

CAPÍTULO 3: O ALGORITMO MISQPSOL

No capítulo 2, vimos que inúmeras dificuldades podem surgir quando da resolução do problema (P2) pelo método SQP. Estas se dividem basicamente nos seguintes grupos, além dos problemas de condicionamento numérico:

- *é necessária a existência de um método eficiente para o cálculo do Hessiano*: o uso de funções analíticas faz com que se tenha convergência local quadrática. Por outro lado, pode não ser fácil obter uma solução estacionária de mínimo do problema da PQ.
- *inconsistências na linearização podem fazer com que surjam restrições nulas, redundantes ou então tais que o problema da PQ é inviável*: quando do uso de estratégias de decomposição, inconsistências entre restrições de igualdade e desigualdade podem se tornar mais acentuadas, fazendo inclusive com que restrições de limites sejam ignoradas.

Na literatura alguns procedimentos para contornar estas dificuldades foram identificados e comentados, a saber:

- *a aproximação do Hessiano na iteração k do algoritmo SQP, H_k , pode ser obtida por um método quasi-Newtoniano de forma que H_k seja PD*: dependendo da fórmula empregada pode não se assegurar que se tenha H_k sempre PD. Mesmo quando H_k obtida PD, o procedimento pode ser demasiadamente conservador ou uma solução não mínima da PNL pode ainda ser encontrada. Assim, outra perspectiva que surge é tornar H_k PD no plano tangente às restrições ativas ou, pelo menos, termos H_k PD em relação ao problema reduzido, i.e., atualizar $Z^T H_k Z$ por um método Newtoniano. Um inconveniente que surge no primeiro caso é que não se sabe a priori qual o conjunto que estará ativo numa dada iteração ou na solução ótima. Desta forma, outros algoritmos surgem que introduzem perturbações em H_k para forçá-la a ser PD quando necessário. Verificar se H_k é PD no plano tangente e a partir daí introduzir elementos de forma a

que ela se torne PD no referido plano pode ser por demais custoso em termos de tempo computacional gasto. Assim, é interessante desenvolver-se outro procedimento. Ainda, quando H_k é PSD no plano tangente, infinitas soluções existem. Poder-se-ia eventualmente querer fazer uso de uma destas soluções particulares, ao invés de se forçar H_k a ser PD.

- *restrições inconsistentes são usualmente tratadas, reformulando-se o problema da PQ, permitindo-se violações discretas nas restrições*: embora com este procedimento possa-se, na maior parte dos casos, encontrar uma solução, não há meios de se garantir que esta será de fato a melhor solução, a qual, depende do relaxamento realizado. Ainda, quando existem restrições nulas, o relaxamento da região viável em nada resolve o problema e neste ponto, inúmeros algoritmos da literatura podem falhar como o pacote NPSOL (Gill et al, 1986) ou mesmo o algoritmo de Schmid & Biegler (1994), pelo menos tal como este último foi descrito pelos autores. Identificar restrições redundantes ou inconsistentes pode não ser uma tarefa elementar e tentar reduzir o custo computacional para este fim é imperativo. Ainda, inconsistências nas restrições de igualdade fazem com que a grande maioria dos algoritmos publicados retorne a uma fase de pré processamento, a qual é por demais dispendiosa. Ainda, muitos dos algoritmos publicados recorrem a uma fase de pré processamento para que se gere uma solução inicial viável a nível do problema da PQ. Eliminar-se esta também é de interesse.

O algoritmo proposto nesta tese visa a melhorar ou buscar alternativas viáveis para estes problemas encontrados. Basicamente, os principais pontos de inovação são descritos a seguir.

A matriz Hessiana, H_k , é calculada por diferenças finitas ou por expressões analíticas e em nenhum momento esta matriz é forçada a se tornar PD. Quando H_k possuir autovalores nulos no plano tangente às restrições ativas, o sistema de KKT é ampliado e resolve-se este por mínimos quadrados. A partir da solução obtida, é possível verificar se o sistema de KKT é consistente ou se a PQ possui características de não convexidade acentuadas.

Inconsistências nas restrições de igualdade são verificadas junto com o procedimento de decomposição de variáveis, o que faz com que não haja um aumento significativo no

tempo computacional. No procedimento adotado, é possível identificar se existem restrições redundantes ou se o problema da PQ é inviável. Em qualquer um dos casos, eliminam-se restrições inconsistentes. Ainda, para o caso particular, em que existam restrições de igualdade linearizadas nulas, tratamentos são efetuados de forma que se assegure a geração de uma direção de busca que perturbe o problema quando as restrições não são satisfeitas. Como a direção de busca gerada pelo algoritmo é tal que incrementos podem ser realizados em direções que afetem todas as restrições, o procedimento pode ter assegurada a propriedade de convergência para um ponto que é solução do conjunto de restrições de igualdade. Ainda, inconsistências entre restrições de igualdade e desigualdade oriundas de limites nas variáveis são tratadas. Basicamente, visa-se a que restrições de limites não sejam ignoradas para o caso em que a base para o kernel das restrições de igualdade é também uma base para o espaço nulo de algumas restrições de limites. Optou-se por não se efetuar tratamentos semelhantes para restrições de desigualdade não lineares, pois, em geral, a direção de busca gerada a nível da PQ provoca perturbações nestas e problemas de convergência para os diversos exemplos testados não foram observados, não justificando um procedimento de verificação que poderia ser desnecessariamente oneroso. No entanto, quando se obtém $d_k=0$, o algoritmo verifica se existe alguma restrição violada e, neste caso, uma perturbação pode ser gerada de forma que a restrição não mais seja ignorada pelo algoritmo de solução. Ainda, permite-se que o sentido da direção de busca a nível da PQ seja invertido, i.e., α_k negativo é permitido no procedimento de busca unidirecional. Isto pode ser interessante tanto para se minimizar a probabilidade de se chegar a uma solução estacionária não de mínimo, como também para auxiliar a obtenção de uma solução viável.

Uma outra característica interessante do algoritmo proposto que difere de algumas outras abordagens é que, em algumas situações, a identificação de H_k não ser PSD ou PD no plano tangente pode ser feita simultaneamente com a resolução do sistema de (KKT) e também ao mesmo tempo são verificadas violações nas restrições, i.e., se o problema da PQ é inviável. O algoritmo é tal que restrições redundantes são eliminadas. Com relação aos problemas reduzidos de PQ inviáveis, o algoritmo obtém uma solução que é viável para um subproblema do problema original da PQ. A premissa para tal é que nada garante que a direção obtida relaxando-se as restrições será melhor. A convergência do algoritmo é forçada, incorporando-se valores para os multiplicadores de Lagrange para este caso e para

alguns problemas da PQ bastante não convexos. Este procedimento também é inédito e obtivemos a convergência do algoritmo para problemas para os quais outros códigos da literatura não conseguem convergir.

Existem, ainda, pequenas diferenças no tocante à implementação realizada. Estas se dão com relação à maneira com que o método de conjuntos ativos foi empregado.

O algoritmo foi desenvolvido de modo que todos os tratamentos realizados são conceitualmente simples e também a sua resolução numérica. De uma forma bastante simplista, o tratamento de problemas inconsistentes é feito empregando-se apenas a fatoração QR e resolvendo-se um problema de mínimos quadrados. A condição de (KKT) consiste em se resolver um sistema do tipo $Ax = b$. Se A não é de posto pleno, então, ou o sistema é impossível ou indeterminado. Em qualquer um destes casos obtemos $\bar{A} = [A \ E]$, onde E é composto de vetores unitários e \bar{A} é de posto de linha pleno.

Resolve-se, então, $\bar{A}\hat{x} = b$ por mínimos quadrados, sendo $\hat{x} = [x^T \ \tilde{x}^T]^T$ e \tilde{x} uma variável artificial. A partir da solução obtida é possível verificar se $Ax = b$ é indeterminado ou impossível. Ainda, a partir dos valores dos multiplicadores de Lagrange, de \hat{x} e da estrutura de E é possível saber se existem restrições redundantes e estas serão automaticamente eliminadas. A partir da resolução do sistema ampliado, é possível perceber se o espaço viável da PQ é vazio. Nesta situação, os valores dos multiplicadores de Lagrange serão impostos, o que assegura a convergência do método. Quando a base do espaço nulo das restrições de igualdade é base para o kernel das restrições de limites, as restrições de igualdade são relaxadas quando estritamente necessário de forma que a direção de busca obtida não gere valores que estejam fora de seus limites. O princípio do método de conjuntos ativos usado é permitir que até $n+1$ restrições possam ser ativadas, sendo n a dimensão do problema original (P1) ou (P2). Por questões de implementação, no entanto, ao invés de permitirmos que se introduzam $n+1$ restrições, optamos por alterar a forma padrão do problema da PNL que se quer resolver. Basicamente, a idéia é a de se introduzir uma variável a mais na função objetivo de (P1) ou (P2) como um termo quadrático, a qual não aparecerá nas restrições.

Ou seja, embora o problema que o algoritmo MISQPSOL irá resolver seja dado por (P2), a forma padrão que deve ser usada é dada em (P3), a saber:

$$\begin{aligned}
 & x \in B_\delta(x^*) \cap X \Rightarrow f(x) \geq f(x^*) = \min_{x \in X} f(x_r) + \frac{1}{2} x_a^2 \\
 & \text{sendo,} \\
 & X = \left\{ x \mid x \in X^o \subset \mathbb{R}^n; x_a \in \mathbb{R}; h(x) = h'(x_r) + 0x_a = 0; g(x) = g'(x_r) + 0x_a \leq 0 \right\} \quad (\text{P3}) \\
 & \text{onde, } x = \begin{bmatrix} x_r \\ x_a \end{bmatrix}; \quad f: \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}; h': \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}^m; g': \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}^p \\
 & \quad \delta > 0; B_\delta(x^*) \text{ e' uma bola aberta em torno de } x^*
 \end{aligned}$$

No problema (P3) o índice r se refere às variáveis originais do problema da PNL que se quer resolver e o índice a à variável artificial da forma padrão do algoritmo MISQPSOL. Note que x_a deve ser igual a zero na solução ótima. Os mapeamentos f , h e g devem ser tomados apenas em relação às variáveis originais. O mapeamento g pode englobar restrições de limites, definidas como em (P4). Neste caso, estas devem ser identificadas pelo usuário para que problemas de inconsistência entre estas restrições e as de igualdade possam ser tratadas.

$$l \leq x_r \leq u \quad (\text{P4})$$

onde, $l, u \in \mathbb{R}^{n-1}$

Findos estes comentários, o algoritmo MISQPSOL para a resolução do problema (P3), passa a ser apresentado. A nomenclatura empregada na descrição do algoritmo é constante da tabela 3.1. Na tabela, dividimos as variáveis em diversos grupos, como os parâmetros que devem ser fornecidos pelo usuário, as mensagens de aviso enviadas (ST) ao usuário pelo programa, as variáveis e funções que definem o problema da PNL e os multiplicadores de Lagrange das restrições (f , h , g , l , u , x , n , m , p , λ , μ), e algumas variáveis internas do programa (número de iterações, variáveis auxiliares, matriz de restrições ativas, número de restrições ativas, índice das restrições ativas, direção de busca, gradientes e Hessiano). Os parâmetros que devem ser fornecidos pelo usuário incluem parâmetros de precisão

numérica (ε_V , ε_A), critérios de parada do algoritmo (ε_P , k^{max} , k_{qp}^{max}), estimativas iniciais (x^0 , μ^0) e parâmetros de sintonia do algoritmo (μ^I).

Tabela 3.1: Nomenclatura empregada na descrição do algoritmo MISQPSOL

parâmetros de convergência e tolerância numérica (definidos pelo usuário)		
ε_P	...	tolerância para o critério de parada (como definido no capítulo 2 no item III.6)
ε_V	...	valor, abaixo do qual um valor em módulo é considerado virtualmente zero
ε_A	...	perturbação a ser realizada quando a matriz das restrições de igualdade linearizadas for nula
k^{max}	...	número máximo de iterações do algoritmo SQP
k_{qp}^{max}	...	número máximo de iterações do algoritmo de resolução da PQ
estimativa inicial (definidos pelo usuário)		
x^0	...	valor com que as variáveis de decisão são iniciadas
μ^0	...	valor com o qual os multiplicadores de Lagrange de todas as restrições são iniciados
parâmetros de sintonia do algoritmo (definidos pelo usuário)		
μ^I	...	valor atribuído aos multiplicadores de Lagrange associados às restrições de desigualdade no caso de se ter um problema da PQ reduzido inviável ou crítico (para a definição de problema da PQ crítico, consulte o capítulo 4, item II.1)
definição do problema da PNL (conforme a forma padrão em (P3) e (P4))		
x	...	variáveis de decisão
f	...	função objetivo
h	...	restrições de igualdade
g	...	restrições de desigualdade
l	...	limite inferior nas variáveis de decisão
n	...	número de variáveis de decisão (incluindo a variável artificial x_a)
m	...	número de restrições de igualdade
p	...	número de restrições de desigualdade
u	...	limite superior nas variáveis de decisão
λ	...	multiplicadores de Lagrange associados às restrições de igualdade

(continuação da tabela 3.1)

μ ... multiplicadores de Lagrange associados às restrições de desigualdade

mensagem de aviso

ST ... indica a ocorrência de avisos a nível da PQ. Assume um dos seguintes valores:

- 0 ... indica que uma solução estacionária da PQ foi obtida
- 1 ... indica que existem erros de precisão numérica relevantes e que a solução pode não ser a correta.
- 2 ... indica que existem restrições ativas, mas o sistema de KKT é inconsistente, ou seja, a solução obtida não é estacionária.
- 4 ... indica que a solução ótima do problema da PQ obtida corresponde à solução irrestrita e que a matriz Hessiana é de posto deficiente e o sistema de equações é consistente.
- 5 ... indica que a solução do problema da PQ obtida corresponde à solução irrestrita e que a matriz Hessiana é de posto deficiente e o sistema de equações é inconsistente. Ou seja, a solução obtida não é estacionária.
- 10 ... indica que o problema da PQ não tem solução viável
- 11 ... existem restrições não lineares de desigualdade que podem não estar satisfeitas pela solução da PQ encontrada
- 13 ... indica que o problema da PQ é crítico (veja definição rigorosa no capítulo 4, item II.1)
- 14 ... indica que o problema é crítico e ardiloso (veja definição rigorosa no capítulo 4, item II.1)

variáveis internas

A ... matriz das restrições ativas

A_{ineq} ... matriz de restrições de desigualdade linearizadas reduzidas não nulas, i.e.,
 $A_{ineq} = \left(\nabla g^T(x_k) Z \right)_{I_R}$, sendo que I_R contém os índices das linhas não nulas de $\nabla g^T(x_k) Z$

\bar{A} ... matriz auxiliar de uso local

(continuação da tabela 3.1)

b	...	vetor correspondente a restrições ativas
b_{ineq}	...	vetor correspondente a restrições de desigualdade linearizadas reduzidas não nulas, i.e., $b_{ineq} = -g_{I_R}(x_k)$
b_{pormul}	...	vetor correspondente a restrições de desigualdade linearizadas reduzidas nulas, i.e., $b_{pormul} = -g_{I_N}(x_k)$, sendo que I_N contém os índices das linhas nulas de $\nabla g^T(x_k)Z$
$\bar{b}, \overline{\bar{b}}$...	vetores de uso local
d	...	direção de busca, i.e., variável de decisão do problema da PQ
\bar{d}	...	solução particular do sistema de equações correspondente às restrições de igualdade
$\overline{\bar{d}}$...	variável auxiliar de uso local
\tilde{d}	...	variável auxiliar de uso local
e_i	...	vetor unitário sendo que o elemento não nulo ocupa a $i^{ésima}$ posição
\tilde{h}	...	porção de h que corresponde às linhas LI da matriz de restrições de igualdade linearizadas
H	...	aproximação da matriz Hessiana da função Lagrangeana do problema da PNL
H_n	...	matriz de uso local (porção LD de \tilde{H})
\overline{H}	...	matriz de uso local (porção LI de \tilde{H})
\tilde{H}	...	matriz Hessiana reduzida
i	...	variável auxiliar de uso local
i_{max}	...	variável auxiliar de uso local
$j_k(i)$...	elemento de J_k
J_k	...	contém o índice das restrições ativas na solução do problema da PQ na iteração k do algoritmo MISQPSOL
k	...	iteração do algoritmo SQP
k_{qp}	...	iteração do algoritmo de resolução da PQ
mr	...	posto da matriz de restrições de igualdade linearizadas
M	...	matriz de uso local
M_1	...	matriz de uso local

