raio da região de confiança, $\Delta^k > 0$, bem como o vetor g_k e a matriz simétrica B_k do modelo q_k .

Faça $z_0 = 0$, $r_0 = g_k$, $p_0 = -r_0$ e $j = 0$.

- 2: Se $\|r_0\| \leq \varepsilon$, então retorne $d_S^k = z_0$ como solução.

Caso contrário, vá para o passo 3.

- 3: Faça $\kappa_j = p_j^T B_k p_j$.

- 4: Se $\kappa_j \leq 0$, então retorne $d_S^k = z_j + \bar{\alpha} p_j$ como solução, em que $\bar{\alpha}$ é a raiz positiva de $\|z_j + \bar{\alpha} p_j\| = \Delta^k$.

Caso contrário, vá para o passo 5.

- 5: Faça $\alpha_j = \frac{r_j^T r_j}{\kappa_j}$.

- 6: Se $\|z_j + \alpha_j p_j\| \geq \Delta^k$, então retorne $d_S^k = z_j + \bar{\alpha} p_j$ como solução, em que $\bar{\alpha}$ é a raiz positiva de $\|z_j + \bar{\alpha} p_j\| = \Delta^k$.

Caso contrário, vá para o passo 7.

- 7: Faça $z_{j+1} = z_j + \alpha_j p_j$ e $r_{j+1} = r_j + \alpha_j B_k p_j$.

- 8: Se $\|r_{j+1}\| \leq \varepsilon \|r_0\|$, retorne $d_S^k = z_{j+1}$ como solução.

Caso contrário, vá para o passo 9.

- 9: Faça $\beta_j = \frac{r_{j+1}^T r_{j+1}}{r_j^T r_j}$ e $p_{j+1} = -r_{j+1} + \beta_j p_j$.

Faça $j = j + 1$ e volte ao passo 3.

Como visto anteriormente, a inicialização $z_0 = 0$ é crucial para o método. Esta inicialização, associada à direção inicial $p_0 = -r_0 = -g_k$, garante que se o método não parar no passo 2, isto é, $\|r_0\| > \varepsilon$, e se $p_0^T B_k p_0 = g_k^T B_k g_k > 0$, tem-se que $\alpha_0 = \frac{g_k^T g_k}{g_k^T B_k g_k}$, de modo que:

$$z_0 + \alpha_0 p_0 = -\frac{g_k^T g_k}{g_k^T B_k g_k} g_k = d_1^k \quad (4.33)$$

Se a condição no passo 6 do Algoritmo 8 se verifica com a direção inicial, isto é, $\|z_0 + \alpha_0 p_0\| \geq \Delta^k$, o algoritmo retorna o ponto de Cauchy como solução, $d_S^k = d_C^k$. Por outro lado, se esta condição não se verifica, então $z_1 = z_0 + \alpha_0 p_0 = d_1^k$, e as iterações subsequentes do método do gradiente conjugado de Steihaug irão obter uma solução d_S^k tal que $q_k(d_S^k) \leq q_k(z_1)$. Por fim, se a condição do passo 4 é ativada na direção inicial, isto é, $p_0^T B_k p_0 = g_k^T B_k g_k \leq 0$, o método também retorna o ponto de Cauchy. De qualquer forma, portanto, o método termina com uma solução d_S^k pelo menos tão boa quanto o ponto de Cauchy, o que é fundamental para a convergência global do método de região de confiança.

4.2.3 Métodos Quase-Exatos

Agora que os métodos *dogleg* e do gradiente conjugado de Steihaug para resolução aproximada dos subproblemas de região de confiança foram discutidos, são apresentadas as ideias básicas dos métodos quase-exatos e, em particular, o método baseado em problemas de autovalores generalizados de ADACHI ET AL. (2017), o qual foi utilizado para obter parte dos resultados numéricos deste trabalho.

O Teorema 4.1, que caracteriza as soluções ótimas globais de um problema de região de confiança, indica que devemos buscar por uma solução d^* e um valor associado $\lambda^* \geq 0$, de modo que as condições (4.15a), (4.15b) e (4.15c) sejam atendidas. Definindo

$$B(\lambda) = B + \lambda I \quad (4.34)$$

tem-se que $d(\lambda)$ é uma solução do sistema linear

$$B(\lambda)d(\lambda) = -g \quad (4.35)$$

para algum valor $\lambda \geq 0$.

A ideia mais elementar para se resolver o conjunto de equações (4.15a), (4.15b) e (4.15c) seria considerar que $d(\lambda) = -B(\lambda)^{-1}g$, e substituí-la na equação $\lambda(\Delta - \|d(\lambda)\|) = 0$, obtendo-se uma equação não-linear na variável λ . Esta última equação, entretanto, não é a mais vantajosa do ponto de vista prático, utilizando-se a forma alternativa dada pela equação (4.18). Além disso, essa estratégia somente funcionaria diante da hipótese de invertibilidade de $B(\lambda)$, a qual não é necessariamente válida. De fato, a singularidade de $B(\lambda^*)$ na solução ótima global do problema de região de confiança indica uma situação

em que possíveis dificuldades podem ocorrer e demanda atenção especial, por exigir que um autovetor apropriado de B seja computado.

4.2.3.1 Soluções exatas na norma Euclidiana

Como B é uma matriz real simétrica, podemos considerar sua decomposição espectral

$$B = V\Lambda V^T \quad (4.36)$$

em que Λ é uma matriz diagonal de autovalores $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ e V é uma matriz ortonormal^[3] cujas colunas são os autovetores correspondentes. Então,

$$B(\lambda) = B + \lambda I = V\Lambda V^T + \lambda VV^T = V(\Lambda + \lambda I)V^T \quad (4.37)$$

Claramente, a partir de (4.15c), conclui-se que na solução ótima do problema de região de confiança $\lambda \geq -\lambda_1$, uma vez que somente assim $B(\lambda)$ será semidefinida positiva, e que se $\lambda > -\lambda_1$ o minimizador global do problema de região de confiança é único, pois teríamos $B(\lambda)$ definida positiva.

Suponhamos, por ora, que $\lambda > -\lambda_1$, de modo que $B(\lambda)$ é definida positiva. Neste caso, o sistema (4.35) possui uma única solução, expressa por

$$d(\lambda) = -B(\lambda)^{-1}g = -V(\Lambda + \lambda I)^{-1}V^Tg \quad (4.38)$$

Esta expressão pode ser escrita como

$$d(\lambda) = -\sum_{i=1}^n \frac{\eta_i}{\lambda_i + \lambda} v_i \quad (4.39)$$

em que $\eta = V^Tg$, η_i é a i -ésima componente do vetor η , e v_i é a i -ésima coluna de V , isto é, o autovetor associado a λ_i .

Além disso, a solução desejada para o problema de região de confiança também deve satisfazer a restrição de região de confiança, dada pela inequação não-linear

$$\|d(\lambda)\| \leq \Delta \quad (4.40)$$

Definindo

$$\delta(\lambda) = \|d(\lambda)\|^2 = \|V(\Lambda + \lambda I)^{-1}V^Tg\|^2 = \|(\Lambda + \lambda I)^{-1}\eta\|^2 = \sum_{i=1}^n \frac{\eta_i^2}{(\lambda_i + \lambda)^2} \quad (4.41)$$

a inequação (4.40) pode ser expressa de modo equivalente por

$$\delta(\lambda) \leq \Delta^2 \quad (4.42)$$

A fim de compreender como as expressões (4.41) e (4.40) podem ser utilizadas para a resolução do problema de região de confiança, consideremos o exemplo de um problema

^[3] Isto significa que $VV^T = V^TV = I_n$.

de região de confiança com modelo convexo, em que

$$g = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

Neste caso, na decomposição espectral de B tem-se simplesmente que $V = I_3$ e $\Lambda = B$, de modo que $\eta = V^T g = g$. Assim, a função $\delta(\lambda)$ para este caso é expressa por:

$$\delta(\lambda) = \frac{1}{(1+\lambda)^2} + \frac{1}{(2+\lambda)^2} + \frac{1}{(4+\lambda)^2} \quad (4.44)$$

cujo gráfico é dado na Figura 4.8.

Figura 4.8: Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo em que o modelo é convexo.

Como se pode notar, esta função é sempre positiva e tende ao infinito quando λ se aproxima dos opostos dos autovalores de B , que são 1, 2 e 4, e tende a 0 quando λ tende ao infinito. Observando a expressão geral (4.41), pode-se entender porque isto ocorre. Primeiramente, cada termo $\frac{\eta_i^2}{(\lambda_i + \lambda)^2}$ é positivo, uma vez que é a razão de dois quadrados, de modo que $\delta(\lambda)$ também é positiva. Cada um dos termos $\frac{\eta_i^2}{(\lambda_i + \lambda)^2}$ tende a 0 quando λ tende ao infinito. Por fim, os denominadores de cada parcela, $(\lambda_i + \lambda)^2$, se anulam quando $\lambda = -\lambda_i$, de modo que $\delta(\lambda)$ tem um pólo nestes valores, desde que $\eta_i \neq 0$. Portanto, pode-se observar que a função $\delta(\lambda)$ pode assumir qualquer valor positivo desejado para um único valor de λ no intervalo $(-\lambda_1, \infty)$. No exemplo, apresentado, $\lambda_1 = 1$, de modo que a função assume qualquer valor positivo no intervalo $(-1, 0)$.

Pode-se utilizar este exemplo para ilustrar o Teorema 4.1. Sabe-se do teorema que, em uma solução ótima, deve-se ter $\lambda \geq 0$, o que reduz a busca à região não-negativa do eixo λ . No caso do exemplo, em que $\delta(\lambda)$ é dada por (4.44), se o raio da região de

confiança for suficientemente grande, tem-se que $\delta(\lambda) < \Delta^2$ para todo $\lambda \geq 0$. À medida em que se reduz a região de confiança, Δ atinge um valor crítico, Δ_{cri} , para o qual, pela primeira vez, $\delta(\lambda) = \Delta_{\text{cri}}^2$. Neste exemplo, isto ocorre no intercepto de $\delta(\lambda)$ com o eixo vertical, isto é, para o valor crítico $\Delta_{\text{cri}}^2 = \delta(0) = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{16} = \frac{21}{16}$, ou seja, $\Delta_{\text{cri}} = \frac{\sqrt{21}}{4}$. A cada valor de Δ menor que o valor crítico, corresponde um único λ que satisfaz as condições do teorema.

Geometricamente, como B é definida positiva, o modelo quadrático possui um único minimizador irrestrito. Para Δ suficientemente grande, este minimizador está no interior da região de confiança, e a solução do problema de região de confiança é simplesmente $d(0) = -B^{-1}g$. Esta situação corresponde ao segmento vertical destacado na Figura 4.8. Reduzindo-se Δ , existe um valor crítico para o qual o minimizador irrestrito do problema se situa exatamente sobre a fronteira da região de confiança. Este valor crítico para Δ está relacionado ao intercepto de $\delta(\lambda)$ com o eixo das ordenadas, e é dado por $\Delta_{\text{cri}} = \sqrt{\delta(0)}$. Para qualquer Δ inferior ao valor crítico, a região de confiança passa a excluir o minimizador irrestrito, e as soluções são obtidas na fronteira da região de confiança para algum valor estritamente positivo de λ , o qual pode ser obtido resolvendo-se a equação

$$\|d(\lambda)\| = \Delta \quad (4.45)$$

Voltemos, agora, a atenção para o caso não-convexo. Para tanto, consideremos um problema de região de confiança em que

$$g = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (4.46)$$

Como no exemplo convexo, na decomposição espectral de B tem-se simplesmente que $V = I_3$ e $\Lambda = B$ e, portanto, $\eta = V^T g = g$. Assim, a função $\delta(\lambda)$ para este caso é expressa por

$$\delta(\lambda) = \frac{1}{(-2 + \lambda)^2} + \frac{1}{(-1 + \lambda)^2} + \frac{1}{(2 + \lambda)^2} \quad (4.47)$$

cujos gráficos são dados na Figura 4.9.

Novamente é possível verificar que $\delta(\lambda)$ é sempre positiva, tende a 0 quando λ tende ao infinito, e possui pólos nos opostos dos autovalores de B , -2 , -1 e 2 . Percebe-se que $\delta(\lambda)$ pode assumir qualquer valor positivo desejado para um único valor de λ no intervalo $(-\lambda_1, \infty)$, entre o maior pólo e o infinito. Para o exemplo considerado, o maior pólo é 2 , que é o oposto do menor autovalor de B , $\lambda_1 = -2$ e, portanto, $B(\lambda) = B + \lambda I$ é definida positiva para $\lambda > 2$. Portanto, para cada $\Delta > 0$, infere-se que há um único valor de $\lambda > 2$ tal que $\delta(\lambda) = \Delta^2$.

Do ponto de vista geométrico, o modelo quadrático é ilimitado inferiormente pois a matriz B é indefinida. Neste caso, conforme discutido previamente, a solução do problema

Figura 4.9: Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo em que o modelo é não-convexo.

deve se situar na fronteira da região de confiança. O minimizador do modelo na região de confiança é dado por (4.35), para algum valor $\lambda > 2$, que pode ser determinado resolvendo a equação (4.45).

Finalmente, deve-se considerar um caso especial, conhecido na literatura como *hard case* (MORE & SORESENSEN, 1983), o qual pode causar dificuldades para os métodos de região de confiança. A fim de ilustrar este caso, consideremos o problema de região de confiança com

$$g = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

Este exemplo é o mesmo do caso anterior, com uma mudança na primeira coordenada de g . Como nos exemplos anteriores, a decomposição espectral de B é tal que $V = I_3$ e $\Lambda = B$. Observa-se, entretanto, que neste caso a primeira coordenada de $\eta = V^T g = g$ é nula, de modo que a função $\delta(\lambda)$ é expressa por

$$\delta(\lambda) = \frac{0}{(-2 + \lambda)^2} + \frac{1}{(-1 + \lambda)^2} + \frac{1}{(2 + \lambda)^2} = \frac{1}{(-1 + \lambda)^2} + \frac{1}{(2 + \lambda)^2} \quad (4.49)$$

cujo gráfico é dado na Figura 4.10.

Neste exemplo, o maior pólo de $\delta(\lambda)$ ocorre em $\lambda = 1 = -\lambda_2$. Assim, apesar de haver uma única raiz para a equação (4.45) entre este pólo e o infinito, isto é, no intervalo $(1, \infty)$, o Teorema 4.1 exige que na solução tenha-se $\lambda \geq 2$. Isto sugere que podem ocorrer dificuldades quando Δ é superior a um valor crítico, Δ_{cri} (neste exemplo, $\Delta_{\text{cri}}^2 = \delta(2) = 1 + \frac{1}{16} = \frac{17}{16}$, ou seja, $\Delta_{\text{cri}} = \frac{\sqrt{17}}{4}$).

Figura 4.10: Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo do *hard case*.

A justificativa para esta situação está relacionada ao desaparecimento do pólo em $\lambda = -\lambda_1$ devido ao valor nulo de η_1 (neste exemplo, $-\lambda_1 = 2$). De modo geral, isto ocorre quando a função $\delta(\lambda)$ deixa de ter um pólo em $-\lambda_1$ porque $\eta_i = 0$ para todos os índices i tais que $\lambda_i = \lambda_1$. Como $\eta_i = v_i^T g$, em que v_i é o autovetor associado a λ_i , pode-se dizer que, geometricamente, esta situação ocorre quando g é ortogonal ao autoespaço, $\mathcal{E}_1$, dos autovetores associados ao menor autovalor de B , λ_1 .

Resta explicar, portanto, como computar um valor adequado de λ quando esta situação ocorre. Enquanto o valor de Δ é menor que o valor crítico $\Delta_{\text{cri}} = \sqrt{\delta(-\lambda_1)}$, existe algum valor λ no intervalo $(-\lambda_1, \infty)$ tal que (4.45) é satisfeita. Por outro lado, quando $\Delta \geq \Delta_{\text{cri}}$, sabemos que não há uma solução para $\lambda \in (-\lambda_1, \infty)$, mas o Teorema 4.1 ainda assegura que a solução global deve ser tal que $\lambda \in [-\lambda_1, \infty)$. Nesta situação, portanto, a única possibilidade é que $\lambda = -\lambda_1$.

A fim de determinar $d(\lambda)$ no *hard case*, não é suficiente excluir de (4.39) os termos para os quais $\lambda_i = \lambda_1$, fazendo $d(\lambda) = - \sum_{i:\lambda_i \neq \lambda_1} \frac{\eta_i}{\lambda_i + \lambda} v_i$. Entretanto, como $B(-\lambda_1) = B - \lambda_1 I$ é singular, existe um vetor z tal que $\|z\| = 1$ e $B(-\lambda_1)z = 0$. Em outras palavras, z é um autovetor de B correspondente ao autovalor λ_1 , isto é, $z \in \mathcal{E}_1$. Devido à ortogonalidade de V , tem-se que $v_i^T z = 0$, para todo i tal que $\lambda_i \neq \lambda_1$. Segue desta propriedade que se considerarmos

$$d(\lambda) = - \sum_{i:\lambda_i \neq \lambda_1} \frac{\eta_i}{\lambda_i + \lambda} v_i + \tau z \quad (4.50)$$

para qualquer escalar τ e pela ortogonalidade dos vetores v_i , tem-se que

$$\|d(\lambda)\|^2 = \sum_{i:\lambda_i \neq \lambda_1} \frac{\eta_i^2}{(\lambda_i + \lambda)^2} + \tau^2 \quad (4.51)$$

de modo que é sempre possível escolher τ de modo que $\|d(\lambda)\|^2 = \Delta^2$. Por construção, portanto, segue que as condições (4.15b) e (4.15c) do Teorema 4.1 são atendidas. Por fim, a condição (4.15a) pode ser verificada facilmente através de álgebra matricial.

Portanto, na ocorrência do *hard case*, além de resolver um sistema singular de equações, é também necessário computar um autovetor de B associado a λ_1 , a fim de obter uma solução. Na prática, é bastante improvável que g seja exatamente ortogonal ao autoespaço $\mathcal{E}_1$. Entretanto, é possível que alguma componente de g neste espaço seja muito pequena, levando a dificuldades numéricas. Por exemplo, considerando o mesmo exemplo do *hard case*, com

$$g = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.52)$$

Neste caso,

$$\delta(\lambda) = \frac{\varepsilon}{(-2 + \lambda)^2} + \frac{1}{(-1 + \lambda)^2} + \frac{1}{(2 + \lambda)^2} \quad (4.53)$$

cujo gráfico é dado na Figura 4.11. Nota-se que, à medida em que ε é reduzido, torna-se mais difícil determinar com precisão soluções para (4.45) para as quais o valor de λ esteja próximo de $-\lambda_1 = 2$.

Figura 4.11: Gráfico de $\delta(\lambda)$ no exemplo, para diferentes valores da primeira coordenada de g , $g_1 = \varepsilon$.

A discussão feita nesta seção é a base para um método numérico bastante conhecido para resolução de problemas de região de confiança, proposto por MORÉ & SORESENSEN (1983). Como este método não foi utilizado neste trabalho, seus detalhes de implementação não serão apresentados. Detalhes sobre ele podem ser encontrados no artigo original de MORÉ & SORESENSEN (1983), ou em livros de PNL, tais como NOCEDAL & WRIGHT (2000) e CONN ET AL. (2000). Na próxima seção é apresentado um método quase-exato para resolução de problemas de região de confiança, baseado em problemas de autovalores generalizados, recentemente proposto por ADACHI ET AL. (2017).

4.2.3.2 Método PAG

Na seção anterior, foi apresentado como um problema de região de confiança pode ser resolvido do ponto de vista teórico, utilizando noções de autovalores. A discussão apresentada é a base para o método de MORÉ & SORESENSEN (1983), o qual utiliza o método de Newton para resolver a equação não-linear (4.18) de modo iterativo. Apesar das ideias apresentadas serem relativamente simples, implementações práticas deste método podem ser bastante intrincadas, devido à exigência de salvaguardas para o método de Newton.

Recentemente, um método de resolução de problemas de região de confiança via Problema de Autovalores Generalizado (PAG) foi proposto por ADACHI ET AL. (2017). Esta abordagem possui como vantagem o fato de obter soluções precisas para o problema de região de confiança resolvendo um único problema de autovalores generalizado, sem a necessidade de iterações externas. Além disso, os autores generalizam esta abordagem para o caso em que a restrição de região de confiança é elipsoidal e detalham como lidar com o *hard case*. Finalmente, o principal atrativo desta abordagem é a simplicidade prática, uma vez que sua estrutura básica pode ser implementada em poucas linhas de código MATLAB.

No trabalho de ADACHI ET AL. (2017), o método PAG foi testado em diversas instâncias de problemas de região de confiança geradas aleatoriamente, mostrando que o mesmo é extremamente competitivo com outras abordagens quase-exatas. Neste trabalho, o objetivo é a utilização deste método como parte de um algoritmo de região de confiança para PNL com restrições de igualdade e desigualdade. Neste sentido, este trabalho pode ser um dos primeiros a verificar a viabilidade da utilização desta abordagem como parte de um algoritmo geral de otimização.

A fim de apresentar o método PAG, consideremos o seguinte problema de região de confiança:

$$\begin{aligned} \min_{d \in \mathbb{R}^n} \quad & q(d) = f + g^T d + \frac{1}{2} d^T B d \\ \text{s.a.} \quad & \|d\|_M \leq \Delta \end{aligned} \tag{4.54}$$

em que $M, B \in \mathbb{R}^n$ são simétricas, $g \in \mathbb{R}^n$, e M é definida positiva. Note que utilizou-se uma restrição de região de confiança definida em uma norma possivelmente elipsoidal, em

que

$$\|d\|_M = \|M^{\frac{1}{2}}d\| = \sqrt{d^T M d} \quad (4.55)$$

Quando o problema de região de confiança é escrito na forma (4.54) suas condições necessárias e suficientes de otimalidade são expressas conforme o teorema a seguir.

Teorema 4.3. Um vetor d^* é uma solução ótima para o problema de região de confiança (4.54) se, e somente se, existe $\lambda^* \geq 0$ tal que:

$$\|d^*\|_M \leq \Delta \quad (4.56a)$$

$$(B + \lambda^* M)d^* = -g \quad (4.56b)$$

$$\lambda^*(\Delta - \|d^*\|_M) = 0 \quad (4.56c)$$

$$(B + \lambda^* M) \text{ é semidefinida positiva.} \quad (4.56d)$$

Além disso, se $(B + \lambda^* M)$ for definida positiva, então o vetor d^* é único.

Demonstração. Ver GAY (1981). □

O Teorema 4.3 nada mais é do que uma generalização do Teorema 4.1, no qual tinha-se que $M = I$. A maioria dos métodos para resolução de problemas de região de confiança considera que $M = I$ e busca uma solução (d^*, λ^*) nas condições do Teorema 4.1 através de um esquema iterativo, durante o qual estimativas para λ^* são atualizadas. De modo geral, o número de iterações destas abordagens é imprevisível. Em contraste com estas abordagens, o método PAG, por não efetuar iterações externas, torna o tempo de execução previsível. Além disso, as dificuldades associadas às abordagens iterativas, como a necessidade de salvaguardas para o método de Newton, simplesmente desaparecem.

A abordagem tradicional para o caso em que $M \neq I$ consiste em tipicamente transformar o problema em um equivalente no qual $M = I$, através da mudança de variável $\hat{d} = M^{\frac{1}{2}}d$. Esta abordagem, entretanto, exige o cálculo da raiz quadrada da matriz M , que pode ser numericamente instável. Além disso, essa transformação pode eliminar a possível estrutura esparsa do problema, tornando-o denso. O algoritmo PAG evita estas situações uma vez que trabalha diretamente com as matrizes B e M , o que permite explorar a esparsidade.

No caso de soluções interiores para (4.54), sabe-se do Teorema 4.3 que se deve ter $\lambda^* = 0$. Portanto, a obtenção de uma solução interior se reduz a determinar a solução do sistema linear $Bd_0 = -g$ para d_0 . Em seguida, verifica-se se a restrição $\|d_0\|_M < \Delta$ é atendida. Se for, então d_0 é candidata a solução interior. Se, além disso, B for definida positiva, então d_0 é de fato a solução para o problema de região de confiança. Por outro lado, se B possui autovalores negativos, então d_0 não é uma solução para o problema de região de confiança. No caso em que B possui um autovalor nulo, a resolução do sistema $Bd_0 = -g$ não é trivial, mas uma solução na fronteira da região de confiança deve existir. Na prática, verificar se B é definida positiva pode ser custoso. Por este motivo, no método

PAG tenta-se simplesmente computar uma solução para $Bd_0 = -g$, mantendo d_0 como candidata se $\|d_0\|_M < \Delta$ e descartando-a caso contrário.

O caso de soluções de fronteira, por outro lado, é mais interessante. As condições (4.56a), (4.56b) e (4.56c) representam as condições de KKT para o problema de região de confiança. Já a condição (4.56d) especifica quais dos vários possíveis multiplicadores KKT correspondem à solução. Conforme explicado a seguir, há até $2n$ possibilidades para tais multiplicadores, e o de interesse é aquele com maior parte real. A fim de discutir este caso, são dadas algumas definições básicas a seguir.

Definição 4.1. Dadas duas matrizes $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$, então o conjunto de todas as matrizes da forma $A - \lambda B$, com $\lambda \in \mathbb{C}$ é chamado de feixe matricial (*matrix pencil*). A matriz $A - \lambda B$ será denotada por (A, B) .

Definição 4.2. Os autovalores generalizados de $A - \lambda B$ são os elementos do conjunto $\lambda(A, B)$ definido por

$$\lambda(A, B) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \det(A - \lambda B) = 0\} \quad (4.57)$$

Se λ é um autovalor generalizado de (A, B) e $0 \neq v \in \mathbb{C}^n$ satisfaz

$$Av = \lambda Bv \quad (4.58)$$

então v é um autovetor generalizado de $A - \lambda B$. O problema de determinar soluções não-triviais para (4.58) é chamado de problema de autovalores generalizado.

Definição 4.3. O feixe matricial (A, B) é chamado regular se $P(\lambda) = \det(A - \lambda B)$ não é um polinômio identicamente nulo. Caso contrário, é chamado de singular.

Algumas observações devem ser feitas, em se tratando do problema de autovalores generalizado. Primeiramente, o problema de autovalores generalizado tem n autovalores se, e somente se, B é invertível. Por outro lado, se B não é invertível, o conjunto $\lambda(A, B)$ pode ser finito, vazio ou infinito, sendo que este último somente ocorre quando o feixe (A, B) é singular. O feixe de matrizes no qual este trabalho está interessado é regular, de modo que o caso em que $\lambda(A, B)$ é infinito não ocorre.

Quando o feixe (A, B) é regular, duas situações podem ocorrer:

- Se a matriz B não é singular então pode-se verificar, multiplicando (4.58) à esquerda por B^{-1} , que $\lambda(A, B) = \lambda(B^{-1}A, I_n)$, isto é, os autovalores generalizados de (A, B) são finitos e são os mesmos autovalores da matriz $B^{-1}A$.
- Se a matriz B é singular, então o grau do polinômio $P(\lambda) = \det(A - \lambda B)$ é menor do que n , digamos, r . Os r zeros de $P(\lambda)$ são os autovalores do feixe (A, B) . Os autovalores nulos de B são chamados de autovalores no infinito^[4].

^[4]Quando B é singular, deve existir um vetor não-nulo v tal que $Bv = 0$. A nomenclatura autovalor no infinito decorre do fato de que, na equação (4.58), isolando Bv , obtemos $Bv = \frac{1}{\lambda}Av$. Assim, quando λ tende ao infinito, tem-se que $Bv = 0$.

Sabe-se da condição (4.56b) do Teorema 4.3 que, para qualquer multiplicador λ , a menos que a matriz $(B + \lambda M)$ seja singular, pode-se escrever d como uma função de λ da seguinte maneira:

$$d(\lambda) = -(B + \lambda M)^{-1}g \quad (4.59)$$

Uma solução de fronteira deve satisfazer a condição $\|d(\lambda)\|_M = \Delta$. Definindo

$$\delta(\lambda) = \|d(\lambda)\|_M^2 = d(\lambda)^T M d(\lambda) = g^T (B + \lambda M)^{-1} M (B + \lambda M)^{-1} g \quad (4.60)$$

esta condição pode ser reescrita de modo equivalente como

$$\delta(\lambda) - \Delta^2 = 0 \quad (4.61)$$

Agora, considere $B + \lambda M$ como o feixe de matrizes $(B, -M)$. Como M é invertível (pois é definida positiva), o feixe $(B, -M)$ possui n autovalores finitos que coincidem com os autovalores da matriz $-M^{-1}B$. Por outro lado, M e B são simétricas, de modo que $-M^{-1}B$ também o é. Portanto, os autovalores do feixe $(B, -M)$ são n números reais, $\chi_1 \leq \dots \leq \chi_n$.

No caso de regiões de confiança esféricas, vimos que a expressão (4.61) podia ser escrita como uma equação racional em λ . Isto foi possível devido à decomposição espectral da matriz B . Esta mesma ideia não é aplicável ao caso em que M é qualquer matriz simétrica e definida positiva, pois os autoespaços das matrizes B e M podem não coincidir. De fato, se a decomposição espectral de B é $B = V\Lambda V^T$, com V ortonormal, pode ocorrer de $V^T M V$ não ser diagonal. As peças-chave para contornar este problema residem no fato de que as matrizes B e M são simétricas e M é uma matriz definida positiva, conforme indicado no teorema a seguir.

Teorema 4.4. Sejam B e M duas matrizes simétricas de mesma dimensão, com M definida positiva. Então existe uma matriz não-singular W tal que

$$W^T M W = I \quad (4.62)$$

e

$$W^T B W = D \quad (4.63)$$

em que D é uma matriz diagonal. Diz-se que a matriz W diagonaliza B e M simultaneamente por congruência.

Demonstração. Ver EREMENKO (2018). □

Uma consequência imediata deste teorema é que podemos escrever $M = U U^T$ e $B = U D U^T$ para alguma matriz não-singular U (basta tomar $U = (W^{-1})^T$ no Teorema 4.4). Disto, conclui-se que os elementos diagonais da matriz D são os autovalores generalizados do feixe (B, M) . Para concluir isto, basta observar que λ é autovalor generalizado de (B, M) se, e só se, $\det(B - \lambda M) = \det(U D U^T - \lambda U U^T) = \det(U(D - \lambda I)U^T) = \det(U) \cdot \det(D - \lambda I) \cdot \det(U^T) = [\det(U)]^2 \cdot \det(D - \lambda I) = 0$. Como U não é singular, pode-se

dizer, portanto, que λ é autovalor generalizado de (B, M) se, e só se, $\det(D - \lambda I) = 0$, isto é, se λ é um elemento diagonal de D . Em suma, os elementos diagonais de D são os autovalores generalizados do feixe (B, M) .

Seja W a matriz que diagonaliza B e M simultaneamente por congruência. A fim de obter uma expressão racional para $\delta(\lambda)$, estamos interessados em diagonalizar o feixe $(B, -M)$, o que pode ser feito de modo natural utilizando a matriz W :

$$\begin{aligned} W^T(B, -M)W &= W^T(B + \lambda M)W \\ &= W^T(B + \lambda M)W \\ &= W^T B W + \lambda W^T M W \\ &= D + \lambda I \end{aligned} \tag{4.64}$$

Como D é uma matriz cuja diagonal são os autovalores do feixe (B, M) , e os autovalores do feixe (B, M) são, obviamente, os opostos dos autovalores do feixe $(B, -M)$, tem-se que $D = -\text{diag}(\chi_1, \dots, \chi_n)$. Da equação (4.64), segue que

$$(B + \lambda M)^{-1} = W(D + \lambda I)^{-1}W^T \tag{4.65}$$

Substituindo (4.65) em (4.60), obtém-se:

$$\begin{aligned} \delta(\lambda) &= g^T (B + \lambda M)^{-1} M (B + \lambda M)^{-1} g \\ &= g^T W (D + \lambda I)^{-1} \underbrace{W^T M W}_I (D + \lambda I)^{-1} W^T g \\ &= g^T W (D + \lambda I)^{-1} (D + \lambda I)^{-1} W^T g \\ &= \|(D + \lambda I)^{-1} W^T g\|^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\eta_i^2}{(\lambda - \chi_i)^2} \end{aligned} \tag{4.66}$$

em que $\eta = W^T g$ e η_i é a i -ésima componente de η . Nota-se que a expressão (4.66) é similar à equação (4.41) obtida para o caso de regiões de confiança definidas na norma Euclidiana.

Portanto, a equação (4.61) pode ser reduzida ao cálculo das soluções de uma equação racional. Como os denominadores estão elevados ao quadrado, esta equação possui $2n$ soluções em $\mathbb{C}$, incluindo multiplicidades, e é possível que todas sejam reais. Entretanto, conforme já explicado na seção anterior, não é conveniente a resolução da equação (4.61), pois o método resultante pode ser impreciso, além de exigir o cálculo de W .

Em vez de utilizar o método de Newton para resolver alguma forma equivalente de (4.61), o método PAG obtém a solução do problema de região de confiança calculando os autovalores de um dentre dois possíveis feixes particulares de matrizes. O primeiro é o feixe $(2n + 1) \times (2n + 1)$ dado por

$$F(\lambda) = \begin{pmatrix} \Delta^2 & 0_{1 \times n} & g^T \\ 0_{n \times 1} & -M & B + \lambda M \\ g & B + \lambda M & 0_{n \times n} \end{pmatrix} \tag{4.67}$$

O segundo é o feixe $2n \times 2n$, expresso por

$$\tilde{F}(\lambda) = \begin{pmatrix} -M & B + \lambda M \\ B + \lambda M & -\frac{gg^T}{\Delta^2} \end{pmatrix} \quad (4.68)$$

Em seu trabalho, ADACHI ET AL. (2017) estudaram as propriedades destes feixes de matrizes. Em especial, foi provado que os autovalores generalizados destes feixes incluem os valores de λ satisfazendo as condições de KKT para o problema de região de confiança e que a solução ótima global do problema de região de confiança, (λ^*, d^*) , pode ser obtida determinando o autovalor de maior parte real e seu autovetor associado. Estes resultados são apresentados a seguir.

Lema 4.2. Para quaisquer (λ, d) satisfazendo $(B + \lambda M)d = -g$ e $\|d\|_M = \Delta$, tem-se que $\det F(\lambda) = \det \tilde{F}(\lambda) = 0$, isto é, λ é autovalor generalizado de $F(\lambda)$ e $\tilde{F}(\lambda)$.

Demonstração. Ver ADACHI ET AL. (2017). □

Pode-se verificar que ambos os feixes $F(\lambda)$ e $\tilde{F}(\lambda)$ são regulares. Desta forma, o número de autovalores generalizados dos mesmos é finito, sendo $2n + 1$ e $2n$, respectivamente, sendo que $2n$ deles coincidem com as raízes da equação racional (4.61). Cabe observar que $2n$, o número de linhas e colunas do feixe $\tilde{F}(\lambda)$, é o menor possível, já que a equação racional pode ser reduzida a uma equação polinomial de grau $2n$, que possui $2n$ soluções.

O Lema 4.2 indica que uma solução de fronteira do problema de região de confiança satisfaz $\det F(\lambda) = \det \tilde{F}(\lambda) = 0$, sendo que ambas igualdades podem ser interpretadas como um problema de autovalores generalizado. O conjunto de autovalores λ destes problemas contém os multiplicadores de Lagrange nos pontos KKT, de modo que o multiplicador para a solução global do problema de região de confiança deve ser um dos $2n$ autovalores finitos.

Teorema 4.5. Para uma solução (λ^*, d^*) na fronteira $\|d\|_M = \Delta$ do problema de região de confiança satisfazendo as condições (4.56), o multiplicador λ^* é igual ao maior autovalor real de $F(\lambda)$ (excluindo o autovalor no infinito) e $\tilde{F}(\lambda)$, e $\lambda^* \in [\chi_n, \infty)$, onde χ_n é o maior autovalor do feixe $B + \lambda M$.

Demonstração. Ver ADACHI ET AL. (2017). □

O próximo resultado indica como é possível recuperar a solução d^* do problema de região de confiança a partir do maior autovalor real λ^* dos feixes $F(\lambda)$ e $\tilde{F}(\lambda)$.

Teorema 4.6. Os autovetores de $F(\lambda)$ e $\tilde{F}(\lambda)$ para o maior autovalor real $\lambda = \lambda^*$ correspondem um-a-um da seguinte maneira:

$$\tilde{F}(\lambda^*) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = 0 \Leftrightarrow F(\lambda^*) \begin{pmatrix} -\frac{1}{\Delta^2} g^T y_2 \\ y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.69)$$

Além disso, se $g^T y_2 \neq 0$, então uma solução d^* para o problema de região de confiança pode ser obtida por

$$d^* = -\frac{\Delta^2}{g^T y_2} y_1 \quad (4.70)$$

Demonstração. Ver ADACHI ET AL. (2017). $\square$

O Teorema 4.6 indica que a solução do problema de região de confiança pode ser recuperada utilizando o autovetor generalizado dos feixes $F(\lambda)$ ou $\tilde{F}(\lambda)$ correspondente a λ^* , desde que $g^T y_2 \neq 0$. Entretanto, a fim de evitar imprecisões numéricas, na prática pode-se utilizar a seguinte expressão para calcular d^* :

$$d^* = -\operatorname{sgn}(g^T y_2) \Delta \frac{y_1}{\|y_1\|_M} \quad (4.71)$$

em que sgn denota a função sinal.

Proposição 4.1. Os autovalores generalizados com maior parte real de $F(\lambda)$ e $\tilde{F}(\lambda)$ (excluindo ∞) são ambos reais e iguais a λ^* .

Demonstração. Ver ADACHI ET AL. (2017). $\square$

A Proposição 4.1, apesar de simples, possui grandes implicações práticas. Isto porque alguns *solvers* utilizados para o cálculo de autovalores podem se beneficiar da informação de que não há outros autovalores complexos à direita de λ^* no plano complexo. Este é o caso, por exemplo, do algoritmo de Arnoldi, que permite calcular autovalores extremos de matrizes esparsas.

Resta, entretanto, determinar como proceder na situação em que $g^T y_2 = 0$, uma vez que neste caso a solução d^* não pode ser recuperada utilizando o Teorema 4.6. Por outro lado, o Teorema 4.5 e a Proposição 4.1 ainda garantem que λ^* é o autovalor com maior parte real do feixe $\tilde{F}(\lambda)$. Este caso é o análogo do *hard case* para problemas de região de confiança esféricas.

Proposição 4.2. Nas condições do Teorema 4.6, $g^T y_2 = 0$ somente se $\lambda^* = \chi_n$.

Demonstração. Ver ADACHI ET AL. (2017). $\square$

A Proposição 4.2 apenas generaliza um fato já explicado anteriormente para regiões de confiança esféricas. Na norma Euclidiana, o *hard case* somente pode ocorrer quando $B + \lambda^* I$ é uma matriz singular, isto é, λ^* coincide com $-\lambda_1$, o oposto do menor autovalor de B . No *hard case* do caso geral, algo semelhante ocorre: o valor de λ^* deve ser igual ao maior autovalor generalizado do feixe $(B, -M)$, χ_n . Além disso, na demonstração desta proposição, verifica-se que se $g^T y_2 = 0$, então $y_1 = 0$, de modo que $\|y_1\|$ pode ser utilizada como critério para detecção do *hard case*.

Portanto, pode-se dizer que o problema de região de confiança (4.54) está no *hard case* quando $\lambda^* = \chi_n$, o maior autovalor do feixe $B + \lambda M$. Esta condição implica que

$g \perp \mathcal{N}(B + \lambda^* M)$, isto é, g é ortogonal aos autovetores correspondentes ao maior autovalor generalizado do feixe $B + \lambda M$.

Conforme explicado no caso de regiões de confiança esféricas, o desafio do *hard case* consiste em determinar uma solução d^* para o sistema indeterminado $(B + \lambda^* M)d^* = -g$ com $\|d^*\|_M = \Delta$. Uma forma de fazer isto para determinar a solução d^* no *hard case* é dada pelo Teorema 4.7, a seguir.

