Métodos de programação quadrática convexa
esparsa e suas aplicações em projeções em
poliedros

Jeinny Maria Peralta Polo

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Métodos de programação quadrática convexa esparsa e suas aplicações em projeções em poliedros

Jeinny Maria Peralta Polo

***Orientadora:* Profa. Dra. Marina Andretta**

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências - Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

USP – São Carlos
Abril de 2013

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

P778m Peralta Polo, Jeinny Maria
 Métodos de programação quadrática convexa esparsa
e suas aplicações em projeções em poliedros / Jeinny
Maria Peralta Polo; orientadora Marina Andretta. --
São Carlos, 2013.
 108 p.

 Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação
em Ciências de Computação e Matemática
Computacional) -- Instituto de Ciências Matemáticas
e de Computação, Universidade de São Paulo, 2013.

 1. Minimização com restrições lineares. 2. Projeção
esparsa. 3. Programação quadrática convexa esparsa.
I. Andretta, Marina, orient. II. Título.

Aos meus amados pais e meu esposo.

Agradecimentos

À professora Marina pela excelente orientação oferecida na realização deste trabalho e pela motivação, colaboração e apoio nos momentos difíceis.

Aos professores que tive, porque deles aprendi muitas coisas.

A toda minha família, especialmente meus pais, Belsy e Alvaro, pelo apoio e amor que sempre me dão.

Aos meus amigos e colegas pela ajuda, especialmente minha querida amiga Yaneth, que apesar da distância sempre está comigo.

À FAPESP, pelo apoio financeiro.

Finalmente, agradeço ao meu principal apoio e incentivo ao longo destes anos, meu amado esposo Alfredo, pelo seu grande amor, compreensão e dedicação.

Resumo

O problema de minimização com restrições lineares é importante, não apenas pelo problema em si, que surge em várias áreas, mas também por ser utilizado como subproblema para resolver problemas mais gerais de programação não-linear. GENLIN é um método eficiente para minimização com restrições lineares para problemas de pequeno e médio porte. Para que seja possível a implementação de um método similar para grande porte, é necessário ter um método eficiente, também para grande porte, para projeção de pontos no conjunto de restrições lineares.

O problema de projeção em um conjunto de restrições lineares pode ser escrito como um problema de programação quadrática convexa. Neste trabalho, estudamos e implementamos métodos esparsos para resolução de problemas de programação quadrática convexa apenas com restrições de caixa, em particular o clássico método Moré-Toraldo e o “método” NQC. O método Moré-Toraldo usa o método dos Gradientes Conjugados para explorar a face da região factível definida pela iteração atual, e o método do Gradiente Projetado para mudar de face. O “método” NQC usa o método do Gradiente Espectral Projetado para definir em que face trabalhar, e o método de Newton para calcular o minimizador da quadrática reduzida a esta face.

Utilizamos os métodos esparsos Moré-Toraldo e NQC para resolver o problema de projeção de GENLIN e comparamos seus desempenhos.

Abstract

The linearly constrained minimization problem is important, not only for the problem itself, that arises in several areas, but because it is used as a subproblem in order to solve more general nonlinear programming problems. GENLIN is an efficient method for solving small and medium scaled linearly constrained minimization problems. To implement a similar method to solve large scale problems, it is necessary to have an efficient method to solve sparse projection problems onto linear constraints.

The problem of projecting a point onto a set of linear constraints can be written as a convex quadratic programming problem. In this work, we study and implement sparse methods to solve box constrained convex quadratic programming problems, in particular the classical Moré-Toraldo method and the NQC “method”. The Moré-Toraldo method uses the Conjugate Gradient method to explore the face of the feasible region defined by the current iterate, and the Projected Gradient method to move to a different face. The NQC “method” uses the Spectral Projected Gradient method to define the face in which it is going to work, and the Newton method to calculate the minimizer of the quadratic function reduced to this face.

We used the sparse methods Moré-Toraldo and NQC to solve the projection problem of GENLIN and we compared their performances.

Sumário

Introdução	3
1 Programação quadrática convexa com restrições de caixa	9
1.1 Método Moré-Toraldo	13
1.1.1 Busca projetada	18
1.1.2 Resultados de convergência	22
1.1.3 Resultados numéricos	25
1.2 “Método” NQC	29
1.3 Resultados numéricos	30
2 Método para resolução de problemas de minimização com restrições lineares	45
2.1 Algoritmos “irrestritos”	47
2.1.1 Algoritmo “irrestrito” com regiões de confiança	49
2.1.2 Algoritmo “irrestrito” com busca linear	51
2.1.3 Cálculo da base do núcleo	52
2.2 Método do Gradiente Espectral Projetado Parcial	54
2.3 Método de restrições ativas para problemas com restrições lineares	57
2.4 Projeção	58
2.5 Teoria de convergência	59
2.6 Detalhes de implementação	66
2.6.1 Detalhes da implementação de GENLIN-GPCG	67
2.6.2 Detalhes da implementação de GENLIN-NQC	69
2.7 Resultados numéricos	70
3 Conclusões e trabalhos futuros	95

A Provas de teoremas, proposições e propriedades	99
Referências	108

Introdução

O problema de minimização com restrições lineares é importante, não apenas pelo problema em si, que surge em várias áreas, mas também por ser utilizado como subproblema para resolver problemas mais gerais de programação não-linear.

Estamos interessados em resolver o seguinte problema:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeita a} && x \in \Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, Cx \leq d, l \leq x \leq u\}, \end{aligned} \tag{1}$$

onde f é uma função em $\mathcal{C}^2$, $x \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{r \times n}$, $b \in \mathbb{R}^r$, $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $d \in \mathbb{R}^m$, $l \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^n$, $u \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^n$ e $[l]_i < [u]_i$, $1 \leq i \leq n$. Daqui em diante, $[]_i$ denota a i -ésima componente de um vetor.

Um método bastante usado para resolver (1) é o método de restrições ativas. GENLIN, apresentado em [Andretta et al. \(2010\)](#), é a implementação de um método de restrições ativas para problemas de pequeno e médio porte, que faz parte do Projeto TANGO (*Trustable Algorithms for Nonlinear General Optimization*)¹. Neste método, o conjunto viável é dividido em faces. Cada face é determinada por um conjunto de restrições lineares de igualdade. A cada iteração, decide-se se deve ser encontrado o minimizador da função restrito à face ou se a face deve ser abandonada. No primeiro caso, resolve-se um subproblema irrestrito utilizando busca linear com Newton truncado ou regiões de confiança com Moré-Sorensen ([Moré e Sorensen \(1983\)](#)), tomando-se o cuidado de não violar nenhuma das restrições de desigualdade que não foram

¹Disponível em www.ime.usp.br/~egbirgin/tango.

consideradas na resolução do subproblema. No segundo caso, usa-se o método do Gradiente Espectral Projetado Parcial (PSPG) (inspirado no método do Gradiente Espectral Projetado, apresentado em [Birgin et al. \(2000, 2001\)](#)), que necessita fazer projeções em um subconjunto de restrições do problema original (1).

Para que seja possível a implementação de um método similar para grande porte, é necessário ter um método eficiente, também para grande porte, para projeção de pontos no conjunto de restrições lineares (usado em PSPG).

O problema de projeção em um conjunto de restrições lineares pode ser escrito como um problema de programação quadrática convexa,

$$\begin{aligned}
& \text{Minimizar} && \frac{1}{2} \|x - \tilde{x}\|_2^2 \equiv \frac{1}{2} x^T I x - \tilde{x}^T x \\
& \text{sujeita a} && Ax = b, \\
& && \tilde{C}x \leq \tilde{d}, \\
& && l \leq x \leq u,
\end{aligned} \tag{2}$$

onde $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ é o ponto que queremos projetar, I é a matriz identidade em $\mathbb{R}^{n \times n}$, $\tilde{C} \in \mathbb{R}^{\tilde{m} \times n}$ e $\tilde{d} \in \mathbb{R}^{\tilde{m}}$ correspondem às restrições lineares de desigualdade utilizadas na projeção.

Há muitos anos problemas de programação quadrática convexa vem sendo estudados e existem alguns métodos para sua resolução. Em [Goldfarb e Idnani \(1983\)](#) foi apresentado um método dual de restrições ativas, eficiente e numericamente estável, para resolver problemas densos de programação quadrática definidos positivos. Este método, que usa como ponto inicial o minimizador do problema irrestrito, foi estendido para problemas mal condicionados por [Powell \(1985\)](#) e reformulado por [Boland \(1997\)](#) para problemas de programação quadrática semi-definidos positivos. Uma outra reformulação do método Goldfarb-Idnani foi proposta por [Bartlett e Biegler \(2006\)](#), em que o método do complemento de Schur [Gill et al. \(1990\)](#) é usado para resolver sistemas lineares.

Estamos interessados em estudar a aplicação de métodos de programação quadrática convexa esparsa para resolver o problema (2). Uma outra maneira de calcular a projeção é considerar o problema dual de (2), dado por

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} \quad \frac{1}{2}y^T \tilde{A} \tilde{A}^T y + (\tilde{b} - \tilde{A}\tilde{x})^T y \\ & \text{sujeita a} \quad y_i \geq 0, \quad i = r+1, r+2, \dots, r+\tilde{m}+2n, \end{aligned} \tag{3}$$

$$\text{onde } \tilde{A} \in \mathbb{R}^{(r+\tilde{m}+2n) \times n}, \tilde{A} = \begin{bmatrix} A \\ \tilde{C} \\ -I \\ I \end{bmatrix} \text{ e } \tilde{b} \in \mathbb{R}^{r+\tilde{m}+2n}, \tilde{b} = \begin{bmatrix} b \\ \tilde{d} \\ -\ell \\ u \end{bmatrix}.$$

Note que (3) é um problema de programação quadrática com restrições de caixa. Este problema tem sido muito estudado.

Em [Coleman e Hulbert. \(1989\)](#) mostrou-se que é possível implementar eficientemente um método direto de restrições ativas para resolver problemas de programação quadráticas com restrições de caixa de grande porte.

Em [Friedlander e Martínez \(1994\)](#) introduz-se um novo método para problemas de grande porte, que combina Gradiente Conjugado com Gradiente Projetado como em [Moré e Toraldo \(1991\)](#) e outros métodos conhecidos. Neste método, uma nova estratégia para a decisão de sair ou ficar na face é introduzida, que torna possível obter convergência finita mesmo para uma Hessiana singular e uma solução dual degenerada. Um ano depois, em [Friedlander et al. \(1995\)](#), foi apresentada uma modificação para este novo método, em que o método Barzilai-Borwein (introduzido por [Barzilai e Borwein \(1988\)](#) e analisado por [Raydan \(1993\)](#)) é usado em vez do clássico método do Gradiente Conjugado para minimização dentro das faces.

Em [Bielschowski et al. \(1997\)](#) apresentou-se um algoritmo de restrições ativas, que pode usar diferentes técnicas de minimização irrestrita em cada face, dependendo da dimensão desta. Dois problemas de projeção em poliedro foram mostrados nos testes apresentados nesse artigo.

Em [Dostál \(2003\)](#) foi apresentada uma modificação do “*proportioning algorithm*”, desenvolvido em [Dostál \(1997\)](#). O “*proportioning algorithm*” é um algoritmo do tipo restrições ativas para problemas de grande porte que, para explorar uma face, usa o método do Gradiente Conjugado até que seja gerada uma iteração desproporcional (conceito introduzido nesse artigo).

Em [Dostál e Schöberl \(2005\)](#) apresentou-se uma nova modificação do “*proportioning algorithm*”, onde é mostrada a taxa de convergência e a propriedade de terminação finita, mesmo para problemas cuja solução não satisfaz a condição de complementaridade estrita.

Em [Dai e Fletcher \(2005\)](#) estudaram-se os dois métodos Barzilai-Borwein projetado (propostos por [Birgin et al. \(2000\)](#), para minimização de funções diferenciáveis em conjuntos convexos fechados), para problemas de programação quadrática de grande porte com restrições de caixa, fazendo uma adaptação à busca linear não monótona. Os métodos Barzilai-Borwein projetado em [Birgin et al. \(2000\)](#) são a combinação do clássico método do gradiente projetado com a estratégia de busca linear não monótona (sugerida por [Grippo et al. \(1986\)](#), para métodos de Newton) e os tamanhos do passo espectrais (introduzidos em [Barzilai e Borwein \(1988\)](#) e analisados por [Raydan \(1993\)](#)).

Em [Zhou et al. \(2006\)](#), inspirado em [Dai e Fletcher \(2005\)](#) e [Birgin et al. \(2000\)](#), são propostos e analisados métodos de gradiente projetado do tipo monótono para problemas de programação quadrática com restrições de caixa de grande porte. Nestes métodos, no cálculo do tamanho do passo, são usados gradientes projetados contínuos ou descontínuos em vez de gradientes negativos.

Neste trabalho, estudamos e implementamos o método Moré-Toraldo, apresentado em [Moré e Toraldo \(1991\)](#), por ser um método clássico para resolução de problemas de programação quadrática convexa com restrições de caixa de grande porte. Neste método, como em GENLIN, a região factível é dividida em faces. Cada face é determinada pelo conjunto de restrições ativas. Uma variável $[x]_i$ é ativa se $[x]_i = [l]_i$ ou $[x]_i = [u]_i$. A cada iteração, o método Moré-Toraldo usa o método de Gradientes Conjugados para explorar a face da região factível, e o método de Gradiente Projetado para mudar de face. Além do método Moré-Toraldo, estudamos o “método” NQC, desenvolvido e implementado pela Profa. Dra. Marina Andretta, durante seu pós-doutorado, em parceria com os professores José Mario Martínez e Mikhail Solodov, para resolução de problemas de programação quadrática convexa com restrições de caixa. O “método” NQC, sigla para Newton para Quadráticas convexas em Caixas, usa o método do Gradiente Espectral Projetado para definir em que

face trabalhar, e o método de Newton para calcular o minimizador da quadrática reduzida a esta face.

Utilizamos o método Moré-Toraldo e o “método” NQC em GENLIN para resolver o problema de projeção e comparamos seus desempenhos.

Neste trabalho, os capítulos estão organizados da maneira que segue. No Capítulo 1, descrevemos dois métodos para resolução de problemas de programação quadrática com restrições de caixa, o Método Moré-Toraldo e o “método” NQC, assim como algumas definições, proposições e teoremas úteis para uma melhor compreensão dos problemas de programação quadrática e dos métodos para a resolução destes problemas. Apresentamos detalhes da implementação de cada um dos métodos e resultados numéricos comparando estes métodos entre si. No Capítulo 2, descrevemos em detalhes GENLIN, um método eficiente para resolução do problema de minimização com restrições lineares. Apresentamos resultados numéricos comparando o desempenho da versão original de GENLIN com as duas novas versões: uma que utiliza o método Moré-Toraldo e outra que utiliza o “método” NQC para calcular projeções esparsas. Por fim, no Capítulo 3, apresentamos as conclusões finais deste trabalho e sugestões para trabalhos futuros.

Programação quadrática convexa com restrições de caixa

Neste capítulo, iremos apresentar dois métodos para resolução de problemas de programação quadrática convexa com restrições de caixa, o Método Moré-Toraldo e o “método” NQC. Primeiramente, apresentaremos algumas definições, proposições e teoremas úteis para uma melhor compreensão do problema e dos métodos.

O problema de programação quadrática com restrições de caixa é definido como segue:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && q(x) \\ &\text{sujeita a} && x \in \Omega_{\square}, \end{aligned} \tag{1.1}$$

onde $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função quadrática e

$$\Omega_{\square} = \{x \in \mathbb{R}^n : l \leq x \leq u\}, \tag{1.2}$$

é a região factível, sendo $l \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^n$, $u \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^n$ e $[l]_i < [u]_i$.

Observação 1.1. *Note que a região factível $\Omega_{\square}$ é um conjunto convexo.*

No Teorema 1.1, que é provado no Apêndice A, afirmamos que a solução x^* do problema (1.1) é única se a função q é estritamente convexa sobre o

conjunto $\Omega_{\square}$.

Teorema 1.1. *O problema de programação quadrática com restrições de caixa (1.1) tem solução única x^* quando q é estritamente convexa na região factível (1.2).*

O Teorema 1.2 mostra uma condição necessária e suficiente para que um ponto seja solução do problema (1.1) (veja Bertsekas (1999), proposição 2.1.2).

Teorema 1.2. *Considere q uma função convexa sobre o conjunto $\Omega_{\square}$. O ponto x^* é minimizador da função q sobre o conjunto $\Omega_{\square}$ se, e somente se, $\nabla q(x^*)^T(x - x^*) \geq 0$, para todo $x \in \Omega_{\square}$.*

Para a prova, veja Apêndice A.

Assim, pelo Teorema 1.2, a solução x^* do problema (1.1) pode ser caracterizada como a solução da desigualdade variacional

$$\nabla q(x^*)^T(x - x^*) \geq 0, \quad \forall x \in \Omega_{\square}. \quad (1.3)$$

Se o conjunto $\Omega_{\square}$, definido por (1.2), é a região factível, qualquer solução da desigualdade variacional (1.3) satisfaz as condições Karush-Kuhn-Tucker ou condições necessárias de primeira ordem KKT para o problema (1.1) (veja, por exemplo, Nocedal e Wright (1999)). As condições são ditas de primeira ordem pois utilizam apenas informação do gradiente da função objetivo e das restrições.

As condições necessárias de primeira ordem KKT para que um ponto x^* seja solução de (1.1) são

$$\begin{aligned} \nabla q(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}_l} [\lambda^*]_i e_i + \sum_{i \in \mathcal{I}_u} [\mu^*]_i e_i &= 0, \\ [x^* - l]_i &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_l, \\ [u - x^*]_i &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_u, \\ [\lambda^*]_i &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_l, \\ [\mu^*]_i &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_u, \\ [\lambda^*]_i [x^* - l]_i &= 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_l, \\ [\mu^*]_i [u - x^*]_i &= 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_u, \end{aligned} \quad (1.4)$$

com $[\lambda^*]_i, [\mu^*]_i \in \mathbb{R}$, e_i i -ésima coluna da matriz identidade, $\mathcal{I}_l$ e $\mathcal{I}_u$ conjunto dos índices das restrições $[l]_i \leq [x]_i$, para $[l]_i \in \mathbb{R}$ e $[x]_i \leq [u]_i$, para $[u]_i \in \mathbb{R}$, respectivamente. Note que $\mathcal{I}_l$ e $\mathcal{I}_u$ não necessariamente são o conjunto $\{i : 1 \leq i \leq n\}$, pois é possível que $[l]_i = -\infty$ ou $[u]_i = \infty$ para algum $1 \leq i \leq n$.

Estas condições podem ser escritas como: se um ponto $x^* \in \Omega_\square$ é solução de (1.1), então

$$\begin{aligned} [\nabla q(x^*)]_i &= 0, & \text{se } [x^*]_i &\in ([l]_i, [u]_i), \\ [\nabla q(x^*)]_i &\geq 0, & \text{se } [x^*]_i &= [l]_i, \\ [\nabla q(x^*)]_i &\leq 0, & \text{se } [x^*]_i &= [u]_i. \end{aligned} \tag{1.5}$$

A seguir, apresentamos três definições e duas proposições apropriadas para restrições de caixa, úteis para definir uma solução aproximada do problema (1.1).

Definição 1.1. A projeção ortogonal de um ponto x no conjunto viável $\Omega_\square$ é dada da seguinte maneira:

$$P_{\Omega_\square}(x) = \begin{cases} [x]_i, & \text{se } [l]_i \leq [x]_i \leq [u]_i, \\ [l]_i, & \text{se } [x]_i < [l]_i, \\ [u]_i, & \text{se } [x]_i > [u]_i. \end{cases} \tag{1.6}$$

Definição 1.2. O gradiente projetado contínuo no ponto x é dado por:

$$P_{\Omega_\square}(x - \nabla q(x)) - x,$$

onde $P_{\Omega_\square}$ é a projeção (1.6).

Definição 1.3. O gradiente projetado descontínuo no ponto x é dado por:

$$\left[\nabla_{\Omega_\square} q(x) \right]_i = \begin{cases} [\nabla q(x)]_i, & \text{se } [x]_i \in ([l]_i, [u]_i), \\ \min \{ [\nabla q(x)]_i, 0 \}, & \text{se } [x]_i = [l]_i, \\ \max \{ [\nabla q(x)]_i, 0 \}, & \text{se } [x]_i = [u]_i. \end{cases}$$

O gradiente projetado descontínuo é o negativo do gradiente projetado definido em Calamai e Moré (1987) para um conjunto convexo fechado qualquer.

Note que $\nabla_{\Omega_{\square}} q(x)$ pode ser descontínuo na fronteira de $\Omega_{\square}$.

Proposição 1.1. *Um ponto x^* viável satisfaz $P_{\Omega_{\square}}(x^* - \nabla q(x^*)) - x^* = 0$, se, e somente se, este ponto também satisfaz as condições KKT (1.4).*

Para a prova, veja o Apêndice A.

Proposição 1.2. *Um ponto x^* viável satisfaz $\nabla_{\Omega_{\square}} q(x^*) = 0$, se, e somente se, este ponto também satisfaz as condições KKT (1.4).*

Para a prova, veja o Apêndice A.

Com base na Proposição 1.2, definimos um minimizador aproximado do problema (1.1) como um vetor $x \in \Omega_{\square}$ tal que

$$\left\| \nabla_{\Omega_{\square}} q(x) \right\|_2 \leq \tau \left\| \nabla q(x_0) \right\|_2, \quad (1.7)$$

sendo $x_0 \in \Omega_{\square}$ um ponto inicial dado, e $\tau \in (0, 1)$ uma tolerância.

Uma definição alternativa para o minimizador aproximado do problema (1.1) é

$$\left\| P_{\Omega_{\square}}(x - \nabla q(x)) - x \right\|_2 \leq \tau \left\| \nabla q(x_0) \right\|_2, \quad (1.8)$$

com $x \in \Omega_{\square}$.

Uma vantagem de (1.7) sobre (1.8) é que, se substituirmos q por αq , para algum $\alpha > 0$, apenas (1.7) é invariante à escala. De fato, se substituirmos q por αq em (1.8), e $\Omega_{\square}$ é limitado, então (1.8) é satisfeito para qualquer $x \in \Omega_{\square}$, se α é suficientemente grande.

A seguir, definimos formalmente face e conjunto ativo, conceitos que são muito usados no estudo de métodos do tipo restrições ativas para problemas com restrições de caixa.

Definição 1.4. *O conjunto dos índices das restrições ativas em x é definido por*

$$\mathcal{A}(x) = \{i : [x]_i = [l]_i \text{ ou } [x]_i = [u]_i\}.$$

As variáveis com índices em $\mathcal{A}(x)$ são ditas fixas e as variáveis com índices fora de $\mathcal{A}(x)$ são ditas livres.

Definição 1.5. *A face do conjunto factível $\Omega_{\square}$ que contém x é dada por*

$$\{y \in \Omega_{\square} : [y]_i = [x]_i \text{ se } [x]_i \in \{[l]_i, [u]_i\}\}.$$

Ou seja, a face do conjunto factível que contém um ponto x pode ser definida em termos do conjunto ativo.

Na proposição 1.3, que será provada no Apêndice A, afirmamos que, de fato, podemos encontrar um minimizador aproximado x do problema (1.1) em $\Omega_{\square}$.

Proposição 1.3. *Considere x^* o minimizador do problema (1.1). Se x está suficientemente perto de x^* e x pertence à mesma face que x^* , então x é um minimizador aproximado do problema (1.1).*

1.1 Método Moré-Toraldo

Nesta seção, descrevemos em detalhes o método usado para solucionar o problema de programação quadrática com restrições de caixa (1.1) para o caso em que q é uma quadrática convexa, apresentado em Moré e Toraldo (1991). O método usa o método dos Gradientes Conjugados (veja, por exemplo, Nocedal e Wright (1999)) para explorar a face da região factível definida pelo iterando atual, e o método do Gradiente Projetado (veja, por exemplo, Nocedal e Wright (1999)) para mudar de face.

O método dos Gradientes Conjugados é um método iterativo para a solução numérica de sistemas lineares cujas matrizes são simétricas e definidas positivas, ou, equivalentemente, o método dos Gradientes Conjugados é uma técnica de minimização de funções quadráticas convexas irrestritas.

O método do Gradiente Projetado é um método de programação não linear para a resolução de problemas de otimização com restrições de igualdade e desigualdade.

Começamos descrevendo o uso do método dos Gradientes Conjugados. Dada a iteração k , um ponto x_k e o conjunto ativo $\mathcal{A}(x_k)$, usamos o mé-

todo dos Gradientes Conjugados para calcular uma solução aproximada do subproblema

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && q(x_k + d) \\ &\text{sujeita a} && [d]_i = 0, \quad i \in \mathcal{A}(x_k). \end{aligned} \tag{1.9}$$

Este subproblema é um problema de programação quadrática irrestrito nas variáveis livres.

Note que, se x_k está na mesma face de x^* , $x_k + d$ é a solução do problema (1.1), com d minimizador de (1.9).

O método dos Gradientes Conjugados para a solução do subproblema (1.9) é implementado expressando este subproblema em termos de um subproblema equivalente usando apenas as variáveis livres.

Se $i_1, \dots, i_{m_k}$ são os índices das variáveis livres e a matriz Z_k é definida como uma matriz em $\mathbb{R}^{n \times m_k}$ cuja j -ésima coluna é a i_j -ésima coluna da matriz identidade em $\mathbb{R}^{n \times n}$, então o subproblema (1.9) é equivalente ao subproblema irrestrito

$$\min \{q_k(w) : w \in \mathbb{R}^{m_k}\}, \tag{1.10}$$

em que

$$q_k(w) \equiv q(x_k + Z_k w) - q(x_k).$$

Sejam a matriz H_k e o vetor r_k , respectivamente, a matriz Hessiana e o gradiente reduzidos de q em x_k com respeito às variáveis livres. Se H é a matriz Hessiana da quadrática q , então

$$H_k = Z_k^T H Z_k, \quad r_k = Z_k^T \nabla q(x_k). \tag{1.11}$$

Note que a matriz H_k é obtida tomando as linhas e colunas de H cujos índices correspondem às variáveis livres. Similarmente, r_k é obtido de $\nabla q(x_k)$, tomando as componentes cujos índices correspondem às variáveis livres.

Propriedade 1.1. *Seja q uma função quadrática. Sejam H_k e r_k , respectivamente, a matriz Hessiana e o gradiente reduzidos de q em x_k com respeito às*

variáveis livres. Então,

$$q(x_k + Z_k w) - q(x_k) = \frac{1}{2} w^T H_k w + r_k^T w.$$

Prova: De fato, como q é quadrática

$$q(x) = \frac{1}{2} x^T H x + x^T c \quad \text{e} \quad \nabla q(x) = H x + c,$$

com H simétrica. Assim,

$$\begin{aligned} q(x_k + Z_k w) - q(x_k) &= \frac{1}{2} (x_k + Z_k w)^T H (x_k + Z_k w) + (x_k + Z_k w)^T c \\ &\quad - \frac{1}{2} x_k^T H x_k - x_k^T c \\ &= w^T Z_k^T H x_k + \frac{1}{2} w^T Z_k^T H Z_k w + w^T Z_k^T c \\ &= w^T Z_k^T (H x_k + c) + \frac{1}{2} w^T Z_k^T H Z_k w \\ &= w^T Z_k^T \nabla q(x) + \frac{1}{2} w^T Z_k^T H Z_k w \\ &= \frac{1}{2} w^T H_k w + r_k^T w. \end{aligned}$$

□

Dado um ponto inicial $w_0 \in \mathbb{R}^{m_k}$, o método dos Gradientes Conjugados gera uma sequência de iterandos $w_0, w_1, \dots$ que termina na solução do problema (1.10) em, no máximo, m_k iterações.

Executamos o método dos Gradientes Conjugados até que seja gerado um ponto w_j de forma que

$$q_k(w_{j-1}) - q_k(w_j) \leq \eta_1 \max \{q_k(w_{l-1}) - q_k(w_l) : 1 \leq l < j\}, \quad (1.12)$$

para alguma constante fixa $\eta_1 \in (0, 1)$.

A solução aproximada do problema (1.9) é, então, $d_k = Z_k w_{j_k}$, em que j_k é o primeiro índice j que satisfaz (1.12).

O critério de parada (1.12) detecta quando o método dos Gradientes Conjugados não obtém progresso suficiente. Uma das vantagens deste critério é

que é invariante à escala, isto é, o critério é invariante se é aplicado à função αq para algum $\alpha > 0$. Outra vantagem é que este critério em algum momento será satisfeito dado que a sequência $\{q_k(w_j)\}$ é monótona decrescente e q_k é limitada inferiormente (o que acontece neste caso por q ser uma função quadrática convexa).

Podem ser usados outros critérios, mas (1.12) é o apropriado para o método dos Gradientes Conjugados. Por exemplo, o critério $\|\nabla q_k(w_j)\|_2 \leq \eta_1 \|\nabla q_k(0)\|_2$, para algum $\eta_1 > 0$, é frequentemente usado ao invés de (1.12). Este critério é invariante à escala. Além disso, é, em algum momento, satisfeito, já que w_j resolve o subproblema (1.10) para algum $j \leq m_k$. Por outro lado, o comportamento de $\|\nabla q_k(w_j)\|_2$ é, com frequência, errático.

Em geral, não temos $x_{k+1} = x_k + d_k$, pois isto pode produzir um x_{k+1} inviável com relação a $\Omega_\square$. Alguns algoritmos usam $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, em que α_k é o minimizador de $q(x_k + \alpha d_k)$ no intervalo $[0, \mu_k]$ e

$$\mu_k = \max \{ \alpha \geq 0 : l \leq x_k + \alpha d_k \leq u \}. \quad (1.13)$$

Porém, nesta estratégia, somente uma restrição é usualmente adicionada a cada iteração, o que pode levar a um algoritmo ineficiente, já que, para obter convergência, pode-se precisar de um número grande de iterações. Usaremos uma busca projetada para definir α_k . Assim

$$x_{k+1} = P_{\Omega_\square}(x_k + \alpha_k d_k), \quad (1.14)$$

em que $P_{\Omega_\square}$ é a projeção (1.6). A busca projetada será estudada em detalhes na Seção 1.1.1. Por agora, é apenas necessário notar que a busca projetada escolhe um $\alpha_k > 0$ tal que $q(x_{k+1}) < q(x_k)$, e que mais de uma restrição pode ser adicionada ao conjunto ativo quando $\alpha_k > \mu_k$.

Se x_{k+1} , gerado pelo método dos Gradientes Conjugados, está na face que contém a solução do problema original, então a face continua sendo explorada. A decisão de continuar com o método dos Gradientes Conjugados é baseada na observação de se identificar se x está na face que contém a solução.