(continuação da tabela 3.1)

\tilde{M}_1	...	matriz de uso local
\overline{M}_1	...	matriz de uso local
M_n	...	matriz de uso local
\overline{M}_n	...	matriz de uso local
na	...	número de restrições ativas
nr	...	número de variáveis do problema da PQ reduzido, $nr = n - mr$
pr	...	número de restrições de desigualdade não nulas do problema da PQ reduzido
Q, R	...	indicam as matrizes obtidas na fatoração QR
Q_2, R_2	...	indicam as matrizes obtidas na fatoração QR
\hat{Q}_2, \hat{R}_2	...	indicam as matrizes obtidas na fatoração QR
\tilde{Q}, \overline{Q}	...	matrizes auxiliares de uso local
r_i	...	elementos da diagonal de R
\hat{R}	...	matriz auxiliar de uso local
t	...	variável auxiliar de uso local
\tilde{t}	...	variável auxiliar de uso local
T	...	base
Z	...	base para o kernel das restrições de igualdade linearizadas
\overline{Z}	...	base para o kernel das restrições ativas na solução encontrada ao final do algoritmo da PQ
α_k	...	atenuação da direção de busca
$\overline{\mu}, \mu_a$...	variáveis auxiliares de uso local
$\hat{\mu}$...	variável auxiliar de uso local
μ_{max}	...	variável de uso local

índices (acompanham quaisquer das variáveis supra apresentadas)

*	...	indica que se trata da solução ótima
k	...	indica a iteração do algoritmo MISQPSOL
T	...	indica transposto
1,2	...	indicam particionamentos convenientes ou então servem para distinguir diferentes fatorações obtidas

De uma forma simplista, o algoritmo MISQPSOL envolve os seguintes passos gerais:

1. Definição do problema a ser resolvido (caracterização de $f, h, g, l, u, n, m, p, x, \varepsilon_p, \varepsilon_V, \varepsilon_A, k^{max}, k_{qp}^{max}, x^o, \mu^o, \mu^I$)
2. Inicialização de variáveis ($k = 0; x_0 = x^o; \lambda_0 = \mu_0 = \mu^o$)
3. Cálculo de gradientes e Hessiano
4. Formação do problema da PQ reduzido (decomposição de variáveis, verificação de inconsistências entre as restrições)
5. Resolução do problema da PQ reduzido (uso de método de conjuntos ativos para a obtenção da direção de busca, obtém-se como solução valores para d_k, λ, μ)
6. Resolução do problema de minimização da função de mérito (obtenção de α_k)
7. Atualização de variáveis ($x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k; \lambda_{k+1} = \lambda; \mu_{k+1} = \mu; k = k + 1$)
8. Verificação da condição de otimalidade (ou encontra-se a solução ótima, ou retorna-se a 3 ou efetua-se uma fase de pós - processamento para análise da solução encontrada)

Estas etapas correspondem à seqüência de operações descritas nas tabelas 3.2 e 3.3. Para que a compreensão do algoritmo seja facilitada, i.e., para que melhor se entenda o que é feito em cada passo do algoritmo, após a apresentação das tabelas, as operações nelas constantes são comentadas com pormenores.

Tabela 3.2: Sumário da seqüência de operações do algoritmo MISQPSOL

(inicialização de variáveis)

1. Escolha qualquer solução inicial $\{x^o, \mu^o\}$ e atribua um valor a μ^I . Ainda, especifique $\varepsilon_p, \varepsilon_V, k^{max}$ e k_{qp}^{max} . Faça $k = 0, \lambda_k = \mu_k = \mu^o$.

(continuação da tabela 3.2)

(formação do problema da PQ -cálculo do Hessiano, dos gradientes, da base para a decomposição e verificação de inconsistências nas restrições de igualdade e de limites)

2. Use o método de diferenças finitas ou expressões analíticas para calcular:

$$H(x_k, \lambda_k, \mu_k), \nabla f^T(x_k), \nabla h^T(x_k), \nabla g^T(x_k)$$

3. Efetue a fatoração QR de $\nabla h(x_k)$, i.e., $Q^T \nabla h(x_k) = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$, onde R é de ordem m e os

elementos da diagonal de R são denotados por r_i . Faça $i = 1$.

4. Se $r_i = 0$, permuta a $i^{\text{ésimo}}$ coluna original de $\nabla h(x_k)$ e o $i^{\text{ésimo}}$ elemento original de $h(x_k)$ de modo que eles passem a ocupar a última posição de $\nabla h(x_k)$ e $h(x_k)$, respectivamente.

5. Se $i < m$ faça $i = i + 1$ e retorne a 4

6. Ao final deste procedimento teremos $m-mr$ colunas permutadas, sendo mr o posto de $\nabla h(x_k)$. Para o caso de se ter $mr = 0$, ou seja, quando $\nabla h(x_k)$ é uma matriz nula, faça $mr = 1$ e modifique o primeiro componente de $\nabla h(x_k)$ correspondente a um elemento de x que é mapeado por h , atribuindo-lhe o valor ε_A . Elimine, então, todas as $m-mr$ últimas colunas e linhas de $\nabla h(x_k)$ e $h(x_k)$, obtendo $\nabla \tilde{h}(x_k)$ e $\tilde{h}(x_k)$, respectivamente, atualizando a fatoração QR da matriz resultante, i.e., $Q^T \nabla \tilde{h}(x_k) = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$. Obtenha, ainda,

$$nr = n - mr.$$

7. A partir da fatoração QR obtida no item precedente faça:

$$\begin{bmatrix} T & Z \end{bmatrix} = Q; T \in \mathbb{R}^{n \times mr}; Z \in \mathbb{R}^{n \times nr}$$

$$R^T \tilde{d} = -\tilde{h}(x_k)$$

$$\bar{d}_k = T\tilde{d}$$

8. Para cada $i = 1, \dots, n$ se $Z^T e_i = 0$, sendo e_i o $i^{\text{ésimo}}$ vetor unitário, verifique se $l_i \leq \bar{d}_{i,k} \leq u_i$, sendo $\bar{d}_{i,k}, l_i, u_i$, respectivamente, o $i^{\text{ésimo}}$ elemento de \bar{d}_k , l e u . Se a desigualdade não é satisfeita faça:

- se $\bar{d}_{i,k} > u_i - x_{i,k}$ então $\bar{d}_{i,k} = \frac{x_{i,k} + l_i}{2} - x_{i,k}$
- se $\bar{d}_{i,k} < l_i - x_{i,k}$ então $\bar{d}_{i,k} = \frac{x_{i,k} + u_i}{2} - x_{i,k}$

(continuação da tabela 3.2)

(*formação do problema da PQ reduzido - verificação de inconsistências nas restrições de desigualdade*)

9. Atribua a pr o número de linhas não nulas em $\nabla g^T(x_k)Z$ e forme a matriz A_{ineq} como sendo a porção não nula de $\nabla g^T(x_k)Z$. Forme, ainda, o vetor b_{ineq} cujos elementos correspondem às linhas de $g(x_k)$ correspondentes às linhas não nulas em $\nabla g^T(x_k)Z$.

Ou seja, efetua-se o seguinte particionamento: $\nabla g^T(x_k)Z = \begin{bmatrix} A_{ineq} \\ 0 \end{bmatrix}$,

$$\begin{bmatrix} -g(x_k) \\ -\nabla g^T(x_k)\bar{d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{ineq} \\ b_{pormul} \end{bmatrix} A_{ineq} \in \mathbb{R}^{pr \times nr}; \dim(0) = (p - pr) \times nr; b_{ineq} \in \mathbb{R}^{pr};$$

$b_{pormul} \in \mathbb{R}^{p-pr}$. Se $b_{pormul} < 0$ então ST=-11 e existem restrições de desigualdade inconsistentes e que serão ignoradas. Em seguida, o problema da PQ reduzido é formado como:

$$\begin{aligned} \min_d & \frac{1}{2} d^T \tilde{H} d + c^T d \\ \text{s.a.} & A_{ineq} d \leq b_{ineq} \end{aligned}$$

onde, $\tilde{H} = Z^T H(x_k, \lambda_k, \mu_k) Z \in \mathbb{R}^{nr \times nr}$; $c = \nabla f^T(x_k)Z + \bar{d}_k^T H(x_k, \lambda_k, \mu_k) Z$;

$$d_k = Z d + \bar{d}_k$$

(*inicialização do conjunto ativo*)

10. **Nomenclatura:** os índices das restrições ativas são armazenados no vetor J_k , o número de restrições ativas na iteração k é na_k e o conjunto das restrições ativas é denotado por A , $A \in \mathbb{R}^{na_k \times nr}$, sendo que a $i^{ésima}$ linha de A corresponde à $j_k(i)^{ésima}$ linha de A_{ineq} , $j_k(i)$ é o $i^{ésimo}$ elemento de J_k . Ainda, note que A tem a seguinte estrutura $[A \in \mathbb{R}^{mr \times (nr-1)} \quad 0]$.

Se $k = 0$: inicialize na_k e J_k como segue:

(continuação da tabela 3.2)

- se $pr > nr \Rightarrow na_k = nr$
- se $pr \leq nr \Rightarrow na_k = pr$
- $J_k = \{1, 2, \dots, na_k\}$

Se $k \geq 1$: $na_k = na_{k-1}$; $J_k = J_{k-1}$. Verifique se em J_k existem restrições que foram eliminadas no passo 9 e se este for o caso, atualize na_k e J_k , retirando-se destes o número de restrições e os índices das restrições que foram eliminadas.

(resolução do problema da PQ reduzido)

11. Faça $k_{qp}=1$. Obtenha a seguinte fatoração QR: $\tilde{H} = QR$

(resolução do sistema de KKT)

12. Faça o seguinte particionamento com as respectivas permutações necessárias:

$$\tilde{H} = \left[\begin{array}{cc|c} \bar{H} & H_1^T & 0 \\ H_1 & H_n & \\ \hline 0^T & & 1 \end{array} \right], \text{ aonde } \bar{H} \text{ é de posto pleno e o último elemento da diagonal de } \tilde{H}$$

corresponde à variável artificial. Este particionamento é facilmente obtido a partir da fatoração QR obtida no item 11. Ou seja, os elementos da diagonal de \bar{H} correspondem aos $i^{\text{ésimos}}$ elementos da diagonal de \tilde{H} que correspondem aos $i^{\text{ésimos}}$ elementos não nulos da diagonal de R . Casos particulares desta fatoração correspondem a se ter por exemplo:

$$H_n = 0 \in IR^{(nr-1) \times (nr-1)}, \text{ ou seja, } \tilde{H} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right]; \text{ ou ainda, pode-se ter a situação inversa, i.e.,}$$

$$\bar{H} \in IR^{(nr-1) \times (nr-1)} \text{ e neste caso } \tilde{H} = \left[\begin{array}{c|c} \bar{H} & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right] \text{ é não singular.}$$

13. Atualize a fatoração QR obtida no item 11 com a porção não singular de \tilde{H} , ou seja, $\bar{H} = QR$.

(continuação da tabela 3.2)

(caso da existência de restrições ativas, senão os passos 14 a 22 são substituídos pelos passos 14 a 22 da tabela 3.3)

14. Em função do particionamento e permutações efetuadas no passo 12, obtenha:

$$c^T = [c_1^T \quad c_2^T \mid 0]; A = [A_1 \quad A_2 \mid 0]; d = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \overline{d_a} = 0 \end{bmatrix}$$

15. A partir dos particionamentos efetuados, proceda como:

Se \tilde{H} é singular e se existe a porção não singular \overline{H} , obtenha:

$$\overline{A}_1 = \begin{bmatrix} H_1 \\ A_1 \end{bmatrix}; \overline{A}_2 = \begin{bmatrix} H_n & A_2^T \\ A_2 & 0 \end{bmatrix}; \overline{\mu} = \begin{bmatrix} d_2 \\ \mu_k \end{bmatrix}; \overline{b} = \begin{bmatrix} -c_2 \\ b \end{bmatrix}$$

Se \tilde{H} é singular e se não existe a porção não singular \overline{H} , faça:

$$\overline{A}_1 = 0; \overline{A}_2 = \begin{bmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix}; \overline{\mu} = \begin{bmatrix} d \\ \mu_k \end{bmatrix}; \overline{b} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix}$$

Se \tilde{H} é não singular, obtenha:

$$\overline{A}_1 = A; \overline{A}_2 = 0; \overline{\mu} = \mu_k; \overline{b} = b$$

16. Se não existe \overline{H} , faça: $M = \overline{A}_2; \overline{\overline{b}} = \overline{b}$.

Em caso contrário, faça:

$$R^T \tilde{t} = -c_1$$

$$t = Q \tilde{t}$$

$$R^T \tilde{M}_1 = \overline{A}_1^T$$

$$\overline{M}_1 = Q \tilde{M}_1$$

$$M_1 = \overline{A}_1 \overline{M}_1$$

$$M = \overline{A}_2 - M_1$$

(continuação da tabela 3.2)

$$\overline{\overline{b}} = \overline{b} - \overline{A}_1 t$$

17. Efetue a seguinte fatoração QR: $M^T = Q_2 R_2$.

18. A cada elemento i da diagonal de R_2 nulo associe um $i^{\text{ésimo}}$ vetor unitário $m_{n,i}$. Se for o caso atualize M como: $M = \begin{bmatrix} M & \bar{M}_n \end{bmatrix}$, onde \bar{M}_n é constituída por todos os vetores unitários $m_{n,i}$. Ainda, se for o caso atualize a fatoração QR do item 17, i.e.,

$$M^T = \begin{bmatrix} Q_2 & \bar{Q}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_2 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

19. Efetue a seguinte operação de passos (obtenção da solução de mínima norma):

$$\begin{cases} R_2^T \bar{d} = \bar{b} \\ \begin{bmatrix} \bar{\mu} \\ \mu_a \end{bmatrix} = Q_2 \bar{d} \end{cases}$$

20. Se existe a porção \bar{M}_n em M , proceda da seguinte forma. Primeiramente, obtenha

$\mu_{\max} = \max |\mu_i|$, sendo que μ_i são os componentes de $\bar{\mu}$ correspondentes aos multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade conforme o particionamento realizado em 15. Em seguida, aplique o teorema de Penrose fazendo com que todos os componentes de μ_i associados às linhas linearmente dependentes de M sejam iguais a $-\mu_{\max} - 0.1$. Isto pode, e.g., ser feito da seguinte forma:

- $\hat{\mu} = (-\mu_{\max} - 0.1) \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} - \bar{M}_n^T \bar{\mu}$
- $\tilde{Q}_2 = \bar{Q}_2^T \begin{bmatrix} I_M \\ 0 \end{bmatrix} \bar{M}_n$, onde I_M é uma matriz unitária de mesma dimensão que M
- obtenha a seguinte fatoração QR: $\tilde{Q}_2 = \hat{Q}_2 \hat{R}_2$
- $\begin{bmatrix} \bar{\mu} \\ \mu_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mu} \\ \mu_a \end{bmatrix} + \bar{Q}_2 \tilde{Q}_2 \hat{R}_2^{T-1} \hat{\mu}$

21. Se existe \bar{H} , faça $d_1 = t - \bar{M}_1 \bar{\mu}$.

22. Recupere as variáveis originais d e μ_k conforme os particionamentos e atribuições realizados nos passos 14 e 15.

(continuação da tabela 3.2)

(atualização do conjunto ativo e verificação da condição de otimalidade do problema da PQ)

23. Se todos os componentes de μ_k forem positivos ou nulos e se $A_{ineq,i}d \leq b_i$; para $i \notin J_k$ vá para 25 (temos as seguintes situações possíveis: quando M é de posto pleno ou quando M é de posto deficiente mas $\mu_a = 0$, a solução obtida na PQ é estacionária; quando M não é de posto pleno e $\mu_a \neq 0$, a solução obtida não é estacionária e uma mensagem de aviso é gerada, a saber, ST = -2).

