



Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada



2o Exame de Qualificação:

Escolha adiada de parâmetros em métodos de pontos interiores para programação linear

Luiz Rafael dos Santos

Doutorado em Matemática Aplicada

Orientador: Prof. Dr. Aurelio Ribeiro Leite de Oliveira

Coorientadores: Dr. Fernando Villas-Bôas e Prof. Dr. Clóvis Perin

Este trabalho contou com suporte financeiro da FAPESP (processo 2008/09685-3).

Campinas-SP

Sumário

1. Introdução e Fundamentos	1
1.1. Programação linear	1
1.1.1. Método simplex	3
1.1.2. Método elipsoide	3
1.1.3. Métodos de pontos interiores	4
1.2. Objetivos e estrutura desde trabalho	5
2. Métodos de Pontos Interiores Primais-Duais para Programação Linear	6
2.1. Um método de pontos interiores	6
2.1.1. Método Afim-escala	9
2.1.2. O método de barreira logarítmica	11
2.2. Métodos seguidores de caminho	15
2.2.1. Modelo geral para métodos seguidores de caminho	15
2.2.2. Vizinhanças da Trajetória Central	16
Vizinhança Simétrica	18
2.2.3. Ponto inicial infactível	19
Métodos Infactíveis	20
2.3. Métodos de Pontos Interiores na Prática	21
2.3.1. Método Preditor-Corretor de Mehrotra	21
Direção com correção de Segunda Ordem	22
2.3.2. Método das múltiplas correções de centralização	25
2.3.3. Ponto Inicial	27
2.3.4. Critério de Parada	29
3. Uma função de mérito polinomial em Métodos de Pontos Interiores (MPI)	31
3.1. Um KKT escalado	31
3.2. Direções de busca	33
3.2.1. Direção Afim-escala	33
3.2.2. A direção ideal	34
3.2.3. Combinando direções	36

3.3. O próximo resíduo	38
3.4. Uma função de mérito polinomial	39
3.5. Vizinhança simétrica como restrições polinomiais	43
3.6. Subproblema de Otimização de Polinômios	45
Considerações Finais	48
Resultados de Convergência	48
Experimentos Numéricos	49
Referências Bibliográficas	50
A. Resultados Técnicos	55
A.1. Lemas para a prova Teorema 3.3	55

Capítulo 1.

Introdução e Fundamentos

Neste capítulo será feita uma breve introdução aos problemas de Programação Linear (PL), bem como a aspectos preliminares de alguns métodos criados para resolvê-los. Posteriormente serão definidos os objetivos deste trabalho e o modo como o mesmo foi estruturado.

1.1. Programação linear

Programação Linear é um tópico que tem sido amplamente estudado no escopo da otimização e que ganhou relevância a partir da década de 1940 com os trabalhos de Dantzig, Kantorovich, Koopmans e von Neumann. A criação do método simplex por Dantzig acelerou o interesse pelo tema, já que se encontrou um meio de resolver tal problema. O mesmo Dantzig, em um texto comemorativo de 1991, faz um resumo histórico do desenvolvimento da PL e a define de maneira genérica:

“Linear programming can be viewed as part of a great revolutionary development which has given mankind the ability to state general goals and to lay out a path of detailed decisions to take in order to ‘best’ achieve its goals when faced with practical situations of great complexity.”[11].

A partir da necessidade de tratar matematicamente problemas econômicos e de planejamento militar nos anos que se seguiram à Segunda Guerra Mundial, ao mesmo tempo em que os computadores passaram a poder realizar operações matemáticas com maior velocidade, houve um crescimento espantoso da utilização da PL e, por extensão, da otimização em geral. Para um resumo histórico há boas fontes [10, 42].

Um problema de otimização pode ser descrito em termos de variáveis de decisão, conjuntos de restrições e uma função objetivo. Resolver um problema de otimização significa encontrar a “melhor maneira” na qual as variáveis satisfaçam as restrições ao mesmo tempo em que se otimiza – minimiza ou maximiza – a função objetivo.

Um problema de *Programação Linear* é um problema de otimização no qual as restrições e a função objetivo são lineares. A PL¹ surge diretamente em várias aplicações reais, por

¹Usaremos problema de PL e PL como sinônimos.

exemplo em problemas de economia, logística, planejamento e controle da produção, entre outros. Aparece ainda em aproximações de problemas mais complexos ou na solução relaxada de problemas de programação inteira ou mista.

Matematicamente podemos escrever qualquer PL na seguinte *forma padrão*:

$$\begin{array}{ll} \underset{x}{\text{minimizar}} & c^T x \\ \text{sujeito a} & \begin{cases} Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases} \end{array} \quad (1.1)$$

em que $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e c , x e b têm dimensão compatível. A região $\mathcal{P} = \{x \in \mathbb{R}^n | Ax = b \text{ e } x \geq 0\}$ é conhecida como região factível do problema e é um poliedro com pelo menos um vértice ou ponto extremo.

Como uma função linear é convexa, problemas de PL tem a particularidade dada pelo seguinte teorema [4, cap. 3]:

Teorema 1.1 (Teorema Fundamental da Programação Linear). *Em um problema de Programação Linear com região factível \mathcal{P} , ou o valor ótimo da função objetivo é ilimitado ou então este valor será atingido em um ponto extremo de \mathcal{P} .*

Um conjunto de restrições lineares define um *poliedro* que constitui então a *região factível*. De acordo com o Teorema 1.1, uma forma de encontrar a solução de um problema de PL seria percorrer todos os vértices da região factível comparando os valores da função objetivo e selecionando o melhor dentre eles. Essa estratégia, no entanto, é pouco eficiente, haja vista o poliedro ser resultante de um sistema linear de m restrições e n variáveis ($m < n$) podendo ter um número de vértices totalizando

$$\binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!} \geq \left(\frac{n}{m}\right)^m,$$

quando o problema está na forma padrão. ~~Embora este valor seja superestimado, já que nem todos os vértices são factíveis, ainda assim este método de exaustão seria pouco eficiente.~~ Por outro lado, o fato de o número de vértices ser limitado garante terminação finita para qualquer método que funcione desta forma. Entretanto, esse número é exponencial, já que

$$\left(\frac{n}{m}\right)^m \geq 2^m \text{ para } n \geq 2m.$$

Assim, encontrar o *vértice ótimo* de maneira eficiente é o segredo dos bons métodos para resolver problemas de PL.

1.1.1. Método simplex

O Método Simplex foi apresentado por Dantzig [9] em 1947 e foi desenvolvido ao mesmo tempo em que houve a percepção do poder da PL como ferramenta auxiliar na tomada de decisões. Seu pioneirismo deve-se à busca da solução do PL caminhando pelos vértices de maneira a utilizar o valor da função objetivo – caso não degenerado – para determinar qual o próximo vértice adjacente deve ser visitado, fazendo assim uma aplicação do Teorema 1.1.

Mais que isso, dado um método de escolha do próximo vértice, o conjunto de vértices possíveis decresce em cada iteração, ainda no caso não degenerado. Degenerescência (primal) ocorre quando um vértice em \mathbb{R}^n é definido por $p > n$ restrições, e um passo de tamanho zero pode ser produzido pelo método. Desta maneira, o método simplex não sairia do lugar, logo nenhuma melhora na função objetivo seria alcançada.

O método simplex se mostrou, e ainda se mostra, robusto e eficiente em grande quantidade de problemas, e por isso mesmo foi considerado *o método preferencial* para se resolver PL's. Entretanto, dado o número exponencial de possíveis vértices, havia sempre o receio de que seria necessário esforço exponencial, isto é, que fosse todos os vértices da região viável fossem visitados para que se encontrasse a solução ótima. De fato, Klee e Minty [33] foram os primeiros a apresentar uma classe de exemplos patológicos para a qual esse comportamento patológico do método simplex apareceu. No exemplo criado por estes autores, com n variáveis e $2n$ restrições, o método simplex de Dantzig precisou passar por todos os $2^n - 1$ pontos extremos da região viável antes de encontrar a solução ótima.

Apesar disso, nenhum caso com número exponencial de iterações foi encontrado na vida real, e geralmente apenas uma pequena porcentagem de vértices é consultada até que se chegue a uma solução ótima. Mais que isso, em geral, o método simplex mostra comportamento polinomial, sendo linear em relação à m e sublinear em relação à n [15, pg. 94]. Um resumo sobre a eficiência do método simplex pode ser encontrada no artigo de Shamir [43].

1.1.2. Método elipsoide

Enquanto na prática o método Simplex continuava como o método mais robusto e eficiente, a busca por um método que tivesse complexidade polinomial no pior caso foi satisfeita por Khachiyan [32] através de seu *Método Elipsoide*. Este método, ao contrário do método simplex, não se baseia em caminhar pelos vértices da região factível mas em diminuir o volume de um elipsoide que contenha um potencial ponto de solução através de um conjunto de desigualdades lineares estritas.

Inquestionavelmente, o método elipsoide representou um grande avanço teórico, significando que um PL faz parte dos problemas polinomiais, isto é, que pode ser resolvido por um algoritmo de complexidade polinomial. Provou-se que a complexidade deste método é

$\mathcal{O}(n^2(1/\varepsilon))$, portanto polinomial. Todavia, do ponto de vista prático, o método elipsoide não conseguiu competir com o método simplex [5], pois sua convergência era muito lenta, na presença de erros de arredondamento perdia robustez e em cada iteração a quantidade de memória necessária para armazenamento era muito grande. Consequentemente, embora desafortunadamente o método simplex tenha complexidade exponencial na análise do *pior caso*, experimentos numéricos indicaram que na prática este era absolutamente superior ao método elipsoide.

1.1.3. Métodos de pontos interiores

Em problemas práticos, o método Simplex reinou absoluto na solução de problemas de PL até meados da década de 1980 como único método viável para resolver tal classe de problemas. Em 1984 Karmarkar [31] inicia uma nova abordagem que ficou conhecida como MPI.

~~De fato, uma busca histórica mostra que em 1955 o primeiro *Métodos de Pontos Interiores* é atribuído a Frisch [17]. Este trabalho implementa uma função barreira logarítmica para encontrar o mínimo local de uma função *não-linear*, sujeita a restrições de desigualdade. O método foi extensamente estudado por Fiacco e McCormick [16], porém caiu em desuso por conta de sua ineficiência bem como pela presença de competidores muito fortes como a programação quadrática sequencial.~~

Em 1967 Dikin [14] publicou um trabalho ~~independentemente de Karmarkar~~, que resolvia PL usando um método de pontos interiores, que ficou conhecido como método afim-escala.

A ideia principal dos MPI difere-se fundamentalmente da que inspira o método simplex. No método simplex as soluções encontradas em cada iteração estão na fronteira da região factível, já que o método visita os vértices do poliedro que define tal região. Por outro lado, nos MPI estas soluções em cada iteração estão no interior desta região. Isto é feito criando-se uma família parametrizada de soluções que convergem assintoticamente para a solução exata, isto é, trata-se de um método homotópico. Consequentemente, usa-se uma abordagem não-linear para resolver um problema linear, escapando então da dificuldade que a dimensão do problema apresenta ao se lidar com as características combinatoriais do PL.

Além disso, como exposto acima, no método simplex a quantidade de iterações cresce de acordo com o tamanho do problema, o que não se repete nos MPI. Do ponto de vista da complexidade computacional, esse método também é polinomial, de ordem $\mathcal{O}(n(1/\varepsilon))$ [31].

Ao contrário do método elipsoide, o método de Karmarkar tem um desempenho muito melhor e compete com o simplex, sendo consideravelmente melhor que este em problemas de larga escala. Uma variante do método de Karmarkar foi implementada por Adler, Resende, Veiga, e Karmarkar [1], e desde então a compreensão do funcionamento desses métodos aumentou consideravelmente, ao mesmo tempo em que variantes têm sido propostas, muitas delas se apresentando como alternativas computacionais viáveis ao método simplex.

Na prática há classes de problemas que são melhores resolvidos pelo método simplex e outras para os quais os métodos de pontos interiores são mais adequados. Tamanho e estrutura de esparsidade, entre outros, são fatores preponderantes para a escolha do método apropriado. Entretanto, pode-se dizer que com o aumento da dimensão do problema, os MPI ficam mais atraentes e efetivos. Este fato entretanto não vale para problemas muito esparsos, em que o método simplex é virtualmente imbatível [26], e para problemas em rede, nos quais uma especialização do método simplex permite explorar a estrutura do problema de maneira muito eficiente [41].

Embora esta tese trate de MPI para problemas lineares, estes podem ser utilizados para resolver problemas não-lineares. Em particular, problemas de Programação Quadrática (QP) convexa são usualmente resolvidos com códigos de Pontos Interiores, em particular quando são de larga escala. Com efeito, um QP convexo pode ser escrito como

$$\begin{aligned} & \underset{x}{\text{minimizar}} && x^T Q x + c^T x \\ & \text{sujeito a} && \begin{cases} Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

em que $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é simétrica definida positiva, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e c , x e b têm dimensão compatível. Com exceção da matriz Q , temos a mesma estrutura de um PL.

1.2. Objetivos e estrutura desde trabalho

O objetivo deste trabalho é apresentar as ideias principais que foram estudadas durante o doutorado e mostrar os caminhos que serão percorridos para a finalização do trabalho em forma de tese.

Nesta monografia, no Capítulo 2 é apresentado o estado da arte no que diz respeito aos métodos de pontos interiores. O Capítulo 3 apresenta a ideia principal deste trabalho, que é o desenvolvimento de uma função de mérito polinomial que sirva não só como medida de factibilidade e otimalidade de um ponto, mas que permita escolher, de forma adiada, os parâmetros que determinam uma melhor direção em cada iteração de um método de pontos interiores do tipo seguidor de caminho primal dual. Nas Considerações Finais estão expostas as ideias que pretendem ser desenvolvidas para complementação e finalização deste trabalho.