Definição 1.6. *O conjunto identificador em x é definido por*

$$\mathcal{B}(x) = \{i : [x]_i = [l]_i \text{ e } [\nabla q(x)]_i \geq 0, \text{ ou } [x]_i = [u]_i \text{ e } [\nabla q(x)]_i \leq 0\}.$$

Se o método dos Gradientes Conjugados produz um ponto x_{k+1} tal que $\mathcal{B}(x_{k+1}) = \mathcal{A}(x_{k+1})$, então continuamos explorando esta face com o método dos Gradientes Conjugados. A condição $\mathcal{B}(x_{k+1}) = \mathcal{A}(x_{k+1})$ não garante que x_{k+1} esteja na mesma face que contém a solução, mas, se x_{k+1} não está na mesma face que contém a solução, a propriedade de terminação finita do método dos Gradientes Conjugados garante que, em algum momento, será gerado um iterando que viola a condição $\mathcal{B}(x_{k+1}) = \mathcal{A}(x_{k+1})$.

Podemos continuar explorando a face atual, salvando o último iterando w_j e a direção de busca s_j gerada pelo método dos Gradientes Conjugados. Estabelecendo w_j e s_j como o ponto e a direção inicial da iteração seguinte, preservamos a informação e, assim, a propriedade de terminação finita do método dos Gradientes Conjugados.

Depois que o método dos Gradientes Conjugados explorou uma face, alguns métodos usam múltiplos critérios para escolher uma face diferente. Usaremos o método do Gradiente Projetado (veja, por exemplo, [Nocedal e Wright \(1999\)](#)).

Para o problema de programação quadrática (1.1), o método do Gradiente Projetado gera uma sequência $\{y_j\}$, sendo

$$y_{j+1} = P_{\Omega_{\square}}(y_j - \alpha_j \nabla q(y_j)),$$

em que $P_{\Omega_{\square}}$ é a projeção (1.6) e $\alpha_j > 0$ é escolhido por uma busca projetada tal que $q(y_{j+1}) < q(y_j)$. Esta busca projetada será apresentada em detalhes na Seção 1.1.1.

O método do Gradiente Projetado é usado para selecionar uma nova face da seguinte maneira: dado x_k , geramos iterandos pelo método do Gradiente Projetado com $y_0 = x_k$. Se, para alguma constante fixa η_2 , quaisquer dos dois critérios

$$\mathcal{A}(y_j) = \mathcal{A}(y_{j-1}) \quad \text{ou} \quad (1.15)$$

$$q(y_{j-1}) - q(y_j) \leq \eta_2 \max \{q(y_{l-1}) - q(y_l) : 1 \leq l < j\} \quad (1.16)$$

é satisfeito, então exploramos a face do conjunto factível que contém y_{j_k} , sendo j_k o primeiro índice que satisfaz (1.15) ou (1.16).

O Algoritmo GPCG (nomenclatura tomada de Moré e Toraldo (1991), baseada na sigla para *Gradient Projection Conjugate Gradient*) descreve por completo o método para encontrar a solução para o problema (1.1).

Algoritmo 1.1 GPCG

Dados um ponto x_0 e os escalares $\eta_1 > 0, \eta_2 > 0, \epsilon > 0, \tau > 0$.

Passo 1: Faça $k \leftarrow 0$.

Passo 2: Faça $j \leftarrow 0, y_j \leftarrow x_k$.

Passo 3: Gere iterações do Gradiente Projetado $y_1, y_2, \dots, y_{j_k}$, sendo j_k o primeiro índice que satisfaz (1.15) ou (1.16). Faça $x_k \leftarrow y_{j_k}$.
Se $\left\| \nabla_{\Omega_{\square}} q(x_k) \right\|_2 \leq \tau \left\| \nabla q(x_0) \right\|_2$, pare e devolva x_k como solução.

Passo 4: Faça $j \leftarrow 0, w_0 \leftarrow 0$.

Passo 5: Gere iterações dos Gradientes Conjugados $w_1, w_2, \dots, w_{j_k}$, sendo j_k o primeiro índice que satisfaz (1.12). Faça $d_k \leftarrow Z_k w_{j_k}$.

Passo 6: Calcule α_k usando busca projetada para definir x_{k+1} por (1.14).
Se $\left\| \nabla_{\Omega_{\square}} q(x_{k+1}) \right\|_2 \leq \tau \left\| \nabla q(x_0) \right\|_2$, pare e devolva x_k como solução.

Passo 7: Se $\mathcal{B}(x_{k+1}) = \mathcal{A}(x_{k+1})$ então
Se $\|r_k\|_2 \leq \epsilon$ pare com o iterando atual como solução.
Senão, volte para o Passo 5.

Passo 8: Faça $k \leftarrow k + 1$, e volte ao Passo 2.

1.1.1 Busca projetada

A busca projetada no algoritmo GPCG requer um $\alpha_k > 0$ que produza um decréscimo suficiente na função $\phi_k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$\phi_k(\alpha) = q(P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha d_k)),$$

Figura 1.1: Pontos de interrupção de ϕ_k

em que $P_{\Omega_{\square}}$ é a projeção (1.6) e d_k é a direção de busca.

A condição de decréscimo suficiente requer que $\alpha_k > 0$ satisfaça

$$\phi_k(\alpha_k) \leq \phi_k(0) + \mu \nabla q(x_k)^T (P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha_k d_k) - x_k), \quad (1.17)$$

para $\mu \in (0, \frac{1}{2})$. A condição de decréscimo suficiente pode ser satisfeita para as duas escolhas de d_k no algoritmo GPCG. Note que, no método Gradiente Projetado, $d_k = -\nabla q(x_k)$, enquanto que, para o método dos Gradientes Conjugados, $d_k = Z_k w_{j_k}$, sendo w_{j_k} produzido pelo método dos Gradientes Conjugados para o subproblema (1.10).

Observe que ϕ_k é contínua e quadrática por partes, devido a $P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha d_k)$ ser uma função linear de α em qualquer intervalo em que o conjunto ativo de $P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha d_k)$ é inalterado. Como q é estritamente convexa, ϕ_k é estritamente convexa por partes. Veja um exemplo na Figura 1.1.

Definimos os pontos de interrupção de ϕ_k , com base em

$$0 = \beta_0 < \beta_1 < \dots < \beta_p < \beta_{p+1} = +\infty,$$

de modo que $\mathcal{A}(P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha d_k))$ é constante para $\alpha \in (\beta_i, \beta_{i+1})$ para $i = 0, \dots, p$. Permitimos valores infinitos para $[l]_i$ ou $[u]_i$ e, assim, podemos ter $p = 0$ na definição dos pontos de interrupção.

Quando $d_k = Z_k w_{j_k}$, a escolha de Z_k garante que $x_k + \alpha d_k$ é factível para α em $[0, \beta_1]$ e, assim, a condição (1.17) pode ser satisfeita, para todo $\alpha_k > 0$ suficientemente pequeno, se $\phi'_k(0) < 0$. Note que, para $d_k = Z_k w_{j_k}$, β_1 coincide com $\mu_k = \max \{ \alpha \geq 0 : l \leq x_k + \alpha d_k \leq u \}$ (definido em (1.13)). Por isso, se $r_k = Z_k^T \nabla q(x_k)$ é o gradiente reduzido (definido em (1.11)), então

$$\phi'_k(0) = \nabla q(x_k)^T d_k = r_k^T w_{j_k}.$$

Como w_{j_k} é uma direção de descida no método dos Gradientes Conjugados, temos que $\phi'_k(0) < 0$, a menos que $r_k = 0$.

Quando $d_k = -\nabla q(x_k)$, temos uma situação similar. Digamos que r_k é o gradiente projetado descontínuo $\nabla_{\Omega_\square} q(x_k)$. Lembremos que, pela Definição 1.3,

$$\left[\nabla_{\Omega_\square} q(x) \right]_i = \begin{cases} [\nabla q(x)]_i, & \text{se } [x]_i \in ([l]_i, [u]_i), \\ \min \{ [\nabla q(x)]_i, 0 \}, & \text{se } [x]_i = [l]_i, \\ \max \{ [\nabla q(x)]_i, 0 \}, & \text{se } [x]_i = [u]_i. \end{cases}$$

Então, $P_{\Omega_\square}(x_k - \alpha \nabla q(x_k)) = x_k - \alpha r_k$, para $\alpha \in [0, \beta_1]$, e

$$\phi_k(\alpha) = q(P_{\Omega_\square}(x_k - \alpha \nabla q(x_k))) = q(x_k - \alpha r_k), \quad \alpha \in [0, \beta_1]. \quad (1.18)$$

Como $\nabla q(x_k)^T r_k = \|r_k\|_2^2 > 0$, a menos que x_k seja a solução, a condição (1.17) pode ser satisfeita para todo α suficientemente pequeno. Note que, se x_k está na borda de $\Omega_\square$, $x_k + \alpha d_k$ pode ser inviável para qualquer $\alpha > 0$. Nesse caso, $\mathcal{A}(P_{\Omega_\square}(x_k + \alpha d_k)) = \mathcal{B}(x_k)$, para α em $(0, \beta_1)$.

O algoritmo da busca projetada gera uma sequência decrescente $\{\alpha_k^{(l)}\}$ de valores positivos tais que

$$\alpha_k^{(l+1)} \in [\gamma_1 \alpha_k^{(l)}, \gamma_2 \alpha_k^{(l)}], \quad 0 < \gamma_1 < \gamma_2 < 1.$$

Escolhemos um $\alpha_k^{(0)} > 0$ e estabelecemos α_k como o primeiro valor que satisfaça a condição de decréscimo suficiente. Uma das vantagens deste processo é que α_k é encontrado em um número finito de passos.

O valor inicial testado $\alpha_k^{(0)}$ é o minimizador da função quadrática que re-

presenta ϕ_k em $[0, \beta_1]$. Assim, afirmamos a seguinte propriedade.

Propriedade 1.2. *Seja k a iteração atual e $\phi_k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida por $\phi_k(\alpha) = q(P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha d_k))$. Então*

$$\alpha_k^{(0)} = -\frac{\phi_k'(0)}{\phi_k''(0)}.$$

Se $d_k = -\nabla q(x_k)$, então

$$\alpha_k^{(0)} = \frac{\|r_k\|_2^2}{r_k^T H r_k}$$

e, no caso $d_k = Z_k w_{j_k}$, temos que

$$\alpha_k^{(0)} = -\frac{r_k^T w_{j_k}}{(w_{j_k})^T H_k w_{j_k}} = 1.$$

Para a prova da Propriedade 1.2, veja o Apêndice A. Se $\alpha_k^{(0)} < \beta_1$, para cada escolha de d_k , então $\alpha_k^{(0)}$ satisfaz a condição de decréscimo suficiente com $\mu \leq \frac{1}{2}$, e, assim, $\alpha_k^{(0)}$ torna-se α_k .

Dado um valor inicial $\alpha_k^{(0)}$, calculamos α_k^* , minimizador da quadrática $\phi_q(\alpha_k) = \left(\frac{\phi_k(\alpha_k^{(0)}) - \phi_k(0) - \alpha_k^{(0)} \phi_k'(0)}{(\alpha_k^{(0)})^2} \right) \alpha_k^2 + \phi_k'(0) \alpha_k + \phi_k(0)$, que interpola $\phi_k(0)$, $\phi_k'(0)$, $\phi_k(\alpha_k)$ e usamos $\bar{\alpha}_k$ como uma nova estimativa, sendo

$$\bar{\alpha}_k = \begin{cases} \frac{1}{100} \alpha_k, & \text{se } \alpha_k^* < \frac{1}{100} \alpha_k, \\ \alpha_k^*, & \text{se } \frac{1}{100} \alpha_k \leq \alpha_k^* \leq \frac{1}{2} \alpha_k, \\ \frac{1}{2} \alpha_k, & \text{se } \alpha_k^* > \frac{1}{2} \alpha_k. \end{cases} \quad (1.19)$$

Veja, a seguir, o algoritmo da busca projetada.

Algoritmo 1.2 *Busca projetada*

Dados $\alpha_k^{(0)}$ e $\mu \in (0, \frac{1}{2})$.

Passo 1: Faça $\alpha_k \leftarrow \alpha_k^{(0)}$.

Passo 2: Se $\phi_k(\alpha_k) \leq \phi(0) + \mu\alpha_k\phi'_k(0)$ então pare e devolva α_k como solução.

$$\text{Senão faça } \alpha_k^* = -\frac{\phi'_k(0)\alpha_k^2}{2(\phi_k(\alpha_k) - \phi(0) - \alpha_k\phi'_k(0))}.$$

Passo 3: Se $\alpha_k^* < \frac{1}{100}\alpha_k$, então faça $\alpha_k^* \leftarrow \frac{1}{100}\alpha_k$.

Passo 4: Se $\alpha_k^* > \frac{1}{2}\alpha_k$, então faça $\alpha_k^* \leftarrow \frac{1}{2}\alpha_k$.

Passo 5: Faça $\alpha_k \leftarrow \alpha_k^*$ e volte ao Passo 2.

1.1.2 Resultados de convergência

Os principais resultados teóricos para o algoritmo GPCG são que ele converge para a solução quando aplicado a problemas estritamente convexos, e que, se o problema é não degenerado, no sentido que $[\nabla q(x^*)]_i \neq 0, i \in \mathcal{A}(x^*)$, GPCG termina em um número finito de iterações.

Os seguintes teoremas são enunciados e provados em [Calamai e Moré \(1987\)](#) e servem como uma ferramenta para as provas dos teoremas de convergência.

Teorema 1.3. *Seja $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável em $\Omega_\square$ e seja $\{x_k\}$ a sequência gerada pelo método do Gradiente Projetado.*

Suponha $\mathcal{K}_{GP} = \{k : x_k \text{ é gerado pelo método do Gradiente Projetado}\}$ infinito. Se alguma subsequência $\{x_k : k \in K\}$, com $K \subset \mathcal{K}_{GP}$, é limitada, então

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left\| \nabla_{\Omega_\square} q(x_{k+1}) \right\|_2 = 0, \quad k \in K.$$

Ainda mais, qualquer ponto limite de $\{x_k : k \in \mathcal{K}_{GP}\}$ é um ponto estacionário do problema (1.1).

Prova: Ver Teorema 5.2 de [Calamai e Moré \(1987\)](#).

Teorema 1.4. *Seja $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável em $\Omega_\square$ e seja $\{x_k\}$ uma sequência arbitrária que converge ao ponto x^* . Se $\left\{ \left\| \nabla_{\Omega_\square} q(x_k) \right\|_2 \right\}$ converge a zero e x^* é não degenerado, então $\mathcal{A}(x_k) = \mathcal{A}(x^*)$, para algum k suficientemente grande.*

Prova: Ver Teorema 4.1 de Calamai e Moré (1987).

Vejamos agora os teoremas de convergência do método GPCG, que aparecem em Moré e Toraldo (1991) e repetimos aqui por completude.

Teorema 1.5. (Teorema 5.1 de Moré e Toraldo (1991)) *Seja $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função quadrática estritamente convexa. Se $\{x_k\}$ é a sequência gerada pelo algoritmo GPCG para o problema (1.1), então $\{x_k\}$ termina em x^* solução do problema (1.1) em um número finito de passos ou $\{x_k\}$ converge a x^* .*

Prova: Note que, se GPCG termina em um número finito de passos, então termina em ponto estacionário do problema (1.1). Como q é estritamente convexa, o problema (1.1) tem um único ponto estacionário, que é a solução x^* .

Considere agora o caso em que GPCG gere uma sequência infinita $\{x_k\}$. Como q é uma função quadrática estritamente convexa e $\{q(x_k)\}$ é uma sequência decrescente, podemos afirmar que a sequência $\{x_k\}$ é limitada. Em particular, $\mathcal{K}_{GP}$ é infinito e $\{x_k : k \in \mathcal{K}_{GP}\}$ é limitada. Assim, pelo Teorema 1.3, afirmamos que existe uma subsequência de $\{x_k\}$ que converge a x^* , e, assim, $\{q(x_k)\}$ converge a $q(x^*)$.

Agora verifiquemos que $\{x_k\}$ converge a x^* como desejamos:

$$\begin{aligned} q(x_k) - q(x^*) &= \frac{1}{2}x_k^T H x_k - x_k^T c - \frac{1}{2}x^{*T} H x^* + x^{*T} c - x_k^T H x^* + x_k^T H x^* \\ &= (H x^* - c)^T x_k - (H x^* - c)^T x^* + \frac{1}{2}(x_k - x^*)^T H (x_k - x^*) \\ &= \nabla q(x^*)^T (x_k - x^*) + \frac{1}{2}(x_k - x^*)^T H (x_k - x^*) \\ &\geq \frac{1}{2}(x_k - x^*)^T H (x_k - x^*) \\ &\geq \frac{\gamma}{2}(x_k - x^*)^T (x_k - x^*), \end{aligned}$$

sendo γ o menor autovalor da matriz Hessiana de q .

Assim, $q(x_k) - q(x^*) \geq \frac{\gamma}{2} \|x_k - x^*\|_2^2$ e, como $\{q(x_k)\}$ converge a $q(x^*)$, $\{x_k\}$ converge a x^* .

□

O Teorema 1.5 não usa fortemente as propriedades do método dos Gradientes Conjugados. A convergência do GPCG depende da propriedade de convergência do método Gradiente Projetado, e o resultado que o método dos Gradientes Conjugados produz iterações tais que $q(x_{k+1}) \leq q(x_k)$.

Agora mostramos que a terminação finita do GPCG depende da propriedade de terminação finita do método dos Gradientes Conjugados nos subproblemas e na propriedade de identificação do Gradiente Projetado.

Teorema 1.6. *(Teorema 5.2 de Moré e Toraldo (1991)) Seja $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função quadrática estritamente convexa. Se a solução x^* do problema (1.1) é não degenerada, no sentido que*

$$[\nabla q(x^*)]_i \neq 0, \quad i \in \mathcal{A}(x^*),$$

então o algoritmo GPCG termina na solução x^ em um número finito de passos.*

Prova: Afirmamos que, se o método dos Gradientes Conjugados no algoritmo GPCG gera um ponto x_k com $\mathcal{A}(x_k) = \mathcal{A}(x^*)$ e suficientemente perto de x^* , então o método dos Gradientes Conjugados produz a solução x^* em um número finito de passos.

Estabelecemos esta afirmação, notando que, como o método dos Gradientes Conjugados não viola nenhuma restrição ativa, então

$$\mathcal{A}(x^*) = \mathcal{A}(x_k) \subset \mathcal{A}(x_{k+1}). \quad (1.20)$$

Como $\mathcal{A}(x) \subset \mathcal{A}(x^*)$, para qualquer x suficientemente perto de x^* , mostramos que $\mathcal{A}(x_{k+1}) = \mathcal{A}(x^*)$.

Agora considere qualquer x suficientemente próximo de x^* . Pela continuidade de ∇q , a suposição de que x^* é não degenerado e que $\mathcal{A}(x_k) = \mathcal{A}(x^*)$, temos que $\mathcal{B}(x) = \mathcal{A}(x^*) = \mathcal{A}(x)$.

Em particular $\mathcal{B}(x_{k+1}) = \mathcal{A}(x_{k+1})$, já que $\mathcal{A}(x_{k+1}) = \mathcal{A}(x^*)$. Isto implica que o método dos Gradientes Conjugados continua explorando a face atual e

produz a solução x^* em um número finito de passos.

Resta mostrar que o ponto x_k produzido pelo GPCG é gerado em um número finito de passos.

Sendo $\mathcal{K}_{GP}$ o conjunto de índices da sequência gerada, como nos Teoremas 1.3 e 1.4, então $\mathcal{A}(y_{j_k}) = \mathcal{A}(x^*)$, em que x_k é suficientemente próximo de x^* e $k \in \mathcal{K}_{GP}$.

Assim, o método dos Gradientes Conjugados no GPCG em algum momento gera um ponto x_k com $\mathcal{A}(x_k) = \mathcal{A}(x^*)$ e suficientemente próximo de x^* .

□

1.1.3 Resultados numéricos

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos obtidos ao usar o método Moré-Toraldo para resolver os três problemas apresentados em [Moré e Toraldo \(1991\)](#): Obstacle, Journal Bearing e Torsion.

Implementamos o método Moré-Toraldo em Fortran 77 e compilamos em gfortran, usando o sistema operacional Ubuntu 11.10. Daqui em diante, chamaremos nossa implementação de GPCG. Os experimentos numéricos foram realizados em um PC com Processador 2ª Geração Intel Core i3 2310M, 2.1 GHz, 4GB de memória.

Os resultados foram obtidos com os seguintes parâmetros:

$$\eta_1 = 0.1, \quad \eta_2 = 0.25, \quad \mu = 0.1, \quad \tau = 10^{-5}, \quad \epsilon = 10^{-8}.$$

Lembrando que η_1 aparece no critério de parada do método dos Gradientes Conjugados (1.12), η_2 no critério de parada do método do Gradiente Projetado (1.16), μ na condição de decréscimo suficiente da busca projetada (1.17), τ no critério de parada (1.7) e ϵ no Passo 7 do Algoritmo GPCG.

Os três problemas para os experimentos numéricos foram obtidos da coleção CUTer [Bongartz et al. \(1995\)](#). Como suas Hessianas não são definidas

positivas, optamos por resolver o problema

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} \quad \frac{1}{2}x^T(H + \rho I)x + b^T x \\ & \text{sujeita a} \quad x \in \Omega_{\square}, \end{aligned} \tag{1.21}$$

com ρ tal que $(H + \rho I)$ é definida positiva. Nos três problemas, $\rho = 10^{-8}$.

Os resultados numéricos para o problema *Journal Bearing* foram obtidos considerando o problema equivalente

$$\min \{ \bar{q}(v) : v \geq 0 \}, \quad \bar{q}(v) = q(D^{-1}v),$$

sendo D uma matriz diagonal, tal que a matriz Hessiana de $\bar{q}$ tenha entradas unitárias na diagonal, como feito em [Moré e Toraldo \(1991\)](#).

Os resultados obtidos pela aplicação do GPCG para a resolução dos três problemas da coleção CUTEr, bem como os dados fornecidos no artigo [Moré e Toraldo \(1991\)](#), podem ser encontrados nas Tabelas 1.1-1.7. Nestas tabelas, GPCG denota a implementação da aluna, Moré-Toraldo denota os resultados apresentados em [Moré e Toraldo \(1991\)](#), n é o número de variáveis do problema, n_{free} é o número de variáveis livres no ponto final x^* obtido pelo método, k é o número de iterações, n_{fg} é o número de avaliações da função-gradiente e n_h é o número de produtos Hessiana-vetor.

Nas Tabelas 1.1-1.7, x_0 é igual a l , se o ponto inicial é o limitante inferior; igual a u , se o ponto inicial é o limitante superior; igual a m^* , se o ponto inicial é o vetor $\frac{1}{2}(l + u)$; igual a e , se o ponto inicial é o vetor com todas suas componentes iguais à unidade; igual a 0, se o ponto inicial é o vetor com todas suas componentes iguais a zero.

Tanto nos resultados apresentados em [Moré e Toraldo \(1991\)](#), como nos resultados da nossa implementação, para todos os problemas o método parou atendendo ao critério de convergência. Ao comparar esses resultados, pode-se ver que a principal diferença está no número de variáveis livres. Isso pode ser devido à implementação dos problemas ou ao tratamento de erros numéricos. Note que existe diferença entre os problemas tomados da coleção CUTEr e os problemas resolvidos em [Moré e Toraldo \(1991\)](#), principalmente no número de

Tabela 1.1: *Obstacle problem A*

		GPCG				Moré-Toraldo			
n	x_0	$nfree$	k	n_{fg}/k	n_h/k	$nfree$	k	n_{fg}/k	n_h/k
5625	l	2902	9	4.0	12.2	2122	9	4.1	13.2
5625	e	2895	9	4.0	13.4	2122	11	5.6	13.3
10000	l	5130	11	4.1	13.4	3843	10	4.5	15.7
10000	e	5127	10	6.3	19.6	3843	12	4.1	17.6
15625	l	7948	12	4.1	15.2	6108	11	4.3	17.1
15625	e	7939	14	4.4	17.9	6108	14	3.8	17.0

Tabela 1.2: *Obstacle problem B*

		GPCG				Moré-Toraldo			
n	x_0	$nfree$	k	n_{fg}/k	n_h/k	$nfree$	k	n_{fg}/k	n_h/k
5625	l	3843	8	4.0	13.6	4171	9	4.2	14.5
5625	u	3842	8	4.3	14.0	4171	8	4.2	15.0
5625	m^*	3843	6	4.2	12.8	4171	5	4.8	18.0
10000	l	7056	9	4.1	17.8	7588	8	4.3	21.7
10000	u	7057	10	4.3	14.5	7588	10	4.5	16.8
10000	m^*	7056	8	4.9	14.5	7588	7	4.2	18.2
15625	l	11318	10	5.0	19.9	11990	12	3.9	19.5
15625	u	11317	10	4.0	16.9	11990	11	4.4	19.6
15625	m^*	11317	7	4.7	20.4	11990	8	4.2	22.1

variáveis dos problemas apresentados nas tabelas 1.3, 1.4 e 1.5. Mas, em geral, os resultados obtidos por GPCG estão próximos dos reportados em [Moré e Toraldo \(1991\)](#), o que nos leva a concluir que a implementação de GPCG está correta.

Tabela 1.3: *Elastic-plastic torsion problem, 1 e 2*

x_0	GPCG					Moré-Toraldo				
	n	$nfree$	k	n_{fg}/k	n_h/k	n	$nfree$	k	n_{fg}/k	n_h/k
0	5476	3560	8	9.6	24.8	5625	3953	9	4.4	27.1
u	5476	3560	11	4.6	15.6	5625	3953	11	4.5	20.1
0	10000	6620	10	5.0	28.1	10000	7016	11	4.9	27.9
u	10000	6620	13	4.8	19.8	10000	7016	14	4.5	23.3
0	14884	9984	11	7.0	30.2	15625	10961	12	5.0	33.5
u	14884	9984	14	4.8	22.2	15625	10961	14	5.0	27.5

Tabela 1.4: *Elastic-plastic torsion problem, 3 e 4.*

	GPCG					Moré-Toraldo				
x_0	n	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k	n	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k
0	5476	1800	7	6.6	15.9	5625	2073	8	4.2	17.5
u	5476	1800	6	6.3	13.7	5625	2073	7	4.4	15.8
0	10000	3476	8	7.1	17.6	10000	3632	8	4.5	21.8
u	10000	3476	8	5.5	15.8	10000	3632	7	4.7	19.8
0	14884	5208	9	5.9	20.7	15625	5789	10	4.5	21.7
u	14884	5208	9	5.4	15.6	15625	5789	9	4.4	18.5

Tabela 1.5: *Elastic-plastic torsion problem, 5 e 6.*

	GPCG					Moré-Toraldo				
x_0	n	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k	n	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k
0	5476	952	5	4.2	10.8	5625	1025	6	3.8	11.1
u	5476	952	4	6.5	8.8	5625	1025	5	4.0	10.0
0	10000	1708	6	5.3	13.7	10000	1786	6	4.0	13.6
u	10000	1708	5	5.2	10.2	10000	1786	5	4.2	11.8
0	14884	2568	7	5.3	15.0	15625	9248	6	4.5	18.8
u	14884	2568	6	5.3	11.8	15625	9248	5	4.8	14.6

Tabela 1.6: *Journal bearing problem A*

	GPCG					Moré-Toraldo			
x_0	n	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k
0	5625	3528	9	5.6	20.7	3808	9	4.3	28.2
0	10000	6359	10	7.1	25.1	6768	10	4.6	33.3
0	15625	9968	10	8.5	30.3	10564	10	5.2	41.5

Tabela 1.7: *Journal bearing problem B*

	GPCG					Moré-Toraldo			
x_0	n	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k	n_{free}	k	n_{fg}/k	n_h/k
0	5625	2989	4	11.5	23.0	3359	5	5.0	31.6
0	10000	5383	4	16.3	29.5	6040	7	4.7	31.0
0	15625	8477	5	13.2	30.6	9426	7	5.1	40.2

1.2 “Método” NQC

Durante o pós-doutorado da orientadora, Profa. Dra. Marina Andretta, em parceria com os professores José Mario Martínez (IMECC-Unicamp) e Mikhail Solodov (IMPA), foi desenvolvido e implementado o “método” NQC, usado para solucionar problemas de programação quadrática convexa com restrições de caixa. NQC é sigla para Newton para Quadráticas convexas em Caixas. Escrevemos “método” pois ele não possui convergência garantida (de fato, há problemas para o qual este procedimento não converge), mas ele se mostra muito eficiente na prática.

Lembrando que o problema a ser resolvido é o seguinte:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && q(x) \\ &\text{sujeita a} && x \in \Omega_{\square}, \end{aligned}$$

onde $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função quadrática e

$$\Omega_{\square} = \{x \in \mathbb{R}^n : l \leq x \leq u\},$$

é a região factível, sendo $l \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^n$, $u \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^n$ e $[l]_i < [u]_i$.

A ideia original surgiu de aplicar o método de Newton não diferenciável (ver, por exemplo, [Gaujoux \(2005\)](#)) ao sistema de equações não diferenciáveis (1.22), obtido ao reformular as condições KKT (1.4) usando a fórmula introduzida por [Fischer \(1992\)](#).

$$\begin{cases} \nabla q(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}_l} [\lambda^*]_i e_i + \sum_{i \in \mathcal{I}_u} [\mu^*]_i e_i = 0, \\ [x - l + \lambda]_i - \sqrt{[x - l]_i^2 + [\lambda]_i^2} = 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_l, \\ [u - x + \mu]_i - \sqrt{[u - x]_i^2 + [\mu]_i^2} = 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_u. \end{cases} \quad (1.22)$$

O “método” NQC usa o método do Gradiente Espectral Projetado, apresentado em [Birgin et al. \(2000, 2001\)](#), para definir em que face trabalhar e o método de Newton (ver, por exemplo, [Nocedal e Wright \(1999\)](#)), para calcular o minimizador da quadrática reduzida a esta face.

Algoritmo 1.3 NQC

Dados um ponto inicial x_0 e $\epsilon > 0$. Seja $s_k = x_k - x_{k-1}$ e $y_k = \nabla q(x_k) - \nabla q(x_{k-1})$, $s_0 = x_0 + ts * gp$, $y_0 = \nabla q(s_0)$, $ts = 10^{-8} \max\{\frac{\max_i\{[x_0]_i\}}{\max_i\{[gp]_i\}}, 1\}$ e $[gp]_i = \min\{[u]_i, \max\{[l]_i, [x_0 - \nabla q(x_0)]_i\}\} - [x_0]_i$

Passo 1: Faça $k \leftarrow 0$.

Passo 2: Se $\|P_{\Omega_{\square}}(x_k - \nabla q(x_k)) - x_k\| < \epsilon$ então pare com x_k como solução.