Em caso contrário, a solução ótima da PQ ainda não foi encontrada. Proceda como:

- se $k_{qp} = k_{qp}^{max}$ vá para 24, senão $k_{qp} = k_{qp} + 1$
- $i_{max} = \max_i \{|\mu_i| : \mu_i < 0\}$
- elimine de J_k o elemento $j_k(i) = i_{max}$ e faça $na_k = na_k - 1$
- inclua em J_k os índices de restrições violadas da seguinte forma: se o índice i satisfaz $A_{ineq,i}d > b_i$; $i \notin J_k$ e $\dim(J_k) = na_k < nr$ então $J_k = \{i, J_k\}$ e $na_k = na_k + 1$. Repita este procedimento para todos os $i = 1, \dots, pr$ e $i \notin J_k$.
- retorne para 14

24. Faça $\mu_k = \mu^I$. O problema da PQ é inviável ou crítico e vá para 25.

(término da PQ, recuperação dos multiplicadores de Lagrange de restrições de igualdade)

25. Atualize λ_k de acordo com a equação (2.III.4.11)

(minimização da função de mérito e atualização das variáveis de decisão)

26. Obtenha α_k usando a equação (2.III.5.2) como função de mérito, aplicando o procedimento de Biegler & Cuthrell (1985) descrito no item III.5 do capítulo 2

27. Calcule $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

(continuação da tabela 3.2)

(verificação do critério de parada: condição de otimalidade e viabilidade da solução)

28. Se a equação (2.III.6.1) for satisfeita vá para 29, senão se $k < k^{max}$ faça $k = k + 1$ e retorne ao passo 2, em caso contrário o algoritmo SQP não convergiu dentro da tolerância especificada ε_p e uma mensagem de aviso é gerada.
29. Se a equação (2.III.6.5) não for satisfeita, a solução é não viável e vá para 30, senão verifique a condição de 2ª ordem, a saber, obtenha pelo método da fatoração QR uma base \bar{Z} para o kernel das restrições pertencentes ao conjunto ativo na solução ótima. Se $\bar{Z}^T H(x^*, \lambda^*, \mu^*) \bar{Z}$ não contiver autovalores negativos e nulos, então a solução ótima do problema foi encontrada e o algoritmo é finalizado. Em caso contrário, obteve-se uma solução estacionária viável que pode não ser de mínimo e vá para 30.
30. Neste item, primeiramente se $\bar{Z}^T H(x^*, \lambda^*, \mu^*) \bar{Z}$ não contém autovalores negativos, verifique se a solução é de mínimo. Em seguida, podem ser feitos tratamentos para as situações em que a solução estacionária não é de mínimo ou quando algumas restrições não são satisfeitas. Após se efetuar o tratamento, pode-se, eventualmente, retornar ao passo 2 do algoritmo, incrementando-se k .

Tabela 3.3: Sumário das operações de resolução da condição da KKT da PQ para o caso irrestrito

14. Efetue conforme o particionamento do passo 12 da tabela 3.2, o seguinte

$$\text{particionamento: } d = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_a = 0 \end{bmatrix}; c^T = \begin{bmatrix} c_1^T & c_2^T & \vdots & 0 \end{bmatrix}.$$

Observação: se \bar{H} é de posto $nr-1$ então não existe d_2 e c_2 . Se H_n for de ordem $nr-1$, então não existe d_1 e c_1 .

15. Usando a fatoração QR obtida no passo 13 da tabela 3.2, se a ordem de H_n for inferior

$$\text{a } nr-1, \text{ resolve } \bar{H}t = -c_1, \text{ i.e., faça: } \begin{cases} \tilde{t} = -Q^T c \\ Rt = \tilde{t} \end{cases}.$$

16. Se $\text{rank}(\bar{H}) = nr - 1$ $d_1 = t$ e vá para 21, senão vá para 17.

(continuação da tabela 3.3)

17. Se existe \bar{H} , usando a fatoração QR de \bar{H} , faça: $\begin{cases} M = H_n - H_1^T \bar{H}^{-1} H_1 \\ \bar{b} = -c_2 - H_1 t \end{cases}$. Por exemplo, aplique um procedimento análogo ao que foi feito no passo 16 da tabela 3.2. Se não existe \bar{H} , então $M = H_n = 0; \bar{b} = -c$.
 18. Efetue a fatoração QR de M^T . Se M for de posto deficiente, atualize M e sua fatoração QR como: $M = [M \quad M_n]$, sendo M_n formada de vetores unitários correspondentes às linhas L.D. da matriz original M .
 19. Resolva $Md_2 = \bar{b}$ diretamente se não existe M_n ou resolva $M \begin{bmatrix} d_2 \\ \mu_a \end{bmatrix} = \bar{b}$ por mínimos quadrados em caso contrário. Se $\mu_a = 0$, o problema irrestrito é indeterminado e ST=-4. Se $\mu_a \neq 0$ o sistema é inconsistente e impossível e ST=-5. Vá para 20 se existe \bar{H} ou para 21 em caso contrário.
 20. Faça: $d_1 = t - \bar{H}^{-1} H_1^T d_2$
 21. Recupere as variáveis originais conforme os particionamentos realizados e faça $\mu_k = 0$.
 22. Faça $k_{qp} = k_{qp} + 1$ e retorne ao passo 23 da tabela 3.2.
-

Primeiramente, no passo 1, atribuem-se valores aos diversos parâmetros do algoritmo e as variáveis são iniciadas. Em seguida, no passo 2, calculam-se os gradientes de todas as funções necessárias para a formulação do problema da PQ. Nos passos 3 a 9, procede-se com o cálculo de uma base ortonormal do kernel do conjunto de restrições de igualdade linearizadas e inconsistências nestas e em relação às restrições de limites são verificadas. No passo 9, a base obtida é aplicada para se formar o problema reduzido da PQ.

Basicamente, a idéia do procedimento adotado é efetuar uma fatoração QR da transposta da matriz de restrições de igualdade linearizadas, $\nabla h(x_k)$, obtendo-se uma matriz Q e outra R (passo 3). Os elementos da diagonal principal de R são analisados (passos 4 e 5) para se identificar a existência de restrições redundantes ou que gerem um sistema impossível (o que ocorre quando R não é de posto m , o que acontece, e.g., quando existirem elementos da diagonal de R , r_i , nulos). Todas as restrições linearmente dependentes são eliminadas (passo 6). Um caso particular que se pode ter é quando a matriz das restrições de igualdade for nula. Neste caso, atribui-se um valor pequeno (ϵ_A) ao seu primeiro elemento (passo 6).

Desta forma, pode-se obter uma base Z de $\ker(\nabla h^T(x_k))$, bem como uma solução particular do sistema de restrições de igualdade linearizadas, o que é feito no passo 7. Ainda, se a base obtida for também base para o espaço nulo de algumas restrições de limites estas podem ser ignoradas. Assim, no passo 8, modifica-se a solução particular obtida para o sistema de equações de igualdade, de forma que nenhuma restrição de limite que será ignorada seja violada. A idéia é trazer os componentes de \bar{d}_k para dentro do espaço delimitado por l e u .

No passo 9, o problema da PQ reduzido é formado a partir da base e solução particular obtidas nos passos anteriores. Um cuidado deve ser tomado neste ponto. A base Z pode também ser base para o espaço nulo de algumas restrições de desigualdade, o que acarretará a existência de linhas nulas em $\nabla g^T(x_k)Z$, que serão ignoradas pelo método de conjuntos ativos. Se este for o caso das restrições de limites, um tratamento foi feito no passo 8. No caso das demais restrições de desigualdade nenhum tratamento foi feito, uma vez que são poucos os casos em que o algoritmo terá problemas de convergência para uma solução viável, não se justificando, assim, o aumento no tempo de computação que seria ocasionado se algum tratamento fosse feito. As restrições de desigualdade reduzidas nulas são eliminadas, o que também é mostrado no passo 9. Quando existirem algumas restrições que não serão satisfeitas, i.e., quando $\nabla g_i^T(x_k)Zd = 0$ e $-g_i(x_k) - \nabla g_i^T(x_k)\bar{d}_k < 0$ para alguns i , gera-se uma mensagem de aviso, i.e., ST=-11. Note que isto significa que a nível da PQ, a restrição não é atendida, o que não implica em que a restrição original de desigualdade nas próximas iterações do algoritmo não seja satisfeita.

Em 10, inicializa-se o conjunto de restrições que devem estar ativas. Na primeira iteração do algoritmo MISQPSOL, i.e., quando $k=0$, ativa-se o maior número possível de restrições. Duas situações distintas surgem, a saber, quando $pr > nr-1$ e neste caso ativam-se as nr primeiras restrições e o caso contrário quando as primeiras pr restrições são ativadas. Vamos assumir, inicialmente, que a primeira situação ocorra. Como, na verdade, uma das nr restrições será (por definição da forma padrão de (P3)) linearmente dependente das demais restrições, percebemos que parte-se de um sistema que é de posto deficiente. Esta é a principal característica do método empregado e que difere das demais abordagens da literatura. Aplicando este raciocínio para casos particulares, perceberemos que se,

eventualmente, tivermos poucas restrições não lineares e de limites, poderemos estar ativando ambas as restrições de limites. Assim, uma primeira indagação que surge no leitor é o porque de se realizar este procedimento, aparentemente, tão incoerente. Uma discussão mais pormenorizada será apresentada no capítulo 4, quando o algoritmo será analisado e os problemas da PQ serão melhor caracterizados. O que interessa observar por ora, é que se o algoritmo parte do pressuposto que irão ser ativadas restrições que por definição serão LD, ele é capaz de lidar com matrizes de posto deficiente e, adicionalmente, ele é capaz de retirar do conjunto ativo todas as restrições LD. Esta é a essência do algoritmo, ou seja, todas as restrições redundantes e a identificação de ser o espaço viável vazio ou não, é feita a partir do princípio de que restrições LD são permitidas e com isto consegue-se obter a mínima representação da região viável ou de sub-regiões viáveis. Para todas as demais iterações do algoritmo MISQPSOL, as restrições que estarão ativas no início do algoritmo de conjuntos ativos, serão aquelas que estavam ativas na solução ótima do problema da PQ na iteração anterior.

Os passos 11 a 24 correspondem ao método de conjuntos ativos empregado para a resolução do problema da PQ. Antes de descrevermos estas operações, teceremos comentários sobre os passos restantes. No passo 25, recuperam-se os valores dos multiplicadores de Lagrange associados às restrições de igualdade. No passo 26, resolve-se o problema de busca unidirecional e as novas variáveis de decisão são calculadas em 27. No passo 28, é verificado o critério de parada do algoritmo e em 29 a condição de otimalidade de 2ª ordem, bem como a violação de eventuais restrições de desigualdade ou de igualdade não lineares são verificadas e correções poderiam ser feitas no passo 30. O passo 30 corresponderia a uma fase de pós - processamento e constitui uma possível linha de pesquisa futura para a continuidade dos estudos iniciados na presente tese. Optamos por não efetuar nenhum tratamento, pois os casos de falha de convergência do algoritmo mostraram-se raros, como será visto no capítulo 5, quando o algoritmo é aplicado para diversos problemas da literatura. Como o objetivo é aplicar o algoritmo para um problema de otimização em tempo real, é de interesse que o custo computacional dele seja o menor possível.

Como visto no item III do capítulo 2, o método de conjuntos ativos corresponde em se obter o conjunto de restrições que deverão estar ativas na solução ótima do problema da PQ, J_k , para as quais a condição de KKT, dada por (3.1) estará satisfeita com $\mu \geq 0$.

$$\begin{bmatrix} \tilde{H} & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

Assim, entender o algoritmo empregado significa compreender os seguintes dois aspectos:

- entender como (3.1) é resolvido numericamente para uma dada matriz A . Esta etapa corresponde aos passos 12 a 22 do algoritmo MISQPSOL.
- entender como a matriz A é atualizada, de uma iteração a outra do algoritmo de conjuntos ativos, i.e., como restrições são incorporadas ou eliminadas, ou seja, como J_k é obtido. Esta etapa corresponde aos passos 23 e 24 do algoritmo MISQPSOL.

Um caso particular que se tem é quando em uma iteração qualquer do algoritmo de solução do problema da PQ, o problema a ser resolvido não apresenta restrições ativas. Neste caso, os passos 14 a 22 da tabela 3.2 são substituídos pelos passos 14 a 22 da tabela 3.3. Note que a resolução destes últimos pode ser feita uma única vez e neste caso a solução obtida deve ser armazenada. Os passos 14 a 20 da tabela 3.3 não são comentados por serem análogos ao procedimento usado para a resolução do sistema de KKT.

No capítulo 2, vimos que um método adequado para a resolução de (3.1) consistia em se efetuar a seguinte sequência de operações:

$$\begin{aligned} M &= -A\tilde{H}^{-1}A^T \\ \tilde{H}t &= -c \\ M\mu &= b - At \\ d &= t - \tilde{H}^{-1}A^T\mu \end{aligned} \quad (3.2)$$

Um problema, no entanto, surge durante a resolução de (3.2) quando o Hessiano é calculado analiticamente ou por diferenças finitas e é devido ao fato de que o Hessiano pode ser de posto deficiente. Nesta situação, a sua inversa não é definida. Assim, devemos

saber como (3.2) pode ser modificado para este caso. Ainda, além de podermos ter o Hessiano de posto deficiente, podemos ter A ou M de posto deficiente. Qualquer destas três situações deve ser identificada e tratada. É o que nos proporemos em seguida. Primeiramente, iremos mostrar como o sistema (3.2) pode ser modificado para que autovalores nulos na matriz Hessiana reduzida não acarretem problemas e em seguida iremos tratar de todas as demais inconsistências do problema da PQ. O primeiro tratamento corresponde aos passos 11 a 17, 21 e 22 do algoritmo MISQPSOL e o último aos passos 18 a 20.

Suponha que a matriz Hessiana pode ser particionada como em (3.3), em que \bar{H} é de posto pleno. Esta não é uma hipótese restritiva pois, linhas e colunas podem ser permutadas em (3.1) sem que isto modifique a solução do sistema (3.1) ou quando a matriz Hessiana em relação às variáveis originais do problema da PNL é nula, \bar{H} não será definido e o algoritmo continua válido.

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \bar{H} & H_1^T \\ 0 & H_1 & H_n \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Assim, sempre é possível obter a estrutura dada em (3.3). Para tanto basta efetuar permutações de linhas e colunas em todas as matrizes e vetores pertinentes (o que corresponde aos passos 12, 14 e 22 do algoritmo MISQPSOL). A forma com que estas permutações devem ser processadas pode ser obtida da fatoração QR da matriz \tilde{H} realizada no passo 11 do algoritmo. Cada elemento nulo da diagonal principal da matriz R desta fatoração corresponde a uma linha linearmente dependente das anteriores ou a uma linha nula. Assim, esta será uma linha que deverá ser permutada (e sua respectiva coluna, já que a estrutura simétrica de \tilde{H} deve ser mantida em (3.3)). Este procedimento é realizado no passo 12 do algoritmo MISQPSOL. A formalização matemática da validade deste procedimento e de todos os outros feitos ao longo deste item será apresentada na forma de lemas e proposições no capítulo 4.