Teorema 4.7. Suponha que o problema de região de confiança (4.54) pertence ao *hard case*, que (λ^*, d^*) satisfaz as condições (4.56b), (4.56c) e (4.56d) e $\|d^*\|_M = \Delta$, com $\lambda^* = \chi_n$. Seja $d = \dim(\mathcal{N}(B + \lambda^* M))$ e $V = (v_1 \cdots v_n)$ uma matriz cujas colunas formam uma base B -ortogonal para $\mathcal{N}(B + \lambda^* M)$, isto é, $V^T B V = I_d$. Para um valor $\alpha > 0$ arbitrário, defina

$$H = B + \lambda^* M + \alpha \sum_{i=1}^d B v_i v_i^T B \quad (4.72)$$

Então H é definida positiva. Além disso, $q = -H^{-1}g$ é a solução de M -norma mínima para o sistema linear $(B + \lambda^* M)d = -g$, isto é,

$$q = \arg \min_{d \in \mathbb{R}^n} \{\|d\|_M \mid (B + \lambda^* M)d = -g\} \quad (4.73)$$

Mais que isso, para qualquer vetor não-nulo $v \in \mathcal{N}(B + \lambda^* M)$, existe um escalar $\eta \in \mathbb{R}$ tal que $d^* = q + \eta v$ é uma solução do problema de região de confiança.

Demonstração. Ver ADACHI ET AL. (2017). □

O Teorema 4.7 indica que, na ocorrência do *hard case* uma solução para o problema de região de confiança ainda pode ser calculada. Para tanto, é necessário determinar uma base B -ortogonal V para o núcleo de $B + \lambda^* M$, formar a matriz definida positiva H em (4.72), e resolver o sistema linear $Hq = -g$ para q . Finalmente, um valor η pode ser facilmente encontrado resolvendo a equação quadrática $\|q + \eta v\|_M^2 = \Delta^2$, de modo que a solução desejada é $d^* = q + \eta v$. Nota-se que esta forma de construir a solução também se assemelha àquela do *hard case* na norma Euclidiana. O processo descrito para resolução do *hard case*, portanto, é dado no Algoritmo 9.

Algoritmo 9 Algoritmo para o *hard case* no método PAG

- 1: Calcule os autovetores generalizados do feixe $(B, -M) = B + \lambda M$ correspondentes a λ^* (isto é, os vetores do núcleo de $B + \lambda^* M$).
 - 2: Calcule $q = -H^{-1}g$.
 - 3: Tome um dos autovetores $v \in \mathcal{N}(B + \lambda^* M)$ calculados anteriormente, e determine $\eta \in \mathbb{R}$ tal que $\|q + \eta v\|_M^2 = \Delta^2$.
 - 4: Retorne $d_1 = q + \eta v$ como candidata a solução global do problema de região de confiança.
-

Finalmente, o pseudocódigo completo do método PAG é dado no Algoritmo 10.

Algoritmo 10 Algoritmo do método PAG

- 1: Resolva $Bd_0 = -g$ para d_0 , armazenando-o se ele satisfizer $\|d_0\|_M < \Delta$.
 - 2: Calcule o autovalor generalizado de maior parte real, λ^* , do feixe $\tilde{F}(\lambda)$ e um autovetor $\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$ tal que

$$\begin{pmatrix} -M & B \\ B & -\frac{gg^T}{\Delta^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = -\lambda^* \begin{pmatrix} 0 & M \\ M & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (4.74)$$
 - 3: Se $\|y_1\| \leq \varepsilon_{\text{HC}}$, em que ε_{HC} é a tolerância adotada para a detecção do *hard case*, utilize o Algoritmo 9 para obter d_1 . Caso contrário, faça $d_1 = -\text{sgn}(g^T y_2) \Delta \frac{y_1}{\|y_1\|_M}$.
 - 4: A solução d^* é ou d_1 ou d_0 (se tiver sido armazenada), sendo aquela com menor valor da função objetivo.
-

Na implementação realizada, considerou-se que $\varepsilon_{\text{HC}} = 10^{-4}$. No trabalho de ADACHI ET AL. (2017) é sugerido que o valor ε_{HC} seja ajustado dinamicamente, de acordo com o *gap* estimado entre λ^* e os outros autovalores, utilizando um método de potências para estimar o *gap*. Entretanto, por simplicidade de implementação, este procedimento não foi adotado neste trabalho.

Capítulo 5

Método de Newton com Programação Linear

Neste capítulo são apresentados alguns aspectos teóricos e práticos de um método recentemente proposto na literatura por FACCHINEI ET AL. (2013). Este método, chamado de método de Newton com Programação Linear (Newton-PL), é um método do tipo Newton desenvolvido para a resolução de sistemas restritos de equações. Sob determinadas hipóteses, que não incluem diferenciabilidade ou unicidade local das soluções, o método Newton-PL converge quadraticamente para a solução do sistema restrito de equações, superando uma das principais limitações dos métodos do tipo Newton.

Além de convergir quadraticamente sob hipóteses razoavelmente fracas, o método Newton-PL possui outras vantagens: é capaz de resolver sistemas de equações em que o número de equações não é igual ao número de variáveis, sistemas não-lineares com equações de complementaridade e sistemas não-lineares cujas equações são suaves por partes.

Detalhes visando a convergência global e implementação prática apontados em FISCHER ET AL. (2016), bem como modificações algorítmicas para a aplicação deste método a problemas com outras características também são propostas e discutidas neste capítulo. Em particular, é mostrado como esta abordagem pode ser utilizada para a resolução de sistemas KKT associados a problemas de PNL. Adicionalmente, uma proposta para o tratamento das variáveis discretas em sistemas restritos de equações, através de uma modificação na estrutura dos subproblemas de PL, tornando-os problemas de Programação Linear Inteira Mista (PLIM) também é delineada. Finalmente, resultados numéricos utilizando esta abordagem para a resolução da relaxação contínua do problema de FPOR são apresentados.

5.1 Método Newton-PL

A solução numérica de sistemas restritos de equações da forma

$$F(\omega) = 0, \quad \omega \in \Omega \quad (5.1)$$

onde $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ é um conjunto não-vazio e fechado e $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ é uma função contínua, é de importância crucial em diversas aplicações práticas. Exemplos incluem cálculos de fluxos de carga e sistemas KKT que surgem naturalmente ao escrever as condições de otimalidade para problemas de otimização, tais como o problema de FPO.

O caso mais conhecido do sistema restrito de equações (5.1) ocorre quando $n = m$ e $\Omega = \mathbb{R}^n$, o que corresponde à solução de um sistema quadrado de equações, isto é, no qual o número de equações é igual ao número de incógnitas. Algoritmos para esta situação frequentemente se baseiam no método de Newton clássico, devido à sua rápida convergência quando o iterando inicial está em uma vizinhança apropriada da solução.

No cálculo do fluxo de carga de uma rede elétrica, é necessário levar em consideração que algumas variáveis de controle, tais como injeções de potência reativa nas barras de geração, magnitudes de tensão, e *taps* dos transformadores, devem ser mantidos dentro de seus respectivos limites operacionais. Como o método de Newton clássico assume que $\Omega = \mathbb{R}^n$, ferramentas para o cálculo do fluxo de carga normalmente são compostas por dois ciclos: um ciclo interno no qual o método de Newton é aplicado para a redução dos *mismatches* de potência, e um ciclo externo para checagem das variáveis de controle e garantir que limites não sejam violados. Entretanto, conforme apontado no Capítulo 1, quando alguma das restrições associada a limites de operação não é atendida, a convergência geralmente é mais lenta e há a possibilidade de divergência do algoritmo.

Em se tratando do problema de FPO, diversas abordagens dependem da resolução de um sistema restrito de equações. Em particular, os métodos do tipo primal-dual de pontos interiores resolve uma sequência de sistemas KKT perturbados, por meio de um parâmetro de barreira, utilizando o método de Newton (CAPITANESCU ET AL., 2007). Uma peça-chave para esta classe de métodos é a perturbação das condições de complementaridade, as quais podem representar um problema para o método de Newton clássico se forem tratadas de modo imprudente.

A título de exemplo, se $xy = 0$ é uma equação de um sistema de equações não-lineares, então a equação correspondente ao utilizar o método de Newton, em uma iteração k , é da forma $y^k \Delta x^k + x^k \Delta y^k = -x^k y^k$. Suponhamos, sem perda de generalidade, que um dos iterandos se anule, digamos $x^k = 0$ e $y^k \neq 0$. Então, a equação se tornará $y^k \Delta x^k = 0$, o que implicará em $\Delta x^k = 0$. Consequentemente, a variável x deixará de ser atualizada, e o método poderá estagnar sem atingir a solução. Por outro lado, se $x^k = 0$ e $y^k = 0$, então a matriz Jacobiana não terá posto completo, o que também pode levar a dificuldades numéricas. Assim, de qualquer modo, o método de Newton está propenso a falhar quando

equações de complementaridade estão presentes no sistema de equações.

A seguir, são apresentados os detalhes do método Newton-PL para resolução de sistemas restritos de equações, conforme proposto por FACCHINEI ET AL. (2013) e estendido por FISCHER ET AL. (2016). Quando comparado ao método de Newton clássico, o método Newton-PL possui várias vantagens: é capaz de resolver sistemas de equações com $n \neq m$, $\Omega \neq \mathbb{R}^n$, equações de complementaridade e equações suaves por partes, além de convergir quadraticamente para a solução sob hipóteses razoavelmente fracas.

Conforme será apresentado, nesta abordagem as direções de busca não são obtidas por meio da resolução de um sistema linear, mas sim resolvendo um problema de PL, o que pode ser uma desvantagem se tais problemas não forem resolvidos de modo eficiente. Além disso, pode-se dizer que esta abordagem se assemelha aos métodos de região de confiança discutidos no Capítulo 4, uma vez que a direção de busca é obtida resolvendo um subproblema de otimização mais simples. Esta semelhança, entretanto, restringe-se apenas a este aspecto, uma vez que a estratégia de globalização aqui apresentada segue o trabalho de FISCHER ET AL. (2016), o qual utiliza busca linear.

5.1.1 Descrição Geral do Método

No método de Newton clássico tem-se que $n = m$ e $\Omega = \mathbb{R}^n$ em (5.1), e a cada iteração k calcula-se uma direção de busca $\Delta\omega^k$ resolvendo-se o sistema linear

$$JF(\omega^k)\Delta\omega^k = -F(\omega^k) \quad (5.2)$$

em que $JF(\omega^k)$ denota a matriz Jacobiana de F avaliada em ω^k . Em seguida, as variáveis são atualizadas utilizando a direção computada.

Entretanto, nos casos em que $n \neq m$ ou Ω é um subconjunto próprio do $\mathbb{R}^n$, a aplicação do método de Newton não é direta. De fato, conforme apontado por FACCHINEI ET AL. (2013), a adição da condição $\omega \in \Omega$ a um sistema de equações da forma $F(\omega) = 0$, conforme (5.1), é um objeto de pesquisa que ainda se encontra em sua infância.

Curiosamente, a limitação da busca por soluções de um sistema de equações a um subconjunto Ω tem importância óbvia em diversas aplicações: por exemplo, sabe-se de antemão que, ao resolver um sistema KKT, os multiplicadores de Lagrange associados às restrições de desigualdade devem ser não-negativos. Outro exemplo seria o problema de fluxo de carga, no qual $F(\omega)$ pode representar as equações de balanço de potência, enquanto Ω pode representar as restrições relativas a limites operacionais.

Tendo em vista este aspecto, FACCHINEI ET AL. (2013) propuseram um novo algoritmo, com rápida convergência local, para a resolução de sistemas restritos de equações. Neste algoritmo, dado um iterando $\omega^k \in \Omega$, a direção de busca utilizada para atualizar as variáveis, d^k , é calculada resolvendo o seguinte subproblema de otimização nas variáveis

$(d, \gamma) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$:

$$\min \quad \gamma \tag{5.3a}$$

$$\text{s.a.} \quad \|F(\omega^k) + G(\omega^k)d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\|^2 \tag{5.3b}$$

$$\|d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\| \tag{5.3c}$$

$$\omega^k + d \in \Omega \tag{5.3d}$$

$$\gamma \geq 0 \tag{5.3e}$$

onde $G(\omega^k)$ denota a matriz Jacobiana de F em ω^k (ou uma matriz Jacobiana generalizada apropriada, se F não for diferenciável).

De um ponto de vista teórico, qualquer norma pode ser utilizada em (5.3) bem como qualquer conjunto fechado Ω . Entretanto, neste capítulo, assume-se que $\|\cdot\|$ denota a norma ℓ_∞ e que Ω é um conjunto poliedral. Sob estas condições (5.3) é reduzido a um simples problema de PL (daí o nome Newton-PL) que pode ser resolvido de modo eficiente através de diversos *solvers* disponíveis. Estas condições englobam a maioria das aplicações práticas, inclusive as de interesse neste trabalho.

Em FACCHINEI ET AL. (2013), os autores provaram que (5.3) possui uma solução para qualquer $\omega^k \in \mathbb{R}^n$ e que o valor ótimo do subproblema é nulo se, e somente se, ω^k é uma solução de (5.1). Devido a este resultado, o Algoritmo 11 a seguir está bem-definido para qualquer escolha de ponto inicial ω^0 . Além disso, apesar do subproblema (5.3) não possuir necessariamente uma única solução com relação às variáveis ω , é suficiente que o algoritmo tome uma solução arbitrária para o subproblema.

Algoritmo 11 Método Newton-PL

- 1: Escolha um ponto inicial $\omega^0 \in \Omega$. Faça $k = 0$.
 - 2: Se $F(\omega^k) = 0$, então retorne ω^k como solução.
 - 3: Resolva (5.3) para obter (d^k, γ^k) e faça $\omega^{k+1} = \omega^k + d^k$.
 - 4: Faça $k = k + 1$ e volte para o Passo 2.
-

Além de propor este algoritmo, FACCHINEI ET AL. (2013) também discutem, em detalhes, as hipóteses sob as quais a convergência quadrática local do método Newton-PL é garantida. Em particular, os autores mostram que algumas condições comumente empregadas na literatura para estabelecer a convergência local de métodos do tipo Newton implicam nas hipóteses por eles utilizadas. Os autores também investigam do ponto de vista teórico condições suficientes para que tais hipóteses sejam satisfeitas, bem como a aplicabilidade do algoritmo proposto na resolução de sistemas KKT e problemas de complementaridade. Esta discussão teórica, entretanto, está além do escopo deste trabalho, e não será aqui apresentada.

5.1.2 Busca Unidimensional

Apesar de bem definido, assim como o método de Newton clássico, o método Newton-PL descrito no Algoritmo 11 pode divergir se o iterando inicial não estiver em uma vizinhança apropriada da solução desejada. Isto ocorre porque o esquema iterativo apresentado não é composto por nenhuma estratégia de globalização.

Visando aumentar a robustez do método Newton-PL, FISCHER ET AL. (2016) propuseram um esquema de globalização no qual, a cada iteração k , uma busca unidimensional com *backtracking* é realizada, visando reduzir o valor da função de mérito natural $\|F(\omega)\|$. Em particular, os autores mostram que o algoritmo modificado é bem-definido e que todo ponto de acumulação da sequência gerada satisfaz as condições necessárias de otimalidade de primeira ordem do problema de otimização

$$\begin{aligned} \min \quad & \|F(\omega)\| \\ \text{s.a.} \quad & \omega \in \Omega \end{aligned} \tag{5.4}$$

Um resultado de globalização deste tipo é o esperado neste contexto, no qual uma função de mérito é utilizada como forma de medir o progresso em direção à solução. Observe que a estratégia de globalização não garante que uma solução satisfazendo $F(\omega) = 0$ seja encontrada, mas sim uma solução que minimiza localmente a medida de violação $\|F(\omega)\|$, com $\omega \in \Omega$. De fato, a garantia de uma solução $F(\omega) = 0$ não pode ser garantida de modo geral, pois existem sistemas restritos de equações que simplesmente não possuem soluções.

Por outro lado, é possível que o método Newton-PL gere uma sequência de iterandos que convirja para um ponto satisfazendo as condições necessárias de otimalidade de primeira ordem do problema (5.4) com $F(\omega) \neq 0$, mesmo que exista uma solução com $F(\omega) = 0$. Esta situação não é uma deficiência específica do método Newton-PL, mas uma característica de diversos métodos que se baseiam na minimização de uma norma para atingir a solução de um sistema de equações. Isto ocorre porque, mesmo que exista uma solução para o sistema restrito de equações, encontrá-la minimizando qualquer medida do tamanho do resíduo envolve a resolução de um problema de minimização global que, em geral, é muito difícil de ser resolvido.

Apesar destas possíveis complicações, soluções normalmente são encontradas na prática porque uma boa solução inicial é conhecida de antemão, e a sequência de iterandos produzida pelos algoritmos frequentemente converge para uma solução desejada (CONN ET AL., 2000).

Seja $Z = \{\omega \in \Omega \mid F(\omega) = 0\}$ o conjunto de soluções para (5.1), o qual assumimos ser não-vazio. Define-se a função de mérito natural para este problema como sendo $M : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ expressa por

$$M(\omega) = \|F(\omega)\| \tag{5.5}$$

e a função $\Delta : \Omega - Z \rightarrow \mathbb{R}$ expressa por

$$\Delta(\omega) = -M(\omega)[1 - \gamma(\omega)M(\omega)] \quad (5.6)$$

em que $\gamma(\omega)$ indica o valor ótimo de γ ao resolver o subproblema (5.3) para algum iterando $\omega \in \Omega$.

Devido ao uso da norma ℓ_∞ , a função de mérito M pode não ser diferenciável, mesmo que F o seja. O valor $\Delta(\omega)$ fornece uma estimativa da derivada direcional da função M no ponto $\omega \in \Omega$, ao longo da direção d obtida a partir do subproblema (5.3).

Em um algoritmo de otimização irrestrita para minimização de uma função diferenciável f , uma busca unidimensional inexata tipicamente utiliza a condição de Armijo (4.3) para determinação de um comprimento de passo apropriado. No caso do algoritmo proposto por FISCHER ET AL. (2016), em uma iteração k , a derivada direcional da função de mérito M que se deseja minimizar é substituída pela estimativa $\Delta(\omega^k)$. Assim, utiliza-se a seguinte variante da condição de Armijo para julgar se o comprimento do passo é apropriado ou deve ser reduzido:

$$M(\omega^k + \alpha d^k) \leq M(\omega^k) + \xi \alpha \Delta(\omega^k) \quad (5.7)$$

Com base nesta modificação, o Algoritmo 12 apresenta a versão globalmente convergente do método Newton-PL proposta por FISCHER ET AL. (2016).

Algoritmo 12 Método Newton-PL com Busca Unidimensional

- 1: Escolha $\xi \in (0, 1)$ e $\theta \in (0, 1)$. Escolha um ponto inicial $\omega^0 \in \Omega$. Faça $k = 0$.
 - 2: Se $F(\omega^k) = 0$, então retorne ω^k como solução.
 - 3: Resolva (5.3) para obter (d^k, γ^k) . Se $\Delta(\omega^k) = 0$, então retorne ω^k como solução.
 - 4: Faça $\alpha = 1$. Enquanto a condição (5.7) não for satisfeita, substitua α por $\theta\alpha$, e cheque a condição (5.7) novamente, até que ela seja válida.
 - 5: Faça $\alpha_k = \alpha$ e atualize o iterando por $\omega^{k+1} = \omega^k + \alpha_k d^k$.
 - 6: Faça $k = k + 1$ e volte para o Passo 2.
-

Além de mostrar que esta versão modificada do algoritmo proposto por FACCHINEI ET AL. (2013) é globalmente convergente, FISCHER ET AL. (2016) também mostraram que o passo unitário eventualmente é aceito durante a busca unidimensional, desde que o iterando esteja suficientemente próximo da solução do problema, e $\gamma(\cdot)$ seja limitado superiormente em Ω próximo da solução. Desta forma, o algoritmo proposto preserva a convergência quadrática local do algoritmo original. Apesar do Algoritmo 12 apresentar desempenho satisfatório e possuir boas propriedades de convergência, modificações podem torná-lo mais eficiente na prática. Alguns destes aspectos são discutidos a seguir.

5.1.3 Aspectos Práticos

Um dos aspectos a ser considerado na utilização prática do método Newton-PL está relacionada ao subproblema (5.3) que precisa ser resolvido a cada iteração para calcular

a direção de busca. Em especial, deve-se tomar cuidado com a ordem de grandeza de alguns coeficientes das restrições, os quais podem afetar a forma da região factível e, consequentemente, o desempenho numérico do *solver* utilizado para sua resolução.

Nas iterações iniciais, espera-se que os iterandos não estejam muito próximos da solução do sistema restrito de equações e, portanto, que $\|F(\omega^k)\|$ seja relativamente grande. Como resultado disso, a constante no membro direito da restrição

$$\|d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\| \quad (5.8)$$

pode ser muito pequena quando comparada à do segundo membro da restrição

$$\|F(\omega^k) + G(\omega^k)d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\|^2 \quad (5.9)$$

Em outras palavras, a condição (5.8) é muito restritiva, forçando a obtenção de direções curtas d^k . Uma modificação que pode ajudar a prevenir esta situação, sem afetar a teoria de convergência, é substituir esta restrição por

$$\|d\| \leq \gamma \max\{\|F(\omega^k)\|, \tau_k \|F(\omega^k)\|^2\} \quad (5.10)$$

onde τ_k é um parâmetro escolhido em um intervalo $[\tau_{\min}, \tau_{\max}]$, com $0 < \tau_{\min} < \tau_{\max}$. A seguinte regra, que também foi utilizada neste trabalho, foi proposta por FISCHER ET AL. (2016) para a atualização deste parâmetro:

$$\tau_{k+1} = \begin{cases} \min\{10\tau_k, \tau_{\max}\}, & \text{se } \|d^k\| \geq \gamma_k \max\{\|F(\omega^k)\|, \tau_k \|F(\omega^k)\|^2\} - 10^{-8} \\ \max\{0, 1\tau_k, \tau_{\min}\}, & \text{se } \|d^k\| < \gamma_k \max\{\|F(\omega^k)\|, \tau_k \|F(\omega^k)\|^2\} - 10^{-8} \end{cases} \quad (5.11)$$

com $\tau_0 = 1$, $\tau_{\min} = 1$ e $\tau_{\max} = 10^8$. Em outras palavras, o valor τ_k é aumentado se a restrição modificada (5.10) estava ativa em (d^k, γ_k) , e reduzido caso contrário.

Nos casos em que o *solver* falha em resolver o subproblema devido a problemas numéricos, a mudança de variável

$$\hat{\gamma} = \gamma \|F(\omega^k)\| \quad (5.12)$$

pode tornar o subproblema melhor escalado para resolução. Nestes casos, resolve-se o seguinte subproblema transformado:

$$\min \quad \hat{\gamma} \quad (5.13a)$$

$$\text{s.a.} \quad \|F(\omega^k) + G(\omega^k)d\| \leq \hat{\gamma} \|F(\omega^k)\| \quad (5.13b)$$

$$\|d\| \leq \hat{\gamma} \quad (5.13c)$$

$$\omega^k + d \in \Omega \quad (5.13d)$$

$$\hat{\gamma} \geq 0 \quad (5.13e)$$

Pode-se verificar facilmente que (d^k, γ_k) é solução de (5.3) se, e somente se, $(d^k, \hat{\gamma}_k)$ é solução de (5.13) com $\hat{\gamma}_k = \gamma_k \|F(\omega^k)\|$.

No que diz respeito à busca unidimensional, algumas modificações são úteis para o aperfeiçoamento do método Newton-PL. Em particular, a adoção de uma busca unidimensional não-monótona pode contribuir para reduzir perceptivelmente o número de

iterações necessárias para convergência. Esta modificação pode ser feita substituindo a condição (5.7) por sua versão não-monótona, expressa por

$$M(\omega^k + \alpha d^k) \leq R_k + \xi \alpha \Delta(\omega^k) \quad (5.14)$$

na qual R_k é um valor de referência calculado por

$$R_k = \max\{M(\omega^\ell) \mid \max\{0, k - \nu + 1\} \leq \ell \leq k\} \quad (5.15)$$

e ν é um número inteiro positivo que determina o número de valores anteriores da função de mérito que são utilizados para definir o valor de referência. Quanto maior o valor deste parâmetro, maior é a “memória” da busca unidimensional no que diz respeito aos valores da função de mérito nas iterações anteriores. Cabe notar que, para $\nu = 1$, a busca unidimensional se reduz à busca monótona, uma vez que nesta situação tem-se que $R_k = M(\omega^k)$. Assim, o efeito não-monótono na busca unidimensional ocorre para $\nu \geq 2$.

5.2 Aplicação a Sistemas KKT

Consideremos um problema de PNL da forma:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) \leq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (5.16)$$

em que $x \in \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ($m < n$) e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ são funções de classe C^2 que constituem, respectivamente, a função objetivo, restrições de igualdade e restrições de desigualdade do problema.

As condições necessárias de otimalidade de KKT para este problema podem ser expressas por

$$\begin{cases} \nabla f(x) + Jg(x)^T \lambda + Jh(x)^T \pi = 0 \\ g(x) = 0 \\ h(x) + s = 0 \\ s \circ \pi = 0 \\ s \geq 0, \quad \pi \geq 0 \end{cases} \quad (5.17)$$

em que $s \in \mathbb{R}^p$ é o vetor de variáveis de folga, $\lambda \in \mathbb{R}^m$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade, $\pi \in \mathbb{R}^p$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade e $s \circ \pi$ denota o produto de Hadamard dos vetores s e π .

Fazendo $\omega = (x, s, \lambda, \pi)$ e considerando o conjunto poliedral $\Omega = \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^p \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}_+^p$, estas condições podem ser escritas como um sistema restrito de equações da forma (5.1),

em que

$$F(\omega) = \begin{pmatrix} \nabla f(x) + Jg(x)^T \lambda + Jh(x)^T \pi \\ g(x) \\ h(x) + s \\ s \circ \pi \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

Este sistema restrito de equações pode ser resolvido pelo método Newton-PL, considerando a matriz Jacobiana

$$G(\omega) = \begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(\omega) & 0 & Jg(x)^T & Jh(x)^T \\ Jg(x) & 0 & 0 & 0 \\ Jh(x) & I_p & 0 & 0 \\ 0 & \Pi & 0 & S \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

em que $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda, \pi)$ denota a matriz Hessiana da função Lagrangiana,

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \pi) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j h_j(x) \quad (5.20)$$

em relação às variáveis x , $\Pi = \text{diag}(\pi_1, \dots, \pi_p)$ e $S = \text{diag}(s_1, \dots, s_p)$.

Cabe observar que, na norma ℓ_∞ , o subproblema (5.3) do método Newton-PL pode ser reescrito na forma mais conveniente

$$\begin{aligned} \min_{d, \gamma} \quad & \gamma \\ \text{s.a.} \quad & -\gamma \|F(\omega^k)\|^2 e \leq F(\omega^k) + G(\omega^k)d \leq \gamma \|F(\omega^k)\|^2 e \\ & -\gamma \|F(\omega^k)\| e \leq d \leq \gamma \|F(\omega^k)\| e \\ & \omega^k + d \in \Omega \end{aligned} \quad (5.21)$$

ou, ainda,

$$\begin{aligned} \min_{d, \gamma} \quad & \gamma \\ \text{s.a.} \quad & -G(\omega^k)d - \gamma \|F(\omega^k)\|^2 e \leq F(\omega^k) \\ & G(\omega^k)d - \gamma \|F(\omega^k)\|^2 e \leq -F(\omega^k) \\ & -Id - \gamma \|F(\omega^k)\| e \leq 0 \\ & Id - \gamma \|F(\omega^k)\| e \leq 0 \\ & \omega^k + d \in \Omega \end{aligned} \quad (5.22)$$

em que I é uma matriz identidade de dimensão $n + m + 2p$ e e é um vetor de dimensão $n + m + 2p$ cujas entradas são todas iguais a 1.

Nota-se que todas as restrições são lineares. Em particular, a restrição $\omega^k + d \in \Omega$ é linear, já que Ω é um politopo, podendo ser reescrita como $s^k + d_s \geq 0$ e $\pi^k + d_\pi \geq 0$, em que d_s e d_π são, respectivamente, as componentes da direção d utilizadas para atualizar s e π .

Em se tratando da resolução de sistemas KKT, deve-se atentar para o fato de que as condições necessárias de primeira ordem de KKT podem levar a soluções ótimas que não

são pontos de mínimo local. Ao resolver um sistema restrito de equações deste tipo, pode-se obter pontos estacionários que são pontos de máximo local ou pontos de sela. Algumas abordagens descritas na literatura, como o método de pontos interiores implementado no *solver* IPOPT (WÄCHTER & BIEGLER, 2006), possuem estratégias para modificação da matriz Hessiana da função Lagrangiana, visando gerar direções de busca que conduzam a pontos de mínimo local.

Nos resultados numéricos deste capítulo observou-se que as soluções obtidas apresentam valor ótimo similar ao reportado em outros trabalhos da literatura que resolveram o mesmo problema e, portanto, são condizentes com os esperados para soluções de mínimo local. No entanto, investigações futuras são necessárias no sentido de salvaguardar o método Newton-PL da convergência para pontos estacionários indesejados.

5.3 Investigações Futuras

Nesta seção, são propostas três possíveis modificações para o método Newton-PL. Devido a restrições de tempo, estas modificações não foram implementadas e testadas numericamente quanto à sua viabilidade e, portanto, constituem propostas para investigações futuras.

5.3.1 Tratamento de Variáveis Discretas

O método Newton-PL, descrito anteriormente, pode ser utilizado para resolver sistemas restritos de equações e, em particular, sistemas KKT, tipicamente obtidos em problemas de PNL. Uma condição naturalmente esperada para sua aplicação é que as variáveis do sistema restrito de equações sejam contínuas, uma vez que isto possibilita a aplicação da busca unidimensional sem entraves ou, de modo mais geral, que Ω seja um conjunto convexo.

Uma possibilidade para resolução de sistemas restritos de equações com variáveis discretas, utilizando esta abordagem, seria a aplicação de uma função penalidade, conforme será descrito no Capítulo 6. Entretanto, pode-se pensar na possibilidade de explorar a própria estrutura do método Newton-PL para obter a discretização das variáveis, uma vez que a teoria desenvolvida no artigo original de FACCHINEI ET AL. (2013) exige apenas que Ω seja um conjunto fechado. Neste trabalho, propõe-se a modificação do subproblema utilizado para o cálculo das direções de busca: em vez de se resolver um problema de PL, resolve-se um problema de PLIM quando o sistema restrito de equações possui variáveis discretas.

Por simplicidade de exposição, consideremos que $\omega = (\omega_1, \omega_2)$ é o vetor de variáveis do sistema restrito de equações (5.1), $\omega_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ é o vetor de variáveis contínuas, $\omega_2 \in \prod_{i=1}^{n_2} \mathcal{D}_{\omega_{2,i}} \subset \mathbb{R}^{n_2}$ é o vetor de variáveis discretas, e $\mathcal{D}_{\omega_{2,i}}$ é o conjunto de valores discretos

aceitáveis para a variável $\omega_{2,i}$, com $i = 1, \dots, n_2$. Então, o sistema restrito de equações pode ser escrito como

$$F(\omega) = 0, \quad \omega \in \Omega, \quad \omega_2 \in \prod_{i=1}^{n_2} \mathcal{D}_{\omega_{2,i}} \quad (5.23)$$

Observa-se que esta condição adicional de discretização das variáveis ω_2 não afeta a teoria desenvolvida em FACCHINEI ET AL. (2013), uma vez que o conjunto $\prod_{i=1}^{n_2} \mathcal{D}_{\omega_{2,i}}$ é fechado, e pode ser visto como parte das restrições em Ω . Entretanto, optou-se por escrever estas restrições separadamente, de modo a apresentar com clareza esta proposta de modificação.

Nestas condições, o subproblema do método Newton-PL pode ser escrito como

$$\min_{d, \gamma} \quad \gamma \quad (5.24a)$$

$$\text{s.a.} \quad \|F(\omega^k) + G(\omega^k)d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\|^2 \quad (5.24b)$$

$$\|d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\| \quad (5.24c)$$

$$\omega^k + d \in \Omega \quad (5.24d)$$

$$\omega_2^k + d_{\omega_2} \in \prod_{i=1}^{n_2} \mathcal{D}_{\omega_{2,i}} \quad (5.24e)$$

$$\gamma \geq 0 \quad (5.24f)$$

em que d_{ω_2} denota as componentes da direção d utilizadas para atualizar as variáveis discretas, ω_2 .

Cabe observar que a introdução da restrição (5.24e) faz com que o subproblema não seja mais linear. Entretanto, através da introdução de variáveis binárias auxiliares, podemos escrevê-lo como um problema de PLIM.

Para tanto, assume-se que cada conjunto discreto é finito e da forma $\mathcal{D}_{\omega_{2,i}} = \{a_{i,1}, a_{i,2}, \dots, a_{i,q_i}\}$, para $i = 1, \dots, n_2$, em que q_i denota o número de elementos de $\mathcal{D}_{\omega_{2,i}}$. Então, o subproblema pode ser escrito na seguinte forma equivalente:

$$\min_{d, \gamma, u} \quad \gamma \quad (5.25a)$$

$$\text{s.a.} \quad \|F(\omega^k) + G(\omega^k)d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\|^2 \quad (5.25b)$$

$$\|d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\| \quad (5.25c)$$

$$\omega^k + d \in \Omega \quad (5.25d)$$

$$\omega_{2,i}^k + d_{\omega_{2,i}} = \sum_{j=1}^{q_i} a_{i,j} u_{i,j}, \quad i = 1, \dots, n_2 \quad (5.25e)$$

$$\sum_{j=1}^{q_i} u_{i,j} = 1, \quad i = 1, \dots, n_2 \quad (5.25f)$$

$$u_{i,j} \in \{0, 1\}, \quad i = 1, \dots, n_2, \quad j = 1, \dots, q_i \quad (5.25g)$$

$$\gamma \geq 0 \quad (5.25h)$$

em que $u_{i,j}$ são as variáveis binárias auxiliares.

Esta reformulação da condição de discretização das variáveis é utilizada com frequência em modelos matemáticos que utilizam variáveis inteiras. As condições (5.25e), (5.25f) e (5.25g), em conjunto, são equivalentes à condição (5.24e). Elas visam garantir que a direção de busca produzida sempre leve a um novo iterando que atenda à condição de discretização. Apesar desta proposta se enquadrar na teoria desenvolvida no artigo de FACCHINEI ET AL. (2013), algumas considerações devem ser feitas, tendo em vista futuras implementações computacionais.

A primeira delas diz respeito à sua utilização com a busca unidimensional apresentada anteriormente. Na proposta de busca unidimensional desenvolvida por FISCHER ET AL. (2016), assume-se que Ω é um conjunto poliedral, o que certamente não ocorre quando as variáveis discretas são levadas em consideração. Além disso, ao resolver o PLIM (5.25), obter-se-á uma direção de busca que garante que o próximo iterando satisfaz a condição de discretização, desde que o passo completo seja dado. Isto significa que se a busca unidimensional encurtar o comprimento de passo a ser dado, um ponto que não satisfaz a condição de discretização pode ser obtido. Consequentemente, o algoritmo não estaria bem-definido neste caso, uma vez que ambas as condições $\omega \in \Omega$ e $\omega_2 \in \prod_{i=1}^{n_2} \mathcal{D}_{\omega_2, i}$ devem ser atendidas pelo próximo iterando. Infelizmente, não está claro qual é a melhor solução para remediar esta situação, e é por este motivo que a convexidade de Ω é uma propriedade desejável, o que não ocorre na presença de variáveis discretas.

Uma possibilidade é ignorar temporariamente a natureza discreta destas variáveis, resolvendo o PLIM e atualizando as variáveis com o comprimento de passo determinado pela busca unidimensional. Sabe-se que uma solução para o subproblema existe, desde que o sistema restrito de equações tenha solução, e a direção de busca pode ser computada independentemente do iterando atender a condição de discretização. Entretanto, outras propriedades de convergência não podem ser garantidas, o que é uma possível desvantagem. A vantagem é que, na prática, quando os iterandos adentram uma vizinhança apropriada da solução, frequentemente o passo unitário é adotado. Outra possibilidade é resolver a relaxação contínua do problema utilizando o algoritmo com busca unidimensional, e somente passar a resolver o PLIM quando uma solução com determinada precisão é atingida. Esta opção tem a vantagem de reduzir a custo computacional das iterações iniciais, quando a tolerância necessária para utilização do PLIM ainda não é atingida. Além disso, esta estratégia pode fornecer uma solução suficientemente boa para que o passo unitário seja sempre adotado com a direção obtida a partir do PLIM. A desvantagem é que, novamente, não há garantias de que o passo unitário seja adotado, a menos que a busca unidimensional seja desconsiderada. Outras variantes que combinam estratégias semelhantes às supracitadas também podem ser delineadas.

A segunda consideração a ser feita diz respeito à resolução de problemas de otimização com variáveis discretas. É de suma importância salientar que não existem condições necessárias de otimalidade explícitas, como as condições de KKT, para problemas com

variáveis discretas. A garantia de otimalidade nestes problemas depende de encontrar limitantes inferiores e superiores para a função objetivo, como ocorre em algoritmos do tipo *branch-and-bound*, o que não é uma tarefa fácil em problemas não-convexos. A proposta anterior para resolução de sistemas restritos de equações com variáveis discretas não pode ser aplicada ingenuamente a sistemas KKT, resultantes da aplicação das condições necessárias de otimalidade à relaxação contínua de um problema de PNLIM, na esperança de determinar uma solução discreta. O motivo é simples: é altamente improvável que uma solução discreta seja também solução da relaxação contínua ou, em outras palavras, o sistema KKT, com a condição adicional de discretização, provavelmente não possuirá soluções.

Aqui, novamente, pode-se cogitar algumas possibilidades. A primeira seria aplicar a abordagem proposta, mesmo sabendo que uma solução para o sistema restrito de equações provavelmente não existe. Como a busca unidimensional busca minimizar o valor da função de mérito, poder-se-ia interromper o processo iterativo, retornando como solução um iterando para o qual pouco progresso na redução da função de mérito fosse detectado em iterações sucessivas, desde que a solução obtida também fosse factível. Esta opção carrega uma grande desvantagem que é o fato de não garantir sequer que uma solução factível será obtida, uma vez que o resíduo $\|F(\omega)\|$ provavelmente não convergirá para zero. Uma sugestão para aumentar as chances de obter uma solução factível, neste caso, seria utilizar a solução da relaxação contínua para inicialização. Outra possibilidade seria associar a abordagem proposta ao método de penalidade para discretização que será descrito no Capítulo 6. Para um parâmetro de penalidade suficientemente grande, o problema penalizado apresenta soluções ótimas cujas variáveis discretas estão próximas dos valores discretos permitidos, de modo que o sistema KKT do problema penalizado pode ser considerado factível quando a restrição de discretização é acrescentada (a menos, é claro, da tolerância adotada). Neste sentido, experimentos numéricos são necessários para julgar se esta associação é de fato vantajosa em relação à versão que utiliza apenas o método de penalidade em conjunto com o método Newton-PL para sistemas restritos de equações com variáveis contínuas.

5.3.2 Condições Necessárias de Fritz-John

Recentemente, ALMEIDA & KOCHOLIK (2016) propuseram a resolução de problemas de FPO utilizando uma versão normalizada das condições necessárias de otimalidade de Fritz-John, combinadas às ideias dos métodos de pontos interiores. Dado um problema de PNL da forma

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) \leq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \tag{5.26}$$

em que $x \in \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ($m < n$) e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ são funções de classe C^2 que constituem, respectivamente, a função objetivo, restrições de igualdade e restrições de desigualdade do problema, as condições necessárias de otimalidade de Fritz-John constituem um sistema restrito de equações, expresso por

$$\begin{cases} \pi_0 \nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j \nabla h_j(x) = 0 \\ g(x) = 0 \\ h(x) \leq 0 \\ \pi \circ h(x) = 0 \\ \pi_j \geq 0, \quad j = 0, \dots, p \end{cases} \quad (5.27)$$

em que $\lambda \in \mathbb{R}^m$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade, $\pi \in \mathbb{R}^p$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade, e π_0 é um multiplicador de Lagrange relacionado à função objetivo.