Passo 3: Calcule o tamanho de passo σ

$$\sigma = \begin{cases} 1, & \text{se } s_k^T y_k \leq 0, \\ \min \left\{ 10^{10}, \max \left\{ 10^{-10}, \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k} \right\} \right\}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Passo 4: Projete $x_k - \sigma \nabla q(x_k)$ no conjunto viável $\Omega_{\square}$, obtendo o ponto $\bar{x}_k$. Ou seja, faça $\bar{x}_k = P_{\Omega_{\square}}(x_k - \sigma \nabla q(x_k))$.

Passo 5: Defina $\mathcal{A}_l$ o conjunto de índices para os quais $[\bar{x}_k]_i = [l]_i$ e $\mathcal{A}_u$ o conjunto de índices para os quais $[\bar{x}_k]_i = [u]_i$.

Passo 6: Se os conjuntos $\mathcal{A}_l$ e $\mathcal{A}_u$ já foram visitados pelo algoritmo, pare declarando a existência de um ciclo.

Passo 7: Considere o problema

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } q(x) \\ & \text{sujeita a } [x]_i = [l]_i, \quad i \in \mathcal{A}_l, \\ & \quad \quad [x]_i = [u]_i, \quad i \in \mathcal{A}_u, \end{aligned}$$

e o resolva através do sistema de Newton.

Passo 8: Faça $k \leftarrow k + 1$ e volte ao Passo 1.

Note que não é pedido nem decréscimo da função, nem viabilidade dos iterandos. Isso permite que o método seja eficiente, mas, em alguns casos, pode falhar por entrar em um ciclo.

1.3 Resultados numéricos

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos obtidos ao usar o método Moré-Toraldo e o “método” NQC para resolver problemas de programação quadrática com restrições de caixa ou irrestritos.

Implementamos o método Moré-Toraldo em Fortran 77. O “método” NQC foi implementado pela orientadora, Profa. Dra. Marina Andretta, durante seu pós-doutorado, também em Fortran 77. Daqui em diante, chamaremos estas duas implementações de GPCG e NQC, respectivamente. Os códigos foram compilados em gfortran, usando o sistema operacional Ubuntu 11.10. Os experimentos numéricos foram realizados em um PC com Processador 2ª Geração Intel Core i3 2310M, 2.1 GHz, 4GB de memória.

Os resultados para NQC foram obtidos utilizando $\epsilon = 10^{-5}$ no critério de convergência (Passo 2 do Algoritmo 1.3).

Os resultados para GPCG, foram obtidos com os seguintes parâmetros:

$$\eta_1 = 0.1, \quad \eta_2 = 0.25, \quad \mu = 0.1, \quad \epsilon = 10^{-8}.$$

Lembrando que η_1 aparece no critério de parada do método dos Gradientes Conjugados (1.12), η_2 no critério de parada do método do Gradiente Projetado (1.16), μ na condição de decréscimo suficiente da busca projetada (1.17), e ϵ no Passo 7 do algoritmo GPCG.

Nestes resultados, para fazer uma comparação mais justa do método Moré-Toraldo com o “método” NQC, na implementação GPCG usamos o critério de parada

$$\left\| \nabla_{\Omega_{\square}} q(x) \right\|_2 \leq \tau, \tag{1.23}$$

com $\tau = 10^{-5}$.

Usamos GPCG e NQC para resolver todos os problemas de programação quadrática com restrições de caixa e irrestritos da coleção CUTer (Bongartz et al. (1995)), totalizando 51 problemas. Alguns destes problemas tem mais de uma dimensão possível e, nestes casos, resolvemos o problema usando as três dimensões maiores, totalizando 116 problemas. Os pontos iniciais usados são os sugeridos para cada problema da coleção CUTer.

As Hessianas H dos problemas tomados da coleção CUTer podem não ser definidas positivas. Nos experimentos de ambos os métodos, em vez de resolver

o problema original, resolvemos o problema

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} \quad \frac{1}{2}x^T(H + \rho I)x + b^T x \\ &\text{sujeita a} \quad x \in \Omega_{\square}, \end{aligned}$$

com ρ tal que $(H + \rho I)$ é definida positiva. Em NQC, para resolver os sistemas lineares Newtonianos, é usada a rotina MA57 (Duff (2004)) da biblioteca HSL.

Os problemas NCVXBQP1, NCVXBQP2 e NCVXBQP3 da coleção CUTer não foram resolvidos, já que, para deixar suas Hessianas definidas positivas e ter, assim, problemas convexos, precisaríamos somar na diagonal um número muito grande, e teríamos problemas totalmente diferentes dos originais. Os problemas HARKERP2 de dimensões 5000 e 10000 também não foram resolvidos, já que as suas matrizes Hessianas são densas. Os resultados da aplicação de GPCG e NQC ao problema BQPGAUSS não foram levados em consideração, já que, ao aplicar GPCG, este parou por atingir o número máximo de iterações permitidas (5000). Ao aplicar NQC, este parou por encontrar um ciclo. Ao aplicar GPCG nos problemas ODNAMUR e PALMER1D, este parou sem satisfazer o critério de convergência. Para o problema ODNAMUR, parou por atingir o tempo máximo de execução permitido (1 hora) e para o problema PALMER1D, parou por progresso insuficiente. Ao aplicar NQC nestes dois problemas, o critério de convergência foi satisfeito. Nos 108 problemas restantes o critério de convergência foi satisfeito na aplicação dos algoritmos GPCG e NQC. Os três problemas apresentados nas Tabelas 1.1-1.7 são repetidos por completude.

Os resultados obtidos pela aplicação de GPCG e NQC para a resolução dos problemas da coleção CUTer podem ser encontrados nas Tabelas 1.8-1.11 e 1.12-1.15, respectivamente. Nestas tabelas, Nome é o nome do problema; n é o número de variáveis do problema; ρ é o número somado na diagonal da Hessiana do problema (1.21); Tempo é o tempo de execução em segundos; k é o número de iterações; $f(x^*)$ é o valor da função no ponto final x^* obtido pelos métodos; n_{fg} é o número de avaliações da função-gradiente; n_h o número de produtos Hessiana-vetor; n_f é o número de avaliações da função; n_g é número de avaliações do gradiente; SN é o número de vezes que é resolvido um sistema de Newton; GC e GP são o número de iterações do Gradiente Conjugado e do Gradiente Projetado, respectivamente; gpc e gpd são a norma do gradiente

projetado contínuo no ponto x^* obtido por NQC e a norma do gradiente projetado descontínuo no ponto x^* obtido por GPCG, respectivamente; e ciclos é o tamanho do ciclo (zero se nenhum ciclo é encontrado).

Nas Tabelas 1.8-1.11, inf é igual a zero, se o critério de parada (1.23) é satisfeito; igual a 1, se o número máximo de iterações é atingido (definido como 5000); igual a 2 se progresso insuficiente; igual a -1 se o tempo máximo de execução é atingindo (definido como 3600 segundos). Nas Tabelas 1.12-1.15, inf é igual a zero, se o gradiente projetado contínuo é menor ou igual a ϵ ; igual a 4 se um ciclo é encontrado.

A fim de comparar os resultados obtidos ao aplicar GPCG e NQC, dizemos que dois valores de função f_1 e f_2 são iguais se

$$|f_1 - f_2| \leq \max\{10^{-10}, 10^{-6} \min\{|f_1|, |f_2|\}\}.$$

Em 10 problemas o valor da função ao aplicar o NQC foi menor. GPCG produziu melhores soluções em 5 problemas. Nos 95 problemas restantes, ao aplicar ambos os métodos, os valores das funções foram iguais.

Estamos interessados em comparar, basicamente, o tempo gasto por cada método e a qualidade da solução encontrada por cada método. Para visualizar melhor esta comparação, construímos os gráficos do perfil de desempenho, que podem ser vistos nas Figuras 1.2-1.3. Nestes gráficos, usando o tempo como medida de desempenho, se um ponto da curva correspondente a um dos métodos vale I no eixo das abscissas e J no eixo das ordenadas, significa que este método resolve $(J \times 100)\%$ dos problemas em um tempo menor ou igual a I vezes o tempo mais rápido. Os pontos mais significativos do gráfico são o mais à esquerda e o mais à direita. À esquerda medimos a *eficiência* dos métodos (verificamos a porcentagem de problemas para os quais cada método é o mais rápido) e à direita medimos a *robustez* (verificamos a porcentagem de problemas que cada método foi capaz de resolver).

Para a construção dos gráficos das Figuras 1.2 e 1.3, comparamos o tempo de execução de cada método. Para os gráficos da Figura 1.2, quando um dos dois métodos encontra valor de função maior para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução. Para

os gráficos da Figura 1.3, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Observando os dados das Tabelas 1.8-1.15 e os gráficos das Figuras 1.2 e 1.3, podemos notar que NQC se mostrou um pouco mais robusto que GPCG (Robustez - GPCG 99,09%, NQC 100%). Por outro lado, GPCG se mostrou um pouco mais eficiente, tanto quando penalizamos os métodos que encontraram pontos com valores de função piores (Eficiência - GPCG 80,00%, NQC 33,63%), como quando usamos na comparação apenas os problemas em que os valores de função são iguais (Eficiência - GPCG 80,73%, NQC 33,02%).

Figura 1.2: Curva de perfil de desempenho comparando GPCG com NQC usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, quando um dos dois métodos encontra valor de função diferente para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução.

Figura 1.3: Curva de perfil de desempenho comparando GPCG com NQC usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Tabela 1.8: Resultados da aplicação de GPCG na resolução dos problemas da coleção CUTer.

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_{fg}	n_h	GP	GC	$f(x^*)$	$\ \nabla_{\Omega q}(x^*)\ $
BIGGSB1	1000	0.0E+00	0	3.60	78	614	2870	503	2367	-1.9850E+00	9.8014E-05
BIGGSB1	5000	0.0E+00	0	100.53	2375	6941	11723	4566	9315	-1.9841E+00	9.9998E-05
BQP1VAR	1	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	0.0000E+00	0.0000E+00
BQPGABIM	50	0.0E+00	0	0.00	1	10	12	3	9	-3.7903E-05	9.2603E-05
BQPGASIM	50	0.0E+00	0	0.00	1	12	14	3	11	-5.5198E-05	3.8665E-05
CHENHARK	1000	0.0E+00	0	6.08	3	916	2746	3	2743	-2.0000E+00	9.8794E-05
CHENHARK	5000	0.0E+00	0	27.48	88	297	5181	110	5143	-2.0000E+00	9.9579E-05
CVXBP1	1000	8.0E-06	0	0.00	1	7	11	2	9	2.2523E+04	0.0000E+00
CVXBP1	10000	4.9E-05	0	0.24	1	8	15	2	13	2.2502E+06	0.0000E+00
DEGDIAG	1001	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	1.6658E+02	0.0000E+00
DEGDIAG	10001	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	1.6666E+03	0.0000E+00
DEGDIAG	100001	0.0E+00	0	0.16	1	2	1	1	0	1.6667E+04	0.0000E+00
DEGRID	1001	0.0E+00	0	0.12	1	44	45	1	44	-9.9950E+02	9.5153E-05
DEGRID	10001	0.0E+00	0	1.36	1	44	45	1	44	-9.9995E+03	9.5215E-05
DEGRID	100001	0.0E+00	0	15.36	3	26	65	3	62	-1.0000E+05	3.6593E-05
DEGRID2	1001	0.0E+00	0	0.00	1	3	2	2	0	-9.9950E+02	0.0000E+00
DEGRID2	10001	0.0E+00	0	0.04	1	3	2	2	0	-9.9995E+03	0.0000E+00
DEGRID2	100001	0.0E+00	0	0.56	1	3	2	2	0	-1.0000E+05	0.0000E+00
DIXON3DQ	1000	0.0E+00	0	3.20	1	998	1002	1	1001	-2.0000E+00	2.6249E-06
DIXON3DQ	10000	0.0E+00	0	190.33	652	6300	6303	652	6303	-1.9992E+00	9.9993E-05
DQDRTIC	1000	0.0E+00	0	0.00	1	6	6	1	5	2.7920E-16	2.1325E-07
DQDRTIC	5000	0.0E+00	0	0.04	1	6	6	1	5	1.8938E-14	1.5231E-06
HARKERP2	1000	0.0E+00	0	2.96	2	15	34	4	30	-5.0000E-01	0.0000E+00
HILBERTA	10	1.0E-08	0	0.00	1	5	5	1	4	6.6018E-07	1.8545E-05
HILBERTB	50	0.0E+00	0	0.00	1	5	5	1	4	1.1819E-14	4.8642E-07
HS3	2	1.0E-08	0	0.00	1	2	1	1	0	9.9303E-06	1.9935E-05
HS3MOD	2	2.0E-08	0	0.00	5	11	22	6	16	1.2326E-32	2.2204E-16

Tabela 1.9: Resultados da aplicação de GPCG na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_{fg}	n_h	GP	GC	$f(x^*)$	$\ \nabla_{\Omega} q(x^*)\ $
JNLBRNG1	5625	1.0E-08	0	2.04	10	61	241	42	199	-1.8055E-01	9.4308E-05
JNLBRNG1	10000	1.0E-08	0	4.12	10	51	337	39	298	-1.8057E-01	4.0205E-05
JNLBRNG1	15625	1.0E-08	0	7.04	10	45	373	32	341	-1.8058E-01	2.7865E-05
JNLBRNG2	5625	1.0E-08	0	3.60	8	122	367	17	350	-4.1466E+00	9.8892E-05
JNLBRNG2	10000	1.0E-08	0	9.20	10	213	447	22	425	-4.1486E+00	9.7916E-05
JNLBRNG2	15625	1.0E-08	0	14.04	15	151	598	29	569	-4.1496E+00	8.4673E-05
JNLBRNGA	5625	1.0E-08	0	1.04	8	33	146	24	122	-2.7527E-01	5.6805E-05
JNLBRNGA	10000	1.0E-08	0	2.60	9	39	204	29	175	-2.7110E-01	3.6974E-05
JNLBRNGA	15625	1.0E-08	0	5.16	10	45	259	34	225	-2.6851E-01	7.8945E-05
JNLBRNGB	5625	1.0E-08	0	0.92	4	40	86	9	77	-6.3296E+00	9.3277E-05
JNLBRNGB	10000	1.0E-08	0	2.20	4	54	107	10	97	-6.3007E+00	8.9865E-05
JNLBRNGB	15625	1.0E-08	0	4.00	5	57	144	14	130	-6.2806E+00	9.3833E-05
MARATOSB	2	0.0E+00	0	0.00	1	3	3	1	2	-5.4612E+06	1.1642E-10
NOBNDTOR	5476	1.0E-08	0	1.68	10	46	192	35	157	-4.4993E-01	7.3264E-05
NOBNDTOR	10000	1.0E-08	0	3.72	12	55	227	43	184	-4.4377E-01	8.7812E-05
NOBNDTOR	14884	1.0E-08	0	7.64	12	65	318	51	267	-4.4054E-01	5.2604E-05
OBSTCLAE	5625	1.0E-08	0	1.28	11	42	144	29	115	1.8630E+00	7.3421E-05
OBSTCLAE	10000	1.0E-08	0	3.52	12	67	210	52	158	1.8865E+00	7.8569E-05
OBSTCLAE	15625	1.0E-08	0	6.36	16	68	276	50	226	1.9010E+00	8.4238E-05
OBSTCLAL	5625	1.0E-08	0	0.88	9	36	110	26	84	1.8630E+00	5.2648E-05
OBSTCLAL	10000	1.0E-08	0	2.16	11	45	147	33	114	1.8865E+00	5.9783E-05
OBSTCLAL	15625	1.0E-08	0	3.88	12	49	182	36	146	1.9010E+00	5.4470E-05
OBSTCLBL	5625	1.0E-08	0	1.24	8	39	116	22	94	7.2309E+00	9.6500E-05
OBSTCLBL	10000	1.0E-08	0	2.60	10	38	161	27	134	7.2722E+00	8.0855E-05
OBSTCLBL	15625	1.0E-08	0	5.08	10	50	199	36	163	7.2958E+00	5.7171E-05
OBSTCLBM	5625	1.0E-08	0	0.80	6	27	79	17	62	7.2309E+00	8.9096E-05
OBSTCLBM	10000	1.0E-08	0	2.00	8	39	116	30	86	7.2722E+00	4.6759E-05
OBSTCLBM	15625	1.0E-08	0	3.08	7	31	127	23	104	7.2958E+00	8.8673E-05

Tabela 1.10: Resultados da aplicação de GPCG na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_{fg}	n_h	GP	GC	$f(x^*)$	$\ \nabla_{\Omega} q(x^*)\ $
OBSTCLBU	5625	1.0E-08	0	0.96	9	35	113	25	88	7.2309E+00	9.7318E-05
OBSTCLBU	10000	1.0E-08	0	2.32	10	43	145	30	115	7.2722E+00	8.3514E-05
OBSTCLBU	15625	1.0E-08	0	4.12	10	40	169	29	140	7.2958E+00	8.2930E-05
ODNAMUR	11130	0.0E+00	-1	3600.00	2392	5831	10641	3427	9429	-1.4536E+06	2.5359E+00
OSLBQP	8	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	6.2500E+00	0.0000E+00
PALMER1D	7	0.0E+00	2	0.00	10	51	93	10	83	-1.0741E+05	1.6209E-04
PALMER2C	8	0.0E+00	0	0.00	6	59	91	6	85	-1.6103E+04	7.1884E-05
PALMER3C	8	0.0E+00	0	0.04	5	46	72	5	67	-1.5824E+04	5.9386E-06
PALMER4C	8	0.0E+00	0	0.00	10	73	129	10	119	-1.7275E+04	6.1437E-05
PENTDI	1000	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	-7.5000E-01	0.0000E+00
PENTDI	5000	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	-7.5000E-01	0.0000E+00
QUDLIN	1200	2.0E+00	0	0.04	1	4	5	2	3	-7.1880E+07	3.7920E-10
QUDLIN	5000	2.0E+00	0	0.04	1	4	5	2	3	-1.2495E+09	1.2083E-09
SIM2BQP	2	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	0.0000E+00	0.0000E+00
SIMBQP	2	0.0E+00	0	0.00	1	3	2	2	0	1.5407E-32	5.5511E-16
TORSION1	5476	1.0E-08	0	1.40	11	46	167	34	133	-4.3027E-01	5.0098E-05
TORSION1	10000	1.0E-08	0	3.52	13	61	223	43	180	-4.2726E-01	8.6624E-05
TORSION1	14884	1.0E-08	0	6.28	14	64	295	50	245	-4.2570E-01	9.3729E-05
TORSION2	5476	1.0E-08	0	1.36	8	39	160	29	131	-4.3027E-01	6.7328E-05
TORSION2	10000	1.0E-08	0	2.92	9	36	206	26	180	-4.2726E-01	9.6911E-05
TORSION2	14884	1.0E-08	0	5.48	10	46	262	35	227	-4.2570E-01	8.0163E-05
TORSION3	5476	1.0E-08	0	0.68	6	34	78	17	61	-1.2170E+00	8.3205E-05
TORSION3	10000	1.0E-08	0	1.52	8	31	113	22	91	-1.2138E+00	8.3354E-05
TORSION3	14884	1.0E-08	0	2.40	9	38	129	26	103	-1.2122E+00	7.9724E-05
TORSION4	5476	1.0E-08	0	0.88	7	37	102	19	83	-1.2170E+00	7.9371E-05
TORSION4	10000	1.0E-08	0	2.08	8	46	130	22	108	-1.2138E+00	8.0743E-05
TORSION4	14884	1.0E-08	0	3.04	9	36	169	26	143	-1.2122E+00	6.8398E-05

Tabela 1.11: Resultados da aplicação de GPCG na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_{fg}	n_h	GP	GC	$f(x^*)$	$\ \nabla_{\Omega g}(x^*)\ $
TORSION5	5476	1.0E-08	0	0.32	4	23	32	11	21	-2.8634E+00	9.5806E-05
TORSION5	10000	1.0E-08	0	0.72	5	22	47	12	35	-2.8604E+00	9.7846E-05
TORSION5	14884	1.0E-08	0	1.20	6	23	62	16	46	-2.8588E+00	6.8552E-05
TORSION6	5476	1.0E-08	0	0.40	5	17	50	11	39	-2.8634E+00	9.9720E-05
TORSION6	10000	1.0E-08	0	1.04	6	25	75	14	61	-2.8604E+00	9.8550E-05
TORSION6	14884	1.0E-08	0	1.76	7	26	94	18	76	-2.8588E+00	6.9679E-05
TORSIONA	5476	1.0E-08	0	1.44	11	46	167	34	133	-4.1830E-01	4.8790E-05
TORSIONA	10000	1.0E-08	0	3.56	13	62	221	44	177	-4.1839E-01	9.1134E-05
TORSIONA	14884	1.0E-08	0	6.52	14	65	295	51	244	-4.1842E-01	8.0869E-05
TORSIONB	5476	1.0E-08	0	1.56	7	36	172	26	146	-4.1830E-01	7.8900E-05
TORSIONB	10000	1.0E-08	0	3.36	10	45	230	34	196	-4.1839E-01	6.3916E-05
TORSIONB	14884	1.0E-08	0	5.56	10	50	254	38	216	-4.1842E-01	2.6500E-05
TORSIONC	5476	1.0E-08	0	0.68	6	34	78	17	61	-1.2042E+00	8.3370E-05
TORSIONC	10000	1.0E-08	0	1.36	8	31	113	22	91	-1.2044E+00	8.6473E-05
TORSIONC	14884	1.0E-08	0	2.76	9	37	129	26	103	-1.2045E+00	8.1483E-05
TORSIOND	5476	1.0E-08	0	0.92	7	37	106	19	87	-1.2042E+00	8.2746E-05
TORSIOND	10000	1.0E-08	0	1.96	8	36	135	23	112	-1.2044E+00	8.2372E-05
TORSIOND	14884	1.0E-08	0	3.28	10	40	168	29	139	-1.2045E+00	8.9110E-05
TORSIONE	5476	1.0E-08	0	0.36	4	23	32	11	21	-2.8502E+00	9.2547E-05
TORSIONE	10000	1.0E-08	0	0.80	5	24	49	12	37	-2.8507E+00	6.7556E-05
TORSIONE	14884	1.0E-08	0	1.20	6	23	62	16	46	-2.8508E+00	7.7513E-05
TORSIONF	5476	1.0E-08	0	0.36	5	18	50	11	39	-2.8502E+00	7.5029E-05
TORSIONF	10000	1.0E-08	0	1.08	6	25	69	14	55	-2.8507E+00	9.9915E-05
TORSIONF	14884	1.0E-08	0	1.92	7	26	96	18	78	-2.8508E+00	7.7520E-05
TRIDIA	1000	0.0E+00	0	1.12	4	287	462	4	458	-1.0000E+00	9.1221E-05
TRIDIA	5000	0.0E+00	0	11.60	4	636	994	4	990	-1.0000E+00	9.8628E-05
TRIDIA	10000	0.0E+00	0	38.32	4	1124	1463	4	1459	-1.0000E+00	9.7981E-05
ZANGWIL2	2	0.0E+00	0	0.00	1	2	1	1	0	-8.4267E+01	4.4409E-16

Tabela 1.12: Resultados da aplicação de NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_f	n_g	SN	$f(x^*)$	gpc	ciclos
BIGGSB1	1000	0.0E+00	0	6.88	500	505	506	500	-1.9850E+00	1.5543E-15	0
BIGGSB1	5000	0.0E+00	0	169.29	2500	2505	2506	2500	-1.9850E+00	2.2204E-16	0
BQP1VAR	1	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	0	0.0000E+00	0.0000E+00	0
BQPGABIM	50	0.0E+00	0	0.00	3	6	7	3	-3.7903E-05	3.8164E-17	0
BQPGASIM	50	0.0E+00	0	0.00	2	4	5	2	-5.5198E-05	1.0408E-17	0
CHENHARK	1000	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	1	-2.0000E+00	2.4425E-15	0
CHENHARK	5000	0.0E+00	0	43.60	774	776	777	774	-2.0000E+00	9.9767E-06	0
CVXBPQ1	1000	8.0E-06	0	0.04	4	8	8	3	2.2523E+04	0.0000E+00	0
CVXBPQ1	10000	4.9E-05	0	0.40	4	8	8	3	2.2502E+06	0.0000E+00	0
DEGDIAG	1001	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	0	1.6658E+02	0.0000E+00	0
DEGDIAG	10001	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	0	1.6666E+03	0.0000E+00	0
DEGDIAG	100001	0.0E+00	0	0.28	1	2	3	0	1.6667E+04	0.0000E+00	0
DEGTRID	1001	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-9.9950E+02	4.4409E-16	0
DEGTRID	10001	0.0E+00	0	0.32	1	4	5	1	-9.9995E+03	4.4409E-15	0
DEGTRID	100001	0.0E+00	0	2.48	1	2	3	1	-1.0000E+05	4.4409E-16	0
DEGTRID2	1001	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-9.9950E+02	0.0000E+00	0
DEGTRID2	10001	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	1	-9.9995E+03	0.0000E+00	0
DEGTRID2	100001	0.0E+00	0	0.48	1	2	3	1	-1.0000E+05	0.0000E+00	0
DIXON3DQ	1000	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	1	-2.0000E+00	8.8818E-16	0
DIXON3DQ	10000	0.0E+00	0	0.28	1	2	3	1	-2.0000E+00	8.8818E-16	0
DQDRTIC	1000	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	0.0000E+00	0.0000E+00	0
DQDRTIC	5000	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	1	0.0000E+00	0.0000E+00	0
HARKERP2	1000	0.0E+00	0	1408.77	1000	2000	1038	1000	-5.0000E-01	0.0000E+00	0
HILBERTA	10	1.0E-08	0	0.00	1	2	3	1	-1.6938E-23	1.2408E-24	0
HILBERTB	50	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-6.3088E-29	7.8886E-30	0
HS3	2	1.0E-08	0	0.00	1	2	3	1	0.0000E+00	0.0000E+00	0
HS3MOD	2	2.0E-08	0	0.00	2	4	4	2	0.0000E+00	0.0000E+00	0

Tabela 1.13: Resultados da aplicação de NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_f	n_g	SN	$f(x^*)$	gpc	ciclos
JNLBRNG1	5625	1.0E-08	0	3.20	14	17	18	14	-1.8055E-01	5.5511E-16	0
JNLBRNG1	10000	1.0E-08	0	9.64	20	23	24	20	-1.8057E-01	5.4123E-16	0
JNLBRNG1	15625	1.0E-08	0	21.60	25	28	29	25	-1.8058E-01	4.5238E-06	0
JNLBRNG2	5625	1.0E-08	0	1.88	9	12	13	9	-4.1466E+00	2.1649E-15	0
JNLBRNG2	10000	1.0E-08	0	5.44	12	15	16	12	-4.1486E+00	2.3592E-15	0
JNLBRNG2	15625	1.0E-08	0	11.20	15	18	19	15	-4.1496E+00	2.4425E-15	0
JNLBRNGA	5625	1.0E-08	0	3.16	14	15	16	14	-2.7527E-01	5.5511E-16	0
JNLBRNGA	10000	1.0E-08	0	8.36	18	19	20	18	-2.7110E-01	4.9960E-16	0
JNLBRNGA	15625	1.0E-08	0	16.12	21	22	23	21	-2.6851E-01	5.6899E-16	0
JNLBRNGB	5625	1.0E-08	0	1.00	5	6	7	5	-6.3296E+00	1.8596E-15	0
JNLBRNGB	10000	1.0E-08	0	2.84	7	8	9	7	-6.3007E+00	2.1372E-15	0
JNLBRNGB	15625	1.0E-08	0	5.68	8	9	10	8	-6.2806E+00	2.1649E-15	0
MARATOSB	2	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-5.4612E+06	1.8626E-09	0
NOBNDTOR	5476	1.0E-08	0	5.36	23	25	26	23	-4.4993E-01	1.2212E-15	0
NOBNDTOR	10000	1.0E-08	0	14.80	30	37	37	30	-4.4377E-01	9.4369E-16	0
NOBNDTOR	14884	1.0E-08	0	30.04	36	38	38	36	-4.4054E-01	8.8818E-16	0
OBSTCLAE	5625	1.0E-08	0	2.32	17	20	21	17	1.8630E+00	1.1102E-15	0
OBSTCLAE	10000	1.0E-08	0	5.48	21	24	25	21	1.8865E+00	9.3528E-06	0
OBSTCLAE	15625	1.0E-08	0	12.08	26	29	30	26	1.9010E+00	1.9984E-15	0
OBSTCLAL	5625	1.0E-08	0	2.04	16	17	18	16	1.8630E+00	1.3878E-15	0
OBSTCLAL	10000	1.0E-08	0	4.44	19	20	21	19	1.8865E+00	9.3528E-06	0
OBSTCLAL	15625	1.0E-08	0	9.76	24	25	26	24	1.9010E+00	2.1094E-15	0
OBSTCLBL	5625	1.0E-08	0	4.40	27	52	33	27	7.2309E+00	1.1102E-15	0
OBSTCLBL	10000	1.0E-08	0	7.16	23	42	30	23	7.2722E+00	1.3323E-15	0
OBSTCLBL	15625	1.0E-08	0	15.84	27	50	36	27	7.2958E+00	1.7764E-15	0
OBSTCLBM	5625	1.0E-08	0	1.52	8	14	12	8	7.2309E+00	1.1102E-15	0
OBSTCLBM	10000	1.0E-08	0	3.48	9	16	15	9	7.2722E+00	1.1102E-15	0
OBSTCLBM	15625	1.0E-08	0	5.88	9	18	15	9	7.2958E+00	1.4433E-15	0