Em função do particionamento (3.3), (3.1) pode ser escrito como:

$$\left[\begin{array}{c|ccc} 1 & & 0 & \\ \hline & \bar{H} & \bar{H}_1^T & A_1^T \\ \hline 0 & H_1 & H_n & A_2^T \\ & A_1 & A_2 & 0 \end{array} \right] \begin{bmatrix} d_a \\ d_1 \\ d_2 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -c_1 \\ -c_2 \\ b \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

De (3.4) percebemos que $d_a=0$ e a resolução de (3.4) consiste em se resolver (3.5).

$$\left[\begin{array}{c|ccc} \bar{H} & H_1^T & A_1^T & \\ \hline H_1 & H_n & A_2^T & \\ A_1 & A_2 & 0 & \end{array} \right] \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c_1 \\ -c_2 \\ b \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Note que (3.5) tem uma estrutura semelhante a (3.1), de forma que dadas as definições em (3.6), a seqüência de operações em (3.2) poderia ser substituída pelas seqüências de operações descritas em (3.7), (3.8) e (3.9).

$$\bar{A}_1 = \begin{bmatrix} H_1 \\ A_1 \end{bmatrix}; \bar{A}_2 = \begin{bmatrix} H_n & A_2^T \\ A_2 & 0 \end{bmatrix}; \bar{\mu} = \begin{bmatrix} d_2 \\ \mu \end{bmatrix}; \bar{b} = \begin{bmatrix} -c_2 \\ b \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$\begin{cases} \bar{H}t = -c_1 \\ M = \bar{A}_2 - \bar{A}_1 \bar{H}^{-1} \bar{A}_1^T \\ \bar{\bar{b}} = \bar{b} - \bar{A}_1 t \end{cases} \quad (3.7)$$

$$M\bar{\mu} = \bar{\bar{b}} \quad (3.8)$$

$$d_1 = t - \bar{H}^{-1} \bar{A}_1^T \bar{\mu} \quad (3.9)$$

Em termos do algoritmo MISQPSOL, o que temos é que (3.6) é calculado no passo 15, (3.7) é resolvido no passo 16 através do uso da fatoração QR da matriz \bar{H} (obtida no passo 13). Em 17, obtém-se a fatoração QR de M . Em 21, resolve-se (3.9) e (3.8) é resolvido nos passos 18 a 20, dos quais trataremos em seguida.

O sistema (3.8) terá solução única se e somente se M for de posto pleno. Ainda, se M é de posto deficiente, (3.8) ou terá infinitas soluções ou nenhuma, ou seja, inconsistências na PQ transformam-se em linhas LD em M .

Se M é de posto pleno, $\bar{\mu}$ é obtido diretamente de (3.8) e em caso contrário, a matriz M é ampliada conforme (3.10) e $\bar{\mu}$ é, então, obtido, resolvendo-se (3.11) por mínimos quadrados.

$$M = \begin{bmatrix} M & \bar{M}_n \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

sendo que \bar{M}_n é constituída de vetores unitários. O elemento não nulo de cada um destes vetores corresponde a uma linha LD na porção M .

$$M_n \begin{bmatrix} \bar{\mu} \\ \mu_a \end{bmatrix} = \bar{b} \quad (3.11)$$

sendo que μ_a será um vetor nulo se (3.8) for indeterminado e será diferente do vetor nulo se (3.8) for impossível, como será demonstrado no capítulo 4.

Tanto para a resolução de (3.8), como para a de (3.11), pode-se usar a fatoração QR de M para a solução do respectivo sistema de equações. Isto é feito nos passos 18 e 19 do algoritmo MISQPSOL.

No caso de termos M de posto deficiente, um cuidado adicional deve ser tomado. Linhas LD em A se transformam em linhas LD em M . Ao mesmo tempo linhas LD em A indicam que em A ou existem restrições redundantes ou, então, que o sistema de equações que se quer resolver será impossível, e.g., pode-se ter que a região viável da PQ será vazia. Adicionalmente, podemos ter linhas em A que são LD em relação às primeiras nr linhas de (3.1), o que corresponde a certos tipos de não convexidade do problema da PQ que serão caracterizados no capítulo 4. Assim, é necessário que se eliminem de A todas as restrições LD. Isto pode ser feito se o valor do multiplicador de Lagrange associado à restrição LD for negativo. Neste caso, como o sistema de equações será ou indeterminado ou impossível, teremos, em qualquer um dos casos, graus de liberdade para impormos o valor do multiplicador de Lagrange. É o que fazemos. Ou seja, forçamos todos os multiplicadores de Lagrange de restrições LD a serem negativos. Isto é feito, aplicando-se o teorema de Penrose, procedimento este realizado no passo 20 do algoritmo MISQPSOL e que também é inédito.

Finalmente, resta comentar como o conjunto ativo é atualizado (passo 23) de modo que a solução do problema da PQ possa ser obtida. Se todos os multiplicadores de Lagrange

forem positivos e se não existirem restrições violadas, o conjunto ativo ótimo é identificado. Se existirem multiplicadores de Lagrange com valores negativos, então estas restrições devem ser eliminadas. Apenas uma restrição por vez é eliminada do conjunto ativo e elimina-se a restrição que possui o maior valor em módulo do multiplicador de Lagrange. Em seguida, verifica-se a existência de restrições violadas e adicionam-se estas até que o número de restrições pertencentes ao conjunto ativo seja igual à dimensão do problema reduzido. Ainda, as restrições adicionadas são sempre incorporadas nas primeiras linhas da matriz A . Uma outra questão que pode não ser transparente é quais são os índices que primeiramente serão incorporados ao conjunto ativo. Como o procedimento é válido para qualquer iteração do algoritmo SQP, tem-se que, na verdade, não só os elementos do conjunto ativo J_k devem ser armazenados, como também os elementos do conjunto não ativo. Neste caso, os índices que poderão ser ativados serão os primeiros constantes do conjunto de restrições não ativas e não necessariamente a primeira restrição não ativa do conjunto original A_{ineq} .

No passo 23, ainda, é verificado se a solução obtida pelo algoritmo é de fato estacionária, o que é feito analisando-se a consistência do sistema de equações em (3.8). Caso não seja, i.e., quando M é de posto deficiente e quando $\mu_a \neq 0$, uma mensagem de aviso é gerada (ST=-2).

Finalmente, o passo 24 corresponde à verificação de se conseguir encontrar uma solução para o problema da PQ. Neste ponto, alguns comentários são relevantes. O algoritmo MISQPSOL ou irá convergir para uma solução estacionária do problema da PQ em um número finito de operações ou então apenas uma das seguintes hipóteses é verdadeira:

- *a região viável do problema da PQ é vazia*: neste caso o que teremos é que em uma das duas últimas iterações do algoritmo de conjuntos ativos, a matriz M será de posto deficiente e o sistema (3.8) será impossível. Cabe salientar que o algoritmo tal como foi concebido não irá convergir em um número finito de iterações e assim as duas últimas iterações se referem às duas últimas antes que o número máximo de iterações (k_{qp}^{max}) seja excedido. O algoritmo MISQPSOL gera uma mensagem de aviso e retorna com ST=-10.
- *o Hessiano possui autovalores negativos e o algoritmo irá ciclar entre uma solução não estacionária e outra inviável*: problemas deste tipo serão melhor caracterizados no

capítulo 4, os quais serão chamados de problemas críticos. O que ocorre nestes casos é que o algoritmo parte de um conjunto ativo não ótimo para o qual se algumas restrições forem eliminadas, teremos, e.g. um decrescimento da função objetivo. O problema é que este é um caso de programação não convexa e NP difícil para o qual o conjunto ativo ótimo não consegue ser enxergado, pois com a eliminação das restrições a direção de busca gerada é no sentido oposto daquela correspondente à solução ótima. A solução ótima é finita e até mesmo pode ser única, no entanto ela não consegue ser detectada. Este é um caso crítico pois, embora, na maior parte das vezes parece não afetar a propriedade de convergência global do algoritmo MISQPSOL para uma solução estacionária, ele fará com que a taxa de convergência seja muito ruim, i.e., o algoritmo torna-se lento. Até o momento, não vislumbramos formas eficientes do ponto de vista de tempo computacional requerido para melhorar este problema. Neste problema, também, como no caso precedente teremos que o algoritmo não irá convergir em um número finito de iterações. O que torna esta situação diferente da anterior é que A será de posto pleno. Para estes casos, o algoritmo MISQPSOL gera uma mensagem de aviso e retorna com $ST=-13$ ou $ST=-14$.

Um caso particular que pode ocorrer quando se tem $ST=-10$ ou $ST=-13$ ou $ST=-14$ é se ter $d_k=0$. Neste caso, o que se faz é fazer com que x assuma o valor de um de seus limites. Este procedimento é, no entanto, heurístico e, assim, dependendo do valor imposto para x o algoritmo pode ter a sua convergência afetada.

Ainda, note que dissemos que o algoritmo irá convergir para uma solução estacionária do problema da PQ. Esta, pode, no entanto, não ser ótima, i.e., pode ser uma solução de máximo ou de sela. Isto pode ocorrer quando a matriz Hessiana tiver autovalores negativos e não for possível assegurar que se tenha a matriz Hessiana PD ou pelo menos PSD no plano tangente às restrições ativas. Dificuldades surgem neste caso para o caso da matriz Hessiana ser indefinida. Isto porque quando a matriz Hessiana é ND ou NSD, condições de otimalidade podem ser facilmente estabelecidas. O problema é que do ponto de vista de tempo computacional requerido, verificar a cada iteração a condição da matriz Hessiana pode não ser factível, razão pela qual preferimos adotar a estratégia da tabela 3.2, i.e., não se checar a condição de 2ª ordem a cada iteração.

CAPÍTULO 4: ANÁLISE DO ALGORITMO MISQPSOL

I. Prólogo

Dizer que um algoritmo converge, significa dizer que o algoritmo é capaz de prever a solução ótima do problema da PNL que se quer resolver. Assim, um algoritmo deixará de convergir quando problemas existirem. Nada mais lógico, então, que analisar quais são estes problemas e mostrar como o algoritmo MISQPSOL os defronta. Esta é a linha de raciocínio que será seguida neste capítulo.

O algoritmo SQP é dependente de uma direção de busca a qual deseja-se que exista e que seja finita e descendente. Como a direção de busca é obtida durante a resolução de um problema da PQ, no caso geral, ela pode não ser única. Para problemas da PQ não convexos, a obtenção desta direção é agravada pelo fato de que pode ser mais fácil a obtenção de uma ou mais soluções estacionárias não mínimas. O êxito do algoritmo está, desta forma, fortemente relacionado com a geração desta direção de busca.

Quando obtém-se uma direção de busca finita e descendente, resultados da literatura podem ser aplicados os quais mostram que qualquer algoritmo SQP irá convergir para uma solução estacionária do problema (P2) da PNL, desde que a aproximação do Hessiano seja adequada (Palomares & Mangasarian, 1976).

Assim, percebemos que, primeiramente, devemos saber classificar as soluções estacionárias dos problemas da PQ não convexos para que se possa asseverar que a direção de busca obtida é adequada. Para que a classificação da direção de busca estabelecida possa ser usada como ferramenta de análise do algoritmo MISQPSOL é necessário relacionar o procedimento de cálculo do algoritmo com os resultados estabelecidos. Para tanto, faz-se necessário estabelecer e apresentar alguns resultados genéricos da teoria de sistemas lineares. O item II trata destes assuntos. No item III, efetuamos breves comentários sobre a obtenção da direção de busca no método SQP e no item IV mostramos algumas

dificuldades que surgem durante a resolução de problemas da PQ não convexos. Em seguida, nos itens V a VII, analisamos o algoritmo elaborado.

Os resultados estabelecidos são mostrados na forma de diversos lemas, proposições, teoremas e corolários, os quais são comentados quando oportuno. Para facilitar a leitura deste capítulo, as provas dos lemas não é apresentada no presente capítulo e encontram-se no apêndice 1. A prova dos teoremas extraídos da literatura, podem ser encontradas nas referências citadas.

Finalmente, já que muitas das análises serão feitas em função do problema da PQ que se quer resolver em uma iteração qualquer do algoritmo, cabe lembrar a sua forma padrão, a saber:

$$\begin{aligned} f(d^*) &= \min_{d \in X_I} f; f = \frac{1}{2} d^T H d + c^T d; \\ X_I &= \{d \in \mathbb{R}^n \mid A_E d = b_E; A_I d \leq b_I; A_E \in \mathbb{R}^{m \times n}; A_I \in \mathbb{R}^{p \times n}\} \cap B_\delta(d^*) \end{aligned} \quad (4.I.1)$$

sendo, $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é o Hessiano da função Lagrangeana do problema da PNL, c é o gradiente da função objetivo, A_E e A_I , são os gradientes das restrições na iteração considerada, d^* é a solução procurada e $B_\delta(d^*)$ é uma bola aberta de raio δ em torno de d^* .

No caso do algoritmo MISQPSOL, resolve-se o problema da PQ reduzido, i.e., A_E não existe e H e A_{ineq} correspondem ao Hessiano e gradiente das restrições de desigualdade reduzidos.

Ainda, as restrições que estarão ativas na solução ótima serão representadas simplesmente por A , ou seja:

$$Ad = b; A = \begin{bmatrix} A_E \\ A_{J_k} \end{bmatrix}; A \in \mathbb{R}^{a \times n}; b = \begin{bmatrix} b_E \\ b_{J_k} \end{bmatrix}; J_k = \{i \mid i \in \{1, \dots, p\} \subset \mathbb{N}; A_{J_k, i} d = b_{J_k, i}\} \quad (4.I.2)$$

sendo, a o número de restrições ativas e J_k contém o índice das restrições ativas..

Desta forma, a condição de KKT para o problema da PQ (4.I.1) é dada em (4.I.3).

$$\begin{bmatrix} H & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix} \quad (4.I.3)$$

Em (4.I.3), μ compreende tanto os multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade como as de desigualdade.

Na discussão que segue nos itens vindouros, iremos caracterizar, também, as soluções de um problema associado a (4.I.1), a saber o problema (4.I.4).

$$f(d^*) = \min_{d \in X_l} f \quad (4.I.4)$$

sendo, d^* , f , d e X_l definidos como em (4.I.1)

Note que o problema (4.I.1) consiste em se obter os componentes de d para os quais f é mínimo em torno de uma vizinhança contida em X_l , enquanto que (4.I.4) consiste em se obter d para o qual o mapeamento f assume um valor máximo em torno de uma certa vizinhança contida em X_l .

II. Elaboração de resultados básicos

Neste item, iremos obter alguns resultados básicos que serão empregados nos itens subsequentes para a análise do algoritmo MISQPSOL. A exposição se faz necessária, uma vez que, apesar de inúmeros livros concernentes à teoria de programação não linear existirem, poucos tratam da caracterização de problemas da PQ não convexos, embora algumas contribuições significativas possam ser encontradas em Cao (1995), Giannessi & Tomasin (1974), Panik (1976) e Avriel et al (1988). Ainda, para que o procedimento de solução do algoritmo MISQPSOL possa ser caracterizado, alguns resultados da teoria de sistemas lineares devem ser estabelecidos e algumas definições devem ser formuladas.