Capítulo 2.

Métodos de Pontos Interiores Primais-Duais para Programação Linear

“In the simplex method, the current solution is modified by introducing a nonzero coefficient for one of the columns in the constraint matrix. Our method allows the current solution to be modified by introducing several columns at once” [31]

(N. Karmarkar)

Este capítulo tem o objetivo de apresentar os Métodos de Pontos Interiores primais-duais seguidores de caminho. A teoria central que versa sobre MPI está bem estabelecida e há ótimos textos sobre o assunto [45, 49]. Recentemente Gondzio [21] fez um resumo histórico no qual resgata as principais contribuições no tema. Estas referências servem como texto introdutório e foi com base nelas e nos trabalhos de Colombo [6] e Villas-Bôas [47], que este capítulo foi escrito.

2.1. Um método de pontos interiores

O problema de PL na forma padrão,

$$\begin{array}{ll} \underset{x}{\text{minimizar}} & c^T x \\ \text{sujeito a} & \begin{cases} Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases} \end{array} \quad (P)$$

é chamado de *problema primal*.

Associado a todo PL existe um outro PL chamado *problema dual*, o qual consiste nos

mesmos dados arranjados de maneira diferente. O dual de (P) é

$$\begin{array}{ll} \underset{(y,z)}{\text{maximizar}} & b^T y \\ \text{sujeito a} & \begin{cases} A^T y + z = b \\ z \geq 0, y \text{ livre} \end{cases} \end{array} \quad (D)$$

em que $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é uma matriz de posto completo, $c, x, z \in \mathbb{R}^n$, $y, b \in \mathbb{R}^m$ e $m < n$. Chamamos os componentes de y de *variáveis duais*, enquanto que z é o vetor das *folgas duais*. Note que, como A tem posto completo, existe uma relação unívoca entre y e z .

Sejam

$$\mathcal{P} = \{x : Ax = b, x \geq 0\} \quad \text{e} \quad \mathcal{D} = \{(y, z) : A^T y + z = b, z \geq 0\} \quad (2.1)$$

os conjuntos de pontos factíveis primais e duais respectivamente. Usando essa notação, o par primal-dual de $(P-D)$ pode ser reescrito como

$$\min_x c^T x \text{ s.a. } x \in \mathcal{P} \quad \text{e} \quad \max_{(y,z)} b^T y \text{ s.a. } (y, z) \in \mathcal{D}. \quad (2.2)$$

Denomina-se $\mathcal{F} = \mathcal{P} \times \mathcal{D}$ o conjuntos dos pontos primais-duais factíveis. Para fins de notação, pode-se escrever $w = (x, y, z)$ e portanto é correto afirmar que $w \in \mathcal{F}$. Define-se também os conjuntos

$$\mathcal{Q} = \{w \in \mathbb{R}^{2n+m} : (x, z) \geq 0\}$$

e

$$\mathcal{Q}^+ = \{w \in \mathbb{R}^{2n+m} : (x, z) > 0\}$$

respectivamente como os conjuntos dos pontos de \mathbb{R}^{2n+m} não-negativos e positivos nas variáveis x e z .

Com isso, seja

$$\mathcal{F}^+ = \mathcal{F} \cap \mathcal{Q}^+$$

o conjunto dos pontos primais-duais interiores. Como o próprio nome sugere, em Métodos de Pontos Interiores dedica-se especialmente a estudar iterandos que estejam contidos em \mathcal{F}^+ , no caso de métodos factíveis.

Neste trabalho, os seguintes pressupostos serão assumidos como verdadeiros:

$\mathcal{P}1$. \mathcal{F} é não-vazio, isto é, existe algum ponto factível.

$\mathcal{P}2$. Para quaisquer $(x, y, z) \in \mathcal{F}$ e $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) \in \mathcal{F}$, temos $(x - \bar{x})^T (z - \bar{z}) \geq 0$.

Com efeito, tem-se que se $\mathcal{P}1$ é assumido verdadeiro, então sempre é possível a existência de solução para o PL (P) (veja [24, Teo. 3.1]).

Apresenta-se agora alguns resultados bem conhecidos sobre a relação entre o par primal-dual. Para maiores detalhes consulte-se [4, 6, 49], textos que inspiraram esta apresentação.

Lema 2.1 (Dualidade Fraca). *Seja $(x, y, z) \in \mathcal{F}$. Então $c^T x \geq b^T y$.*

Demonstração. Como $x \in \mathcal{P}$ e $(y, z) \in \mathcal{D}$ então vale

$$c^T x - b^T y = c^T x - x^T A^T y = x^T (c - A^T y) = x^T z \geq 0.$$

■

O significado da Dualidade Fraca é que o valor objetivo primal serve de limitante superior para o valor objetivo dual e vice-versa. A diferença $c^T x - b^T y$ é chamada *gap de dualidade*. Quando em um ponto (x, y, z) factível, o gap de dualidade é zero, isto é, quando tanto o valor objetivo primal quanto dual alcançam seus limites, então este ponto é solução ótima primal-dual. Este resultado é formalizado no lema a seguir.

Lema 2.2 (Dualidade Forte). *Um ponto $x \in \mathcal{P}$ é ótimo se e somente se existe um par $(y, z) \in \mathcal{D}$ tal que $c^T x = b^T y$.*

Uma condição necessária e suficiente para que o problema (P) tenha uma solução factível é que $\mathcal{P} \neq \emptyset$. Além disso, se $\mathcal{P} \neq \emptyset$ e $\mathcal{D} \neq \emptyset$ então ambos (P) e (D) admitem solução ótima (x^*, y^*, z^*) e pelo Lema 2.2 o valor da função objetivo coincide neste ponto. Por outro lado, se um dos conjuntos \mathcal{P} ou \mathcal{D} forem vazios, então o outro conjunto será ilimitado ou vazio. Nestes casos, os problemas $(P-D)$ não terão solução.

Podemos agora expressar condições de otimalidade para (P) e (D) . Tais condições ajudarão a reconhecer quando estes problemas possuem solução ótima e por isso podem nos ajudar a desenvolver algoritmos ou métodos para encontrar tais soluções. As condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) expressam uma condição de otimalidade de primeira ordem para um PL e podem ser escritas como

$$\begin{cases} Ax = b, & (2.3a) \\ A^T y + z = c, & (2.3b) \\ XZe = 0, & (2.3c) \\ (x, z) \geq 0. & (2.3d) \end{cases}$$

em que $X = \text{diag}(x)$, $Z = \text{diag}(z)$ e $e = (1, \dots, 1)^T$.

As duas primeiras equações de (2.3) são conhecidas como *factibilidade ou viabilidade primal e dual*, respectivamente. A equação (2.3c) significa que $x_i z_i = 0$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$, e

é chamada de *complementaridade*¹. A última equação é chamada de *não-negatividade*. Note ainda que se $(x, y, z) \in \mathcal{F}$, então ele satisfaz (2.3a), (2.3b) e (2.3d). Isso significa que uma solução ótima é caracterizada pela factibilidade primal e dual e pela complementaridade. Para pontos não ótimos, mas factíveis, a complementaridade pode nos dar uma medida da *distância* destes pontos para a otimalidade:

$$x^T z = c^T x - b^T y. \quad (2.4)$$

A valor $x^T z$ é chamado *gap de complementaridade*. Quando este converge para zero, então tem-se uma solução ótima. Além disso, a igualdade entre o gap de complementaridade e o gap de dualidade mostrado em (2.4) só vale quando o ponto é factível.

As equações (2.3) dão uma condição necessária e suficiente para que $w^* = (x^*, y^*, z^*)$ seja solução de $(P-D)$, isto é, x^* é solução de (P) e (y^*, z^*) é solução de (D) . Consequentemente, um corolário de KKT para PL é o Lema 2.2.

Uma hipótese padrão que consideraremos, chamada *hipótese de ponto interior*, diz que tanto \mathcal{P} quanto \mathcal{D} sejam não vazios [25]. Caso essa hipótese não seja satisfeita, considera-se permitir que o método aceite iterandos infactíveis ou introduzindo perturbações que aumentem o conjunto \mathcal{F} .

2.1.1. Método Afim-escala

Os métodos de pontos interiores primais-duais para PL encontram w^* resolvendo as equações (2.3). Note que a única equação não-linear de (2.3) é $XZe = 0$ e por conta dela é que aplica-se alguma variante do método de Newton, modificando a direção de busca e o tamanho de passo de modo que (2.3d) seja satisfeita *estritamente* em toda iteração.

Podemos reescrever (2.3) utilizando uma aplicação $F : \mathbb{R}^{2n+m} \rightarrow \mathbb{R}^{2n+m}$ da seguinte maneira:

$$F(w) = \begin{bmatrix} Ax - b \\ A^T y + z - c \\ XZe \end{bmatrix} = 0, \quad (2.5a)$$

$$(x, z) \geq 0. \quad (2.5b)$$

Todos os métodos primais-duais geram iterandos $w^k = (x^k, y^k, z^k)$ que satisfazem (2.5b) estritamente, isto é, $(x^k, z^k) > 0$. Esta propriedade dá origem ao termo *ponto interior*. Ao

¹ Para fins de simplificação de notação, para quaisquer vetores u e v em \mathbb{R}^n , o vetor UVe poderá ser representado usando-se o produto de Hadamard [27, p. 455], isto é, uv é o vetor em \mathbb{R}^n , tal que cada componente $(uv)_i = u_i v_i$, para $i = 1, \dots, n$. Além disso, a substituição ξe por ξ pode ser feita, quando ξ for um escalar e $e = (1, \dots, 1)$, sempre respeitando e adequando as dimensões.

respeitar estes limites, impede-se iterandos tais que $F(w^k) = 0$, mas que não satisfaçam $(x, z) \geq 0$. Estes tipos de soluções são facilmente encontrados, no entanto não nos dão informações úteis para a solução de (P) e (D) . Alguns métodos primais-duais exigem que $w^k \in \mathcal{F}^0$, ou seja, que o ponto seja estritamente factível. No entanto, atualmente os métodos mais competitivos trabalham com pontos infactíveis, exigindo somente que o ponto seja estritamente interior (veja Seção 2.2.3)

O método de Newton aplicado a (2.5a) dá uma aproximação linear em torno do ponto atual, obtendo uma direção de busca $\Delta w = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ resolvendo o seguinte sistema linear

$$\nabla F(w) \Delta w = -F(w)$$

em que

$$\nabla F = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z & 0 & X \end{bmatrix}$$

é a matriz Jacobiana de F .

No caso de problemas de QP como dado em (1.2), a diferença estaria justamente na matriz Jacobiana, que seria dada por

$$\nabla F = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ -Q & A^T & I \\ Z & 0 & X \end{bmatrix}.$$

Note que o passo Newton é encontrado ao resolver

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z & 0 & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b - Ax \\ c - A^T y - z \\ -XZe \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_P \\ r_D \\ r_C \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

Se o ponto atual é estritamente factível, então os resíduos r_P e r_D são nulos.

Um passo na direção $\Delta w = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ é chamado *afim-escala*. Normalmente não é possível caminhar nesta direção com passo completo, isto é, $w + \Delta w$ geralmente viola o limite (2.5b). Para evitar essa dificuldade pode ser feita uma busca linear na direção de Newton tal que o novo iterando será

$$w + \alpha \Delta w$$

em que $\alpha \in (0, 1]$ é o parâmetro da busca linear. Mesmo assim, geralmente podemos apenas dar passos pequenos nesta direção ($\alpha \ll 1$) antes de violar a condição $(x, z) > 0$. Consequentemente passos puramente afim-escala não nos permitem um bom progresso em direção

à solução.

De modo a poder contornar os problemas do método afim-escala, os métodos primais-duais sugerem algumas estratégias diferentes do procedimento padrão de Newton:

- (i) Enviar a direção de busca de modo a fazê-la apontar para dentro do interior do ortante não-negativo $(x, z) \geq 0$, de tal forma que seja possível mover-se suficientemente ao longe dessa direção antes que algum componente de (x, z) se torne negativo.
- (ii) Manter os componentes de (x, z) longe do limite do ortante não negativo. Direções de busca calculadas por meio de pontos próximos a este limite tendem a ser calculadas com erros de arredondamento relativamente grandes e pouco progresso pode ser feito por elas.

2.1.2. O método de barreira logarítmica

Uma maneira de fazer as duas proposições acima valerem é usar uma função barreira logarítmica no PL. Dado o PL na forma padrão (P) , é possível definir um *problema de barreira* correspondente

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x - \tau \sum_{i=1}^n \ln x \\ \text{s.a.} \quad & x \in \mathcal{P}^0 \end{aligned} \quad (P_\tau)$$

em que $\tau > 0$ é um escalar, normalmente pequeno, que serve de parâmetro para uma família de problemas (P_τ) , e que é chamado de *parâmetro de barreira*.

A presença da barreira logarítmica na função objetivo de (P_τ) força o iterando a ficar no interior da região factível, já que há uma penalização muito pesada quando os pontos estão perto do limite. Por outro lado a influência da função barreira pode ser controlada através do parâmetro τ . O peso na barreira regula a distância do iterando para o limite, ou seja, quando $\tau \rightarrow 0$, o problema (P_τ) cada vez mais se parece com o problema (P) . Esta estratégia só é possível se $\mathcal{P}^0 \neq \emptyset$. Além disso, se \mathcal{P} for limitado então tanto (P) quanto (P_τ) admitem solução ótima.