Tabela 1.14: Resultados da aplicação de NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_f	n_g	SN	$f(x^*)$	gpc	ciclos
OBSTCLBU	5625	1.0E-08	0	2.44	16	29	22	16	7.2309E+00	9.9920E-16	0
OBSTCLBU	10000	1.0E-08	0	6.04	20	34	24	20	7.2722E+00	1.3323E-15	0
OBSTCLBU	15625	1.0E-08	0	10.88	22	37	26	22	7.2958E+00	1.7764E-15	0
ODNAMUR	11130	0.0E+00	0	3581.38	10	20	18	10	-1.4537E+06	3.5470E-11	0
OSLBQP	8	0.0E+00	0	0.00	1	3	4	1	6.2500E+00	0.0000E+00	0
PALMER1D	7	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-1.0741E+05	1.8626E-09	0
PALMER2C	8	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	1	-1.6103E+04	1.3039E-08	0
PALMER3C	8	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-1.5824E+04	4.1910E-09	0
PALMER4C	8	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-1.7275E+04	6.5193E-09	0
PENTDI	1000	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-7.5000E-01	8.8818E-16	0
PENTDI	5000	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	1	-7.5000E-01	8.8818E-16	0
QUDLIN	1200	2.0E+00	0	0.00	2	3	4	2	-7.1880E+07	0.0000E+00	0
QUDLIN	5000	2.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-1.2495E+09	0.0000E+00	0
SIM2BQP	2	0.0E+00	0	0.00	1	3	4	0	0.0000E+00	0.0000E+00	0
SIMBQP	2	0.0E+00	0	0.00	1	3	4	1	0.0000E+00	0.0000E+00	0
TORSION1	5476	1.0E-08	0	3.16	23	24	25	23	-4.3027E-01	8.3267E-16	0
TORSION1	10000	1.0E-08	0	8.40	31	32	33	31	-4.2726E-01	1.0547E-15	0
TORSION1	14884	1.0E-08	0	16.32	37	38	39	37	-4.2570E-01	1.1102E-15	0
TORSION2	5476	1.0E-08	0	2.48	13	16	17	13	-4.3027E-01	8.8818E-16	0
TORSION2	10000	1.0E-08	0	5.96	16	20	21	16	-4.2726E-01	8.9689E-06	0
TORSION2	14884	1.0E-08	0	11.64	19	24	24	19	-4.2570E-01	1.0547E-15	0
TORSION3	5476	1.0E-08	0	0.76	11	12	13	11	-1.2170E+00	8.3267E-16	0
TORSION3	10000	1.0E-08	0	2.00	15	16	17	15	-1.2138E+00	1.2212E-15	0
TORSION3	14884	1.0E-08	0	4.08	19	20	21	19	-1.2122E+00	1.1102E-15	0
TORSION4	5476	1.0E-08	0	1.12	14	17	18	14	-1.2170E+00	9.9920E-16	0
TORSION4	10000	1.0E-08	0	2.96	18	21	22	18	-1.2138E+00	1.2212E-15	0
TORSION4	14884	1.0E-08	0	6.08	23	26	27	23	-1.2122E+00	1.0547E-15	0

Tabela 1.15: Resultados da aplicação de NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	n	ρ	inf	Tempo	k	n_f	n_g	SN	$f(x^*)$	gpc	ciclos
TORSION5	5476	1.0E-08	0	0.20	6	7	8	6	-2.8634E+00	9.4369E-16	0
TORSION5	10000	1.0E-08	0	0.64	8	9	10	8	-2.8604E+00	9.4369E-16	0
TORSION5	14884	1.0E-08	0	1.16	9	10	11	9	-2.8588E+00	1.0547E-15	0
TORSION6	5476	1.0E-08	0	0.56	9	12	13	9	-2.8634E+00	7.7716E-16	0
TORSION6	10000	1.0E-08	0	1.36	11	14	15	11	-2.8604E+00	9.4369E-16	0
TORSION6	14884	1.0E-08	0	2.48	13	16	17	13	-2.8588E+00	9.9920E-16	0
TORSIONA	5476	1.0E-08	0	3.24	23	24	25	23	-4.1830E-01	8.3267E-16	0
TORSIONA	10000	1.0E-08	0	8.72	31	32	33	31	-4.1839E-01	1.0547E-15	0
TORSIONA	14884	1.0E-08	0	18.52	37	38	39	37	-4.1842E-01	1.0547E-15	0
TORSIONB	5476	1.0E-08	0	2.44	13	17	17	13	-4.1830E-01	7.2164E-16	0
TORSIONB	10000	1.0E-08	0	6.40	17	22	22	17	-4.1839E-01	1.0547E-15	0
TORSIONB	14884	1.0E-08	0	12.48	20	23	24	20	-4.1842E-01	1.1657E-15	0
TORSIONC	5476	1.0E-08	0	0.76	11	12	13	11	-1.2042E+00	8.8818E-16	0
TORSIONC	10000	1.0E-08	0	2.08	15	16	17	15	-1.2044E+00	1.0547E-15	0
TORSIONC	14884	1.0E-08	0	4.32	19	20	21	19	-1.2045E+00	1.2768E-15	0
TORSIOND	5476	1.0E-08	0	1.20	14	17	18	14	-1.2042E+00	8.3267E-16	0
TORSIOND	10000	1.0E-08	0	3.08	18	21	22	18	-1.2044E+00	9.4369E-16	0
TORSIOND	14884	1.0E-08	0	6.32	23	26	27	23	-1.2045E+00	1.3878E-15	0
TORSIONE	5476	1.0E-08	0	0.28	6	7	8	6	-2.8502E+00	7.7716E-16	0
TORSIONE	10000	1.0E-08	0	0.76	8	9	10	8	-2.8507E+00	8.3267E-16	0
TORSIONE	14884	1.0E-08	0	1.12	9	10	11	9	-2.8508E+00	8.3267E-16	0
TORSIONF	5476	1.0E-08	0	0.64	9	12	13	9	-2.8502E+00	8.3267E-16	0
TORSIONF	10000	1.0E-08	0	1.52	11	14	15	11	-2.8507E+00	9.9920E-16	0
TORSIONF	14884	1.0E-08	0	2.80	13	16	17	13	-2.8508E+00	9.4369E-16	0
TRIDIA	1000	0.0E+00	0	0.04	1	2	3	1	-1.0000E+00	1.3323E-15	0
TRIDIA	5000	0.0E+00	0	0.16	1	2	3	1	-1.0000E+00	1.3323E-15	0
TRIDIA	10000	0.0E+00	0	0.28	1	2	3	1	-1.0000E+00	1.3323E-15	0
ZANGWIL2	2	0.0E+00	0	0.00	1	2	3	1	-8.4267E+01	1.3323E-15	0

Método para resolução de problemas de minimização com restrições lineares

Neste capítulo, descrevemos em detalhes GENLIN, um método eficiente para resolução do problema de minimização com restrições lineares, apresentado em [Andretta et al. \(2010\)](#).

O problema de minimização com restrições lineares a ser resolvido por GENLIN é

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeita a} && x \in \Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, Cx \leq d, l \leq x \leq u\}, \end{aligned}$$

onde f é uma função em $\mathcal{C}^2$, $x \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{r \times n}$, $b \in \mathbb{R}^r$, $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $d \in \mathbb{R}^m$, $l \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^n$, $u \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^n$ e $[l]_i < [u]_i$, $1 \leq i \leq n$.

GENLIN é um método de restrições ativas e sua implementação faz parte do Projeto TANGO (*Trustable Algorithms for Nonlinear General Optimization*). A seguir, definimos formalmente o que é face do conjunto factível Ω , conceito muito usado no estudo de métodos de restrições ativas.

Definição 2.1. Para todo $I \subset \{1, 2, \dots, m\}$ e $J \subset \{1, 2, \dots, 2n\}$ definimos uma

face do conjunto factível Ω por

$$\begin{aligned}
F_{I,J} = \{x \in \Omega \mid & a^k x = [b]_k, 1 \leq k \leq r, \\
& c^i x = [d]_i, \text{ se } i \in I, \\
& c^i x < [d]_i, \text{ se } i \notin I, \\
& [x]_j = [l]_j, \text{ se } j \in J, \\
& [x]_j = [u]_j, \text{ se } n+j \in J, \\
& [l]_j < [x]_j < [u]_j, \text{ se } j \notin J, n+j \notin J\},
\end{aligned} \tag{2.1}$$

onde a^k é a k -ésima linha da matriz A e c^i é a i -ésima linha da matriz C .

O poliedro Ω é a união de todas as faces. As restrições lineares de igualdade, as restrições i tais que $i \in I$ e j tais que $j \in J$ são chamadas de restrições *ativas*. Definimos $V_{I,J}$ o menor espaço afim que contém $F_{I,J}$ e $S_{I,J}$ o subespaço linear paralelo a $V_{I,J}$.

De maneira análoga à que é feita no Capítulo 1, a seguir definimos o gradiente projetado contínuo.

Definição 2.2. Dado $\delta \in \mathbb{R}_+^m$, o gradiente projetado contínuo no ponto z é dado por:

$$g_P(z, \delta) = P_{\Omega(z, \delta)}(z - \nabla f(z)) - z, \tag{2.2}$$

com $\Omega(z, \delta) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, l \leq x \leq u, c^j x \leq [d]_j, \forall j \in I(z, \delta)\}$ e $I(z, \delta) = \{j \mid c^j z - [d]_j \geq -[\delta]_j\}$. $P_{\Omega(x, \delta)}(x)$ é a projeção ortogonal do ponto x no conjunto $\Omega(x, \delta)$.

Note que $\Omega(z, \delta)$ é o conjunto das restrições de caixa e das restrições que são satisfeitas por igualdade ou que estão relativamente próximas de serem satisfeitas por igualdade e que, para $\delta = \infty$, temos $\Omega(z, \delta) = \Omega$.

GENLIN usa um algoritmo “irrestrito” com regiões de confiança ou com busca linear, apresentados em detalhes nas Seções 2.1.1 e 2.1.2, respectivamente, para encontrar o minimizador da função restrito à face da região factível definida pelo iterando atual, e o método do Gradiente Espectral Projetado Parcial (PSPG) para mudar de face, apresentado na Seção 2.2.

2.1 Algoritmos “irrestritos”

Nesta seção, descrevemos o uso dos algoritmos “irrestritos” para encontrar o minimizador da função restrito a uma face.

Dada uma iteração k e um iterando x_k , suponha, sem perda de generalidade, que as variáveis livres em $F_{I,J}$ são $\bar{x} = ([x]_1, \dots, [x]_s)^T$ e que as variáveis restantes estão fixas em $[\hat{x}]_{s+1}, \dots, [\hat{x}]_n$ ($[\hat{x}]_i \in \{[l]_i, [u]_i\}$, para $s+1 \leq i \leq n$). Definamos $\bar{f}(\bar{x}) = f([x]_1, \dots, [x]_s, [\hat{x}]_{s+1}, \dots, [\hat{x}]_n)$, $\bar{\Omega} = \{x \in \mathbb{R}^s \mid (x, \hat{x})^T \in F_{I,J}\}$, $\bar{A}$ e $\bar{b}$ correspondentes às restrições ativas de $\bar{\Omega}$ em x_k .

Usemos um algoritmo “irrestrito” para resolver o seguinte problema:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && \bar{f}(x) \\ &\text{sujeita a} && \bar{A}x = \bar{b}, \end{aligned} \tag{2.3}$$

onde $x \in \mathbb{R}^s$, $\bar{A} \in \mathbb{R}^{t \times s}$ e $\bar{b} \in \mathbb{R}^t$.

Ao trabalhar com o problema (2.3), trataremos apenas do caso em que a matriz $\bar{A}$ possui linhas linearmente independentes. Isso é razoável na prática, pois quando alguma linha de $\bar{A}$ depende linearmente de outra, ou a linha em questão pode ser eliminada sem nenhuma alteração da solução de (2.3) ou a região viável é vazia, não havendo solução para o problema. Considere $Z \in \mathbb{R}^{s \times (s-t)}$ e $Y \in \mathbb{R}^{s \times t}$ as matrizes cujas colunas formam, respectivamente, uma base para espaço nulo e para a imagem do espaço gerado pelas linhas de $\bar{A}$. Assim, temos que $\bar{A}Z = 0$ e $\bar{A}Y$ é não-singular.

Note que, uma vez escolhidas as matrizes Z e Y , todo vetor x em $\mathbb{R}^s$ possui uma única representação da forma

$$x = Yx_y + Zx_z,$$

com $x_y \in \mathbb{R}^t$ e $x_z \in \mathbb{R}^{(s-t)}$. Em particular, tomando x^* solução de (2.3), temos $x^* = Yx_y^* + Zx_z^*$. Como x^* é viável, vale que

$$\bar{A}x^* = \bar{A}(Yx_y^* + Zx_z^*) = \bar{b}.$$

Como $\bar{A}Z = 0$, temos

$$x_y^* = (\bar{A}Y)^{-1}\bar{b},$$

pois $\bar{A}Y$ é não singular.

Assim, a solução x^* do problema (2.3) (assim como qualquer ponto viável de (2.3)) pode ser vista como a soma de uma solução particular para o sistema linear $\bar{A}x = \bar{b}$ (fazendo-se, por exemplo, $x_z^* = 0$) e de um ponto no núcleo do espaço gerado pelas linhas de $\bar{A}$ (ou seja, Zx_z^*). Desta forma, reduzimos o problema restrito (2.3) para um problema irrestrito de $s - t$ variáveis, dado por

$$\text{Minimizar } \bar{f}_1(x_z) = \bar{f}(Y(\bar{A}Y)^{-1}\bar{b} + Zx_z). \quad (2.4)$$

Note que o gradiente e a Hessiana de $\bar{f}_1$ são dados por

$$\nabla \bar{f}_1(x_z) = Z^T \nabla \bar{f}(x)$$

e

$$\nabla^2 \bar{f}_1(x_z) = Z^T \nabla^2 \bar{f}(x) Z.$$

Formularemos, então, um algoritmo para resolver o problema (2.4) que gera uma sequência de pontos viáveis. Para manter a viabilidade de cada ponto gerado pelo algoritmo, a cada iteração k partimos de um ponto x_k viável e calculamos um passo p_k tal que

$$\bar{A}p_k = 0.$$

Desta forma, temos que o ponto $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ é viável, pois

$$\bar{A}x_{k+1} = \bar{A}(x_k + \alpha_k p_k) = \bar{A}x_k + \alpha_k \bar{A}p_k = \bar{A}x_k = \bar{b},$$

já que x_k também é viável. Note que

$$\bar{A}p_k = 0 \iff p_k = Zp^z,$$

para algum vetor $p^z \in \mathbb{R}^{(s-t)}$.

Nas Seções 2.1.1 e 2.1.2 apresentamos um algoritmo “irrestrito” com re-

giões de confiança e com busca linear, respectivamente, para resolver o problema (2.4).

2.1.1 Algoritmo “irrestrito” com regiões de confiança

Nesta seção, apresentamos uma iteração de um algoritmo “irrestrito” baseado em regiões de confiança introduzido em [Andretta et al. \(2005\)](#), adaptado ao caso em que o problema original possui restrições lineares (veja [Andretta \(2008\)](#)).

Algoritmo 2.1 *Iteração de um algoritmo “irrestrito” com regiões de confiança*

Seja k a iteração atual. Sejam $\bar{\Omega}$ e $\bar{f}(x)$ como definidos anteriormente. Dados $\bar{A} \in \mathbb{R}^{t \times s}$, x_k tais que $\bar{A}x_k = \bar{b}$, $Z \in \mathbb{R}^{s \times (s-t)}$ tal que $\bar{A}Z = 0$, $\Delta_{\min} > 0$ e $\Delta_k \geq \Delta_{\min}$, faça:

Passo 1. Se $Z^T \nabla \bar{f}(x_k) = 0$ então pare e devolva x_k como solução declarando “Ponto estacionário de primeira ordem”.

Passo 2. Calcule Δ_{borda} a distância de x_k à borda da face.
Se $\Delta_{\text{borda}} < 2\Delta_{\min}$ então faça uma iteração do método SPG, ([Birgin et al. \(2000, 2001\)](#)), restrito a $F_{I,J}$ (face atual) para calcular x_{k+1} e pare.

Passo 3. Calcule s_k uma solução aproximada de

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & \varphi(w) \equiv \frac{1}{2} w^T Z^T \nabla^2 \bar{f}(x_k) Z w + (Z^T \nabla \bar{f}(x_k))^T w \\ \text{sujeita a} \quad & \|w\| \leq \Delta_k. \end{aligned}$$

Passo 4. Se $\varphi(s_k) = 0$ então pare e devolva x_k como solução declarando “Ponto estacionário de segunda ordem”. Senão, calcule $p_k = Zs_k$.

Passo 5. Se $x_k + p_k$ não pertence à face atual então calcule

$$\alpha_{\max} = \max\{\alpha \in [0, 1] \mid [x_k, x_k + \alpha p_k] \subset \bar{\Omega}\}.$$

Se $\bar{f}(x_k + \alpha_{\max} p_k) < \bar{f}(x_k)$ então faça $x_{k+1} = x_k + \alpha_{\max} p_k$ e pare declarando “Iterando na borda”. Senão faça

$$\Delta_k = \Delta_{\min} + 0.7 \left(\frac{\Delta_{\text{borda}}}{1 + \sigma} - \Delta_{\min} \right)$$

e volte para o Passo 3.

Passo 6. Calcule $\rho_k = \frac{\bar{f}(x_k + p_k) - \bar{f}(x_k)}{\varphi(s_k)}$.

Passo 7. Se $\rho_k \leq 0.1$ então faça $\Delta_k = \Delta \in [0.1\|p_k\|, 0.9\|p_k\|]$ e volte para o Passo 3.

Passo 8. Faça $x_{k+1} = x_k + p_k$.

Passo 9. Escolha $\Delta_{k+1} \geq \Delta_{\min}$.

Observações:

- No Passo 1, utiliza-se o critério $\|Z^T \nabla f(x_k)\|_{\infty} \leq \epsilon$.
- No Passo 3, s_k é calculado usando-se o algoritmo Moré-Sorensen ([Moré e Sorensen \(1983\)](#)) para minimização de quadrática em bolas (com parâmetro σ).
- No Passo 4, utiliza-se o teste $|\varphi(p_k)| \leq \epsilon_{\varphi}$.
- No Passo 7, calcula-se $\Delta_k = 0.25\|p_k\|$.
- No Passo 9, o cálculo de Δ_{k+1} é feito da seguinte maneira:

$$\Delta = \begin{cases} 0.25\|p_k\|_2, & \text{se } \rho_k \leq 0.25, \\ 2\Delta_k, & \text{se } \rho_k \geq 0.5 \text{ e } |\|p_k\|_2 - \Delta_k| \leq 10^{-5}, \\ \Delta_k, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

$$\Delta_{k+1} = \max\{\Delta_{\min}, \Delta\}.$$

- Define-se Δ_0 como $\Delta_0 = \max\{\Delta_{\min}, 100 \max\{1, \|x_0\|\}\}$.

Na Seção 2.1.3 apresentaremos como pode ser calculada a matriz Z . Assim a descrição do Algoritmo 2.1 se torna completa.

2.1.2 Algoritmo “irrestrito” com busca linear

Nesta seção, apresentamos uma outra possibilidade para definir uma iteração de um algoritmo “irrestrito” para resolver o problema (2.4). O Algoritmo 2.2 é baseado em um método de Newton truncado com busca linear.

Algoritmo 2.2 *Iteração de um algoritmo “irrestrito” com busca linear*

Seja k a iteração atual. Seja $\bar{\Omega}$ e $\bar{f}(x)$ como definido anteriormente. Dados $\bar{A} \in \mathbb{R}^{t \times s}$, x_k tal que $\bar{A}x_k = \bar{b}$, $Z \in \mathbb{R}^{s \times (s-t)}$ tal que $\bar{A}Z = 0$, $\theta \in (0, 1)$ e $\gamma \in (0, 1)$.

Passo 1. Se $Z^T \nabla \bar{f}(x_k) = 0$ então pare e devolva x_k como solução declarando “Ponto estacionário de primeira ordem”.

Passo 2. Calcule um vetor não nulo $p^z \in \mathbb{R}^{s-t}$ que satisfaça

$$(Z^T \nabla \bar{f}(x_k))^T p^z \leq -\theta \|Z^T \nabla \bar{f}(x_k)\| \|p^z\|. \quad (2.5)$$

Calcule a direção $p_k = Zp^z$.

Passo 3. Calcule $\alpha_{\max} = \max\{\alpha \in [0, 1] \mid [x_k, x_k + \alpha p_k] \subset \bar{\Omega}\}$.

Se $\alpha_{\max} < 1$ e $\bar{f}(x_k + \alpha_{\max} p_k) < \bar{f}(x_k)$, então

faça $x_{k+1} = x_k + \alpha_{\max} p_k$ e pare declarando “Iterando na borda”.

Passo 4. Calcule $\alpha_k < \alpha_{\max}$ para o qual valha

$$\bar{f}(x_k + \alpha_k p_k) \leq \bar{f}(x_k) + \gamma \alpha_k (Z^T \nabla \bar{f}(x_k))^T p^z.$$

Passo 5. Faça $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$.

Observações:

- No Passo 1, utiliza-se o critério $\|Z^T \nabla \bar{f}(x_k)\|_{\infty} \leq \epsilon$.
- No Passo 2, p^z é calculado utilizando um método de gradientes conjugados para resolver o sistema Newtoniano

$$B_k p^z = -Z^T \nabla \bar{f}(x_k),$$

onde B_k é uma aproximação de $Z^T \nabla^2 \bar{f} Z$ no ponto x_k . A cada iteração de

gradientes conjugados, toma-se o cuidado de satisfazer a condição (2.5). Quando esta não é válida, toma-se o ponto calculado na iteração anterior.

- No Passo 4, utiliza-se “backtracking” com interpolação quadrática unidimensional para calcular α_k . A quadrática interpolante é dada por $q(w)$, com $q(0) = \bar{f}(x_k)$, $q(\alpha_k) = \bar{f}(x_k + \alpha_k p_k)$ e $\nabla q(0) = \nabla \bar{f}(x_k)^T p_k$. Definimos $\bar{\alpha}_{\text{nov}}o$ como o minimizador da função q e utilizamos $\bar{\alpha}_{\text{nov}}o$ para calcular α_k .

Passo 4.1. Faça $\alpha_{\text{tent}} \leftarrow \alpha_{\text{max}}$.

Passo 4.2. Se $\bar{f}(x_k + \alpha_{\text{tent}} p_k) \leq \bar{f}(x_k) + \gamma \alpha_{\text{tent}} (Z^T \nabla \bar{f}(x_k))^T p^z$,
então faça $\alpha_k = \alpha_{\text{tent}}$ e pare.

Passo 4.3. Calcule

$$\bar{\alpha}_{\text{nov}}o = - \frac{\alpha_{\text{tent}}^2 (Z^T \nabla \bar{f}(x_k))^T p^z}{2(\bar{f}(x_k + \alpha_{\text{tent}} p_k) - \bar{f}(x_k) - \alpha_{\text{tent}} (Z^T \nabla \bar{f}(x_k))^T p^z)}.$$

Se $\bar{\alpha}_{\text{nov}}o \geq 0.1\alpha_{\text{tent}}$ e $\bar{\alpha}_{\text{nov}}o \leq 0.9\alpha_{\text{tent}}$,

então faça $\alpha_{\text{nov}}o \leftarrow \bar{\alpha}_{\text{nov}}o$. Senão, faça $\alpha_{\text{nov}}o \leftarrow 0.5\alpha_{\text{tent}}$.

Faça $\alpha_{\text{tent}} \leftarrow \alpha_{\text{nov}}o$ e volte para o Passo 4.2.

Para que a descrição do Algoritmo 2.2 esteja completa, restará apenas mostrar como calcular a matriz Z , o que será feito na Seção 2.1.3.

2.1.3 Cálculo da base do núcleo

Apresentamos aqui duas técnicas que podem ser utilizadas para calcular a matriz Z usada nos Algoritmos 2.1 e 2.2.

2.1.3.1 Fatoração LQ

A primeira ideia para o cálculo da matriz Z é o uso da fatoração LQ da matriz $\bar{A}$. Nesta fatoração, que gasta $O(st^2)$ operações, temos uma matriz ortogonal $Q \in \mathbb{R}^{s \times s}$ tal que

$$\bar{A}Q = (L \quad 0),$$

onde $L \in \mathbb{R}^{t \times t}$ é triangular inferior. Como estamos supondo que as linhas da matriz $\bar{A}$ são linearmente independentes, a matriz L é não-singular.

Escrevendo a matriz Q como $Q = [Q_1; Q_2]$, com $Q_1 \in \mathbb{R}^{s \times t}$ e $Q_2 \in \mathbb{R}^{s \times (s-t)}$, temos que

$$\bar{A}Q_1 = L \text{ e } \bar{A}Q_2 = 0.$$

É fácil ver que as colunas de Q_1 e Q_2 formam, respectivamente, uma base ortogonal para a imagem e o núcleo do espaço gerado pelas linhas de $\bar{A}$. Assim, uma escolha natural para a matriz Z é Q_2 .

Note que, se utilizarmos técnicas do tipo Newton para calcular o passo p^z (Passo 2 do Algoritmo 2.2), é importante levar em conta o condicionamento da Hessiana reduzida $Z^T \nabla^2 \bar{f}(x_k) Z$.

Neste caso, temos que

$$\text{cond}(Z^T \nabla^2 \bar{f}(x_k) Z) \leq \text{cond}(\nabla^2 \bar{f}(x_k)) (\text{cond}(Z))^2.$$

Assim, como este limitante é justo (pode valer a igualdade), se o número de condição da matriz Z fosse grande, a matriz Hessiana reduzida $Z^T \nabla^2 \bar{f}(x_k) Z$ poderia ser mau-condicionada, independentemente do número de condição da matriz Hessiana $\nabla^2 \bar{f}(x_k)$. No entanto, utilizando a fatoração LQ para determinar Z , temos $\text{cond}(Z) = 1$. Ou seja,

$$\text{cond}(Z^T \nabla^2 \bar{f}(x_k) Z) \leq \text{cond}(\nabla^2 \bar{f}(x_k)),$$

o que mostra que, neste caso, o condicionamento do problema (2.4) não é pior que o condicionamento do problema (2.3). Portanto, uma grande vantagem do uso desta técnica é o fato de que esta escolha de Z não piora o condicionamento do problema de encontrar uma solução para o problema (2.4).

Para formar a matriz Q usando a fatoração LQ, é necessário calcular o produto de transformações ortogonais usadas para triangularizar a matriz $\bar{A}$. Na implementação de métodos que usam a matriz Z somente em produtos matriz-vetor, pode não ser eficiente calcular a matriz Q (e, conseqüentemente, Z) explicitamente, principalmente quando o número de restrições é pequeno. Neste caso é mais interessante armazenar as transformações ortogonais de forma com-

pacta e aplicá-las ao vetor apropriado para calcular o produto matriz-vetor sempre que necessário.

2.1.3.2 Redução de variáveis

Apesar das vantagens do uso da fatoração LQ para o cálculo da matriz Z , esta é uma operação computacionalmente custosa e que não aproveita uma eventual esparsidade de $\bar{A}$. Uma alternativa é a técnica de redução de variáveis.

Tomando a matriz $\bar{A}$ com linhas linearmente independentes, podemos particioná-la em

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} V & U \end{pmatrix},$$

onde $V \in \mathbb{R}^{t \times t}$ é não singular e $U \in \mathbb{R}^{t \times (s-t)}$. Usando esta partição de $\bar{A}$, a matriz Z pode ser definida como

$$Z = \begin{pmatrix} -V^{-1}U \\ I \end{pmatrix},$$

onde I é a matriz identidade $(s-t) \times (s-t)$. Note que

$$\bar{A}Z = \begin{pmatrix} V & U \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -V^{-1}U \\ I \end{pmatrix} = -VV^{-1}U + U = 0,$$

como desejamos.

Geralmente a matriz Z , tal como descrita acima, não é armazenada explicitamente. Produtos matriz-vetor envolvendo Z e Z^T podem ser obtidos resolvendo sistemas lineares envolvendo V e V^T . A grande dificuldade desta técnica é encontrar uma maneira eficiente de particionar $\bar{A}$ de forma que a matriz V escolhida fique relativamente bem-condicionada.

2.2 Método do Gradiente Espectral Projetado Parcial

Quando GENLIN, apresentado em [Andretta et al. \(2010\)](#), decide mudar de face, ou seja, decide mudar o conjunto de restrições ativas corrente, usamos o método do Gradiente Espectral Projetado Parcial (PSPG) (inspirado no método do Gradiente Espectral Projetado SPG, apresentado em [Birgin et al. \(2000, 2001\)](#)), para definir qual será a nova face a ser trabalhada. Em outras

palavras, para escolher quais restrições devem entrar no conjunto das restrições ativas e quais devem sair deste conjunto.

O método do Gradiente Espectral Projetado é usado para resolver o seguinte problema:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeita a} && x \in \Omega, \end{aligned}$$

onde f é uma função em $\mathcal{C}^1$, $x \in \mathbb{R}^n$ e Ω é um conjunto convexo fechado. No nosso caso, $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n | Ax = b, Cx \leq d, l \leq x \leq u\}$.

A ideia do algoritmo é a seguinte: na iteração k , calculamos uma direção p_k e damos um passo α_k tal que $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \in \Omega$ satisfaça a condição de Armijo. A direção p_k é calculada com base na projeção ortogonal de $-\lambda_k^{\text{PSPG}} \nabla f(x_k)$ no conjunto $\Omega(x_k, \delta)$, onde λ_k^{PSPG} (chamado de *passo espectral*) é um escalar calculado a partir de informações fornecidas pelo ponto atual x_k e pelo ponto x_{k-1} da iteração anterior.

Denotamos por Ω^0 o conjunto de pontos interiores de Ω . Os passos de uma iteração de PSPG são dados a seguir.

Algoritmo 2.3 Iteração de PSPG

Seja k a iteração atual. Suponha que $\nabla f(x_k) \neq 0$. Dados $x_k \in \Omega^0$, $0 < \lambda_{\min}^{\text{PSPG}} < \lambda_{\max}^{\text{PSPG}} < \infty$, $\gamma \in (0, 1)$, $\delta_k \geq \delta_{\min} > 0$.

Passo 1. Cálculo do λ_k^{PSPG}

Se $k = 0$ ou $(x_k - x_{k-1})^T (\nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})) \leq 0$, então faça

$\lambda_k^{\text{PSPG}} = 1$. Senão, calcule $s_k = x_k - x_{k-1}$,

$y_k = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})$ e faça

$$\lambda_k^{\text{PSPG}} = \min \left\{ \lambda_{\max}^{\text{PSPG}}, \max \left\{ \lambda_{\min}^{\text{PSPG}}, \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k} \right\} \right\}.$$

Passo 2. Calcule $p_k^{\text{PSPG}} = P_{\Omega(x_k, \delta_k)}(x_k - \lambda_k^{\text{PSPG}} \nabla f(x_k)) - x_k$.

Passo 3. Calcule $\alpha_{\max} = \max\{\alpha \in [0, 1] \mid [x_k, x_k + \alpha p_k^{\text{PSPG}}] \subset \Omega\}$.

Passo 4. Faça $\alpha_{\text{tent}} \leftarrow \alpha_{\text{max}}$.

Passo 5. Se $f(x_k + \alpha_{\text{tent}} p_k) \leq f(x_k) + \gamma \alpha_{\text{tent}} \nabla f(x_k)^T p_k^{\text{PSPG}}$,

então faça $\alpha_k = \alpha_{\text{tent}}$ e termine a iteração com

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k^{\text{PSPG}}.$$

Senão, escolha $\alpha_{\text{novo}} \in [0, 1\alpha_{\text{tent}}, 0.9\alpha_{\text{tent}}]$, faça $\alpha_{\text{tent}} \leftarrow \alpha_{\text{novo}}$

e repita o Passo 5.

Observações:

- No Passo 5, escolhemos α_{novo} usando interpolação quadrática uni-dimensional com salvaguardas. A quadrática interpolante é dada por $q(w)$, com $q(0) = f(x_k)$, $q(\alpha_k) = f(x_k + \alpha_k p_k^{\text{PSPG}})$ e $\nabla q(0) = \nabla f(x_k)^T p_k^{\text{PSPG}}$. Definimos $\bar{\alpha}_{\text{novo}}$ como o minimizador da função q com salvaguardas.