II.1 Formalizações matemáticas

Neste item, iremos rever alguns resultados conhecidos da literatura e formalizar outros, os quais serão necessários, juntamente com aqueles do sub-item seguinte para a análise do algoritmo MISQPSOL. Ainda, algumas definições serão feitas para simplificar a notação dos itens vindouros.

definição D1: *da solução de KKT* - denominaremos uma solução de KKT como sendo qualquer uma que satisfaça (4.I.3) com $\mu \geq 0$ para as restrições de desigualdade e $\mu = \lambda$ irrestrito no sinal para as restrições de igualdade.

definição D2: *do problema da PQ indefinido* (Lucia et al, 1996) - denominaremos um problema da PQ como sendo indefinido quando o Hessiano for indefinido sobre o plano tangente às restrições ativas.

definição D3: *do problema da PQ crítico* - denominaremos um problema da PQ como sendo crítico quando a região viável dele for não vazia e quando o algoritmo de conjuntos ativos não convergir para uma solução estacionária do problema da PQ em um número finito de iterações.

definição D4: *do problema da PQ ardiloso* - denominaremos um problema da PQ como sendo ardiloso quando pelo menos uma restrição de desigualdade ativa for

linearmente dependente das primeiras n linhas do sistema (4.I.3), sendo n a dimensão de H em (4.I.3).

Note que como consequência da definição D4, temos que a existência de problemas da PQ críticos é dependente do método de conjuntos ativos empregado. Em verdade, como veremos mais adiante, problemas da PQ críticos correspondem a problemas da PQ bastante não convexos e que podem ser NP difíceis.

definição D5: *do sistema de KKT estendido* - chamaremos de sistema de KKT estendido ao conjunto de equações dado em (i) obtido das condições de (KKT), dadas em (ii) com M_1 e M_2 definidos em (iii).

$$(i) \begin{bmatrix} H & A^T & M_1 & 0 \\ A & 0 & 0 & M_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d \\ \mu \\ \bar{\omega}_1 \\ \bar{\omega}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix}$$

$$(ii) \begin{bmatrix} H & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix}$$

(iii) M_1 e M_2 são constituídos de vetores unitários para os quais o único componente não nulo ocupa a posição de uma linha LD em $\begin{bmatrix} H & A^T \end{bmatrix}$ e A , respectivamente, em relação à matriz definida à esquerda em (ii).

definição D6: *do resíduo do sistema de KKT estendido ou do resíduo do problema de mínimos quadrados associado ao sistema de KKT*- o resíduo do sistema de KKT estendido ou alternativamente o resíduo do problema de mínimos quadrados associado ao sistema de KKT é o valor da norma H_2 do vetor $\begin{bmatrix} \bar{\omega}_1 \\ \bar{\omega}_2 \end{bmatrix}$, em que $\bar{\omega}_1$ e $\bar{\omega}_2$ são os mesmos da definição D5.

teorema TL1 (*teorema de Penrose, Stewart & Sun, 1990*): Qualquer solução do problema de mínimos quadrados $\|Ax - b\|_2$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pode ser escrita como: $x = A^+b + (I - P_{A^H})z$, onde z é qualquer vetor de dimensão n , A^+ é a inversa de

Penrose de A e P_{A^H} é a projeção ortogonal sobre o espaço das colunas de A^H , sendo que o índice H se refere à matriz transposta conjugada. De todas as soluções possíveis A^+b é a solução de mínima norma.

lema L1: Sejam $A: IR^n \rightarrow IR^m; \mathfrak{N} = \ker(A); \Theta = \{H: IR^n \rightarrow IR^n: H(\mathfrak{N}) \subset \mathfrak{N}^\perp\}$, sendo que \mathfrak{N} tem dimensão $n \times n - k; k \leq m$ e seja, ainda, a base Z de IR^n formada como $Z = \{Z_1 \ Z_2\}$ sendo Z_1 uma base para \mathfrak{N} e Z_2 uma base para \mathfrak{N}^\perp . Então H possui em relação à base Z a seguinte representação matricial $\begin{bmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix}$. Se Z é uma base ortogonal e se H é simétrica então $H_{12}=H_{21}$.

lema L2: Sejam $A: IR^n \rightarrow IR^m; \mathfrak{N} = \ker(A); \Xi = \{H: IR^n \rightarrow IR^n: H(\mathfrak{N}) \subset \mathfrak{N}; H = H^T\}$ sendo que \mathfrak{N} tem dimensão $n \times n - k; k \leq m$ e seja, ainda, uma base Z de IR^n formada como $Z = \{Z_1 \ Z_2\}$ sendo Z_1 uma base ortogonal para \mathfrak{N} e Z_2 uma base ortogonal para \mathfrak{N}^\perp . Então existe $P: IR^m \rightarrow IR^n$ tal que $H = PA$.

lema L3: Seja a matriz $A \in IR^{m \times n}, n \geq m$ de posto $k < m$. Seja, ainda, a matriz A_n de posto m , dada por $A_n = [A \ E] \in IR^{m \times n+m-k}$, sendo que E é composto de vetores unitários contendo um único elemento não nulo ocupando a $j^{ésima}$ linha correspondente à $j^{ésima}$ linha LD da matriz A . Então a matriz G dada por $G = EE^T (AA^T + EE^T)^{-1}$ tem a seguinte estrutura geral: $G = [0 \ g_i^T \ 0 \ g_i^T]^T; i \in \{1, \dots, k\}$, onde os vetores não nulos g_i ocupam linhas correspondentes às linhas LD da matriz A e cada vetor g_i contém os coeficientes que determinam a relação linear entre as linhas da matriz A , sendo que os elementos não nulos da diagonal de G são iguais a 1.

lema L4: Seja a matriz $A \in IR^{m \times n}, n \geq m$ de posto $k < m$ e seja o sistema de equações lineares a ser resolvido dado por $Ax=b$. Seja, ainda, a matriz A_n de posto m , dada por $A_n = [A \ E] \in IR^{m \times n+m-k}$, sendo que E é composto de vetores unitários contendo um único elemento não nulo ocupando a $j^{ésima}$ linha

correspondente à $j^{\text{ésima}}$ linha LD da matriz A . Seja, ainda,

$A_n x_n = b$, onde $x_n = \begin{bmatrix} x \\ x_b \end{bmatrix}$ e $x_b \in \mathbb{R}^{m-k}$. As seguintes afirmações são verdadeiras:

1. Se $Ax=b$ é indeterminado então a solução do problema de mínimos quadrados associada a $A_n x_n = b$ gera um x que é solução de $Ax=b$. Ainda, $x_b=0$.
2. Se $Ax=b$ é impossível, então formando-se o seguinte particionamento:

$A = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}$, onde A_1 contém todas as primeiras k linhas LI de A temos que x

obtido pela solução de mínimos quadrados de $A_n x_n = b$ também será solução de $A_1 x = b_1$. Ainda, para este x , o resíduo de $\|Ax - b\|_2^2$ será dado por:

$$\|A_2 x - b_2\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m-k} x_{b_i}^2.$$

lema L5: Para que um problema da PQ seja crítico, a matriz do termo quadrático da função objetivo deve ter pelo menos um autovalor negativo.

Neste ponto, um comentário é pertinente com relação à forma com que o sistema de KKT é resolvido pelo algoritmo MISQPSOL. Quando o sistema de KKT não é de posto pleno, efetua-se um particionamento de (4.I.3) conforme (4.II.1.1) e resolve-se KKT segundo os passos dados em (4.II.1.2) a (4.II.1.7).

$$\begin{bmatrix} \bar{H} & H_1^T & A_1^T \\ H_1 & H_n & A_2^T \\ A_1 & A_2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c_1 \\ -c_2 \\ b \end{bmatrix} \quad (4.II.1.1)$$

sendo, \bar{H} de posto pleno e de mesma dimensão que o posto de H .

$$\bar{\mu} = \begin{bmatrix} d_2 \\ \mu \end{bmatrix} \quad (4.II.1.2)$$

$$\bar{H}t = -c_1 \quad (4.II.1.3)$$

$$M = \begin{bmatrix} H_n & A_2^T \\ A_2 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} H_1 \\ A_1 \end{bmatrix} \bar{H}^{-1} \begin{bmatrix} H_1^T & A_1^T \end{bmatrix} \quad (4.II.1.4)$$

$$\bar{\bar{b}} = \begin{bmatrix} -c_2 \\ b \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} H_1 \\ A_1 \end{bmatrix} t \quad (4.II.1.5)$$

$$M\bar{\mu} = \bar{\bar{b}} \quad (4.II.1.6)$$

$$d_1 = t - \bar{H}^{-1} \begin{bmatrix} H_1^T & A_1^T \end{bmatrix} \bar{\mu} \quad (4.II.1.7)$$

No algoritmo MISQPSOL, é verificado se (4.II.1.6) é de posto pleno. Quando não for, resolve-se (4.II.1.8) ao invés de (4.II.1.6) por mínimos quadrados.

$$\begin{bmatrix} M & M_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\mu} \\ \mu_a \end{bmatrix} = \bar{\bar{b}} \quad (4.II.1.8)$$

sendo que M_n é constituída de vetores unitários contendo um único elemento não nulo correspondente à $j^{\text{ésima}}$ linha LD de M .

A partir das definições apresentadas, percebemos que $\begin{bmatrix} M & M_n \end{bmatrix}$ tem a estrutura dada em (4.II.1.9).

$$\begin{bmatrix} H_n - H_1 \bar{H}^{-1} H_1^T & A_2^T - H_1 \bar{H}^{-1} A_1^T & M_{n1} & 0 \\ A_2 - A_1 \bar{H}^{-1} H_1^T & -A_1 \bar{H}^{-1} A_1^T & 0 & M_{n2} \end{bmatrix} \quad (4.II.1.9)$$

Como as análises do algoritmo são feitas em função do sistema de KKT ou do sistema de KKT estendido, devemos verificar como o sistema (4.II.1.8) relaciona-se com o sistema de (KKT) estendido, a saber (4.II.1.10).

$$\begin{bmatrix} \bar{H} & H_1^T & A_1^T & 0 & 0 \\ H_1 & H_n & A_2^T & M_1 & 0 \\ A_1 & A_2 & 0 & 0 & M_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \mu \\ \varpi_1 \\ \varpi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c_1 \\ -c_2 \\ b \end{bmatrix} \quad (4.II.1.10)$$

Pré multiplicando (4.II.1.10) pela matriz dada em (4.II.1.11) e efetuando um particionamento adequado, obtemos a mesma estrutura dada em (4.II.1.8) e assim obtemos as identificações dadas em (4.II.1.12).

$$\begin{bmatrix} -H_1 \bar{H}^{-1} & I & 0 \\ -A_1 \bar{H}^{-1} & 0 & I \end{bmatrix} \quad (4.II.1.11)$$

$$M_{n1} = \begin{bmatrix} 0 \\ M_1 \end{bmatrix} \quad (4.II.1.12)$$

$$M_{n2} = M_2$$

Ou seja, nenhuma informação é perdida ao se aplicar o procedimento de resolução das equações (4.II.1.2) a (4.II.1.7), resolvendo-se (4.II.1.6) por mínimos quadrados quando M não for de posto pleno. Assim, quando M_1 existir é por que no caso do resíduo do sistema de KKT estendido ser não nulo, o sistema de KKT é inconsistente e pode não existir solução estacionária para o problema da PQ. Analogamente, quando o problema da PQ é inviável ou quando existirem restrições ativas redundantes, M_2 pode existir.

II.2 Resultados sobre a existência de solução do problema da PQ - formalização de condições necessárias ou suficientes

A resolução do problema da PQ é feita por um método de conjuntos ativos, o qual, de uma forma muito simplista corresponde a se identificar as restrições que estarão ativas na solução ótima e a se resolver a condição de (KKT) para o problema da PQ.

Mangasarian (1969) e Nemhauser (1989) apresentam alguns resultados sobre a existência e caracterização das soluções ótimas de (4.I.1) os quais são sumarizados, em seguida, nas condições p1 a p6.

- p1. se d é solução da PQ com H NSD então d pertence à fronteira de X_l .
- p2. (4.I.1) não tem solução se o conjunto Y for vazio, sendo Y , aplicado ao problema da PQ reduzido e é definido por:
$$Y = \{d \in \mathbb{R}^n, \mu \in \mathbb{R}^p, Hd + A_l^T \mu = -c, \mu \geq 0\}$$
- p3. se H for PD no plano tangente às restrições ativas, então d que satisfaz (KKT) para estas e que é viável quanto às outras restrições, será solução ótima de (4.I.1).

- p4. se H for indefinido no plano tangente às restrições ativas, então se (KKT) tem solução finita d e $\mu \geq 0$ e se este d não viola nenhuma outra restrição, d não será solução de mínimo de (4.I.1). Ainda, (4.I.1) poderá não ter solução finita se não existir um conjunto ativo tal que H não tenha autovalores negativos no plano tangente a este conjunto.
- p5. se H for PSD no plano tangente às restrições ativas, então se (KKT) tem alguma solução finita d , ela não será única e existirão infinitas tais soluções
- p6. se H for PSD no plano tangente às restrições ativas, então se (KKT) não tem pelo menos uma solução finita, o sistema de (KKT) é dito não compatível. Neste caso (4.I.1) não tem solução finita e o conjunto definido por (KKT) será vazio.

Estas condições, no entanto, podem não ser adequadas para fins de caracterização se um dado conjunto ativo é ótimo ou não. Assim, na discussão que segue iremos buscar resultados que tragam informações mais pormenorizadas.

Nos enunciados dos lemas L6 a L12, Z é considerada uma base para o espaço nulo das restrições ativas A e a solução de KKT é aquela da definição D1, ou seja, $\mu \geq 0$ para as restrições de desigualdade. Isto porque, neste item, não estamos preocupados em estabelecer um algoritmo de obtenção de um dado A que gere uma solução de KKT, mas uma vez identificado um tal $A \in \mathbb{R}^{a \times n}$, saber se a solução de KKT é solução de (4.I.1).

lema L6: O sistema KKT tem solução única finita se e somente se k1 e k2 se verificam.

- k1. A é de posto de linha pleno.
- k2. Apenas uma das seguintes afirmações ocorre. Temos $a=n$. Se $a < n$ então $Z^T H Z$ não possui autovalores nulos, sendo Z uma base para $\text{nul}(A)$.

Vimos que se H é ND, então a solução ótima de (4.I.1) se encontra na fronteira. Contudo, ainda que um dado A seja tal que a solução de KKT esteja na fronteira da região viável da PQ, esta solução pode não ser de fato solução de (4.I.1). Para tanto, considere o exemplo dado em (E1).

$$\begin{aligned}
& \min_{d_1, d_2} -d_1^2 - d_2^2 \\
& \text{s.a. } 0 \leq d_1 \leq 3 \\
& \quad 0 \leq d_2 \leq 3
\end{aligned} \tag{E1}$$

A solução ótima de (E1) é $d_1=d_2=3$. Contudo, para este problema, $d_1=d_2=0 \Rightarrow \mu_1=\mu_2=0$ é solução de KKT e esta é solução do problema (4.I.4) associado a (E1). Daí, faz-se necessário estabelecer os seguintes resultados.

lema L7: Se H é ND e $m + p < n$, então (4.I.1) não tem solução finita e para qualquer A , a solução de KKT não será solução de (4.I.1).

lema L8: Se H é ND e $m + p \geq n$, então a solução de KKT é solução de (4.I.1) se em (4.I.3), A contiver n restrições ativas, sendo A de posto de linha pleno e se $\mu > 0$ para todos os componentes de μ associados às restrições de desigualdade.