O sistema restrito de equações (5.27) pode ser reescrito na forma

$$\begin{cases} \pi_0 \nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j \nabla h_j(x) = 0 \\ g(x) = 0 \\ h(x) + s = 0 \\ s \circ \pi = 0 \\ s \geq 0 \\ \pi_j \geq 0, \quad j = 0, \dots, p \end{cases} \quad (5.28)$$

em que $s \in \mathbb{R}^p$ são variáveis de folga.

O método de Newton clássico não pode ser aplicado diretamente na busca de uma solução que atenda às equações deste sistema restrito, pois o número de equações é inferior ao número de incógnitas, devido à introdução do multiplicador π_0 para a função objetivo. Esta situação pode ser contornada, introduzindo uma equação de normalização extra no sistema de equações. Em ALMEIDA & KOCHOLIK (2016), duas equações de normalização são apresentadas: a normalização linear-quadrática expressa por

$$\pi_0 + \lambda^T \lambda + e^T \pi = 1 \quad (5.29)$$

em que e é um vetor de dimensão p cujas entradas são todas iguais a 1, e a normalização quadrática expressa por

$$\pi_0^2 + \lambda^T \lambda + \pi^T \pi = 1 \quad (5.30)$$

O objetivo destas normalizações é introduzir uma equação que seja linearmente independente no sistema de equações, de modo a garantir que o número de equações seja igual ao número de incógnitas. Para tratar a condição de não-negatividade das variáveis de folgas, as autoras utilizam uma função barreira logarítmica, e propõem um algoritmo com estrutura similar à dos métodos de pontos interiores, que se baseiam nas condições necessárias de KKT.

A principal vantagem da utilização das condições de Fritz-John é que, em contraste com as condições de KKT, ela continua válida quando os gradientes das restrições são linearmente dependentes na solução ótima. Esta preocupação aparentemente simples ganha maior importância ao considerar que em determinados problemas de otimização, como os de otimização binível, as condições de complementaridade violam a condição de independência linear dos gradientes das restrições em todas as soluções candidatas (ALMEIDA & KOCHOLIK, 2016).

Desta forma, a utilização do método Newton-PL para resolução de um problema de PNL através de sua reformulação por meio das condições necessárias de Fritz-John constitui um assunto a ser investigado. Diferentemente do método de Newton clássico, pode-se considerar a aplicação direta do método Newton-PL ao sistema restrito de equações (5.28), sem utilização obrigatória de alguma normalização. Entretanto, o emprego de uma normalização provavelmente também possui efeito benéfico no contexto do método Newton-PL, uma vez que evita a ocorrência de soluções duais múltiplas e não-isoladas.

5.3.3 Região de Confiança

No trabalho de FISCHER ET AL. (2016), a convergência global do método Newton-PL é atingida mediante a utilização de um procedimento de busca unidimensional com uma função de mérito. Conforme destacado no Capítulo 4, uma estratégia alternativa para a globalização de algoritmos de otimização são as regiões de confiança.

É natural, portanto, considerar possíveis extensões do algoritmo Newton-PL que utilizem regiões de confiança. Assim como na proposta para tratamento das variáveis discretas, pode-se pensar em modificar o subproblema do método, de modo a incluir uma restrição de região de confiança adicional. Em particular, considerando uma restrição de região de confiança na norma ℓ_∞ , o subproblema continuará sendo um problema de PL.

Tendo em vista esta modificação, tem-se um subproblema da forma:

$$\min \quad \gamma \tag{5.31a}$$

$$\text{s.a.} \quad \|F(\omega^k) + G(\omega^k)d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\|^2 \tag{5.31b}$$

$$\|d\| \leq \gamma \|F(\omega^k)\| \tag{5.31c}$$

$$\|d\| \leq \Delta^k \tag{5.31d}$$

$$\omega^k + d \in \Omega \tag{5.31e}$$

$$\gamma \geq 0 \tag{5.31f}$$

onde $\Delta^k > 0$ denota o raio da região de confiança.

Pode-se verificar, utilizando a mesma ideia apresentada em FACCHINEI ET AL. (2013) que este problema modificado é factível e tem solução bem-definida. Contudo, algumas questões precisam ser investigadas neste contexto, de modo a estabelecer um algoritmo viável na prática.

A primeira diz respeito ao modelo utilizado para a função de mérito, e como calcular a redução predita. Um modelo conveniente, devido à sua simplicidade, seria a versão linearizada $\|F(\omega^k) + G(\omega^k)d\|$. Entretanto, como o método Newton-PL não atua minimizando o modelo linearizado, mas sim a variável γ , não é possível garantir que a redução predita será positiva, isto é, que $\|F(\omega^k)\| - \|F(\omega^k) + G(\omega^k)d^k\| > 0$. Um caso especial no qual isto poderia ser garantido seriam as iterações nas quais $\|F(\omega^k)\| < 1$ com valor ótimo $\gamma^k < 1$, uma vez que nestes casos teríamos $\gamma^k \|F(\omega^k)\|^2 < \|F(\omega^k)\|^2 < \|F(\omega^k)\|$ e, em virtude da restrição (5.31b), obteríamos $\|F(\omega^k) + G(\omega^k)d^k\| < \|F(\omega^k)\|$. O que fazer nas situações em que isto não ocorre, entretanto, é um objeto para pesquisas futuras.

Outro aspecto, que se relaciona ao anterior, diz respeito à redução real da função de mérito. Conforme estabelecido por FISCHER ET AL. (2016), ao resolver o subproblema (5.3), obtém-se uma direção de descida para a função de mérito $M(\omega) = \|F(\omega)\|$, e uma estimativa da derivada direcional é dada pela função $\Delta(\omega)$. Obviamente, para valores grandes do raio da região de confiança, espera-se que a restrição (5.31d) esteja inativa, e uma direção de descida para a função de mérito seja obtida. Entretanto, não está claro se uma direção de descida também será obtida quando o raio da região de confiança for pequeno. Este aspecto é de fundamental importância no contexto dos métodos de região de confiança, uma vez que à medida em que o raio é reduzido, espera-se que a redução real se aproxime da redução predita.

5.4 Resultados Numéricos

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos do método Newton-PL na resolução de problemas de FPOR com variáveis contínuas, visando a minimização das perdas de potência ativa. Para avaliar a eficiência desta abordagem foram realizados experimentos numéricos com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras, utilizando o banco de dados disponível no pacote MATPOWER versão 6.0.

A fim de obter os resultados, o algoritmo proposto foi implementado em linguagem MATLAB[®] versão R2012a. Todos os testes foram realizados em um microcomputador com processador Intel Core i7-4770, 3.50 GHz e 16GB de memória RAM. Os subproblemas de PL foram resolvidos pelo *solver* CPLEX[®] versão 12.6.0, utilizando as configurações padrão, com exceção de que as tolerâncias de parada foram modificadas para 10^{-9} , conforme FISCHER ET AL. (2016). Optou-se por utilizar os parâmetros sugeridos em FISCHER ET AL. (2016), devido aos bons resultados apontados no referido artigo, os quais são apresentados na Tabela 5.1. Nesta tabela, ε representa a tolerância de parada do método Newton-PL, dada pela condição $\|F(\omega^k)\| \leq \varepsilon$.

Nos testes conduzidos, considerou-se que os *taps* dos transformadores possuem limites mínimo e máximo iguais a 0,88 p.u. e 1,12 p.u., respectivamente. Os limites mínimo e

máximo para as magnitudes de tensão foram extraídos do banco de dados e os limites para as susceptâncias *shunt* das barras foram extraídos de MAZZINI (2016) e LAGE (2013), e são exibidos nas tabelas de resultados relativos às susceptâncias *shunt* de cada caso.

Tabela 5.1: Método Newton-PL: parâmetros utilizados nos experimentos numéricos.

Parâmetro	Valor
θ	0,5
ξ	0,001
ε	10^{-6}

A fim de avaliar a influência da busca unidimensional não-monótona, testes com distintos valores do parâmetro ν foram conduzidos, dependendo da instância a ser resolvida. Em todos os casos, os multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade foram inicializados com valor 0,1, ou seja, $\pi^0 = 0,1e$. Os multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade foram inicializados por meio da estimativa de mínimos quadrados:

$$\lambda^0 = -[Jg(x^0)Jg(x^0)^T]^{-1}Jg(x^0)[\nabla f(x^0) + Jh(x^0)^T\pi^0] \quad (5.32)$$

Uma análise comparativa desta abordagem com as demais propostas deste trabalho é apresentada na Seção 7.2.6.

5.4.1 Sistema IEEE de 14 Barras

O sistema elétrico IEEE de 14 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 4 barras com controle de geração de reativos;
- 9 barras de carga;
- 1 banco de capacitores;
- 17 linhas de transmissão;
- 3 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis contínuas relativo ao sistema IEEE de 14 barras possui:

- 22 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 46 restrições de desigualdade, sendo:
 - 28 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;

- 10 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;
- 6 restrições de limites operacionais dos *taps* dos transformadores em-fase;
- 2 restrições de limites operacionais relativas às susceptâncias *shunt* das barras;
- 31 variáveis contínuas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

A Figura 5.1 apresenta o valor do resíduo das condições de KKT, expresso pela função de mérito $M(\omega)$, para diferentes valores do parâmetro da busca unidimensional, ν . Para este caso, observa-se que o aumento do parâmetro ν tende a ter um efeito benéfico no número de iterações necessárias para convergência, com exceção do caso $\nu = 2$.

Figura 5.1: IEEE de 14 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.

A Tabela 5.2 apresenta os valores da função objetivo, tempo computacional, número total de iterações e número de iterações com passo completo, isto é, o número de iterações no qual o comprimento de passo na busca unidimensional é igual a 1, para os diferentes valores de ν utilizados. Para este caso, foram realizados testes com o parâmetro $\nu \in \{1, 2, 3, 4, 5, 9\}$, uma vez que para $\nu = 9$ todos os passos efetuados são completos. Nota-se, nesta tabela, que para $\nu = 2$, a busca não-monótona ocasiona um aumento do número

Figura 5.2: IEEE de 14 barras: magnitudes de tensão.

5.4.2 Sistema IEEE de 30 Barras

O sistema elétrico IEEE de 30 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 5 barras com controle de geração de reativos;
- 24 barras de carga;
- 2 bancos de capacitores;
- 37 linhas de transmissão;
- 4 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis contínuas relativo ao sistema IEEE de 30 barras possui:

- 53 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 84 restrições de desigualdade, sendo:
 - 60 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 12 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;

- 8 restrições de limites operacionais dos *taps* dos transformadores em-fase;
- 4 restrições de limites operacionais relativas às susceptâncias *shunt* das barras;
- 65 variáveis contínuas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

A Figura 5.3 apresenta o valor do resíduo das condições de KKT, expresso pela função de mérito $M(\omega)$, para diferentes valores do parâmetro da busca unidimensional, ν . Para este caso, observa-se que o aumento do parâmetro ν tende a ter um efeito benéfico no número de iterações necessárias para convergência, com exceção do caso $\nu = 2$.

Figura 5.3: IEEE de 30 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.

A Tabela 5.5 apresenta os valores da função objetivo, tempo computacional, número total de iterações e número de iterações com passo completo, isto é, o número de iterações no qual o comprimento de passo na busca unidimensional é igual a 1, para os diferentes valores de ν utilizados. Para este caso, foram realizados testes com o parâmetro ν variando de 1 a 4, uma vez que para $\nu = 4$ todos os passos efetuados são completos. Nota-se, nesta tabela, que para $\nu = 2$, a busca não-monótona ocasiona um aumento do número de iterações e tempo de processamento. Entretanto, para valores a partir de $\nu = 3$, ela passa a se tornar mais eficiente que a busca monótona.

Tabela 5.5: IEEE de 30 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν .

ν	Perdas (MW)	Tempo (s)	# Iterações	# Passos Completos	% Passos Completos
1	17,7543	0,6471	17	11	64,7059
2	17,7543	0,8962	22	10	45,4545
3	17,7543	0,6087	16	13	81,2500
4	17,7543	0,5219	15	15	100,0000

A Figura 5.4 apresenta os valores ótimos obtidos para as magnitudes de tensão, enquanto as Tabelas 5.6 e 5.7 apresentam, respectivamente, os valores ótimos dos *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* das barras, ao resolver este caso, para diferentes valores dos parâmetros ν . Para este sistema, nota-se que as soluções obtidas para os diferentes valores de ν são praticamente iguais, com variações pouco significativas nos *taps*.

Tabela 5.6: IEEE de 30 barras: *taps* dos transformadores.

k	m	t_{km}			
		$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 3$	$\nu = 4$
6	9	1,1070	1,1069	1,1070	1,1072
6	10	0,9380	0,9380	0,9379	0,9377
4	12	0,9816	0,9816	0,9816	0,9816
28	27	0,9541	0,9541	0,9541	0,9541

Tabela 5.7: IEEE de 30 barras: susceptâncias *shunt* das barras.

k	$\underline{b}_k^{\text{sh}}$	$\overline{b}_k^{\text{sh}}$				$\overline{\overline{b}}_k^{\text{sh}}$
		$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 3$	$\nu = 4$	
10	0	0,3900	0,3900	0,3900	0,3900	0,39
24	0	0,0900	0,0900	0,0900	0,0900	0,09

Figura 5.4: IEEE de 30 barras: magnitudes de tensão.

5.4.3 Sistema IEEE de 57 Barras

O sistema elétrico IEEE de 57 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 6 barras com controle de geração de reativos;
- 50 barras de carga;
- 3 bancos de capacitores;
- 63 linhas de transmissão;
- 17 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis contínuas relativo ao sistema IEEE de 57 barras possui:

- 106 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 168 restrições de desigualdade, sendo:
 - 114 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 14 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;

- 34 restrições de limites operacionais dos *taps* dos transformadores em-fase;
- 6 restrições de limites operacionais relativas às susceptâncias *shunt* das barras;
- 133 variáveis contínuas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

A Figura 5.5 apresenta o valor do resíduo das condições de KKT, expresso pela função de mérito $M(\omega)$, para diferentes valores do parâmetro da busca unidimensional, ν . Neste caso, observa-se que a busca monótona se mostra mais eficiente que a busca não-monótona, tanto em termos de tempo de processamento quanto de número de iterações. Este fato é evidenciado pelos resultados da Tabela 5.8, na qual são apresentados os valores da função objetivo, tempo computacional, número total de iterações e número de iterações com passo completo, isto é, o número de iterações no qual o comprimento de passo na busca unidimensional é igual a 1, para os diferentes valores de ν utilizados. Para este caso, testou-se valores de ν de 1 a 3, uma vez que para $\nu = 3$ todos os passos efetuados são completos.

Figura 5.5: IEEE de 57 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.

Tabela 5.8: IEEE de 57 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν .

ν	Perdas (MW)	Tempo (s)	# Iterações	# Passos Completos	% Passos Completos
1	24,8291	2,4201	15	13	86,6667
2	24,8291	2,6001	16	14	87,5000
3	24,8291	2,9705	16	16	100,0000

As Figuras 5.6 e 5.7 apresentam, respectivamente, os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e magnitudes de tensão, enquanto a Tabela 5.9 apresenta os valores ótimos das susceptâncias *shunt* das barras, ao resolver este caso, para diferentes valores dos parâmetros ν . Nota-se que, apesar das magnitudes de tensão e susceptâncias *shunt* das barras serem aproximadamente os mesmos para qualquer valor de ν testado, os *taps* dos transformadores podem ser diferentes, indicando a existência de múltiplas soluções locais. Neste caso em particular, isto ocorre porque os transformadores do ramo 4 – 18 possuem resistência nula. Como resultado, as perdas nestes ramos também são nulas, e tais *taps* não exercem influência direta na função objetivo.

Figura 5.6: IEEE de 57 barras: *taps* dos transformadores.

Tabela 5.9: IEEE de 57 barras: susceptâncias *shunt* das barras.

k	b_k^{sh}	b_k^{sh}			$\overline{b_k^{\text{sh}}}$
		$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 3$	
18	0	0,1091	0,1091	0,1091	0,27
25	0	0,0900	0,0900	0,0900	0,09
53	0	0,1386	0,1386	0,1386	0,165

Figura 5.7: IEEE de 57 barras: magnitudes de tensão.

5.4.4 Sistema IEEE de 118 Barras

O sistema elétrico IEEE de 118 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 53 barras com controle de geração de reativos;
- 64 barras de carga;
- 14 bancos de capacitores;
- 177 linhas de transmissão;
- 9 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis contínuas relativo ao sistema IEEE de 118 barras possui:

- 181 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 390 restrições de desigualdade, sendo:
 - 236 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 108 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;
 - 18 restrições de limites operacionais dos *taps* dos transformadores em-fase;
 - 28 restrições de limites operacionais relativas às susceptâncias *shunt* das barras;
- 258 variáveis contínuas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

A Figura 5.8 apresenta o valor do resíduo das condições de KKT, expresso pela função de mérito $M(\omega)$, para diferentes valores do parâmetro da busca unidimensional, ν . As curvas para os casos $\nu = 3$ e $\nu = 4$ apresentam a mesma trajetória de convergência e estão sobrepostas. Para este caso, observa-se que o aumento do parâmetro ν tende a ter um efeito benéfico no número de iterações necessárias para convergência. Entretanto, o tempo computacional não diminui necessariamente com a redução das iterações. Isto ocorre porque os subproblemas de PL resolvidos a cada iteração podem demandar mais tempo em um caso com menor número de iterações.

A Tabela 5.10 apresenta os valores da função objetivo, tempo computacional, número total de iterações e número de iterações com passo completo, isto é, o número de iterações no qual o comprimento de passo na busca unidimensional é igual a 1, para os diferentes valores de ν utilizados. Neste caso, observou-se que o aumento do número de valores de referência para a busca não-monótona permitiu que o método Newton-PL realizasse uma maior proporção de passos completos, contribuindo para a redução do número de iterações. Para $\nu = 5$, todos os passos efetuados foram completos.

Figura 5.8: IEEE de 118 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.

Tabela 5.10: IEEE de 118 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν .

ν	Perdas (MW)	Tempo (s)	# Iterações	# Passos Completos	% Passos Completos
1	117,1272	14,0076	32	11	34,3750
2	117,1272	6,1790	18	14	77,7778
3	117,1272	6,5983	17	16	94,1176
4	117,1272	6,7821	17	16	94,1176
5	117,1272	9,7618	17	17	100,0000

As Figuras 5.9 e 5.10 apresentam, respectivamente, os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e magnitudes de tensão, enquanto a Tabela 5.11 apresenta os valores ótimos das susceptâncias *shunt* das barras, ao resolver este caso, para diferentes valores dos parâmetros ν . Nota-se que, apesar das magnitudes de tensão e *taps* dos transformadores serem aproximadamente os mesmos para qualquer valor de ν testado, as susceptâncias *shunt* das barras podem ser diferentes, indicando a existência de múltiplas soluções locais.

Figura 5.9: IEEE de 118 barras: *taps* dos transformadores. Tabela 5.11: IEEE de 118 barras: susceptâncias *shunt* das barras.

k	$\underline{b}_k^{\text{sh}}$	$\overline{b}_k^{\text{sh}}$					$\overline{b}_k^{\text{sh}}$
		$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 3$	$\nu = 4$	$\nu = 5$	
5	-0,4	-0,0005	-0,0003	-0,0000	-0,0000	-0,0000	0
34	0	0,0842	0,0918	0,1621	0,1621	0,1474	0,2
37	-0,2	-0,0713	-0,0713	-0,0723	-0,0723	-0,0724	0
44	0	0,0989	0,0989	0,0989	0,0989	0,0986	0,1
45	0	0,1000	0,1000	0,1000	0,1000	0,1000	0,1
46	0	0,1000	0,1000	0,0969	0,0969	0,0871	0,1
48	0	0,0791	0,0791	0,0791	0,0791	0,0791	0,15
74	0	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2
79	0	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2
82	0	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2
83	0	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2
105	0	0,2000	0,2000	0,1815	0,1815	0,1815	0,2
107	0	0,1965	0,1965	0,1968	0,1968	0,1983	0,2
110	0	0,2000	0,1744	0,1711	0,1711	0,1331	0,2

Figura 5.10: IEEE de 118 barras: magnitudes de tensão.

5.4.5 Sistema IEEE de 300 Barras

O sistema elétrico IEEE de 300 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 68 barras com controle de geração de reativos;
- 231 barras de carga;
- 14 bancos de capacitores;
- 304 linhas de transmissão;
- 107 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis contínuas relativo ao sistema IEEE de 300 barras possui:

- 530 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 980 restrições de desigualdade, sendo:
 - 600 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 138 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;

- 214 restrições de limites operacionais dos *taps* dos transformadores em-fase;
- 28 restrições de limites operacionais relativas às susceptâncias *shunt* das barras;
- 720 variáveis contínuas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados. Por questões de implementação, as barras foram renumeradas de 1 a 300, uma vez que o banco de dados não apresenta a numeração consecutiva das barras.

A Figura 5.11 apresenta o valor do resíduo das condições de KKT, expresso pela função de mérito $M(\omega)$, para diferentes valores do parâmetro da busca unidimensional, ν . Neste caso, observou-se que o método não convergiu no caso da busca unidimensional monótona, isto é, para $\nu = 1$, dentro do limite máximo de 300 iterações especificado. Por este motivo, a busca monótona não está representada nesta figura. Para este caso, observa-se que o aumento do parâmetro ν tende a ter um efeito benéfico no número de iterações necessárias para convergência.

Figura 5.11: IEEE de 300 barras: erro das condições de KKT, para diferentes valores do parâmetro ν da busca unidimensional.

A Tabela 5.12 apresenta os valores da função objetivo, tempo computacional, número total de iterações e número de iterações com passo completo, isto é, o número de iterações no qual o comprimento de passo na busca unidimensional é igual a 1, para os diferentes valores de ν utilizados. Neste caso, a menos para o parâmetro $\nu = 4$, o aumento do número

de valores de referência para a busca não-monótona permitiu que o método Newton-PL realizasse uma maior proporção de passos completos, contribuindo para a redução do número de iterações.

Tabela 5.12: IEEE de 300 barras: função objetivo, tempo computacional, iterações e número de passos completos para valores do parâmetro ν .

ν	Perdas (MW)	Tempo (s)	# Iterações	# Passos Completos	% Passos Completos
2	371,4149	286,4151	45	16	35,5556
3	371,4149	255,8047	38	26	68,4211
4	371,4149	80,6061	39	26	66,6667
5	371,4148	65,2452	30	25	83,3333
10	371,4150	65,7619	31	28	90,3226

As Figuras 5.12 e 5.13 apresentam, respectivamente, os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e magnitudes de tensão, enquanto a Tabela 5.13 apresenta os valores ótimos das susceptâncias *shunt* das barras, ao resolver este caso, para diferentes valores dos parâmetros ν . Nota-se, portanto, a existência de múltiplas soluções locais. Em particular, a Tabela 5.12 indica que os valores ótimos obtidos são similares. Além disso, os resultados indicam que as múltiplas soluções obtidas possuem muitas variáveis com valores praticamente iguais.

Figura 5.12: IEEE de 300 barras: *taps* dos transformadores.

Tabela 5.13: IEEE de 300 barras: susceptâncias *shunt* das barras.

k	b_k^{sh}	b_k^{sh}					$\overline{b_k^{\text{sh}}}$
		$\nu = 2$	$\nu = 3$	$\nu = 4$	$\nu = 5$	$\nu = 10$	
96	0	3,4209	3,4209	3,4209	3,4207	3,4208	4,5
99	0	0,0687	0,0687	0,0697	0,0687	0,0755	0,59
133	0	0,0910	0,0910	0,0910	0,0910	0,0910	0,39
143	-4,5	-0,9257	-0,9257	-0,9257	-0,9257	-0,9257	0
145	-4,5	-0,0504	-0,0006	0	-2,7835	-2,8418	0
152	0	0,5900	0,5900	0,5900	0,5900	0,5900	0,59
158	0	0,5900	0,5900	0,5900	0,5900	0,5900	0,59
169	-2,5	-2,2820	-2,5000	-2,2056	-1,5483	-2,0074	0
210	-4,5	-4,5000	-4,5000	-4,5000	-4,5000	-4,5000	0
217	-4,5	-0,0000	0,0000	0	-0,0000	-0,0000	0
219	-1,5	-0,1943	-0,1942	-0,1942	-0,1942	-0,1942	0
227	0	0,4404	0,4404	0,4404	0,4404	0,4403	0,59
268	0	0,1500	0,1500	0,1500	0,1500	0,1500	0,15
283	0	0,0088	0,0088	0,0088	0,0088	0,0088	0,15

Figura 5.13: IEEE de 300 barras: magnitudes de tensão.

5.4.6 Análise dos Resultados

Os resultados numéricos obtidos com o método Newton-PL indicam que esta abordagem é promissora para resolução de sistemas restritos de equações, em especial a resolução

de sistemas KKT. Esta abordagem se mostrou capaz de resolver todos os casos testados do problema de FPOR com variáveis contínuas, atingindo soluções com a tolerância especificada de 10^{-6} em tempo computacional razoável. Em todos os casos testados, o método convergiu. Entretanto, para o sistema elétrico de 300 barras, a versão monótona do algoritmo não obteve uma solução dentro do limite máximo de iterações estipulado. Isto provavelmente aconteceu porque a versão monótona do algoritmo é mais exigente durante o procedimento de busca unidimensional, forçando o método a encurtar o comprimento de passo com maior frequência. Além disso, ao utilizar um procedimento de busca não-monótono, há uma maior possibilidade do método aceitar passos que permitem aos iterandos abandonarem regiões de mínimo local da função de mérito que não correspondem a soluções do sistema restrito de equações.

Um resultado interessante de se observar é que, para diversos casos, a mudança do parâmetro ν conduziu a diferentes soluções locais. Apesar deste tipo de comportamento ser esperado em problemas de PNL não-convexos, os resultados obtidos indicam que múltiplas soluções locais devem ser esperadas em problemas de FPOR contínuos. Em especial, para o sistema IEEE de 57 barras, observou-se que a existência de transformadores com resistência nula pode introduzir múltiplas soluções, que se diferenciam essencialmente pelos valores dos *taps*.

Uma das dificuldades associadas ao método Newton-PL é a sua dependência do *solver* utilizado para a resolução dos subproblemas de PL. Em particular, observou-se que alterações nas opções algorítmicas do CPLEX, tais como a utilização do método primal simplex ou do método de pontos interiores, podem reduzir ou aumentar o número de iterações ou o tempo computacional para convergência. Infelizmente, não parece haver um critério para a escolha das opções adequadas do *solver* para cada caso, motivo pelo qual todos os resultados foram apresentados para a opção de escolha automática.

Além de ter mostrado resultados satisfatórios para os sistemas KKT oriundos das condições de otimalidade de problemas de FPOR, é possível destacar outra possibilidade de aplicação desta abordagem: a resolução de problemas de fluxo de carga. Neste contexto, o método Newton-PL pode se mostrar vantajoso em relação aos algoritmos atualmente utilizados, uma vez que permite incluir as restrições de limites de variáveis de controle diretamente no conjunto Ω . Métodos do tipo Newton tipicamente utilizados nestes problemas exigem uma estrutura de ciclos aninhados: um ciclo interno para a resolução do sistema não-linear composto pelas equações de balanço de potência ativa e reativa através do método de Newton, e um ciclo externo nos quais os limites das variáveis são verificados e, possivelmente, os tipos de barras do sistema são alterados. Em contrapartida, o método Newton-PL é capaz de resolver este tipo de problema diretamente, sem a necessidade de utilizar esta estrutura de ciclo interno e externo.

Mais do que isso, a utilização do método Newton-PL abre a possibilidade para utilização de modelos mais expressivos para o problema de fluxo de carga. Por exemplo,

pode-se pensar em incluir restrições de complementaridade em problemas de fluxo de carga, visando permitir ajustes nos *taps* dos transformadores e chaveamentos dos bancos de capacitores somente quando a magnitude de tensão da barra controlada não puder ser mantida dentro de seus limites, de modo similar ao modelo de FPO descrito em LAGE (2013). Isto porque o método Newton-PL é capaz de tratar este tipo de restrição naturalmente, sem a necessidade de reformulações. Deve-se destacar, entretanto, que a habilidade do método Newton-PL tratar restrições de complementaridade pode ser verificada nos experimentos realizados, uma vez que sistemas KKT são sistemas restritos de equações com condições de complementaridade, devido à condição de folgas complementares.

Capítulo 6

Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança

Algoritmos de pontos interiores com busca linear constituem uma classe de algoritmos de grande importância em PNL, tendo se consolidado como uma das técnicas mais bem-sucedidas para a resolução de problemas de FPO. Apesar de seu sucesso, existem situações em que os algoritmos primais-duais de pontos interiores podem falhar. Um exemplo desta situação é apresentada em SOUSA ET AL. (2011), no qual um algoritmo primal-dual de pontos interiores bem como sua variante do tipo preditor-corretor falham em convergir quando o *flat start* é utilizado como solução inicial, em um sistema elétrico de grande porte, devido à baixa magnitude de tensão em algumas barras, limites estreitos para variação das magnitudes de tensão e ausência de compensação de reativos por elementos *shunt*.

Conforme apresentado no Capítulo 3, o método de rescalamento não-linear, que utiliza a função barreira logarítmica modificada como função de rescalamento, tem se mostrado uma abordagem eficiente na resolução de problemas de FPO. Exemplos do sucesso desta abordagem incluem os trabalhos de ADIBI ET AL. (2003); SOUSA ET AL. (2004, 2009, 2012); LAGE (2013). Resultados numéricos com esta classe de métodos em outros problemas-teste são reportados, por exemplo, nos trabalhos de NASH ET AL. (1994); GRIVA & POLYAK (2006), mostrando sua eficiência e viabilidade para resolução de problemas de PNL. Todos estes trabalhos, entretanto, utilizam uma estratégia de convergência global baseada em busca linear.

Uma alternativa aos métodos baseados em busca linear é a utilização dos métodos de região de confiança, descritos no Capítulo 4. Esta classe de métodos constitui uma área de pesquisa relativamente recente que tem sido explorada significativamente nas últimas décadas. Os estudos sobre esta classe de métodos originaram diversos tipos de métodos de região de confiança, para diferentes tipos de problemas, tais como: otimização restrita e irrestrita, otimização não-diferenciável, equações e mínimos quadrados não-lineares, entre

outros.

Uma vantagem dos métodos de região de confiança sobre os métodos baseados em busca linear é que os subproblemas de região de confiança sempre possuem um conjunto factível limitado, o que permite o emprego de modelos não-lineares para aproximar a função objetivo. Isto é possível devido à restrição de região de confiança, que promove uma regularização implícita no problema. Por este motivo, métodos de região de confiança são confiáveis e robustos, uma vez que podem ser aplicados a problemas não-convexos e mal-condicionados (YUAN, 2015). Dentre os métodos de região de confiança, estamos particularmente interessados no método de passo composto com programação quadrática sequencial, proposto por BYRD ET AL. (1999) e OMOJOKUN (1989).

Assim, o objetivo deste capítulo é apresentar um dos algoritmos propostos neste trabalho para a resolução do problema de FPO Reativo com variáveis contínuas e discretas. A ideia aqui desenvolvida consiste na associação do método de rescalamento não-linear para tratamento das restrições de desigualdade, o método de região de confiança de Byrd-Omojokun para resolução de problemas com restrições de igualdade e o método de penalidade para variáveis discretas desenvolvido em SOLER ET AL. (2013) e estendido por LAGE (2013).

Nesta abordagem, denominada método de Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC), as restrições de desigualdade são tratadas através do método de rescalamento não-linear, utilizando a função barreira logarítmica modificada com extração quadrática como função de rescalamento. À função objetivo de cada subproblema de rescalamento não-linear são incorporadas funções senoidais que penalizam as variáveis discretas que não assumem valores discretos permitidos. Finalmente, a resolução de cada subproblema de rescalamento não-linear e penalidade é feita através do método de região de confiança baseado em programação quadrática sequencial com passo composto de BYRD ET AL. (1999) e OMOJOKUN (1989).

Nas próximas seções são apresentados os detalhes do método RNRC, seu algoritmo, e os resultados numéricos obtidos a partir de sua aplicação na resolução de problemas de FPOR.

6.1 Região de Confiança em Problemas com Restrições de Igualdade

Nesta seção são discutidas as ideias do método de região de confiança com passo composto de BYRD ET AL. (2000) e OMOJOKUN (1989), para resolução de problemas de PNL com restrições de igualdade. A fim de apresentar a técnica de região de confiança de Byrd-Omojokun, considera-se o seguinte problema de PNL, com apenas restrições de

igualdade:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \end{aligned} \quad (6.1)$$

em que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ são funções de classe C^2 . A função Lagrangiana associada a esse problema é expressa por

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) \quad (6.2)$$

em que $\lambda \in \mathbb{R}^m$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange associados às restrições de igualdade.

A técnica de Byrd-Omojokun descrita nesta seção pode ser vista como um método de Programação Quadrática Sequencial (PQS) com região de confiança, no qual o passo tentativo é calculado através da soma de dois passos, obtidos a partir da decomposição do subproblema de PQS com região de confiança em dois subproblemas de região de confiança menores e mais fáceis de se resolver.

Em um método de PQS com região de confiança, para cada iterando x^k , um raio $\Delta^k > 0$ da região de confiança e multiplicadores de Lagrange λ^k são escolhidos, e um passo tentativo d^k é computado resolvendo o seguinte problema de programação quadrática, com uma restrição de região de confiança:

$$\begin{aligned} \min \quad & q_k(d) = \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \\ \text{s.a.} \quad & Jg(x^k)d + g(x^k) = 0 \\ & \|d\| \leq \Delta^k \end{aligned} \quad (6.3)$$

no qual $Jg(x^k)$ é a matriz Jacobiana de g avaliada em x^k e B_k é uma matriz simétrica que aproxima a matriz Hessiana da função Lagrangiana em relação às variáveis primais, $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k)$. Neste trabalho, assume-se que a matriz $Jg(x^k)$ possui posto completo, para todo x^k . Como no caso irrestrito, a matriz Hessiana exata pode ser utilizada se estiver disponível. Note que o termo constante $f(x^k)$ não foi incluído no modelo quadrático q_k em (6.3), uma vez que ele não altera a solução ótima do subproblema de região de confiança.

Conforme discussão prévia, a robustez e a propriedade de convergência global dos métodos de região de confiança estão associadas à sua capacidade de ajustar o raio da região de confiança de maneira conveniente, o qual pode ser reduzido até que o modelo quadrático estabelecido constitua uma aproximação adequada da função objetivo (ou, no caso de problemas restritos, da função de mérito, a qual será apresentada mais adiante).

Observando o modelo (6.3), é possível notar que, em contraste com o caso irrestrito, algumas dificuldades surgem na resolução de problemas restritos. Em especial, se o raio da região de confiança for pequeno, a restrição de região de confiança pode impedir o atendimento das restrições de igualdade linearizadas levando à infactibilidade do problema, isto é, nenhum passo tentativo que satisfaça as restrições de igualdade em (6.3) intercepta a região de confiança. Desta forma, a ocorrência de restrições inconsistentes

em subproblemas de região de confiança da forma (6.3) é praticamente inevitável. Uma ilustração desta situação é dada na Figura 6.1.

Figura 6.1: Incompatibilidade entre a restrição de região de confiança e as restrições de igualdade linearizadas.

A resolução do possível conflito entre atender as restrições de igualdade linearizadas e atender a restrição da região de confiança não pode ser resolvido simplesmente aumentando o raio Δ^k , até que um passo tentativo possa ser computado. Esta abordagem iria contra o propósito da região de confiança, que é definir uma região na qual o modelo representa com boa precisão o comportamento da função objetivo e das restrições. Analiticamente, fazer isto prejudicaria as propriedades de convergência do algoritmo (NOCEDAL & WRIGHT, 2000).

A literatura, sobre métodos de região de confiança, apresenta diversas abordagens para o tratamento das restrições incompatíveis. Dentre elas, algumas se baseiam na ideia de que não é necessário que as restrições de igualdade linearizadas sejam atendidas de maneira exata em cada passo; em vez disso, busca-se melhorar a factibilidade das restrições e satisfazê-las de maneira exata apenas quando a região de confiança permitir. Assim, o objetivo não é exigir a factibilidade das restrições linearizadas a cada passo, mas sim que haja uma tendência à factibilidade ao longo do processo iterativo.

As abordagens de região de confiança baseadas em PQS com passo composto se baseiam nas ideias supracitadas. Nestes métodos, o passo tentativo é decomposto na forma

$$d^k = n^k + t^k \quad (6.4)$$

em que n^k é um passo normal, que busca satisfazer as restrições linearizadas, e t^k é um passo tangencial que busca minimizar o modelo, preservando quaisquer ganhos de factibilidade atingidos através de n^k .

Uma das primeiras abordagens de passo composto foi apresentada nos trabalhos de VARDI (1985) e BYRD ET AL. (1987), nos quais foi proposta uma relaxação das restrições linearizadas, da forma $Jg(x^k)d + \alpha g(x^k) = 0$, em que $\alpha \in (0, 1]$ é escolhido de modo

que as novas restrições e a região de confiança possuam algum ponto factível em comum. Entretanto, conforme destacado por CONN ET AL. (2000), esta abordagem possui a desvantagem de que é necessário que as restrições linearizadas modificadas sejam compatíveis em cada etapa, o que é inviável na prática.

Tendo isto em mente, conforme a abordagem de Byrd-Omojokun (OMOJOKUN, 1989), um passo normal é computado de modo a atender as restrições de igualdade linearizadas da melhor maneira possível, reduzindo a violação das restrições linearizadas. Em seguida, calcula-se um passo tangencial no núcleo de $Jg(x^k)$ (denotado por $\mathcal{N}(Jg(x^k))$), visando atingir a otimalidade. Como $t^k \in \mathcal{N}(Jg(x^k))$, conclui-se de (6.3) que o passo tentativo $d^k = n^k + t^k$ não precisa se aproximar mais do conjunto factível do que o passo normal n^k . A seguir, são apresentados os dois subproblemas que possibilitam o cálculo dos passos normal e tangencial.

6.1.1 Subproblema Normal

O passo normal n^k é calculado a partir da resolução do seguinte subproblema normal:

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} \|Jg(x^k)n + g(x^k)\|^2 \\ \text{s.a.} \quad & \|n\| \leq \zeta \Delta^k \end{aligned} \quad (6.5)$$

em que $\zeta \in (0, 1)$ é um parâmetro utilizado para garantir que o passo normal computado seja estritamente interior à região de confiança.

O objetivo deste subproblema é minimizar a violação das restrições linearizadas, ao mesmo tempo em que a restrição de região de confiança reduzida seja respeitada. O fator de contração ζ é importante, pois permite que “haja espaço” na região de confiança original para que o passo tangencial reduza o modelo. Do contrário, um passo normal na fronteira da região de confiança poderia ser computado, impedindo o progresso em direção à otimalidade através do passo tangencial.

Como os problemas de região de confiança estudados estão definidos na norma Euclidiana, ignorando termos constantes o subproblema normal pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \min \quad & [Jg(x^k)^T g(x^k)]^T n + \frac{1}{2} n^T Jg(x^k)^T Jg(x^k) n \\ \text{s.a.} \quad & \|n\| \leq \zeta \Delta^k \end{aligned} \quad (6.6)$$

Conforme LALEE ET AL. (1998), este subproblema sempre possui uma solução na imagem de $Jg(x^k)^T$ (aqui denotada por $\mathcal{R}(Jg(x^k)^T)$), isto é, n^k é uma combinação linear das colunas de $Jg(x^k)^T$. Com efeito, assumindo que $m < n$, seja $Z_k \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$ uma matriz que gera $\mathcal{N}(Jg(x^k))$, ou seja, as colunas de Z_k formam uma base para $\mathcal{N}(Jg(x^k))$. Naturalmente, deve-se ter $Jg(x^k)Z_k = 0$.