Como a função objetivo de (P_τ) é estritamente convexa, o minimizador desta função, se existir, pode ser completamente caracterizado pelas condições KKT:

$$\begin{cases} Ax = b, \\ \tau X^{-1}e + A^T y = c, \\ (x, z) > 0. \end{cases}$$

Fazendo $Ze = \tau X^{-1}e$, ou equivalentemente $XZe = \tau e$, obtemos a formulação padrão primal-dual das chamadas *condições KKT perturbadas*:

$$\begin{cases} Ax = b, & (2.7a) \\ A^T y + z = c, & (2.7b) \\ XZe = \tau e, & (2.7c) \\ (x, z) > 0. & (2.7d) \end{cases}$$

Se as condições KKT perturbadas admitem solução para algum $\hat{\tau} > 0$, então admitem solução para qualquer $\tau > 0$. O sistema (2.7) se aproxima mais e mais de (2.3) quando $\tau \rightarrow 0$ e determina uma única curva suave, contínua e parametrizada pela variável τ , definida por $\mathcal{C} = \{(x(\tau), y(\tau), z(\tau)) : \tau > 0\}$. Para cada τ o ponto da curva é completamente caracterizado como sendo a solução única do sistema (2.7). Além disso, quando $\tau \rightarrow 0$, \mathcal{C} converge para uma solução ótima primal-dual do PL. Essa curva é chamada em MPI de *trajetória central*. Esta trajetória nos guia para uma solução em que os pares $x_i z_i$ são estritamente positivos e decrescem a zero na mesma taxa de decrescimento de τ . Estudos sobre a trajetória central pode ser encontrados em Bayer e Lagarias [2, 3], Megiddo [36], Sonnevend [44], entre outros.

Usando o fato de que para algum $\tau > 0$ o ponto $(x(\tau), y(\tau), z(\tau))$ é primal-dual factível, podemos definir o gap de dualidade $g(\tau)$ para (P_τ) de forma semelhante à Equação (2.4) como função do parâmetro de barreira:

$$g(\tau) = c^T x(\tau) - b^T y(\tau) = x(\tau)^T (\tau), \quad (2.8)$$

isto é, para cada valor de τ , o gap de dualidade corresponde ao gap de complementaridade e logo reduzir um significa reduzir o outro. Além disso, como $XZe - \tau e = 0$ por (2.7c), então $x_i z_i = \tau, i = 1, \dots, n$ e logo

$$g(\tau) = x(\tau)^T z(\tau) = \sum_{i=1}^n x_i(\tau) z_i(\tau) = n\tau. \quad (2.9)$$

Isso significa que quando $\tau \rightarrow 0$ temos $g(\tau) \rightarrow 0$. As equações (2.8) e (2.9) em conjunto com o fato de que $c^T x(\tau) \geq c^T x^* = b^T y^* \geq b^T y(\tau)$, implicam que

$$c^T x(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} c^T x^* \quad \text{e} \quad b^T y(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} b^T y^*.$$

Assim, os valores objetivos do problema perturbado convergem para aqueles obtidos por uma solução ótima (x^*, y^*, z^*) do problema original. Mais que isso, vale o seguinte resultado [36]:

Teorema 2.3. *Se um problema de PL for primal e dual factível e A for de posto completo, então*

$$x(\tau) \rightarrow x^* \quad \text{e} \quad (y(\tau), z(\tau)) \rightarrow (y^*, z^*),$$

sempre que $\tau \rightarrow 0$.

Este teorema significa que, sob algumas condições, a trajetória central converge para a solução ótima dos problemas (P) e (D) . Em consequência disto, a trajetória central pode ser um bom guia para encontrar o conjunto ótimo primal-dual. Métodos que se baseiam na trajetória central são chamados Métodos de Pontos Interiores *seguidores de caminho*.

A solução que se encontra por seguir a trajetória central é caracterizada pela *complementaridade estrita*. Isso é descrito pelo seguinte resultado.

Teorema 2.4 (Complementaridade estrita). *Se (P) e (D) forem factíveis, então existe um ponto $x^* \in \mathcal{P}$ e um par $(y^*, z^*) \in \mathcal{D}$ tais que*

$$(x^*)^T z^* = 0 \quad \text{e} \quad x_i^* + z_i^* > 0, \text{ para } i = 1, \dots, n.$$

Uma solução (x^*, z^*) que satisfaça o teorema acima é chamada estritamente complementar. Nesses termos pode-se definir o conceito de partição ótima. Seguindo as ideias de Jansen [28], definimos o suporte do vetor $v \in \mathbb{R}^n$ como

$$\text{supp}(v) = \{i : v_i > 0, i = 1, \dots, n\}.$$

e a partição do conjunto de índices $\{1, \dots, n\}$ através da definição dos conjuntos

$$\mathcal{B} = \text{supp}(x^*) \quad \text{e} \quad \mathcal{M} = \text{supp}(z^*).$$

Do Teorema 2.4 segue que essa é uma partição bem definida, no sentido de que as soluções que possuem a propriedade da complementaridade estrita satisfazem tanto $\mathcal{B} \cap \mathcal{M} = \emptyset$ quanto $\mathcal{B} \cup \mathcal{M} = 1, \dots, n$. A noção de complementaridade estrita e de partição ótima são ideias recorrentes em análises de MPI.

Um fato que vale a pena chamar atenção é que nos casos em que o PL tenha múltiplas soluções, um MPI termina no centro analítico da face ótima ao invés de em um vértice, como no método simplex. Isso significa que de certa maneira, através do conceito de partição ótima, pode-se interpretar essa situação como sendo a determinação de todo o conjunto de soluções ótimas. Em contraste a isso, a escolha do vértice ótimo obtido pelo método simplex é arbitrária e depende de alguns fatores como regras de pivoteamento.

Não raramente, ter uma solução básica que identifica um vértice é equivalente a encontrar uma solução exata. Entretanto, deve-se discutir o que significa de solução “exata”. Em vários casos, não é necessária uma precisão adicional de ter-se uma solução em um vértice, ao invés da solução que se encontra no centro analítico da face ótima. Do ponto de vista da programação inteira, temos uma exceção a esse caso, já que as soluções inteiras encontram-se nos vértices do envoltório convexo de pontos inteiros factíveis. A diferença entre ter ou não uma base ótima

ou uma partição ótima é de importante consequência para o uso de soluções na análise de sensibilidade [28, 51]

Vavasis e Ye [46] discutiram propriedades da trajetória central, demonstrando que a mesma é caracterizada por $\mathcal{O}(n^2)$ curvas de alto grau e segmentos nos quais a trajetória é relativamente reta. Mais que isso, em uma vizinhança suficientemente pequena do ótimo a trajetória central se torna uma linha reta e com isto, nesta região, o método apresenta a boa propriedade da convergência quadrática que os métodos do tipo Newton possuem [36].

Considere o limite de (P_τ) quando $\tau \rightarrow \infty$ e consequentemente encontra-se o ponto do qual a trajetória central inicia. Isso corresponde a encontrar o ponto \tilde{x} que minimiza a função de barreira, isto é,

$$\tilde{x} = \arg \min_{x \in \mathcal{P}^+} \left\{ - \sum_{i=1}^n \ln x_i \right\}.$$

O ponto \tilde{x} é o *centro analítico* do politopo factível, e foi primeiramente estudado por Sonnevend [44]. Dada a convexidade estrita da função de barreira, o conceito de centro analítico está bem definido. Como o centro analítico minimiza o problema de barreira, ele é o ponto que se encontra mais distante da fronteira do politopo. Entretanto, existe um problema em definir a trajetória central em termos de centro analítico: a trajetória central é afetada pela presença de restrições redundantes. Isso acontece porque tem-se aqui um conceito exclusivamente analítico, o qual não explora considerações geométricas. Para vencer essa desvantagem, outros tipos de centro – centro de gravidade, centro do elipsoide de volume máximo que pode ser inscrito em \mathcal{P} , centro volumétrico – podem ser definidos, mas usualmente são muito custosos de se calcular [23].

Tal desvantagem da trajetória central foi apresentada como potencialmente geradora de consequências extremas por Deza, Nematollahi, Peyghami, e Terlaky [13], que conseguiram replicar o comportamento do método simplex no cubo de Klee-Minty num contexto de pontos interiores. Isso foi conseguido por patologicamente se adicionar um número exponencial de restrições redundantes e paralelas às faces do cubo, tal que a trajetória central torna-se altamente destorcida e está presente em vizinhanças arbitrariamente pequenas de todos os vértices do cubo.

Menciona-se aqui o fato de que técnicas de pré-processamento são usualmente implementadas em códigos maduros de modo a remover tanto quanto possível essas restrições redundantes, mas embora elas sejam implementadas com heurísticas de sucesso, geralmente não são ótimas.

2.2. Métodos seguidores de caminho

2.2.1. Modelo geral para métodos seguidores de caminho

A maioria dos métodos primais-duais seguidores de caminho dão passos de Newton em direção a pontos de \mathcal{C} para os quais $\tau > 0$, ao invés de passos puramente Newton para F . Como vimos, o sistema (2.3) é resolvido por fazer os pares complementares se alinhem (veja Equação (2.7c)) ao mesmo tempo em que $(x, z) > 0$. Como estes passos são enviesados em direção ao ortante positivo definido por $(x, z) > 0$, usualmente é possível tomar passos maiores que um passo de Newton para F antes de violar a restrição de positividade. Para descrever esta busca enviesada, introduzimos um *parâmetro de centralização* $\eta \in [0, 1]$, na equação (2.7c), que faz com que em cada iteração τ decresça monotonicamente.

As equações para encontrar a direção de busca tornam-se

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z & 0 & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_P \\ r_D \\ r_C + \eta\tau e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_P \\ r_D \\ r_\tau \end{bmatrix}, \quad (2.10)$$

em que $\Delta w = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ é um passo de Newton apontando para $(x(\eta\tau), y(\eta\tau), z(\eta\tau)) \in \mathcal{C}$ e o par $x_i z_i$ é igual a $\eta\tau$. Mesmo nesse caso, a direção de busca encontrada Δw nem sempre pode ser utilizada e o novo iterando é calculado novamente usando um teste da razão, isto é, escolhendo α_k , tal que

$$w^{k+1} = w^k + \alpha_k \Delta w \quad (2.11)$$

e $(x^{k+1}, z^{k+1}) > 0$.

O parâmetro η

Por um lado, se $\eta = 1$ então (2.10) define a *direção de centragem* na qual o passo de Newton é dado em direção à trajetória central. Embora esta direção se afaste dos limites do ortante não-negativo, ela pouco ou nada reduz o valor de τ . Entretanto, ao se mover mais perto de \mathcal{C} estes passos formam uma boa base para um progresso substancial na próxima iteração. Isto porque como a próxima iteração está mais perto da trajetória central, será possível dar um passo relativamente grande sem que se deixe o ortante não-negativo. Por outro lado, se $\eta = 0$ temos a direção afim-escala pura como em (2.6). A maioria dos métodos usa valores intermediários de η no intervalo aberto $(0, 1)$, de modo a tentar alcançar de maneira eficiente o duplo objetivo de reduzir τ e melhorar a centralidade. Esta escolha é dependente do método.

Vamos definir agora uma maneira de escolher τ utilizando a equação (2.9). Considere dado um ponto estritamente factível, isto é, $w^0 \in \mathcal{F}^+$. Então o valor do parâmetro de barreira será

dado por

$$\tau_k = \frac{(x^k)^T z^k}{n}. \quad (2.12)$$

Olhando por este ângulo, τ_k representa a média dos valores dos produtos $x_i^k z_i^k$. Além disso, com o avanço das iterações, o parâmetro de centralização η faz com que o problema perturbado que estamos resolvendo (2.10) se aproxime cada vez mais do problema original (2.5).

Com estes conceitos e ideias em mão, podemos definir um modelo geral para métodos primais-duais, dado no Pseudo-Código 1.

Pseudo-Código 1 Modelo geral para um método primal-dual seguidor de caminho.

Dado: $w^0 \in \mathcal{F}^+$

$k \leftarrow 0$

Repita

Resolva (2.10) para algum $\eta \in (0, 1)$.

Encontre α_k , tamanho de passo factível máximo na direção Δw^k .

Atualize o iterando conforme (2.11).

$k \leftarrow k + 1$

Até O critério de parada ser satisfeito.

2.2.2. Vizinhanças da Trajetória Central

Um método seguidor de caminho segue a trajetória central \mathcal{C} no interior da região factível em direção a uma solução ótima. No entanto manter um iterando exatamente sobre \mathcal{C} é um objetivo muito difícil, senão impossível. Isto porque encontrar um ponto que resolve a condição de complementaridade perturbada (2.7c) para um τ específico é um problema tão difícil quanto resolver o próprio PL.

Assim, já que computacionalmente é pouco eficiente caminhar ao longo de uma direção não-linear, um método seguidor de caminho faz com que os iterandos fiquem em torno de \mathcal{C} . Isto significa restringir os iterandos a uma *vizinhança* da trajetória central e durante o progresso das iterações segui-la até uma solução do PL. Podemos definir vários tipos de vizinhanças, no entanto sempre excluimos os pontos (x, z) que estão muito perto do limite do ortante não-negativo. Com isto direções de busca calculadas de qualquer ponto desta vizinhança progridem, mesmo que minimamente, em direção ao conjunto solução e ao mesmo tempo são obtidas de maneira mais fácil.

As duas vizinhanças de \mathcal{C} mais comuns são $\mathcal{N}_2(\theta)$, que tem como base a norma-2 e é definida por

$$\mathcal{N}_2(\theta) = \{w \in \mathcal{F}^0 : \|XZe - \tau e\|_2 \leq \theta\tau\},$$

em que $\theta \in (0, 1)$, e a vizinhança $\mathcal{N}_{-\infty}(\theta)$, baseada na norma- ∞ , dada por

$$\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma) = \{w \in \mathcal{F}^0 : x_i z_i \geq \gamma \tau, \text{ para todo } i = 1, \dots, n\}, \quad (2.13)$$

para algum $\gamma \in (0, 1)^2$.