Note que como decorrência do lema L8 para os casos em que H é ND, temos que se para um dado A ativo com $a=n$, existir pelo menos um componente nulo em μ , então (4.I.1) só terá solução finita se existir algum outro A para o qual não existam componentes nulos em μ associados a restrições de desigualdade. Os lemas L7 e L8 são extensões dos teoremas TL2, TL3 e TL4 extraídos de Giannessi & Tomasin (1974) e Bazaraa et al (1993).

teorema TL2: *(da localização de soluções em problemas com f convexas - Bazaraa et al, 1993, p. 107)* Seja $f: E_n \rightarrow E_1$ uma função convexa e seja S um poliedro não vazio e compacto em E_n . Considere o problema de maximização de $f(x)$ sujeito à restrição $x \in S$. Uma solução ótima x^* existe e é um ponto extremo de S .

teorema TL3: *(da localização de soluções ótimas da PQ não estritamente convexas - Giannessi & Tomasin, 1974, p. 181)* Se a função objetivo de (4.I.1) não for estritamente convexa (i.e. não for PD) sobre a região viável de (4.I.1),

então a solução de mínimo global se encontra sobre a fronteira relativa da região viável.

teorema TL4: *(da fronteira relativa - Giannessi & Tomasin, 1974, p. 181)* A fronteira relativa de um poliedro de dimensão n é a união de suas faces fechadas de dimensão $(n-1)$.

lema L9: Suponha que a solução de KKT seja única e que H seja não nula. Então apenas uma das afirmações k3, k4 ou k5 é verdadeira.

- k3. A solução de (KKT) é solução de (4.I.1). Neste caso, apenas uma das seguintes condições ocorrem. Se $a < n$, então $Z^T H Z$ é PD. Se $a = n$, então ou $\mu > 0$ para todas as restrições de desigualdade se H não tem autovalores positivos ou $\mu \geq 0$ para os demais casos de H .
- k4. A solução de (KKT) não é solução de (4.I.1), mas é solução do problema (4.I.4). Neste caso, se $a < n$, então $Z^T H Z$ é ND. Se $a = n$, existem componentes nulos em μ associados às restrições de desigualdade.
- k5. A solução de (KKT) não é solução nem de (4.I.1) nem de (4.I.4). Neste caso, se $a < n$, então $Z^T H Z$ possui autovalores negativos. Se $a = n$, existem autovalores positivos e negativos em H e existe pelo menos um componente nulo em μ associado a uma restrição de desigualdade ativa.

Cabe salientar que a situação em que se tem H indefinido é a mais crítica, pois neste caso quando temos n restrições ativas e alguns componentes nulos em μ , mesmo assim esta solução pode ser solução do problema (4.I.1). Para estes casos, se retirarmos pelo menos uma restrição correspondente a $\mu = 0$ de A , teremos que para o novo A , $Z^T H Z$ será PD.

proposição P1: Os lemas L2, L3 e L4 implicam as condições p1 a p4.

prova: trivial.

lema L10: Suponha que exista mais de uma solução para o sistema de KKT e que H seja não nula. Se A é de posto de linha pleno então $Z^T H Z$ possui autovalores nulos e $a < n$. Se A é de posto de linha não pleno, $Z^T H Z$ pode ter autovalores nulos. Ainda, apenas uma das afirmações k6 ou k7 é verdadeira.

k6. Se existirem autovalores não nulos negativos em $Z^T H Z$, então as soluções de (4.I.3) não são soluções de (4.I.1).

k7. Se não existirem autovalores negativos em $Z^T H Z$, então ou $Z^T H Z$ é nula ou todos os autovalores não nulos são positivos. Em ambos os casos a solução de (4.I.3) pode ser solução de (4.I.1).

O lema L10 na verdade é um resultado bem conhecido da literatura. O agravante que surge é saber identificar os casos em que (4.I.3) não é solução de (4.I.1). Particularmente, uma situação complicada é quando $Z^T H Z$ é nula. Os lemas L1 e L2 mostram estruturas particulares de H e A que fazem com que $Z^T H Z$ seja nula. Até o momento, não conseguimos obter resultados que partindo-se das estruturas de H e A pudessem identificar de uma forma simples quando (4.I.3) não é solução de (4.I.1). cremos, no entanto, que esforços devem ser feitos para apresentar novas contribuições e esta é uma das linhas de continuidade de pesquisa sugerida por nós para o presente trabalho.

teorema TL5: *(do critério de otimalidade da PL, Papadimitriou & Steiglitz, 1982, p. 47/48)* Seja o problema da programação linear (PL) dado como em (i). Seja B uma base, dada conforme o particionamento (ii) de forma que (i) se transforme em (iii), aplicando-se B . Se (iv) se verifica, então x dado por (v) é solução de (i).

$$(i) \quad \begin{cases} \min c^T x \\ \text{s.a. } Ax = b \end{cases}; c \in \mathbb{R}^n; A \in \mathbb{R}^{m \times n}; b \in \mathbb{R}^m; \text{rank}(A) = m$$

$$(ii) \quad A = \begin{bmatrix} B & A_N \end{bmatrix}; c^T = \begin{bmatrix} c_B^T & c_N^T \end{bmatrix}$$

$$(iii) \quad \begin{cases} \min c_B^T \bar{b} + \bar{c}_N^T x_N \\ \text{s.a. } x_B + \bar{A}_N x_N = \bar{b} \\ \bar{A}_N = B^{-1} A_N \\ \bar{b} = B^{-1} b \\ \bar{c}_N = c_N - \bar{A}_N^T c_B \end{cases}$$

$$(iv) \quad \bar{c}_N \geq 0$$

$$(v) \quad x = \begin{bmatrix} \bar{b} \\ 0 \end{bmatrix}$$

corolário C1: *(do critério de otimalidade da PL)* Seja a PL da forma (i) dada no teorema TL5. Seja o sistema de equações lineares dado por (ii), sendo que A , c e b são como na PL. Se o sistema (ii) admite uma ou mais soluções com $\mu \geq 0$, então x é da forma de (iii) e μ é da forma de (iv) e x é solução da PL.

$$(ii) \quad \begin{bmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix}$$

$$(iii) \quad x = \begin{bmatrix} B^{-1}b \\ 0 \end{bmatrix}; B \text{ como no teorema TL5}$$

$$(iv) \quad \mu = -(B^T)^{-1} c_B; c_B \text{ como no teorema TL5}$$

prova: Vemos que (iii) e (iv) satisfazem (ii). Ainda, como μ satisfaz as n primeiras equações de (ii) temos que:

$$A_N^T \mu = -c_N \quad (*)$$

Do teorema TL5 temos que:

$$-c_N = -\bar{c}_N - c_B \bar{A}_N \quad (**)$$

Logo, substituindo (*) em (**) temos que:

$$\bar{c}_N = -A_N^T \mu - \bar{A}_N^T c_B = A_N^T (B^T)^{-1} c_B - \bar{A}_N^T c_B = 0$$

Logo, a condição de otimalidade está satisfeita e assim x é solução da PL.

lema L11: Suponha que a solução de KKT seja única e que H seja nula. Então, $a=n$ e A é de posto pleno. Ainda, (4.I.3) é solução de (4.I.1).

lema L12: Suponha que exista mais de uma solução para o sistema de KKT e que H seja nula. Então: (i) se $a=n$, A é de posto não pleno (ii) (4.I.3) é solução de (4.I.1).

III. Obtenção da direção de busca nos métodos SQP

Neste item, iremos efetuar breves comentários sobre a forma com que a direção de busca é obtida nos métodos SQP. O algoritmo SQP poderá não convergir se a direção de busca não

for calculada adequadamente. Assim, neste item, apontamos algumas dificuldades que podem surgir durante a resolução dos problemas da PQ para a obtenção desta direção.

A obtenção da solução, x^* , do problema da PNL em sua forma mais geral requer que se encontre um x^* que satisfaça as restrições de igualdade, i.e., as equações dadas em (4.III.1).

$$h(x) = 0 \quad (4.III.1)$$

sendo, $x \in \mathbb{R}^n$; $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$.

No método SQP, x^* é obtido a partir de uma seqüência de valores $\{x_k\}$, construída a partir de (4.III.2) e satisfazendo (4.III.3), ou seja, a resolução de (4.III.1) é feita, em verdade, por um método de Newton.

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad (4.III.2)$$

$$\nabla h^T(x_k) d_k = -h(x_k) \quad (4.III.3)$$

Ainda, como (4.III.1), em geral, não é um sistema quadrado, i.e., $n > m$, então pode existir mais de uma solução para (4.III.1). Assim, alternativamente, d_k pode ser obtido de (4.III.4). Ou seja, para qualquer valor de y_k , d_k será uma direção adequada.

$$d_k = Zy_k + \bar{d}_k \quad (4.III.4)$$

sendo, Z uma base para $\text{nul}(\nabla h^T(x_k))$ e \bar{d}_k uma solução particular qualquer de (4.III.3).

Se $\nabla h(x_k) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ é de posto de coluna pleno, a convergência da seqüência (4.III.2) para uma solução de (4.III.1) é garantida mediante uma escolha adequada de α_k . Assim, o método SQP poderá falhar na obtenção de uma solução viável quanto a (4.III.1), i.e., as restrições de igualdade não serão satisfeitas se $\nabla h^T(x_k)$ não for de posto de linha pleno ou se α_k não for calculado adequadamente.

Adicionalmente às restrições de igualdade, o problema da PNL pode apresentar restrições de desigualdade, a saber as equações presentes em (4.III.5).

$$g(x) \leq 0 \quad (4.III.5)$$

sendo, $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$.

A resolução do sistema de restrições (4.III.5) é feito a partir de sua linearização dada em (4.III.6).

$$\nabla g^T(x_k) d_k \leq -g(x_k) \quad (4.III.6)$$

Aplicando a direção de busca (4.III.4) em (4.III.6), temos o conjunto de restrições reduzidas dado em (4.III.7).

$$\nabla g^T(x_k) Z y_k \leq -g(x_k) - \nabla g^T(x_k) \bar{d}_k \quad (4.III.7)$$

Se $\nabla h^T(x_k)$ for de posto de linha pleno em todas as iterações do algoritmo SQP, então a análise da convergência deste pode ser feita em função da solução y_k obtida na resolução do problema da PQ reduzido, i.e., o problema da PQ conterá apenas restrições de desigualdade e os resultados do item II podem ser facilmente aplicados para a análise da direção de busca obtida pelo algoritmo SQP. Um agravante que pode surgir é quando Z é também base para $\text{nul}(\nabla g_L^T(x_k))$, sendo que L indica algumas restrições de desigualdade. Neste caso, o que temos é que as restrições de desigualdade podem não ser satisfeitas se cuidados adicionais não forem tomados.

Um aspecto do algoritmo MISQPSOL que deve ser inicialmente analisado corresponde aos problemas que apresentam apenas restrições de desigualdade. Isto porque os problemas da PQ reduzidos recaem neste tipo de problema. Se uma direção de busca adequada não consegue ser obtida para os problemas que apresentem apenas restrições de desigualdade, então nem o problema da PQ reduzido e conseqüentemente nem o problema da PQ conseguem ser resolvidos de forma apropriada. No item IV, discutimos alguns problemas que podem surgir durante a resolução dos problemas da PQ com restrições de desigualdade. Os problemas podem ser entendidos como dificuldades na obtenção de uma solução estacionária para os problemas da PQ não convexos. No item V, efetuamos uma

generalização dos aspectos discutidos no item IV e mostraremos quando o algoritmo MISQPSOL obtém uma solução estacionária do problema da PQ. Quando a solução obtida é estacionária, podemos aplicar os resultados do item II para saber se a solução é uma direção de busca descendente ou não.

Uma vez analisado o problema com restrições de desigualdade, a análise do algoritmo proposto pode ser estendida para os demais casos. Inicialmente, é de interesse analisar o que ocorre quando se tem restrições linearizadas nulas ou restrições reduzidas nulas. Com relação às restrições não lineares que se tornam nulas no problema da PQ reduzido, não efetuamos nenhum tratamento, pois para todos os problemas testados até o momento isto não se mostrou necessário. Assim, o algoritmo poderá não convergir no caso geral, embora uma mensagem de aviso seja gerada ao final do programa. No entanto, tratamentos são feitos com relação às restrições de limites reduzidas nulas. Uma discussão do procedimento adotado é feita no item VI. Quando da existência de restrições de igualdade, dificuldades surgem quando $\nabla h^T(x_k)$ não é de posto de linha pleno. Um caso particular corresponde a se ter $\nabla h^T(x_k) = 0$. Nesta situação, o algoritmo MSIQPSOL introduz uma pequena perturbação em uma direção adequada. Uma breve discussão do procedimento adotado também é apresentada no item VI.

Neste trabalho, preocupamo-nos mais com os aspectos relacionados com a convergência local do algoritmo, i.e., apresentar um procedimento alternativo aos existentes para a geração da direção de busca. Particularmente, preocupamo-nos com os problemas da PQ não convexos. Como a direção de busca gerada pelo algoritmo pode ser não descendente, a análise da convergência global não é trivial e não é alvo de estudo da presente tese. Assim, no item VII, efetuamos uma discussão sobre as limitações do algoritmo na atual versão, indicando linhas de pesquisa que poderiam suprimi-las ou reduzi-las.

Na discussão que segue nos itens vindouros, fazemos uso da seguinte notação:

H_r ... matriz Hessiana reduzida na iteração considerada do algoritmo de solução do problema da PQ do algoritmo MISQPSOL. Aplica-se uma decomposição sobre restrições convenientes que são definidas localmente no texto. Por

exemplo, a redução pode ser feita sobre as restrições que se encontram ativas na iteração considerada.

Z_a ... base para o espaço nulo das restrições consideradas para a redução de H_k a H_r .

n ... número de variáveis do problema da PNL, n inclui a variável artificial.

As demais variáveis seguem a nomenclatura dos capítulos 2 e 3 e do item II deste capítulo.

IV. Os problemas com restrições de desigualdade da PQ não convexos oriundos da PNL

Neste item, iremos tratar apenas dos problemas da PNL que apresentem restrições de desigualdade, ou seja, o problema que iremos resolver é dado em (4.IV.1).

$$\min_{x=\begin{bmatrix} \hat{x} \\ x_a \end{bmatrix} \in B_\delta(x^*) \cap X} f(\hat{x}) + \frac{1}{2} x_a^2; X = \left\{ \hat{x}, x_a \mid \hat{x} \in X^o; x_a \in \mathbb{R}; g(\hat{x}) \leq 0 \right\} \quad (4.IV.1)$$

sendo, $\delta > 0$, $B_\delta(x^*)$ é uma bola aberta em torno de x^* , $f: \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$; $g: \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}^p$ e X^o é um espaço aberto contido em \mathbb{R}^{n-1} .

Em cada iteração do algoritmo MISQPSOL, resolve-se uma aproximação quadrática do Lagrangeano associado ao problema (4.IV.1), o que resulta no problema da programação quadrática dado em (4.IV.2).

$$\begin{aligned} \min & \frac{1}{2} d^T H_k d + c^T d \\ \text{s.a.} & A_{ineq} d \leq b \end{aligned} \quad (4.IV.2)$$

As soluções estacionárias de (4.IV.2) são caracterizadas pela condição de KKT dada em (4.IV.3), onde apenas algumas restrições (A) do conjunto de restrições original (A_{ineq}) estão ativas.

$$\begin{bmatrix} H_k & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix} \quad (4.IV.3)$$

Iniciaremos a exposição com um exemplo para ilustrar algumas das dificuldades que podem ser encontradas durante a resolução de (4.IV.1). Consideremos o problema da PQ dado por (E2).

$$\begin{aligned} \min & x_1^2 - x_2^2 + x_1 + \frac{1}{2} x_a^2 \\ \text{s.a.} & x_1 + x_2 \leq a \end{aligned} \quad (E2)$$

sendo, que a é uma constante real finita.