Passo 5.1. Faça

$$\bar{\alpha}_{\text{novo}} = - \frac{\alpha_{\text{tent}}^2 \nabla f(x_k)^T p_k^{\text{PSPG}}}{2(f(x_k + \alpha_{\text{tent}} p_k^{\text{PSPG}}) - f(x_k) - \alpha_{\text{tent}} \nabla f(x_k)^T p_k^{\text{PSPG}})}.$$

Passo 5.2. Salvaguarda de α_{novo}

Se $\bar{\alpha}_{\text{novo}} \geq 0.1\alpha_{\text{tent}}$ e $\bar{\alpha}_{\text{novo}} \leq 0.9\alpha_{\text{tent}}$ então faça

$\alpha_{\text{novo}} \leftarrow \bar{\alpha}_{\text{novo}}$. Senão, faça $\alpha_{\text{novo}} \leftarrow 0.5\alpha_{\text{tent}}$.

- Definimos $\lambda_{\text{min}}^{\text{PSPG}} = 10^{-10}$ e $\lambda_{\text{max}}^{\text{PSPG}} = 10^{10}$.

Note que, para $\delta = \infty$, o algoritmo 2.3 se reduz ao método SPG, apresentado em [Birgin et al. \(2000, 2001\)](#).

Definido o método PSPG para mudar de face e dados os algoritmos “irrestritos” que podem ser usados para encontrar o minimizador da função restrito à face atual, podemos agora escrever o método de restrições ativas GENLIN para resolver o problema (1).

2.3 Método de restrições ativas para problemas com restrições lineares

Agora que dispomos de todas as ferramentas necessárias, descrevemos o método de restrições ativas para problemas com restrições lineares chamado GENLIN.

Algoritmo 2.4 *Método de restrições ativas para problemas com restrições lineares (GENLIN)*

Dados $x_0 \in \mathbb{R}^n$ e $\delta_1 \geq \delta_{\min} > 0$.

Passo 1. Calcule $x_1 = P_{\Omega}(x_0)$.

Se é possível calcular x_1 , então faça $k \leftarrow 1$ e $bd \leftarrow 0$. Senão, pare declarando “Problema inviável”.

Passo 2. *Atingiu borda por 20 iterações seguidas.* Sai da face.

Se $bd = 20$ então vá para o Passo 3. Senão, vá para o Passo 4.

Passo 3. *Critério de convergência.*

Se $g_P(x_k, \delta_k) = 0$, então pare e devolva x_k como solução.

Senão, use uma iteração do Algoritmo 2.3 para calcular x_{k+1} , faça $bd \leftarrow 0, k \leftarrow k + 1$ e vá para o Passo 4.

Passo 4. x_k é um minimizador na face.

Se $P_{S_{I,J}}(-\nabla f(x_k)) = 0$ então volte para o Passo 3.

Passo 5. *Permanece na mesma face*

Calcule $x_{k+1} \in \bar{\Omega}$ usando o Algoritmo 2.1 ou 2.2 para resolver o problema (2.3) com x_k como ponto inicial.

Passo 6. *Ponto x_{k+1} está na borda.*

Se o algoritmo “irrestrito” usado no Passo 5 termina sua execução com x_{k+1} declarando “Iterando na borda”, então faça $bd \leftarrow bd + 1$. Senão, faça $bd \leftarrow 0$.

Passo 7. Faça $k \leftarrow k + 1$ e volte para o Passo 2.

Para que GENLIN esteja totalmente definido, mostraremos na Seção 2.4 como é calculada a projeção de um ponto nas restrições lineares.

2.4 Projeção

Note que projetar um ponto $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ em um conjunto $\tilde{\Omega} = \{x \in \mathbb{R} \mid Ax = b, \tilde{C}x \leq \tilde{d}, l \leq x \leq u\}$ significa encontrar um ponto $\tilde{x}^*$ que seja solução do seguinte problema:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} && \frac{1}{2} \|x - \tilde{x}\|_2^2 \equiv \frac{1}{2} x^T I x - \tilde{x}^T x \\ & \text{sujeita a} && Ax = b, \\ & && \tilde{C}x \leq \tilde{d}, \\ & && l \leq x \leq u, \end{aligned} \tag{2.6}$$

onde I é a matriz identidade em $\mathbb{R}^{n \times n}$, $\tilde{C} \in \mathbb{R}^{\tilde{m} \times n}$ e $\tilde{d} \in \mathbb{R}^{\tilde{m}}$ correspondem às restrições lineares de desigualdade utilizadas na projeção.

Como este é um problema de programação quadrática convexa, existem algoritmos conhecidos que podem ser utilizados para resolver (2.6). Um algoritmo clássico para a resolução deste problema é o proposto em Goldfarb e Idnani (1983).

Uma outra maneira de calcular a projeção seria considerar o problema dual de (2.6), dado por

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} && \frac{1}{2} y^T \tilde{A} \tilde{A}^T y + (\tilde{b} - \tilde{A} \tilde{x})^T y \\ & \text{sujeita a} && y_i \geq 0, \quad i = r + 1, r + 2, \dots, r + \tilde{m} + nl + nu, \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{(r+\tilde{m}+nl+nu) \times n}$, $\tilde{A} = \begin{bmatrix} A \\ \tilde{C} \\ -I_l \\ I_u \end{bmatrix}$, $\tilde{b} \in \mathbb{R}^{r+\tilde{m}+nl+nu}$, $\tilde{b} = \begin{bmatrix} b \\ \tilde{d} \\ -\ell \\ u \end{bmatrix}$, $\mathcal{I}_l = \{i \mid [x]_i \geq [l]_i, [l]_i \in \mathbb{R}\}$, $\mathcal{I}_u = \{i \mid [x]_i \leq [u]_i, [u]_i \in \mathbb{R}\}$, $nl = |\mathcal{I}_l|$, $nu = |\mathcal{I}_u|$, $I_l \in \mathbb{R}^{nl \times n}$ é a matriz formada pelas linhas da identidade com índice em $\mathcal{I}_l$ e $I_u \in \mathbb{R}^{nu \times n}$ é a matriz formada pelas linhas da identidade com índice em $\mathcal{I}_u$.

Assim, qualquer algoritmo para minimização de quadráticas em caixas poderia ser utilizado para encontrar a solução y^* do problema (2.7). Dado y^* , a solução primal (ou seja, o ponto $\tilde{x}^*$ projeção de $\tilde{x}$ em $\tilde{\Omega}$) é dada por $\tilde{x}^* = \tilde{x} - \tilde{A}^T y^*$.

Embora sofra de problemas de condicionamento, esta formulação é mais interessante para o caso esparso, para o qual há menos implementações de métodos para resolver o problema de programação quadrática (2.6). No caso de problemas esparsos, é necessário um método para resolver (2.7) que não fatore a matriz Hessiana do problema.

Usaremos os métodos de programação quadrática para problemas com restrições de caixa apresentados no Capítulo 1 para resolver o problema de projeção, usando a formulação (2.7).

2.5 Teoria de convergência

Para simplificar a teoria de convergência de GENLIN, vamos escrever o problema (1) como

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeita a} && x \in \Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid C_i(x) \leq 0, i = 1, \dots, p\}, \end{aligned} \tag{2.8}$$

com

$$C_i(x) = (a^i)^T x - [b]_i, a^i = (a_1^i, \dots, a_n^i)^T.$$

Vamos supor que Ω é compacto. Claramente, os problemas (1) e (2.8) são equivalentes. Dado $I \subset \{1, \dots, p\}$, definimos F_I de maneira análoga a $F_{I,J}$, ou seja,

$$F_I = \{x \in \Omega \mid C_i(x) = 0 \text{ se e somente se } i \in I\}.$$

Note que Ω é a união dos conjuntos F_I , para $I \subset \{1, \dots, p\}$. Ainda, $F_I \neq F_J$ implica que $F_I \cap F_J = \emptyset$. O menor espaço afim que contém a face não-vazia F_I será denotado por V_I e o subespaço linear paralelo a V_I será denotado por S_I .

Dados $z \in \Omega$ e $\delta \in [0, \infty]^p$, definimos

$$\Omega(z, \delta) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid C_i(x) \leq 0 \text{ para todo } i \in I(z, \delta)\},$$

onde

$$I(z, \delta) = \{i \mid C_i(z) \geq -[\delta]_i\}.$$

Claramente, $\Omega \subset \Omega(z, \delta)$ e $\Omega(z, \infty) = \Omega$.

A seguir, apresentaremos uma propriedade que será útil para provar a convergência de GENLIN.

Propriedade 2.1. *Se $z \in \Omega$ satisfaz as condições KKT de (2.8) então z também satisfaz as condições KKT de*

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} && f(x) \\ & \text{sujeita a} && x \in \Omega(z, \delta), \end{aligned} \tag{2.9}$$

para todo $\delta \geq 0$. Reciprocamente, se z satisfaz as condições KKT de (2.9) para algum $\delta \geq 0$, então z satisfaz as condições KKT de (2.8).

Para a prova, veja o Apêndice A.

Dado $z \in \Omega$, definimos

$$g_P(z) = P_\Omega(z - \nabla f(z)) - z \tag{2.10}$$

e

$$g_P(z, \delta) = P_{\Omega(z, \delta)}(z - \nabla f(z)) - z. \tag{2.11}$$

Além disso, para todo $\sigma > 0$, definimos

$$g_P(z, \delta, \sigma) = P_{\Omega(z, \delta)}(z - \sigma \nabla f(z)) - z. \tag{2.12}$$

Finalmente, se $z \in F_I \subset \Omega$, definimos

$$g_S(z) = P_{S_I}(-\nabla f(z)) = -Z^T \nabla f(z). \tag{2.13}$$

Note que vale que

$$g_P(z) = g_P(z, \infty) = g_P(z, \infty, 1) \tag{2.14}$$

e

$$g_P(z, \delta) = g_P(z, \delta, 1). \tag{2.15}$$

Dados $\delta \in [0, \infty)^p$ e $\sigma > 0$, satisfazer as condições KKT para $z \in \Omega$ é equivalente a $g_P(z, \delta, \sigma) = 0$. Ainda, se $[\delta_k]_i \geq \delta_{\min} > 0$ para todo $i = 1, \dots, p$, $k \in \mathbb{N}$, $z_k \rightarrow z$ e z é um ponto KKT, temos que $\|g_P(z_k, \delta_k)\| \rightarrow 0$. Isso justifica o uso de $\|g_P(z_k, \delta_k)\|$ como critério de parada do método.

Para provar a convergência do Algoritmo 2.4, precisamos definir e apresentar o teorema de convergência de um algoritmo auxiliar. Primeiramente, vejamos a definição do método de Métrica Variável Inexata (Birgin et al. (2003)). Este método é usado para resolver o problema de minimizar uma função $f(x)$ sujeita a $x \in \Omega$, com Ω fechado e convexo, e f com derivadas parciais contínuas em um conjunto aberto que contém Ω .

Defina $\mathcal{M}$ o conjunto das matrizes em $\mathbb{R}^{n \times n}$ definidas positivas tais que, para $B \in \mathcal{M}$, $\|B\| \leq L$ e $\|B^{-1}\| \leq L$, para algum L . Defina $g_k = \nabla f(x_k)$.

Algoritmo 2.5 *Iteração do método de Métrica Variável Inexata*

Sejam k a iteração atual e $x_0 \in \Omega$ um ponto inicial arbitrário. Dados $\eta \in (0, 1]$, $\gamma \in (0, 1)$, $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$, M um inteiro positivo, $x_k \in \Omega$, $B_k \in \mathcal{M}$.

Passo 1. *Cálculo da direção de busca*

Considere o subproblema

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && Q_k(d) \\ &\text{sujeita a} && x_k + d \in \Omega, \end{aligned} \tag{2.16}$$

com

$$Q_k(d) = \frac{1}{2}d^T B_k d + g_k^T d.$$

Seja $\bar{d}_k$ o minimizador de (2.16). Seja d_k tal que $x_k + d_k \in \Omega$ e

$$Q_k(d_k) \leq \eta Q_k(\bar{d}_k). \tag{2.17}$$

Se $d_k = 0$, então pare declarando “Ponto estacionário”.

Passo 2. *Cálculo do tamanho do passo.*

Faça $\alpha = 1$ e $f_{\max} = \max\{f(x_{k-j+1}) \mid 1 \leq j \leq \min\{k+1, M\}\}$.

Passo 3. *Teste de decréscimo da função.*

Se

$$f(x_k + \alpha d_k) \leq f_{\max} + \gamma \alpha g_k^T d_k, \quad (2.18)$$

então faça $\alpha_k = \alpha$, $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ e pare. Senão, escolha

$\alpha_{\text{novo}} \in [\sigma_1 \alpha, \sigma_2 \alpha]$, faça $\alpha \leftarrow \alpha_{\text{novo}}$ e repita o Passo 3.

O Lema 2.1 e o Teorema 2.1, apresentados a seguir, são o Lema 2.1 e o Teorema 2.1 de Birgin et al. (2003), respectivamente.

Lema 2.1. *O método de Métrica Variável Inexata é bem-definido.*

Teorema 2.1. *Suponha que o conjunto de nível $\{x \in \Omega \mid f(x) \leq f(x_0)\}$ é limitado. Então, ou o método de Métrica Variável Inexata pára em algum ponto estacionário x_k , ou todo ponto limite de sequência gerada é estacionário.*

Vejamos agora a definição de uma iteração da versão monótona do método SPG (Birgin et al. (2000, 2001)), que será usado na prova da convergência de GENLIN.

Algoritmo 2.6 *Iteração de SPG monótono*

Seja $\hat{\Omega} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo fechado. Suponha que $\alpha \in (0, 1)$, $0 < \sigma_{\min} < \sigma_{\max} < \infty$. Seja $x_0 \in \hat{\Omega}$ um ponto inicial arbitrário. Seja k a iteração atual. Dados $x_k \in \hat{\Omega}$, $\sigma_k \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$.

Passo 1. *Cálculo da direção de busca.*

Calcule

$$p_k = P_{\hat{\Omega}} \left(x_k - \frac{1}{\sigma_k} \nabla f(x_k) \right) - x_k.$$

Se $p_k = 0$, pare com x_k declarando “Ponto estacionário”.

Passo 2. *Cálculo do tamanho do passo.*

Escolha $t_{\text{inicial}} \geq t_{\min}$ e faça $t \leftarrow t_{\text{inicial}}$.

Passo 3. *Teste de decréscimo da função.*

Se

$$f(x_k + tp_k) \leq f(x_k) + \alpha t \nabla f(x_k)^T p_k,$$

então faça x_{k+1} tal que $f(x_{k+1}) \leq f(x_k + tp_k)$ e pare. Senão, escolha $t_{\text{novo}} \in [0.1t, 0.9t]$, faça $t \leftarrow t_{\text{novo}}$ e repita o Passo 3.

Teorema 2.2. *Seja $\hat{\Omega}$ convexo e fechado. Suponha que a sequência gerada pelo Algoritmo 2.6 seja limitada. Então*

- *Se o Algoritmo 2.6 não pára em $x_k \in \hat{\Omega}$, então x_{k+1} é bem-definido.*
- *Se o Algoritmo 2.6 pára em $x_k \in \hat{\Omega}$, então x_k é um ponto estacionário do problema*

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} && f(x) \\ & \text{sujeita a} && x \in \hat{\Omega}. \end{aligned} \tag{2.19}$$

- *Se x^* é um ponto limite da sequência gerada pelo Algoritmo 2.6, então x^* é um ponto KKT de (2.19). Mais ainda,*

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \|p_k\| = \lim_{k \rightarrow +\infty} \|P_{\hat{\Omega}}(x_k - \nabla f(x_k)) - x_k\| = 0.$$

Prova: Note que o método SPG monótono se reduz ao Método de Métrica Variável Inexata apresentado anteriormente. Basta tomar $M = 1$ e $Q_k(d) = \frac{\|d\|^2 \sigma_k}{2} + g_k^T d$. Assim, a prova segue diretamente do Lema 2.1 e do Teorema 2.1.

□

Agora podemos provar a convergência de GENLIN (Algoritmo 2.4). O algoritmo “irrestrito” a ser utilizado no Passo 5 do Algoritmo 2.4 admite várias implementações. Basicamente, é um algoritmo para minimização irrestrita que pára quando atinge a borda da região viável. Como visto na Seção 2.1, utilizamos os algoritmos “irrestritos” com regiões de confiança ou com busca linear. Para provar a convergência de GENLIN, estes algoritmos devem satisfazer as seguintes hipóteses.

Hipótese 1

- *Se x_{k+1} é calculado pelo algoritmo “irrestrito” e $x_k \in F_I$, então $x_{k+1} \in \bar{F}_I$ e $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$.*

- Se $x_{k+j} \in F_I$ é calculado pelo algoritmo “irrestrito” para todo $j \geq 1$, existe j tal que $\|g_S(x_{k+j})\|_\infty \leq \epsilon$, em que $g_S(x)$ está definido em (2.13).

Teorema 2.3. *O Algoritmo 2.1 satisfaz Hipótese 1.*

Prova: Pela construção do algoritmo, se ele pára em x_k , vale a Hipótese 1. Basta verificar o caso em que o algoritmo gera uma sequência infinita $\{x_k\}$. Neste caso, ou temos infinitas iterações de SPG ou temos infinitas iterações de regiões de confiança. Se são realizadas infinitas iterações de SPG, temos que o ponto limite da sequência $\{x_k\}$ é um ponto estacionário. Se são realizadas infinitas iterações de regiões de confiança, por argumentos clássicos de minimização irrestrita, temos também que o ponto limite da sequência $\{x_k\}$ é um ponto estacionário. Ou seja, em ambos os casos, para k suficientemente grande, $\|g_S(x_{k+j})\|_\infty \leq \epsilon$.

□

Teorema 2.4. *O Algoritmo 2.2 satisfaz Hipótese 1.*

Prova: Pela construção do algoritmo, se ele pára em x_k , vale a Hipótese 1. Basta verificar o caso em que o algoritmo gera uma sequência infinita $\{x_k\}$. Neste caso, ou temos infinitas iterações irrestritas de Newton truncado, ou o algoritmo atinge a borda e realiza infinitas iterações de *backtracking* para obter um ponto onde haja decréscimo suficiente da função. Em ambos os casos, argumentos clássicos de minimização irrestrita garantem que o ponto limite da sequência $\{x_k\}$ é um ponto estacionário. Ou seja, em ambos os casos, para k suficientemente grande, $\|g_S(x_{k+j})\|_\infty \leq \epsilon$.

□

Teorema 2.5. *Suponha que GENLIN (Algoritmo 2.4) seja aplicado ao problema (2.8). Então:*

- Para todo $k = 0, 1, 2, \dots$, se GENLIN não termina em x_k , então x_{k+1} está bem-definido.
- A sequência $\{x_k\}$ gerada pelo GENLIN termina em um número finito de iterações em um ponto no qual $\|g_P(x_k, \delta_k)\|_\infty \leq \epsilon$.

Prova: A primeira parte da tese segue da Hipótese 1 e dos Teoremas 2.3 e 2.4. Vamos provar a segunda parte. Suponha, por contradição, que GENLIN

gera infinitas iterações. Consideramos dois casos:

1. Há infinitas iterações de PSPG.
2. Há um número finito de iterações de PSPG.

Considere o primeiro caso. Seja $K \subset \mathbb{N}$ o conjunto de índices k tal que x_{k+1} é computado pelo método PSPG. Como o número de faces F_I é finito, existem $I \subset \{1, \dots, p\}$ e K_1 um subconjunto infinito de K tal que $x_k \in F_I$ para todo $k \in K_1$. Note que o número de subconjuntos diferentes $\Omega(x_k, \delta_k)$ também é finito e, portanto, existem $\hat{\Omega}$ e K_2 , um subconjunto infinito de K_1 , tais que

$$\Omega(x_k, \delta_k) = \hat{\Omega} \quad \text{para todo } k \in K_2.$$

Portanto, para todo $k \in K_2$,

$$p_k = P_{\hat{\Omega}}(x_k - \lambda_k^{\text{PSPG}} \nabla f(x_k)) - x_k.$$

Suponha, sem perda de generalidade, que $\hat{\Omega}$ seja definido pelas desigualdades

$$(a^i)^T x - [b]_i \leq 0 \quad \text{para todo } i = 1, \dots, q.$$

Seja $i \in \{q+1, \dots, p\}$. Então,

$$(a^i)^T x_k - [b]_i < -[\delta_k]_i.$$

Suponha que $\alpha \geq 0$ seja tal que

$$(a^i)^T (x_k + \alpha p_k) - [b]_i = 0.$$

Então,

$$\alpha = \frac{[b]_i - (a^i)^T x_k}{(a^i)^T p_k}.$$

Portanto,

$$\alpha > \frac{[\delta_k]_i}{\|a^i\| \|p_k\|}.$$

Como Ω é compacto, a sequência $\{x_k\}$ é limitada e, então, a sequência $\{p_k\}$

também é limitada. Ou seja $\|p_k\| \leq c$ para todo k . Portanto,

$$\alpha > \frac{[\delta_k]_i}{\|a^i\|_c} \geq \frac{\min\{[\delta_k]_i\}}{\max\{\|a^i\|_c\}} \equiv \alpha_{\min}.$$

Isso implica que o primeiro ponto da forma $x_k + \alpha_{\max}p_k$ que é testado no método PSPG está longe de $x_k + \alpha_{\min}p_k$ para $\alpha_{\min} > 0$. Portanto, como $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ para todo k , a sequência $\{x_k\}_{k \in K_2}$ pode ser pensada, depois de renomeados seus índices, como sendo gerada pelo Algoritmo 2.6 aplicado à minimização de f em $\hat{\Omega}$ (tomando $t_{\text{inicial}} = \alpha_{\max}$). Portanto, qualquer ponto limite x^* da sequência é um ponto estacionário. Como $\Omega \subset \hat{\Omega}$, isso implica que x^* é um ponto estacionário de (2.8). Então, $\lim_{k \rightarrow K_2} \|g_P(x_k, \delta_k)\| = 0$. Portanto, para $k \in K_2$ suficientemente grande, temos que $\|g_P(x_k, \delta_k)\|_{\infty} \leq \epsilon$ e GENLIN teria parado em x_k . Isso contradiz a hipótese de que $\{x_k\}$ é infinita.

No caso em que há um número finito de iterações de PSPG, temos que, para k suficientemente grande, todas as iterações são internas. Mais ainda, depois de um número finito de iterações, todos os iterandos pertencem à mesma face F_I . Pela Hipótese 1, isso implica que existe k tal que $\|g_S(x_k)\|_{\infty} \leq \epsilon$. Portanto, nesta iteração devemos ter $\|g_P(x_k, \delta_k)\|_{\infty} \leq \epsilon$, caso contrário o próximo iterando seria obtido por PSPG.

□

2.6 Detalhes de implementação

Implementamos, em Fortran 77, duas novas versões de GENLIN, que chamamos de GENLIN-GPCG e GENLIN-NQC.

A versão original de GENLIN (que chamamos de, simplesmente, GENLIN) já estava disponível e implementada em Fortran 77. Ela utiliza, para calcular as projeções, a formulação primal (2.6). Para resolver este problema, utiliza a rotina QL, implementada por Powell (1983), modificada por Schittkowski (2004) e apresentada em Goldfarb e Idnani (1983). Esta rotina calcula as projeções usando álgebra linear densa e é ideal para problemas de pequeno e médio porte.

Para calcular as projeções, as duas novas versões de GENLIN utilizam a formulação (2.7). GENLIN-GPCG utiliza a implementação GPCG, apresen-

tada na Seção 1.1, para resolver os problemas de projeção de forma esparsa. Já GENLIN-NQC utiliza a implementação NQC, apresentada na Seção (1.2), para resolver os problemas de projeção, também de forma esparsa.

Todos os parâmetros padrão de GENLIN foram mantidos. O cálculo da matriz Z (veja Seção 2.1.3) é feito usando fatoração LQ e o algoritmo “irres- trito” usado é o algoritmo de busca linear com Newton truncado (Algoritmo 2.2). Para detalhes, veja Andretta et al. (2010).

A precisão da viabilidade das caixas e das restrições lineares ϵ_{viab} nos três algoritmos é de 10^{-8} . A precisão na rotina QL é de $\epsilon_{\text{QL}} = (\epsilon_{\text{viab}})^{1.25}$, e a pre- cisão nos algoritmos GPCG e NQC é de $\epsilon_{\text{GPCG}} = \epsilon_{\text{NQC}} = 10^{-8}$. O número máximo de iterações é de 5000, para os três algoritmos.

Como a matriz $\tilde{A}\tilde{A}^T$ da formulação (2.7) pode não ser definida positiva, optamos por resolver o problema

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} \quad \frac{1}{2}y^T(\tilde{A}\tilde{A}^T + I\gamma)y + (\tilde{b} - \tilde{A}\tilde{x})^Ty \\ &\text{sujeita a} \quad y_i \geq 0, \quad i = r + 1, r + 2, \dots, r + \tilde{m} + 2n, \end{aligned} \quad (2.20)$$

com $[\gamma]_i = \max\{10^{-16}, \gamma^0[d]_i\}$, tal que $(\tilde{A}\tilde{A}^T + I\gamma)$ é definida positiva, sendo d a diagonal da matriz $\tilde{A}\tilde{A}^T$ e $10^{-16} \leq \gamma^0 \leq 10^{-5}$.

Nas Seções 2.6.1 e 2.6.2, apresentamos detalhes da implementação de GENLIN- GPCG e GENLIN-NQC, respectivamente.

2.6.1 Detalhes da implementação de GENLIN-GPCG

A rotina GPCG possui um parâmetro de saída $\text{INFO}_{\text{GPCG}}$, que pode ter os seguintes valores:

- $\text{INFO}_{\text{GPCG}} = 0$: Sucesso. O critério de convergência $\left\|\nabla_{\Omega_{\square}}q(x)\right\|_2 \leq \epsilon_{\text{GPCG}}$ foi satisfeito;
- $\text{INFO}_{\text{GPCG}} = 1$: Número máximo de iterações foi atingido;
- $\text{INFO}_{\text{GPCG}} = 2$: Não foi encontrado um α que satisfaça a condição de decréscimo suficiente da busca projetada (1.17);

- $\text{INFO}_{\text{GPCG}} = 3$: Progresso insuficiente;
- $\text{INFO}_{\text{GPCG}} = 4$: Matriz Hessiana não é definida positiva;
- $\text{INFO}_{\text{GPCG}} = 5$: Valor da função tende a menos infinito. Neste caso, valor da função menor do que -10^{20} .

Independentemente do critério de convergência satisfeito por GPCG, verificamos a viabilidade do ponto obtido. Nosso objetivo na projeção é obter um ponto viável com tolerância ϵ_{viab} , ou seja, estamos interessados em um ponto x que satisfaça $\rho_{\text{viab}}(x) \leq \epsilon_{\text{viab}}$, com

$$\rho_{\text{viab}}(x) = \max_{\substack{i=1,\dots,m \\ j=1,\dots,n}} \{0, \|Ax - b\|, [Cx - d]_i, [l - x]_j, [x - u]_j\}. \quad (2.21)$$

Para que isso aconteça, utilizamos o seguinte procedimento, usando $\epsilon_{\text{GPCG}} = 10^{-8}$, $\gamma^0 = 10^{-16}$ e $R = \emptyset$.

Passo 1. *Primeira tentativa.*

Chame a rotina GPCG com ϵ_{GPCG} e γ^0 . Seja $\bar{x}$ o ponto projetado e $\text{INFO}_{\text{GPCG}}$ o status de saída da rotina. Faça $R = R \cup \{\bar{x}\}$.

Se $\rho_{\text{viab}}(\bar{x}) \leq \epsilon_{\text{viab}}$, então pare e devolva $\bar{x}$ como solução declarando “Sucesso na projeção”.

Se $\text{INFO}_{\text{GPCG}} = 0$, então vá para o Passo 2. Senão, vá para o Passo 3.

Passo 2. *Tentativa de satisfazer $\rho_{\text{viab}}(x) \leq \epsilon_{\text{viab}}$ utilizando tolerância mais justa.*

Se $\epsilon_{\text{GPCG}} > 10^{-16}$,

faça $\epsilon_{\text{GPCG}} = 10^{-2}\epsilon_{\text{GPCG}}$.

Se $\gamma^0 < 10^{-8}$, faça $\gamma^0 = 10\gamma^0$ e repita o Passo 1.

Senão, vá para o Passo 4.

Passo 3. *Tentativa com γ^0 maior ou tolerância menos restrita.*

Se $\gamma^0 < 10^{-8}$, então faça $\gamma^0 = 10\gamma^0$ e repita o Passo 1.

Senão,

faça $\epsilon_{\text{GPCG}} = 10\epsilon_{\text{GPCG}}$.

Chame a rotina GPCG com ϵ_{GPCG} e γ^0 . Seja $\bar{x}$ o ponto projetado e $\text{INFO}_{\text{GPCG}}$ o status de saída da rotina.

Faça $R = R \cup \{\bar{x}\}$.

Se $\rho_{\text{viab}}(\bar{x}) \leq \epsilon_{\text{viab}}$, então pare e devolva $\bar{x}$ como solução declarando “*Sucesso na projeção*”.

Passo 4. *Tratamento de perda de viabilidade.*

Seja $\hat{x} = \operatorname{argmin}_{x \in R} \{\rho_{\text{viab}}(x)\}$. Se $\rho_{\text{viab}}(\hat{x}) \leq \sqrt{\epsilon_{\text{viab}}}$, então pare e devolva $\hat{x}$ como solução declarando “*Perda parcial de viabilidade*”.

Senão, pare declarando “*Falha na projeção*”.

2.6.2 Detalhes da implementação de GENLIN-NQC

A rotina NQC possui um parâmetro de saída INFO_{NQC} , que pode ter os seguintes valores:

- $\text{INFO}_{\text{NQC}} = 0$: Sucesso. O critério de convergência $\|P_{\Omega_{\square}}(x_k - \nabla q(x_k)) - x_k\| < \epsilon_{\text{NQC}}$ foi satisfeito;
- $\text{INFO}_{\text{NQC}} = 4$: Ciclo encontrado.
- $\text{INFO}_{\text{NQC}} < 0$: Problema na matriz Hessiana.

Independentemente do critério de convergência satisfeito por NQC, verificamos a viabilidade do ponto obtido. Nosso objetivo na projeção é obter um ponto viável com tolerância ϵ_{viab} , ou seja, estamos interessados em um ponto x que satisfaça $\rho_{\text{viab}}(x) \leq \epsilon_{\text{viab}}$, com $\rho_{\text{viab}}(x)$ como em (2.21).

Para que isso aconteça, utilizamos o seguinte procedimento, usando $\epsilon_{\text{NQC}} = 10^{-8}$, $\gamma^0 = 10^{-16}$ e $R = \emptyset$.