A vizinhança $\mathcal{N}_2(\theta)$ é mais restrita e portanto define pontos que estão mais próximos da trajetória central. Portanto certos pontos de \mathcal{F}^0 não pertencem à $\mathcal{N}_2(\theta)$, não importando quanto façamos θ se aproximar de 1. Por outro lado se um ponto pertence à $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$, então cada par $x_i z_i$ deve ser pelo menos um múltiplo γ de seus valores médios τ . Ao manter todos os iterandos nos limites destas vizinhanças, métodos seguidores de caminho reduzem todos os produtos $x_i z_i$ a zero mais ou menos na mesma taxa.

MPI seguidores de caminho são métodos de homotopia continuada [40] similares aos métodos de homotopia para equações não-lineares gerais. Estes definem uma trajetória que deve ser seguida para encontrar a solução. Tradicionalmente, métodos de homotopia mantêm-se em uma vizinhança tubular da trajetória, realizando mudanças incrementais no parâmetro e perseguindo a trajetória homotópica em busca da solução. Para MPI primais-duais, estas vizinhanças são cônicas, ao invés de tubulares, e tendem a ser amplas e relaxadas para valores grandes da medida de dualidade τ , porém se tornam mais estreitas quando $\tau \rightarrow 0$, por conta da positividade exigida de (x, z) .

Direções de busca que se baseiam na vizinhança $\mathcal{N}_2(\theta)$ podem ser utilizadas com $\alpha = 1$, e o parâmetro de barreira decresce pouco em cada iteração, dando lugar aos chamados *métodos de passo-curto*. Esta propriedade impõe e ao mesmo tempo produz os melhores resultados de complexidade existentes para PL: algoritmos de passo curto tem complexidade $\mathcal{O}(\sqrt{n} \log(1/\varepsilon))$. Os métodos de passo curto são os mais simples dos MPI pois fixam $\alpha_k \equiv 1$ e $\eta_k \equiv \eta$ dependente de θ e foram introduzidos por Kojima, Mizuno, e Yoshise [34] e Monteiro e Adler [38]. Como a redução do parâmetro de barreira é muito pequena, estes tipos de métodos são pouco usados na prática.

Métodos baseados na vizinhança $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$ permitem iterandos que seguem a trajetória central de maneira mais relaxada pois obtém-se mais liberdade para manobrar e é possível se aproximar da fronteira da região factível. De fato, para γ pequeno quase todo o conjunto \mathcal{F}^0 está contido em $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$. Por outro lado, direções calculadas a partir de pontos desta vizinhança têm propriedades mais fracas e o teste da razão é necessário para assegurar a positividade de (x, z) . Portanto, métodos que levam em conta a vizinhança larga são menos conservadores que os métodos de passo-curto e podem decrescer o parâmetro de barreira mais rapidamente. São chamados de *métodos de passo-longo* e implementações eficientes de MPI baseiam-se em alguma variação de métodos de passo-longo.

²Tipicamente são usados os seguintes valores para os parâmetros: $\theta = 0.5$ e $\gamma = 10^{-3}$ [49, pg. 9].

Vizinhança Simétrica

A vizinhança $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$, como vimos, produz uma boa base para métodos práticos, pois permite o parâmetro de barreira reduzir rapidamente. Mesmo assim, permite que os iterandos produzam produtos $x_i z_i$ muito diferentes, já que não impõe um limite superior para a complementaridade.

Essa dificuldade, quando ultrapassada, permite resultados muito melhores na prática, já que os pares $x_i z_i$, quando mal escalados, influenciam o mau comportamento do método de Newton.

A razão

$$\varrho(XZe) = \frac{\min(XZe)}{\max(XZe)} \quad (2.14)$$

dá uma medida de proporção entre o maior e o menor par de complementaridade. Claramente, $\varrho(XZe) \in (0, 1)$ e quando o iterando é perfeitamente centrado o temos igual a 1. Uma análise da medida (2.14) pode ser encontrada em [29].

Gondzio [20] e posteriormente Colombo [6], Colombo e Gondzio [7] definiram uma vizinhança que tenta fazer com que em cada iteração tenha-se uma certa *centralidade* dos iterandos. Por centralidade entenda-se a dispersão dos pares $x_i z_i$. Quando a discrepância nos valores dos pares complementares é muito grande, e portanto têm-se pouca centralidade, as direções de busca não são adequadas, não só com valores pequenos mas também com valores grandes de $x_i z_i$. Com efeito, Colombo [6, pp. 26] diz que “a noção de dispersão dos produtos complementares não é adequadamente representada em um ambiente computacional por nenhuma das vizinhanças $\mathcal{N}_{-\infty}$.”

Com o propósito de corrigir estes problemas foi proposta a *vizinhança simétrica* \mathcal{N}_s , na qual os pares complementares não só satisfazem um limite inferior mas também um limite superior e é definida como

$$\mathcal{N}_s(\gamma) = \left\{ w \in \mathcal{F}^0 : \gamma\tau \leq x_i z_i \leq \frac{1}{\gamma}\tau, i = 1, \dots, n \right\}, \quad (2.15)$$

em que $\tau = x^T z / n$ e $\gamma \in (0, 1)$.

A vizinhança simétrica (2.15) pode ser considerada uma extensão de $\mathcal{N}_{-\infty}$. No entanto, ela não deixa que os produtos complementares se tornem muito grandes em relação à média. Além disso, \mathcal{N}_s promove uma diminuição dos pares complementares que são muito grandes, permitindo uma melhor centralidade.

Colombo [6] determinou o valor de n para o qual a vizinhança simétrica impõe um limite superior mais estreito:

$$n > \frac{1 + \gamma}{\gamma}$$

Para um $\gamma = 0.1$, o limite é estreito sempre que $n > 11$.

Além disso, a complexidade do pior caso para um método de passo-longo factível que utiliza a vizinhança simétrica \mathcal{N}_s é $\mathcal{O}(n \ln(1/\varepsilon))$, em que ε é a tolerância para convergência [7]. Isso significa que os limites superiores que diferenciam a vizinhança simétrica de $\mathcal{N}_{-\infty}$ não produzem perdas teóricas, ao mesmo tempo em que, contribuem com a possibilidade de deixar os iterandos mais centrados.

De fato, Zhang e Tapia [53], ao provar a convergência superlinear de um método primal-dual, utilizam uma vizinhança com parâmetros simétricos para melhorar os limites da convergência. No entanto, à época imaginavam que um limite superior, como o dado por $\gamma\tau$, não teria significância prática, previsão não se concretizou [6, 7, 20]

2.2.3. Ponto inicial infactível

Note que até agora, estamos assumindo que o método inicia um ponto estritamente factível $w^0 \in \mathcal{F}^0$. Neste caso, $r_P = r_D = 0$, no lado direito de (2.10), e assim a direção de busca encontrada através desta equação garante que

$$A\Delta x = 0 \quad \text{e} \quad A^T \Delta y + \Delta z = 0. \quad (2.16)$$

Consequentemente a factibilidade de todos os iterandos é garantida, pois para $\alpha = 1$ valem as seguintes igualdades:

$$\begin{aligned} A(x + \Delta x) &= Ax + A\Delta x = b, \\ A^T(y + \Delta y) + (z + \Delta z) &= (A^T y + z) + (A^T \Delta y + \Delta z) = c, \text{ e} \\ \Delta x^T \Delta z &= -\Delta x^T (A^T \Delta y) = -(A\Delta x)^T \Delta y = 0. \end{aligned}$$

Métodos que assumem esta hipótese são os chamados *MPI factíveis*.

Ao avaliar o gap de complementaridade quando tomando um passo de tamanho α na direção $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ obtemos

$$x(\alpha)^T z(\alpha) = x^T z + \alpha (z^T \Delta x + x^T \Delta z + \alpha^2 \Delta x^T \Delta z) = (1 - \alpha(1 - \eta)) x^T z,$$

em que usamos o fato de que $\Delta x^T \Delta z = 0$, $x^T z = n\tau$ e que $z^T \Delta x + x^T \Delta z = -x^T z + n\tau\eta$. Assim, dividindo por n obtemos

$$\tau(\alpha) = x(\alpha)^T z(\alpha)/n = (1 - \alpha(1 - \eta))\tau. \quad (2.17)$$

A equação (2.17) mostra que o progresso na otimização depende dos parâmetros τ e η bem como do tamanho do passo α . Este fato motiva a escolha adequada destes valores de modo a

obter um iterando que progrida em direção ao ótimo de maneira mais rápida.

Nem sempre, porém, obter um ponto inicial factível é uma tarefa trivial. É possível, por exemplo, encontrar um ponto inicial factível reformulando o problema ou utilizando um método do tipo *Big M*, mas estas reformulações podem causar distorções, instabilidades numéricas ou aumento de colunas densas. Além disso, a região factível pode ter o interior vazio, o que torna inválida a teoria apresentada até aqui. Uma abordagem totalmente diferente é baseada na formulação auto-dual [50], mas, nesse caso, para tornar o problema sempre factível, aumenta-se o tamanho do problema, o que de certa forma aumenta o tempo computacional por exigir dois *backsolves* adicionais no cálculo de próximo iterando, devido à introdução de colunas extra.

Métodos Infactíveis

Uma alternativa que permite que essas dificuldades sejam contornadas é utilizar *MPI infactíveis*. Métodos implementados que têm importância prática fazem uso de pontos infactíveis [8, 18, 20]. Em geral, métodos infactíveis exigem apenas que para o ponto inicial tenha-se $w^0 \in \mathcal{Q}^+$, isto é, (x^0, z^0) esteja no ortante positivo. Nesse caso r_P^0 e r_D^0 são não-nulos.

A direção de busca ainda é feita segundo (2.10), e portanto tem-se um passo de Newton em direção ao ponto $(x(\eta\tau), y(\eta\tau), z(\eta\tau)) \in \mathcal{C}$. Pode-se provar que se fosse possível dar um passo completo ($\alpha = 1$), a infactibilidade seria eliminada. No entanto, na prática, o limite da sequência de iterandos é o ponto ótimo e somente quando o ponto atual está em uma vizinhança apropriada deste ótimo é que se dá um passo que zera os resíduos.

Kojima, Megiddo, e Mizuno [35] estabeleceram resultados de convergência para um MPI infactível bem como uma regra para o tamanho do passo que garante a convergência global do método. Isto é obtido ao utilizar-se uma vizinhança similar à $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$ (veja equação (2.13)), dada por

$$\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) = \left\{ w \in \mathcal{Q}^+ : \frac{\|(r_P, r_D)\|}{\tau} \leq \beta \frac{\|(r_P^0, r_D^0)\|}{\tau_0}, x_i z_i \geq \gamma\tau, \forall i = 1, \dots, n \right\}, \quad (2.18)$$

em que $\gamma \in (0, 1)$ e $\beta \geq 1$ são parâmetros, τ_0 é dado por (2.12) e r_P^0, r_D^0 são os resíduos iniciais primais e duais respectivamente.

Embora $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$ não exija a factibilidade em cada iteração, existe um limitante superior para a infactibilidade, que tem como componente principal a medida de complementaridade τ . Assim, ao reduzirmos τ forçamos os resíduos para zero, reduzindo a complementaridade e a infactibilidade na mesma taxa. Com efeito, se $(x(\alpha), y(\alpha), z(\alpha)) = (x, y, z) + \alpha\Delta(x, y, z)$, então

$$r_P(\alpha) = (1 - \alpha)r_P \text{ e } r_D(\alpha) = (1 - \alpha)r_D$$

mostrando que a infactibilidade se reduz linearmente com α . Assim, se $\alpha = 1$, então os resíduos r_P e r_D tornam-se nulos, portanto a factibilidade é restaurada e subsequentemente o método infactível torna-se igual a um método factível, já que todos os próximos iterandos estarão em \mathcal{F}^0 . Kojima et al. [35] provaram a convergência global de um método com passos infactíveis, enquanto Zhang [52] provou a complexidade de $\mathcal{O}(n^2 \ln(1/\varepsilon))$ para um método deste tipo. Para uma explanação completa de métodos infactíveis veja Wright [49, cap. 6].

2.3. Métodos de Pontos Interiores na Prática

2.3.1. Método Preditor-Corretor de Mehrotra

Do ponto de vista prático, a maioria dos códigos de implementação de MPI baseia-se em alguma variação do Método Preditor-Corretor (MPC) devido a Mehrotra [37]. O método de Mehrotra baseia-se no modelo geral para Métodos Seguidores de Caminho, dado no Pseudo-código 1, mas altera a busca de direção puramente Newton com correções que são muito baratas computacionalmente mas que auxiliam a obter uma direção melhor. Além disso, um escolha adaptativa do parâmetro de centragem η é feita em cada iteração. Atualmente, nos códigos mais utilizados, tanto acadêmicos como BPMPD, HOPDM, OOPS, OQPD, PCx, bem como comerciais tais quais Cplex, Mosek and Xpress, algumas heurísticas e ideias de otimização também foram incorporadas, de modo que todos são variantes do MPC.

Este método usa aproximações de ordem maior da trajetória central \mathcal{C} – abordagem começada por Megiddo [36] e mais tarde desenvolvidas por Monteiro, Adler, e Resende [39] – e o uso de pontos infactíveis. Segundo Wright [49, pg 194], “a contribuição de Mehrotra foi combinar estas ideias existentes da maneira certa e adicionar heurísticas engenhosas para escolher o parâmetro de centragem (adaptativamente), o tamanho do passo e o ponto inicial.”

Até aqui o tamanho de passo foi sempre considerado igual tanto para o problema primal, quanto para o problema dual. No entanto, a quase totalidade das implementações do método de Mehrotra usa passos diferentes para as variáveis primais e duais. Esta ideia não tem origem em Mehrotra, mas tem sido usada em quase todos os desenvolvimentos práticos de métodos primais-duais e contribui para reduzir em até 10% no número de iterações, tendo como base de testes o conjunto Netlib [49, pg. 195].