Seja n_*^k a solução ótima global do subproblema normal (6.6). O teorema que caracteriza a solução global de um problema de região de confiança (Teorema 4.1) indica que

n_*^k deve ser tal que existe algum $\lambda^* \geq 0$ satisfazendo:

$$[Jg(x^k)^T Jg(x^k) + \lambda^* I]n_*^k = -Jg(x^k)^T g(x^k) \quad (6.7)$$

Consideremos primeiro o caso em que $\lambda^* = 0$. Nesta situação a solução ótima satisfaz:

$$Jg(x^k)^T Jg(x^k)n_*^k = -Jg(x^k)^T g(x^k) \quad (6.8)$$

que corresponde às condições necessárias de otimalidade para o problema (6.6), sem a restrição de região de confiança, ou seja, o passo normal ótimo é um ponto de mínimo irrestrito do subproblema normal. Nota-se, porém, que a matriz $Jg(x^k)^T Jg(x^k)$ não é invertível, pois tem dimensão $n \times n$ e posto m , de modo que o passo de Newton não está bem definido e o sistema (6.8) possui múltiplas soluções. Como o teorema garante que uma solução deste sistema é a solução ótima do subproblema normal, a solução de norma Euclidiana mínima é, garantidamente, uma solução ótima possível.

Por outro lado, nota-se que $Jg(x^k)Jg(x^k)^T$ é invertível, pois assumiu-se que $Jg(x^k)$ tem posto completo. Desta forma, a solução de norma mínima para o sistema (6.8) é única e pode ser expressa por:

$$n_N^k = -Jg(x^k)^T [Jg(x^k)Jg(x^k)^T]^{-1} g(x^k) \quad (6.9)$$

Utiliza-se a notação n_N^k para esta solução pois se considera que o passo de Newton para o subproblema normal é o passo de norma mínima que minimiza o problema de maneira irrestrita. Assim, quando $\lambda^* = 0$, um possível passo normal ótimo é $n_*^k = n_N^k$, o qual claramente está na imagem de $Jg(x^k)^T$.

O segundo caso possível é que $\lambda^* > 0$, no qual tem-se que:

$$[Jg(x^k)^T Jg(x^k) + \lambda^* I]n_*^k = -Jg(x^k)^T g(x^k) \quad (6.10)$$

Pré-multiplicando esta igualdade por Z_k^T , conclui-se que:

$$Z_k^T n_*^k = 0 \quad (6.11)$$

ou seja, $n_*^k \in \mathcal{N}(Z_k^T)$.

Como as colunas de Z_k formam uma base para $\mathcal{N}(Jg(x^k))$, então $\mathcal{R}(Z_k) = \mathcal{N}(Jg(x^k))$. Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{p \times q}$, sabe-se que $\mathcal{N}(A) = \mathcal{R}(A^T)^\perp$. Logo, conclui-se que:

$$n_*^k \in \mathcal{N}(Z_k^T) = \mathcal{R}(Z_k)^\perp = \mathcal{N}(Jg(x^k))^\perp = \mathcal{R}(Jg(x^k)^T) \quad (6.12)$$

Portanto, de qualquer forma, n_*^k está na imagem de $Jg(x^k)^T$. Esta propriedade aparentemente simples tem um papel crucial no desenvolvimento da técnica de Byrd-Omojokun, conforme apresentado a seguir, uma vez que possibilita o desacoplamento entre os subproblemas normal e tangencial. De um ponto de vista prático, na maioria das vezes não se computa a solução exata n_*^k . Entretanto, é importante que a solução quase-exata ou aproximada obtida ao resolver o subproblema normal esteja na imagem de $Jg(x^k)^T$, pois a simplificação do subproblema tangencial apresentado a seguir depende

desta propriedade.

A matriz Hessiana $Jg(x^k)^T Jg(x^k)$ da função objetivo do subproblema normal é, conforme destacado anteriormente, semidefinida positiva. Desta forma, o método do gradiente conjugado de Steihaug é uma opção viável para resolução aproximada deste subproblema. Pode-se verificar observando as expressões no Algoritmo 8 que os iterandos obtidos no método do gradiente conjugado de Steihaug estão todos na imagem de $Jg(x^k)^T$, de modo que a solução aproximada obtida tem a propriedade necessária.

Por outro lado, é possível mostrar que, apesar de $Jg(x^k)^T Jg(x^k)$ ser apenas semidefinida positiva, o método *dogleg* também pode ser utilizado para resolver o subproblema normal, adotando-se o passo n_N^k em (6.9) como passo de Newton. O minimizador irrestrito n_I^k ao longo da direção oposta do gradiente, utilizado para definir a trajetória *dogleg*, pode ser obtido através de substituição na expressão (4.27):

$$n_I^k = -\frac{\|Jg(x^k)^T g(x^k)\|^2}{g(x^k)^T [Jg(x^k) Jg(x^k)^T]^2 g(x^k)} Jg(x^k)^T g(x^k) \quad (6.13)$$

Note que o denominador na expressão (6.13) é sempre positivo, a menos que x^k seja um ponto factível para o problema original. Neste caso, porém, não faz sentido obter um passo normal, pois o ponto já está na região factível, de modo que se pode considerar que o passo normal é nulo. Observa-se também que tanto n_I^k quanto n_N^k definido em (6.9) estão na imagem de $Jg(x^k)^T$, de modo que qualquer ponto sobre a trajetória *dogleg* também possui esta propriedade.

Uma vez calculada uma solução aproximada para o subproblema normal, a mesma é utilizada no subproblema tangencial, apresentado a seguir.

6.1.2 Subproblema Tangencial

Seja n^k o passo normal obtido ao resolver o subproblema normal em uma iteração k . No subproblema tangencial, a seguinte versão relaxada do problema de PQS com região de confiança (6.3) é resolvida:

$$\begin{aligned} \min \quad & q_k(d) = \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \\ \text{s.a.} \quad & Jg(x^k) d + g(x^k) = r^k \\ & \|d\| \leq \Delta^k \end{aligned} \quad (6.14)$$

em que r^k é um resíduo.

Idealmente, o resíduo r^k deveria ser nulo. Contudo, conforme discutido anteriormente, isto pode tornar o problema infactível. Em vez disso, escolhe-se r^k a partir da solução do subproblema normal, fazendo $r^k = Jg(x^k)n^k + g(x^k)$. Logo, r^k é o resíduo de norma mínima que garante que as restrições linearizadas sejam compatíveis com uma

margem, dependendo do parâmetro ζ . Assim, o subproblema tangencial é escrito como:

$$\begin{aligned} \min \quad & q_k(d) = \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \\ \text{s.a.} \quad & Jg(x^k)d = Jg(x^k)n^k \\ & \|d\| \leq \Delta^k \end{aligned} \quad (6.15)$$

Diferentemente de (6.3), o subproblema tangencial acima descrito é sempre factível; por exemplo, $d = n^k$ satisfaz todas as restrições. A restrição de igualdade $Jg(x^k)d = Jg(x^k)n^k$ indica que o passo tentativo d^k apenas precisa obter o mesmo progresso em termos da factibilidade que o passo normal n^k . Esta restrição pode ser reescrita como $Jg(x^k)(d - n^k) = 0$, isto é, se d é factível para (6.15), então $(d - n^k) \in \mathcal{N}(Jg(x^k))$. Definindo $d = n^k + t$ e ignorando termos constantes da função objetivo, o subproblema tangencial pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} \min \quad & [\nabla f(x^k) + B_k n^k]^T t + \frac{1}{2} t^T B_k t \\ \text{s.a.} \quad & Jg(x^k)t = 0 \\ & \|n^k + t\| \leq \Delta^k \end{aligned} \quad (6.16)$$

Apesar de sua estrutura mais simples, o problema em (6.16) ainda possui restrições de igualdade e o centro da região de confiança não coincide com a origem quando $n^k \neq 0$. Portanto, métodos comuns para resolução de subproblemas de região de confiança não podem ser diretamente aplicados. A fim de obter um subproblema que possa ser resolvido de maneira eficiente, OMOJOKUN (1989) observou que qualquer solução factível t está no núcleo de $Jg(x^k)$. Assim, se uma base $Z_k \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$ para $\mathcal{N}(Jg(x^k))$ for conhecida, então t pode ser obtido como combinação linear dos vetores desta base, isto é, $t = Z_k u$, onde $u \in \mathbb{R}^{n-m}$. Esta mudança de variável permite eliminar a restrição de igualdade.

Deve-se recordar que $n^k \in \mathcal{R}(Jg(x^k)^T)$ e que, por sua vez, $\mathcal{R}(Jg(x^k)^T) = \mathcal{N}(Jg(x^k))^\perp$. Assim, o passo normal n^k é ortogonal a $t = Z_k u$. Tendo em vista este fato, deve valer a igualdade pitagórica:

$$\|n^k + Z_k u\|^2 = \|n^k\|^2 + \|Z_k u\|^2 \quad (6.17)$$

Substituindo $t = Z_k u$ em (6.16) e levando em consideração a propriedade de ortogonalidade em (6.17), obtemos a seguinte forma equivalente do subproblema tangencial:

$$\begin{aligned} \min \quad & [\nabla f(x^k) + B_k n^k]^T Z_k u + \frac{1}{2} u^T Z_k^T B_k Z_k u \\ \text{s.a.} \quad & \|Z_k u\| \leq \sqrt{(\Delta^k)^2 - \|n^k\|^2} \end{aligned} \quad (6.18)$$

Neste ponto, cabem algumas observações acerca da resolução do subproblema tangencial. O problema em (6.18) é muito mais simples de se resolver do que o subproblema tangencial original. Entretanto, diferentemente do subproblema tangencial inicial, a restrição de região de confiança pode não ser esférica, devido ao termo Z_k . Teoricamente, conforme apresentado em LALEE ET AL. (1998), este problema pode ser contornado facil-

mente fazendo a mudança de variável $u = (Z_k^T Z_k)^{-\frac{1}{2}} \bar{u}$ ^[1]. De um ponto de vista prático, entretanto, esta mudança de variável é inviável, pois o cálculo da raiz quadrada de uma matriz definida positiva é caro computacionalmente.

No trabalho de LALEE ET AL. (1998), uma versão modificada do método do gradiente conjugado de Steihaug é apresentada para a resolução de (6.18). Esta modificação leva em consideração que a escolha da base Z_k pode ser feita de diversas maneiras. Assumindo que podemos particionar $Jg(x^k)$ da forma

$$Jg(x^k) = \begin{pmatrix} J_B^k & J_N^k \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

em que J_B^k é uma matriz $m \times m$ não-singular, uma base Z_k satisfazendo $Jg(x^k)Z_k = 0$ pode ser calculada por:

$$Z_k = \begin{pmatrix} -(J_B^k)^{-1} J_N^k \\ I_{n-m} \end{pmatrix} \quad (6.20)$$

Conforme apontado pelos autores, entretanto, o algoritmo modificado proposto para resolver o subproblema tangencial requer a resolução de um sistema linear da forma $Z_k^T Z_k t_{j+1} = r_{j+1}$, com a mesma matriz de coeficientes, a cada iteração do método do gradiente conjugado, o que pode consumir bastante tempo de processamento. Para contornar este problema, os autores propõem a utilização de iterações não escaladas dentro do método do gradiente conjugado proposto. Isto é, considera-se $t_{j+1} = r_{j+1}$, evitando-se a resolução do sistema linear. Esta estratégia, porém, pode ser problemática, e deve ser feita de maneira cuidadosa.

Em vez disso, OMOJOKUN (1989) propôs obter uma matriz Z_k que forme uma base ortonormal para $\mathcal{N}(Jg(x^k))$, de modo que:

$$\|Z_k u\| = \|u\| \quad (6.21)$$

o que permite a obtenção de um subproblema tangencial com região de confiança esférica.

Ao adotar Z_k ortonormal, nenhuma adaptação é necessária ao método do gradiente conjugado de Steihaug. No Algoritmo 8, basta fazer $r_0 = Z_k^T [\nabla f(x^k) + B_k n^k]$, substituir B_k por $Z_k^T B_k Z_k$, e escolher o raio $\sqrt{(\Delta^k)^2 - \|n^k\|^2}$ para a resolução do subproblema tangencial. Esta possibilidade também é apontada por LALEE ET AL. (1998), uma vez que uma base ortonormal Z_k pode ser computada de maneira estável, por exemplo, através da fatoração QR de $Jg(x^k)^T$.

Durante o desenvolvimento deste trabalho, adotou-se inicialmente o método do gradiente conjugado de Steihaug para resolução do subproblema tangencial, com a matriz ortonormal Z_k computada pela fatoração QR. Entretanto, observou-se que o desempenho do método do gradiente conjugado pode não ser satisfatório para alguns casos testados, o que incentivou o estudo dos métodos de resolução quase-exatos. Tendo em vista este

^[1]Aqui, $(Z_k^T Z_k)^{\frac{1}{2}}$ denota a raiz quadrada da matriz $Z_k^T Z_k$, isto é, $(Z_k^T Z_k)^{\frac{1}{2}}(Z_k^T Z_k)^{\frac{1}{2}} = Z_k^T Z_k$, enquanto $(Z_k^T Z_k)^{-\frac{1}{2}}$ denota a inversa de $(Z_k^T Z_k)^{\frac{1}{2}}$.

fato, adotou-se uma estratégia mista, na qual o subproblema normal é resolvido de modo aproximado através do método *dogleg*, enquanto o subproblema tangencial é resolvido de modo quase-exato através do método PAG. Nesta nova implementação, uma matriz Z_k ortonormal ainda é computada através da fatoração QR. Contudo, cabe observar que, se Z_k não for ortonormal, pode-se escrever

$$\|Z_k u\|^2 = u^T Z_k^T Z_k u = \|u\|_{Z_k^T Z_k}^2 \quad (6.22)$$

ou seja, tem-se uma restrição de região de confiança definida na norma $Z_k^T Z_k$. Como o método PAG pode ser utilizado para resolver o subproblema de região de confiança em qualquer M -norma definida positiva, conclui-se que outras opções para Z_k podem ser utilizadas, sem exigir modificações no método PAG. Isto abre a possibilidade de utilização de matrizes Z_k que não sejam ortonormais, mas sejam computacionalmente mais baratas de se calcular, como a forma na equação (6.20).

A seguir outros aspectos importantes para o funcionamento do método são apresentados, com base em LALEE ET AL. (1998).

6.1.3 Aspectos Práticos

Nesta subseção, alguns detalhes que são importantes para a implementação numérica da técnica de Byrd-Omojokun são apresentados. Em particular, discute-se de maneira sucinta o cálculo dos multiplicadores de Lagrange, a escolha da função de mérito e seu parâmetro de penalidade, correções de segunda ordem e a atualização do raio da região de confiança.

6.1.3.1 Multiplicadores de Lagrange

Os multiplicadores de Lagrange utilizados para computar a matriz Hessiana da função Lagrangiana, B_k , não são obtidos como subproduto durante a resolução aproximada dos subproblemas normal e tangencial. Assim, a cada novo iterando x^k , é necessário obter uma nova estimativa para λ^k . Sabe-se, das condições necessárias de KKT, que um par primal-dual ótimo (x^*, λ^*) , deve satisfazer:

$$\nabla f(x^*) + Jg(x^*)^T \lambda^* = 0 \quad (6.23)$$

Tendo esta igualdade como referência, dado um iterando x^k uma estimativa de mínimos quadrados para os multiplicadores de Lagrange pode ser obtida resolvendo o sistema linear:

$$[Jg(x^k)Jg(x^k)^T]\lambda^k = -Jg(x^k)\nabla f(x^k) \quad (6.24)$$

Este sistema linear é resolvido fatorando $Jg(x^k)Jg(x^k)^T$ pelo método de Cholesky. Esta fatoração é armazenada porque pode ser utilizada posteriormente, na mesma iteração, no cálculo do passo de Newton para o método *dogleg* no subproblema normal,

e também pode ser empregada, conforme discussão a seguir, no cálculo da correção de segunda ordem. Outras estratégias podem ser utilizadas para atualização dos multiplicadores de Lagrange, como as descritas em TAPIA (1977). Porém, conforme salientado em VICENTE (1996), a escolha dos multiplicadores de Lagrange está intimamente relacionada com o tipo de decomposição de passo, sendo que a maioria dos pesquisadores considera a aproximação via mínimos quadrados. Como este trabalho segue as ideias delineadas em OMOJOKUN (1989); LALEE ET AL. (1998); BYRD ET AL. (2000), também se utilizou uma estimativa de mínimos quadrados.

6.1.3.2 Função de Mérito, Parâmetro de Penalidade e Aceitação do Passo

Após o cálculo do passo tentativo d^k , através da resolução dos subproblemas normal e tangencial, uma função de mérito deve ser utilizada para avaliar a qualidade do passo obtido. O passo tentativo é aceito se propicia uma redução suficiente na função de mérito; caso contrário, é rejeitado. Alguns exemplos de função de mérito são:

- $\mathcal{L}(x, \lambda) + \eta \|g(x)\|^2$ (Lagrangiana Aumentada)
- $f(x) + \sum_{i=1}^m \eta_i |g_i(x)|$ (Função Penalidade ℓ_1)
- $f(x) + \eta \|g(x)\|^2$ (Função Penalidade ℓ_2)
- $f(x) + \eta \|g(x)\|$ (Função Penalidade ℓ_2 sem termo quadrático).

Neste trabalho, seguindo a teoria apresentada em LALEE ET AL. (1998), utiliza-se a função de mérito:

$$\omega(x, \eta) = f(x) + \eta \|g(x)\| \quad (6.25)$$

na qual $\eta > 0$ é o parâmetro de penalidade, que efetua a ponderação entre dois objetivos possivelmente conflitantes: atingir a factibilidade e minimizar a função objetivo. Cabe enfatizar que a escolha da função de mérito não é arbitrária: ela deve levar em consideração as características dos subproblemas quadráticos utilizados no cálculo do passo. Assim, a função de mérito ω em (6.25) é adequada para o método de Byrd-Omojokun, pois é compatível com a norma ℓ_2 utilizada na minimização da violação das restrições linearizadas no subproblema normal.

Deve-se observar que esta função de mérito é não-diferenciável, devido ao termo de penalidade $\|g(x)\|$. Porém, ela é exata: na vizinhança de um ponto solução x^* , e para $\eta > \|\lambda^*\|_\infty$, o minimizador de $\omega(x, \eta)$ é precisamente x^* (LALEE ET AL., 1998).

A escolha apropriada do parâmetro de penalidade η é determinante para a convergência do método. No caso irrestrito, a redução predita devida a um passo d^k é sempre positiva, pois minimiza-se o modelo da própria função objetivo. Conforme discussão a seguir, a fim de utilizar a mesma ideia no caso restrito, um valor adequado e suficientemente

grande para η deve ser escolhido de modo a garantir que o passo tentativo d^k resulte em uma redução no modelo da função de mérito em torno de x^k , dado por:

$$\bar{\omega}(d, \eta) = \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d + \eta \|Jg(x^k)d + g(x^k)\| \quad (6.26)$$

A redução predita no modelo da função de mérito devido a um passo tentativo d^k é, portanto, calculada por:

$$\begin{aligned} \text{pred}(d^k, \eta) &= \bar{\omega}(0, \eta) - \bar{\omega}(d^k, \eta) \\ &= -\nabla f(x^k)^T d^k - \frac{1}{2} (d^k)^T B_k d^k + \eta (\|g(x^k)\| - \|Jg(x^k)n^k + g(x^k)\|) \end{aligned} \quad (6.27)$$

Em (6.27), as relações $d^k = n^k + Z_k u^k$ e $Jg(x^k)Z_k = 0$ foram utilizadas. Como n^k é um minimizador, que pode ser obtido de forma aproximada, do subproblema normal, tem-se que $\|g(x^k)\| - \|Jg(x^k)n^k + g(x^k)\|$ é sempre não-negativo, pois os métodos *dogleg* ou do gradiente conjugado de Steihaug utilizados no subproblema normal reduzem o valor da função objetivo $\|Jg(x^k)n + g(x^k)\|$ a partir de seu valor $\|g(x^k)\|$ em $n = 0$.

A diferença $\|g(x^k)\| - \|Jg(x^k)n^k + g(x^k)\|$ pode ser nula se $n^k = 0$, o que somente ocorre quando $g(x^k) = 0$. Para concluir isto, basta observar que se $g(x^k) \neq 0$, então o gradiente do subproblema normal, dado por $Jg(x^k)^T g(x^k)$, é não nulo, já que $Jg(x^k)$ tem posto completo. Assim, existe uma direção de descida na qual é possível reduzir a função objetivo do subproblema normal, de modo que o passo normal n^k é não nulo e $\|g(x^k)\| - \|Jg(x^k)n^k + g(x^k)\| > 0$.

Para obter uma redução predita positiva, no caso em que $g(x^k) \neq 0$ calcula-se o seguinte valor tentativo para a penalidade:

$$\eta^+ = \max \left\{ \eta^k; 0, 1 + \frac{\nabla f(x^k)^T d^k + \frac{1}{2} (d^k)^T B_k d^k}{\|g(x^k)\| - \|g(x^k) + Jg(x^k)n^k\|} \right\} \quad (6.28)$$

onde η^k é o valor de penalidade na iteração anterior. Esta escolha de parâmetro de penalidade garante que a redução predita é sempre positiva, e que a sequência de parâmetros de penalidade é monotonicamente crescente, o que é uma propriedade importante na análise de convergência global do algoritmo (BYRD ET AL., 1999). Por outro lado, se $g(x^k) = 0$, então a expressão (6.28) não é utilizada, pois a redução predita é positiva devido ao decréscimo na função objetivo do subproblema tangencial pelo passo d^k .

A fórmula (6.28) computa η^+ utilizando uma linearização das restrições. Por este motivo, de acordo com LALEE ET AL. (1998), para certos problemas com restrições não-lineares a convergência pode ser lenta, se o parâmetro de penalidade não for aumentado o suficiente. Dependendo das características das restrições, o modelo linear para elas pode não ser bom o suficiente, fazendo com que o passo tentativo cause um aumento na função de mérito e seja rejeitado. Nesta situação, é vantajoso dar um peso maior ao atendimento das restrições, aumentando o parâmetro de penalidade. No outro extremo, se o parâmetro de penalidade for excessivamente grande, os iterandos podem ser forçados a permanecer próximos ao conjunto factível, potencialmente aumentando o número de

iterrações necessrias para convergência. A heurística de aperfeioamento de η^+ proposta por LALEE ET AL. (1998), apresentada no Algoritmo 13 a seguir, busca mitigar estes problemas.

No Algoritmo 13, a primeira condição permite um aumento no valor tentativo de penalidade, η^+ , se pouco progresso foi realizado em termos de viabilidade ($\|g(x^k)\| > \frac{1}{5}\|g(x^{k-l})\|$), o que indica que o peso relacionado à violação das restrições não está exercendo influência suficiente na função de mérito. Este aumento, entretanto, somente é permitido quando pelo menos um dos dois últimos passos tentativos tiver sido rejeitado, sugerindo que o modelo linearizado não constitui uma boa aproximação. Algumas precauções são adotadas para evitar variações acentuadas no valor da penalidade ($\eta^+ < 5\eta^k$) e permitir incrementos somente quando o parâmetro de penalidade estiver com valor crescente ($\eta^k > \eta^{k-l}$). A segunda condição permite reduções no valor tentativo de penalidade quando os iterandos são quase factíveis ($\|g(x^k)\| < 10^4\varepsilon$), o passo normal é pequeno ($\|n^k\| < \frac{\zeta\Delta^k}{10}$) e o valor tentativo do parâmetro de penalidade é igual ao da iteração anterior. O valor η^+ reduzido nunca é menor do que o valor inicial η^0 , que o valor $\bar{\eta}_k$ necessário para assegurar que o passo tentativo causa um decréscimo no modelo da função de mérito ou que $\|\lambda^k\|$. O valor $\|\lambda^k\|$ é uma estimativa para o limitante inferior teórico seguro de η^* (LALEE ET AL., 1998).

Algoritmo 13 Heurística de Aperfeioamento do Parâmetro de Penalidade

- 1: Se $\|g(x^k)\| > \frac{1}{5}\|g(x^{k-l})\|$, $\eta^k > \eta^{k-l}$, $\eta^+ > \eta^k$, $\eta^+ < 5\eta^k$ e pelo menos um dos dois últimos passos tentativos tiver sido rejeitado, então

$$\eta^+ = \min\{5\eta^k, \eta^+ + 25(\eta^+ - \eta^{k-l})\}$$

onde $k - l$, com $l \geq 1$ é o índice do iterando mais recente no qual o passo tentativo d^{k-l} foi aceito.

- 2: Se $\eta^+ = \eta^k$, $\|n^k\| < \frac{\zeta\Delta^k}{10}$ e $\|g(x^k)\| < 10^4\varepsilon$ então

$$\eta^+ = \max\{\eta^0, \bar{\eta}_k, \|\lambda^k\|\}$$

onde $\varepsilon > 0$ é a precisão de parada do método de região de confiança e $\bar{\eta}_k$ é o segundo termo entre chaves em (6.28).

Como no caso irrestrito, deve-se verificar se o passo tentativo d^k leva a um decréscimo suficiente na função de mérito original. Para tanto, define-se a redução real na função de mérito devida ao passo tentativo d^k com penalidade η^+ por:

$$\begin{aligned} \text{ared}(d^k, \eta^+) &= \omega(x^k, \eta^+) - \omega(x^k + d^k, \eta^+) \\ &= f(x^k) - f(x^k + d^k) + \eta^+(\|g(x^k)\| - \|g(x^k + d^k)\|) \end{aligned} \quad (6.29)$$

Se a redução real for suficientemente positiva, isto é, $\text{ared}(d^k, \eta^+) \geq \rho_1 \text{pred}(d^k, \eta^+)$, então o passo tentativo é aceito e o ponto atualizado por $x^{k+1} = x^k + d^k$. Nesta situação, o raio da região de confiança pode ser aumentado ou mantido o mesmo, dependendo da

razão

$$\rho^k = \frac{\text{ared}(d^k, \eta^+)}{\text{pred}(d^k, \eta^+)} \quad (6.30)$$

Por outro lado, se $\text{ared}(d^k, \eta^+) < \rho_1 \text{pred}(d^k, \eta^+)$, ou o passo tentativo é rejeitado ou um procedimento de correção de segunda ordem é chamado sob certas condições que são apresentadas a seguir.

6.1.3.3 Correção de Segunda Ordem

A função de mérito $\omega(x, \eta)$ em (6.25) possui algumas vantagens: é simples, pode ser avaliada com baixo custo computacional e possui derivadas de primeira ordem contínuas quando $g(x) \neq 0$. Ela também possui a propriedade de que, se o raio da região de confiança Δ^k é suficientemente pequeno, então o passo tentativo satisfaz $\text{ared}(d^k, \eta^+) \geq \rho_1 \text{pred}(d^k, \eta^+)$ (OMOJOKUN, 1989). Entretanto, esta função de mérito é não-diferenciável quando todas as restrições de igualdade estão satisfeitas e pode sofrer do efeito Maratos, levando ao mau desempenho do método em determinados problemas.

Esta situação acontece quando a curvatura das restrições não é representada adequadamente por um modelo linearizado de $g(x + d)$: um passo unitário é muito grande para que $g(x) + Jg(x)d$ represente com precisão $g(x + d)$. Esta dificuldade pode ser superada computando um passo de correção de segunda ordem y , que busca compensar por esta curvatura imprevista. Diversas estratégias podem ser utilizadas para calcular o passo de correção de segunda ordem, conforme indicado em CONN ET AL. (2000). Em particular, uma maneira de escolher y é determinar uma solução de norma Euclidiana mínima para:

$$g(x^k + d^k) + Jg(x^k)y = 0 \quad (6.31)$$

A solução de norma mínima para (6.31) pode ser calculada de maneira explícita por:

$$y^k = -Jg(x^k)^T [Jg(x^k)Jg(x^k)^T]^{-1} g(x^k + d^k) \quad (6.32)$$

Deve-se ressaltar que $Jg(x^k)Jg(x^k)^T$ é a mesma matriz utilizada no cálculo dos multiplicadores de Lagrange, de modo que a mesma fatoração pode ser utilizada para calcular y^k . Logo, quando um passo de correção de segunda ordem é empregado, utilizamos o passo tentativo

$$d_{\text{CSO}}^k = d^k + y^k \quad (6.33)$$

para calcular a redução real e, possivelmente, atualizar a solução corrente (a redução prevista continua sendo calculada utilizando d^k).

Como o cálculo da correção de segunda ordem aumenta o custo computacional de uma iteração, tenta-se identificar a ocorrência do efeito Maratos para evitar o cálculo desnecessário de correções de segunda ordem. Neste sentido, d_{CSO}^k somente é computado quando d^k for rejeitado, x^k for quase factível ($\|n^k\| \leq 0,8\zeta\Delta^k$), e o passo normal for

pequeno quando comparado ao passo tangencial ($\|n^k\| \leq 0,1\|Z_k u^k\|$).

6.1.3.4 Atualização do Raio da Região de Confiança

Uma peça-chave dos métodos de região de confiança é a sua capacidade de ajustar o raio da região de confiança de modo que o modelo seja preciso e forneça uma boa aproximação da função de mérito. A decisão de como atualizar o raio da região de confiança é baseada na razão ρ^k em (6.30), que mede a precisão do modelo da função de mérito ante um passo tentativo. Se existe boa concordância entre o modelo e a função de mérito real, espera-se que esta razão esteja próxima ou seja superior a 1, e é razoável aumentar a região de confiança porque o modelo aparenta ser confiável. Em contrapartida, se esta razão for negativa ou próxima de zero, reduz-se o raio da região de confiança na esperança de que o modelo seja mais preciso em uma região menor.

Sejam $0 < \rho_1 < \rho_2 < \rho_3 < 1$ parâmetros definidos pelo usuário. Quando um passo tentativo d^k (ou d_{CSO}^k) é aceito, isto é, $\rho^k \geq \rho_1$, o raio é atualizado de acordo com a regra:

$$\Delta^{k+1} = \begin{cases} \min\{\bar{\Delta}, \max\{5\|d^k\|, \Delta^k\}\}, & \text{se } \rho^k \geq \rho_3 \\ \min\{\bar{\Delta}, \max\{2\|d^k\|, \Delta^k\}\}, & \text{se } \rho_2 \leq \rho^k < \rho_3 \\ \Delta^k, & \text{se } \rho_1 \leq \rho^k < \rho_2 \end{cases} \quad (6.34)$$

em que $\bar{\Delta}$ é um limitante superior para o raio da região de confiança. Na prática, este limite é útil para evitar situações em que o raio da região de confiança aumenta demais, o que pode levar a uma sequência de passos rejeitados em iterações posteriores. Entretanto, este limite deve ser grande o suficiente para prevenir a ocorrência de passos curtos e um número elevado de iterações com passos atingindo a fronteira da região de confiança. Idealmente, a magnitude das variáveis e outras características do problema devem ser consideradas ao estabelecer este parâmetro. As constantes multiplicando $\|d^k\|$ em (6.34) também podem ser definidas pelo usuário. Estes valores foram utilizados porque permitem bons resultados e são coerentes, porém outras escolhas podem se mostrar melhores na prática.

Quando o passo tentativo é rejeitado, isto é, $\rho^k < \rho_1$, o raio da região de confiança é reduzido a uma fração $\delta \in [0,1; 0,5]$ do comprimento do passo rejeitado. O motivo para esta escolha é simples: se o raio atualizado não for uma fração menor que 1 do comprimento do passo rejeitado, o mesmo passo seria calculado na iteração seguinte. Para calcular δ , considera-se que a razão entre a redução real e prevista é uma função linear q de δ , satisfazendo $q(0) = 1$ e $q(1) = \frac{\text{ared}(d^k, \eta^+)}{\text{pred}(d^k, \eta^+)} = \rho^k$. Em seguida, determina-se $\bar{\delta}$ tal que $q(\bar{\delta}) = \rho_1$, o qual pode ser calculado explicitamente por:

$$\bar{\delta} = \frac{1 - \rho_1}{1 - \rho^k} \quad (6.35)$$

Portanto, se o passo tentativo é rejeitado ($\rho^k < \rho_1$), o raio da região de confiança é

atualizado por:

$$\Delta^{k+1} = \begin{cases} 0,1\|d^k\|, & \text{se } \bar{\delta} < 0,1 \\ \bar{\delta}\|d^k\|, & \text{se } 0,1 \leq \bar{\delta} \leq 0,5 \\ 0,5\|d^k\|, & \text{se } \bar{\delta} > 0,5 \end{cases} \quad (6.36)$$

6.1.4 Algoritmo do Método de Região de Confiança para Problemas com Restrições de Igualdade

Nas seções anteriores, os principais detalhes da técnica de Byrd-Omojokun, conforme descrito em LALEE ET AL. (1998) e OMOJOKUN (1989) foram delineados. Tendo em vista o exposto, o algoritmo do método de região de confiança para problemas de PNL com restrições de igualdade é apresentado no Algoritmo 14.

Neste algoritmo, deve-se notar que, se um passo tentativo é rejeitado e o ponto não é atualizado, conforme o passo 17, então os passos 3, 4, 5 e 8 não precisam ser calculados, pois o ponto x^k e o multiplicador de Lagrange λ^k são os mesmos da iteração anterior. Isto é, sempre que um passo é rejeitado, a função objetivo dos subproblemas normal e tangencial não se alteram, mudando apenas o raio da região de confiança. As escolhas para resolução dos subproblemas e fatorações matriciais estão comentadas nos passos em que são necessárias.

Algoritmo 14 Região de Confiança para PNL com Restrições de Igualdade

- 1: Parâmetros: $\varepsilon > 0$, $0 < \rho_1 < \rho_2 < \rho_3 < 1$, $\bar{\Delta} > 0$, $\zeta \in (0, 1)$.
Inicialização: Escolher $\eta^0 \in (0, 1)$, $\Delta^0 \in (0, \bar{\Delta}]$ e um ponto inicial x^0 .
- 2: Faça $k = 0$.
- 3: Calcule $f(x^k)$, $g(x^k)$, $\nabla f(x^k)$ e $Jg(x^k)$.
- 4: Fatore $Jg(x^k)Jg(x^k)^T$. ▷ Cholesky
- 5: Calcule multiplicadores de Lagrange λ^k através de (6.24).
- 6: Se as condições necessárias de KKT forem satisfeitas, retorne x^k como solução.
Caso contrário, vá para o passo 7.
- 7: Compute uma solução n^k do subproblema normal (6.6). ▷ Dogleg
- 8: Compute a matriz B_k e uma base Z_k para o núcleo de $Jg(x^k)$. ▷ QR
- 9: Compute uma solução $t^k = Z_k u^k$ para o subproblema tangencial (6.18). ▷ GEP
- 10: Faça $d^k = n^k + t^k$.
- 11: Calcule η^+ conforme (6.28), utilizando o Algoritmo 13, se necessário.
- 12: Calcule $\text{pred}(d^k, \eta^+)$ a partir de (6.27) e $\text{ared}(d^k, \eta^+)$ a partir de (6.29).
- 13: Se $\text{ared}(d^k, \eta^+) \geq \rho_1 \text{pred}(d^k, \eta^+)$, então $x^{k+1} = x^k + d^k$, $\eta^{k+1} = \eta^+$, atualize o raio da região de confiança por (6.34), faça $k = k + 1$ e volte para o passo 3.
Caso contrário, vá para o passo 14.
- 14: Se $\|n^k\| \leq 0,8\zeta\Delta^k$ e $\|n^k\| \leq 0,1\|Z_k u^k\|$, vá para o passo 15.
Caso contrário, vá para o passo 17.

- 15: Compute a correção de segunda ordem d_{CSO}^k utilizando (6.32) e (6.33).
Calcule $\text{ared}(d_{\text{CSO}}^k, \eta^+)$ e vá para o passo 16.
 - 16: Se $\text{ared}(d_{\text{CSO}}^k, \eta^+) \geq \rho_1 \text{pred}(d^k, \eta^+)$, então $x^{k+1} = x^k + d_{\text{CSO}}^k$, $\eta^{k+1} = \eta^+$, atualize o raio da região de confiança por (6.34), faça $k = k + 1$ e volte para o passo 3.
Caso contrário, vá para o passo 17.
 - 17: Faça $x^{k+1} = x^k$, $\eta^{k+1} = \eta^k$, atualize o raio da região de confiança por (6.35) e (6.36), faça $k = k + 1$ e volte para o passo 7.
-

6.2 Penalidade Discreta

Nesta seção, a abordagem para discretização de variáveis utilizada neste trabalho é discutida. Para tanto, consideremos o seguinte problema de PNLIM:

$$\begin{aligned}
 \min \quad & f(x) \\
 \text{s.a.} \quad & g(x) = 0 \\
 & h(x) \leq 0 \\
 & x_{2,i} \in \mathcal{D}_{x_{2,i}} \quad i = 1, \dots, n_2
 \end{aligned} \tag{6.37}$$

em que $x = (x_1, x_2)$ é o vetor de variáveis do problema, $x_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ é o vetor de variáveis contínuas, $x_2 \in \prod_{i=1}^{n_2} \mathcal{D}_{x_{2,i}} \subset \mathbb{R}^{n_2}$ é o vetor de variáveis discretas, e $\mathcal{D}_{x_{2,i}}$ é o conjunto de valores discretos aceitáveis para a variável $x_{2,i}$, com $i = 1, \dots, n_2$.

Assume-se que a função objetivo $f : \mathbb{R}^{n_1+n_2} \rightarrow \mathbb{R}$, bem como as restrições de igualdade, $g : \mathbb{R}^{n_1+n_2} \rightarrow \mathbb{R}^m$ ($m < n_1 + n_2$), e desigualdade, $h : \mathbb{R}^{n_1+n_2} \rightarrow \mathbb{R}^p$, são funções de classe C^2 .

A partir do exposto em SOLER (2011); SOLER ET AL. (2012, 2013); LAGE (2013), uma função penalidade $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ que pode ser utilizada para tratamento das variáveis discretas x_2 na resolução de problemas como (6.37) é definida como:

$$\phi(x_{2,i}) = \begin{cases} 0, & \text{se } x_{2,i} \leq \underline{x_{2,i}} \text{ ou } x_{2,i} > \overline{x_{2,i}} \\ [\text{sen}(v_i(x_{2,i} - d_i^L))]^2, & \text{se } \underline{x_{2,i}} < x_{2,i} \leq \overline{x_{2,i}} \end{cases} \tag{6.38}$$

em que $v_i = \frac{\pi}{d_i^U - d_i^L}$, d_i^L é o valor discreto em $\mathcal{D}_{x_{2,i}}$ mais próximo e menor que $x_{2,i}$, d_i^U é o valor discreto em $\mathcal{D}_{x_{2,i}}$ mais próximo e maior ou igual a $x_{2,i}$, $\underline{x_{2,i}} = \min \mathcal{D}_{x_{2,i}}$ e $\overline{x_{2,i}} = \max \mathcal{D}_{x_{2,i}}$. Logo, $\phi(x_{2,i})$ se anula dentro do intervalo $[\underline{x_{2,i}}, \overline{x_{2,i}}]$ somente para valores discretos em $\mathcal{D}_{x_{2,i}}$.

Para cada variável discreta $x_{2,i}$, uma função penalidade $\phi(x_{2,i})$ é incorporada à função objetivo do problema original através de um parâmetro de penalidade $\gamma > 0$,

resultando no seguinte problema modificado:

$$\min \quad \Phi(x) = f(x) + \gamma \sum_{i=1}^{n_2} \phi(x_{2,i}) \quad (6.39a)$$

$$\text{s.a.} \quad g(x) = 0 \quad (6.39b)$$

$$h(x) \leq 0 \quad (6.39c)$$

$$\underline{x}_{2,i} \leq x_{2,i} \leq \overline{x}_{2,i}, \quad i = 1, \dots, n_2 \quad (6.39d)$$

O problema modificado consiste na relaxação contínua do problema original com termos de penalidade adicionais na função objetivo, resultando na função objetivo aumentada $\Phi(x)$. O parâmetro de penalidade $\gamma > 0$ influencia na amplitude das funções penalidade ϕ . Valores elevados de γ podem descaracterizar a função objetivo original, levando à obtenção de soluções discretas de má qualidade. Valores baixos de γ tendem a fazer com que a função objetivo aumentada se aproxime da função objetivo original, porém as variáveis discretas podem não assumir valores discretos permitidos.