Passo 1. *Primeira tentativa.*

Chame a rotina NQC com ϵ_{NQC} e γ^0 . Sejam $\bar{x}$ o ponto projetado e INFO_{NQC} o status de saída da rotina.

Se INFO_{NQC} é menor que zero ou igual a 4, então

Se $\gamma^0 < 10^{-5}$, faça $\gamma^0 = 10\gamma^0$ e repita o Passo 1.

Senão,

faça $R = R \cup \{\bar{x}\}$.

Se $\rho_{\text{viab}}(\bar{x}) \leq \epsilon_{\text{viab}}$, então pare e devolva $\bar{x}$ como solução declarando “*Sucesso na projeção*”.

Se $\text{INFO}_{\text{NQC}} = 0$, então vá para o Passo 2. Senão, vá para o Passo 3.

Passo 2. *Tentativa de satisfazer $\rho_{\text{viab}}(x) \leq \epsilon_{\text{viab}}$ utilizando tolerância mais justa.*

Se $\epsilon_{\text{GPCG}} > 10^{-16}$, faça $\epsilon_{\text{GPCG}} = 10^{-2}\epsilon_{\text{GPCG}}$. Repita o Passo 1.

Senão, vá para o Passo 4.

Passo 3. *Tentativa de tolerância menos restrita.*

Faça $\epsilon_{\text{NQC}} = 10\epsilon_{\text{NQC}}$. Chame a rotina NQC com ϵ_{NQC} e γ^0 . Seja $\bar{x}$ o ponto projetado e INFO_{NQC} o status de saída da rotina.

Faça $R = R \cup \{\bar{x}\}$.

Se $\rho_{\text{viab}}(\bar{x}) \leq \epsilon_{\text{viab}}$, então pare e devolva $\bar{x}$ como solução declarando “*Sucesso na projeção*”.

Passo 4. *Tratamento de perda de viabilidade.*

Seja $\hat{x} = \text{argmin}_{x \in R} \{\rho_{\text{viab}}(x)\}$. Se $\rho_{\text{viab}}(\hat{x}) \leq \sqrt{\epsilon_{\text{viab}}}$, então pare e devolva $\hat{x}$ como solução declarando “*Perda parcial de viabilidade*”.

Senão, pare declarando “*Falha na projeção*”.

2.7 Resultados numéricos

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos obtidos ao aplicar GENLIN, GENLIN-GPCG e GENLIN-NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer com até 500 variáveis, restrições de caixa e de 1 a 2000 restrições line-

ares, totalizando 133 problemas. Vale observar que, apesar de GPCG e NQC terem sido desenvolvidos para resolver problemas esparsos, GENLIN utiliza álgebra linear densa em outros pontos de seu código, o que nos leva a solucionar problemas de menor porte.

Os códigos foram compilados em gfortran, usando o sistema operacional Ubuntu 11.10. Os experimentos numéricos foram realizados em um PC com Processador 2ª Geração Intel Core i3 2310M, 2.1 GHz, 4GB de memória.

O critério de convergência usado nestes experimentos é que a norma infinito do gradiente projetado no ponto deve ser menor ou igual a $\epsilon_{otim} = 10^{-8}$ ($\|g_P(x_k, \delta_k)\|_\infty \leq 10^{-8}$). Foi determinado um número máximo de iterações (200000) e um número máximo de avaliações de função (1000000).

Os problemas NASH, MODEL, ARGLALE, ARGLBLE, ARGLCLE e LINCONT são inviáveis e, de fato, nenhuma das três versões de GENLIN encontrou um ponto inicial viável. Portanto, estes problemas foram eliminados dos experimentos. Daqui em diante, serão considerados somente os 127 problemas restantes, apresentados nas Tabelas 2.1-2.3. Nestas tabelas, Nome é o nome do problema; n é o número de variáveis; nl é o número de variáveis com limitante inferior; nu é o número de variáveis com limitante superior; $mleq$ é o número de restrições lineares de igualdade; e $mlin$ é o número de restrições lineares de desigualdade.

Os resultados obtidos pela aplicação de GENLIN, GENLIN-GPCG e GENLIN-NQC para a resolução dos problemas da coleção CUTer podem ser encontrados nas Tabelas 2.4-2.6, 2.7-2.9 e 2.10-2.12, respectivamente. Nestas tabelas, Tempo é o tempo de execução em segundos; k é o número de iterações; n_f é o número de avaliações da função; n_g é o número de avaliações do gradiente; n_h é o número de avaliações da Hessiana; n_{cg} é o número de iterações do Gradiente Conjugado; n_{spg} é o número de iterações do PSPG; $n_{f_{spg}}$ é o número de avaliações da função realizadas nas iterações do PSPG; n_{nt} é o número de iterações do Newton truncado; $n_{f_{nt}}$ é o número de avaliações da função realizadas nas iterações do Newton truncado; iproj é o número de projeções feitas; $f(x^*)$ é o valor da função no ponto final x^* obtido pelos algoritmos; cnorm é a norma das restrições lineares; e gpsupn é a norma do gradiente projetado descontínuo.

Nas Tabelas 2.4-2.6, ql é o número de vezes que é chamada a rotina QL; nas Tabelas 2.7-2.9, GPCG e iGPCG são o número de vezes que é chamada a rotina GPCG e o número total de iterações feitas nessa rotina, respectivamente; nas Tabelas 2.10-2.12, NQC e iNQC são o número de vezes que é chamada a rotina NQC e o número total de iterações feitas nessa rotina, respectivamente.

Nas Tabelas 2.4-2.12, inf é igual a zero, se o critério de convergência é satisfeito; igual a 2, se o método parou por progresso insuficiente; igual a 4, se o método parou porque o valor da função tende a menos infinito, neste caso, o valor da função fica menor do que -10^{20} ; igual a 6, se o tamanho do passo é muito pequeno na busca linear; igual a 7, se o número máximo de iterações é atingido; igual a 10, se o método parou porque a direção não pode ser calculada devido a erros ocorridos durante seus cálculos; igual a -30, se o método parou em um ponto viável, mas um problema ocorreu na projeção; igual a -40, se o método parou em um ponto inviável; igual a -90, se ocorreu um erro ao avaliar a função; igual a 99, se o tempo de execução foi excedido. O tempo máximo de execução nos três métodos é de 2000 segundos.

Devido a problemas de condicionamento na formulação (2.7), muitos problemas não satisfazem o critério de convergência ao aplicar GENLIN-GPCG e GENLIN-NQC nos problemas apresentados nas Tabelas 2.1-2.3.

Em 14 problemas, a aplicação do método GENLIN-GPCG resulta em pontos inviáveis. Em 12 problemas, a aplicação do método GENLIN-NQC resulta em pontos inviáveis. Em todos os problemas, a aplicação do método GENLIN resulta em pontos viáveis. Pode-se ver que GENLIN é mais robusto.

A fim de comparar os resultados obtidos ao aplicar GENLIN, GENLIN-GPCG e GENLIN-NQC, dizemos que dois valores de função f_1 e f_2 são iguais se

$$|f_1 - f_2| \leq \max\{10^{-10}, 10^{-6} \min\{|f_1|, |f_2|\}\}.$$

A seguir comparamos o desempenho de GENLIN-GPCG com GENLIN-NQC. Para fazer uma comparação melhor, excluimos os 14 problemas para os quais o método GENLIN-GPCG pára com inf igual a -40, os 7 problemas

para os quais GENLIN-NQC pára com inf igual a -40 e os 5 problemas para os quais o método GENLIN-NQC pára por tempo de execução excedido, em um total de 19 problemas distintos. Os 2 problemas para os quais o método GENLIN-GPCG pára por tempo de execução excedido não são excluídos ao fazer as comparações, já que o método pára em um ponto viável. Ao comparar GENLIN-GPCG com GENLIN-NQC nos 108 problemas restantes, podemos ver que:

- Em 17 problemas, GENLIN-GPCG obteve valor de função melhor.
- Em 7 problemas, GENLIN-NQC obteve valor de função melhor.
- nos 84 problemas restantes, o valor da função é igual ao aplicar ambos os métodos.

Estamos interessados em comparar, basicamente, o tempo gasto por cada método e a qualidade da solução encontrada por cada método. Para visualizar melhor esta comparação, construímos os gráficos do perfil de desempenho, que podem ser vistos nas Figuras 2.1 e 2.2. Nestes gráficos, usando o tempo como medida de desempenho, se um ponto da curva correspondente a um dos métodos vale I no eixo das abscissas e J no eixo das ordenadas, significa que este método resolve $(J \times 100)\%$ dos problemas em um tempo menor ou igual a I vezes o tempo mais rápido. Os pontos mais significativos do gráfico são o mais à esquerda e o mais à direita. À esquerda medimos a *eficiência* dos métodos (verificamos a porcentagem de problemas para os quais cada método é o mais rápido) e à direita medimos a *robustez* (verificamos a porcentagem de problemas que cada método foi capaz de resolver).

Para a construção dos gráficos das Figuras 2.1 e 2.2, comparamos os tempos de execução de GENLIN-GPCG e de GENLIN-NQC. Para os gráficos da Figura 2.1, quando um dos dois métodos encontra valor de função maior para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução. Para os gráficos da Figura 2.2, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Considerando o número de problemas para os quais GENLIN-GPCG e GENLIN-NQC param em pontos inviáveis (14 problemas para GENLIN-GPCG

e 12 problemas para GENLIN-NQC) poderíamos dizer que GENLIN-NQC é um pouco mais robusto que GENLIN-GPCG. Mas, observando os gráficos das Figuras 2.1 e 2.2, também poderíamos dizer que GENLIN-GPCG é um pouco mais robusto que GENLIN-NQC, já que achou melhores soluções em um número maior de problemas (Robustez - GENLIN-GPCG 89,81%, GENLIN-NQC 80,55%).

GENLIN-NQC é um pouco mais eficiente que GENLIN-GPCG tanto quando penalizamos os métodos que encontraram pontos com valores de função piores (Eficiência - GENLIN-GPCG 70,37%, GENLIN-NQC 75%), como quando usamos na comparação apenas os problemas em que os valores de função são iguais (Eficiência - GENLIN-GPCG 72,36%, GENLIN-NQC 92,10%).

A seguir comparamos o desempenho de GENLIN-GPCG com GENLIN. Para fazer uma comparação melhor, excluimos os 14 problemas para os quais o método GENLIN-GPCG pára com inf igual a -40. Ao comparar GENLIN com GENLIN-GPCG nos 113 problemas restantes, podemos ver que:

- Em 10 problemas, GENLIN obteve valor de função melhor. Destes 10 problemas, só em 1 problema GENLIN-GPCG parou com inf igual a zero; nos 9 problemas restantes, GENLIN-GPCG parou em um ponto viável que não satisfaz o critério de convergência.
- Em 7 problemas, GENLIN-GPCG obteve valor de função melhor. É significativo dizer que nesses 7 problemas GENLIN-GPCG pára em um ponto viável, mas que não satisfaz o critério de convergência. Esses problemas são: SIPOW1M, OET3, LOTSCHD, KSIP e GMNCASE4, para os quais GENLIN-GPCG pára com inf igual a 2, e WATER e QPC-BLEND, para os quais GENLIN-GPCG para com inf igual a -30 e inf igual a 6, respectivamente.
- Nos 96 problemas restantes, o valor da função é igual ao aplicar ambos os métodos.

Estamos interessados em comparar, basicamente, o tempo gasto por GENLIN e GENLIN-GPCG e a qualidade da solução encontrada por cada método. Para visualizar melhor esta comparação, construímos os gráficos do perfil de desempenho, que podem ser vistos nas Figuras 2.3 e 2.4. Nestes gráficos, usa-

mos o tempo como medida de desempenho.

Para a construção dos gráficos das Figuras 2.3 e 2.4, comparamos os tempos de execução de GENLIN e de GENLIN-GPCG. Para os gráficos da Figura 2.3, quando um dos dois métodos encontra valor de função maior para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução. Para os gráficos da Figura 2.4, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Observando os dados das Tabelas 2.4-2.6, 2.7-2.9 e os gráficos das Figuras 2.3 e 2.4, podemos notar que GENLIN é mais robusto (Robustez - GENLIN 100%, GENLIN-GPCG 93,80%) e mais eficiente que GENLIN-GPCG, tanto quando penalizamos os métodos que encontraram pontos com valores de função piores (Eficiência - GENLIN 96,46%, GENLIN-GPCG 52,21%), como quando usamos na comparação apenas os problemas em que os valores de função são iguais (Eficiência - GENLIN 96,26%, GENLIN-GPCG 55,14%).

A seguir, comparamos o desempenho de GENLIN com GENLIN-NQC. Para fazer uma comparação melhor, excluimos os 7 problemas para os quais o método GENLIN-NQC pára com inf igual a -40 e os 5 problemas para os quais pára por tempo de execução excedido. Ao comparar GENLIN com GENLIN-NQC nos 115 problemas restantes, podemos ver que:

- Em 20 problemas, GENLIN obteve valor de função melhor. Nestes 20 problemas, GENLIN-NQC parou com inf igual a -30.
- Em 4 problemas, GENLIN-NQC obteve valor de função melhor. Desses 4 problemas, GENLIN-NQC pára em 2 problemas (DEGENLPB e KSIP) com inf igual a 2.
- Nos 91 problemas restantes, o valor da função é igual ao aplicar ambos os métodos.

Estamos interessados em comparar, o tempo gasto por cada método e a qualidade da solução encontrada por cada método. Para visualizar melhor esta comparação, construímos os gráficos do perfil de desempenho, que podem ser vistos nas Figuras 2.5-2.6. Nestes gráficos, usamos o tempo como medida de desempenho.

Para a construção dos gráficos das Figuras 2.5-2.6, comparamos os tempos de execução de GENLIN e de GENLIN-NQC. Para os gráficos da Figura 2.5, quando um dos dois métodos encontra valor de função maior para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução. Para os gráficos da Figura 2.6, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Observando os dados das Tabelas 2.4-2.6, 2.10-2.12 e os gráficos das Figuras 2.5 e 2.6, podemos notar que GENLIN é mais robusto (Robustez - GENLIN 98,26%, GENLIN-NQC 83,47%) e mais eficiente que GENLIN-NQC, tanto quando penalizamos os métodos que encontraram pontos com valores de função piores (Eficiência - GENLIN 86,95%, GENLIN-NQC 66,08%), como quando usamos na comparação apenas os problemas em que os valores de função são iguais (Eficiência - GENLIN 86,17%, GENLIN-NQC 78,72%).

Tabela 2.1: Problemas com apenas restrições lineares selecionados da coleção CUTeR

Nome	n	nl	nu	$mleq$	$mlin$
EXTRASIM	2	1	0	1	0
HS9	2	0	0	1	0
TAME	2	2	0	1	0
HS21	2	2	2	0	1
HS35MOD	2	2	0	0	1
HUBFIT	2	1	0	0	1
LSQFIT	2	1	0	0	1
BOOTH	2	0	0	2	0
HIMMELBA	2	0	0	2	0
SUPERSIM	2	1	0	2	0
SIMPLIPA	2	2	0	0	2
ZECEVIC2	2	2	2	0	2
HS24	2	2	0	0	2
SIMPLLPB	2	2	0	0	3
PT	2	0	0	0	501
SIPOW1M	2	0	0	0	288
SIPOW1	2	0	0	0	288
SIPOW2M	2	0	0	0	144
SIPOW2	2	0	0	0	144
HS28	3	0	0	1	0
HS62	3	3	3	1	0
HS35I	3	3	3	0	1
HS35	3	3	0	0	1
HS36	3	3	3	0	1
HS37	3	3	3	0	1
STANCMIN	3	3	0	0	2
ZANGWIL3	3	0	0	3	0
TFI2	3	0	0	0	101
TFI3	3	0	0	0	16
OET1	3	0	0	0	1002
HONG	4	4	4	1	0
HS41	4	4	4	1	0
LIN	4	4	4	2	0
HS76I	4	4	4	0	2
HS76	4	4	0	0	2
S277-280	4	4	0	0	4
HS44NEW	4	4	0	0	2
HS44	4	4	0	0	2
BIGGSC4	4	4	4	0	13
HATFLDH	4	4	4	0	13
OET3	4	0	0	0	1002
SIPOW3	4	0	0	0	653
SIPOW4	4	0	0	0	2

Tabela 2.2: Problemas com apenas restrições lineares selecionados da coleção CUTeR

Nome	n	nl	nu	$mleq$	$mlin$
HS48	5	0	0	2	0
HS49	5	0	0	2	0
BT3	5	0	0	3	0
HS50	5	0	0	3	0
HS51	5	0	0	3	0
HS52	5	0	0	3	0
HS53	5	5	5	3	0
LSNNODOC	5	3	3	4	0
HS268	5	0	0	0	2
S268	5	0	0	0	2
HS86	5	5	0	0	2
EXPFITA	5	0	0	0	2
EXPFITB	5	0	0	0	3
EXPFITC	5	0	0	0	12
HS54	6	6	6	1	0
HS55	6	6	2	6	0
PENTAGON	6	0	0	0	15
HS21MOD	7	4	4	0	1
EQC	7	7	7	0	3
QCNEW	7	7	7	0	3
QC	7	7	7	0	1
DUALC2	7	7	7	1	228
HS105	8	8	8	0	1
AVGASA	8	8	8	0	10
AVGASB	8	8	8	0	10
DUALC5	8	8	8	1	277
DUALC8	8	8	8	1	502
DUALC1	9	9	9	1	214
HS112	10	10	0	3	0
ODFITS	10	10	0	6	0
GENHS28	10	0	0	8	0
PORTFL1	12	12	12	1	0
PORTFL2	12	12	12	1	0
PORTFL3	12	12	12	1	0
PORTFL4	12	12	12	1	0
PORTFL6	12	12	12	1	0
LOTSCHD	12	12	0	7	0
HS118	15	15	15	0	1
HS119	16	16	16	8	0
FCCU	19	19	0	8	0
RES	20	20	20	12	2
DEGENLPA	20	20	20	15	0
DEGENLPB	20	20	20	15	0

Tabela 2.3: Problemas com apenas restrições lineares selecionados da coleção CUTEr

Nome	n	nl	nu	$mleq$	$mlin$
KSIP	20	0	0	0	879
MAKELA4	21	0	0	0	40
WATER	31	31	31	10	0
LOADBAL	31	31	11	11	0
HIMMELBJ	43	43	0	14	0
DALLASS	46	46	46	31	0
AVION2	49	49	49	15	0
GOFFIN	51	0	0	0	50
DUAL4	75	75	75	1	0
LINSPANH	81	81	81	33	0
SPANHYD	81	81	81	33	0
QPCBLEND	83	83	0	43	23
QPNBLEND	83	83	0	43	23
DUAL1	85	85	85	1	0
DUAL2	96	96	96	1	0
HIMMELBI	100	100	100	0	12
DUAL3	111	111	111	1	0
SMBANK	117	117	117	64	0
QPCBOEI2	143	143	54	4	181
QPNBOEI2	143	143	54	4	181
AGG	163	163	0	36	452
HYDROELS	167	167	167	0	4
GMNCASE1	175	0	0	0	300
GMNCASE4	175	0	0	0	350
GMNCASE2	175	0	0	0	1050
GMNCASE3	175	0	0	0	1050
SSEBLIN	192	192	168	48	24
DALLASM	196	196	196	151	0
PRIMALC1	230	215	0	0	1
PRIMALC2	231	229	0	0	1
PRIMALC5	287	278	0	0	1
PRIMAL1	325	1	0	0	85
QPCBOEI1	384	384	156	9	431
QPNBOEI1	384	384	156	9	431
QPCSTAIR	385	379	6	209	147
QPNSTAIR	385	379	6	209	147
STEENBRA	432	432	0	108	0
STATIC3	434	144	0	96	0
STEENBRB	468	468	0	108	0
STEENBRD	468	468	0	108	0
STEENBRF	468	468	0	108	0

Figura 2.1: Curva de perfil de desempenho comparando GENLIN-GPCG com GENLIN-NQC usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, quando um dos dois métodos encontra valor de função diferente para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução.

Figura 2.2: Curva de perfil de desempenho comparando GENLIN-GPCG com GENLIN-NQC usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Figura 2.3: Curva de perfil de desempenho comparando GENLIN com GENLIN-GPCG usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, quando um dos dois métodos encontra valor de função diferente para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução.

Figura 2.4: Curva de perfil de desempenho comparando GENLIN com GENLIN-GPCG usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Figura 2.5: Curva de perfil de desempenho comparando GENLIN com GENLIN-NQC usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, quando um dos dois métodos encontra valor de função diferente para um mesmo problema, consideramos que este método levou tempo infinito para encontrar a solução.

Figura 2.6: Curva de perfil de desempenho comparando GENLIN com GENLIN-NQC usando tempo como medida de desempenho. O segundo gráfico é apenas um destaque da região mais à esquerda do primeiro gráfico. Para a construção destes gráficos, consideramos apenas os problemas para os quais ambos os métodos chegaram ao mesmo valor de função.

Tabela 2.4: Resultados da aplicação de GENLIN na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n _f	n _g	n _h	n _{cg}	n _{spg}	n _{f_{spg}}	n _{nt}	n _{f_{nt}}	iproj	ql	f	cnorm	gsupn
EXTRASIM	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	3	3	1.0000D+00	4.4D-16	0.0D+00
HS9	0.00	0	2	6	2	1	1	0	0	1	5	4	4	-5.0000D-01	0.0D+00	1.3D-12
TAME	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	0.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
HS21	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	4	4	-9.9960D+01	0.0D+00	0.0D+00
HS35MOD	0.00	0	3	3	3	2	2	0	0	2	2	3	3	2.5000D-01	0.0D+00	0.0D+00
HUBFTT	0.00	0	5	5	5	3	4	1	1	1	3	5	5	1.6894D-02	0.0D+00	2.8D-17
LSQFIT	0.00	0	5	5	5	3	4	1	1	1	3	5	5	3.3787D-02	0.0D+00	5.6D-17
BOOTH	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	0.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
HIMMELBA	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	0.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
SUPERSIM	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	6.6667D-01	0.0D+00	0.0D+00
SIMPLIPA	0.00	0	2	2	2	0	0	1	1	1	0	4	4	1.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
ZECEVIC2	0.00	0	3	4	3	1	1	1	2	1	1	5	5	-4.1250D+00	0.0D+00	0.0D+00
HS24	0.00	0	3	3	3	2	2	0	0	2	2	3	3	-1.0000D+00	2.2D-16	4.4D-16
SIMPLLPB	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	3	3	1.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
PT	0.00	0	4	4	4	1	1	2	2	1	1	5	5	1.7839D-01	0.0D+00	0.0D+00
SIPOWIM	0.00	0	15	15	15	5	5	9	9	5	5	12	12	-1.0000D+00	0.0D+00	1.2D-14
SIPOW1	0.00	0	15	15	15	5	5	9	9	5	5	12	12	-1.0000D+00	0.0D+00	6.1D-17
SIPOW2M	0.00	0	14	14	14	5	5	8	8	5	5	11	11	-1.0000D+00	0.0D+00	6.2D-15
SIPOW2	0.00	0	15	15	15	6	6	8	8	6	6	11	11	-1.0000D+00	0.0D+00	6.1D-17
HS28	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	3	3	1.8242D-30	2.0D-15	2.7D-15
HS62	0.00	0	8	9	8	7	13	0	0	7	8	4	4	-2.6273D+04	0.0D+00	1.4D-11
HS35I	0.00	0	3	3	3	2	3	0	0	2	2	4	4	1.1111D-01	0.0D+00	6.7D-16
HS35	0.00	0	3	3	3	2	3	0	0	2	2	4	4	1.1111D-01	0.0D+00	6.7D-16
HS36	0.00	0	4	4	4	3	3	0	0	3	3	4	4	-3.3000D+03	0.0D+00	3.6D-15
HS37	0.00	0	6	6	6	5	5	0	0	5	5	4	4	-3.4560D+03	0.0D+00	1.4D-10
STANCMIN	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	4.2500D+00	0.0D+00	1.1D-16
ZANGWIL3	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	0.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
TFT2	0.00	0	22	22	22	11	11	10	10	11	11	13	13	6.4903D-01	0.0D+00	4.3D-15
TFT3	0.00	0	5	5	5	2	2	2	2	2	2	6	6	4.3012D+00	0.0D+00	1.4D-16
OET1	0.00	0	13	13	13	6	6	6	6	6	6	9	9	5.3824D-01	5.6D-17	1.1D-14
HONG	0.00	0	7	7	7	6	16	0	0	6	6	4	4	2.2571D+01	0.0D+00	2.8D-09
HS41	0.00	0	6	6	6	4	4	1	1	4	4	5	5	1.9259D+00	0.0D+00	1.6D-10
LIN	0.00	0	2	3	2	0	0	1	2	0	0	5	5	-1.7576D-02	5.0D-13	4.4D-13
HS76I	0.00	0	6	6	6	4	6	1	1	4	4	5	5	-4.6818D+00	0.0D+00	0.0D+00
HS76	0.00	0	6	6	6	4	6	1	1	4	4	5	5	-4.6818D+00	0.0D+00	0.0D+00
S277-280	0.00	0	4	4	4	3	3	0	0	3	3	3	3	5.0762D+00	1.1D-16	1.9D-12
HS44NEW	0.00	0	6	6	6	5	5	0	0	5	5	3	3	-1.5000D+01	0.0D+00	0.0D+00
HS44	0.00	0	6	6	6	3	3	2	2	3	3	5	5	-1.5000D+01	0.0D+00	0.0D+00
BIGGSC4	0.00	0	4	4	4	2	2	1	1	1	2	4	4	-2.4375D+01	0.0D+00	0.0D+00
HATFLDH	0.00	0	3	3	3	1	1	1	1	1	1	5	5	-2.4375D+01	0.0D+00	0.0D+00
OET3	0.00	0	4	4	4	1	1	2	2	1	1	5	5	4.5051D-03	1.1D-16	5.6D-17
SIPOW3	0.01	0	9	9	9	5	5	3	3	5	5	6	6	5.3466D-01	0.0D+00	0.0D+00

Tabela 2.5: Resultados da aplicação de GENLIN na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n_f	n_g	n_h	n_{cg}	n_{spg}	$n_{f_{spg}}$	n_{nt}	$n_{f_{nt}}$	iproj	ql	f	cnorm	gsupn
SIPOW4	0.01	0	11	11	11	7	7	3	3	7	7	6	6	2.7236D-01	0.0D+00	2.8D-17
HS48	0.00	0	2	2	2	1	3	0	0	1	1	3	3	6.3109D-30	1.8D-15	3.6D-15
HS49	0.00	0	20	20	20	19	40	0	0	19	19	4	4	1.0600D-11	5.3D-15	5.0D-09
BT3	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	4.0930D+00	4.2D-15	2.7D-15
HS50	0.00	0	10	10	10	9	18	0	0	9	9	3	3	1.1734D-29	6.6D-14	6.7D-15
HS51	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	3	3	1.7749D-30	1.3D-15	1.8D-15
HS52	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	5.3267D+00	2.2D-16	3.7D-15
HS53	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	4.0930D+00	3.3D-16	1.3D-15
LSNNODOC	0.00	0	7	7	7	5	5	1	1	5	5	5	5	1.2311D+02	8.9D-16	8.9D-16
HS268	0.00	0	7	20	7	4	15	2	15	4	4	5	5	7.2760D-12	0.0D+00	3.6D-09
S268	0.00	0	7	20	7	4	15	2	15	4	4	5	5	7.2760D-12	0.0D+00	3.6D-09
HS86	0.00	0	10	10	10	7	11	2	2	7	7	6	6	-3.2349D+01	8.9D-16	5.5D-13
EXPFITA	0.00	0	19	19	19	15	16	3	3	15	15	7	7	1.1366D-03	7.1D-15	2.3D-10
EXPFITB	0.00	0	24	24	24	19	19	4	4	19	19	8	8	5.0194D-03	6.7D-16	5.3D-15
EXPFITC	0.02	0	46	48	46	33	34	12	14	33	33	16	16	2.3303D-02	4.0D-15	2.4D-09
HS54	0.04	0	826	862	826	808	1619	17	52	808	809	21	21	-9.0349D-01	0.0D+00	1.4D-09
HS55	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	6.6667D+00	4.4D-16	2.2D-16
PENTAGON	0.00	0	15	15	15	14	19	0	0	14	14	4	4	1.3652D-04	2.2D-16	2.9D-10
HS21MOD	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	4	4	-9.5959D+01	0.0D+00	0.0D+00
EQC	0.00	0	2	2	2	0	0	1	1	0	0	4	4	-8.2954D+02	0.0D+00	0.0D+00
QCNEW	0.00	0	2	2	2	0	0	1	1	0	0	4	4	-8.0652D+02	0.0D+00	0.0D+00
QC	0.00	0	7	7	7	6	6	0	0	6	6	3	3	-9.5654D+02	0.0D+00	0.0D+00
DUALC2	0.00	0	7	7	7	5	7	1	1	5	5	5	5	3.5513D+03	0.0D+00	9.3D-13
HS105	0.02	0	24	30	24	21	68	2	8	21	21	6	6	1.0619D+03	0.0D+00	3.7D-09
AVGASA	0.00	0	4	4	4	3	5	0	0	3	3	4	4	-4.6319D+00	3.3D-16	4.4D-16
AVGASB	0.00	0	4	4	4	3	5	0	0	3	3	4	4	-4.4832D+00	3.3D-16	4.4D-16
DUALC5	0.00	0	5	5	5	4	8	0	0	4	4	4	4	4.2723D+02	2.2D-16	6.5D-13
DUALC8	0.01	0	11	12	11	8	10	2	3	8	8	6	6	1.8309D+04	0.0D+00	3.2D-11
DUALC1	0.00	0	12	13	12	9	12	2	3	9	9	6	6	6.1553D+03	0.0D+00	1.7D-12
HS112	0.01	0	22	31	22	19	73	2	11	19	19	6	6	-4.7761D+01	2.2D-16	6.6D-09
ODFITS	0.00	0	6	6	6	5	16	0	0	5	5	4	4	-2.3800D+03	1.1D-13	8.0D-10
GENHS28	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	9.2717D-01	3.1D-15	1.4D-15
PORTFL1	0.00	0	8	8	8	7	14	0	0	7	7	4	4	2.0486D-02	2.2D-16	1.1D-16
PORTFL2	0.00	0	9	9	9	8	12	0	0	8	8	4	4	2.9689D-02	0.0D+00	5.6D-17
PORTFL3	0.00	0	11	12	11	9	16	1	2	9	9	5	5	3.2750D-02	2.2D-16	5.6D-17
PORTFL4	0.00	0	8	8	8	7	14	0	0	7	7	4	4	2.6307D-02	4.4D-16	1.1D-16
PORTFL6	0.00	0	8	8	8	7	15	0	0	7	7	4	4	2.5792D-02	2.2D-16	1.1D-16
LOTSCHD	0.00	0	5	5	5	4	4	0	0	4	4	4	4	2.3984D+03	2.8D-14	1.4D-14
HS118	0.00	0	16	16	16	14	14	1	1	14	14	5	5	6.6482D+02	1.4D-14	1.8D-14
HS119	0.00	0	12	12	12	10	18	1	1	10	10	5	5	2.4490D+02	1.3D-15	2.5D-09
FCCU	0.00	0	7	32	6	5	12	1	1	5	30	5	5	1.1149D+01	2.7D-15	9.4D-09
RES	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	0.0000D+00	9.2D-15	0.0D+00