A condição de (KKT) para (E2) é dada em (4.IV.4). Pode-se verificar que o sistema é de posto deficiente e se $a \neq -\frac{1}{2}$ o sistema (4.IV.4) não é consistente. Uma representação de (E2) é dada na figura 4.IV.1 para $a=1$. Percebemos que $x_1 = -0.5, x_2 = -\infty$ é solução global de (E2) a qual não é finita.

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_a \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ a \end{bmatrix} \quad (4.IV.4)$$

O problema irrestrito ($\min x_1^2 - x_2^2 + x_1 + \frac{1}{2}x_a^2$) apresenta uma solução estacionária de cela em $x_1 = -0.5, x_2 = 0$. Esta será uma solução estacionária de (E2) se $a \geq -\frac{1}{2}$. Se $a > -\frac{1}{2}$ temos que se x_1 for limitado inferiormente, o problema (E2) apresentará uma solução ótima local finita. A limitação deve ser feita sobre x_1 uma vez que para x_1 negativo, a função $x^2 + x$ apresenta um crescimento menos acentuado que x^2 como pode ser depreendido da figura 4.IV.2. Para o caso em que $a < -\frac{1}{2}$, isto já não ocorre, pois estaremos caminhando na região de x_1 positivo e assim para que exista solução finita em (E2) devemos limitar x_2 inferiormente. Nesta situação, podemos ter uma solução ótima global finita. Na discussão que segue, iremos considerar o caso em que $a=1$ e $a=-1$ e mostraremos os problemas que podem surgir dependendo das restrições que serão ativadas pelo método de conjuntos ativos.

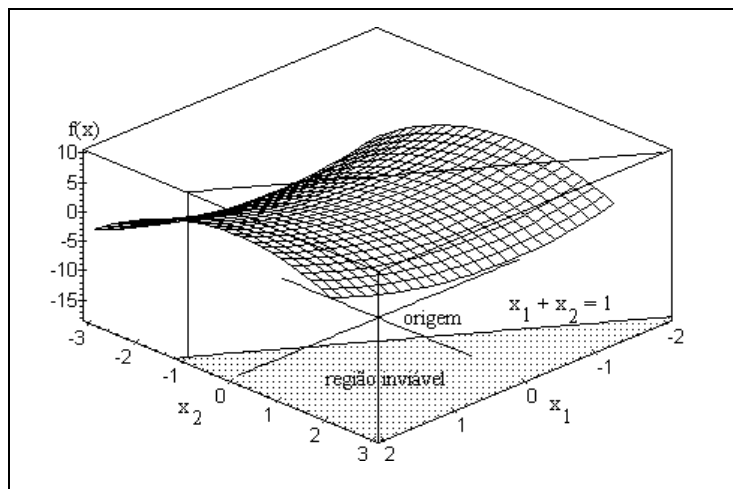
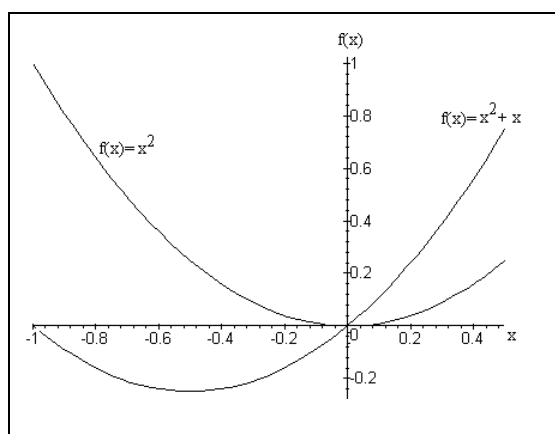


figura 4.IV.1: representação do problema da PQ dado em (E2) com $a = 1$ **figura 4.IV.2:** representação do crescimento comparativo de termos da função objetivo de (E2)

Primeiramente, cabe lembrar como o método de conjuntos ativos do algoritmo MISQPSOL funciona. Na primeira iteração do algoritmo SQP, serão ativadas no máximo as n primeiras restrições, enquanto que para as demais, serão ativadas ao início da PQ todas as restrições da iteração anterior do método SQP. Ainda, a primeira restrição que apresentar um valor negativo do multiplicador de Lagrange será retirada do conjunto ativo e todas as que forem violadas serão ativadas, obedecendo a restrição de que apenas n poderão estar ativas. Se existirem restrições linearmente dependentes das anteriores ou das primeiras n linhas do sistema (KKT), então atribuir-se-á um valor negativo ao multiplicador de Lagrange e elas poderão ser retiradas.

Para o exemplo considerado, se $a=1$, teremos que se a restrição em (E2) for ativada ela é LD em relação às primeiras três linhas de (4.IV.4) e logo ela será retirada. O problema irrestrito é solução estacionária viável de (E2) e assim o algoritmo da PQ terminará, obtendo a solução correspondente ao ponto de sela. Já para o caso em que $a=-1$, a solução estacionária de sela, $x_1 = -0.5, x_2 = 0$, não é viável e conseqüentemente o algoritmo irá ativá-la novamente e não irá convergir em um número finito de iterações. Neste último caso, temos um problema da PQ ardiloso e crítico e no primeiro um problema da PQ ardiloso.

Se $a=1$ e incorporando-se a (E2) a seguinte restrição: $x_1 \geq -0.7$, temos que (E2) apresentará as seguintes soluções:

solução de mínimo global: $x_1 = -0.5, x_2 = -\infty$

solução de mínimo local: $x_1 = -0.7, x_2 = 1.7$

solução de cela: $x_1 = -0.5, x_2 = 0$

Se o método de conjuntos ativos inicia com a primeira restrição ativa, i.e., $x_1 + x_2 = 1$, teremos um problema da PQ ardiloso que irá convergir para o ponto de cela. Se apenas a segunda restrição estiver ativa, i.e., $x_1 = -0.7$ i.e., o valor do multiplicador de Lagrange desta restrição resulta em um número negativo e a restrição é eliminada, obtendo-se a convergência do algoritmo para o ponto de cela. Se ambas as restrições estiverem ativas o algoritmo irá convergir para a solução de mínimo local. Neste ponto, uma observação é pertinente. Verifica-se que a direção definida pela solução local é muito diversa daquela definida pela solução global. Ou seja, se este problema for uma aproximação de um problema da PNL, a obtenção da solução local resultará em um caminho bem distinto daquela correspondente à solução global. Observe também que a solução de cela é uma solução intermediária a estas duas.

Para o caso de termos $a=-1$ e $x_2 \geq -0.7$, uma situação bem distinta da anterior surge. Neste caso, $x_1 = -0.5, x_2 = -0.7$ é solução de mínimo global para o problema. Se a primeira restrição estiver ativa isoladamente, ela será eliminada uma vez que ela é L.D. em relação às primeiras três linhas do sistema de KKT. Neste caso, o algoritmo irá gerar a solução estacionária irrestrita que é inviável quanto a esta restrição e teremos um problema da PQ crítico e ardiloso. Se a segunda restrição ou ambas estiverem ativas, o algoritmo irá convergir para a solução de mínimo. Ou seja, a presença da primeira restrição pode prejudicar a solução do problema da PQ de forma que uma direção de busca não adequada é obtida.

Analisemos, em seguida, o problema da PQ dado por (E3).

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1^2 - x_2^2 + 7x_2 + \frac{1}{2}x_3^2 \\ \text{s.a.} \quad & -3 \leq x_1 \leq 3 \\ & -3 \leq x_2 \leq 3 \end{aligned} \tag{E3}$$

Para este problema a solução ótima corresponde a $x_1 = 0, x_2 = -3$. Ainda, o problema irrestrito apresenta uma solução estacionária em $x_1 = 0, x_2 = 3.5$ que não é viável em relação a (E3). Se o algoritmo iniciar com ambas as restrições de limite superior ativadas, o que teremos é que ambas serão eliminadas e aí como a solução irrestrita é estacionária, mas não viável com relação a (E3), o algoritmo irá ciclar entre a solução estacionária do problema irrestrito ($x_1 = 0, x_2 = 3.5$) e $x_1 = 0, x_2 = 3$, para a qual seu multiplicador de Lagrange será um número negativo. O mesmo se sucede se nenhuma restrição estiver ativa, ou se a primeira restrição de limite inferior estiver ativa isoladamente ou com $x_2 = 3$. Percebemos que se trata de um problema da PQ crítico. Se, por outro lado, ambas as restrições de limite inferior ou apenas a segunda de limite inferior estiverem ativas no início do algoritmo, a solução ótima do problema é identificada. Neste exemplo, o que temos é que todos os sistemas de (KKT) são de posto pleno. Ainda, consideremos que (E3) tenha sido obtida como uma linearização de um problema da PNL no ponto $x_1 = 0; x_2 = 0$ e que a direção ótima dada por $d = [0 \quad -3]^T$ tenha sido obtida. Aplicando esta direção sobre a matriz Hessiana, obtemos $d^T H_k d = -18$ e sobre a matriz Hessiana reduzida em relação à restrição ativa temos que $d_r^T Z_a^T H_k Z_a d_r = 18; Z_a = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, Z_a é base para $\text{nul}([0 \quad -1])$. Assim, aplicar a direção obtida sobre a matriz Hessiana plena pode não ser um indicativo eficaz da ocorrência de problemas na solução da PQ, mas pode servir como uma situação de aviso em que se deve verificar se existem $n-1$ restrições ativas ou se a direção de busca é descendente. No nosso programa, ao término da resolução do problema da PQ, calcula-se o produto $d^T H_k d$ e com isto pode-se ter uma idéia da ocorrência de problemas (i.e., se o referido produto der negativo, sabemos que a matriz Hessiana possui pelo menos um autovalor negativo).

Considere agora o seguinte problema de PNL dado em (E4).

$$\begin{aligned}
 & \min -x_1 - x_2 + \frac{1}{2}x_3^2 \\
 & s.a. x_1x_2 \leq 4 \\
 & \quad x_1 \leq 6 \\
 & \quad x_2 \leq 4 \\
 & \quad x_1 \geq 0 \\
 & \quad x_2 \geq 0
 \end{aligned} \tag{E4}$$

A solução ótima deste problema é $x_1 = 6, x_2 = \frac{2}{3}$. Considere que numa dada iteração do algoritmo SQP tenhamos $x_1 = \frac{17}{3}, x_2 = \frac{2}{3}$, ou seja, nenhuma das restrições está ativa e conseqüentemente a matriz Hessiana será nula. O problema da PQ é na verdade um problema da PL e o sistema (KKT) para o caso em que as duas primeiras restrições estiverem ativas será representado por (4.IV.5).

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{17}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{17}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{2}{9} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} \tag{4.IV.5}$$

A solução de (4.IV.5) é $d_1 = 1/3, d_2 = 0, \mu_1 = 0.1765, \mu_2 = 0.8825$. Ou seja, para este conjunto ativo a solução ótima da PNL será obtida. Mas, se nenhuma restrição for ativada, o sistema correspondente é dado em (4.IV.6) que é de posto deficiente. O algoritmo MISQPSOL resolve (4.IV.6) pelo sistema de KKT estendido que tem como solução uma direção nula e resíduo não nulo.

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{4.IV.6}$$

Ou seja, do exemplo considerado percebemos que é de vital importância que se analisem inconsistências no sistema (4.IV.7).

$$H(x_k, \mu_k)d = -\nabla f(x_k) \tag{4.IV.7}$$

Se $H(x_k, \mu_k)$ em (4.IV.7) é de posto deficiente, (KKT) só será consistente se um número suficientemente elevado de restrições for ativado. No caso do problema da PL, e.g., devemos ter sempre $n-1$ restrições ativas. Se este cuidado não é tomado e se $d=0$ for solução de um dado sistema de (KKT) estendido, então o algoritmo irá convergir para uma solução não estacionária da PNL. Note que esta solução será possivelmente viável quanto ao problema da PNL, pois se não for, possivelmente o problema da PQ irá ativar alguma restrição violada desde que a aproximação linear das restrições não lineares seja adequada.

Pelos problemas apresentados nos parágrafos precedentes vemos que o algoritmo da PQ pode convergir em um número finito de iterações ou não. Mesmo quando o algoritmo converge em um número finito de iterações, a solução obtida pode não ser estacionária ou se for pode não ser uma solução de mínimo. Um outro caso em que o algoritmo não converge é quando o problema da PQ é inviável. O que temos, neste caso, é que $n-1$ restrições podem não ser suficientes para caracterizar a região viável e quando a $n^{\text{ésima}}$ restrição for ativada, teremos um sistema de posto deficiente e assim o algoritmo irá ciclar.

Em função do que foi exposto, percebemos que para o êxito do algoritmo de solução da PQ, possíveis problemas devem ser identificados. Isto será alvo da discussão que segue no item V. Iniciaremos por analisar quais problemas o algoritmo MISQPSOL consegue identificar. Em seguida, mostraremos que tratamentos são feitos e quais problemas são sanados.

V. Análise do algoritmo MISQPSOL para problemas da PNL com restrições de desigualdade apenas

No item IV, mostramos diversas dificuldades que podem ser encontradas na resolução de um problema da PQ não convexo. Neste item, as discussões apresentadas serão formalizadas e o comportamento do algoritmo será caracterizado. O objetivo, neste item, é mostrar quando uma solução estacionária é obtida pelo algoritmo de solução da PQ do algoritmo MISQPSOL e no caso em que isto não ocorre, mostraremos como o algoritmo é capaz de caracterizar os problemas encontrados.

Lema L13: Se a matriz das restrições ativas do problema da PQ em uma iteração qualquer do algoritmo de solução da PQ do algoritmo MISQPSOL não for de posto pleno então ou o problema da PQ é inviável ou existem restrições redundantes.

Lema L14: Se o problema da PQ é inviável então o algoritmo de solução do problema da PQ não irá convergir. A partir de uma certa iteração, a matriz A das restrições ativas será de posto deficiente em pelo menos uma de cada duas iterações.

Lema L15: Se o problema da PQ for ardiloso e viável, então a partir de uma certa iteração do algoritmo de solução do problema da PQ do algoritmo MISQPSOL, este poderá ciclar entre duas ou mais soluções. Quando o algoritmo ciclar, i.e, quando o problema for ardiloso e crítico, temos que em cada duas iterações teremos sempre que em pelo menos uma delas a primeira linha da matriz de restrições ativas será LD em relação às primeiras n linhas do sistema de (KKT), sendo n a dimensão do problema da PQ. Ainda, no caso da não convergência do algoritmo, o resíduo do sistema de KKT estendido em pelo menos uma das duas últimas iterações será não nulo.

Lema L16: Seja o espaço viável do problema da PQ que se quer resolver não vazio e que não contenha restrições redundantes. Considere o sistema de KKT em uma iteração qualquer do algoritmo de solução do problema da PQ do algoritmo MISQPSOL. Sejam a o número de restrições ativas e Z_a uma base para o

espaço nulo das restrições ativas na iteração considerada ou $Z_a = I$ se nenhuma restrição está ativa. Seja ainda \bar{d} uma solução particular de $Ad = b$. Se $Z_a^T H Z_a d_r \neq -Z_a^T c - Z_a^T H \bar{d}$ para todo $d_r \in \mathbb{R}^{n-a}$ então o problema da PQ original ou não tem solução local e/ou global finita, ou no caso de existir pelo menos uma solução finita, é necessário que haja tantas restrições não ativas quantas forem necessárias para que quando ativadas tornarem o sistema de KKT consistente.

Lema L17: Considere uma iteração qualquer do algoritmo MISQPSOL. Seja o problema da PQ não ardiloso. Se o sistema de (KKT) de uma iteração qualquer do algoritmo de solução da PQ não for de posto de linha pleno, então apenas uma das seguintes afirmações é verdadeira.