Como se quer que (x, z) permaneça no ortante positivo, emprega-se uma busca linear a fim de encontrar os tamanhos de passo primal α_P e dual α_D tais que $x + \alpha_P \Delta x > 0$ e $z + \alpha_D \Delta z > 0$. Para isso, podemos fazer um teste da razão, isto é,

$$\alpha_P = \alpha_0 \min \left\{ -\frac{x_i}{\Delta x_i} : \Delta x_i < 0 \right\}, \quad \alpha_D = \alpha_0 \min \left\{ -\frac{z_i}{\Delta z_i} : \Delta z_i < 0 \right\} \quad (2.19)$$

em que α_0 é um fator que garante positividade estrita e em geral vale 0,9995. Além disso, embora use-se sempre algum tipo de vizinhança, muitas vezes permite-se que o ponto esteja fora da mesma e por isso, perde-se a propriedade da convergência global em favor da eficiência computacional.

O método de Mehrotra gera a sequência de iterandos infactíveis (x, y, z) , tais que $(x, z) > 0$ e a direção de busca consiste em três componentes:

- (i) Uma *direção preditora*;
- (ii) Um termo de centralização, cujo tamanho é controlado pela escolha de forma adaptativa do parâmetro η ;
- (iii) Uma direção *corretora*.

Para compreendermos melhor o que essas ideias significam, note que no sistema de Newton (2.10), o lado direito pode ser separado da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} b - Ax \\ c - A^T y - z \\ -XZe + \eta\tau e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b - Ax \\ c - A^T y - z \\ -XZe \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \eta\tau e \end{bmatrix}.$$

Assim, a direção preditora $(\Delta x^{\text{af}}, \Delta y^{\text{af}}, \Delta z^{\text{af}})$ é obtida resolvendo-se o sistema de Newton com o lado direito dado por

$$\begin{bmatrix} b - Ax \\ c - A^T y - z \\ -XZe \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_P \\ r_D \\ r_C \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

isto é, $(\Delta x^{\text{af}}, \Delta y^{\text{af}}, \Delta z^{\text{af}})$ corresponde a direção afim-escala dada em (2.6). Como visto, essa direção otimiza fortemente em direção aos pontos para os quais a complementaridade é nula. Entretanto, como o alvo é $XZe = 0$, essas direções podem ser excessivamente influenciadas por pontos que têm complementaridade pequena, mas que não são ótimos

Direção com correção de Segunda Ordem

O MPC de Mehrotra explora uma direção corretora de centralidade de modo a tentar remediar pontos que estão mal centrados. Esta direção caminha para perto da trajetória central e logo reduz o espalhamento dos produtos complementares em relação à média, embora não busque otimalidade.

Uma ferramenta importante para isso foi a avaliação dinâmica do parâmetro de centralização η . Para começar, queremos medir a eficácia da direção afim-escala, e por isso definimos τ_{af}

como sendo a média dos valores hipotéticos para os pares complementares resultantes de um passo na direção afim-escala, dado por

$$\tau_{\text{af}} = \frac{g_{\text{af}}}{n} = \frac{(x + \alpha_P^{\text{af}} \Delta x^{\text{af}})^T (z + \alpha_D^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}})}{n}. \quad (2.21)$$

em que g_{af} é o gap de complementaridade previsto para a direção afim-escala. Note que $\tau_{\text{af}}/\tau \in (0,1)$. Se $\tau_{\text{af}} \ll \tau$ então a direção afim-escala é boa e permite uma significativa redução do gap de complementaridade. Por outro lado, se a razão τ_{af}/τ é próxima de 1, então pouco progresso está sendo feito na direção $(\Delta x^{\text{af}}, \Delta y^{\text{af}}, \Delta z^{\text{af}})$ e um parâmetro η perto de 1 é recomendado. Essa escolha faz com que ocorra uma forte centralização, isto é, move-se para mais perto de \mathcal{C} , e logo, na próxima iteração, o método está melhor posicionado para reduzir o gap de complementaridade.

Mehrotra [37] utiliza a seguinte heurística na escolha do parâmetro de centralização foi usada:

$$\eta = \left(\frac{\tau_{\text{af}}}{\tau} \right)^3 \quad (2.22)$$

Essa escolha sugere um parâmetro de barreira dado por

$$\tau = \left(\frac{g_{\text{af}}}{x^T z} \right)^2 \tau_{\text{af}} = \left(\frac{g_{\text{af}}}{x^T z} \right)^3 \frac{x^T z}{n}. \quad (2.23)$$

Assim, se o passo preditor progride bem, η é escolhido pequeno e têm-se pouca centralização. Caso contrário, η é escolhido próximo a alcança-se uma forte centralização. Mais geralmente, o parâmetro de centralização pode ser escolhido como

$$\eta = \left(\frac{\tau_{\text{af}}}{\tau} \right)^p = \left(\frac{g_{\text{af}}}{x^T z} \right)^p.$$

Além disso, Mehrotra [37] estudou o efeito de diferentes valores de $p = 1, 2, 3, 4$ em um subconjunto de problemas da `Netlib` e conclui que não havia muita diferença para p entre 2 e 4.

Para calcular a direção centralizadora, bastaria resolver o sistema de Newton com lado direito dado por $(0, 0, \eta \tau e)$. No entanto, será mais eficiente calcular esse termo em conjunto com a direção corretora.

A direção afim-escala corresponde à aproximação linear da trajetória que liga o ponto atual ao conjunto ótimo. Esta linearização produz um erro que pode ser determinado. De fato, assumindo que daremos um passo completo na direção afim-escala, temos que o vetor dos pares complementares é dado por

$$\hat{x}\hat{z} = (x + \Delta x^{\text{af}})(z + \Delta z^{\text{af}}) = xz + x\Delta z^{\text{af}} + z\Delta x^{\text{af}} + \Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}} = \Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}}$$

já que ao usarmos o lado direito (2.20) para resolver o sistema de Newton, temos que $x\Delta z^{\text{af}} + z\Delta x^{\text{af}} = -xz$. Isso significa que, quando um passo completo é dado, os produtos $\hat{x}_i\hat{z}_i$ se transformam em $\Delta x_i^{\text{af}}\Delta z_i^{\text{af}}$, ao invés de se anularem como era esperado. Este é exatamente o erro da aproximação linear e um passo corretor $(\Delta x^c, \Delta y^c, \Delta z^c)$ é dado para tentar compensá-lo.

Pode-se ainda ver que, idealmente, deseja-se que o próximo ponto satisfaça

$$(x + \Delta x)(z + \Delta z) = \eta\tau e,$$

o que é equivalente a resolver o sistema não linear

$$z\Delta x + x\Delta z = -xz + \eta\tau e - \Delta x\Delta z.$$

Comparando esta equação com (2.10), vê-se que na direção afim-escala falta exatamente o termo $\Delta x\Delta z$. Para corrigir isso, o sistema de Newton é resolvido com o seguinte lado direito

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}} + \eta\tau e \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

encontrando a direção $(\Delta x^c, \Delta y^c, \Delta z^c)$. Note que tal direção combina a centralização e o termo de segunda ordem que é o erro da linearização.

Uma vez que as direções preditora e corretora foram calculadas, elas são simplesmente adicionadas de maneira a ter a direção desejada:

$$(\Delta w, \Delta y, \Delta z) = (\Delta x^{\text{af}}, \Delta y^{\text{af}}, \Delta z^{\text{af}}) + (\Delta x^c, \Delta y^c, \Delta z^c), \quad (2.25)$$

e o próximo iterando será dado por

$$(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) = (x^k, y^k, z^k) + (\alpha_P \Delta x, \alpha_D \Delta y, \alpha_D \Delta z), \quad (2.26)$$

em que α_P e α_D são os tamanhos de passo primal e dual dado por (2.19).

Resumimos o método preditor-corretor de Mehrotra no Pseudo-Código 2.

A principal vantagem do MPC é que, na prática, ele produz tamanho de passos maiores antes de violar as restrições de não-negatividade. Isso normalmente significa que se está economizando número de iterações: de fato Mehrotra relata que temos economia da ordem de 35%-50% quando comparada com outras estratégias [37]. Nesse caso, o custo é apenas de um *backsolve* a mais, já que a matriz do sistema de Newton é sempre a mesma. Assim, se o custo da fatoração é elevado, economia nos custos computacionais também é alcançada por essa

Pseudo-Código 2 Método preditor-corretor de Mehrotra.

Dado: (x^0, y^0, z^0) inicial tal que $(x^0, z^0) > 0$ **Repita**

Resolva o sistema de Newton com o lado direito dado por (2.20).

Encontre tamanho de passo α_P^{af} e α_D^{af} para a direção afim-escalaEncontre τ , dado por (2.23) e calcule η de acordo com (2.22).

Resolva o sistema de Newton com o lado direito dado por (2.24).

Encontre tamanhos de passos α_P e α_D tais que possa se dar um passo factível na direção

$$(\Delta x^{\text{af}}, \Delta y^{\text{af}}, \Delta z^{\text{af}}) + (\Delta x^c, \Delta y^c, \Delta z^c)$$

Atualize o iterando conforme (2.26).

 $k \leftarrow k + 1$ **Até** O critério de parada ser satisfeito.

técnica. De fato, o método de Mehrotra é vantajoso em relação a todas as implementações para programação linear que usam métodos diretos para calcular as direções de Newton [6, pg. 40].

2.3.2. Método das múltiplas correções de centralização

O método de Mehrotra é baseado na hipótese de que um passo completo na direção corretora ocorre, o que raramente é possível. Mais que isso, tentar corrigir a complementaridade fazendo todos os seus produtos iguais ao valor τ é um pedido muito forte e algumas vezes pouco eficaz. É possível tentar remediar estes problemas através de uma extensão do MPC que utiliza mais correções lineares de uma forma inteligente.

O *método das múltiplas correções* deve-se a Gondzio [20] e é uma tentativa de melhorar a centralização do iterando atual. Esta abordagem busca produzir produtos $x_i z_i$ mais homogêneos e forçar um aumento do tamanho do passo corrigindo o parâmetro de centralização de Mehrotra.

Implicitamente Gondzio [20] utiliza a Vizinhança Simétrica dada em (2.15), de modo a ter produtos perto o suficiente da trajetória central. Nesta descrição o passo será dado na direção

$$\Delta w = \Delta w^{\text{m}} + \Delta w^{\text{g}}$$

em que Δw^{m} é a direção de Mehrotra (2.25), à qual uma ou mais correções Δw^{g} podem ser aplicadas. Outras escolhas da direção preditora Δw^{m} podem ser feitas [7].

Dada a direção preditora-corretora Δw^{m} , seja

$$\tilde{\alpha}_P = \min(\alpha_P + \delta, 1) \quad \text{e} \quad \tilde{\alpha}_D = \min(\alpha_D + \delta, 1)$$

para algum $\delta \in (0, 1)$ fixo, entendido como uma quantidade desejável de aumento do passo. Calcula-se o ponto de tentativa

$$\tilde{x} = x + \tilde{\alpha}_P \Delta x^m, \quad \tilde{z} = z + \tilde{\alpha}_D \Delta z^m$$

e os respectivos produtos complementares $\tilde{t} = \tilde{X} \tilde{Z} e \in \mathbb{R}^n$. Note que por aumentar o tamanho do passo, o ponto de tentativa é inactivo (exterior) mas em compensação é utilizado apenas para buscar corrigir a centralização, logo não é necessário preocupar-se com este fato.

Obviamente os produtos \tilde{t} dificilmente serão iguais a τ como desejaríamos. Alguns componentes são bem menores que τ – inclusive podendo ser negativos – e outros muito maiores. Impondo que $\tilde{t} \in \mathcal{N}_s(\gamma)$, colocamos limites superiores e inferiores para cada par complementar, também checamos as componentes que não satisfazem a vizinhança simétrica.

De fato, o que faremos é mover produtos pequenos ($\tilde{t}_i \leq \gamma\tau$) para o limite inferior $\gamma\tau$ e produtos grandes ($\tilde{t}_i \geq \gamma^{-1}\tau$) para o limite superior $\gamma^{-1}\tau$. Os produtos que estiverem na vizinhança simétrica já satisfazem estes limites e portanto estão razoavelmente pouco dispersos em relação à média. Na prática estamos movendo os iterandos para dentro de $\mathcal{N}_s(\gamma)$.

Nesse caso, o termo Δw^g será encontrado resolvendo o sistema de Newton com o lado direito dado por

$$r = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \xi \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

em que o alvo ξ é definido como

$$\xi_i = \begin{cases} \gamma\tau - \tilde{t}_i, & \text{se } \tilde{t}_i \leq \gamma\tau, \\ \frac{1}{\gamma}\tau - \tilde{t}_i, & \text{se } \tilde{t}_i \geq \gamma^{-1}\tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Ressalte-se que o ponto que estamos buscando não pertence à trajetória central mas à vizinhança simétrica e que nem todos os produtos complementares sofrem correção. Assim, o alvo dado por (2.27) é realmente alcançado.

Dada uma nova direção, poderemos repetir o processo de atualizá-la tantas vezes quantas forem convenientes. Basta fazer-se $\Delta^m \leftarrow \Delta$ e procurar novamente a direção Δ^g . No entanto, o número máximo de correções de centralização permitida depende do problema. Tal número é obtido em [20] de modo heurístico. Note que a direção corretora obtida é aceita contanto que o tamanho do passo tenha aumentado de uma fração desejada.

Em códigos como o PCx [8], o número máximo de correções é calculado considerando-se o esforço relativo entre o número de operações necessárias para calcular a decomposição da

matriz resultante do sistema de Newton e o número de operações necessárias para fazer o *backsolve*. Além disso estima-se a redução do número de iterações. Em [20] o custo da fatoração não foi considerado.