Tabela 2.6: Resultados da aplicação de GENLIN na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n_f	n_g	n_h	n_{cg}	n_{spg}	$n_{f_{spq}}$	n_{nt}	$n_{f_{nt}}$	iproj	ql	f	cnorm	gsupn
DEGENLPA	0.00	0	3	3	3	1	1	1	1	1	1	4	4	3.0604D+00	1.1D-16	5.5D-11
DEGENLPB	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	3	3	3.0731D+01	4.9D-16	2.3D-14
KSIP	0.06	0	23	25	23	17	79	5	7	17	17	9	9	5.7580D-01	2.2D-16	5.6D-09
MAKELA4	0.00	0	16	16	16	15	15	0	0	15	15	3	3	4.7740D-15	2.1D-15	6.9D-15
WATER	0.01	0	22	28	22	19	47	2	4	19	23	6	6	1.0549D+04	2.3D-13	6.1D-10
LOADBAL	0.01	0	21	22	21	17	59	3	4	17	17	7	7	4.5285D-01	1.4D-14	4.9D-09
HIMMELBJ	0.42	-90	979	5913	895	876	8001	102	593	876	5319	144	144	-1.9104D+03	2.0D-10	6.5D-01
DALLASS	0.02	0	49	60	49	45	294	3	13	45	46	7	7	-3.2393D+04	1.0D-13	4.2D-09
AVION2	0.01	0	5	5	5	4	38	0	0	4	4	4	4	9.4680D+07	3.6D-12	8.3D-09
GOFFIN	0.01	0	7	7	7	6	6	0	0	6	6	3	3	-6.8834D-15	4.0D-13	1.5D-14
DUAL4	0.02	0	19	19	19	17	62	1	1	17	17	5	5	7.4609D-01	1.1D-16	2.0D-09
LINSPANH	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	-7.7000D+01	1.4D-13	4.1D-13
SPANHYD	0.02	0	12	23	12	9	20	2	3	9	19	6	6	2.3974D+02	6.0D-13	6.6D-09
QPCBLEND	0.05	0	8	10	8	5	6	2	4	5	5	6	6	-7.8425D-03	6.9D-18	1.5D-16
QPCBLEND	0.10	0	20	22	20	14	16	5	7	14	14	9	9	-9.1361D-03	7.4D-15	2.3D-14
DUAL1	0.08	0	49	56	49	45	363	3	10	45	45	7	7	3.5013D-02	8.9D-16	2.5D-09
DUAL2	0.04	0	8	8	8	7	86	0	0	7	7	4	4	3.3734D-02	1.8D-15	2.1D-09
HIMMELBI	0.06	0	65	67	64	60	160	4	7	60	59	8	8	-1.7356D+03	5.7D-14	3.9D-09
DUAL3	0.09	0	30	54	29	26	223	3	6	26	47	7	7	1.3576D-01	1.1D-15	2.0D-09
SMBANK	0.27	0	54	69	54	48	748	5	20	48	48	8	8	-7.1293D+06	4.1D-10	4.2D-09
QPCBOE12	0.26	0	11	11	10	8	35	2	3	8	7	6	6	8.1720D+06	1.8D-12	5.7D-10
QPNBOE12	0.61	0	85	703	81	78	455	6	8	78	694	10	10	1.3714D+06	4.4D-12	2.7D-09
AGG	0.66	0	57	56	56	51	51	5	5	51	50	8	10	-3.5992D+07	7.1D-09	4.4D-10
HYDROELS	0.38	0	16	16	16	12	12	3	3	12	12	7	7	-3.5823D+06	4.1D-14	1.7D-10
GMNCASE1	0.20	0	16	16	16	15	28	0	0	15	15	4	4	2.6697D-01	4.2D-17	1.7D-09
GMNCASE4	0.19	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	5.9469D+03	1.8D-15	2.7D-15
GMNCASE2	0.58	0	28	28	28	26	62	1	1	26	26	5	5	-9.9445D-01	2.8D-17	4.1D-09
GMNCASE3	0.56	0	26	27	26	24	58	1	2	24	24	5	5	1.5252D+00	5.6D-17	6.4D-10
SSEBLIN	0.42	0	100	100	100	95	95	4	4	95	95	7	7	1.6171D+07	8.7D-11	1.8D-12
DALLASM	1.30	0	59	418	59	56	1397	2	5	56	412	6	6	-4.8198D+04	6.9D-13	3.5D-09
PRIMALC1	0.25	0	6	6	6	4	5	1	1	4	4	4	5	-6.1553D+03	2.7D-11	2.2D-13
PRIMALC2	0.31	0	5	6	5	2	2	2	3	2	2	6	6	-3.5513D+03	1.1D-10	1.7D-12
PRIMALC5	0.47	0	7	7	7	5	6	1	1	5	5	5	5	-4.2723D+02	1.7D-11	3.7D-13
PRIMAL1	0.64	0	3	3	3	1	1	1	1	1	1	5	5	-3.5013D-02	3.8D-16	2.9D-16
QPCBOE11	5.11	0	19	20	19	16	87	2	3	16	16	6	6	1.1504D+07	4.5D-13	2.4D-09
QPNBOE11	22.00	0	254	3646	253	245	3850	8	20	245	3625	12	12	6.7771D+06	1.3D-12	1.6D-09
QPCSTAIR	4.74	0	53	935	53	51	117	1	1	51	933	5	5	6.2044D+06	2.8D-14	6.6D-10
QPNSTAIR	6.88	0	155	2584	155	151	251	3	4	151	2579	7	7	5.1460D+06	8.5D-14	1.1D-09
STEENBRA	5.09	0	36	34	34	31	49	4	4	31	29	8	8	1.6958D+04	6.8D-13	2.8D-13
STATIC3	2.13	4	8	8	8	7	20	0	0	7	7	3	7	-1.0566D+20	8.3D-09	1.0D+99
STEENBRB	11.82	0	128	120	117	115	485	12	13	115	106	16	16	9.0759D+03	1.9D-12	5.4D-09
STEENBRD	11.13	0	117	115	108	105	494	11	13	105	101	15	15	9.1447D+03	2.6D-12	5.3D-09
STEENBRF	11.83	0	130	121	119	117	490	12	12	117	108	16	16	8.9919D+03	6.6D-11	5.4D-09

Tabela 2.7: Resultados da aplicação de GENLIN-GPCG na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n _f	n _g	n _h	n _{cg}	n _{spg}	n _{f_{spg}}	n _{nt}	n _{f_{nt}}	iproj	GPCG	iGPCG	f	cnorm	gsupn
EXTRASIM	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	3	3	4	1.0000D+00	2.2D-16	7.8D-16
HS9	0.00	0	2	6	2	1	1	0	0	1	5	4	3	3	-5.0000D-01	0.0D+00	1.3D-12
TAME	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	1	0.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
HS21	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	4	1	1	-1.0000D+02	0.0D+00	0.0D+00
HS35MOD	0.00	0	3	3	3	2	2	0	0	2	2	3	0	0	2.5000D-01	0.0D+00	0.0D+00
HUBFIT	0.00	0	5	5	5	3	4	1	1	3	3	5	2	2	1.6894D-02	0.0D+00	1.1D-16
LSQFIT	0.00	0	5	5	5	3	4	1	1	3	3	5	2	2	3.3787D-02	0.0D+00	2.8D-17
BOOTH	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	5	21	0.0000D+00	8.3D-12	0.0D+00
HIMMELBA	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	1	0.0000D+00	1.1D-14	0.0D+00
SUPERSIM	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	3	6.6667D-01	0.0D+00	2.2D-16
SIMPLLPA	0.00	0	3	3	3	1	1	1	1	1	1	4	4	10	1.0000D+00	3.8D-10	4.6D-10
ZECEVIC2	0.00	0	3	4	3	1	1	1	2	1	1	5	4	4	-4.1250D+00	4.4D-16	1.3D-15
HS24	0.00	0	3	3	3	2	2	0	0	2	2	3	1	1	-1.0000D+00	2.2D-16	1.8D-10
SIMPLLPB	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	3	3	5	1.1000D+00	0.0D+00	5.8D-11
PT	4.10	0	4	4	4	1	1	2	2	1	1	5	5	7455	1.7839D-01	7.0D-12	4.1D-11
SIPOW1M	71.30	2	121	904	69	61	9	59	894	61	9	62	101	409567	-1.0000D+00	4.8D-06	1.0D-05
SIPOW1	8.38	0	18	17	17	8	7	9	9	8	7	12	14	33862	-1.0000D+00	9.6D-13	6.1D-10
SIPOW2M	4.08	0	15	15	15	6	6	8	8	6	6	11	16	41986	-1.0000D+00	0.0D+00	5.0D-10
SIPOW2	1.75	0	15	15	15	6	6	8	8	6	6	11	10	11273	-1.0000D+00	2.1D-09	3.7D-09
HS28	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	3	1	1	1.8242D-30	2.0D-15	2.7D-15
HS62	0.01	0	8	9	8	7	13	0	0	7	8	4	3	75	-2.6273D+04	0.0D+00	1.3D-11
HS35I	0.00	0	3	3	3	2	3	0	0	2	2	4	2	2	1.1111D-01	0.0D+00	6.7D-16
HS35	0.00	0	3	3	3	2	3	0	0	2	2	4	2	2	1.1111D-01	0.0D+00	6.7D-16
HS36	0.00	0	4	4	4	3	3	0	0	3	3	4	2	4	-3.3000D+03	0.0D+00	3.1D-10
HS37	0.00	0	6	6	6	5	5	0	0	5	5	4	2	2	-3.4560D+03	0.0D+00	1.4D-10
STANCMIN	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	3	25	4.2500D+00	6.8D-12	3.6D-09
ZANGWIL3	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	2	0.0000D+00	1.4D-14	0.0D+00
TFI2	1.13	0	22	22	22	11	11	10	10	11	11	13	13	2030	6.4903D-01	3.6D-13	6.7D-10
TFI3	0.35	0	5	5	5	2	2	2	2	2	2	6	5	747	4.3012D+00	0.0D+00	1.4D-10
OET1	5.74	0	13	13	13	6	6	6	6	6	6	9	10	9125	5.3824D-01	1.3D-12	1.0D-10
HONG	0.00	0	7	7	7	6	16	0	0	6	6	4	4	19	2.2571D+01	0.0D+00	2.8D-09
HS41	0.00	0	6	6	6	4	4	1	1	4	4	5	5	7	1.9259D+00	1.5D-10	1.7D-10
LIN	0.00	0	2	3	2	0	0	1	2	0	0	5	4	4	-1.7576D-02	1.2D-09	1.8D-09
HS76I	0.00	0	7	7	7	5	7	1	1	5	5	5	3	6	-4.6818D+00	0.0D+00	4.6D-09
HS76	0.00	0	7	7	7	5	7	1	1	5	5	5	3	6	-4.6818D+00	0.0D+00	4.6D-09
S277-280	0.01	2	54	887	54	3	3	50	883	3	3	53	53	148	5.0762D+00	7.4D-09	1.9D-06
HS44NEW	0.00	0	6	6	6	5	5	0	0	5	5	3	1	2	-1.5000D+01	0.0D+00	3.6D-09
HS44	0.00	0	6	6	6	3	3	2	2	3	3	5	1	2	-1.5000D+01	0.0D+00	3.6D-09
BIGGSC4	0.00	0	4	4	4	2	2	1	1	2	2	4	2	13	-2.4375D+01	0.0D+00	3.0D-09
HATFLDH	0.00	0	3	3	3	1	1	1	1	1	1	5	5	30	-2.4375D+01	0.0D+00	3.0D-09
OET3	639.26	2	118	1173	61	59	2	58	1170	59	2	61	134	660825	4.5046D-03	1.2D-06	7.5D-07
SIPOW3	17.66	0	10	9	9	6	5	3	3	6	5	6	14	51368	5.3466D-01	2.4D-08	4.1D-10

Tabela 2.8: Resultados da aplicação de GENLIN-GPCG na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n _f	n _g	n _h	n _{cg}	n _{spg}	n _{f_{spg}}	n _{nt}	n _{f_{nt}}	iproj	GPCG	iGPCG	f	cnorm	gsupn
SIPOW4	60.31	0	12	12	12	8	8	3	3	8	8	6	21	91831	2.7236D-01	2.1D-09	7.0D-11
HS48	0.00	0	2	2	2	1	3	0	0	1	1	3	1	1	6.3109D-30	1.8D-15	3.6D-15
HS49	0.00	0	20	20	20	19	40	0	0	19	19	4	3	3	1.0600D-11	5.3D-15	4.9D-09
BT3	0.10	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	6	5019	4.0930D+00	6.6D-14	4.2D-11
HS50	0.12	0	10	10	10	9	18	0	0	9	9	3	2	5002	1.1734D-29	6.6D-14	6.7D-15
HS51	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	3	1	2	1.7749D-30	1.3D-15	1.8D-15
HS52	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	6	5.3267D+00	3.6D-09	3.0D-09
HS53	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	7	4.0930D+00	3.6D-09	2.9D-09
LSNNODOC	0.28	0	8	8	8	6	6	1	1	6	6	5	8	5046	1.2311D+02	1.0D-09	5.7D-09
HS268	0.00	0	7	20	7	4	15	2	15	4	4	5	2	7	7.2760D-12	0.0D+00	3.6D-09
S268	0.00	0	7	20	7	4	15	2	15	4	4	5	2	7	7.2760D-12	0.0D+00	3.6D-09
HS86	0.00	0	10	10	10	7	11	2	2	7	7	6	5	15	-3.2349D+01	1.8D-09	1.1D-09
EXPFITA	0.03	0	19	19	19	15	16	3	3	15	15	7	6	420	1.1366D-03	2.3D-09	4.7D-09
EXPFITB	0.57	0	27	27	27	22	22	4	4	22	22	8	9	2789	5.0194D-03	0.0D+00	2.9D-10
EXPFITC	36.47	0	42	109	41	29	29	12	80	29	28	16	34	39550	2.3303D-02	3.8D-09	1.8D-10
HS54	0.04	0	884	913	884	866	1742	17	45	866	867	21	28	36	-9.0349D-01	2.7D-09	1.4D-09
HS55	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	16	6.6667D+00	5.6D-09	6.8D-09
PENTAGON	0.00	0	15	15	15	14	19	0	0	14	14	4	4	4	1.3652D-04	0.0D+00	2.9D-10
HS21MOD	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	4	1	1	-9.5960D+01	0.0D+00	0.0D+00
EQC	0.00	0	2	2	2	0	0	1	1	0	0	4	1	1	-8.2955D+02	0.0D+00	0.0D+00
QCNEW	0.00	0	2	2	2	0	0	1	1	0	0	4	1	1	-8.0652D+02	0.0D+00	0.0D+00
QC	0.00	0	7	7	7	6	6	0	0	6	6	3	2	2	-9.5654D+02	0.0D+00	2.6D-13
DUALC2	0.03	0	10	29	9	7	9	2	2	7	26	6	6	324	3.5513D+03	7.4D-09	3.0D-09
HS105	0.02	0	24	30	24	21	68	2	8	21	21	6	1	1	1.0619D+03	0.0D+00	3.7D-09
AVGASA	0.00	0	4	4	4	3	5	0	0	3	3	4	4	23	-4.6320D+00	1.1D-09	6.0D-10
AVGASB	0.00	0	4	4	4	3	5	0	0	3	3	4	5	22	-4.4832D+00	1.1D-09	8.6D-10
DUALC5	0.01	0	5	5	5	4	8	0	0	4	4	4	4	139	4.2723D+02	0.0D+00	9.6D-10
DUALC8	0.09	0	13	14	13	10	13	2	3	10	10	6	11	957	1.8309D+04	1.2D-09	1.0D-09
DUALC1	0.49	0	13	14	13	10	13	2	3	10	10	6	13	8859	6.1553D+03	8.5D-11	5.6D-09
HS112	0.02	0	22	31	22	19	73	2	11	19	19	6	10	376	-4.7761D+01	6.3D-11	6.6D-09
ODFITS	0.01	0	6	6	6	5	16	0	0	5	5	4	5	21	-2.3800D+03	1.8D-10	3.0D-09
GENHS28	0.44	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	5	5021	9.2717D-01	3.3D-09	6.7D-10
PORTFL1	0.00	0	8	8	8	7	14	0	0	7	7	4	4	9	2.0486D-02	4.0D-10	5.3D-10
PORTFL2	0.00	0	9	9	9	8	12	0	0	8	8	4	3	4	2.9689D-02	4.0D-10	8.6D-11
PORTFL3	0.00	0	11	12	11	9	16	1	2	9	9	5	4	6	3.2750D-02	4.6D-10	8.7D-10
PORTFL4	0.00	0	8	8	8	7	14	0	0	7	7	4	3	5	2.6307D-02	4.0D-10	7.8D-11
PORTFL6	0.00	0	8	8	8	7	15	0	0	7	7	4	3	6	2.5792D-02	4.0D-10	8.7D-11
LOTSCHD	16.82	2	426	5010	422	64	64	361	4949	64	60	364	1114	108384	2.3984D+03	3.7D-05	3.1D-05
HS118	0.33	6	18	56	17	15	14	2	41	15	14	5	16	1632	6.6482D+02	2.5D-07	4.4D-07
HS119	0.06	0	14	14	14	12	39	1	1	12	12	5	7	238	2.4490D+02	3.6D-09	5.3D-09
FCCU	0.01	0	11	31	11	9	16	1	1	9	29	5	8	69	1.1149D+01	4.4D-09	3.5D-09
RES	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0.0000D+00	9.2D-15	0.0D+00

Tabela 2.9: Resultados da aplicação de GENLIN-GPCG na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n_f	n_g	n_h	n_{cg}	n_{spg}	$n_{f_{spg}}$	n_{nt}	$n_{f_{nt}}$	iproj	GPCG	iGPCG	f	cnorm	gsupn
DEGENLPA	9.00	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	50000	0.0000D+00	1.9D-03	0.0D+00
DEGENLPB	9.15	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	50000	0.0000D+00	1.9D-03	0.0D+00
KSIP	1656.27	2	121	1150	71	67	51	53	1132	67	17	56	116	554957	5.7579D-01	5.2D-06	7.2D-05
MAKELA4	0.01	0	16	16	16	15	15	0	0	15	15	3	3	3	4.7739D-15	2.1D-15	5.6D-15
WATER	3.96	-30	53	347	43	40	61	12	44	40	302	15	50	7532	1.0549D+04	7.8D-05	5.7D+01
LOADBAL	0.11	6	38	145	34	29	70	8	43	29	101	13	28	585	4.5285D-01	1.8D-07	1.3D-07
HIMMELBJ	0.13	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	358	0.0000D+00	2.0D-06	0.0D+00
DALLASS	109.01	10	1026	13530	962	664	1786	361	5115	664	8414	364	992	259206	-3.2393D+04	3.1D-05	2.8D-06
AVION2	57.23	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	11	30237	9.4680D+07	9.8D-09	0.0D+00
GOFFIN	0.02	0	7	7	7	6	6	0	0	6	6	3	5	20	5.4498D-09	1.8D-13	5.5D-09
DUAL4	0.02	0	19	19	19	17	62	1	1	17	17	5	7	17	7.4609D-01	7.5D-13	2.0D-09
LINSPANH	0.11	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	38	-7.7000D+01	1.4D-13	2.2D-09
SPANHYD	86.08	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	10	30016	2.2689D+10	1.4D-13	0.0D+00
QPCBLEND	158.30	6	12	68	7	5	1	6	45	5	22	9	48	232057	-7.8432D-03	1.9D-06	1.7D-03
QPNBLEND	142.02	6	10	53	6	4	0	5	52	4	0	8	40	197863	-8.9147D-03	1.6D-06	5.9D-03
DUAL1	0.07	0	50	59	50	46	376	3	11	46	47	7	7	16	3.5013D-02	2.8D-11	3.3D-09
DUAL2	0.02	0	8	8	8	7	85	0	0	7	7	4	5	18	3.3734D-02	3.3D-16	2.1D-09
HIMMELBI	39.64	2	138	103	86	84	35	53	70	84	32	56	173	30152	-1.7352D+03	4.2D-07	4.0D-03
DUAL3	0.07	0	30	32	30	26	223	3	5	26	26	7	8	24	1.3576D-01	9.5D-10	2.6D-09
SMBANK	62.35	-30	33	33	33	31	185	1	1	31	31	4	12	555	-6.9770D+06	3.4D-09	1.7D+01
QPCBOEI2	126.78	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	50000	0.0000D+00	9.2D-01	0.0D+00
QPNBOEI2	130.25	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	50000	0.0000D+00	9.2D-01	0.0D+00
AGG	714.22	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	8230	0.0000D+00	3.6D+02	0.0D+00
HYDROELS	103.55	-30	11	10	10	8	7	2	2	8	7	5	14	30530	-3.4558D+06	6.5D-08	8.3D-02
GMNCASE1	48.88	0	21	88	21	15	28	5	72	15	15	12	14	20172	2.6697D-01	2.8D-09	8.1D-09
GMNCASE4	408.18	2	100	788	51	49	0	50	787	49	0	53	129	6806	5.9469D+03	2.0D-06	3.5D-05
GMNCASE2	53.20	0	34	151	33	31	67	2	2	31	148	7	10	20076	-9.9445D-01	2.1D-09	6.8D-09
GMNCASE3	0.62	0	26	27	26	24	58	1	2	24	24	5	5	64	1.5252D+00	2.2D-09	4.2D-09
SSEBLIN	1000.48	2	120	71	71	69	20	50	50	69	20	53	166	43220	1.7194D+07	1.6D-05	2.2D+01
DALLASM	633.32	-30	35	36	35	33	625	1	2	33	33	4	19	34556	-4.8184D+04	2.4D-06	4.0D+02
PRIMALC1	82.97	-30	6	6	6	4	5	1	1	4	4	4	12	14526	-6.1553D+03	6.6D-09	1.0D+00
PRIMALC2	0.04	6	6	67	4	2	0	3	66	2	0	6	22	117	-2.2818D+03	2.4D-08	1.0D+00
PRIMALC5	0.00	99	7	7	7	5	5	1	1	5	5	3	2	2	-4.2724D+02	3.9D-12	1.0D+00
PRIMAL1	0.00	99	3	3	3	1	1	1	1	1	1	3	2	38	-3.5013D-02	3.9D-09	3.7D-02
QPCBOEI1	469.23	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	50000	0.0000D+00	4.9D+00	0.0D+00
QPNBOEI1	464.10	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	50000	0.0000D+00	4.9D+00	0.0D+00
QPCSTAIR	132.38	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	32472	0.0000D+00	1.2D-03	0.0D+00
QPNSTAIR	133.86	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	32472	0.0000D+00	1.2D-03	0.0D+00
STEENBRA	7.21	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	3306	0.0000D+00	4.1D-05	0.0D+00
STATIC3	0.03	4	8	8	8	7	20	0	0	7	7	3	2	2	-1.0566D+20	8.3D-09	1.0D+99
STEENBRB	7.18	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	2046	0.0000D+00	6.5D-05	0.0D+00
STEENBRD	15.58	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	2066	0.0000D+00	4.7D-05	0.0D+00
STEENBRF	7.16	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	10	2046	0.0000D+00	6.5D-05	0.0D+00

Tabela 2.10: Resultados da aplicação de GENLIN-NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n_f	n_g	n_h	n_{cg}	n_{spg}	$n_{f_{spa}}$	n_{nt}	$n_{f_{nt}}$	iproj	NQC	iNQC	f	cnorm	gsupn
EXTRASIM	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	3	3	3	1.0000D+00	4.4D-16	2.2D-16
HS9	0.00	0	2	6	2	1	1	0	0	1	5	4	3	3	-5.0000D-01	0.0D+00	1.3D-12
TAME	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	1	0.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
HS21	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	4	1	2	-9.9960D+01	0.0D+00	0.0D+00
HS35MOD	0.00	0	3	3	3	2	2	0	0	2	2	3	0	0	2.5000D-01	0.0D+00	0.0D+00
HUBFTT	0.00	0	5	5	5	3	4	1	1	3	3	5	2	2	1.6894D-02	0.0D+00	1.1D-16
LSQFIT	0.00	0	5	5	5	3	4	1	1	3	3	5	2	2	3.3787D-02	0.0D+00	0.0D+00
BOOTH	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	1	0.0000D+00	1.8D-15	0.0D+00
HIMMELBA	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	1	0.0000D+00	0.0D+00	0.0D+00
SUPERSIM	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	3	6.6667D-01	4.4D-16	7.8D-16
SIMPLIPA	0.01	0	2	2	2	0	0	1	1	0	0	4	5	10	1.0000D+00	1.7D-15	8.9D-16
ZECEVIC2	0.00	0	3	4	3	1	1	1	2	1	1	5	4	4	-4.1250D+00	4.4D-16	1.6D-15
HS24	0.00	0	3	3	3	2	2	0	0	2	2	3	1	1	-1.0000D+00	2.2D-16	8.9D-16
SIMPLLPB	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	3	4	6	1.1000D+00	0.0D+00	6.7D-16
PT	27.28	0	12	7	7	6	1	5	5	6	1	8	53	1173	1.7839D-01	8.0D-07	8.4D-09
SIPOW1M	3.37	0	15	15	15	5	5	9	9	5	5	12	13	520	-1.0000D+00	1.0D-14	3.3D-12
SIPOW1	4.47	0	15	15	15	5	5	9	9	5	5	12	13	731	-1.0000D+00	1.0D-13	8.2D-09
SIPOW2M	0.68	0	14	14	14	5	5	8	8	5	5	11	12	383	-1.0000D+00	1.0D-13	1.6D-11
SIPOW2	0.64	0	15	15	15	6	6	8	8	6	6	11	11	372	-1.0000D+00	7.1D-09	7.1D-09
HS28	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	3	1	1	1.8242D-30	2.0D-15	2.7D-15
HS62	0.00	0	8	9	8	7	13	0	0	7	8	4	3	7	-2.6273D+04	0.0D+00	1.3D-11
HS35I	0.00	0	3	3	3	2	3	0	0	2	2	4	2	2	1.1111D-01	0.0D+00	4.4D-16
HS35	0.00	0	3	3	3	2	3	0	0	2	2	4	2	2	1.1111D-01	0.0D+00	4.4D-16
HS36	0.01	-30	5	5	5	3	3	1	1	3	3	5	16	59	-3.3000D+03	2.8D-14	1.0D+99
HS37	0.00	0	6	6	6	5	5	0	0	5	5	4	2	5	-3.4560D+03	0.0D+00	1.4D-10
STANCMIN	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	6	4.2500D+00	5.1D-13	1.4D-13
ZANGWIL3	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	1	1	0.0000D+00	1.4D-14	0.0D+00
TFI2	0.32	0	22	22	22	11	11	10	10	11	11	13	15	165	6.4903D-01	8.1D-15	1.2D-12
TFI3	0.11	0	5	5	5	2	2	2	2	2	2	6	7	92	4.3012D+00	2.5D-14	2.9D-13
OET1	1581.65	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	15	2680	0.0000D+00	8.2D-07	0.0D+00
HONG	0.00	0	7	7	7	6	16	0	0	6	6	4	5	9	2.2571D+01	0.0D+00	2.8D-09
HS41	0.01	0	6	6	6	4	4	1	1	4	4	5	5	11	1.9259D+00	4.4D-16	1.6D-10
LIN	0.00	0	2	3	2	0	0	1	2	0	0	5	5	10	-1.7578D-02	5.3D-13	4.4D-13
HS76I	0.00	0	6	6	6	4	6	1	1	4	4	5	3	5	-4.6818D+00	8.9D-16	4.4D-16
HS76	0.00	0	6	6	6	4	6	1	1	4	4	5	3	5	-4.6818D+00	8.9D-16	4.4D-16
S277-280	0.00	0	4	4	4	3	3	0	0	3	3	3	3	13	5.0762D+00	4.4D-16	1.3D-12
HS44NEW	0.00	0	6	6	6	5	5	0	0	5	5	3	1	1	-1.5000D+01	0.0D+00	1.8D-15
HS44	0.00	0	6	6	6	3	3	2	2	3	3	5	1	1	-1.5000D+01	0.0D+00	1.8D-15
BIGGSC4	0.00	0	4	4	4	2	2	1	1	2	2	4	3	6	-2.4375D+01	0.0D+00	4.4D-15
HATFLDH	0.00	0	3	3	3	1	1	1	1	1	1	5	6	9	-2.4375D+01	0.0D+00	4.4D-15
OET3	92.55	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	15	703	0.0000D+00	6.2D-08	0.0D+00
SIPOW3	32.51	-30	9	7	7	6	4	2	2	6	4	5	25	674	5.4281D-01	3.3D-05	2.3D-01