Tendo em vista estas observações, SOLER ET AL. (2012) propõem a resolução de uma sequência de problemas penalizados, com valores de γ progressivamente maiores. Por simplicidade de notação, assume-se que as restrições de desigualdade (6.39d) já estão incluídas nas restrições (6.39c). Assim, o problema modificado tem a forma:

$$\begin{aligned} \min \quad & \Phi(x) = f(x) + \gamma \sum_{i=1}^{n_2} \phi(x_{2,i}) \\ \text{s.a.} \quad & g(x) = 0 \\ & h(x) \leq 0 \end{aligned} \quad (6.40)$$

A ideia é iniciar a resolução com um valor baixo para o parâmetro de penalidade, de modo a permitir que o método atinja regiões de mínimo local e, então, discretizar as variáveis de forma gradual. A cada ciclo externo, o parâmetro de penalidade é atualizado por:

$$\gamma^{k+1} = \tau_\gamma \gamma^k \quad (6.41)$$

em que $\tau_\gamma > 1$ é o fator de ajuste do crescimento de γ .

O processo de resolução do problema (6.40) e ajuste do parâmetro γ continua até que as condições necessárias de KKT para o problema penalizado (6.40) sejam satisfeitas e a seguinte condição de discretização das variáveis x_2 , seja verificada:

$$|x_{2,i}^k - x'_{2,i}| < \varepsilon_D \quad (6.42)$$

para $i = 1, \dots, n_2$, onde $x'_{2,i} \in \mathcal{D}_{x_{2,i}}$ é o valor discreto permitido mais próximo de $x_{2,i}^k$ e ε_D é a tolerância de discretização no algoritmo.

6.3 Rescalamento Não-Linear

Uma vez obtido o problema penalizado (6.40), é necessário resolvê-lo através de alguma abordagem de otimização. No algoritmo RNRC proposto, primeiramente as restrições de desigualdade são tratadas por meio de uma função de rescalamento não-linear, baseada na função barreira logarítmica modificada com extrapolação quadrática, a qual foi discutida no Capítulo 3 e aqui reproduzida novamente por facilidade de exposição:

$$\psi(t) = \begin{cases} \ln(t+1), & \text{se } t \geq \beta \\ p(t) = \frac{1}{2}p_2t^2 + p_1t + p_0, & \text{se } t < \beta \end{cases} \quad (6.43)$$

Os parâmetros p_2 , p_1 e p_0 são calculados por:

$$p_2 = -\frac{1}{(1+\beta)^2} \quad (6.44)$$

$$p_1 = \frac{1+2\beta}{(1+\beta)^2} \quad (6.45)$$

$$p_0 = \ln(1+\beta) - \frac{\beta(2+3\beta)}{2(1+\beta)^2} \quad (6.46)$$

e dependem do ponto de extrapolação $\beta \in (-1, 0)$ escolhido.

A utilização da função de rescalamento pode ser feita de duas maneiras: aplicando a função de rescalamento diretamente às restrições de desigualdade, ou transformando-as em igualdades através da adição de variáveis de folga para, em seguida, aplicar a função de rescalamento às variáveis de folga. Diferentemente dos trabalhos de LAGE (2013) e SOUSA (2006), neste trabalho, optou-se pela primeira opção por dois motivos. Primeiramente, a função de rescalamento adotada está bem definida para qualquer argumento devido à extrapolação quadrática, de modo que a violação das restrições de desigualdade não gera dificuldades. O segundo motivo é que a adição de variáveis de folga aumenta o número de variáveis do problema. Cabe observar que para alguns métodos, como os de pontos interiores, a utilização de variáveis de folga é vantajosa, pois é necessário calcular um comprimento de passo que não ocasione a violação das restrições de desigualdade. Nestas situações, variáveis de folga facilitam os cálculos.

Uma vez aplicada a função de rescalamento, obtém-se o seguinte problema transformado:

$$\begin{aligned} \min \quad & \varphi(x) = \Phi(x) - \mu \sum_{j=1}^p \sigma_j \psi(-\mu^{-1}h_j(x)) \\ \text{s.a.} \quad & g(x) = 0 \end{aligned} \quad (6.47)$$

por meio da dualização das restrições de desigualdade transformadas pela função de rescalamento, que são inseridas na função objetivo através do vetor de multiplicadores de Lagrange $\sigma \in \mathbb{R}^p$.

O problema de rescalamento não-linear com penalidade (6.47) é um problema de PNL com apenas restrições de igualdade, que pode ser resolvido através do método de

região de confiança descrito no Algoritmo 14.

6.4 Método de Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC)

As metodologias apresentadas nas seções anteriores nos permite delinear uma nova abordagem para a resolução de problemas de PNLIM, aqui chamada de método de RNRC. Primeiramente, transforma-se o problema discreto em um problema contínuo através da introdução de termos de penalidade. Em seguida, o método de rescalamento não-linear é aplicado ao problema penalizado, como forma de tratar as restrições de desigualdade. No método de RNRC uma solução para o problema (6.37) é determinada pela resolução de uma sequência de subproblemas de rescalamento não-linear com penalidade discreta, representados em (6.47), através do método de região de confiança de Byrd-Omojokun.

6.4.1 Ciclo Interno

Cada ciclo interno do método de RNRC resolve o problema (6.47) pelo método de região de confiança, com os valores do parâmetro de rescalamento (μ), parâmetro de penalidade (γ) e multiplicadores de Lagrange (σ) fixos. Por este motivo, na discussão a seguir, são omitidos os índices relacionados a estes valores, uma vez que eles são atualizados apenas no ciclo externo do algoritmo.

Ao subproblema de rescalamento não-linear com penalidade discreta, associa-se a seguinte função Lagrangiana:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = \varphi(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) \quad (6.48)$$

em que $\lambda \in \mathbb{R}^m$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange relacionados às restrições de igualdade.

Em um método de PQS com região de confiança, o passo tentativo para atualização das variáveis x em cada subproblema interno (6.47) é calculado resolvendo o seguinte problema de região de confiança:

$$\begin{aligned} \min \quad & q_k(d) = \nabla \varphi(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \\ \text{s.a.} \quad & Jg(x^k)d + g(x^k) = 0 \\ & \|d\| \leq \Delta^k \end{aligned} \quad (6.49)$$

em que B_k é uma aproximação ou a forma exata da matriz Hessiana da função Lagrangiana $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k)$, $\nabla \varphi(x^k)$ é o vetor gradiente de φ calculado em x^k e $Jg(x^k)$ é a matriz Jacobiana da função g calculada em x^k .

6.4.1.1 Vetor Gradiente $\nabla\varphi(x^k)$

O vetor gradiente $\nabla\varphi(x^k)$ pode ser obtido a partir da soma do vetor gradiente da função $\Phi(x)$ com um vetor obtido a partir de uma multiplicação matriz-vetor. Para tanto, definimos

$$u^k = \sigma \circ \psi'(-\mu^{-1}h(x^k)) \quad (6.50)$$

em que $\psi'(-\mu^{-1}h(x^k))$ denota o vetor cujas componentes são $\psi'(-\mu^{-1}h_j(x^k))$, para $j = 1, \dots, p$, com

$$\psi'(t) = \begin{cases} \frac{1}{t+1}, & \text{se } t \geq \beta \\ p_2 t + p_1, & \text{se } t < \beta \end{cases} \quad (6.51)$$

e $\circ$ denota o produto de Hadamard (ou produto componente-a-componente) entre dois vetores.

Derivando a função $\varphi(x)$ em relação a alguma variável x_s , obtém-se:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_s}(x^k) = \frac{\partial\Phi}{\partial x_s}(x^k) + \sum_{j=1}^p \left[\sigma_j \psi'(-\mu^{-1}h_j(x^k)) \frac{\partial h_j}{\partial x_s}(x^k) \right] \quad (6.52)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \nabla\varphi(x^k) &= \nabla\Phi(x^k) + \sum_{j=1}^p [\sigma_j \psi'(-\mu^{-1}h_j(x^k)) \nabla h_j(x^k)] \\ &= \nabla\Phi(x^k) + Jh(x^k)^T [\sigma \circ \psi'(-\mu^{-1}h(x^k))] \end{aligned} \quad (6.53)$$

ou seja,

$$\nabla\varphi(x^k) = \nabla\Phi(x^k) + Jh(x^k)^T u^k \quad (6.54)$$

6.4.1.2 Matriz Hessiana B_k

Além do vetor gradiente da função φ , a utilização do método de região de confiança necessita de uma matriz B_k , que pode ser uma aproximação ou a matriz Hessiana exata da função Lagrangiana do subproblema de rescalamento não-linear com penalidade discreta, apresentada em (6.48). Neste trabalho, optou-se por utilizar a forma exata da matriz Hessiana. Assim,

$$B_k = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) = \nabla_{xx}^2 \varphi(x^k) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^k \nabla_{xx}^2 g_i(x^k) \quad (6.55)$$

de modo que precisamos calcular a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 \varphi(x^k)$.

Para calcular a matriz Hessiana $\nabla_{xx}^2 \varphi(x^k)$, derivamos novamente a expressão (6.52) em relação a uma variável x_z , obtendo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_z \partial x_s}(x^k) &= \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_z \partial x_s}(x^k) + \sum_{j=1}^p \sigma_j \left[\psi''(-\mu^{-1}h_j(x^k)) \left(-\mu^{-1} \frac{\partial h_j}{\partial x_z}(x^k) \right) \frac{\partial h_j}{\partial x_s}(x^k) \right. \\ &\quad \left. + \psi'(-\mu^{-1}h_j(x^k)) \cdot \frac{\partial^2 h_j}{\partial x_z \partial x_s}(x^k) \right] \end{aligned} \quad (6.56)$$

Definindo

$$a^k = -\mu^{-1}[\sigma \circ \psi''(-\mu^{-1}h(x^k))] \quad (6.57)$$

em que $\psi''(-\mu^{-1}h(x^k))$ denota o vetor cujas componentes são $\psi''(-\mu^{-1}h_j(x^k))$, para $j = 1, \dots, p$, de modo que $a_j^k = -\mu^{-1}\sigma_j\psi''(-\mu^{-1}h_j(x^k))$, pode-se escrever:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_z \partial x_s}(x^k) = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_z \partial x_s}(x^k) + \sum_{j=1}^p \left[a_j^k \frac{\partial h_j}{\partial x_z}(x^k) \frac{\partial h_j}{\partial x_s}(x^k) + u_j^k \frac{\partial^2 h_j}{\partial x_z \partial x_s}(x^k) \right] \quad (6.58)$$

Logo,

$$\nabla_{xx}^2 \varphi(x^k) = \nabla_{xx}^2 \Phi(x^k) + Jh(x^k)^T A_k Jh(x^k) + \sum_{j=1}^p u_j^k \nabla_{xx}^2 h_j(x^k) \quad (6.59)$$

em que $A_k = \text{diag}(a^k)$.

Finalmente, substituindo (6.59) em (6.55), obtemos a matriz Hessiana desejada:

$$B_k = \nabla_{xx}^2 \Phi(x^k) + Jh(x^k)^T A_k Jh(x^k) + \sum_{j=1}^p u_j^k \nabla_{xx}^2 h_j(x^k) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^k \nabla_{xx}^2 g_i(x^k) \quad (6.60)$$

Considerando que

$$L(x, \lambda, \pi) = \Phi(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j h_j(x) \quad (6.61)$$

é a função Lagrangiana associada ao problema de penalidade original (6.40), a matriz B_k pode ser escrita da seguinte forma:

$$B_k = \nabla_{xx}^2 L(x^k, \lambda^k, u^k) + Jh(x^k)^T A_k Jh(x^k) \quad (6.62)$$

Os multiplicadores de Lagrange, λ^k , necessários para computar B_k , são obtidos através da estimativa de mínimos quadrados, conforme a equação (6.24):

$$\lambda^k = -[Jg(x^k)Jg(x^k)^T]^{-1} Jg(x^k) \nabla \varphi(x^k) \quad (6.63)$$

a qual é calculada através da fatoração de Cholesky de $Jg(x^k)Jg(x^k)^T$.

Conforme a Seção 6.1, o problema (6.49) nem sempre pode ser resolvido devido à incompatibilidade das restrições, que leva a uma região factível vazia. A fim de contornar esta dificuldade, a técnica de Byrd-Omojokun apresentada no Algoritmo 14 é utilizada. Nesta abordagem, o passo é decomposto em duas componentes: um passo normal, que busca reduzir a infactibilidade, e um passo tangencial que visa atingir a otimalidade, isto é, reduzir o valor da função objetivo.

Tendo em vista que a técnica de Byrd-Omojokun já foi detalhada na Seção 6.1, limitamo-nos aqui a dizer que sua aplicação à resolução do problema de rescalamento não-linear e penalidade (6.47) é direta, bastando substituir a função f pela função φ na discussão realizada na Seção 6.1.

6.4.1.3 Critério de Parada do Ciclo Interno

Como critério de parada do ciclo interno, utilizam-se as condições necessárias de KKT para o subproblema de rescalamento não-linear com penalidade, apresentado em

(6.47). Assim, um problema interno de rescalamento não-linear com penalidade converge quando um par primal-dual (x^k, λ^k) satisfaz as condições:

$$\|\nabla\varphi(x^k) + Jg(x^k)^T \lambda^k\|_\infty \leq \varepsilon_{\text{int}} \quad (6.64a)$$

$$\|g(x^k)\|_\infty \leq \varepsilon_{\text{int}} \quad (6.64b)$$

em que $\varepsilon_{\text{int}} > 0$ é a tolerância adotada para o ciclo interno.

6.4.2 Ciclo Externo

O ciclo externo do método RNRC é destinado a verificar a convergência para o problema de PNLIM, bem como atualizar os parâmetros mantidos fixos no ciclo interno: o parâmetro de rescalamento, μ , o parâmetro de penalidade, γ , e os estimadores dos multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade, σ .

6.4.2.1 Critério de Parada do Ciclo Externo

Utilizaremos o índice K para referir às iterações do ciclo externo. Uma solução satisfatória para o problema de PNLIM (6.37) é obtida quando os dois critérios abaixo são atendidos:

- as condições necessárias de KKT para o problema penalizado (6.40) são satisfeitas;
- as variáveis discretas satisfazem (6.42).

Dessa forma, assume-se que um iterando (x^k, λ^k) , que satisfaz as condições de parada do ciclo interno, é uma solução aproximada no ciclo externo quando:

$$\|\nabla\Phi(x^k) + Jg(x^k)^T \lambda^k + Jh(x^k)^T \sigma^K\|_\infty \leq \varepsilon_{\text{ext}} \quad (6.65a)$$

$$\|g(x^k)\|_\infty \leq \varepsilon_{\text{ext}} \quad (6.65b)$$

$$\max\{h(x^k)\} \leq \varepsilon_{\text{ext}} \quad (6.65c)$$

$$\|\sigma^K \circ h(x^k)\|_\infty \leq \varepsilon_{\text{ext}} \quad (6.65d)$$

em que $\varepsilon_{\text{ext}} > 0$ é a tolerância do ciclo externo, e as variáveis discretas x_2 satisfazem (6.42), isto é, estão próximas o suficiente de valores discretos permitidos, com a tolerância ε_D desejada.

Cabe observar aqui que não é necessário checar a viabilidade dual dos multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade, isto é, que $\sigma^K \geq 0$. Isto porque este fato é uma decorrência das propriedades da função de rescalamento e da fórmula de atualização dos estimadores dos multiplicadores, apresentada novamente a seguir.

6.4.2.2 Atualização de Parâmetros

Se um iterando (x^k, λ^k) no ciclo externo não satisfaz as condições (6.65) do critério de parada, a qual está relacionada às condições de KKT do problema penalizado, então os

estimadores dos multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade transformadas são atualizados por:

$$\sigma_j^{K+1} = \sigma_j^K \psi'(-(\mu^K)^{-1} h_j(x^k)), \quad j = 1, \dots, p \quad (6.66)$$

em que ψ' está definida em (6.51). Como ψ' é estritamente positiva, segue disto que se todos os estimadores iniciais σ_j^0 forem estritamente positivos, então todos os estimadores subsequentes também o serão.

Além disso, se (6.65) não é satisfeita, o parâmetro de rescalamento é atualizado pela simples regra de redução:

$$\mu^{K+1} = \tau_\mu \mu^K \quad (6.67)$$

em que $\tau_\mu \in (0, 1)$ é o fator de redução do parâmetro de rescalamento. Valores típicos são $\tau_\mu = 0,5$ ou $\tau_\mu = 0,1$ (LAGE, 2013).

Por outro lado, se o iterando (x^k, λ^k) no ciclo externo não satisfaz a condição de discretização (6.42), então o parâmetro de penalidade γ é aumentado^[2] por um fator $\tau_\gamma > 1$, isto é:

$$\gamma^{K+1} = \tau_\gamma \gamma^K \quad (6.68)$$

Quando (6.65) é satisfeita, os valores dos estimadores e do parâmetro de rescalamento são, mantidos, isto é, $\sigma^{K+1} = \sigma^K$ e $\mu^{K+1} = \mu^K$. Por outro lado, quando (6.42) é satisfeita, o parâmetro de penalidade é mantido, isto é, $\gamma^{K+1} = \gamma^K$.

Do que foi exposto, nota-se que o parâmetro de rescalamento, μ , e os estimadores dos multiplicadores de Lagrange, σ , somente são atualizados quando uma precisão maior para as condições necessárias de KKT é exigida no ciclo externo, enquanto que o parâmetro da discretização, γ , somente é atualizado quando maior precisão é exigida para as variáveis discretas. Esta escolha de desacoplar as duas atualizações objetiva evitar que o parâmetro de penalidade cresça desnecessariamente, quando apenas as condições de KKT precisam ser satisfeitas com maior rigor, mas as variáveis discretas já estão dentro da tolerância especificada; ou que os parâmetros do método de rescalamento não-linear sejam atualizados, levando a problemas numericamente mais difíceis de se resolver devido à redução do parâmetro de rescalamento, quando apenas as variáveis discretas precisam atingir a precisão requerida.

Cabe salientar, ainda, que a abordagem de RNRC possui outras diferenças sutis em relação aos algoritmos desenvolvidos em SOLER ET AL. (2013) e LAGE (2013). Nestes últimos, cada subproblema com penalidade da forma (6.40) é resolvido até a otimalidade, para somente então atualizar γ . Como os métodos utilizados por estes autores para resol-

^[2]Na prática, podem ser escolhidos vários parâmetros de penalidade, um para cada variável discreta (γ_i , para $i = 1, \dots, n_2$). Isto porque o comportamento de cada variável discreta e sua influência no problema pode variar. Por exemplo, em problemas de FPO, as variáveis discretas relacionadas aos bancos de capacitores e reatores *shunt* têm impacto bem maior no processo de otimização do que as variáveis discretas relacionadas aos *taps* dos transformadores em-fase.

ver cada subproblema com penalidade já possuem uma estrutura de ciclo interno e externo, os algoritmos para discretização acabam por ter uma estrutura com ciclo triplo: um ciclo interno, composto pelo método de Newton, um ciclo intermediário, para atualização dos parâmetros (barreira, no caso de SOLER ET AL. (2013), e rescalamento e multiplicadores de Lagrange, no caso de LAGE (2013)), e um ciclo externo no qual atualiza-se o parâmetro da penalidade discreta. Esta escolha por parte dos autores pode estar relacionada ao fato de que foram utilizados pacotes comerciais de otimização através de plataformas de modelagem (GAMS e AMPL), o que impossibilita alterações na estrutura dos algoritmos utilizados.

Já a abordagem aqui proposta une os dois ciclos mais externos em um único ciclo. A razão para esta alternativa está relacionada principalmente a questões de eficiência computacional, uma vez que a utilização de um ciclo triplo pode elevar o número de iterações necessárias para convergência, e o custo por iteração de um método de região de confiança geralmente é maior do que o custo por iteração de um método que utiliza busca linear.

6.4.3 Algoritmo do Método de RNRC

Tendo em vista a discussão apresentada, propomos o algoritmo de RNRC apresentado no Algoritmo 15 para a resolução de problemas de PNLIM.

Algoritmo 15 Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança

- 1: Parâmetros do método de rescalamento não-linear: $\sigma^0 \in (\mathbb{R}_+^*)^p$, $\mu^0 > 0$, $\tau_\mu \in (0, 1)$.
 Parâmetros do método de região de confiança: $\varepsilon_{\text{int}} > 0$, $0 < \rho_1 < \rho_2 < \rho_3 < 1$, $\bar{\Delta} > 0$, $\zeta \in (0, 1)$.
 Parâmetros da penalidade de discretização: $\gamma^0 > 0$, $\tau_\gamma > 1$, $\varepsilon_D > 0$.
 Escolha $x^0 \in \mathbb{R}^n$ e a tolerância de parada $\varepsilon_{\text{ext}} > 0$.
 - 2: Faça $K = 0$.
 - 3: **Ciclo Interno:** Obtenha o problema (6.47) e resolva-o pelo método de região de confiança do Algoritmo 14 com precisão ε_{int} , obtendo uma solução (x^k, λ^k) .
 - 4: Se as condições (6.65) e (6.42) forem satisfeitas, retorne x^k como solução.
 - 5: Se as condições de KKT (6.65) do problema penalizado não forem satisfeitas com a precisão ε_{ext} , então atualize σ^K por (6.66) e μ^K por (6.67).
 Caso contrário, $\sigma^{K+1} = \sigma^K$ e $\mu^{K+1} = \mu^K$.
 - 6: Se a condição de discretização (6.42) não for satisfeita com a precisão ε_D , então atualize γ^K por (6.68).
 Caso contrário, $\gamma^{K+1} = \gamma^K$.
 - 7: Faça $K = K + 1$ e volte para o Passo 3.
-

6.5 Resultados Numéricos

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos do Algoritmo de RNRC na resolução de problemas de FPOR com variáveis de controle discretas. Para avaliar a eficiência da abordagem proposta foram realizados experimentos numéricos com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras, utilizando o banco de dados disponível no pacote MATPOWER versão 6.0.

A fim de obter os resultados, o algoritmo proposto foi implementado em linguagem MATLAB® versão R2012a. Todos os testes foram realizados em um microcomputador com processador Intel Core i7-4770, 3.50 GHz e 16GB de memória RAM.

Nos testes conduzidos, considerou-se que os *taps* dos transformadores possuem limites mínimo e máximo iguais a 0,88 p.u. e 1,12 p.u., respectivamente. No caso de *taps* discretos, considerou-se que os mesmos devem pertencer ao conjunto discreto igualmente espaçado por passos de 0,0075 p.u. entre 0,88 p.u. e 1,12 p.u., totalizando 33 posições discretas possíveis para cada transformador. Os limites mínimo e máximo para as magnitudes de tensão foram extraídos do banco de dados e os valores das susceptâncias *shunt* discretas equivalentes foram extraídos de MAZZINI (2016) e LAGE (2013).

Apesar da escolha individual de parâmetros levar a soluções de melhor qualidade, ou reduzir o número de iterações e tempo de processamento de cada caso, optou-se por utilizar o mesmo conjunto de parâmetros para todos os testes computacionais, com exceção do parâmetro de atualização da penalidade para as variáveis discretas. Os valores dos parâmetros de penalidade somente são atualizados para aquelas variáveis discretas que não atingiram a precisão de discretização necessária. Os valores dos parâmetros utilizados em todos os testes realizados são apresentados na Tabela 6.1.

Tabela 6.1: Algoritmo RNRC: parâmetros utilizados nos experimentos numéricos.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
ε_{ext}	10^{-5}	ρ_3	0,9
ε_{int}	10^{-6}	ζ	0,7
ε_{D}	10^{-5}	η^0	1
Δ^0	1	μ^0	0,1
$\overline{\Delta}$	100	τ_{μ}	0,5
ρ_1	0,1	β	-0,5
ρ_2	0,7	γ^0	10^{-7}

Uma análise comparativa desta abordagem com as demais propostas deste trabalho é apresentada na Seção 7.2.6.

6.5.1 Sistema IEEE de 14 Barras

O sistema elétrico IEEE de 14 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 4 barras com controle de geração de reativos;
- 9 barras de carga;
- 1 banco de capacitores;
- 17 linhas de transmissão;
- 3 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis de controle discretas relativo ao sistema IEEE de 14 barras possui:

- 22 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 38 restrições de desigualdade, sendo:
 - 28 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 10 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;
- 27 variáveis contínuas;
- 4 variáveis discretas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

No caso discreto, considerou-se que a susceptância *shunt* equivalente do banco de capacitores na barra 9 deve pertencer ao conjunto

$$\mathcal{D}_9^{\text{sh}} = \{0; 0,19; 0,34; 0,39\}$$

e o parâmetro de atualização da penalidade foi $\tau_\gamma = 2,5$.

As Tabelas 6.2 e 6.3 apresentam o processo de convergência dos *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* para a relaxação contínua e para o caso discreto, bem como as perdas de potência ativa finais. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 13,6042 MW, em um tempo computacional de 0,3167 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 13,6064 MW, em um tempo

computacional de 0,4322 segundos. A Figura 6.2 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Tabela 6.2: Processo de convergência: IEEE de 14 barras – relaxação contínua.

It. Ext.	$t_{4,7}$	$t_{4,9}$	$t_{5,6}$	b_9^{sh}
0	0,9780	0,9690	0,9320	0,1900
1	1,1068	1,0546	1,0790	0,2029
2	1,0413	0,9936	1,0150	0,2736
3	1,0410	0,9477	0,9939	0,3496
4	1,0561	0,9008	0,9775	0,3791
5	1,0672	0,8901	0,9777	0,3790
6	1,0808	0,8814	0,9800	0,3866
7	1,0833	0,8801	0,9808	0,3898
8	1,0833	0,8800	0,9810	0,3900
9	1,0833	0,8800	0,9811	0,3900
10	1,0833	0,8800	0,9811	0,3900
Perdas de Potência Ativa: 13,6042 MW				

Tabela 6.3: Processo de convergência: IEEE de 14 barras – discreto.

It. Ext.	$t_{4,7}$	$t_{4,9}$	$t_{5,6}$	b_9^{sh}
0	0,9780	0,9690	0,9320	0,1900
1	1,1067	1,0543	1,0789	0,2026
2	1,0424	0,9926	1,0150	0,2740
3	1,0450	0,9404	0,9932	0,3464
4	1,0372	0,9246	0,9778	0,3857
5	1,0373	0,9248	0,9776	0,3874
6	1,0375	0,9250	0,9784	0,3886
7	1,0375	0,9250	0,9783	0,3894
8	1,0375	0,9250	0,9779	0,3897
9	1,0375	0,9250	0,9777	0,3899
10	1,0375	0,9250	0,9776	0,3900
11	1,0375	0,9250	0,9775	0,3900
12	1,0375	0,9250	0,9775	0,3900
13	1,0375	0,9250	0,9775	0,3900
Perdas de Potência Ativa: 13,6064 MW				

Figura 6.2: IEEE de 14 barras: magnitudes de tensão.

6.5.2 Sistema IEEE de 30 Barras

O sistema elétrico IEEE de 30 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 5 barras com controle de geração de reativos;
- 24 barras de carga;
- 2 bancos de capacitores;
- 37 linhas de transmissão;
- 4 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis de controle discretas relativo ao sistema IEEE de 30 barras possui:

- 53 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 72 restrições de desigualdade, sendo:
 - 60 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 12 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;

Tabela 6.5: Processo de convergência: IEEE de 30 barras – discreto.

It. Ext.	$t_{6,9}$	$t_{6,10}$	$t_{4,12}$	$t_{28,27}$	b_{10}^{sh}	b_{24}^{sh}
0	0,9780	0,9690	0,9320	0,9680	0,1900	0,0430
1	1,1072	1,0604	1,0727	1,0521	0,2263	0,0871
2	1,0521	1,0077	1,0120	0,9829	0,3099	0,0821
3	1,0459	0,9923	0,9988	0,9624	0,3709	0,0829
4	1,0462	0,9928	0,9920	0,9559	0,3827	0,0871
5	1,0463	0,9932	0,9913	0,9553	0,3833	0,0895
6	1,0456	0,9929	0,9919	0,9551	0,3862	0,0899
7	1,0453	0,9927	0,9922	0,9550	0,3883	0,0900
8	1,0451	0,9926	0,9924	0,9550	0,3893	0,0900
9	1,0450	0,9925	0,9925	0,9550	0,3897	0,0900
10	1,0450	0,9925	0,9925	0,9550	0,3899	0,0900
11	1,0450	0,9925	0,9925	0,9550	0,3900	0,0900
12	1,0450	0,9925	0,9925	0,9550	0,3900	0,0900
13	1,0450	0,9925	0,9925	0,9550	0,3900	0,0900
Perdas de Potência Ativa: 17,7576 MW						

Figura 6.3: IEEE de 30 barras: magnitudes de tensão.

6.5.3 Sistema IEEE de 57 Barras

O sistema elétrico IEEE de 57 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;

- 6 barras com controle de geração de reativos;
- 50 barras de carga;
- 3 bancos de capacitores;
- 63 linhas de transmissão;
- 17 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis de controle discretas relativo ao sistema IEEE de 57 barras possui:

- 106 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 128 restrições de desigualdade, sendo:
 - 114 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 14 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;
- 113 variáveis contínuas;
- 20 variáveis discretas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

No caso discreto, considerou-se que as susceptâncias *shunt* equivalentes dos bancos de capacitores nas barras 18, 25 e 53 devem pertencer, respectivamente, aos conjuntos

$$\mathcal{D}_{18}^{\text{sh}} = \{0; 0,12; 0,22; 0,27\}$$

$$\mathcal{D}_{25}^{\text{sh}} = \{0; 0,04; 0,07; 0,09\}$$

$$\mathcal{D}_{53}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,165\}$$

e o parâmetro de atualização da penalidade foi $\tau_\gamma = 2,5$.

As Figuras 6.4 e 6.5 apresentam os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt*, ao resolver a relaxação contínua e o modelo discreto. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 24,8291 MW, em um tempo computacional de 1,7261 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 24,8775 MW, em um tempo computacional de 3,3432 segundos. A Figura 6.6 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Figura 6.4: IEEE de 57 barras: *taps* dos transformadores. Figura 6.5: IEEE de 57 barras: susceptâncias *shunt* equivalentes.

Figura 6.6: IEEE de 57 barras: magnitudes de tensão.

6.5.4 Sistema IEEE de 118 Barras

O sistema elétrico IEEE de 118 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 53 barras com controle de geração de reativos;
- 64 barras de carga;
- 14 bancos de capacitores;
- 177 linhas de transmissão;
- 9 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis de controle discretas relativo ao sistema IEEE de 118 barras possui:

- 181 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 344 restrições de desigualdade, sendo:
 - 236 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 108 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;

- 235 variáveis contínuas;
- 23 variáveis discretas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

No caso discreto, considerou-se que as susceptâncias *shunt* equivalentes dos bancos de capacitores nas barras 5, 34, 37, 44, 45, 46, 48, 74, 79, 82, 83, 105, 107 e 110 devem pertencer, respectivamente, aos conjuntos

$$\mathcal{D}_5^{\text{sh}} = \{-0,4; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{34}^{\text{sh}} = \{0; 0,06; 0,07; 0,13; 0,14; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{37}^{\text{sh}} = \{-0,25; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{44}^{\text{sh}} = \{0; 0,1\}$$

$$\mathcal{D}_{45}^{\text{sh}} = \{0; 0,1\}$$

$$\mathcal{D}_{46}^{\text{sh}} = \{0; 0,1\}$$

$$\mathcal{D}_{48}^{\text{sh}} = \{0; 0,15\}$$

$$\mathcal{D}_{74}^{\text{sh}} = \{0; 0,08; 0,12; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{79}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{82}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{83}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{105}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{107}^{\text{sh}} = \{0; 0,06; 0,07; 0,13; 0,14; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{110}^{\text{sh}} = \{0; 0,06; 0,07; 0,13; 0,14; 0,2\}$$

e o parâmetro de atualização da penalidade foi $\tau_\gamma = 2,5$.

As Figuras 6.7 e 6.8 apresentam os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt*, ao resolver a relaxação contínua e o modelo discreto. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 117,1271 MW, em um tempo computacional de 4,0032 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 117,1686 MW, em um tempo computacional de 5,9389 segundos. A Figura 6.9 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Figura 6.7: IEEE de 118 barras: *taps* dos transformadores. Figura 6.8: IEEE de 118 barras: susceptâncias *shunt* equivalentes.

Figura 6.9: IEEE de 118 barras: magnitudes de tensão.

6.5.5 Sistema IEEE de 300 Barras

O sistema elétrico IEEE de 300 barras possui as seguintes características:

- 1 barra *slack*;
- 68 barras com controle de geração de reativos;
- 231 barras de carga;
- 14 bancos de capacitores;
- 304 linhas de transmissão;
- 107 transformadores com *tap* variável.

O modelo matemático para o problema de FPOR com variáveis de controle discretas relativo ao sistema IEEE de 300 barras possui:

- 530 restrições de igualdade, relacionadas às equações de balanço de potência ativa e reativa;
- 738 restrições de desigualdade, sendo:
 - 600 restrições de limites operacionais de magnitudes de tensão;
 - 138 restrições de limites operacionais de geração de potência reativa nas barras de controle de reativos;

- 599 variáveis contínuas;
- 121 variáveis discretas.

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados. Por questões de implementação, as barras foram renumeradas de 1 a 300, uma vez que o banco de dados não apresenta a numeração consecutiva das barras.

No caso discreto, considerou-se que as susceptâncias *shunt* equivalentes dos bancos de capacitores nas barras 96, 99, 133, 143, 145, 152, 158, 169, 210, 217, 219, 227, 268 e 283 devem pertencer, respectivamente, aos conjuntos

$$\mathcal{D}_{96}^{\text{sh}} = \{0; 2; 3,5; 4,5\}$$

$$\mathcal{D}_{99}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{133}^{\text{sh}} = \{0; 0,19; 0,34; 0,39\}$$

$$\mathcal{D}_{143}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{145}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{152}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{158}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{169}^{\text{sh}} = \{-2,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{210}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{217}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{219}^{\text{sh}} = \{-1,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{227}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{268}^{\text{sh}} = \{0; 0,15\}$$

$$\mathcal{D}_{283}^{\text{sh}} = \{0; 0,15\}$$

e o parâmetro de atualização da penalidade foi $\tau_\gamma = 5$.

As Figuras 6.10 e 6.11 apresentam os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt*, ao resolver a relaxação contínua e o modelo discreto. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 371,4149 MW, em um tempo computacional de 84,7629 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 372,5122 MW, em um tempo computacional de 67,1289 segundos. A Figura 6.12 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Figura 6.10: IEEE de 300 barras: *taps* dos transformadores. Figura 6.11: IEEE de 300 barras: susceptâncias *shunt* equivalentes.

Figura 6.12: IEEE de 300 barras: magnitudes de tensão.

6.5.6 Análise dos Resultados

Pode-se observar que o método de RNRC apresenta desempenho satisfatório para os sistemas elétricos testados, visando a minimização das perdas de potência ativa. Os resultados indicam que a abordagem proposta é capaz de resolver o problema de FPOR com variáveis de controle discretas, convergindo em tempo computacional aceitável com uma tolerância de 10^{-5} para as condições de KKT do problema penalizado e para a discretização das variáveis. Todas as restrições estão atendidas com a tolerância especificada, incluindo as magnitudes de tensão nas barras dos sistemas elétricos, as quais estão dentro dos limites estipulados no banco de dados, conforme indicado nas figuras anteriores.

De modo geral, a inclusão das variáveis discretas torna a resolução do problema de FPOR mais difícil e levemente mais custosa computacionalmente. Cabe destacar, entretanto, o comportamento para o sistema elétrico de 300 barras, cuja relaxação contínua exigiu um maior tempo para convergência do que o caso em que se utilizou a penalidade para discretização.

Observa-se que a função penalidade não atua arredondando os valores discretos para a posição discreta mais próxima, o que permite que o método tenha maior liberdade para determinar soluções discretas de boa qualidade. O método proposto mostrou-se robusto, sendo capaz de convergir em todos os casos, utilizando praticamente o mesmo conjunto de parâmetros para todos os testes. O único parâmetro que demandou um ajuste mais cuidadoso foi o fator de atualização da penalidade para discretização. O motivo para isto provavelmente está associado ao fato de que a ordem de grandeza da função objetivo

varia para cada sistema elétrico testado. A robustez da abordagem proposta está associada ao efeito regularizador da região de confiança, que ajustou o raio adequadamente, possibilitando o progresso em direção à solução ótima.

Uma das dificuldades associadas a esta abordagem, entretanto, é o critério para aceitação do passo, que utiliza uma função de mérito não-diferenciável, e está propensa ao efeito Maratos. De fato, para o sistema elétrico de 300 barras, verificou-se a ocorrência de várias iterações com correções de segunda ordem. Apesar destas iterações contribuírem para acelerar a convergência, elas também podem causar o comportamento oscilatório do raio da região de confiança, uma vez que um passo de correção de segunda ordem não precisa necessariamente atender à restrição de região de confiança. Neste sentido, a utilização de outro critério para aceitação do passo, como o método de filtros proposto por FLETCHER & LEYFFER (2002), pode auxiliar no aperfeiçoamento desta abordagem. Além disso, investigações mais aprofundadas são necessárias para compreender possíveis interações entre a função de mérito com outros aspectos da abordagem proposta.

Outra possibilidade de aperfeiçoamento desta abordagem é a utilização de algum método aproximado para resolução do subproblema tangencial. Na versão de qualificação deste trabalho, o método do gradiente conjugado de Steihaug foi utilizado para resolver o subproblema tangencial, porém dificuldades computacionais ocorreram com o sistema elétrico de 300 barras, o que motivou o estudo e implementação do método PAG. Entretanto, é possível que a utilização de um pré-condicionador possa contribuir para a melhoria do desempenho do método do gradiente conjugado de Steihaug, uma vez que a matriz Hessiana no método de rescalamento não-linear também pode se tornar mal-condicionada.

Capítulo 7

Pontos Interiores com Região de Confiança

Os métodos de região de confiança constituem uma abordagem robusta para a resolução de problemas de PNL, devido ao efeito regularizador proporcionado pela minimização do modelo em uma região predefinida. Entretanto, o cálculo das direções de busca em um método de região de confiança é naturalmente mais custoso do que o dos métodos de busca linear, uma vez que é necessário resolver um subproblema quadrático (o qual pode ser não-convexo) com uma restrição de região de confiança, a cada iteração.

Desde o trabalho de KARMARKAR (1984), os métodos de pontos interiores se tornaram uma importante classe de algoritmos para resolução de problemas de PL. Em particular, alguns anos mais tarde, os métodos do tipo primal-dual de pontos interiores se popularizaram amplamente devido à sua eficiência computacional e adaptabilidade para outros tipos de problemas, como os de PNL.

Nos estudos de sistemas elétricos de potência, o método primal-dual de pontos interiores se tornou um dos algoritmos mais bem-sucedidos na resolução de problemas de FPO, o que é evidenciado pela grande quantidade de trabalhos na literatura que utilizam esta abordagem. O trabalho de GRANVILLE (1994) foi um dos pioneiros na aplicação do método primal-dual de pontos interiores a problemas de FPO, mostrando que estes algoritmos têm um potencial significativo para a resolução de problemas de FPO de grande porte. WU ET AL. (1994) mostraram que a variante do tipo preditor-corretor do método primal-dual de pontos interiores pode tornar sua aplicação prática ainda mais eficiente.

Desde então, estes métodos têm sido aplicados a modelos cada vez mais sofisticados de FPO. Por exemplo, HALILBAŠIĆ ET AL. (2019) utilizam o método primal-dual de pontos interiores do *solver* MIPS do pacote MATPOWER para resolver o problema de FPO com restrições probabilísticas, enquanto CAPITANESCU & WEHENKEL (2013) resolveram instâncias do problema de FPO com restrições de segurança, as quais constituem problemas de grande porte. Em PLATBROOD ET AL. (2014), os autores propuseram uma

abordagem iterativa para o problema de FPO com restrições de segurança e compressão da rede, que utiliza o método de pontos interiores com região de confiança proposto por BYRD ET AL. (1999) como um de seus módulos computacionais. Esta abordagem possibilitou a resolução de instâncias do problema de FPO com restrições de segurança que possuem 277 milhões de variáveis.

Apesar da quantidade significativa de trabalhos acerca de métodos de pontos interiores, esta classe de algoritmos ainda constitui uma importante linha de pesquisa em otimização, fato este que é evidenciado pelas publicações recentes sobre o tema (HUO ET AL., 2018; HINDER & YE, 2018). Vertentes modernas de pesquisa sobre os métodos de pontos interiores incluem a proposição de variações de métodos de pontos interiores que sejam mais robustas e eficientes (HINDER & YE, 2018) e sua especialização para determinadas classes de problemas. Por exemplo, em LU ET AL. (2018), é proposto um algoritmo de pontos interiores descentralizado para resolução do problema de FPO descentralizado.