As experiências computacionais apresentadas em [20] mostram que a estratégia das múltiplas correções realmente é efetiva, pois os passos primais e duais calculados para a direção composta são maiores que aqueles correspondentes à direção preditora. Isso resulta em uma redução do número de iterações. O custo de cada correção neste caso é o mesmo, ao contrário de outros métodos cujo custo aumenta a cada correção. Praticamente todos os códigos modernos utilizam-se desta estratégia [49, Apêndice B]. Uma generalização desta pode ser encontrada em [7], no qual a direção de busca é dada por $\Delta w = \Delta w^m + \omega \Delta w^g$ em que usa-se parâmetro de peso $\omega \in (0, 1]$. Este peso é encontrado através de uma busca linear tal que a solução \hat{w} maximiza o tamanho de passo α .

2.3.3. Ponto Inicial

Como dissemos, códigos práticos que resolvem PL através de MPI utilizam passos infactíveis, exigindo apenas que $(x, z) > 0$. Nada obstante, encontrar tal ponto seja tarefa mais fácil que encontrar um ponto inicial factível, obviamente deseja-se que a escolha seja feita de forma a acelerar a convergência do método.

A escolha de um iterando inicial com boas propriedades é crítica e é uma tarefa difícil tanto para métodos factíveis quanto infactíveis. Pedese que o ponto possua boas propriedades nas seguintes características: centralidade do ponto e magnitude das infactibilidades.

Mehrotra [37] introduziu uma heurística para encontrar um ponto inicial que satisfaça essas hipóteses. Nesta, resolve-se os seguintes problemas de Quadrados Mínimos

$$\begin{aligned} \min x^T x \quad & \text{s.a.} \quad Ax = b \\ \min_{(y,z)} z^T z \quad & \text{s.a.} \quad A^T y + z = c \end{aligned}$$

que tentam encontrar um ponto $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$ que satisfaça as restrições primais e duais. As soluções para estes problemas são dada por

$$\tilde{x} = A^T(AA^T)^{-1}b, \quad \tilde{y} = (AA^T)^{-1}Ac \quad \text{e} \quad \tilde{z} = c - A^T\tilde{y}.$$

Tal ponto é então transladado para o ortante positivo e o ponto inicial é dado por

$$(x^0, y^0, z^0) = (\tilde{x} + \vartheta_x e, \tilde{y} + \vartheta_y e, \tilde{z} + \vartheta_z e),$$

em que ϑ_x , ϑ_y e ϑ_z são escalares positivos tais que $(x^0, z^0) > 0$.

Essa estratégia de Mehrotra tem algumas questões a serem consideradas. Ela depende do escalamento da matriz, é afetada pela presença de restrições redundantes que porventura tenham escapado do pré-processamento, e não garante que o ponto inicial seja bem centrado. Mesmo assim, é uma estratégia comum em códigos de pontos interiores por ser considerada uma heurística muito boa para determinar o ponto inicial, além de ter custo computacional equivalente ao de uma iteração de um MPI.

Gertz e Wright [18], em seu *solver* OOQP, propõem uma heurística que se baseia nos mesmos princípios – que o ponto inicial seja ao mesmo tempo “bem centrado” e “não muito infactível” – agora para usar um MPI no contexto de Programação Quadrática. Descreveremos a seguir essa heurística, no contexto de PL.

Primeiramente calcula-se a *norma dos dados*, que é definida como a raiz quadrada da magnitude do maior elemento dos dados do problema, isto é, o maior elemento em valor absoluto entre a matriz A e os vetores c e b . Após isso, faz-se x e z iguais a essa norma dos dados e y igual a zero e a partir desse ponto, resolve-se o sistema de Newton (2.6) e dá-se um passo completo na direção afim-escala, encontrando-se o ponto $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$. Certamente esse procedimento resulta em um ponto infactível. Proceda-se então de forma similar à heurística de Mehrotra, isto é, translada-se $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$ para o ortante positivo. Para tal, calcula-se valor o máximo da violação dos limites das variáveis, digamos

$$\vartheta = \max_{i \in I_V} \{-x_i, -z_i, 0\},$$

em que I_V é o conjunto de índices de x e z que violaram a não-negatividade e translada-se o ponto com o valor

$$\tilde{\vartheta} = 100 + 2\vartheta,$$

tal que o ponto inicial seja interior o suficiente. Com efeito, o ponto inicial será

$$(x^0, y^0, z^0) = (\tilde{x} + \tilde{\vartheta}e, \tilde{y}, \tilde{z} + \tilde{\vartheta}e).$$

Note-se que tal ponto, assim como o ponto de Mehrotra, também tem custo computacional de uma iteração de MPI.

As estratégias expostas acima podem ser compreendidas como uma tentativa de encontrar um ponto inicial que esteja perto o suficiente da trajetória central, mas com produtos complementares $x_i z_i$ maiores que uma fração adequada de τ , e que a razão

$$\frac{\|(r_P, r_D)\|}{\tau}$$

não seja muito grande.

Aliás, note-se que se está utilizando a *métrica* dada pela vizinhança $\mathcal{N}(\gamma, \beta)$ definida em (2.18). Com isso, essas heurísticas têm como objetivo impedir que o tamanho do passo α seja muito pequeno, ao mesmo tempo que tendem a limitar o valor de $\|(r_P^k, r_D^k)\| / \tau_k$. Além disso, ao utilizarmos $\mathcal{N}(\gamma, \beta)$, deseja-se que a infactibilidade seja levada a zero na mesma taxa que o *gap* de dualidade. Para uma análise aprofundada de estratégias de pontos iniciais em MPI veja [12, 19].

2.3.4. Critério de Parada

Os MPI, ao contrário do simplex, por exemplo, encontram a solução apenas assintoticamente. Por conta do parâmetro de barreira τ , ele nunca encontra a solução exata do problema de PL. Com isso, é necessário um critério de parada que possa decidir quando o iterando atual está próximo o suficiente do conjunto solução.

Códigos práticos de pontos-interiores, geralmente geram uma sequência de pontos estritamente factíveis $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ para os quais x^k e z^k são ambos estritamente positivos. Nenhum desses iterandos pode ser uma solução de fato do PL já que para estes, $x_i^k z_i^k > 0$, para $k = 0, 1, 2, \dots$, o que viola a condição de complementaridade (2.3d). Com efeito, os iterandos convergem para um conjunto de soluções sem de fato alcançá-lo, e para efeitos práticos um iterando avançado $((x^k, y^k, z^k)$ para k suficientemente grande) serve muito bem como uma solução aproximada. Para outras aplicações e para propósitos teóricos, uma solução de fato $(x^*, y^*, z^*) \in \mathcal{F}$ pode ser necessária. Para tanto, nesses códigos, há uma fase de *terminação finita*, a qual toma um iterando interior suficientemente avançado para um ponto em \mathcal{F} , encontrando, se for o caso, a base ótima. É necessário também saber quão avançado o iterando precisa ser, tal que garanta-se que o número de iterações de ponto-interior não seja muito grande (veja [49, Cap. 7]).

A maioria das implementações de pontos interiores, por estar trabalhando com precisão finita, garante apenas um certo grau de exatidão. Tipicamente a maioria dos códigos utiliza os seguintes critérios [22]:

$$\frac{\|Ax - b\|}{1 + \|x\|_\infty} \leq 10^{-\beta}, \quad (2.28a)$$

$$\frac{\|A^T y + z - c\|}{1 + \|z\|_\infty} \leq 10^{-\beta}, \quad (2.28b)$$

$$\frac{|c^T x - b^T y|}{1 + |b^T y|} \leq 10^{-\nu}. \quad (2.28c)$$

Os valores de $\beta, \nu \in \mathbb{N}$ dependem da precisão desejada. Comumente na literatura escolhe-se $\beta = \nu = 8$.

Os critérios (2.28a) e (2.28b) exigem que os resíduos primais e duais sejam menores ou iguais

a uma tolerância. Assim estaríamos, ainda que assintoticamente, com pontos factíveis. O critério (2.28c) faz uso do Lema 2.2 (Dualidade Forte para PL) e é indicador de otimalidade. Os denominadores em cada critério são construídos de modo a permitirem avaliar relativamente tanto viabilidades primal e dual quanto otimalidade.

Um outro conjunto de critérios muito parecido com (2.28) e que é utilizado no PCx [8] é

$$\frac{\|Ax - b\|}{1 + \|b\|} \leq 10^{-8}, \quad (2.29a)$$

$$\frac{\|A^T y + z - c\|}{1 + \|c\|} \leq 10^{-8}, \quad (2.29b)$$

$$\frac{\tau}{1 + |c^T x|} \leq 10^{-8}. \quad (2.29c)$$

Note que agora, em contraste com (2.28), os denominadores de (2.29a) e (2.29b) são fixos, o que de certa maneira diminui a quantidade de operações, já que não é mais necessário encontrar a norma (ainda que norma- ∞) dos vetores x e y em cada iteração. O valor de τ , é usado em (2.29c) ao invés do gap dual como em (2.28c), pois no ponto ótimo, gap dual e gap de complementaridade são iguais e já que τ está calculado, temos mais uma vez uma economia de operações.

Todas estas ideias representam o estado da arte no que diz respeito a MPI para problemas de PL. Servirão como estrutura e base para os desenvolvimentos que faremos neste trabalho.

Capítulo 3.

Uma função de mérito polinomial em MPI

3.1. Um KKT escalado

Este trabalho tem por objetivo propor um método para resolver o problema PL. Para isso considere o par primal-dual na sua forma padrão, i.e.,

$$\begin{array}{ll} \underset{x}{\text{minimizar}} & c^T x \\ \text{sujeito a} & \begin{cases} Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases} \end{array} \quad (\text{P})$$

e

$$\begin{array}{ll} \underset{(y,z)}{\text{maximizar}} & b^T y \\ \text{sujeito a} & \begin{cases} A^T y + z = c \\ z \geq 0, y \text{ livre} \end{cases} \end{array} \quad (\text{D})$$

conforme as equações (P) e (D).

Como visto no capítulo 2, as condições KKT para este problema são

$$\begin{cases} Ax = b, & (3.1a) \\ A^T y + z = c, & (3.1b) \\ XZe = 0, & (3.1c) \\ (x, z) \geq 0. & (3.1d) \end{cases}$$

Dado qualquer $w = (x, y, z)$, os vetores dos resíduos de (3.1), r_P, r_D e r_C , podem ser

definidos como

$$r_P = Ax - b, \quad (3.2a)$$

$$r_D = A^T y + z - c, \quad (3.2b)$$

$$r_C = XZe. \quad (3.2c)$$

Como o pressuposto $\mathcal{P}1$ é assumido como verdadeiro, seja (x^0, y^0, z^0) um ponto inicial que pertença à \mathcal{F}^+ . Então

$$\begin{aligned} r_P^0 &= Ax^0 - b, \\ r_D^0 &= A^T y^0 + z^0 - c, \\ r_C^0 &= X^0 Z^0 e > 0. \end{aligned}$$

No método proposto, precisa-se garantir que ambos r_P^0 e r_D^0 sejam não-negativos – os motivos para isso ficarão mais claros abaixo. Para esse fim, sejam H_P e H_D matrizes diagonais tais que cada entrada de suas diagonais é formada segundo as seguintes regras:

$$(H_P)_i = \begin{cases} 1, & \text{if } (r_P^0)_i \geq 0 \\ -1, & \text{if } (r_P^0)_i < 0 \end{cases}, \quad (3.3a)$$

para $i = 1, \dots, m$, e

$$(H_D)_j = \begin{cases} 1, & \text{if } (r_D^0)_j \geq 0 \\ -1, & \text{if } (r_D^0)_j < 0 \end{cases}, \quad (3.3b)$$

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

Consequentemente,

$$H_P r_P^0 \geq 0 \text{ e } H_D r_D^0 \geq 0$$

Mais que isso, como H_D e H_P são matrizes de posto completo, o conjunto solução de (3.1) e do sistema

$$\begin{cases} H_P(Ax - b) = 0, & (3.4a) \\ H_D(A^T y + z - c) = 0, & (3.4b) \\ XZe = 0, & (3.4c) \\ (x, z) \geq 0, & (3.4d) \end{cases}$$

é o mesmo. De fato, note que apenas se está multiplicando cada linha do sistema KKT original por um escalar.

A otimalidade do sistema (3.1) – bem como de (3.4) – é alcançada quando todos os resíduos são nulos, ou melhor dizendo, sempre que esses resíduos forem menores ou iguais a uma tolerância pré-estabelecida. Assim propõe-se um método para resolver o sistema KKT escalado que resolva aproximadamente, em cada iteração, para $(x, y, z) \in \mathcal{F}^+$ e algum $\mu > 0$ o sistema

$$\begin{cases} H_P(Ax - b) = 0, & (3.5a) \\ H_D(A^T y + z - c) = 0, & (3.5b) \\ XZe = \mu e, & (3.5c) \\ (x, z) > 0. & (3.5d) \end{cases}$$

3.2. Direções de busca

3.2.1. Direção Afim-escala

Como consequência da Seção 2.1.1, a direção afim-escala Δw^{af} , que resolve aproximadamente o sistema (3.1) é encontrada através na solução do sistema não linear

$$\begin{cases} A\Delta x^{\text{af}} + r_P = 0 & (3.6a) \\ A^T \Delta y^{\text{af}} + \Delta z^{\text{af}} + r_D = 0 & (3.6b) \\ Z\Delta x^{\text{af}} + X\Delta z^{\text{af}} + r_C = 0 & (3.6c) \end{cases}$$

Por meio da equação (3.6c) pode-se encontrar Δz^{af} como

$$\Delta z^{\text{af}} = -X^{-1}(Z\Delta x^{\text{af}} + r_C). \quad (3.7)$$

Se esta equação for usada e além disso Δz^{af} for substituído na equação (3.6b) obtém-se o sistema:

$$\begin{cases} A\Delta x^{\text{af}} + r_P = 0 \\ A^T \Delta y^{\text{af}} - X^{-1}Z\Delta x^{\text{af}} - X^{-1}r_C + r_D = 0 \end{cases}$$

Este sistema é chamado *Sistema Aumentado* e tem sua forma matricial dada por

$$\begin{bmatrix} -D^{-1} & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x^{\text{af}} \\ \Delta y^{\text{af}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r_D + X^{-1}r_C \\ -r_P \end{bmatrix}$$

em que $D = XZ^{-1}$ é não-singular pois $(x, z) > 0$. Mais que isso, Δx^{af} pode ser encontrado

como

$$\begin{aligned}
 \Delta x^{\text{af}} &= -D \left(-r_D + X^{-1}r_C - A^T \Delta y^{\text{af}} \right) \\
 &= D \left(r_D - X^{-1}r_C + A^T \Delta y^{\text{af}} \right) \\
 &= D \left(A^T \Delta y^{\text{af}} - t \right), \tag{3.8}
 \end{aligned}$$

em que

$$\begin{aligned}
 t &= X^{-1}r_C - r_D \\
 &= X^{-1}XZe - A^T y - z + c \\
 &= z - A^T y - z + c \\
 &= -(A^T y - c).
 \end{aligned}$$

Usando a fórmula para Δx^{af} , encontra-se Δy^{af} e neste caso a equação (3.6c) torna-se $AD(A^T \Delta y^{\text{af}} - t) + r_P = 0$ e logo

$$\Delta y^{\text{af}} = B(ADt - r_P), \tag{3.9}$$

em que

$$B = (ADA^T)^{-1} \tag{3.10}$$

e portanto B^{-1} é sempre simétrica definida positiva. Consequentemente, para encontrar Δw^{af} usa-se uma fatoração de Cholesky de B^{-1} e um *backsolve*.