- (i) O problema da PQ é inviável.
- (ii) Existem restrições redundantes na matriz de restrições ativas.
- (iii) O problema da PQ não tem solução local ou global finita e o resíduo do sistema de KKT estendido é não nulo.
- (iv) O problema da PQ tem solução finita correspondente a outras restrições que não se encontram ativas na iteração considerada. O resíduo do sistema de (KKT) estendido é não nulo e a solução obtida não é estacionária.
- (v) O problema da PQ admite infinitas soluções estacionárias e o resíduo do sistema de KKT estendido é nulo.

Lema L18: Seja o problema da PQ em uma iteração qualquer do algoritmo MISQPSOL viável, não crítico, ardiloso e tal que $\begin{bmatrix} H & A^T \end{bmatrix}$ seja de posto de linha pleno. Apenas uma das seguintes afirmações é verdadeira.

- (i) As restrições que são LD em relação às n primeiras linhas de KKT são tais que o resíduo do sistema de KKT estendido é nulo e neste caso o algoritmo converge para uma solução estacionária do problema da PQ em um número finito de iterações.
- (ii) As restrições que são LD em relação às n primeiras linhas de KKT são tais que o resíduo do sistema de KKT estendido não é nulo. O algoritmo

irá convergir para uma solução estacionária do problema da PQ em um número finito de iterações se e somente se forem ativadas tantas restrições quantas são LD em relação às primeiras $n-1$ linhas do sistema de KKT na iteração considerada, desconsiderando-se as restrições redundantes.

Lema L19: Seja o problema da PQ em uma iteração qualquer do algoritmo de solução do problema da PQ do algoritmo MISQPSOL não ardiloso e crítico. Então o algoritmo de solução da PQ não irá convergir e irá oscilar entre uma iteração para a qual a solução obtida é não viável e uma outra em que o multiplicador de Lagrange de uma restrição violada incorporada ao conjunto ativo será negativo.

Nos resultados acima, enumeramos os possíveis problemas que podem surgir durante a resolução do problema da PQ. Adicionalmente a estes casos temos a situação em que a matriz Hessiana é nula ou quando existem restrições linearizadas nulas. Com relação ao primeiro destes problemas, vimos no lemas L11 e L12 as condições que devem ser atendidas e que levam à solução do problema. Assim, a solução da PL não será encontrada se o sistema de KKT não for consistente. Isto ocorre quando o resíduo do sistema de KKT estendido é não nulo. No início da resolução do problema da PQ, é verificado se existem restrições nulas e caso estas existam é gerada uma condição de aviso. Assim, em função do que foi exposto podemos avaliar os problemas que o algoritmo MISQPSOL é capaz de identificar ao longo do procedimento de busca da solução do problema considerado, a saber:

- *restrições de desigualdade nulas:* no início do algoritmo as restrições nulas são eliminadas do problema da PQ.
- *não obtenção da solução ótima em problemas da PL ($ST=-2$ ou $ST=-5$):* basicamente o que temos é que o sistema de KKT é inconsistente e a convergência se deu em um número finito de iterações.
- *existência de infinitas soluções estacionárias para o problema irrestrito ($ST=-4$):* neste caso não existem restrições ativas e o sistema de KKT é de posto deficiente mas consistente, i.e., o sistema de KKT estendido tem resíduo nulo.

- *convergência para uma solução não estacionária da PQ ($ST=-5$ ou $ST=-2$):* novamente a convergência se dá em um número finito de iterações, o sistema de KKT é inconsistente (resíduo do sistema de KKT estendido é não nulo).
- *problemas da PQ inviáveis ($ST=-10$):* não ocorre convergência e teremos a matriz A de posto deficiente em pelo menos uma das duas últimas iterações calculadas, sendo o resíduo do sistema de KKT estendido não nulo.
- *problemas da PQ críticos ($ST=-13$ ou $ST=-10$):* podemos ter duas situações, a primeira em que as duas últimas iterações calculadas apresentam um sistema de KKT de posto pleno e a outra em que em pelo menos uma das duas últimas iterações apresenta A de posto pleno mas $\begin{bmatrix} H_k & A^T \end{bmatrix}$ de posto de linha deficiente.
- *problemas da PQ ardilosos que não convergem em um número finito de iterações ($ST=-14$):* teremos que em pelo menos uma das duas últimas iterações o sistema de KKT é de posto deficiente com resíduo não nulo e sendo que a primeira linha da matriz A de restrições ativas é LD das primeiras n linhas do sistema de KKT, sendo que n é a dimensão do problema da PQ.
- *existência de autovalores negativos na matriz Hessiana:* ao término da resolução do problema da PQ, calcula-se o produto $d_k^T H d_k$ e assim sabe-se da existência de autovalores negativos na matriz Hessiana e uma mensagem de aviso é gerada.

Assim, restam os seguintes problemas que podem ocorrer e que o algoritmo tal como foi apresentado não é capaz de detectar:

- *PQ não tem solução finita:* isto porque verifica-se apenas que o sistema de KKT é inconsistente, o que significa que pode não existir solução finita para o problema da PQ. Mesmo assim, a direção finita gerada pode ser adequada, uma vez que uma direção não finita pode desestabilizar o algoritmo numérico.
- *convergência para ponto de sela do problema da PQ:* o que se sabe é que eventualmente a solução estacionária obtida pode não ser de mínimo. No entanto, isto não significa que a direção obtida não é adequada.
- *convergência para solução de máximo local do problema da PQ:* os comentários são os mesmos em relação à situação do caso anterior. Eventualmente, poderíamos verificar se existem $n-1$ restrições ativas para o caso de termos $d_k^T H d_k < 0$, mas verificar

quantas restrições encontram-se ativas, só seria adequado se H_k fosse ND ou NSD, correspondendo a casos particulares e assim não efetuamos esta verificação.

Dos problemas identificados, o tratamento realizado é com relação à imposição dos valores dos multiplicadores de Lagrange para os seguintes casos:

- problema da PQ inviável
- problema da PQ crítico
- problema da PQ ardiloso e crítico

Adicionalmente, nestas situações se a direção de busca obtida for nula, então reinicializam-se as variáveis de decisão, arbitrando-se um valor para elas (por exemplo iguais ao limite inferior).

A idéia do raciocínio que será apresentado a seguir é primeiramente distinguir os casos em que se obtém uma solução estacionária para o problema da PQ e para estes casos analisar quando ela é descendente, o que pode ser feito usando-se os resultados do item II. No caso da não obtenção de uma solução estacionária, é necessário verificar se a solução resultante é viável. A obtenção de uma solução estacionária pode ser feita em função da convergência ou não do algoritmo de resolução da PQ em um número finito de iterações e se o sistema de (KKT) for de posto deficiente, se o resíduo é nulo.

Como decorrência direta dos lemas L13 a L19 temos os seguintes resultados.

Proposição P2: Suponha que o sistema de KKT calculado na última iteração do algoritmo de solução do problema da PQ seja de posto pleno ou se não que o resíduo do sistema de KKT estendido seja nulo. Então se o algoritmo converge em um número finito de iterações, a convergência se dá para um ponto estacionário da PQ.

Proposição P3: Se o algoritmo de solução do problema da PQ não convergir em um número finito de iterações então apenas uma das seguintes afirmativas ocorre.

- k1. o problema da PQ é inviável
- k2. o problema da PQ é crítico
- k3. o problema da PQ é ardiloso e crítico

Proposição P4: Suponha que o sistema de KKT calculado na última iteração do algoritmo de solução da PQ seja de posto não pleno e que o resíduo seja não nulo. Então se o algoritmo converge em um número finito de iterações, a solução obtida é solução viável e não estacionária do problema da PQ.

Os resultados das proposições P2 a P4 são representadas na figura 4.V.1.

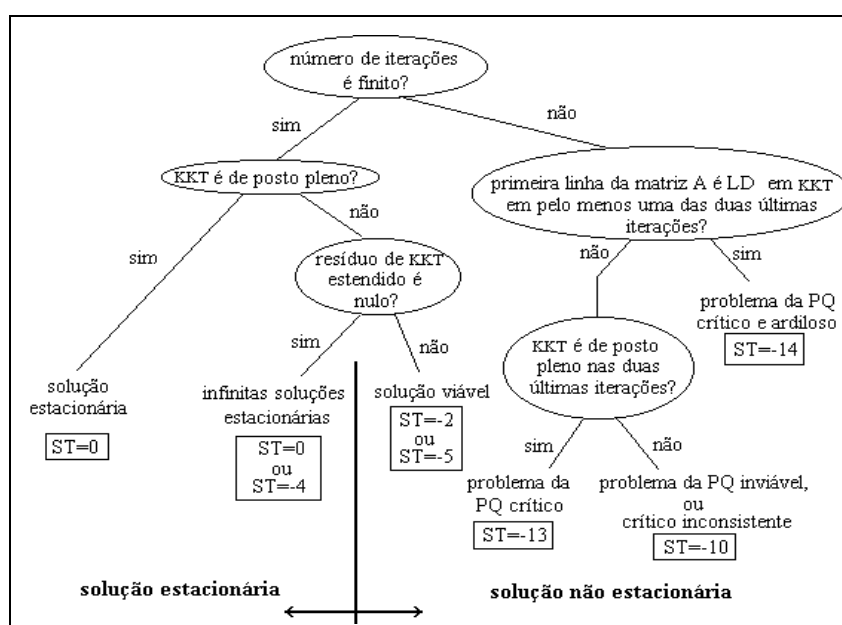


figura 4.V.1: caracterização das soluções obtidas pelo algoritmo de solução dos problemas da PQ

Para os casos em que o algoritmo da PQ obtém uma solução estacionária, os resultados de convergência local da literatura podem ser estendidos para o algoritmo MISQPSOL, isto é, pode-se mostrar que o algoritmo MISQPSOL converge para uma solução estacionária da PNL. A complicação surge quando o algoritmo da PQ não obtém uma solução estacionária. Através dos problemas testados (capítulo 5), percebemos que escolhidos adequadamente os parâmetros μ^0 e μ^1 , sempre obtivemos a convergência do algoritmo MISQPSOL para uma solução estacionária do problema da PNL testado, independentemente da estimativa inicial de x . Isto leva a crer que a imposição destes valores para os casos em que o algoritmo da

PQ não converge para uma solução estacionária pode ser suficiente para a garantia da convergência local para uma solução estacionária da PNL. Este resultado é bastante ambicioso. No entanto, a obtenção deste está além dos objetivos da presente tese. Note que o algoritmo MISQPSOL apresenta uma contribuição significativa. Primeiramente, pelo fato de introduzir um procedimento alternativo e inédito para o tratamento de problemas da PQ não convexos e, também, por ser capaz de classificar as dificuldades presentes no problema da PQ a ser resolvido.

VI. Extensão da análise do algoritmo MISQPSOL: problemas com restrições de igualdade

No item precedente, analisamos o algoritmo para os problemas que não apresentavam restrições de igualdade. Com a introdução de restrições de igualdade os seguintes agravantes surgem:

- na formação do problema reduzido podem surgir restrições inequações reduzidas nulas
- a matriz de restrições de igualdade pode ser de posto de linha deficiente

Com relação aos problemas do primeiro grupo, tratamentos são realizados apenas para o caso de termos restrições de limite reduzidas nulas. A idéia é restringir o domínio de busca da solução do conjunto de restrições de igualdade. No caso de termos linhas linearmente dependentes entre si na matriz de restrições de igualdade, a idéia é retirar as linhas que são LD. Um caso particular é quando a matriz de restrições de igualdade é nula, neste caso, a idéia é introduzir perturbações em direções adequadas. Este procedimento foi efetuado desta forma, uma vez que se a matriz é não nula e o problema da PQ é inviável, o que temos é que uma direção de busca é gerada que perturba a restrição violada. Como o problema é não linear, espera-se que na nova linearização as restrições deixem de ser linearmente dependentes. No caso de termos a matriz nula, a direção de busca obtida pode não ocasionar uma perturbação suficiente e neste caso, as restrições poderiam ser ignoradas se nenhuma perturbação não for efetuada. Este tratamento parece ser bastante adequado para a grande maioria dos problemas da PNL que se quer resolver. Problemas irão ocorrer para problemas em que as restrições apresentem curvaturas semelhantes e que se aproximem de hiperplanos paralelos. Ou seja, a ocorrência destes problemas não se dá em grande número. Assim, embora os tratamentos realizados possam parecer simplistas, eles se mostraram adequados para todos os problemas realizados até o momento. A generalização do procedimento para incluir mais situações é trivial embora possa ser custosa.

VII. Comentários finais a cerca do algoritmo MISQPSOL

Em função da discussão apresentada, podemos concluir que a limitação do algoritmo na atual versão compreende as seguintes situações em que uma solução não estacionária do problema da PNL é obtida:

- *incorporação de perturbação em uma única direção no caso em que a matriz de restrições de igualdade é nula*: uma generalização que poderia ser feita é verificar se a matriz de restrições é separável. Neste caso uma perturbação deveria ser gerada para cada bloco separável, i.e., em mais de uma direção de busca.
- *tratamento para os casos em que as restrições não forem atendidas*: quando o algoritmo termina, é verificado se a solução obtida é viável. Embora este não tenha sido o caso de nenhum dos problemas testados, problemas podem ocorrer para aplicações muito específicas. Eventualmente, perturbações adequadas poderiam ser geradas. Este pode ser um assunto para pesquisa futura. Neste item, incluem-se as restrições inequações linearizadas ou reduzidas nulas.
- *convergência para solução viável não estacionária*: quando a direção de busca obtida é nula e o sistema de KKT é inconsistente (e.g. $ST=-2$ ou $ST=-5$), a convergência pode se dar para uma solução viável não estacionária, dependendo do valor de μ^o e μ^I escolhido. Como estes problemas podem ser facilmente identificados, poderíamos incluir tratamentos adequados de forma que a convergência ocorra para uma solução estacionária. Desta forma, eliminaríamos a necessidade de uma escolha adequada dos parâmetros μ^o e μ^I para sanar problemas deste tipo.
- *problemas da PQ que não tenham solução finita não são identificados*: embora tenhamos indícios quando o problema pode não apresentar solução finita ($ST=-10$, $ST=-2$, $ST=-5$, $ST=-14$), nenhum teste é feito para se aprofundar esta questão. Eventualmente, a inclusão deste pode ser interessante.

Se a solução obtida não for de mínimo, tratamentos adequados poderiam ser realizados em função dos resultados obtidos no item II. Outras melhorias que poderiam ser introduzidas, neste ponto, seriam relacionadas, por exemplo, com a inclusão de mais restrições ou com a alteração do sentido da direção de busca obtida.

Uma outra alteração que poderia ser introduzida no algoritmo seria distinguir os problemas da PQ inviáveis dos críticos inconsistentes. Esta distinção é fácil de ser feita, uma vez que para os primeiros, temos que a matriz A é de posto não pleno, enquanto que para os últimos temos que $\begin{bmatrix} H_k & A^T \end{bmatrix}$ é de posto de linha não pleno.

Um último comentário é pertinente. As limitações do algoritmo desenvolvido são bastante menores que as de outros presentes na literatura, por exemplo quando se considera que a matriz Hessiana é PD no plano tangente às restrições ativas ou quando os multiplicadores de Lagrange são estritamente positivos para as restrições ativas ou quando o gradiente das restrições ativas deve ser um sistema de posto pleno para qualquer iteração (Han, 1976). Adicionalmente, o algoritmo apresentado introduziu uma nova forma de se tratar os problemas da PQ não convexos e atualmente poucos são os algoritmos que permitem que se faça uso de problemas da PQ não convexos. Os casos de falha do algoritmo MISQPSOL podem ocorrer para situações muito específicas. Cada tratamento novo introduzido no algoritmo pode comprometer o desempenho computacional deste, assim, cremos que tratamentos mais rigorosos devem ser voltados apenas para aplicações específicas e não necessariamente inclusas para a resolução de qualquer problema da PNL.