A globalização de algoritmos para problemas de PNL normalmente é estabelecida por meio da associação de uma função de mérito a uma estratégia de busca linear ou região de confiança. A maioria dos algoritmos de pontos interiores propostos na literatura utiliza busca unidimensional, tais como o *solver* LOQO de VANDERBEI & SHANNO (1999) e o método de pontos interiores com filtro IPOPT de WÄCHTER & BIEGLER (2006). Exceções incluem o método de pontos interiores com região de confiança de BYRD ET AL. (2000), que deu origem ao *solver* KNITRO e utiliza a técnica de Byrd-Omojokun delineada no Capítulo 6, e o método proposto por YAMASHITA ET AL. (2005). Entretanto, o método de pontos interiores de BYRD ET AL. (2000) não pode ser visto como um método primal-dual convencional, uma vez que as variáveis duais são obtidas por estimativas de mínimos quadrados e não atualizadas utilizando as direções de busca obtidas a partir do subproblema de região de confiança.

Neste capítulo, estamos particularmente interessados no método de pontos interiores com região de confiança descrito em YAMASHITA ET AL. (2005), uma vez que este se diferencia perceptivelmente dos métodos de região de confiança clássicos. Uma das características mais marcantes dos métodos de região de confiança tradicionais é a necessidade de resolver um subproblema de minimização de uma função quadrática, a qual pode ser não-convexa, com uma restrição de região de confiança, a fim de determinar o passo para atualização das variáveis. O método de pontos interiores com região de confiança proposto por YAMASHITA ET AL. (2005), em contrapartida, se assemelha mais aos métodos primais-duais de pontos interiores clássicos, nos quais as direções de busca são computadas a partir da resolução de sistemas lineares.

Mais recentemente, BIRGIN ET AL. (2011) apresentaram a ideia de modificação de algoritmos por meio de uma Região de Confiança Exterior (RCE). Segundo os autores, métodos de penalidade e Lagrangianos para problemas de otimização não-convexa podem ser afetados negativamente pelo comportamento da função objetivo em pontos infactíveis.

Se a função objetivo assume valores muito baixos na região infactível, os iterandos podem ser atraídos por minimizadores indesejáveis, e o algoritmo pode divergir. Os autores mostraram que a versão modificada de um algoritmo de Lagrangiano aumentado, utilizando a RCE, é capaz de evitar este fenômeno.

Dado um algoritmo A para resolução de um problema matemático baseado na solução iterativa de subproblemas mais simples, uma modificação no algoritmo A por meio da RCE é o resultado da adição de uma restrição de região de confiança a cada subproblema. O tamanho da região de confiança é atualizado de modo adaptativo, de acordo com o comportamento das variáveis, e os novos subproblemas não devem ser mais complexos do que os originais. O algoritmo descrito em YAMASHITA ET AL. (2005) parece se aproximar destas ideias. Neste algoritmo, as direções de busca são calculadas de modo similar ao método primal-dual de pontos interiores descrito em GRANVILLE (1994), resolvendo um sistema linear advindo das condições necessárias de otimalidade de KKT. Entretanto, se apropriada de ideias dos métodos de região de confiança para decidir se o passo deve ser aceito ou rejeitado. Neste sentido, o objetivo deste capítulo é investigar o método descrito em YAMASHITA ET AL. (2005), propor modificações que possam torná-lo mais eficiente, e verificar sua viabilidade para a resolução de problemas de FPOR com variáveis de controle discretas.

7.1 Método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança (PDPIRC)

7.1.1 Ciclo Externo

Seja um problema de PNL da forma

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) \leq 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \tag{7.1}$$

em que $x \in \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ($m < n$) e $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ são funções de classe C^2 que constituem, respectivamente, a função objetivo, restrições de igualdade e restrições de desigualdade do problema.

Em métodos de pontos interiores, utilizam-se as variáveis de folga para tratamento das restrições de desigualdade, uma vez que elas permitem avaliar facilmente a distância do iterando à fronteira. Este aspecto é crucial para o funcionamento do método, uma vez que a função barreira logarítmica não está bem definida para argumentos não-positivos. Adicionando variáveis de folga ao problema (7.1), obtém-se o seguinte problema equiva-

lente:

$$\begin{aligned}
 \min \quad & f(x) \\
 \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\
 & h_j(x) + s_j = 0 \quad j = 1, \dots, p \\
 & s_j \geq 0 \quad j = 1, \dots, p
 \end{aligned} \tag{7.2}$$

em que $s \in \mathbb{R}^p$.

Ao problema (7.2) podemos associar a seguinte função Lagrangiana:

$$L(x, s, \lambda, \pi, \nu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j [h_j(x) + s_j] - \sum_{j=1}^p \nu_j s_j \tag{7.3}$$

em que $\lambda \in \mathbb{R}^m$, $\pi \in \mathbb{R}^p$ e $\nu \in \mathbb{R}^p$ são, respectivamente, os vetores de multiplicadores de Lagrange associados às restrições de igualdade originais, desigualdades transformadas em igualdades e condição de não-negatividade das folgas.

As condições necessárias de otimalidade de KKT para o problema com folgas (7.2) são expressas por:

$$\begin{cases}
 \nabla f(x) + Jg(x)^T \lambda + Jh(x)^T \pi = 0 \\
 \pi - \nu = 0 \\
 g(x) = 0 \\
 h(x) + s = 0 \\
 s \circ \nu = 0 \\
 s \geq 0, \nu \geq 0
 \end{cases} \tag{7.4}$$

em que $Jg(x)$ denota a matriz Jacobiana de g , $Jh(x)$ denota a matriz Jacobiana de h e $s \circ \nu$ denota o produto de Hadamard de s e ν .

Estas condições podem ser reescritas como:

$$r_0(\omega) = \begin{pmatrix} \nabla_x L(\omega) \\ g(x) \\ h(x) + s \\ s \circ \pi \end{pmatrix} = 0, \quad s \geq 0, \quad \pi \geq 0 \tag{7.5}$$

em que $\nabla_x L(\omega) = \nabla f(x) + Jg(x)^T \lambda + Jh(x)^T \pi$.

Assim como os métodos primais-duais de pontos interiores clássicos para PNL, o método proposto por YAMASHITA ET AL. (2005) computa soluções aproximadas para uma sequência de problemas de barreira da forma

$$\begin{aligned}
 \min \quad & f(x) - \mu \sum_{j=1}^p \ln(s_j) \\
 \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\
 & h_j(x) + s_j = 0 \quad j = 1, \dots, p \\
 & s_j > 0 \quad j = 1, \dots, p
 \end{aligned} \tag{7.6}$$

em que $\mu > 0$ é uma constante especificada, conhecida como parâmetro de barreira.

Sob hipóteses adequadas e para valores suficientemente pequenos de μ , uma solução do problema de barreira fornece uma boa aproximação para uma solução do problema original (7.1).

Ao problema de barreira (7.6) podemos associar a seguinte função Lagrangiana:

$$\mathcal{L}(x, s, \lambda, \pi) = f(x) - \mu \sum_{j=1}^p \ln(s_j) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j [h_j(x) + s_j] \quad (7.7)$$

em que $\lambda \in \mathbb{R}^m$ e $\pi \in \mathbb{R}^p$ são, respectivamente, os vetores de multiplicadores de Lagrange associados às restrições de igualdade originais e desigualdades transformadas em igualdades.

As condições necessárias de otimalidade de KKT para o problema de barreira são expressas por:

$$\begin{cases} \nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(x) + \sum_{j=1}^p \pi_j \nabla h_j(x) = 0 \\ -\mu S^{-1}e + \pi = 0 \\ g(x) = 0 \\ h(x) + s = 0 \\ s > 0, \pi > 0 \end{cases} \quad (7.8)$$

Uma peça-chave dos métodos de pontos interiores é o tratamento do segundo conjunto de equações do sistema não-linear (7.8). A experiência computacional de diversos trabalhos indica que o desempenho do método de pontos interiores é aprimorado se resolvemos a seguinte forma equivalente de (7.8):

$$r(\omega, \mu) = \begin{pmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(\omega) \\ S\Pi e - \mu e \\ g(x) \\ h(x) + s \end{pmatrix} = 0, \quad s > 0, \quad \pi > 0 \quad (7.9)$$

em que $\nabla_x \mathcal{L}(\omega) = \nabla f(x) + Jg(x)^T \lambda + Jh(x)^T \pi$, $S = \text{diag}(s_1, s_2, \dots, s_p)$, $\Pi = \text{diag}(\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_p)$ e e é um vetor cujas componentes são todas iguais a 1 de dimensão $p \times 1$.

Estas condições são frequentemente chamadas de condições de KKT-barreira ou de centralidade, e um ponto $\omega(\mu) = (x(\mu), s(\mu), \lambda(\mu), \pi(\mu))$ que satisfaz estas condições é chamado de ponto KKT-barreira. Deve-se notar que $r_0(\omega) = r(\omega, 0)$, isto é, as condições de KKT do problema original podem ser recuperadas fazendo $\mu \rightarrow 0$ nas condições de KKT do problema de barreira. Assim, pode-se esperar que a sequência $\{\omega^K\}$, que consiste de aproximações para os pontos KKT-barreira com $\{\mu^K\}$, $\mu^K \rightarrow 0$, convirja para um ponto KKT do problema original.

Tendo em vista a discussão anterior, o Algoritmo 16 sintetiza os passos fundamentais do ciclo externo do método PDPIRC.

Algoritmo 16 Método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança

1: Parâmetros: $\mu^0 > 0$, $\varepsilon_{\text{ext}} > 0$ e $\varepsilon_{\text{int}} > 0$.

Inicialização: Escolha $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $s^0 \in \mathbb{R}_{++}^p$, $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$, $\pi^0 \in \mathbb{R}_{++}^p$ e faça $K = 0$.

- 2: **Ciclo Interno:** Forme o problema (7.6) e resolva-o, obtendo um ponto KKT-barreira aproximado ω^{K+1} , que satisfaz a condição

$$\|r(\omega^{K+1}, \mu^K)\|_\infty \leq \varepsilon_{\text{int}} \quad (7.10)$$

- 3: Se $\|r_0(\omega^{K+1})\|_\infty \leq \varepsilon_{\text{ext}}$, então pare. Do contrário, escolha $\mu^{K+1} \in (0, \mu^K)$.
4: Faça $K = K + 1$ e volte para o Passo 2.
-

No Algoritmo 16, a condição (7.10) é utilizada como critério de parada no ciclo interno, de modo a obter uma solução aproximada ω^{K+1} do problema de barreira, com tolerância ε_{int} . Em seguida, no passo 3, é verificado se o ponto KKT-barreira aproximado, ω^{K+1} , satisfaz as condições de KKT para o problema original, com uma tolerância ε_{ext} .

7.1.2 Ciclo Interno: Resolução do Problema de Barreira

Uma iteração interna de um método primal-dual de pontos interiores consiste, tipicamente, na aplicação do método de Newton para resolução das condições de otimalidade (7.9) para um valor fixo $\mu^K > 0$, visando determinar um ponto KKT-barreira aproximado. Por este motivo, iremos omitir o índice K relativo às iterações externas.

Assumindo que as variáveis s e π são estritamente positivas e aplicando o método de Newton ao sistema não-linear (7.9), obtém-se:

$$\begin{pmatrix} H & 0 & Jg(x)^T & Jh(x)^T \\ 0 & \Pi & 0 & S \\ Jg(x) & 0 & 0 & 0 \\ Jh(x) & I_p & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \\ \Delta \lambda \\ \Delta \pi \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(\omega) \\ S\Pi e - \mu e \\ g(x) \\ h(x) + s \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

em que $H = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(\omega) = \nabla^2 f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla^2 g_i(x) + \sum_{i=1}^m \pi_i \nabla^2 h_i(x)$ e I_p é a matriz identidade de ordem p .

7.1.2.1 Função de Mérito e Direção de Referência

Assim como os métodos descritos nos capítulos anteriores, a globalização desta abordagem utiliza uma função de mérito para avaliar o progresso rumo à otimalidade e factibilidade. Para tanto, utiliza-se a seguinte função de mérito na norma ℓ_1 :

$$M(w, \mu) = f(x) - \mu \sum_{j=1}^p \ln(s_j) + \rho \sum_{i=1}^m |g_i(x)| + \rho \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j| \quad (7.12)$$

em que $w = (x, s)$ é o vetor de variáveis primais, $\mu > 0$ é o parâmetro de barreira e $\rho > 0$ é o parâmetro de penalidade da função de mérito.

Conforme apontado por YAMASHITA ET AL. (2005), pode-se mostrar que se ρ for suficientemente grande de modo a satisfazer $\rho > \max\{\|\lambda\|_\infty, \|\pi\|_\infty\}$, então as condições de otimalidade (7.9) do problema de barreira são equivalentes às condições de otimalidade

do problema

$$\begin{aligned} \min \quad & M(w, \mu) \\ & s_j > 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (7.13)$$

Em diversos algoritmos primais-duais de pontos interiores na literatura, como os dos *solvers* IPOPT (WÄCHTER & BIEGLER, 2006) e LOQO (VANDERBEI & SHANNO, 1999), a função de mérito é utilizada como parte do mecanismo de busca unidimensional, utilizando-se uma busca inexata do tipo Armijo para determinar um comprimento de passo apropriado. Neste contexto, é fundamental que as direções de busca sejam de descida para a função de mérito, de modo a garantir que a busca unidimensional possa ser efetuada com sucesso. Outro aspecto a ser destacado é que as variáveis duais não fazem parte direta da função de mérito (7.12). Entretanto, é possível utilizar funções de mérito primais-duais, as quais também incluem uma medida relacionada ao atendimento da condição de folgas complementares (ARMAND & OMHENI, 2017).

Seguindo as ideias propostas por YAMASHITA ET AL. (2005), neste trabalho optou-se por estudar como os elementos básicos dos métodos de região de confiança podem ser introduzidos nos métodos primais-duais de pontos interiores tradicionais, visando torná-los mais robustos. Em métodos de região de confiança, o grau de sucesso de um passo é medido comparando-se a redução real da função de mérito com a redução predita por seu modelo.

Para utilizar estas ideias, começamos definindo um modelo linear $M_l(w, \cdot) : \mathbb{R}^{n+p} \rightarrow \mathbb{R}$ da função de mérito em um ponto $w \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}^p$ com relação a uma variação $d = (dx^T, ds^T)^T \in \mathbb{R}^{n+p}$ por:

$$\begin{aligned} M_l(w, d) &= f(x) + \nabla f(x)^T dx - \mu \sum_{j=1}^p \ln(s_j) - (\mu S^{-1}e)^T ds \\ &\quad + \rho \sum_{i=1}^m |g_i(x) + \nabla g_i(x)^T dx| \\ &\quad + \rho \sum_{j=1}^p |h_j(x) + \nabla h_j(x)^T dx + s_j + ds_j| \\ &= M(w, \mu) + \nabla f(x)^T dx - (\mu S^{-1}e)^T ds \\ &\quad + \rho \sum_{i=1}^m (|g_i(x) + \nabla g_i(x)^T dx| - |g_i(x)|) \\ &\quad + \rho \sum_{j=1}^p (|h_j(x) + \nabla h_j(x)^T dx + s_j + ds_j| - |h_j(x) + s_j|) \end{aligned} \quad (7.14)$$

Definimos, ainda, um modelo quadrático $M_q(w, \cdot) : \mathbb{R}^{n+p} \rightarrow \mathbb{R}$ da função de mérito em um ponto $w \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}^p$ com relação a uma variação $d = (dx^T, ds^T)^T \in \mathbb{R}^{n+p}$ por:

$$M_q(w, d) = M_l(w, d) + \frac{1}{2} d^T Q d \quad (7.15)$$

Neste trabalho, utilizamos a matriz Q da forma

$$Q = \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1}\Pi \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

uma vez que esta forma possibilita, sob determinadas hipóteses, a convergência quadrática do algoritmo (YAMASHITA ET AL., 2005).

Assim, as variações na função de mérito e seus modelos linear e quadrático devido a um passo (primal) d são expressas, respectivamente, por:

$$\Delta M(w, d) = M(w, \mu) - M(w + d, \mu) \quad (7.17)$$

$$\begin{aligned} \Delta M_l(w, d) &= M_l(w, 0) - M_l(w, d) = M(w, \mu) - M_l(w, d) \\ &= -\nabla f(x)^T dx + (\mu S^{-1}e)^T ds \\ &\quad - \rho \sum_{i=1}^m (|g_i(x) + \nabla g_i(x)^T dx| - |g_i(x)|) \\ &\quad - \rho \sum_{j=1}^p (|h_j(x) + \nabla h_j(x)^T dx + s_j + ds_j| - |h_j(x) + s_j|) \end{aligned} \quad (7.18)$$

$$\begin{aligned} \Delta M_q(w, d) &= M_q(w, 0) - M_q(w, d) = M(w, \mu) - \left[M_l(w, d) + \frac{1}{2}d^T Qd \right] \\ &= M(w, \mu) - M_l(w, d) - \frac{1}{2}d^T Qd = \Delta M_l(w, d) - \frac{1}{2}d^T Qd \\ &= -\nabla f(x)^T dx + (\mu S^{-1}e)^T ds - \frac{1}{2}d^T Qd \\ &\quad - \rho \sum_{i=1}^m (|g_i(x) + \nabla g_i(x)^T dx| - |g_i(x)|) \\ &\quad - \rho \sum_{j=1}^p (|h_j(x) + \nabla h_j(x)^T dx + s_j + ds_j| - |h_j(x) + s_j|) \end{aligned} \quad (7.19)$$

Deve-se notar que $\Delta M(w, d)$ corresponde à redução real da função de mérito devido ao passo d , enquanto $\Delta M_l(w, d)$ e $\Delta M_q(w, d)$ correspondem, respectivamente, às reduções preditas pelos modelos linear e quadrático, devido ao passo d .

Além da direção de Newton, computamos uma direção adicional, chamada de direção de referência ou direção de máxima descida. A direção de referência tem um papel importante na demonstração de convergência global do algoritmo descrito em YAMASHITA ET AL. (2005) e é obtida substituindo a matriz H em (7.11) por uma matriz definida positiva D , e resolvendo o sistema:

$$\begin{pmatrix} D & 0 & Jg(x)^T & Jh(x)^T \\ 0 & \Pi & 0 & S \\ Jg(x) & 0 & 0 & 0 \\ Jh(x) & I_p & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_{\text{ref}} \\ \Delta s_{\text{ref}} \\ \Delta \lambda_{\text{ref}} \\ \Delta \pi_{\text{ref}} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(w) \\ S\Pi e - \mu e \\ g(x) \\ h(x) + s \end{pmatrix} \quad (7.20)$$

A direção de referência $\Delta \omega_{\text{ref}} = (\Delta x_{\text{ref}}^T, \Delta s_{\text{ref}}^T, \Delta \lambda_{\text{ref}}^T, \Delta \pi_{\text{ref}}^T)^T$ é também chamada de direção de máxima descida em analogia com o caso de otimização irrestrita. Esta nomenclatura

também está relacionada ao fato de que a direção de referência desempenha um papel similar ao do ponto de Cauchy no algoritmo.

Conforme explicado nos capítulos anteriores, ao minimizar o modelo da função de mérito, o método de região de confiança garante que a redução predita seja positiva. Em particular, no algoritmo de região de confiança descrito no Capítulo 6, a redução predita é mantida positiva por meio de escolhas apropriadas do parâmetro de penalidade da função de mérito. O próximo resultado indica que algo similar ocorre no algoritmo de pontos interiores aqui delineado, desde que o parâmetro de penalidade da função de mérito e as matrizes do sistema de direções satisfaçam determinadas condições.

Lema 7.1. Seja $\Delta\omega = (\Delta x^T, \Delta s^T, \Delta\lambda^T, \Delta\pi^T)^T$ a direção de busca obtida a partir de (7.11), para uma matriz qualquer H . Defina $\Delta w = (\Delta x^T, \Delta s^T)^T$. Então, a seguinte desigualdade é válida:

$$\begin{aligned} \Delta M_l(w, \Delta w) \geq \Delta w^T \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1}\Pi \end{pmatrix} \Delta w + (\rho - \|\lambda + \Delta\lambda\|_\infty) \sum_{i=1}^m |g_i(x)| \\ + (\rho - \|\pi + \Delta\pi\|_\infty) \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j| \end{aligned} \quad (7.21)$$

Se $\rho \geq \max\{\|\lambda + \Delta\lambda\|_\infty, \|\pi + \Delta\pi\|_\infty\}$ e H é semidefinida positiva, então $\Delta M_l(w, \Delta w) \geq 0$. Se, além disso, H for definida positiva e $\Delta M_l(w, \Delta w) = 0$, então $\Delta w = 0$.

Demonstração. Do sistema linear (7.11), temos que:

$$\begin{cases} H\Delta x + Jg(x)^T \Delta\lambda + Jh(x)^T \Delta\pi = -\nabla f(x) - Jg(x)^T \lambda - Jh(x)^T \pi \\ \Pi\Delta s + S\Delta\pi = -S\Pi e + \mu e \\ Jg(x)\Delta x = -g(x) \\ Jh(x)\Delta x + \Delta s = -h(x) - s \end{cases} \quad (7.22)$$

Este sistema pode se reescrito como:

$$\begin{cases} -\nabla f(x) = H\Delta x + Jg(x)^T(\lambda + \Delta\lambda) + Jh(x)^T(\pi + \Delta\pi) \\ \mu S^{-1}e = S^{-1}\Pi\Delta s + \pi + \Delta\pi \\ g(x) + Jg(x)\Delta x = 0 \\ h(x) + Jh(x)\Delta x + s + \Delta s = 0 \end{cases} \quad (7.23)$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
\Delta M_l(w, \Delta w) &= -\nabla f(x)^T \Delta x + (\mu S^{-1}e)^T \Delta s \\
&\quad - \rho \sum_{i=1}^m \underbrace{(|g_i(x) + \nabla g_i(x)^T \Delta x| - |g_i(x)|)}_0 \\
&\quad - \rho \sum_{j=1}^p \underbrace{(|h_j(x) + \nabla h_j(x)^T \Delta x + s_j + \Delta s_j| - |h_j(x) + s_j|)}_0 \\
&= -\nabla f(x)^T \Delta x + (\mu S^{-1}e)^T \Delta s + \rho \sum_{i=1}^m |g_i(x)| \\
&\quad + \rho \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j|
\end{aligned} \tag{7.24}$$

Assim, substituindo as duas primeiras equações de (7.23) em (7.24):

$$\begin{aligned}
\Delta M_l(w, \Delta w) &= \Delta x^T H \Delta x + (\lambda + \Delta \lambda)^T Jg(x) \Delta x + (\pi + \Delta \pi)^T Jh(x) \Delta x \\
&\quad + \Delta s^T S^{-1} \Pi \Delta s + (\pi + \Delta \pi)^T \Delta s \\
&\quad + \rho \sum_{i=1}^m |g_i(x)| + \rho \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j| \\
&= \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1} \Pi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \end{pmatrix} \\
&\quad - (\lambda + \Delta \lambda)^T g(x) - (\pi + \Delta \pi)^T (h(x) + s + \Delta s) \\
&\quad + (\pi + \Delta \pi)^T \Delta s + \rho \sum_{i=1}^m |g_i(x)| + \rho \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j|
\end{aligned} \tag{7.25}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
\Delta M_l(w, \Delta w) &= \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1} \Pi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \end{pmatrix} \\
&\quad - (\lambda + \Delta \lambda)^T g(x) - (\pi + \Delta \pi)^T (h(x) + s) \\
&\quad + \rho \sum_{i=1}^m |g_i(x)| + \rho \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j|
\end{aligned} \tag{7.26}$$

Da desigualdade de Cauchy-Schwarz para normas duais, tem-se que:

$$(\lambda + \Delta \lambda)^T g(x) \leq \|\lambda + \Delta \lambda\|_\infty \|g(x)\|_1 = \|\lambda + \Delta \lambda\|_\infty \sum_{i=1}^m |g_i(x)| \tag{7.27}$$

$$(\pi + \Delta \pi)^T (h(x) + s) \leq \|\pi + \Delta \pi\|_\infty \|h(x) + s\|_1 = \|\pi + \Delta \pi\|_\infty \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j| \tag{7.28}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \Delta M_l(w, \Delta w) &\geq \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1}\Pi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \end{pmatrix} \\ &\quad - \|\lambda + \Delta\lambda\|_\infty \sum_{i=1}^m |g_i(x)| - \|\pi + \Delta\pi\|_\infty \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j| \\ &\quad + \rho \sum_{i=1}^m |g_i(x)| + \rho \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j| \end{aligned} \quad (7.29)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \Delta M_l(w, \Delta w) &\geq \Delta w^T \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1}\Pi \end{pmatrix} \Delta w + (\rho - \|\lambda + \Delta\lambda\|_\infty) \sum_{i=1}^m |g_i(x)| \\ &\quad + (\rho - \|\pi + \Delta\pi\|_\infty) \sum_{j=1}^p |h_j(x) + s_j| \end{aligned} \quad (7.30)$$

o que prova a desigualdade do Lema.

Se $\rho \geq \max\{\|\lambda + \Delta\lambda\|_\infty, \|\pi + \Delta\pi\|_\infty\}$ e H é semidefinida positiva, então cada uma das parcelas do membro direito da desigualdade (7.30) é não-negativa, de modo que $\Delta M_l(w, \Delta w) \geq 0$.

Se $\Delta M_l(w, \Delta w) = 0$ e H é definida positiva, então cada uma das parcelas não-negativas do membro direito da desigualdade (7.30) deve ser nula. Logo, $\Delta w = 0$, uma vez que a matriz $\begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1}\Pi \end{pmatrix}$ é definida positiva. $\square$

O Lema 7.1 fornece um importante resultado para o funcionamento prático do método de região de confiança aqui investigado. Ele indica que a redução predita pelo modelo linear pode ser feita positiva, desde que se adote um parâmetro de penalidade $\rho \geq \max\{\|\lambda + \Delta\lambda\|_\infty, \|\pi + \Delta\pi\|_\infty\}$ e uma matriz H semidefinida positiva. Isto significa que a direção de referência obtida a partir da resolução do sistema (7.20) sempre permite que a redução predita pelo modelo linear seja não-negativa, desde que o parâmetro de penalidade seja escolhido adequadamente.

7.1.2.2 Cálculo do Passo para Atualização das Variáveis

A maioria dos métodos primais-duais de pontos interiores utiliza um múltiplo da direção de Newton computada a partir do sistema (7.11) como passo para atualização das variáveis primais e duais. Este é o caso, por exemplo, dos métodos de WÄCHTER & BIEGLER (2006) e VANDERBEI & SHANNO (1999). Nestes métodos um comprimento de passo adequado é computado utilizando uma busca unidimensional com função de mérito, de modo a garantir que um decréscimo suficiente seja atingido.

Em contrapartida, a abordagem investigada neste capítulo segue as ideias descritas em YAMASHITA ET AL. (2005), visando incorporar elementos básicos dos métodos de região de confiança nos métodos primais-duais de pontos interiores. A ideia desta abor-

dagem é, em uma iteração interna k , utilizar como passo para atualização das variáveis primais um múltiplo da combinação convexa da direção de Newton, Δw^k , com a direção de referência, Δw_{ref}^k . A escolha do fator de ponderação da combinação convexa é feita de modo a garantir que a redução no modelo quadrático seja, pelo menos, a metade da redução propiciada pela direção de referência.

A fim de apresentar estas ideias, consideremos que em uma iteração k o raio da região de confiança seja $\Delta^k > 0$. Sejam Δw^k e Δw_{ref}^k as componentes das direções $\Delta \omega^k$ e $\Delta \omega_{\text{ref}}^k$ relacionadas às variáveis primais. A partir destas direções, define-se o vetor:

$$\bar{d}^k = \sigma \Delta w^k + (1 - \sigma) \Delta w_{\text{ref}}^k \quad (7.31)$$

onde $\sigma \in [0, 1]$.

A ideia de combinar direções de busca para produzir um passo apropriado para atualização das variáveis, contudo, já foi empregada em outras abordagens de pontos interiores. Por exemplo, no trabalho de COLOMBO & GONDZIO (2008), os autores propõem a utilização de uma direção definida pela combinação das direções dos procedimentos preditor e corretor, em um método primal-dual de pontos interiores para PL. Entretanto, enquanto no método de COLOMBO & GONDZIO (2008) o objetivo da combinação das direções é produzir um algoritmo mais eficiente, na abordagem aqui apresentada o propósito é garantir o decréscimo suficiente da função de mérito.

A abordagem aqui proposta utiliza um múltiplo $d^k = \alpha \bar{d}^k$ da direção $\bar{d}^k$ como passo para atualização das variáveis. Este múltiplo deve ser escolhido de modo a atender três condições:

- (i) a restrição de região de confiança, isto é, $\|d^k\| \leq \Delta^k$;
- (ii) a condição de não-negatividade das variáveis de folga, isto é, $s^k + ds^k > 0$;
- (iii) a redução suficiente no modelo quadrático da função de mérito.

A condição (i) pode ser garantida utilizando um comprimento de passo α de valor no máximo igual a $\frac{\Delta^k}{\|\bar{d}^k\|}$. A condição (ii) pode ser garantida de modo similar aos métodos de pontos interiores tradicionais, utilizando um comprimento de passo que satisfaça a desigualdade:

$$s_j^k + ds_j^k \geq (1 - \tau)s_j^k, \quad \text{para todo } j = 1, \dots, p \quad (7.32)$$

em que τ é um parâmetro predefinido (tipicamente, $\tau = 0,995$).

Deve-se notar que, devido a esta condição, o raio da região de confiança não precisa ser desnecessariamente pequeno para satisfazer as condições de positividade das folgas. Além disso, a restrição de região de confiança somente é aplicada ao passo para as variáveis primais, não afetando o passo para atualização das variáveis duais.

A fim de atender a condição (iii), impõe-se que o passo d^k deve satisfazer a desigualdade:

$$\Delta M_q(w^k, d^k) \geq \frac{1}{2} \Delta M_q(w^k, \alpha^*(w^k, \Delta w_{\text{ref}}^k) \cdot \Delta w_{\text{ref}}^k) \quad (7.33)$$

onde

$$\alpha^*(w, d) = \arg \min \{ M_q(w, \alpha d) \mid \alpha \leq 1, \|\alpha d\| \leq \Delta, \alpha \in [0, \tau \bar{\alpha}(s, ds)] \} \quad (7.34)$$

e

$$\bar{\alpha}(s, ds) = \min_{j=1, \dots, p} \left\{ -\frac{s_j}{ds_j} \mid ds_j < 0 \right\} \quad (7.35)$$

O valor $\bar{\alpha}(s, ds)$ fornece o comprimento de passo máximo que pode ser dado ao longo de uma direção d para que as variáveis de folga não se tornem negativas. Portanto, $\alpha^*(w, d)$ é o comprimento do passo que minimiza o modelo quadrático M_q , a partir de w ao longo de d , no intervalo definido pela região de confiança e pela condição de positividade das folgas, expressa pela condição $\alpha \in [0, \tau \bar{\alpha}(s, ds)]$. Assim, a desigualdade (7.33) fornece uma condição de decréscimo suficiente baseada na direção de referência. O Algoritmo 17 sintetiza as ideias desta abordagem.

Algoritmo 17 Ciclo Interno: Método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança

- 1: Parâmetros: $\mu > 0$, $\rho > 0$, $\varepsilon_{\text{int}} > 0$, $\tau \in (0, 1)$, $\Delta^0 > 0$.
Inicialização: Escolha $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $s^0 \in \mathbb{R}_{++}^p$, $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$, $\pi^0 \in \mathbb{R}_{++}^p$ e faça $k = 0$.
- 2: Se $\|r(\omega^k, \mu)\| \leq \varepsilon_{\text{int}}$, então pare.
- 3: Calcule os vetores $\Delta \omega^k$ e $\Delta \omega_{\text{ref}}^k$. Se necessário, utilize o procedimento de correção de inércia descrito na próxima seção para computar $\Delta \omega^k$.
- 4: Para as direções Δw^k e Δw_{ref}^k , defina o vetor

$$\bar{d}^k = \sigma \Delta w^k + (1 - \sigma) \Delta w_{\text{ref}}^k$$

Determine $\sigma \in [0, 1]$ tal que o vetor $d^k = \alpha^*(w^k, \bar{d}^k) \cdot \bar{d}^k$ satisfaz as condições:

$$\|d^k\| \leq \Delta^k$$

$$ds_j^k \geq -\tau s_j^k, \quad j = 1, \dots, p$$

$$\Delta M_q(w^k, d^k) \geq \frac{1}{2} \Delta M_q(w^k, \alpha^*(w^k, \Delta w_{\text{ref}}^k) \cdot \Delta w_{\text{ref}}^k)$$

- 5: Atualizar o raio da região de confiança de acordo com as condições:

- Se $\Delta M(w^k, d^k) < 0$, então $\Delta^{k+1} = \frac{1}{2} \Delta^k$;
- Se $\frac{1}{2} \Delta M_q(w^k, d^k) \leq \Delta M(w^k, d^k) < \Delta M_q(w^k, d^k)$, então $\Delta^{k+1} = \frac{3}{2} \Delta^k$;
- Se $\Delta M(w^k, d^k) \geq \Delta M_q(w^k, d^k)$, então $\Delta^{k+1} = \frac{5}{2} \Delta^k$.

- 6: Se $\Delta M(w^k, d^k) \geq 0$, então faça $w^{k+1} = w^k + d^k$, calcule comprimentos de passo para as variáveis duais α_λ^k e α_π^k , faça $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \alpha_\lambda^k \Delta \lambda^k$ e $\pi^{k+1} = \pi^k + \alpha_\pi^k \Delta \pi^k$. Caso contrário, faça $\omega^{k+1} = \omega^k$.

7: Faça $k = k + 1$ e vá para o Passo 2.

O Algoritmo 17 apresenta de modo sucinto os passos utilizados no ciclo interno do método PDPIRC. Outros aspectos importantes para sua implementação prática são detalhados a seguir.

7.1.3 Aspectos Práticos

Nesta seção, são apresentados alguns detalhes práticos para a implementação da abordagem proposta.

7.1.3.1 Parâmetro da Combinação Convexa

No Passo 4 do Algoritmo 17, utiliza-se o vetor $\bar{d}^k$ para calcular o passo para atualização das variáveis. Para tanto, emprega-se um parâmetro de ponderação $\sigma \in [0, 1]$ para a combinação convexa dos vetores Δw^k e Δw_{ref}^k . O passo $d^k = \alpha^*(w^k, \bar{d}^k) \cdot \bar{d}^k$ computado deve satisfazer a condição de decréscimo suficiente (7.33).

Uma consequência do Lema 7.1 é que se H for definida positiva, o parâmetro de penalidade da função de mérito for suficientemente grande e a direção $\Delta w^k \neq 0$, então $\Delta M_l(w^k, \Delta w^k) > 0$. Além disso, nestas situações a matriz Q do modelo quadrático é definida positiva, de modo que também é possível escolher um passo ao longo desta direção que torne a redução do modelo quadrático positiva.

Em particular, quando $\sigma = 0$, a direção $\bar{d}^k = \Delta w_{\text{ref}}^k$ coincide com a direção de referência. Neste caso, pode-se determinar um passo na direção de referência para o qual a redução do modelo quadrático é positiva, desde que a direção primal não se anule e o parâmetro de penalidade seja escolhido apropriadamente. Portanto, na pior hipótese, escolhe-se $\sigma = 0$ para que as condições do Passo 4 do Algoritmo 17 sejam atendidas.

A situação em que $\sigma = 1$ corresponde à situação em que $\bar{d}^k = \Delta w^k$, isto é, a direção utilizada para determinar o passo é a direção de Newton. Como a direção de Newton, sob determinadas hipóteses, possibilita a convergência quadrática do algoritmo, tentamos $\sigma = 1$ primeiro, e reduzimos o valor de σ em 0,1 até que a condição explicitada no Passo 4 do Algoritmo 17 seja satisfeita.

Deve-se notar que as duas primeiras condições do Passo 4 do Algoritmo 17 são automaticamente satisfeitas, devido à maneira que o passo $d^k = \alpha^*(w^k, \bar{d}^k) \cdot \bar{d}^k$ é computado. Assim, a única condição que pode causar a redução do parâmetro σ é a de decréscimo suficiente da função de mérito.

7.1.3.2 Correção de Inércia

Em problemas de otimização não-convexa, as direções de busca obtidas ao resolver o sistema de Newton (7.11) podem não ser direções de descida para a função de mérito,

em especial quando a matriz H não é definida positiva. Isto ocorre porque o sistema (7.11) gera direções que buscam atender às condições necessárias de otimalidade de primeira ordem de KKT, as quais também podem ser satisfeitas por outros tipos de pontos estacionários, que não são de mínimo local.

No algoritmo originalmente proposto por YAMASHITA ET AL. (2005), uma direção de Newton é utilizada quando produz uma direção Δw^k tal que $\|\Delta w^k\| \leq C_1 \|\Delta w_{\text{ref}}^k\|$, em que C_1 é uma constante escolhida pelo usuário. Esta direção é utilizada mesmo quando a matriz H não é definida positiva. Nos testes realizados inicialmente, observou-se que esta estratégia pode levar a um aumento do número de iterações, devido à perda de qualidade das direções de busca. Isto acontece porque, quando a direção de Newton não é de boa qualidade, o método recorre a direções mais próximas da direção de referência para computar o passo, isto é, valores de σ mais próximos de 0, reduzindo sua eficiência.

A fim de contornar este problema, optou-se por utilizar a estratégia de correção de inércia apresentada por NOCEDAL & WRIGHT (2000) e WÄCHTER & BIEGLER (2006). A inércia de uma matriz simétrica A pode ser definida como a tripla ordenada $\mathcal{I}(A) = (i_+, i_-, i_0)$, em que i_+ é o número de autovalores positivos de A , i_- é o número de autovalores negativos de A e i_0 é o número de autovalores nulos de A .

Consideremos a forma simetrizada do sistema (7.11), obtida a partir da multiplicação à esquerda da segunda linha por S^{-1} :

$$\begin{pmatrix} H & 0 & Jg(x)^T & Jh(x)^T \\ 0 & S^{-1}\Pi & 0 & I_p \\ Jg(x) & 0 & 0 & 0 \\ Jh(x) & I_p & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta s \\ \Delta \lambda \\ \Delta \pi \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(\omega) \\ \pi - \mu S^{-1}e \\ g(x) \\ h(x) + s \end{pmatrix} \quad (7.36)$$

Conforme apontado por NOCEDAL & WRIGHT (2000), uma direção de descida para a função de mérito M (e, portanto, uma redução predita positiva para o modelo linearizado da função de mérito) pode ser obtida quando a submatriz

$$A = \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & S^{-1}\Pi \end{pmatrix} \quad (7.37)$$

do sistema (7.36) é definida positiva, a direção para as variáveis primais não é nula e o parâmetro de penalidade da função de mérito é suficientemente grande. Este fato está de acordo com o Lema 7.1.

Cabe salientar que, no ciclo interno do algoritmo aqui proposto, busca-se determinar uma solução para o subproblema de barreira (7.6), o qual pode ser visto como um problema com apenas restrições de igualdade, uma vez que a condição de positividade de s deve ser atendida naturalmente para que o logaritmo esteja bem definido.

Suponhamos que a matriz Jacobiana das restrições,

$$B = \begin{pmatrix} Jg(x) & 0 \\ Jh(x) & I_p \end{pmatrix} \quad (7.38)$$

tenha posto completo, isto é, posto $m + p$. Seja, ainda, Z uma matriz de ordem $(n + p) \times (n - m)$, cujas colunas formam uma base para o núcleo de B .