3.2.2. A direção ideal

O método proposto aqui seguirá a estrutura dos métodos preditores-corretores (vide seção 2.2). Suponha que dados o ponto $w = (x, y, z)$ e um parâmetro $\mu > 0$, seja possível encontrar a solução do sistema

$$\begin{cases} A\hat{x} - b = 0 \\ A^T \hat{y} + \hat{z} - c = 0 \\ \hat{X}\hat{Z}e = \mu e \end{cases} \quad . \tag{3.11}$$

através de um único passo *ideal* $\Delta w = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, tal que

$$\hat{w} = w + \Delta w.$$

A estratégia adotada aqui para encontrar esse passo ideal é escrever $\Delta w = \Delta w^{\text{af}} + \Delta w^c$, em que Δw^{af} é a direção afim-escala e Δw^c é a direção corretora *ideal*.

Procedendo com as substituições, na parte linear de (3.11), tem-se

$$A(x + \Delta x) - b = A(x + \Delta x^{\text{af}} + \Delta x^c) - b = \underbrace{(Ax - b) + A\Delta x^{\text{af}}}_{=0 \text{ por (3.6a)}} + A\Delta x^c = A\Delta x^c$$

e

$$\begin{aligned} A^T(y + \Delta y) + (z + \Delta z) - c &= A^T(y + \Delta y^{\text{af}} + \Delta y^c) + (z + \Delta z^{\text{af}} + \Delta z^c) - c \\ &= \underbrace{A^T y + z - c + A^T \Delta y^{\text{af}} + \Delta z^{\text{af}}}_{=0 \text{ por (3.6b)}} + A^T \Delta y^c + \Delta z^c \\ &= A^T \Delta y^c + \Delta z^c. \end{aligned}$$

Por outro lado, para a parte da complementaridade de (3.11), tem-se que

$$\begin{aligned} \hat{x}\hat{z} &= (x + \Delta x)(z + \Delta z) = xz + x\Delta z + z\Delta x + \Delta x\Delta z \\ &= \underbrace{xz + x\Delta z^{\text{af}} + z\Delta x^{\text{af}}}_{=0 \text{ por (3.6c)}} + z\Delta x^c + x\Delta z^c + (\Delta x^{\text{af}} + \Delta x^c)(\Delta z^{\text{af}} + \Delta z^c) \\ &= x\Delta z^c + z\Delta x^c + \Delta x^c\Delta z^c + \Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}} + \Delta x^{\text{af}}\Delta z^c + \Delta z^{\text{af}}\Delta x^c \\ &= x\Delta z^c + z\Delta x^c + \Delta x\Delta z \end{aligned}$$

Usando tais simplificações, obtém-se o seguinte sistema não linear

$$\begin{cases} A\Delta x^c = 0 \\ A^T \Delta y^c + \Delta z^c = 0 \\ X\Delta z^c + Z\Delta x^c + \Delta X\Delta z = \mu e \end{cases} \quad (3.12)$$

O vetor $\Delta X\Delta z$ corresponde a uma correção de segunda ordem, nos moldes dos trabalhos de Gondzio [20], Mehrotra [37].

A proposta deste trabalho é utilizar uma forma de generalização das correções de ordem superior usadas por esses autores. Essa generalização será feita supondo-se que para algum escalar $\sigma \in [0, \zeta]$, $\zeta > 0$, a aproximação

$$\Delta X\Delta z \approx \sigma \Delta X^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}} \quad (3.13)$$

seja aceitável.

Em particular note que se $\sigma = 1$ e $\mu = \tau_{\text{af}}^3/\tau$ – em que τ_{af} é dado na equação (2.21) e $\tau = x^T z/n$ – tem-se o método de Mehrotra [37]. Por outro lado, para Gondzio [20], μ é escolhido como no método de Mehrotra e $\Delta X\Delta z$ é várias vezes aproximado por direções que

projetem, componente a componente, a complementaridade na vizinhança $N_s(\gamma)$. De fato, a escolha do valor μ e a utilização de correções de ordem superior definem os diferentes tipos de MPI que têm sido utilizados atualmente [49].

3.2.3. Combinando direções

Alguns autores como Colombo e Gondzio [7] e também Jarre e Wechs [30] combinam direções de correção utilizando pesos para essas direções. Os primeiros generalizam e estendem o trabalho de Gondzio [20], fazendo com que a combinação das correções múltiplas tenham um peso, que é escolhido fazendo-se uma busca linear. Já os segundos propõe um subproblema linear que é resolvido a cada iteração e cuja solução determina os pesos que as direções de correções de ordem superior terão na direção final.

Já Villas-Bôas e Perin [48], também no contexto primal-dual, estudam algumas vantagens de adiar a escolha do parâmetro de barreira e do tamanho do passo. Estes autores mostram que o próximo iterando pode ser expressado como uma função quadrática do parâmetro de barreira, bem como que tal parametrização é útil para garantir tanto a não negatividade do próximo iterando quanto a proximidade destes da trajetória central.

Uma das principais contribuições deste trabalho, através da extensão das ideias de Villas-Bôas e Perin [48], é a escolha do valor de μ – que aqui faz as vezes de parâmetro de barreira – e de σ sendo feita de maneira adiada, e por isso tais parâmetros, bem como o tamanho do passo α , estão sendo tratados como *variáveis*. Para a escolha desses parâmetros, far-se-á uso de uma função de mérito, a qual será descrita abaixo.

Antes disso, note que a aproximação dada em (3.13) transforma o sistema não linear (3.12) no sistema linear

$$\begin{cases} A\Delta x^c = 0 \\ A^T \Delta y^c + \Delta z^c = 0 \\ X\Delta z^c + Z\Delta x^c = \mu e - \sigma \Delta X^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}} \end{cases}.$$

Expressando tal sistema na forma matricial tem-se

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z & 0 & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x^c \\ \Delta y^c \\ \Delta z^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu e - \sigma \Delta X^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}} \end{bmatrix}. \quad (3.14)$$

Note que as matrizes do lado esquerdo das equações em (3.6) e (3.14) são as mesmas. Com isso podemos resolver (3.14) utilizando a mesma fatoração de Cholesky de B^{-1} – veja Equação (3.10).

De fato, o lado direito de (3.14) pode ser reescrito como

$$\mu \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ e \end{bmatrix} + \sigma \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\Delta X^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}} \end{bmatrix}. \quad (3.15)$$

Portanto, para (μ, σ) qualquer – ainda não escolhidos –, é possível encontrar Δw^c como

$$\Delta w^c = \mu \Delta w^\mu + \sigma \Delta w^\sigma, \quad (3.16)$$

resolvendo portanto dois sistemas lineares similares ao da seção 3.2.1. Com efeito, encontra-se Δw^μ e Δw^σ usando a mesma abordagem da referida seção, i.e., resolvendo os sistemas $\nabla F(w) \Delta w^\mu = (0, 0, e)$ e $\nabla F(w) \Delta w^\sigma = (0, 0, -\Delta X^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}})$. Explicitamente, tem-se

$$\begin{aligned} \Delta y^\mu &= B(ADt^\mu) & \Delta y^\sigma &= B(ADt^\sigma) \\ \Delta x^\mu &= D(A^T \Delta y^\mu - t^\mu) & \Delta x^\sigma &= D(A^T \Delta y^\sigma - t^\sigma) \\ \Delta z^\mu &= -X^{-1}(Z \Delta x^\mu - e) & \Delta z^\sigma &= -X^{-1}(Z \Delta x^\sigma + \Delta X^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}}) \end{aligned}, \quad (3.17)$$

em que

$$t^\mu = -X^{-1}e \quad \text{and} \quad t^\sigma = X^{-1} \Delta X^{\text{af}} \Delta z^{\text{af}}.$$

Desta forma, o esforço computacional por iteração do método proposto consiste em uma fatoração de Cholesky da matriz B^{-1} e três *backsolves*.

Define-se o próximo ponto, para cada uma das variáveis, como sendo

$$\hat{w} = w + \alpha(\Delta w^{\text{af}} + \Delta w^c),$$

ou ainda expandindo para cada variável bem como separando as direções como

$$\hat{x} = x + \alpha(\Delta x^{\text{af}} + \mu \Delta x^\mu + \sigma \Delta x^\sigma) \quad (3.18a)$$

$$\hat{y} = y + \alpha(\Delta y^{\text{af}} + \mu \Delta y^\mu + \sigma \Delta y^\sigma) \quad (3.18b)$$

$$\hat{z} = z + \alpha(\Delta z^{\text{af}} + \mu \Delta z^\mu + \sigma \Delta z^\sigma) \quad (3.18c)$$

Até o presente momento, a tripla (α, μ, σ) , em que α é o tamanho do passo ainda não foi escolhida. Para construir a função de mérito dada acima, a abordagem proposta neste trabalho é tratar algebricamente (α, μ, σ) como uma tripla de variáveis reais, utilizar no máximo três *backsolves* para escolhe-las e finalmente usar a combinação linear das direções Δw^{af} , Δw^μ e Δw^σ , porém usando a tripla (α, μ, σ) para determinar as constantes – ou pesos – de tal

combinação.

A função de mérito que será proposta mais abaixo, será formada a partir dos resíduos do sistema KKT escalado (3.4). Para tanto, a seção a seguir mostrará que é possível prever, a depender de uma escolha de (α, μ, σ) , o próximo resíduo deste sistema.

3.3. O próximo resíduo

Definição 3.1. Definimos ρ , *vetor de resíduos do sistema KKT escalado* (3.4) para um ponto (x, y, z) como

$$\rho(x, y, z) = \begin{cases} \rho_P(x, y, z) = H_P(Ax - b) \\ \rho_D(x, y, z) = H_D(A^T y + z - c) \\ \rho_C(x, y, z) = XZe \end{cases} \quad (3.19)$$

Além disso, seja $\rho_L = (\rho_P, \rho_D)^T \in \mathbb{R}^{m+n}$ o *vetor dos resíduos da parte linear* do sistema KKT escalado. Definimos o *vetor dos resíduos na iteração k* como ρ^k . Por construção $\rho^0 > 0$ para (x^0, y^0, z^0) . Pode-se denotar o *vetor (preditivo) dos resíduos para a próxima iteração $k + 1$* como

$$\rho^{k+1} \rho(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}).$$

Observação 3.2. De acordo com o contexto pode-se representar o resíduo preditivo ρ^{k+1} como $\hat{\rho}$ ou ainda $\hat{\rho}(\alpha, \mu, \sigma)$ já que, como veremos no Teorema 3.3 a seguir, a escolha de (α, μ, σ) determinará o próximo resíduo.

Usando a Definição 3.1, dado um ponto (x, y, z) , podemos prever o próximo resíduo $\hat{\rho}$, a depender de uma escolha de (α, μ, σ) , através do teorema a seguir.

Teorema 3.3. O próximo resíduo para o sistema KKT escalado (3.4) é escrito, em termos da tripla (α, μ, σ) , como

$$\hat{\rho}(\alpha, \mu, \sigma) = \begin{cases} (\hat{\rho}_L)_\ell = (1 - \alpha)(\rho_L)_\ell, \\ \text{para } \ell = 1, \dots, n + m. \\ (\hat{\rho}_C)_j = (1 - \alpha)(\rho_C)_j + \alpha\mu + \alpha(\alpha - \sigma)(L_{0,0})_j + \alpha^2\Lambda(\mu, \sigma)_j, \\ \text{para } j = 1, \dots, n. \end{cases} \quad (3.20)$$

em que

$$\Lambda(\mu, \sigma) = (\mu^2 L_{2,0} + \mu L_{1,0} + \mu\sigma L_{1,1} + \sigma^2 L_{0,2} + \sigma L_{0,1}) \quad (3.21)$$

e

$$\begin{aligned}
L_{0,0} &= \Delta x^{af} \Delta z^{af}, & L_{1,1} &= \Delta x^\mu \Delta z^\sigma + \Delta x^\sigma \Delta z^\mu, \\
L_{1,0} &= \Delta x^{af} \Delta z^\mu + \Delta z^{af} \Delta x^\mu, & L_{0,1} &= \Delta x^{af} \Delta z^\sigma + \Delta z^{af} \Delta x^\sigma, \\
L_{2,0} &= \Delta x^\mu \Delta z^\mu, & L_{0,2} &= \Delta x^\sigma \Delta z^\sigma.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

A prova do Teorema 3.3 é consequência direta da aplicação dos Lemas A.1 e A.2, que atacam a parte linear e não linear de $\hat{\rho}$ de forma separada. Esses lemas e suas demonstrações encontram-se no Apêndice A.