Tabela 2.11: Resultados da aplicação de GENLIN-NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n_f	n_g	n_h	n_{cg}	n_{spg}	n_{fspg}	n_{nt}	n_{fnt}	iproj	NQC	iNQC	f	cnorm	gsupn
SIPOW4	89.17	0	11	11	11	7	7	3	3	7	7	6	11	800	2.7236D-01	1.6D-10	1.1D-12
HS48	0.00	0	2	2	2	1	3	0	0	1	1	3	1	1	6.3109D-30	1.8D-15	3.6D-15
HS49	0.00	0	20	20	20	19	40	0	0	19	19	4	3	3	1.0600D-11	5.3D-15	5.0D-09
BT3	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	4	4.0930D+00	7.1D-14	4.3D-14
HS50	0.00	0	10	10	10	9	18	0	0	9	9	3	1	1	1.1734D-29	6.6D-14	6.7D-15
HS51	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	3	1	1	1.7749D-30	1.3D-15	1.8D-15
HS52	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	4	5.3267D+00	8.5D-15	3.9D-14
HS53	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	4	4.0930D+00	8.7D-15	1.7D-15
LSNNODOC	0.01	0	7	7	7	5	5	1	1	5	5	5	5	9	1.2311D+02	1.8D-15	3.6D-14
HS268	0.00	0	7	20	7	4	15	2	15	4	4	5	2	2	7.2760D-12	0.0D+00	3.6D-09
S268	0.00	0	7	20	7	4	15	2	15	4	4	5	2	2	7.2760D-12	0.0D+00	3.6D-09
HS86	0.00	0	10	10	10	7	11	2	2	7	7	6	5	13	-3.2349D+01	2.9D-15	5.6D-13
EXPTITA	0.02	-30	13	13	13	11	12	1	1	11	11	4	16	135	2.5368D-03	4.4D-12	9.2D+01
EXPTITB	0.16	-30	21	18	18	16	13	4	4	16	13	7	30	585	5.1401D-03	2.7D-06	4.4D+02
EXPTITC	0.01	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	13	51	7.4952D+02	0.0D+00	0.0D+00
HS54	0.06	0	824	845	824	807	1624	16	36	807	808	20	20	52	-9.0349D-01	2.2D-09	2.1D-09
HS55	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	3	5	6.6667D+00	1.3D-14	5.0D-15
PENTAGON	0.00	0	15	15	15	14	19	0	0	14	14	4	4	4	1.3652D-04	2.2D-16	2.9D-10
HS21MOD	0.00	0	2	2	2	1	1	0	0	1	1	4	1	2	-9.5960D+01	0.0D+00	0.0D+00
EQC	0.00	0	2	2	2	0	0	1	1	0	0	4	1	1	-8.2955D+02	0.0D+00	0.0D+00
QCNEW	0.00	0	2	2	2	0	0	1	1	0	0	4	1	1	-8.0652D+02	0.0D+00	0.0D+00
QC	0.00	0	7	7	7	6	6	0	0	6	6	3	2	2	-9.5654D+02	0.0D+00	2.6D-13
DUALC2	0.02	0	7	7	7	5	7	1	1	5	5	5	5	18	3.5513D+03	1.1D-16	1.3D-11
HS105	0.02	0	24	30	24	21	68	2	8	21	21	6	1	1	1.0619D+03	0.0D+00	3.7D-09
AVGASA	0.00	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	14	78	-3.6837D+00	1.4D-15	0.0D+00
AVGASB	0.02	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	14	78	-3.6735D+00	1.4D-15	0.0D+00
DUALC5	0.01	0	5	5	5	4	8	0	0	4	4	4	4	10	4.2723D+02	0.0D+00	6.4D-13
DUALC8	0.07	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	12	172	4.9021D+04	3.6D-15	0.0D+00
DUALC1	0.06	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	13	399	1.0837D+05	1.3D-14	0.0D+00
HS112	0.00	0	22	31	22	19	73	2	11	19	19	6	6	15	-4.7761D+01	2.2D-16	6.6D-09
ODFTS	0.00	0	6	6	6	5	16	0	0	5	5	4	4	5	-2.3800D+03	2.3D-13	8.0D-10
GENHS28	0.00	0	2	2	2	1	2	0	0	1	1	4	4	4	9.2717D-01	4.9D-15	1.5D-15
PORTFL1	0.00	0	8	8	8	7	14	0	0	7	7	4	4	6	2.0486D-02	4.0D-10	6.7D-11
PORTFL2	0.00	0	9	9	9	8	12	0	0	8	8	4	4	6	2.9689D-02	4.0D-10	8.0D-11
PORTFL3	0.00	0	11	12	11	9	16	1	2	9	9	5	5	9	3.2750D-02	3.5D-10	5.8D-11
PORTFL4	0.00	0	8	8	8	7	14	0	0	7	7	4	4	6	2.6307D-02	4.0D-10	6.7D-11
PORTFL6	0.00	0	8	8	8	7	15	0	0	7	7	4	3	5	2.5792D-02	4.0D-10	6.7D-11
LOTSCHD	0.00	0	5	5	5	4	4	0	0	4	4	4	5	16	2.3984D+03	4.3D-14	4.3D-13
HS118	0.03	-30	15	15	15	14	14	0	0	14	14	3	14	165	6.6514D+02	2.8D-14	2.3D+00
HS119	0.14	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	14	829	5.1036D+03	2.0D-13	0.0D+00
FCCU	0.00	0	6	6	6	4	11	1	1	4	4	5	6	10	1.1149D+01	3.6D-15	7.1D-15
RES	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0.0000D+00	9.2D-15	0.0D+00

Tabela 2.12: Resultados da aplicação de GENLIN-NQC na resolução dos problemas da coleção CUTer

Nome	Tempo	inf	k	n _f	n _g	n _h	n _{cg}	n _{spg}	n _{f_{spg}}	n _{nt}	n _{f_{nt}}	iproj	NQC	iNQC	f	cnorm	gsupn
DEGENLPA	0.05	0	4	4	4	1	1	2	2	1	1	5	13	194	3.0521D+00	1.4D-06	4.4D-09
DEGENLPB	0.32	2	52	580	52	1	1	50	578	1	1	53	107	1258	-3.1017D+01	7.5D-06	1.4D-08
KSIP	980.97	2	107	1154	58	56	17	50	1146	56	7	53	315	11599	5.7580D-01	6.2D-06	3.9D-04
MAKELA4	0.00	0	16	16	16	15	15	0	0	15	15	3	3	6	4.7740D-15	2.1D-15	6.9D-15
WATER	0.00	-30	9	9	9	8	15	0	0	8	8	3	4	9	1.2311D+04	9.1D-13	5.7D+01
LOADBAL	0.01	0	15	14	14	11	42	3	3	11	10	7	6	13	4.5285D-01	4.3D-14	1.8D-09
HIMMELBJ	0.12	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	14	525	-1.4391D+03	4.4D-12	0.0D+00
DALLASS	2.75	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	15	9442	1.2499D+07	3.3D-14	0.0D+00
AVION2	154.93	7	200000	200011	200000	133335	133478	66664	66664	133335	133346	133329	133330	565699	9.4680D+07	4.5D-13	5.2D-08
GOFFIN	0.01	0	7	7	7	6	6	0	0	6	6	3	3	6	-2.9998D-13	1.3D-12	2.9D-13
DUAL4	0.01	0	19	19	19	17	62	1	1	17	17	5	5	12	7.4609D-01	1.1D-16	2.0D-09
LINSPANH	0.00	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	2	4	-7.7000D+01	1.4D-13	1.1D-13
SPANHYD	0.00	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	3	5	2.2689D+10	1.4D-13	0.0D+00
QPCBLEND	0.00	99	1	1	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0.0000D+00	0.0D+00	1.0D+99
QPNBLEND	0.00	99	1	1	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0.0000D+00	0.0D+00	1.0D+99
DUAL1	0.07	0	49	56	49	45	365	3	10	45	45	7	7	24	3.5013D-02	6.7D-16	2.8D-09
DUAL2	0.02	0	8	8	8	7	85	0	0	7	7	4	4	11	3.3734D-02	0.0D+00	2.4D-09
HIMMELBI	0.03	0	65	67	64	60	160	4	7	60	59	8	7	26	-1.7356D+03	4.3D-13	3.9D-09
DUAL3	0.07	0	30	33	30	26	223	3	6	26	26	7	8	18	1.3576D-01	0.0D+00	2.0D-09
SMBANK	0.15	0	54	69	54	48	735	5	20	48	48	8	7	18	-7.1293D+06	3.8D-10	4.9D-09
QPCBOE12	0.07	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	17	0.0000D+00	1.2D+21	0.0D+00
QPNBOE12	0.08	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	17	0.0000D+00	1.2D+21	0.0D+00
AGG	0.37	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	8	0.0000D+00	7.5D+20	0.0D+00
HYDROELS	0.02	-30	9	9	9	7	7	1	1	7	7	4	5	4	-3.4489D+06	7.1D-15	8.3D-02
GMNCASE1	0.20	0	16	16	16	15	28	0	0	15	15	4	4	9	2.6697D-01	1.2D-16	1.7D-09
GMNCASE4	0.00	99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1.0000D+99	1.0D+99	1.0D+99
GMNCASE2	1.37	0	28	28	28	26	62	1	1	26	26	5	5	12	-9.9445D-01	2.0D-16	4.1D-09
GMNCASE3	1.34	0	26	27	26	24	58	1	2	24	24	5	5	11	1.5252D+00	2.5D-16	6.4D-10
SSEBLIN	0.18	-30	100	100	100	95	95	4	4	95	95	7	13	93	1.6171D+07	5.8D-11	3.3D+01
DALLASM	0.07	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	4	20	6.1953D+07	4.4D-14	0.0D+00
PRIMALC1	0.02	-30	6	6	6	4	5	1	1	4	4	4	4	13	-6.1553D+03	1.5D-10	1.0D+00
PRIMALC2	0.06	-30	10	9	8	6	5	3	4	6	4	6	14	64	-3.5513D+03	5.1D-06	1.0D+00
PRIMALC5	0.02	0	7	7	7	5	6	1	1	5	5	5	6	18	-4.2723D+02	1.6D-11	1.8D-10
PRIMAL1	0.10	0	3	3	3	1	1	1	1	1	1	5	4	20	-3.5012D-02	2.8D-15	2.5D-16
QPCBOE11	4.01	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	672	0.0000D+00	1.4D+18	0.0D+00
QPNBOE11	4.00	-40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	672	0.0000D+00	1.4D+18	0.0D+00
QPCSTAIR	0.00	99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1.0000D+99	1.0D+99	1.0D+99
QPNSTAIR	0.00	99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1.0000D+99	1.0D+99	1.0D+99
STEENBRA	0.15	-30	9	8	8	8	8	0	0	8	7	3	5	26	2.5432D+04	1.1D-12	2.2D+00
STATIC3	0.04	4	8	8	8	7	20	0	0	7	7	3	2	1	-1.0566D+20	8.3D-09	1.0D+99
STEENBRB	0.06	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	3	6	2.6135D+12	1.6D-12	0.0D+00
STEENBRD	0.06	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	3	8	1.5358D+12	1.6D-12	0.0D+00
STEENBRF	0.06	-30	1	1	1	0	0	0	0	0	0	2	3	6	2.6135D+12	1.6D-12	0.0D+00

Conclusões e trabalhos futuros

Neste trabalho, estudamos em detalhes o método Moré-Toraldo, apresentado em [Moré e Toraldo \(1991\)](#). O método Moré-Toraldo é um método clássico para resolução de problemas de programação quadrática convexa com restrições de caixa. A cada iteração, o método Moré-Toraldo usa o método de Gradientes Conjugados para explorar a face da região factível, e o método de Gradiente Projetado para mudar de face.

Implementamos, em Fortran 77, o método Moré-Toraldo, que chamamos GPCG. Reproduzimos os experimentos numéricos feitos em [Moré e Toraldo \(1991\)](#), obtendo resultados semelhantes, atestando que a implementação GPCG está correta.

Estudamos o “método” NQC, um procedimento para resolução de problemas de programação quadrática convexa com restrições de caixa. O “método” NQC, desenvolvido e implementado pela orientadora Profa. Dra. Marina Andretta, durante seu pós-doutorado, em parceria com os professores José Mario Martínez (IMECC-Unicamp) e Mikhail Solodov (IMPA), usa o método do Gradiente Espectral Projetado para definir em que face trabalhar, e o método de Newton para calcular o minimizador da quadrática reduzida a esta face. Apesar de sua eficiência, este método não tem garantia de convergência. Chamamos de NQC à implementação deste procedimento.

Usamos GPCG e NQC para resolver todos os problemas de programação quadrática com restrições de caixa e irrestritos da coleção CUTer ([Bongartz et al. \(1995\)](#)).

As Hessianas dos problemas tomados da coleção CUTer podem não ser definidas positivas. Nos experimentos numéricos de ambos os métodos, somamos um ρ pequeno na diagonal da matriz Hessiana para tornar a função objetivo convexa.

O problema BQPGAUSS não foi levado em consideração já que GPCG parou por número máximo de iterações atingido e NQC parou ao encontrar um ciclo. Os problemas ODNAMUR e PALMER1D também não foram levados em consideração já que GPCG parou por número máximo de iterações atingidas e por progresso insuficiente, respectivamente. NQC satisfaz o critério de convergência nestes dois problemas. Todos os problemas restante da coleção CUTer foram resolvidos pelos métodos.

Ao comparar o desempenho de GPCG e NQC, NQC se mostrou um pouco mais robusto que o GPCG. Por outro lado, GPCG se mostrou um pouco mais eficiente.

Neste trabalho, também estudamos GENLIN, apresentado em [Andretta et al. \(2010\)](#). GENLIN é a implementação de um método de restrições ativas para resolução de problemas de minimização com restrições lineares de pequeno e médio porte, que faz parte do Projeto TANGO (*Trustable Algorithms for Non-linear General Optimization*) ¹.

Tanto GPCG como NQC foram inclusos em GENLIN para calcular projeções de maneira esparsa, usando uma formulação dual. Desse modo, obtivemos dois novos métodos com projeção esparsa, GENLIN-GPCG e GENLIN-NQC, os quais usam as rotinas GPCG e NQC, respectivamente. Utilizamos os problemas da coleção CUTer que possuem um número limitado de variáveis e apenas restrições lineares e de caixa para verificar o desempenho destes dois novos métodos, isso porque, apesar de a projeção ser esparsa para estas novas versões de GENLIN, outras partes essenciais de GENLIN usam álgebra linear

¹Disponível em www.ime.usp.br/~egbirgin/tango.

densa.

Como o dual do problema de projeção é muito mal condicionado, infelizmente os resultados não foram muito animadores, mostrando que a versão original de GENLIN é mais robusta e mais eficiente.

Algumas sugestões para trabalhos futuros são:

- Estudar outros métodos para programação quadrática convexa, talvez tentando resolver o problema primal de forma esparsa, evitando, assim, o mau-condicionamento do problema.
- Com relação a GENLIN, para que tenhamos uma versão esparsa, é necessário que seja mudado o modo como é feito o cálculo da matriz base do núcleo Z (usando redução de variáveis, por exemplo). Com isso, poderão ser testados problemas maiores. E uma alternativa ao uso de métodos de programação quadrática para resolver o problema de projeção seria eliminar as projeções. Isso geraria um método essencialmente diferente do GENLIN atual, que é adequado para a resolução de problemas de pequeno e médio porte.

Provas de teoremas, proposições e propriedades

Teorema 1.1. *O problema de programação quadrática com restrições de caixa (1.1) tem solução única x^* quando q é estritamente convexa na região factível (1.2).*

Prova: Como q é convexa em $\Omega_{\square}$, o problema (1.1) possui ao menos uma solução. Admita duas soluções diferentes para o problema (1.1) x_1, x_2 , tais que $q(x_1) = q(x_2)$.

Seja $\bar{x} = \lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2$, com $\lambda \in (0, 1)$. Como $x_1, x_2 \in \Omega_{\square}$, então $\bar{x} \in \Omega_{\square}$ e assim, devido a q ser estritamente convexa,

$$q(\bar{x}) = q(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) < \lambda q(x_1) + (1 - \lambda)q(x_2).$$

Como $q(x_1) = q(x_2)$, temos que $q(\bar{x}) < q(x_2)$, concluindo que x_2 não é mínimo.

Fica mostrado que o problema (1.1) tem solução única.

□

Teorema 1.2. *Considere q uma função convexa sobre o conjunto $\Omega_{\square}$. O*

ponto x^* é minimizador da função q sobre o conjunto $\Omega_\square$ se, e somente se, $\nabla q(x^*)^T(x - x^*) \geq 0$, para todo $x \in \Omega_\square$.

Prova: Suponha que x^* é minimizador da função q sobre o conjunto $\Omega_\square$ e que $\nabla q(x^*)^T(x - x^*) < 0$ para algum $x \in \Omega_\square$.

Para $\epsilon > 0$, defina $g(\epsilon) = q(x^* + \epsilon(x - x^*))$. Assim, pelo teorema do Valor Médio, temos que existe $s \in [0, 1]$, tal que

$$g(\epsilon) - g(0) = g'(s\epsilon)\epsilon.$$

Ou seja,

$$q(x^* + \epsilon(x - x^*)) = q(x^*) + \epsilon \nabla q(x^* + s\epsilon(x - x^*))^T(x - x^*).$$

Como ∇q é contínua, para ϵ suficientemente pequeno, $\nabla q(x^* + s\epsilon(x - x^*))^T(x - x^*) < 0$. Assim, $q(x^* + \epsilon(x - x^*)) < q(x^*)$, o que é absurdo, já que x^* é minimizador (note que o vetor $x^* + \epsilon(x - x^*)$ é factível para todo $\epsilon \in [0, 1]$, devido a $\Omega_\square$ ser convexo).

Portanto, se x^* é minimizador de q sobre o conjunto $\Omega_\square$, então $\nabla q(x^*)^T(x - x^*) \geq 0$, para todo $x \in \Omega_\square$.

Agora, como q é uma função convexa sobre o conjunto $\Omega_\square$, temos que

$$q(x) \geq q(x^*) + \nabla q(x^*)^T(x - x^*), \quad \forall x \in \Omega_\square.$$

Portanto, se $\nabla q(x^*)^T(x - x^*) \geq 0$, concluímos que $q(x) \geq q(x^*)$ para todo $x \in \Omega_\square$, assim x^* é minimizador de q sobre o conjunto $\Omega_\square$.

□

Proposição 1.1. *Um ponto x^* viável satisfaz $P_{\Omega_\square}(x^* - \nabla q(x^*)) - x^* = 0$, se, e somente se, este ponto também satisfaz as condições KKT (1.4).*

Prova: Se um ponto x^* satisfaz as condições KKT (1.4), deduzimos que:

- Se $[x^*]_i \in ([l]_i, [u]_i)$, então $[\lambda^*]_i = [\mu^*]_i = 0$. Assim, $[\nabla q(x^*)]_i = 0$ e $P_{\Omega_\square}([x^*]_i) - [x^*]_i^* = 0$.

- Se $[x^*]_i = [l]_i$, então $[\lambda^*]_i \geq 0$ e $[\mu^*]_i = 0$. Assim, $[\nabla q(x^*)]_i \geq 0$ e $[x^* - \nabla q(x^*)]_i = [l^* - \nabla q(x^*)]_i \leq [l]_i$. Ou seja, $P_{\Omega_\square}([x^* - \nabla q(x^*)]_i) - [x^*]_i^* = 0$.
- Se $[x^*]_i = [u]_i$, então $[\lambda^*]_i = 0$ e $[\mu^*]_i \geq 0$. Assim, $[\nabla q(x^*)]_i \leq 0$ e $[x^* - \nabla q(x^*)]_i = [u^* - \nabla q(x^*)]_i \geq [u]_i$. Ou seja, $P_{\Omega_\square}([x^* - \nabla q(x^*)]_i) - [x^*]_i^* = 0$.

Portanto, se um ponto x^* satisfaz as condições KKT (1.4), então $P_{\Omega_\square}(x^* - \nabla q(x^*)) - x^* = 0$.

Agora, se um ponto x^* viável satisfaz $P_{\Omega_\square}(x^* - \nabla q(x^*)) - x^* = 0$, ou seja, satisfaz $[P_{\Omega_\square}(x^* - \nabla q(x^*))]_i = [x^*]_i$, podemos deduzir que:

- Se $[x^*]_i \in ([l]_i, [u]_i)$, então $[\nabla q(x^*)]_i = 0$.
- Se $[x^*]_i = [l]_i$, então $[\nabla q(x^*)]_i \geq 0$.
- Se $[x^*]_i = [u]_i$, então $[\nabla q(x^*)]_i \leq 0$.

Portanto, se um ponto x^* viável satisfaz $P_{\Omega_\square}(x^* - \nabla q(x^*)) - x^* = 0$, satisfaz as condições (1.5), que é uma simplificação das condições KKT (1.4).

□

Proposição 1.2. *Um ponto x^* viável satisfaz $\nabla_{\Omega_\square} q(x^*) = 0$, se, e somente se, este ponto também satisfaz as condições KKT (1.4).*

Prova: Se um ponto x^* viável satisfaz $\nabla_{\Omega_\square} q(x^*) = 0$, pela Definição 1.3, deduzimos que:

- Se $[x^*]_i \in ([l]_i, [u]_i)$, então $[\nabla q(x^*)]_i = 0$.
- Se $[x^*]_i = [l]_i$, então $[\nabla q(x^*)]_i \geq 0$.
- Se $[x^*]_i = [u]_i$, então $[\nabla q(x^*)]_i \leq 0$.

Portanto, se um ponto x^* viável satisfaz $\nabla_{\Omega_\square} q(x^*) = 0$, satisfaz as condições (1.5), que é uma simplificação das condições KKT (1.4).

A prova de que se um ponto x^* viável satisfaz as condições KKT (1.4), então este ponto também satisfaz $\nabla_{\Omega_\square} q(x^*) = 0$, é análoga.

□

Proposição 1.3. *Considere x^* o minimizador do problema (1.1). Se x está suficientemente perto de x^* e x pertence à mesma face que x^* , então x é um minimizador aproximado do problema (1.1).*

Prova: Como x pertence à mesma face que x^* , x está suficientemente perto de x^* e q é uma função contínua, afirmamos, pelas condições (1.5), que:

- Se $[x^*]_i = [x]_i = [l]_i$, então $[\nabla q(x)]_i \geq -\epsilon_i$.
- Se $[x^*]_i = [x]_i = [u]_i$, então $[\nabla q(x)]_i \leq \epsilon_i$.
- Se $[x]_i \in ([l]_i, [u]_i)$, então $|[\nabla q(x)]_i| < \epsilon_i$,

sendo $\epsilon_i > 0$ pequeno, $1 \leq i \leq n$. Portanto, x satisfaz (1.7) e (1.8), ou seja, x é um minimizador aproximado do problema (1.1).

□

Propriedade 1.2. *Seja k a iteração atual e $\phi_k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida por $\phi_k(\alpha) = q(P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha d_k))$. Então*

$$\alpha_k^{(0)} = -\frac{\phi_k'(0)}{\phi_k''(0)}.$$

Se $d_k = -\nabla q(x_k)$, então

$$\alpha_k^{(0)} = \frac{\|r_k\|_2^2}{r_k^T H r_k},$$

e, no caso $d_k = Z_k w_{j_k}$, temos que

$$\alpha_k^{(0)} = -\frac{r_k^T w_{j_k}}{(w_{j_k})^T H_k w_{j_k}} = 1.$$

Prova: Como o valor inicial testado $\alpha_k^{(0)}$ é o minimizador da função quadrática convexa que representa ϕ_k em $[0, \beta_1]$, vamos derivar ϕ_k e igualar a zero para encontrar o minimizador.

Lembrando que $\phi_k(\alpha) = q(P_{\Omega_{\square}}(x_k + \alpha d_k))$ e, como $\alpha \in [0, \beta_1]$, então $x_k + \alpha d_k$

é factível. Ou seja $\phi_k(\alpha) = q(x_k + \alpha d_k)$. Assim,

$$\begin{aligned}\phi'_k(\alpha) &= \nabla q(x_k + \alpha d_k)^T d_k \\ &= (H(x_k + \alpha d_k) + c)^T d_k \\ &= x_k^T H d_k + \alpha d_k^T H d_k + c^T d_k.\end{aligned}$$

Igualando a zero, temos que

$$\alpha = \alpha_k^{(0)} = -\frac{(Hx_k + c)^T d_k}{d_k^T H d_k} = -\frac{\phi'_k(0)}{\phi''_k(0)}.$$

Agora, se $d_k = -\nabla q(x_k)$, por (1.18) temos

$$\alpha_k^{(0)} = \frac{\nabla q_k^T r_k}{r_k^T H r_k} = \frac{\|r_k\|_2^2}{r_k^T H r_k}.$$

No caso $d_k = Z_k w_{j_k}$,

$$\alpha_k^{(0)} = -\frac{\nabla q(x_k)^T Z_k w_{j_k}}{w_{j_k}^T Z_k^T H Z_k w_{j_k}},$$

tendo por (1.11), que

$$\alpha_k^{(0)} = -\frac{r_k^T w_{j_k}}{w_{j_k}^T H_k w_{j_k}}.$$

Agora, como w_{j_k} é o minimizador da função q_k , temos que $H_k w_{j_k} = -r_k$, concluindo assim que $\alpha_k^{(0)} = 1$.

□

Propriedade 2.1. *Se $z \in \Omega$ satisfaz as condições KKT de (2.8) então z também satisfaz as condições KKT de*

$$\begin{aligned}&\text{Minimizar} && f(x) \\ &\text{sujeita a} && x \in \Omega(z, \delta),\end{aligned}$$

para todo $\delta \geq 0$. Reciprocamente, se z satisfaz as condições KKT de (2.9) para algum $\delta \geq 0$, então z satisfaz as condições KKT de (2.8).

Prova: Se z satisfaz as condições KKT de (2.8) então existem $[\mu]_i \geq 0, i =$

$1, \dots, p$ tal que $[\mu]_i C_i(z) = 0$ e

$$\nabla f(z) + \sum_{i=1}^p [\mu]_i \nabla C_i(z) = 0,$$

o que pode ser reformulado como

$$\nabla f(z) + \sum_{i \in I(z, \delta)} [\mu]_i \nabla C_i(z) + \sum_{i \notin I(z, \delta)} [\mu]_i \nabla C_i(z) = 0,$$

para todo $\delta \geq 0$. Se $i \notin I(z, \delta)$ então $C_i(z) < -[\delta]_i \leq 0$, pelo que $[\mu]_i = 0$ para todo $i \notin I(z, \delta)$, provando assim que $\nabla f(z) + \sum_{i \in I(z, \delta)} [\mu]_i \nabla C_i(z) = 0$, ou seja, que z satisfaz as condições KKT de (2.9).

A prova da recíproca é análoga.

□

Referências Bibliográficas

- ANDRETTA, M. *Tópicos em otimização com restrições lineares*. Tese de Doutorado, IME, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brasil, 2008.
- ANDRETTA, M.; BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J. M. Practical active-set Euclidian trust-region method with spectral projected gradients for bound-constrained minimization. *Optimization*, v. 54, p. 305–325, 2005.
- ANDRETTA, M.; BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J. M. Partial spectral projected gradient method with active-set strategy for linearly constrained optimization. *Numerical Algorithms*, v. 53, p. 23–52, 2010.
- BARTLETT, R. A.; BIEGLER, L. T. QPSchur: a dual, active-set, Schur-complement method for large-scale and structured convex quadratic programming. *Optim. Eng.*, v. 7 (1), p. 5–32, 2006.
- BARZILAI, J.; BORWEIN, J. Two-point step size gradient methods. *IMA Journal of Numerical Analysis*, v. 8, p. 141–148, 1988.
- BERTSEKAS, D. P. *Nonlinear programming*. Athena Scientific, Belmont, MA, 1999.
- BIELSCHOWSKI, R. H.; FRIEDLANDER, A.; GOMES, F. A. M.; MARTÍNEZ, J. M.; RAYDAN, M. An adaptive algorithm for bound constrained quadratic minimization. *Investigación Operativa*, v. 7, p. 67–102, 1997.
- BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J.; RAYDAN, M. Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets. *SIAM Journal on Optimization*, v. 10, p. 1196–1211, 2000.

- BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J.; RAYDAN, M. Algorithm 813: SPG - software for convex-constrained optimization. *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 27, p. 340–349, 2001.
- BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J. M.; RAYDAN, M. Inexact Spectral Projected Gradient methods on convex sets. *IMA Journal on Numerical Analysis*, v. 23, p. 539–559, 2003.
- BOLAND, N. L. A dual-active-set algorithm for positive semi-definite quadratic programming. *Mathematical Programming*, v. 78 (1, ser. A), p. 1–27, 1997.
- BONGARTZ, I.; CONN, A. R.; GOULD, I. M.; TOINT, P. L. CUTE constrained and unconstrained testing environment. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*., v. 21, p. 123–160, 1995.
- CALAMAI, P. H.; MORÉ, J. J. Projected gradient methods for linearly constrained problems. *Math. Programming*, v. 39, p. 93–116, 1987.
- COLEMAN, T.; HULBERT., L. A direct active-set algorithm for large sparse quadratic programs with simple bounds. *Mathematical Programming.*, v. 45, 1-3, p. 373–406, 1989.
- DAI, Y.-H.; FLETCHER, R. Projected Barzilai-Borwein methods for large-scale box-constrained quadratic programming. *Numerische Mathematik*, v. 100, p. 21–47, 2005.
- DOSTÁL, Z. Box constrained quadratic programming with proportioning and projections. *SIAM J. Optim.*, v. 7(3), p. 871–887, 1997.
- DOSTÁL, Z. A proportioning based algorithm with rate of convergence for bound constrained quadratic programming. *Numerical Algorithms*, v. 34, p. 293–302, 2003.
- DOSTÁL, Z.; SCHÖBERL, J. Minimizing quadratic functions over non-negative cone with the rate of convergence and finite termination. *Comput. Optim. Appl.*, v. 30, p. 23–44, 2005.
- DUFF, I. S. MA57 a code for the solution of sparse symmetric definite and indefinite systems. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*., v. 30, p. 118–144, 2004.

- FISCHER, A. A special Newton-type optimization method. *Optimization*, v. 24, p. 269–284, 1992.
- FRIEDLANDER, A.; MARTÍNEZ, J. On the maximization of a concave quadratic function with box constraints. *SIAM Journal on Optimization*., v. 4, p. 177–192, 1994.
- FRIEDLANDER, A.; MARTÍNEZ, J.; RAYDAN, M. A new method for large-scale box constrained convex quadratic minimization problems. *Optimization Methods and Software*., v. 5, p. 57–74, 1995.
- GAUJOUX, R. G. *Resolução de sistema KKT por método de tipo Newton não diferenciável*. Dissertação de Mestrado, IMECC, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil, 2005.
- GILL, P.; MURRAY, W.; SAUNDERS, M.; WRIGHT, M. H. A Schur-complement method for sparse quadratic programming. *In Reliable Numerical Computation, Oxford University Press*., p. 113–138, 1990.
- GOLDFARB, D.; IDNANI, A. A numerically stable dual method for solving strictly convex quadratic programs. *Math. Programming*, v. 27, p. 1–33, 1983.
- GRIPPO, L.; LAMPARIELLO, F.; LUCIDI, S. A nonmonotone line search technique for Newton’s method. *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 23, p. 707–716, 1986.
- MORÉ, J. J.; SORENSEN, D. C. Computing a trust region step. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, v. 4, p. 553–572, 1983.
- MORÉ, J. J.; TORALDO, G. On the solution of large quadratic programming problems with bound constraints. *SIAM J. Optimization*, v. 1, p. 93–113, 1991.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. *Numerical optimization*. Springer, New York, USA, 1999.
- POWELL, M. J. D. *ZQPCVX, a FORTRAN subroutine for convex programming*. Relatório Técnico, University of Cambridge, England, 1983.
- POWELL, M. J. D. On the quadratic-programming algorithm of Goldfarb and Idnani. *Math. Programming Study*, v. 25, p. 46–61, 1985.

- RAYDAN, M. On the Barzilai and Borwein choice of steplength for the gradient method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, v. 13, p. 321–326, 1993.
- SCHITTKOWSKI, K. *QL: a Fortran code for convex quadratic programming*. User's Guide, version 2.1, 2004.
- ZHOU, B.; GAO, L.; DAI, Y. Monotone projected gradient methods for large-scale box constrained quadratic programming. *Science in China series A: Mathematics*, v. 49, p. 688–702, 2006.