Conforme apontado por NOCEDAL & WRIGHT (2000), em vez de se exigir que a matriz A seja definida positiva em todo o espaço, para a obtenção de uma direção de descida para a função de mérito, é suficiente que a matriz Hessiana reduzida $Z^T A Z$ seja definida positiva, o que acontece quando a inércia da matriz primal-dual

$$W = \begin{pmatrix} H & 0 & Jg(x)^T & Jh(x)^T \\ 0 & S^{-1}\Pi & 0 & I_p \\ Jg(x) & 0 & 0 & 0 \\ Jh(x) & I_p & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.39)$$

é dada por

$$\mathcal{I}(W) = (n + p, m + p, 0) \quad (7.40)$$

Do ponto de vista da implementação prática, é conveniente utilizar uma versão modificada da matriz W , de modo a obter uma matriz $\tilde{W}$ que tenha a inércia desejada, que permitirá o cálculo de uma direção de descida para a função de mérito. Este tipo de modificação é bastante comum, sendo sugerida em diversos trabalhos na literatura (BENSON ET AL., 2004; WÄCHTER & BIEGLER, 2006; ARMAND & OMHENI, 2017).

Neste trabalho, utilizamos a modificação proposta em NOCEDAL & WRIGHT (2000) e WÄCHTER & BIEGLER (2006), na qual a matriz primal-dual modificada é da forma:

$$\tilde{W} = \begin{pmatrix} H + \delta_w I_n & 0 & Jg(x)^T & Jh(x)^T \\ 0 & S^{-1}\Pi & 0 & I_p \\ Jg(x) & 0 & -\delta_c I_m & 0 \\ Jh(x) & I_p & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.41)$$

em que $\delta_w \geq 0$ e $\delta_c \geq 0$ são parâmetros escolhidos heurísticamente, conforme o Algoritmo 18 a seguir, adaptado a partir de WÄCHTER & BIEGLER (2006).

Algoritmo 18 Heurística da Correção de Inércia

- 1: Parâmetros: $0 < \bar{\delta}_w^{\min} < \bar{\delta}_w^0 < \bar{\delta}_w^{\max}$, $\bar{\delta}_c > 0$, $0 < \kappa_w^- < 1 < \kappa_w^+ < \bar{\kappa}_w^+$, $\kappa_c \geq 0$.
No início do processo de otimização, faça $\delta_w^{\text{last}} = 0$.
- 2: Tente fatorar a matriz $\tilde{W}$ sem modificações, isto é, para $\delta_w = \delta_c = 0$. Se a matriz for não-singular e sua inércia for $(n + p, m + p, 0)$, utilize esta matriz para calcular a direção de Newton, $\Delta\omega$. Caso contrário, vá para o Passo 3.
- 3: Se a matriz possuir autovalores nulos, faça $\delta_c = \bar{\delta}_c \mu^{\kappa_c}$. Caso contrário, faça $\delta_c = 0$.
- 4: Se $\delta_w^{\text{last}} = 0$, faça $\delta_w = \bar{\delta}_w^0$. Caso contrário, faça $\delta_w = \max\{\bar{\delta}_w^{\min}, \kappa_w^- \delta_w^{\text{last}}\}$.
- 5: Tente fatorar a matriz modificada $\tilde{W}$. Se a inércia for $(n + p, m + p, 0)$, faça $\delta_w^{\text{last}} = \delta_w$ e utilize esta matriz para calcular a direção de Newton, $\Delta\omega$. Caso contrário, vá para o Passo 6.
- 6: Se $\delta_w^{\text{last}} = 0$, faça $\delta_w = \bar{\kappa}_w^+ \delta_w$. Caso contrário, faça $\delta_w = \kappa_w^+ \delta_w$.

7: Se $\delta_w > \bar{\delta}_w^{\max}$, faça $\delta_w = 0$, e utilize a matriz modificada para calcular a direção de Newton. Caso contrário, volte ao Passo 5.

Utilizou-se, neste trabalho, os mesmos parâmetros sugeridos por WÄCHTER & BIEGLER (2006), a saber: $\bar{\delta}_w^{\min} = 10^{-20}$, $\bar{\delta}_w^0 = 10^{-4}$, $\bar{\delta}_w^{\max} = 10^{40}$, $\bar{\delta}_c = 10^{-8}$, $\kappa_w^- = \frac{1}{3}$, $\kappa_w^+ = 8$, $\bar{\kappa}_w^+ = 100$ e $\kappa_c = \frac{1}{4}$.

Na heurística de correção de inércia descrita no Algoritmo 18, verifica-se inicialmente se a matriz sem modificações, W , fornece uma direção de descida para a função de mérito, de modo a se utilizar, quando possível, a direção sem perturbações. Quando isto não é possível, valores progressivamente maiores para δ_w são experimentados, até que a inércia desejada seja atingida. Deve-se observar que o primeiro valor tentativo para δ_w corresponde a uma fração κ_w^- de δ_w^{last} , que é o valor da perturbação na última iteração em que uma modificação foi necessária. Desta forma, busca-se a menor perturbação necessária para que a inércia desejada seja obtida, ao mesmo tempo em que se evita fatorações desnecessárias da matriz, quando δ_w é muito pequeno. Quando nenhuma modificação ainda foi necessária ($\delta_w^{\text{last}} = 0$), o fator de aumento $\bar{\kappa}_w^+$ para atualização de δ_w é maior do que quando alguma modificação foi aplicada, a fim de evitar fatorações desnecessárias quando a ordem de grandeza de δ_w ainda é desconhecida.

Finalmente, na heurística aqui utilizada, se o valor de δ_w excede $\bar{\delta}_w^{\max}$, ignora-se a inércia da matriz W , utilizando-a para calcular a direção de Newton. No algoritmo apresentado em WÄCHTER & BIEGLER (2006), quando isto acontece, aborta-se o procedimento de cálculo da direção de busca, utilizando-se uma fase de restauração. Isto porque, nestas situações, não é possível garantir uma direção de descida para a função de mérito, o que pode levar o algoritmo a ficar preso indefinidamente no procedimento de busca unidimensional. No algoritmo aqui proposto, o passo é calculado com base na combinação convexa da direção de Newton com a direção de referência, sendo que esta última sempre possibilita um decréscimo na função de mérito. Assim, na pior hipótese, o método calculará um passo que é um múltiplo apenas da direção de referência.

7.1.3.3 Cálculo do Comprimento de Passo

Para uma dada escolha do parâmetro da combinação convexa, σ , é necessário calcular o comprimento de passo $\alpha^*(w^k, \bar{d}^k)$, a fim de determinar o passo $d^k = \alpha^*(w^k, \bar{d}^k) \cdot \bar{d}^k$ para atualização das variáveis primais. Os resultados a seguir indicam que o cálculo de $\alpha^*(w^k, \bar{d}^k)$ é simples, devido à natureza quadrática do modelo da função de mérito.

Lema 7.2. Se $d = (dx^T, ds^T)^T \in \mathbb{R}^{n+p}$ é um vetor que satisfaz:

$$\begin{cases} g(x) + Jg(x)dx = 0 \\ h(x) + Jh(x)dx + s + ds = 0 \end{cases} \quad (7.42)$$

então vale a seguinte condição:

$$\Delta M_l(w, \alpha d) = \alpha \Delta M_l(w, d), \quad \alpha \in [0, 1] \quad (7.43)$$

Demonstração. Da definição da redução do modelo linearizado, tem-se que:

$$\begin{aligned} \Delta M_l(w, \alpha d) &= -\nabla f(x)^T(\alpha dx) + (\mu S^{-1}e)^T(\alpha ds) \\ &\quad - \rho \sum_{i=1}^m (|g_i(x) + \nabla g_i(x)^T(\alpha dx)| - |g_i(x)|) \\ &\quad - \rho \sum_{j=1}^p (|h_j(x) + \nabla h_j(x)^T(\alpha dx) + s_j + \alpha ds_j| - |h_j(x) + s_j|) \\ &= \alpha [-\nabla f(x)^T dx + (\mu S^{-1}e)^T ds] \\ &\quad - \rho \sum_{i=1}^m (|(1-\alpha)g_i(x) + \alpha(g_i(x) + \nabla g_i(x)^T dx)| - |g_i(x)|) \\ &\quad - \rho \sum_{j=1}^p (|(1-\alpha)(h_j(x) + s_j) + \alpha(h_j(x) + \nabla h_j(x)^T dx + s_j + ds_j)| - |h_j(x) + s_j|) \\ &= \alpha (-\nabla f(x)^T dx + (\mu S^{-1}e)^T ds) - \rho \sum_{i=1}^m ((1-\alpha)|g_i(x)| - |g_i(x)|) \\ &\quad - \rho \sum_{j=1}^p ((1-\alpha)|h_j(x) + s_j| - |h_j(x) + s_j|) \\ &= \alpha \left[-\nabla f(x)^T dx + (\mu S^{-1}e)^T ds - \rho \sum_{i=1}^m (-|g_i(x)|) - \rho \sum_{j=1}^p (-|h_j(x) + s_j|) \right] \\ &= \alpha \left[-\nabla f(x)^T dx + (\mu S^{-1}e)^T ds - \rho \sum_{i=1}^m (|g_i(x) + \nabla g_i(x)^T dx| - |g_i(x)|) \right. \\ &\quad \left. - \rho \sum_{j=1}^p (|h_j(x) + \nabla h_j(x)^T dx + s_j + ds_j| - |h_j(x) + s_j|) \right] \\ &= \alpha \Delta M_l(w, d) \end{aligned}$$

□

Lema 7.3. Sejam $x \in \mathbb{R}^n$, $s \in \mathbb{R}_+^p$, $0 \neq d \in \mathbb{R}^{n+p}$ e $\Delta > 0$ dados. Assuma que $\Delta M_l(w, d) > 0$ e que

$$\begin{cases} g(x) + Jg(x)dx = 0 \\ h(x) + Jh(x)dx + s + ds = 0 \end{cases} \quad (7.44)$$

Então o comprimento de passo $\alpha^*(w, d)$ pode ser expresso por:

$$\alpha^*(w, d) = \min \left\{ 1, \frac{\Delta}{\|d\|}, \tau \bar{\alpha}(s, ds), \frac{\Delta M_l(w, d)}{\max\{d^T Q d, 0\}} \right\} \quad (7.45)$$

em que o termo $\frac{\Delta M_l(w, d)}{\max\{d^T Q d, 0\}}$ é considerado como infinito se o denominador é nulo. Além disso, tem-se que:

$$\Delta M_q(w, \alpha^*(w, d) \cdot d) \geq \frac{1}{2} \alpha^*(w, d) \Delta M_l(w, d) \quad (7.46)$$

Demonstração. Pela definição,

$$M_q(w, d) = M_l(w, d) + \frac{1}{2}d^T Q d \quad (7.47)$$

Além disso,

$$\Delta M_l(w, d) = M_l(w, 0) - M_l(w, d) = M(w, \mu) - M_l(w, d)$$

de modo que

$$M_l(w, d) = M(w, \mu) - \Delta M_l(w, d) \quad (7.48)$$

Portanto, utilizando (7.47) e (7.48), obtemos:

$$\begin{aligned} M_q(w, \alpha d) &= M(w, \mu) - \Delta M_l(w, \alpha d) + \frac{1}{2}(\alpha d)^T Q (\alpha d) \\ &= M(w, \mu) - \alpha \Delta M_l(w, d) + \frac{1}{2}(d^T Q d)\alpha^2 \end{aligned} \quad (7.49)$$

Caso 1. $d^T Q d > 0$.

Nesta situação, o minimizador irrestrito da função convexa

$$\varphi(\alpha) = M(w, \mu) - \alpha \Delta M_l(w, d) + \frac{1}{2}(d^T Q d)\alpha^2 \quad (7.50)$$

ocorre para

$$\varphi'(\hat{\alpha}) = -\Delta M_l(w, d) + (d^T Q d)\hat{\alpha} = 0 \quad (7.51)$$

ou seja,

$$\hat{\alpha} = \frac{\Delta M_l(w, d)}{d^T Q d} \quad (7.52)$$

Disto, segue da definição de $\alpha^*(w, d)$, que:

$$\alpha^*(w, d) = \min \left\{ 1, \frac{\Delta}{\|d\|}, \tau \bar{\alpha}(s, ds), \frac{\Delta M_l(w, d)}{d^T Q d} \right\} \quad (7.53)$$

Da condição acima, tem-se que

$$\alpha^*(w, d) \leq \frac{\Delta M_l(w, d)}{d^T Q d} \quad (7.54)$$

ou seja,

$$\alpha^*(w, d)d^T Q d \leq \Delta M_l(w, d) \quad (7.55)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \Delta M_q(w, \alpha^*(w, d) \cdot d) &= \Delta M_l(w, \alpha^*(w, d) \cdot d) - \frac{1}{2}\alpha^*(w, d)^2 d^T Q d \\ &\geq \alpha^*(w, d)\Delta M_l(w, d) - \frac{1}{2}\alpha^*(w, d)\Delta M_l(w, d) \\ &= \frac{1}{2}\alpha^*(w, d)\Delta M_l(w, d) \end{aligned} \quad (7.56)$$

Caso 2. $d^T Q d \leq 0$.

Nesta situação, o minimizador irrestrito da função $\varphi(\alpha)$ em (7.50) ocorre na extremidade direita do intervalo de valores delimitados pelo passo unitário, pelo raio da região de

confiança, e pela condição de positividade das variáveis de folga, de modo que

$$\alpha^*(w, d) = \min \left\{ 1, \frac{\Delta}{\|d\|}, \tau \bar{\alpha}(s, ds) \right\} \quad (7.57)$$

Além disso,

$$\begin{aligned} \Delta M_q(w, \alpha^*(w, d) \cdot d) &= \Delta M_l(w, \alpha^*(w, d) \cdot d) - \frac{1}{2} \alpha^*(w, d)^2 d^T Q d \\ &= \alpha^*(w, d) \Delta M_l(w, d) - \frac{1}{2} \alpha^*(w, d)^2 d^T Q d \\ &\geq \alpha^*(w, d) \Delta M_l(w, d) + 0 \\ &\geq \frac{1}{2} \alpha^*(w, d) \Delta M_l(w, d) \end{aligned} \quad (7.58)$$

□

O Lema 7.3 fornece uma expressão simples para o cálculo de do comprimento do passo $\alpha^*(w^k, \bar{d}^k)$, o qual é necessário no Passo 4 do Algoritmo 17. Deve-se notar que, em virtude da segunda parte do Lema 7.3, se a redução predita pelo modelo linear for positiva, então a redução predita pelo modelo quadrático também o será, tendo valor igual a pelo menos a metade da redução predita pelo modelo linear.

7.1.3.4 Cálculo da Direção de Referência

A fim de calcular Δw_{ref} , faz-se necessário utilizar uma matriz diagonal D que seja definida positiva. A escolha mais simples para a matriz D é, portanto, a matriz identidade. Neste trabalho, utilizou-se uma matriz diagonal cujos elementos diagonais têm a mesma ordem de grandeza dos elementos diagonais da matriz Hessiana exata, sem exceder a ordem de grandeza da matriz identidade.

Portanto, sendo $D = (d_{ij})_{n \times n}$, tem-se que:

$$d_{ii} = \min\{ |(\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(\omega))_{ii}|, 1 \}, \quad d_{ij} = 0, \text{ para } i \neq j \quad (7.59)$$

7.1.3.5 Parâmetros de Penalidade da Função de Mérito

Na implementação realizada, conforme sugerido por YAMASHITA ET AL. (2005), utilizou-se um parâmetro de penalidade da função de mérito para cada restrição. Assim, tem-se os vetores de parâmetros de penalidade $\rho_g \in \mathbb{R}^m$ e $\rho_h \in \mathbb{R}^p$, relativos às restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente.

Uma componente $\rho_{g,i}$ do vetor ρ_g é atualizada se $\rho_{g,i} \leq \max\{ |\lambda_i + \Delta \lambda_i|, |\lambda_i + \Delta \lambda_{\text{ref},i}| \}$, utilizando a seguinte regra:

$$\rho_{g,i} = \max\{ 1, 2|\lambda_i + \Delta \lambda_i|; 1, 2|\lambda_i + \Delta \lambda_{\text{ref},i}|; 10^{-6} \} \quad (7.60)$$

Uma componente $\rho_{h,j}$ do vetor ρ_h é atualizada se $\rho_{h,j} \leq \max\{ |\pi_j + \Delta \pi_j|, |\pi_j + \Delta \pi_{\text{ref},j}| \}$, utilizando a seguinte regra:

$$\rho_{h,j} = \max\{ 1, 2|\pi_j + \Delta \pi_j|; 1, 2|\pi_j + \Delta \pi_{\text{ref},j}|; 10^{-6} \} \quad (7.61)$$

Esta regra é adotada, a fim de garantir que a redução predita pelos modelos seja não-negativa. Adicionalmente, as componentes de ρ_g e ρ_h são atualizadas em duas outras situações. A primeira delas é na primeira iteração de cada ciclo interno, isto é, sempre que o parâmetro de barreira for atualizado. A segunda situação é quando nenhuma atualização de qualquer componente dos vetores de penalidades ocorreu nas duas últimas iterações internas. O objetivo desta última regra é evitar valores excessivamente grandes para os parâmetros de penalidade da função de mérito. Entretanto, como essa regra pode ocasionar a divergência do método se for aplicada um número infinito de vezes, esta segunda condição de atualização é executada no máximo 5 vezes para cada ciclo interno.

7.1.3.6 Atualização dos Multiplicadores de Lagrange

Caso o passo primal, d^k , obtido seja aceito, isto é, $\Delta M(w^k, d^k) \geq 0$ no Passo 6 do Algoritmo 17, além de atualizar as variáveis primais, também é necessário atualizar as variáveis duais, λ^k e π^k . Neste trabalho, adota-se a regra tipicamente utilizada nos métodos primais-duais de pontos interiores para PNL para atualização destas variáveis.

Para tanto, utilizando a direção de Newton, $\Delta\omega^k = (\Delta x^k, \Delta s^k, \Delta\lambda^k, \Delta\pi^k)$, computa-se um comprimento de passo α_π^k , de modo que os multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade não se tornem negativos:

$$\alpha_\pi^k = \max\{\alpha \in (0, 1] \mid \pi_j^k + \alpha\Delta\pi_j^k \geq (1 - \tau)\pi_j^k, \text{ para todo } j = 1, \dots, p\} \quad (7.62)$$

Este mesmo valor é adotado para atualização dos multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade:

$$\alpha_\lambda^k = \alpha_\pi^k \quad (7.63)$$

7.1.3.7 Atualização do Parâmetro de Barreira

No ciclo externo do método PDPIRC, apresentado no Algoritmo 16, caso uma solução para o problema de PNL original não tenha sido atingida, é necessário atualizar o parâmetro de barreira, a fim de gerar um novo subproblema de barreira a ser resolvido.

Neste trabalho, adotou-se a seguinte regra comumente utilizada em métodos de pontos interiores:

$$\mu^{K+1} = \tau_\mu \mu^K \quad (7.64)$$

em que $\tau_\mu \in (0, 1)$ é o fator de redução escolhido pelo usuário.

7.1.3.8 Critério de Parada

No ciclo interno, o critério de parada se baseia na norma dos resíduos das condições necessárias de otimalidade de primeira ordem de KKT do subproblema de barreira,

parando quando uma tolerância ε_{int} é atingida, conforme o Passo 2 do Algoritmo 17:

$$\|r(\omega^k, \mu)\|_{\infty} \leq \varepsilon_{\text{int}} \quad (7.65)$$

em que $r(\omega^k, \mu)$ é dada em (7.9).

De modo análogo, no ciclo externo o critério de parada utiliza a norma dos resíduos das condições necessárias de otimalidade de KKT do problema de PNL original, parando quando uma tolerância ε_{ext} é atingida, conforme o Passo 3 do Algoritmo 16:

$$\|r_0(\omega^{K+1})\|_{\infty} \leq \varepsilon_{\text{ext}} \quad (7.66)$$

em que $r_0(\omega^{K+1})$ é dada em (7.5).

Deve-se notar que não há necessidade de se verificar as condições $s \geq 0$ e $\pi \geq 0$, uma vez que estas variáveis são mantidas positivas ao longo do processo iterativo.

7.1.4 Tratamento das Variáveis Discretas

Consideremos o seguinte problema de PNLIM:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & g(x) = 0 \\ & h(x) \leq 0 \\ & x_{2,i} \in \mathcal{D}_{x_{2,i}} \quad i = 1, \dots, n_2 \end{aligned} \quad (7.67)$$

em que $x = (x_1, x_2)$ é o vetor de variáveis do problema, $x_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ é o vetor de variáveis contínuas, $x_2 \in \prod_{i=1}^{n_2} \mathcal{D}_{x_{2,i}} \subset \mathbb{R}^{n_2}$ é o vetor de variáveis discretas, e $\mathcal{D}_{x_{2,i}}$ é o conjunto de valores discretos aceitáveis para a variável $x_{2,i}$, com $i = 1, \dots, n_2$.

Assim como no Capítulo 6, para cada variável discreta $x_{2,i}$, uma função penalidade $\phi(x_{2,i})$ é incorporada à função objetivo do problema original através de um parâmetro de penalidade $\gamma > 0$, resultando no seguinte problema modificado:

$$\min \quad \Phi(x) = f(x) + \gamma \sum_{i=1}^{n_2} \phi(x_{2,i}) \quad (7.68a)$$

$$\text{s.a.} \quad g(x) = 0 \quad (7.68b)$$

$$h(x) \leq 0 \quad (7.68c)$$

$$\underline{x}_{2,i} \leq x_{2,i} \leq \overline{x}_{2,i}, \quad i = 1, \dots, n_2 \quad (7.68d)$$

O problema modificado consiste na relaxação contínua do problema original com termos de penalidade adicionais na função objetivo, resultando na função objetivo aumentada $\Phi(x)$. O parâmetro de penalidade $\gamma > 0$ influencia na amplitude das funções penalidade ϕ . No algoritmo aqui proposto, resolve-se uma sequência de problemas penalizados, com valores de γ progressivamente maiores. Por simplicidade de notação, assume-se que as restrições de desigualdade (7.68d) já estão inclusas nas restrições (7.68c). Assim,

o problema modificado tem a forma:

$$\begin{aligned}
 \min \quad & \Phi(x) = f(x) + \gamma \sum_{i=1}^{n_2} \phi(x_{2,i}) \\
 \text{s.a.} \quad & g(x) = 0 \\
 & h(x) \leq 0
 \end{aligned} \tag{7.69}$$

No ciclo interno do algoritmo, busca-se uma solução aproximada para o seguinte subproblema de barreira e penalidade, no qual o parâmetro de barreira, μ , e o parâmetro de penalidade da discretização, γ , estão fixos:

$$\begin{aligned}
 \min \quad & \Phi(x) - \mu \sum_{j=1}^p \ln(s_j) \\
 \text{s.a.} \quad & g_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, m \\
 & h_j(x) + s_j = 0 \quad j = 1, \dots, p \\
 & s_j > 0 \quad j = 1, \dots, p
 \end{aligned} \tag{7.70}$$

Assim como no algoritmo RNRC, na presença de variáveis discretas, o parâmetro de barreira somente é atualizado no ciclo externo quando as condições necessárias de otimalidade de KKT para o problema penalizado (7.69) não forem atendidas com a precisão ε_{ext} desejada, isto é, quando (7.66) não é satisfeita.

Além disso, a cada ciclo externo, deve-se verificar se a seguinte condição de discretização das variáveis x_2 é satisfeita:

$$|x_{2,i}^k - x'_{2,i}| < \varepsilon_D \tag{7.71}$$

para $i = 1, \dots, n_2$, onde $x'_{2,i} \in \mathcal{D}_{x_{2,i}}$ é o valor discreto permitido mais próximo de $x_{2,i}^k$ e ε_D é a tolerância de discretização no algoritmo.

Quando esta condição não é atendida, o parâmetro de penalidade para discretização das variáveis x_2 é atualizado por:

$$\gamma^{K+1} = \tau_\gamma \gamma^K \tag{7.72}$$

em que $\tau_\gamma > 1$ é o fator de ajuste do crescimento de γ .

Com base nesta discussão, pode-se estabelecer a seguinte versão modificada do Algoritmo 16, visando a resolução de problemas de PNLIM.

Algoritmo 19 Método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança e Penalidade Discreta

- 1: Parâmetros: $\mu^0 > 0$, $\gamma^0 > 0$, $\tau_\mu \in (0, 1)$, $\tau_\gamma > 1$, $\varepsilon_{\text{ext}} > 0$, $\varepsilon_{\text{int}} > 0$ e $\varepsilon_D > 0$.
Inicialização: Escolha $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $s^0 \in \mathbb{R}_{++}^p$, $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$, $\pi^0 \in \mathbb{R}_{++}^p$ e faça $K = 0$.
- 2: **Ciclo Interno:** Forme o problema penalizado (7.69) e resolva-o, obtendo um ponto KKT-barreira aproximado ω^{K+1} , que satisfaz a condição (7.65).
- 3: Se as condições (7.66) e (7.71) forem satisfeitas, retorne x^K como solução.
- 4: Se as condições de KKT (7.66) do problema penalizado não forem satisfeitas com a precisão ε_{ext} , então atualize μ^K por (7.64).

Caso contrário, $\mu^{K+1} = \mu^K$.

- 5: Se a condição de discretização (7.71) não for satisfeita com a precisão ε_D , então atualize γ^K por (7.72).

Caso contrário, $\gamma^{K+1} = \gamma^K$.

- 6: Faça $K = K + 1$ e volte para o Passo 2.
-

Cabe ressaltar que, no ciclo interno, utiliza-se o Algoritmo 17 para resolução do subproblema (7.70), com a única diferença de que a função f é substituída pela função aumentada, Φ .

7.2 Resultados Numéricos

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos do algoritmo PDPIRC e penalidade discreta, na resolução de problemas de FPOR com variáveis de controle discretas. Para avaliar a eficiência da abordagem proposta foram realizados experimentos numéricos com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras, utilizando o banco de dados disponível no pacote MATPOWER versão 6.0.

Para obter os resultados, o algoritmo proposto foi implementado em linguagem MATLAB® versão R2012a. Todos os testes foram realizados em um microcomputador com processador Intel Core i7-4770, 3.50 GHz e 16GB de memória RAM.

Nos testes conduzidos, considerou-se que os *taps* dos transformadores possuem limites mínimo e máximo iguais a 0,88 p.u. e 1,12 p.u., respectivamente. No caso de *taps* discretos, considerou-se que os mesmos devem pertencer ao conjunto discreto igualmente espaçado por passos de 0,0075 p.u. entre 0,88 p.u. e 1,12 p.u., totalizando 33 posições discretas possíveis para cada transformador. Os limites mínimo e máximo para as magnitudes de tensão foram extraídos do banco de dados, enquanto os valores das susceptâncias *shunt* discretas equivalentes foram extraídos de MAZZINI (2016) e LAGE (2013).

Apesar da escolha individual de parâmetros levar a soluções de melhor qualidade, ou reduzir o número de iterações e tempo de processamento de cada caso, optou-se por utilizar o mesmo conjunto de parâmetros para todos os testes computacionais, com exceção do fator de atualização do parâmetro de barreira, τ_μ . O motivo para isto está relacionado ao fato de que, enquanto para o problema de FPOR com variáveis contínuas a redução do parâmetro de barreira pode ser feita de modo rápido, para o problema de FPOR com variáveis discretas a rápida redução do parâmetro de barreira pode dificultar a convergência para soluções discretas, devido ao efeito predominante do parâmetro de barreira.

Por este motivo, adotou-se um fator de redução $\tau_\mu^C = 0,01$ para a relaxação contínua, e um fator $\tau_\mu^D = 0,85$ para o caso discreto. Nos experimentos numéricos realizados, a redução agressiva do parâmetro de barreira mostrou-se benéfica no caso contínuo, dimi-

nuindo significativamente o número total de iterações e tempo computacional. No caso discreto, o parâmetro de barreira é reduzido de modo menos agressivo. Entretanto, se for detectado que as variáveis discretas já estão discretizadas com a tolerância especificada, o parâmetro de barreira passa a ser reduzido pelo fator τ_μ^C .

Os parâmetros de penalidade para discretização somente são atualizados para aquelas variáveis discretas que não atingiram a precisão de discretização necessária. Adotou-se um fator $\tau_\gamma^{\text{tap}} = 2,5$ para atualização dos parâmetros de penalidade associados aos *taps* dos transformadores, e um fator $\tau_\gamma^{\text{sh}} = 10$ para atualização dos parâmetros de penalidade associados às susceptâncias *shunt* equivalentes das barras. Os valores dos parâmetros utilizados em todos os testes realizados são apresentados na Tabela 7.1.

Tabela 7.1: Algoritmo Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança e Penalidade Discreta: parâmetros utilizados nos experimentos numéricos.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
ε_{ext}	10^{-6}	τ_μ^C	0,01
ε_{int}	10^{-6}	τ_μ^D	0,85
ε_D	10^{-5}	γ^0	10^{-7}
Δ^0	1	τ_γ^{tap}	2,5
$\overline{\Delta}$	100	τ_γ^{sh}	10
μ^0	10^{-4}		

Para todos os casos testados a seguir, as características do sistema elétrico, bem como do modelo matemático para o problema de FPOR associado são apresentadas na Seção 6.5.

Uma análise comparativa desta abordagem com as demais propostas deste trabalho é apresentada na Seção 7.2.6.

7.2.1 Sistema IEEE de 14 Barras

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

No caso discreto, considerou-se que a susceptância *shunt* equivalente do banco de capacitores na barra 9 deve pertencer ao conjunto

$$\mathcal{D}_9^{\text{sh}} = \{0; 0,19; 0,34; 0,39\}$$

As Tabelas 7.2 e 7.3 apresentam o processo de convergência dos *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* para a relaxação contínua e para o caso discreto, bem como as perdas de potência ativa finais. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa

obtidas foram de 13,6042 MW, em um tempo computacional de 0,2208 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 13,6202 MW, em um tempo computacional de 0,2236 segundos. A Figura 7.1 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Tabela 7.2: Processo de convergência: IEEE de 14 barras – relaxação contínua.

It. Ext.	$t_{4,7}$	$t_{4,9}$	$t_{5,6}$	b_9^{sh}
0	0,9780	0,9690	0,9320	0,1900
1	1,0344	0,9723	0,9924	0,3184
2	1,0451	0,9149	0,9809	0,3668
3	1,0829	0,8804	0,9811	0,3897
Perdas de Potência Ativa: 13,6042 MW				

Tabela 7.3: Processo de convergência: IEEE de 14 barras – discreto.

It. Ext.	$t_{4,7}$	$t_{4,9}$	$t_{5,6}$	b_9^{sh}
0	0,9780	0,9690	0,9320	0,1900
1	1,0354	0,9708	0,9924	0,3183
2	1,0342	0,9695	0,9916	0,3212
3	1,0309	0,9700	0,9907	0,3264
4	1,0302	0,9697	0,9900	0,3362
5	1,0299	0,9696	0,9909	0,3396
6	1,0299	0,9697	0,9917	0,3400
7	1,0299	0,9698	0,9921	0,3400
8	1,0300	0,9699	0,9923	0,3400
9	1,0300	0,9700	0,9924	0,3400
10	1,0300	0,9700	0,9925	0,3400
11	1,0300	0,9700	0,9925	0,3400
12	1,0300	0,9700	0,9925	0,3400
13	1,0300	0,9700	0,9925	0,3400
14	1,0300	0,9700	0,9925	0,3400
Perdas de Potência Ativa: 13,6202 MW				

Figura 7.1: IEEE de 14 barras: magnitudes de tensão.

7.2.2 Sistema IEEE de 30 Barras

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

No caso discreto, considerou-se que as susceptâncias *shunt* equivalentes dos bancos de capacitores nas barras 10 e 24 devem pertencer, respectivamente, aos conjuntos

$$\mathcal{D}_{10}^{\text{sh}} = \{0; 0,19; 0,34; 0,39\}$$

$$\mathcal{D}_{24}^{\text{sh}} = \{0; 0,05; 0,09\}$$

As Tabelas 7.4 e 7.5 apresentam o processo de convergência dos *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* para a relaxação contínua e para o caso discreto, bem como as perdas de potência ativa finais. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 17,7543 MW, em um tempo computacional de 0,1491 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 17,7584 MW, em um tempo computacional de 0,3306 segundos. A Figura 7.2 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Tabela 7.4: Processo de convergência: IEEE de 30 barras – relaxação contínua.

[illegible]

Tabela 7.5: Processo de convergência: IEEE de 30 barras – discreto.

It.	Ext.	$t_{6,9}$	$t_{6,10}$	$t_{4,12}$	$t_{28,27}$	b_{10}^{sh}	b_{24}^{sh}
0		0,9780	0,9690	0,9320	0,9680	0,1900	0,0430
1		1,0520	0,9918	0,9975	0,9616	0,3504	0,0799
2		1,0525	0,9919	0,9979	0,9618	0,3513	0,0809
3		1,0521	0,9918	0,9986	0,9620	0,3466	0,0824
4		1,0517	0,9919	0,9993	0,9624	0,3410	0,0853
5		1,0521	0,9922	0,9997	0,9625	0,3401	0,0882
6		1,0523	0,9924	0,9999	0,9625	0,3400	0,0894
7		1,0524	0,9925	0,9999	0,9625	0,3400	0,0898
8		1,0525	0,9925	1,0000	0,9624	0,3400	0,0899
9		1,0525	0,9925	1,0000	0,9625	0,3400	0,0900
10		1,0525	0,9925	1,0000	0,9625	0,3400	0,0900
11		1,0525	0,9925	1,0000	0,9625	0,3400	0,0900
12		1,0525	0,9925	1,0000	0,9625	0,3400	0,0900
13		1,0525	0,9925	1,0000	0,9625	0,3400	0,0900
14		1,0525	0,9925	1,0000	0,9625	0,3400	0,0900

Perdas de Potência Ativa: 17,7584 MW

Figura 7.2: IEEE de 30 barras: magnitudes de tensão.

7.2.3 Sistema IEEE de 57 Barras

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

No caso discreto, considerou-se que as susceptâncias *shunt* equivalentes dos bancos de capacitores nas barras 18, 25 e 53 devem pertencer, respectivamente, aos conjuntos

$$\mathcal{D}_{18}^{\text{sh}} = \{0; 0,12; 0,22; 0,27\}$$

$$\mathcal{D}_{25}^{\text{sh}} = \{0; 0,04; 0,07; 0,09\}$$

$$\mathcal{D}_{53}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,165\}$$

As Figuras 7.3 e 7.4 apresentam os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt*, ao resolver a relaxação contínua e o modelo discreto. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 24,8291 MW, em um tempo computacional de 0,2288 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 24,8752 MW, em um tempo computacional de 1,1627 segundos. A Figura 7.5 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Figura 7.3: IEEE de 57 barras: *taps* dos transformadores. Figura 7.4: IEEE de 57 barras: susceptâncias *shunt* equivalentes.

Figura 7.5: IEEE de 57 barras: magnitudes de tensão.

7.2.4 Sistema IEEE de 118 Barras

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco de dados.

No caso discreto, considerou-se que as susceptâncias *shunt* equivalentes dos bancos de capacitores nas barras 5, 34, 37, 44, 45, 46, 48, 74, 79, 82, 83, 105, 107 e 110 devem pertencer, respectivamente, aos conjuntos

$$\mathcal{D}_5^{\text{sh}} = \{-0,4; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{34}^{\text{sh}} = \{0; 0,06; 0,07; 0,13; 0,14; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{37}^{\text{sh}} = \{-0,25; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{44}^{\text{sh}} = \{0; 0,1\}$$

$$\mathcal{D}_{45}^{\text{sh}} = \{0; 0,1\}$$

$$\mathcal{D}_{46}^{\text{sh}} = \{0; 0,1\}$$

$$\mathcal{D}_{48}^{\text{sh}} = \{0; 0,15\}$$

$$\mathcal{D}_{74}^{\text{sh}} = \{0; 0,08; 0,12; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{79}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{82}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{83}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{105}^{\text{sh}} = \{0; 0,1; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{107}^{\text{sh}} = \{0; 0,06; 0,07; 0,13; 0,14; 0,2\}$$

$$\mathcal{D}_{110}^{\text{sh}} = \{0; 0,06; 0,07; 0,13; 0,14; 0,2\}$$

As Figuras 7.6 e 7.7 apresentam os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt*, ao resolver a relaxação contínua e o modelo discreto. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 117,1272 MW, em um tempo computacional de 0,6818 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 117,1629 MW, em um tempo computacional de 3,3181 segundos. A Figura 7.8 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Figura 7.6: IEEE de 118 barras: *taps* dos transformadores.

Figura 7.7: IEEE de 118 barras: susceptâncias *shunt* equivalentes.

Figura 7.8: IEEE de 118 barras: magnitudes de tensão.

7.2.5 Sistema IEEE de 300 Barras

Para inicialização das tensões utilizou-se o *flat start*, isto é, considerou-se as magnitudes de tensão iniciais iguais a 1 p.u. e os ângulos de tensão iniciais nulos. Os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt* equivalentes foram inicializados conforme o banco

de dados. Por questões de implementação, as barras foram renumeradas de 1 a 300, uma vez que o banco de dados não apresenta a numeração consecutiva das barras.

No caso discreto, considerou-se que as susceptâncias *shunt* equivalentes dos bancos de capacitores nas barras 96, 99, 133, 143, 145, 152, 158, 169, 210, 217, 219, 227, 268 e 283 devem pertencer, respectivamente, aos conjuntos

$$\mathcal{D}_{96}^{\text{sh}} = \{0; 2; 3,5; 4,5\}$$

$$\mathcal{D}_{99}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{133}^{\text{sh}} = \{0; 0,19; 0,34; 0,39\}$$

$$\mathcal{D}_{143}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{145}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{152}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{158}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{169}^{\text{sh}} = \{-2,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{210}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{217}^{\text{sh}} = \{-4,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{219}^{\text{sh}} = \{-1,5; 0\}$$

$$\mathcal{D}_{227}^{\text{sh}} = \{0; 0,25; 0,44; 0,59\}$$

$$\mathcal{D}_{268}^{\text{sh}} = \{0; 0,15\}$$

$$\mathcal{D}_{283}^{\text{sh}} = \{0; 0,15\}$$

As Figuras 7.9 e 7.10 apresentam os valores ótimos obtidos para os *taps* dos transformadores e susceptâncias *shunt*, ao resolver a relaxação contínua e o modelo discreto. Para a relaxação contínua, as perdas de potência ativa obtidas foram de 371,4150 MW, em um tempo computacional de 14,3417 segundos. No caso discreto, as perdas de potência ativa obtidas foram de 372,0990 MW, em um tempo computacional de 39,0701 segundos. A Figura 7.11 apresenta as magnitudes de tensão na solução ótima para a relaxação contínua e para o caso discreto.

Figura 7.9: IEEE de 300 barras: *taps* dos transformadores. Figura 7.10: IEEE de 300 barras: susceptâncias *shunt* equivalentes.

Figura 7.11: IEEE de 300 barras: magnitudes de tensão.

7.2.6 Análise dos Resultados

Os resultados obtidos com o algoritmo PDPIRC proposto neste capítulo indicam que esta abordagem é promissora para resolução de problemas de FPOR com variáveis contínuas e discretas, visando a minimização das perdas de potência ativa. Em todos os testes realizados, o algoritmo convergiu em tempo computacional aceitável com uma tolerância de 10^{-6} para as condições de KKT do problema penalizado e de 10^{-5} para a discretização das variáveis. Todas as restrições são atendidas com a tolerância especificada, incluindo as magnitudes de tensão nas barras dos sistemas elétricos, as quais estão dentro dos limites estipulados no banco de dados, conforme indicado nas figuras anteriores.

A qualidade das soluções obtidas é similar a das abordagens Newton-PL e RNRC, sendo que pequenas diferenças podem ser verificadas. Estas diferenças podem ser decorrentes da não-convexidade e existência de múltiplas soluções locais do problema de FPOR, bem como da influência dos diversos parâmetros do método. Em termos de tempo computacional, esta abordagem se destaca em relação às demais, fato este que já era esperado. Isto porque cada iteração da abordagem apresentada neste capítulo requer, basicamente, a resolução de dois sistemas lineares (um para a direção de referência e outro para a direção de Newton), enquanto que os métodos Newton-PL e RNRC requerem a resolução de subproblemas de otimização para calcular as direções de busca. As Tabelas 7.6 e 7.7 sintetizam os resultados obtidos para as abordagens implementadas.

Tabela 7.6: Comparação das abordagens implementadas para a relaxação contínua do problema de FPOR.

Sistemas	Métodos					
	Newton-PL		RNRC		PDPIRC	
	Perdas (MW)	Tempo (s)	Perdas (MW)	Tempo (s)	Perdas (MW)	Tempo (s)
IEEE-14	13,6043	0,2006	13,6042	0,3167	13,6042	0,2208
IEEE-30	17,7543	0,5219	17,7543	0,7357	17,7543	0,1491
IEEE-57	24,8291	2,4201	24,8291	1,7261	24,8291	0,2288
IEEE-118	117,1272	6,1790	117,1271	4,0032	117,1272	0,6818
IEEE-300	371,4148	65,2452	371,4149	84,7629	371,4150	14,3417

Tabela 7.7: Comparação das abordagens implementadas para o problema de FPOR discreto.

Sistemas	Métodos			
	RNRC		PDPIRC	
	Perdas (MW)	Tempo (s)	Perdas (MW)	Tempo (s)
IEEE-14	13,6064	0,4322	13,6202	0,2236
IEEE-30	17,7576	0,7729	17,7584	0,3306
IEEE-57	24,8775	3,3432	24,8752	1,1627
IEEE-118	117,1686	5,9389	117,1629	3,3181
IEEE-300	372,5122	67,1289	372,0990	39,0701

Assim como no caso do algoritmo RNRC, observa-se que a função penalidade utilizada para o tratamento das variáveis discretas não atua arredondando as variáveis, quando incorporada ao algoritmo PDPIRC, de modo que o método atinge soluções discretas de boa qualidade. Entretanto, a associação da função penalidade para discretização ao método de pontos interiores deve ser feita de maneira criteriosa, uma vez que a rápida convergência do parâmetro de barreira para zero pode dificultar a convergência para soluções discretas, devido à sua influência na forma da função objetivo de cada subproblema de barreira penalizado. Apesar disso, em todos os casos o mesmo conjunto de parâmetros forneceu resultados satisfatórios.

No que diz respeito às dificuldades enfrentadas, a ocorrência do efeito Maratos também pode afetar o desempenho numérico desta abordagem, devido à utilização da norma- ℓ_1 na função de mérito. De fato, verificou-se que, para alguns casos, um número razoavelmente elevado de iterações pode ser realizado durante um ciclo interno, devido à rejeição do passo, ainda que se esteja próximo à solução ótima. Neste sentido, a investigação de formas de amenizar estas situações, tais como correções de segunda ordem ou buscas não-monótonas, são extensões naturais da metodologia deste capítulo.

Capítulo 8

Conclusões e Perspectivas Futuras

O problema de Fluxo de Potência Ótimo é modelado matematicamente como um problema de otimização não-linear, não-convexo, restrito, de grande porte e com variáveis contínuas e discretas. Sua resolução desempenha um papel de relevância na operação e planejamento dos sistemas elétricos de potência, pois permite a determinação dos ajustes necessários nas variáveis de controle de modo a otimizar algum critério da rede, sem violar suas restrições físicas e operacionais.

Neste trabalho, investigamos e propusemos três novas abordagens para a resolução de problemas de Fluxo de Potência Ótimo com variáveis contínuas e discretas: o método de Newton com Programação Linear (Newton-PL), o método de Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC) e o método Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança (PDPIRC).

O método Newton-PL é uma abordagem desenvolvida para a resolução de sistemas restritos de equações não-lineares. Diferentemente do método de Newton clássico para a resolução de sistemas de equações não-lineares, o método Newton-PL possui convergência quadrática sob hipóteses razoavelmente fracas, que não requerem a diferenciabilidade ou unicidade local das soluções, superando uma das limitações comuns em métodos do tipo Newton. Adicionalmente, o método Newton-PL é capaz de resolver sistemas de equações em que o número de equações não é igual ao número de variáveis, sistemas não-lineares com equações de complementaridade e sistemas não-lineares cujas equações são suaves por partes. Restrições para a solução do sistema de equações não-lineares definidas por desigualdades também podem ser tratadas naturalmente nesta abordagem. Uma iteração do método Newton-PL consiste, basicamente, na resolução de um problema de PL para determinar as direções de busca, o qual pode ser resolvido de modo eficiente por diversos *solvers* comerciais ou gratuitos.

A fim de aplicar esta abordagem na resolução de problemas de FPOR, utilizou-se as condições necessárias de otimalidade de KKT do problema, que constituem um sistema restrito de equações não-lineares. Testes numéricos com os sistemas elétricos IEEE de 14,

30, 57, 118 e 300 barras mostraram que esta abordagem é promissora para a resolução de problemas de FPOR contínuos. Entretanto, ao utilizar esta abordagem, deve-se levar em consideração que seu custo computacional por iteração pode ser elevado, devido à necessidade de resolução de um problema de PL para determinar as direções de busca. Apesar disso, ela constitui uma alternativa viável, em especial quando abordagens mais rápidas encontram dificuldades para convergência.

Investigações futuras no contexto do método Newton-PL incluem:

- sua aplicação a outros problemas que podem ser expressos como sistemas restritos de equações não-lineares, tais como problemas de Fluxo de Carga (FC);
- o tratamento das variáveis discretas, explorando-se, possivelmente, a estrutura de subproblemas de PL do algoritmo;
- a utilização das condições necessárias de otimalidade de Fritz-John para resolução de problemas de PNL, como no trabalho de ALMEIDA & KOCHOLIK (2016);
- a substituição da busca linear por uma estratégia de regiões de confiança, visando a globalização do algoritmo.

No algoritmo de Rescalamento Não-Linear com Região de Confiança (RNRC), um problema de PNLIM é transformado em um problema com apenas variáveis contínuas, pela introdução na função objetivo de funções que penalizam as variáveis discretas que não assumem valores discretos. A condição de não-negatividade das restrições de desigualdade é tratada por meio de uma função de rescalamento não-linear, que utiliza a função barreira logarítmica modificada com extrapolação quadrática, resultando em um problema de rescalamento não-linear e penalidade com apenas restrições de igualdade. Uma solução para o problema original é determinada pela resolução de uma sequência de problemas de rescalamento não-linear e penalidade por meio de um método de programação quadrática sequencial com região de confiança e passo composto. O passo composto é obtido por meio da soma de um passo normal, calculado de modo aproximado pelo método *dogle*, e um passo tangencial, obtido utilizando um método quase-exato baseado em problemas de autovalores generalizados recentemente proposto na literatura. A sequência de problemas de rescalamento não-linear e penalidade é resolvida até que o erro nas condições necessárias de KKT para o problema penalizado e na discretização das variáveis esteja dentro da tolerância desejada.

Os testes computacionais com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras mostraram que a abordagem proposta é promissora para resolução de problemas de PNL e, em particular, para problemas de FPOR com variáveis contínuas e discretas. Os resultados obtidos mostram que o método é robusto, sendo capaz de convergir em todos os casos do problema de FPOR discreto testados. Os resultados obtidos ainda indicam que

a abordagem obtém soluções de boa qualidade para o problema de FPOR com variáveis de controle discretas, por meio de funções de penalidade para discretização.

Investigações futuras no contexto do método RNRC incluem:

- o aperfeiçoamento da implementação computacional, visando redução do tempo computacional;
- a verificação da viabilidade da abordagem proposta na resolução de problemas de FPO de maior porte e em problemas de FPO com restrições de complementaridade;
- a utilização do método de filtros desenvolvido em FLETCHER & LEYFFER (2002) ou alguma variante deste, como forma de substituição da função de mérito;
- a proposição de regras para o ajuste adaptativo do parâmetro de penalidade da função de discretização, que sejam compatíveis com o algoritmo proposto.

No algoritmo Primal-Dual de Pontos Interiores com Região de Confiança (PDPIRC), assim como no método RNRC, as variáveis discretas de um problema de PNLIM também são tratadas por meio de funções penalidade introduzidas na função objetivo, visando penalizar as variáveis discretas que não assumem valores discretos. As restrições de desigualdade são transformadas em igualdades, pelo acréscimo de variáveis de folga, e a condição de não-negatividade das folgas é tratada através da função barreira logarítmica, tipicamente utilizada em métodos de pontos interiores, resultando em um problema de barreira e penalidade com apenas restrições de igualdade. Uma solução para o problema original é determinada pela resolução de uma sequência de problemas de barreira e penalidade. Nesta abordagem, o passo para atualização das variáveis é um múltiplo da combinação convexa de uma direção de referência e uma direção de Newton.

A direção de referência tem papel similar ao ponto de Cauchy nos métodos de região de confiança tradicionais, uma vez que ela garante a obtenção de um passo com decréscimo suficiente para o modelo da função de mérito. Como a direção de Newton tem potencial para calcular um passo com maior redução para o modelo da função de mérito, a combinação convexa prioriza a utilização da direção de Newton inicialmente. Caso a direção de Newton não permita a obtenção de um passo com decréscimo suficiente para o modelo da função de mérito, aumenta-se o peso dado à direção de referência na combinação convexa. Na pior hipótese, portanto, o método recorre à própria direção de referência para calcular o passo, uma vez que esta possui garantia de decréscimo suficiente. Além de permitir um decréscimo suficiente, o passo computado deve garantir a positividade das variáveis de folga e que a restrição de região de confiança não seja violada.

Experimentos numéricos com os sistemas elétricos IEEE de 14, 30, 57, 118 e 300 barras indicam que esta abordagem é promissora para resolução de problemas de PNL e, em particular, para problemas de FPOR com variáveis contínuas e discretas, utilizando uma

função de penalidade para discretização. A robustez e viabilidade do algoritmo PDPIRC é evidenciada por sua capacidade de convergir em todos os casos do problema de FPOR discreto testados, obtendo soluções de boa qualidade, em tempo computacional menor que as abordagens anteriores. Isto porque, enquanto os métodos Newton-PL e RNRC requerem a resolução de subproblemas de otimização para cálculo das direções de busca, o método PDPIRC exige apenas a resolução de dois sistemas lineares. Entretanto, deve-se salientar que, em decorrência da utilização de uma função de mérito não-diferenciável, o efeito Maratos pode reduzir a eficiência desta abordagem. Além disso, na presença de variáveis discretas, o controle do parâmetro de penalidade deve ser feito de modo criterioso, a fim de não comprometer o processo de convergência.

Investigações futuras no contexto do método PDPIRC incluem:

- formas de amenizar o efeito Maratos, tais como correções de segunda ordem e buscas não-monótonas;
- a verificação da viabilidade da abordagem proposta na resolução de problemas de FPO de maior porte e em problemas de FPO com restrições de complementaridade;
- a adoção de estratégias para atualização dos parâmetros de barreira e penalidade da discretização, de modo a acelerar o processo de convergência;
- a adaptação dos elementos do método de região de confiança desta abordagem para o método de rescalamento não-linear.

Desta forma, as contribuições deste trabalho podem ser sintetizadas da seguinte forma: na área de matemática, foram propostas e investigadas novas abordagens para resolução de problemas de PNL e PNLIM; do ponto de vista prático, particularmente em engenharia elétrica, as abordagens apresentadas permitiram a resolução de problemas de FPO, os quais desempenham um papel fundamental no planejamento e operação dos sistemas elétricos de potência.

Referências Bibliográficas

- ABIDO, M. (2002). Optimal power flow using particle swarm optimization. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 24(7), 563–571.
- ADACHI, S., IWATA, S., NAKATSUKASA, Y., & TAKEDA, A. (2017). Solving the trust-region subproblem by a generalized eigenvalue problem. *SIAM Journal on Optimization*, 27, 269–291.
- ADIBI, M. M., POLYAK, R. A., GRIVA, I. A., MILI, L., & AMMARI, S. (2003). Optimal transformer tap selection using modified barrier-augmented Lagrangian method. *IEEE Transactions on Power Systems*, 18(1), 251–257.
- ADLER, I., KARMARKAR, N., RESENDE, M. G. C., & VEIGA, G. (1986). An Implementation Of Karmarkar’s Algorithm For Linear Programming. *Mathematical Programming*, 44, 297–335.
- ALGUACIL, N. & CONEJO, A. J. (2000). Multiperiod optimal power flow using Benders decomposition. *IEEE Transactions on Power Systems*, 15(1), 196–201.
- ALMEIDA, K. C. & KOCHOLIK, A. (2016). Solving ill-posed optimal power flow problems via fritz-john optimality conditions. *IEEE Transactions on Power Systems*, 31(6), 4913–4922.
- ALRASHIDI, M. R. & EL-HAWARY, M. E. (2007). Hybrid Particle Swarm Optimization Approach for Solving the Discrete OPF Problem Considering the Valve Loading Effects. *IEEE Transactions on Power Systems*, 22(4), 2030–2038.
- ALSAC, O. & STOTT, B. (1974). Optimal load flow with steady-state security. *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, PAS-93(3), 745–751.
- ARMAND, P. & OMHENI, R. (2017). A mixed logarithmic barrier-augmented Lagrangian method for nonlinear optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 173(2), 523–547.
- BAI, X., WEI, H., FUJISAWA, K., & WANG, Y. (2008). Semidefinite programming for optimal power flow problems. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 30(6–7), 383 – 392.

- BAKIRTZIS, A. G., BISKAS, P. N., ZOUMAS, C. E., & PETRIDIS, V. (2002). Optimal power flow by enhanced genetic algorithm. *IEEE Transactions on Power Systems*, 17(2), 229–236.
- BAPTISTA, E. C. (2001). *Método da Função Lagrangiana Aumentada-Barreira Logarítmica para a Solução do Problema de Fluxo de Potência Ótimo*. Tese (Doutorado), Universidade de São Paulo.
- BAPTISTA, E. C., BELATI, E. A., SOUSA, V. A., & COSTA, G. R. M. (2006). Primal-Dual Logarithmic Barrier and Augmented Lagrangian Function to the Loss Minimization in Power Systems. *Electric Power Components and Systems*, 34(7), 775–784.
- BAZARAA, M. S., SHERALI, H. D., & SHETTY, C. M. (2006). *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*. Wiley-Interscience, 3rd edition.
- BELATI, E. A., NASCIMENTO, C. F., DIETRICH, A. B., & DE FARIA, H. (2014). Sensitivity analysis applied to nodal technical losses evaluation in power transmission systems. *International Transactions on Electrical Energy Systems*, 24(2), 178–185.
- BENDSØE, M. P., BEN-TAL, A., & ZOWE, J. (1994). Optimization methods for truss geometry and topology design. *Structural Optimization*, 7(3), 141–159.
- BENSON, H. Y. (2001). *Interior-point methods for nonlinear, second-order cone, and semidefinite programming*. Tese (Doutorado), Princeton University, Princeton, NJ, USA.
- BENSON, H. Y., SHANNO, D. F., & VANDERBEI, R. J. (2004). Interior-point methods for nonconvex nonlinear programming: Jamming and numerical testing. *Mathematical Programming*, 99(1), 35–48.
- BIEHL, S. V. (2012). *Uma Nova Abordagem para Resolução de Problemas de Fluxo de Carga com Variáveis Discretas*. Tese (Doutorado), Universidade de São Paulo.
- BIRGIN, E. G., CASTELANI, E. V., MARTINEZ, A. L. M., & MARTÍNEZ, J. M. (2011). Outer trust-region method for constrained optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 150(1), 142–155.
- BISKAS, P. N., ZIOGOS, N. P., TELLIDOU, A., ZOUMAS, C. E., BAKIRTZIS, A. G., & PETRIDIS, V. (2006). Comparison of two metaheuristics with mathematical programming methods for the solution of OPF. *IEE Proceedings - Generation, Transmission and Distribution*, 153(1), 16–24.
- BIXBY, R. E. (2012). A brief history of linear and mixed-integer programming computation. *Documenta Mathematica*, (pp. 107–121).

- BREITFELD, M. G. & SHANNO, D. F. (1996). Computational experience with penalty-barrier methods for nonlinear programming. *Annals of Operations Research*, 62(1), 439–463.
- BURCHETT, R. C., HAPP, H. H., & VIERATH, D. R. (1984). Quadratically Convergent Optimal Power Flow. *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, PAS-103(11), 3267–3275.
- BURCHETT, R. C., HAPP, H. H., & WIRGAU, K. A. (1982). Large scale optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, PAS-101(10), 3722–3732.
- BUSSOTTI, P. (2003). On the genesis of the Lagrange multipliers. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 117(3), 453–459.
- BYRD, H. R., GILBERT, C. J., & NOCEDAL, J. (2000). A trust region method based on interior point techniques for nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 89(1), 149–185.
- BYRD, R. H., HRIBAR, M. E., & NOCEDAL, J. (1999). An Interior Point Algorithm for Large-Scale Nonlinear Programming. *SIAM Journal on Optimization*, 9(4), 877–900.
- BYRD, R. H., SCHNABEL, R. B., & SHULTZ, G. A. (1987). A Trust Region Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24(5), 1152–1170.
- CAPITANESCU, F. (2016). Critical review of recent advances and further developments needed in ac optimal power flow. *Electric Power Systems Research*, 136, 57–68.
- CAPITANESCU, F., GLAVIC, M., ERNST, D., & WEHENKEL, L. (2007). Interior-point based algorithms for the solution of optimal power flow problems. *Electric Power Systems Research*, 77(5–6), 508–517.
- CAPITANESCU, F., RAMOS, J. M., PANCIATICI, P., KIRSCHEN, D., MARCOLINI, A. M., PLATBROOD, L., & WEHENKEL, L. (2011). State-of-the-art, challenges, and future trends in security constrained optimal power flow. *Electric Power Systems Research*, 81(8), 1731–1741.
- CAPITANESCU, F. & WEHENKEL, L. (2010a). Optimal power flow computations with a limited number of controls allowed to move. *IEEE Transactions on Power Systems*, 25(1), 586–587.
- CAPITANESCU, F. & WEHENKEL, L. (2010b). Sensitivity-Based Approaches for Handling Discrete Variables in Optimal Power Flow Computations. *IEEE Transactions on Power Systems*, 25(4), 1780–1789.

- CAPITANESCU, F. & WEHENKEL, L. (2011). Redispatching Active and Reactive Powers Using a Limited Number of Control Actions. *IEEE Transactions on Power Systems*, 26(3), 1221–1230.
- CAPITANESCU, F. & WEHENKEL, L. (2013). Experiments with the interior-point method for solving large scale optimal power flow problems. *Electric Power Systems Research*, 95, 276–283.
- CARPENTIER, J. L. (1962). Contribution à l'étude du dispatching économique. *Bulletin de la Société Française des Electriciens*, 3(8), 431–447.
- CARROLL, C. W. & FIACCO, A. V. (1961). The Created Response Surface Technique for Optimizing Nonlinear, Restrained Systems. *Operations Research*, 9(2), 169–184.
- CHEN, B. & HARKER, P. T. (1993). A non-interior-point continuation method for linear complementarity problems. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 14(4), 1168–1190.
- CHEN, L., MATOBA, S., INABE, H., & OKABE, T. (1998). Surrogate constraint method for optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 13(3), 1084–1089.
- COLOMBO, M. & GONDZIO, J. (2008). Further development of multiple centrality correctors for interior point methods. *Computational Optimization and Applications*, 41(3), 277–305.
- CONEJO, A. J., CARRIÓN, M., & MORALES, J. M. (2010). *Decision Making Under Uncertainty in Electricity Markets*. International Series in Operations Research & Management Science. Springer US.
- CONN, A., GOULD, N., & TOINT, P. (2000). *Trust Region Methods*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- COSTA, G. R. M. (1990). *O metodo dual-Newton aplicado ao fluxo de carga ótimo*. Tese (Doutorado), Universidade Estadual de Campinas.
- COSTA, G. R. M., COSTA, C. E. U., & SOUZA, A. M. (2000). Comparative studies of optimization methods for the optimal power flow problem. *Electric Power Systems Research*, 56(3), 249 – 254.
- DENNIS, J. E. (1977). *A Brief Introduction to Quasi-Newton Methods*. Technical report, Ithaca, NY, USA.
- DING, X., WANG, X., & SONG, Y. H. (2004). Interior point cutting plane method for optimal power flow. *IMA Journal of Management Mathematics*, 15(4), 355–368.

- DOMMEL, H. W. & TINNEY, W. F. (1968). Optimal Power Flow Solutions. *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, PAS-87(10), 1866–1876.
- EREMENKO, A. (2018). *Simultaneous diagonalization of two quadratic forms and a generalized eigenvalue problem*. <https://www.math.purdue.edu/~eremenko/dvi/simult.pdf>.
- ESTEVAM, C. R. N., RIDER, M. J., AMORIM, E., & MANTOVANI, J. R. S. (2010). Reactive power dispatch and planning using a non-linear branch-and-bound algorithm. *IET Generation, Transmission Distribution*, 4(8), 963–973.
- FACCHINEI, F., FISCHER, A., & HERRICH, M. (2013). An LP-Newton method: Nonsmooth equations, KKT systems, and nonisolated solutions. *Mathematical Programming*, 146.
- FIACCO, A. & MCCORMICK, G. (1990). *Nonlinear Programming*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- FISCHER, A., HERRICH, M., IZMAILOV, A. F., & SOLODOV, M. V. (2016). A globally convergent LP-Newton method. *SIAM Journal on Optimization*, 26(4), 2012–2033.
- FLETCHER, R. & LEYFFER, S. (1997). *Nonlinear Programming without a penalty function*. Dundee Numerical Analysis Report NA/171, University of Dundee.
- FLETCHER, R. & LEYFFER, S. (2002). Nonlinear programming without a penalty function. *Mathematical Programming*, 91(2), 239–269.
- FRISCH, K. R. (1955). *The logarithmic potential method of convex programming*. Memorandum, University Institute of Economics, Oslo.
- GABRIEL, S. A., CONEJO, A. J., FULLER, J. D., HOBBS, B. F., & RUIZ, C. (2012). *Complementarity Modeling in Energy Markets*. International Series in Operations Research & Management Science. Springer New York.
- GAY, D. (1981). Computing optimal locally constrained steps. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 2(2), 186–197.
- GENDREAU, M. & POTVIN, J. Y. (2010). *Handbook of Metaheuristics*. International Series in Operations Research & Management Science. Springer US.
- GILL, P. E., MURRAY, W., SAUNDERS, M. A., TOMLIN, J. A., & WRIGHT, M. H. (1986). On projected Newton barrier methods for linear programming and an equivalence to Karmarkar’s projective method. *Mathematical Programming*, 36(2), 183–209.

- GÓMEZ-EXPÓSITO, A., CONEJO, A. J., & CAÑIZARES, C. (2011). *Sistemas de Energia Elétrica: Análise e Operação*. Rio de Janeiro: LTC.
- GONDZIO, J. (1996). Multiple centrality corrections in a primal-dual method for linear programming. *Computational Optimization and Applications*, 6(2), 137–156.
- GOPALAKRISHNAN, A., RAGHUNATHAN, A. U., NIKOVSKI, D., & BIEGLER, L. T. (2013). Global optimization of multi-period optimal power flow. In *2013 American Control Conference* (pp. 1157–1164).
- GOULD, N. I. M. & LEYFFER, S. (2003). An introduction to algorithms for nonlinear optimization. In J. F. Blowey, A. W. Craig, & T. Shardlow (Eds.), *Frontiers in Numerical Analysis: Durham 2002* (pp. 109–197). Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- GRANVILLE, S. (1994). Optimal reactive dispatch through interior point methods. *IEEE Transactions on Power Systems*, 9(1), 136–146.
- GRIVA, I. (2004). Numerical experiments with an interior-exterior point method for nonlinear programming. *Computational Optimization and Applications*, 29(2), 173–195.
- GRIVA, I., NASH, S., & SOFER, A. (2009). *Linear and Nonlinear Optimization*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM).
- GRIVA, I. & POLYAK, A. R. (2006). Primal-dual nonlinear rescaling method with dynamic scaling parameter update. *Mathematical Programming*, 106(2), 237–259.
- HALILBAŠIĆ, L., PINSON, P., & CHATZIVASILEIADIS, S. (2019). Convex relaxations and approximations of chance-constrained AC-OPF problems. *IEEE Transactions on Power Systems*, 34(2), 1459–1470.
- HESTENES, M. R. (1969). Multiplier and gradient methods. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 4(5), 303–320.
- HINDER, O. & YE, Y. (2018). A one-phase interior point method for nonconvex optimization. *arXiv preprint arXiv:1801.03072*.
- HUO, D., BLOND, S. L., GU, C., WEI, W., & YU, D. (2018). Optimal operation of interconnected energy hubs by using decomposed hybrid particle swarm and interior-point approach. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 95, 36–46.
- JABR, R. A., COONICK, A. H., & CORY, B. J. (2002). A primal-dual interior point method for optimal power flow dispatching. *IEEE Transactions on Power Systems*, 17(3), 654–662.

- JIANG, Q. & GENG, G. (2010). A reduced-space interior point method for transient stability constrained optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 25(3), 1232–1240.
- KANZOW, C. (1996). Some Noninterior Continuation Methods for Linear Complementarity Problems. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 17(4), 851–868.
- KARAS, E. W. (2002). *Exemplos de Trajetória Central Mal Comportada em Otimização Convexa e um Algoritmo de Filtros para Programação Não-Linear*. Tese (Doutorado), Universidade Federal de Santa Catarina.
- KARMARKAR, N. (1984). A new polynomial-time algorithm for linear programming. *Combinatorica*, 4(4), 373–395.
- KAROUI, K., PLATBROOD, L., CRISCIU, H., & WALTZ, R. A. (2008). New large-scale security constrained optimal power flow program using a new interior point algorithm. In *5th International Conference on the European Electricity Market* (pp. 1–6).
- KORT, B. W. & BERTSEKAS, D. P. (1972). A new penalty function method for constrained minimization. In *Proceedings of the 1972 IEEE Conference on Decision and Control and 11th Symposium on Adaptive Processes* (pp. 162–166).
- LAGE, G. G. (2013). *O Fluxo de Potência Ótimo Reativo com Variáveis de Controle Discretas e Restrições de Atuação de Dispositivos de Controle de Tensão*. Tese (Doutorado), Universidade de São Paulo.
- LALEE, M., NOCEDAL, J., & PLANTENGA, T. (1998). On the implementation of an algorithm for large-scale equality constrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 8(3), 682–706.
- LAVAEI, J. & LOW, S. H. (2012). Zero duality gap in optimal power flow problem. *IEEE Transactions on Power Systems*, 27(1), 92–107.
- LEVENBERG, K. (1944). A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. *Quarterly of Applied Mathematics*, 2(2), 164–168.
- LIN, S.-Y., HO, Y.-C., & LIN, C.-H. (2004). An ordinal optimization theory-based algorithm for solving the optimal power flow problem with discrete control variables. *IEEE Transactions on Power Systems*, 19(1), 276–286.
- LIPOWSKI, J. S. & CHARALAMBOUS, C. (1981). Solution of optimal load flow problem by modified recursive quadratic-programming method. *IEE Proceedings C - Generation, Transmission and Distribution*, 128(5), 288–294.

- LIU, L., WANG, X., DING, X., & CHEN, H. (2009). A Robust Approach to Optimal Power Flow With Discrete Variables. *IEEE Transactions on Power Systems*, 24(3), 1182–1190.
- LIU, M., TSO, S. K., & CHENG, Y. (2002). An extended nonlinear primal-dual interior-point algorithm for reactive-power optimization of large-scale power systems with discrete control variables. *IEEE Transactions on Power Systems*, 17(4), 982–991.
- LIU, W. H. E., PAPALEXOPOULOS, A. D., & TINNEY, W. F. (1992). Discrete shunt controls in a Newton optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 7(4), 1509–1518.
- LU, W., LIU, M., LIN, S., & LI, L. (2018). Fully decentralized optimal power flow of multi-area interconnected power systems based on distributed interior point method. *IEEE Transactions on Power Systems*, 33(1), 901–910.
- MACFIE, P. J., TAYLOR, G. A., IRVING, M. R., HURLOCK, P., & WAN, H. B. (2010). Proposed Shunt Rounding Technique for Large-Scale Security Constrained Loss Minimization. *IEEE Transactions on Power Systems*, 25(3), 1478–1485.
- MARQUARDT, D. W. (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 11(2), 431–441.
- MARTÍNEZ, J. M. & SANTOS, S. A. (1995). Métodos computacionais de otimização. *Colóquio Brasileiro de Matemática, Apostilas*, 20.
- MATOLI, L. C. & GONZAGA, C. C. (2008). A new family of penalties for augmented Lagrangian methods. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 15(10), 925–944.
- MAZZINI, A. P. (2016). *Desenvolvimento de Estratégias de Otimização Contínua e Discreta para Problemas de Fluxo de Potência Ótimo*. Tese (Doutorado), Universidade de São Paulo.
- MAZZINI, A. P. & ASADA, E. N. (2014). A penalty function for reactive power optimization with discrete variables. In *2014 IEEE PES General Meeting / Conference Exposition* (pp. 1–5).
- MAZZINI, A. P., ASADA, E. N., & G., G. (2015). The optimal reactive dispatch problem with discrete control variables and limited control adjustments. In *2015 IEEE Power Energy Society General Meeting* (pp. 1–5).
- MAZZINI, A. P., ASADA, E. N., & LAGE, G. G. (2018). Minimisation of active power losses and number of control adjustments in the optimal reactive dispatch problem. *IET Generation, Transmission & Distribution*, 12, 2897–2904.

- MIN, W. & SHENGSONG, L. (2005). A trust region interior point algorithm for optimal power flow problems. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 27(4), 293–300.
- MOLZAHN, D. K., HOLZER, J. T., LESIEUTRE, B. C., & DEMARCO, C. L. (2013). Implementation of a Large-Scale Optimal Power Flow Solver Based on Semidefinite Programming. *IEEE Transactions on Power Systems*, 28(4), 3987–3998.
- MONTICELLI, A. & LIU, W. H. E. (1992). Adaptive movement penalty method for the Newton optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 7(1), 334–342.
- MONTICELLI, A. J. (1983). *Fluxo de carga em redes de energia eletrica*. São Paulo: Edgard Blücher.
- MORÉ, J. J. & SORENSEN, D. C. (1983). Computing a Trust Region Step. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 4(3), 553–572.
- MURRAY, W., RUBIRA, T. T. D., & WIGINGTON, A. (2015). Optimal power flow with limited and discrete controls. In *2015 IEEE Power Energy Society Innovative Smart Grid Technologies Conference (ISGT)* (pp. 1–5).
- NASH, S. G., POLYAK, R., & SOFER, A. (1994). *A Numerical Comparison of Barrier and Modified Barrier Methods For Large-Scale Bound-Constrained Optimization*, (pp. 319–338). Springer US: Boston, MA.
- NEJDAMI, I. M., CLEMENTS, K. A., & DAVIS, P. W. (2000). An efficient interior point method for sequential quadratic programming based optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 15(4), 1179–1183.
- NOCEDAL, J. & WRIGHT, S. (2000). *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer New York.
- OMOJOKUN, E. O. (1989). *Trust Region Algorithms for Optimization with Nonlinear Equality and Inequality Constraints*. PhD thesis, Boulder, CO, USA. UMI Order No: GAX89-23520.
- PAPALEXOPOULOS, A. D., IMPARATO, C. F., & WU, F. F. (1989). Large-scale optimal power flow: effects of initialization, decoupling and discretization. *IEEE Transactions on Power Systems*, 4(2), 748–759.
- PLATBROOD, L., CAPITANESCU, F., MERCKX, C., CRISCIU, H., & WEHENKEL, L. (2014). A generic approach for solving nonlinear-discrete security-constrained optimal power flow problems in large-scale systems. *IEEE Transactions on Power Systems*, 29(3), 1194–1203.

- POLYAK, R. (1992). Modified barrier functions (theory and methods). *Mathematical Programming*, 54(1), 177–222.
- POLYAK, R. & GRIVA, I. (2004). Primal-dual nonlinear rescaling method for convex optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 122(1), 111–156.
- POLYAK, R. & TEBoulLE, M. (1997). Nonlinear rescaling and proximal-like methods in convex optimization. *Mathematical Programming*, 76(2), 265–284.
- POLYAK, R. A. (2002). Nonlinear rescaling vs. smoothing technique in convex optimization. *Mathematical Programming*, 92(2), 197–235.
- POWELL, M. J. D. (1969). A method for nonlinear constraints in minimization problems. In R. Fletcher (Ed.), *Optimization* (pp. 283–298). New York: Academic Press.
- ROCKAFELLAR, R. T. (1973). The multiplier method of Hestenes and Powell applied to convex programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 12(6), 555–562.
- ROSEHART, W. (2002). Optimal power flows incorporating network stability. In *2002 IEEE Power Engineering Society Winter Meeting. Conference Proceedings (Cat. No.02CH37309)*, volume 2 (pp. 1100–1104).
- SAMPATH, L., PATIL, B. V., GOOI, H., MACIEJOWSKI, J., & LING, K. (2018). A trust-region based sequential linear programming approach for ac optimal power flow problems. *Electric Power Systems Research*, 165, 134–143.
- SANTOS, A., DECKMANN, S., & SOARES, S. (1988). A dual augmented Lagrangian approach for optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 3(3), 1020–1025.
- SANTOS, S. A. (2014). Trust-Region-Based Methods for Nonlinear Programming: Recent Advances and Perspectives. *Pesquisa Operacional*, 34, 447–462.
- SARTENAER, A. (1997). Automatic Determination of an Initial Trust Region in Nonlinear Programming. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18(6), 1788–1803.
- SASSON, A. M. (1969). Combined Use of the Powell and Fletcher-Powell Nonlinear Programming Methods for Optimal Load Flows. *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, PAS-88(10), 1530–1537.
- SASSON, A. M., VILORIA, F., & ABOYTES, F. (1973). Optimal Load Flow Solution Using the Hessian Matrix. *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, PAS-92(1), 31–41.

- SEBASTIÁN, G.-C. J., ALEXANDER, C.-L. J., & MAURICIO, G.-E. (2014). Stochastic AC Optimal Power Flow Considering the Probabilistic Behavior of the Wind, Loads and Line Parameters. *Ingeniería, Investigación y Tecnología*, 15(4), 529–538.
- SHANNO, D. (2012). Who Invented the Interior-Point Method? *Documenta Mathematica*, (pp. 55–64).
- SIMONI, V. R. & TORRES, G. L. (2014). A sequential ℓ_1 quadratic programming method for robust nonlinear optimal power flow solution. In *2014 Power Systems Computation Conference* (pp. 1–7).
- SOLER, E. M. (2011). *Resolução do problema de Fluxo de Potência Ótimo com variáveis de controle discretas*. Tese (Doutorado), Universidade de São Paulo.
- SOLER, E. M., ASADA, E. N., & DA COSTA, G. R. M. (2013). Penalty-based nonlinear solver for optimal reactive power dispatch with discrete controls. *IEEE Transactions on Power Systems*, 28(3), 2174–2182.
- SOLER, E. M., DE SOUSA, V. A., & COSTA, G. R. M. (2012). A modified primal–dual logarithmic-barrier method for solving the optimal power flow problem with discrete and continuous control variables. *European Journal of Operational Research*, 222(3), 616–622.
- SOUSA, A. A., TORRES, G. L., & CANIZARES, C. A. (2011). Robust Optimal Power Flow Solution Using Trust Region and Interior-Point Methods. *IEEE Transactions on Power Systems*, 26(2), 487–499.
- SOUSA, V. A. (2006). *Resolução do Problema de Fluxo de Potência Ótimo Reativo via Método da Função Lagrangiana Barreira Modificada*. Tese (Doutorado), Universidade de São Paulo.
- SOUSA, V. A., BAPTISTA, E. C., & COSTA, G. R. M. (2004). Modified barrier method for optimal power flow problem. In *IEEE Power Engineering Society General Meeting*, volume 1 (pp. 831–836).
- SOUSA, V. A., BAPTISTA, E. C., & COSTA, G. R. M. (2009). Loss minimization by the predictor–corrector modified barrier approach. *Electric Power Systems Research*, 79(5), 803–808.
- SOUSA, V. A., BAPTISTA, E. C., & COSTA, G. R. M. (2012). Optimal reactive power flow via the modified barrier Lagrangian function approach. *Electric Power Systems Research*, 84(1), 159–164.

- SOUSA, V. A., NUNES, L. C. T., BELATI, E. A., & COSTA, G. R. M. (2003). A new approach type-Newton for optimal reactive dispatch problem. In *2003 IEEE Power Engineering Society General Meeting (IEEE Cat. No.03CH37491)*, volume 1 (pp. 257 Vol. 1).
- STEIHAUG, T. (1983). The Conjugate Gradient Method and Trust Regions in Large Scale Optimization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 20(3), 626–637.
- SUN, D. I., ASHLEY, B., BREWER, B., HUGHES, A., & TINNEY, W. F. (1984). Optimal power flow by Newton approach. *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, PAS-103(10), 2864–2880.
- TAPIA, R. A. (1977). Diagonalized multiplier methods and quasi-Newton methods for constrained optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 22(2), 135–194.
- TINNEY, W. F., BRIGHT, J. M., DEMAREE, K. D., & HUGHES, B. A. (1988). Some deficiencies in optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 3(2), 676–683.
- TORRES, G. L. (2011). Globally convergent optimal power flow using complementarity functions and trust region methods. In *Proc. of the 17th Power Systems Computation Conference, Stockholm, Sweden*.
- TORRES, G. L. & QUINTANA, V. H. (1998). An interior-point method for nonlinear optimal power flow using voltage rectangular coordinates. *IEEE Transactions on Power Systems*, 13(4), 1211–1218.
- TORRES, G. L. & QUINTANA, V. H. (1999). Optimal power flow by a nonlinear complementarity method. In *Proceedings of the 21st International Conference on Power Industry Computer Applications. Connecting Utilities. PICA 99. To the Millennium and Beyond (Cat. No.99CH36351)* (pp. 211–216).
- TORRES, G. L. & QUINTANA, V. H. (2001). On a nonlinear multiple-centrality-corrections interior-point method for optimal power flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 16(2), 222–228.
- VAN AMERONGEN, R. A. M. (1988). Optimal power flow solved with sequential reduced quadratic programming. *Archiv für Elektrotechnik*, 71(3), 213–219.
- VANDERBEI, R. J. & SHANNO, D. F. (1999). An interior-point algorithm for nonconvex nonlinear programming. *Computational Optimization and Applications*, 13(1), 231–252.

- VARADARAJAN, M. & SWARUP, K. (2008). Differential evolutionary algorithm for optimal reactive power dispatch. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 30(8), 435–441.
- VARDI, A. (1985). A Trust Region Algorithm for Equality Constrained Minimization: Convergence Properties and Implementation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 22(3), 575–591.
- VICENTE, L. N. (1996). *Trust-Region Interior-Point Algorithms for a Class of Nonlinear Programming Problems*. (PhD Thesis), Rice University.
- WÄCHTER, A. & BIEGLER, L. T. (2006). On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 106(1), 25–57.
- WANG, H., MURILLO-SANCHEZ, C. E., ZIMMERMAN, R. D., & THOMAS, R. J. (2007). On Computational Issues of Market-Based Optimal Power Flow. *IEEE Transactions on Power Systems*, 22(3), 1185–1193.
- WRIGHT, M. H. (2005). The interior-point revolution in optimization: history, recent developments, and lasting consequences. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 42(1), 39–56.
- WU, Y.-C., DEBS, A. S., & MARSTEN, R. E. (1994). A direct nonlinear predictor-corrector primal-dual interior point algorithm for optimal power flows. *IEEE Transactions on Power Systems*, 9(2), 876–883.
- YAMASHITA, H., YABE, H., & TANABE, T. (2005). A globally and superlinearly convergent primal-dual interior point trust region method for large scale constrained optimization. *Mathematical Programming*, 102(1), 111–151.
- YAN, W., LU, S., & YU, D. C. (2004). A novel optimal reactive power dispatch method based on an improved hybrid evolutionary programming technique. *IEEE Transactions on Power Systems*, 19(2), 913–918.
- YAN, X. & QUINTANA, V. H. (1999). Improving an interior-point-based OPF by dynamic adjustments of step sizes and tolerances. *IEEE Transactions on Power Systems*, 14(2), 709–717.
- YU, H. & ROSEHART, W. D. (2012). An Optimal Power Flow Algorithm to Achieve Robust Operation Considering Load and Renewable Generation Uncertainties. *IEEE Transactions on Power Systems*, 27(4), 1808–1817.
- YUAN, Y. (2015). Recent advances in trust region algorithms. *Mathematical Programming*, 151(1), 249–281.