Note que $\hat{\rho}(\alpha, \mu, \sigma) \in \mathbb{R}^q$, em que $q = m + 2n$, precisamente o número de linhas de (3.4). Além disso, uma consequência do Teorema 3.3 é que todos os resíduos permanecem não-negativos, se nosso ponto inicial é interior.

Corolário 3.4. *Em cada iteração k , para $\alpha \in (0, 1]$ e $(\mu, \sigma) > 0$, $\rho^k(\alpha, \mu, \sigma) \geq 0$.*

Demonstração. Para a parte linear de (3.4), pelo Lema A.1, $\hat{\rho}_L(\alpha, \mu, \sigma) = (1 - \alpha)\rho_L$. Como garantimos que, $\rho^0 \geq 0$, $0 \leq \alpha \leq 1$, por indução, o corolário se verifica. A parte da complementaridade, por construção é positiva já $(x, y, z) \in \mathcal{Q}^+$. Além disso, faremos a cada iteração o teste da razão, isto é, escolheremos α_k , tal que

$$\alpha_k < \bar{\alpha}_k = \frac{-1}{\min \{(X^k)^{-1} \Delta x^k, (Z^k)^{-1} \Delta z^k, -1\}}.$$

Logo, $\rho_C^k > 0$ para todo k e o corolário é válido. ■

3.4. Uma função de mérito polinomial

Em geral, funções de mérito para MPI servem para dar uma medida de quão próximo se está da solução do problema, embora nem sempre elas sejam usadas como critério de parada do algoritmo.

Zhang [52], por exemplo, quer escolher o tamanho de passo de seu algoritmo, tal que a complementaridade e a factibilidade primal-dual sejam reduzidas. Para isso, o autor define sua função de mérito como a soma do *gap* de complementaridade e da norma-2 do resíduo primal-dual, i.e.,

$$\phi(x, y, z) = \|(r_P, r_D)\| + x^T z$$

e escolhe α tal que essa função seja minimizada. Nada obstante, essa função é utilizada apenas de maneira teórica, para demonstrar a convergência do método.

Do ponto de vista prático, o *software* PCx [8] utiliza-se de uma função de mérito para detectar se o problema é infactível ou se a solução é desconhecida ou sub-ótima. Nesse caso,

a função é dada por

$$\phi(x, y, z) = \frac{\|r_P\|}{\max\{1, \|b\|\}} + \frac{\|r_D\|}{\max\{1, \|c\|\}} + \frac{c^T x - b^T y}{\max\{1, \|b\|, \|c\|\}}.$$

Note que essa função de mérito tem relação com o próprio critério de parada do algoritmo como visto em (2.29).

Neste trabalho, será definida uma função de mérito que não só sirva como medida de complementaridade e factibilidade, mas que também sirva de guia para a escolha do próximo ponto. De maneira similar aos autores acima citados, será usada a soma da norma-1 da factibilidade – esta escolha ficará mais clara mais adiante – e a média do *gap* de complementaridade.

Definição 3.5 (Função de Mérito). Definimos a *função de mérito* de um ponto (x, y, z) como

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{m+n} \|\rho_L\|_1 + \frac{x^T z}{n} \quad (3.23)$$

em que ρ_L é dado pela (3.19) no ponto (x, y, z) .

A Definição 3.5 é uma das possíveis maneiras de medir quão perto da solução está um ponto (x, y, z) . Em particular, esta possui algumas propriedades que serão exploradas para escolher-se a tripla (α, μ, σ) , a saber:

- (i) Se (x^*, y^*, z^*) é solução de (3.4), então $\varphi(x^*, y^*, z^*) = 0$;
- (ii) A utilização das matrizes H_P e H_D e o Corolário 3.4 garantem que dado (x, y, z) calculado pelo método e que esteja em \mathcal{Q}^+ , então $\rho_L(x, y, z) \geq 0$. Por isso,

$$\frac{1}{m+n} \|\rho_L\|_1 = \frac{1}{n+m} \sum_{\ell=1}^{n+m} (\rho_L)_\ell$$

e portanto não é preciso se preocupar com a não-diferenciabilidade da norma-1;

- (iii) Pode-se reescrever o *gap* de complementaridade como

$$x^T z = \sum_{i=1}^n x_i z_i = \sum_{i=1}^n (\rho_C)_i;$$

- (iv) A média do *gap* de complementaridade, $x^T z/n$, é usada em geral como valor para o parâmetro de barreira (vide Seção 2.1.2) e logo, em uma solução ótima, este valor é nulo;

(v) Também devido ao Corolário 3.4, dado $(x, y, z) \in \mathcal{Q}^+$ gerado pelo método, vale

$$\varphi(x, y, z) \geq 0.$$

Por conta da propriedade (iii), podemos reescrever (3.23) como

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{n+m} \sum_{\ell=1}^{n+m} (\rho_L)_\ell + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\rho_C)_i \quad (3.24)$$

Para fins de notação, define-se o *operador média* para qualquer vetor $v \in \mathbb{R}^p$ como

$$\bar{v} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p v_i.$$

Este operador encontra a média aritmética das componentes do vetor em questão.

Com esta notação, pode-se representar a função de mérito (3.24) como

$$\varphi(x, y, z) = \overline{\rho_L} + \overline{\rho_C} \quad (3.25)$$

Em vista disso e do Teorema 3.3, pode-se definir a função mérito para o próximo ponto $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ a depender de uma escolha de (α, μ, σ) , i.e., temos a seguinte definição.

Definição 3.6 (Função de Mérito Preditiva). A *função de mérito preditiva* $\hat{\varphi}$, na iteração k será

$$\hat{\varphi}(x^k, y^k, z^k) = \overline{\hat{\rho}_L}(x^k, y^k, z^k) + \overline{\hat{\rho}_C}(x^k, y^k, z^k).$$

Como, por conta da equação (3.20) sabe-se a expressão do próximo resíduo, a depender de uma escolha de (α, μ, σ) , reescreve-se a função de mérito preditiva como

$$\hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma) = \overline{\hat{\rho}_L}(\alpha, \mu, \sigma) + \overline{\hat{\rho}_C}(\alpha, \mu, \sigma). \quad (3.26)$$

Finalmente, usando as propriedades (i-v) acima descritas e o próximo teorema, pode-se escrever $\hat{\varphi}$ como uma função polinomial que depende das variáveis (α, μ, σ) . Com isso, alcança-se o objetivo de encontrar uma função de mérito que tenha boas propriedades matemáticas e que ao mesmo tempo dê uma medida adequada da qualidade solução.

Teorema 3.7. A *função de mérito preditiva* pode ser escrita como o polinômio $\hat{\varphi} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ a depender das variáveis (α, μ, σ) , com a seguinte expressão:

$$\hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma) = (1 - \alpha)(\overline{\rho_{L_k}} + \overline{\rho_{C_k}}) + \alpha\mu + \alpha(\alpha - \sigma)\overline{L_{0,0_k}} + \alpha^2\overline{\Lambda(\mu, \sigma)_k} \quad (3.27)$$

em que

$$\overline{\Lambda(\mu, \sigma)}_k = \mu^2 \overline{L_{2,0}}_k + \mu \overline{L_{1,0}}_k + \mu \sigma \overline{L_{1,1}}_k + \sigma^2 \overline{L_{0,2}}_k + \sigma \overline{L_{0,1}}_k.$$

Demonstração. Aplicando diretamente o Teorema 3.3 na Definição 3.6 temos que

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma) &= \frac{1}{m+n} \sum_{\ell=1}^{m+n} (\hat{\rho}_L)_\ell + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\hat{\rho}_C)_j \\ &= \frac{1}{m+n} \sum_{\ell=1}^{n+m} [(1-\alpha)(\rho_L)_\ell +] + \\ &\quad + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n [(1-\alpha)(\rho_C)_j + \alpha\mu + \alpha(\alpha-\sigma)(L_{0,0})_j + \alpha^2 \Lambda(\mu, \sigma)_j] \\ &= (1-\alpha)(\overline{\rho_L} + \overline{\rho_C}) + \alpha\mu + \alpha(\alpha-\sigma)\overline{L_{0,0}} + \alpha^2 \overline{\Lambda(\mu, \sigma)}. \end{aligned}$$

■

Observação 3.8. É fácil ver que

$$\overline{L_{2,0}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Delta x_i^\mu \Delta z_i^\mu = \frac{(\Delta x^\mu)^T (\Delta z^\mu)}{n} = 0$$

e que

$$\overline{L_{0,2}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Delta x_i^\sigma \Delta z_i^\sigma = \frac{(\Delta x^\sigma)^T (\Delta z^\sigma)}{n} = 0.$$

Com efeito, pelas equações (3.14) e (3.15), tanto Δx^μ e Δz^μ quanto Δx^σ e Δz^σ são vetores ortogonais.

Definindo os coeficientes

$$\begin{cases} a_{0,0,0} = (\overline{\rho_L} + \overline{\rho_C}) & a_{2,1,1} = \overline{L_{1,1}} \\ a_{1,0,0} = -(\overline{\rho_L} + \overline{\rho_C}) & a_{2,1,0} = \overline{L_{1,0}} \\ a_{1,1,0} = 2 & a_{2,2,0} = \overline{L_{2,0}} = 0 \\ a_{1,0,1} = -\overline{L_{0,0}} & a_{2,0,1} = \overline{L_{0,1}} \\ a_{2,0,0} = \overline{L_{0,0}} & a_{2,0,2} = \overline{L_{0,2}} = 0 \end{cases}$$

e adotando a convenção de que se o coeficiente $a_{\ell,p,s}$ não está definido acima, então será nulo, pode-se escrever $\hat{\varphi}$ como

$$\hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma) = \sum_{\ell=0}^2 \sum_{p=0}^2 \sum_{s=0}^2 a_{\ell,p,s} \alpha^\ell \mu^p \sigma^s$$

ou explicitamente

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma) = & a_{0,0,0} + a_{1,0,0}\alpha + a_{1,1,0}\alpha\mu + a_{1,0,1}\alpha\sigma \\ & + a_{2,0,0}\alpha^2 + a_{2,1,0}\alpha^2\mu + a_{2,0,1}\alpha^2\sigma \\ & + a_{2,1,1}\alpha^2\mu\sigma.\end{aligned}\tag{3.28}$$

Esses 8 coeficientes de três índices não nulos são os únicos coeficientes que são calculados nessa implementação, além das direções.

O método que está sendo proposto nesta tese encontra em cada iteração o argumento do mínimo global $(\alpha^*, \mu^*, \sigma^*)$ para a função polinomial $\hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma)$. Como $\hat{\varphi}$ é capaz de prever a média aritmética do próximo resíduo, esta escolha ótima permite um passo em uma direção que minimizará o resíduo ρ , pelo menos em média. Com isso teremos um problema de otimização global a resolver em cada iteração.

Na seção 2.2.2 ficou claro que bons métodos baseiam-se na utilização de vizinhanças que fazem com que os iterandos estejam a distâncias razoáveis da trajetória central. Na próxima seção será mostrado que, se um ponto pertence ao conjunto viável gerado por funções polinomiais $\psi_\ell : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ nas variáveis (α, μ, σ) , construídas a partir da vizinhança simétrica \mathcal{N}_s , então esse ponto também pertencerá a essa vizinhança. Com isso, tais funções serão usadas como restrições do problema de otimização global da função de mérito φ exposto acima, garantindo que o próximo iterando não só reduza o valor da função de mérito, mas também que o próximo ponto tenha as boas propriedades que um ponto de uma vizinhança como a vizinhança \mathcal{N}_s possui.

3.5. Vizinhança simétrica como restrições polinomiais

Como visto no capítulo anterior, Colombo e Gondzio [7] propuseram a vizinhança simétrica $\mathcal{N}_s(\gamma)$ dada na Equação (2.15) – baseada na vizinhança $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$ – com objetivo de melhorar a *centralidade* de um ponto, i.e., como o espalhamento dos produtos complementares $x_i z_i$, para $i = 1, \dots, n$. Estes autores entendem que tal vizinhança é a pedra angular através da qual suas implementações obtém boas performances, já que tais condições impedem que os pares da complementaridade torne-se muito grandes ou muito pequenos antes do tempo adequado.

Pode-se interpretar $\mathcal{N}_s(\gamma)$ da seguinte maneira:

- $x_i z_i$ é não só o par de complementaridade, mas também o resíduo atual do sistema KKT na parte da complementaridade – vide Equação (3.2c).
- O termo

$$\tau = \frac{x^T z}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i z_i$$

pode ser entendido como a média dos resíduos, no que diz respeito à parte complementar de KKT.

Como este trabalho baseia-se em pontos infactíveis mas ao mesmo tempo pretende utilizar as boas propriedades da vizinhança $\mathcal{N}_s(\gamma)$, é necessário estendê-la. No Capítulo 2, mostrou-se que Kojima et al. [35], assim como Wright [49, pg. 110], utilizou em seu método infactível a vizinhança $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$.

Assim, usando a Definição 3.1, define-se a vizinhança simétrica infactível $\mathcal{N}_s(\gamma, \beta)$, para o sistema KKT escalado (3.4), como

$$\mathcal{N}_s(\gamma, \beta) = \left\{ (x, y, z) \in \mathcal{Q}^+ : \frac{\|\rho_L\|}{\tau} \leq \beta \frac{\|\rho_L^0\|}{\tau_0}, \gamma\tau \leq x_i z_i \leq \frac{1}{\gamma}\tau, \forall i = 1, \dots, n \right\}, \quad (3.29)$$

em que $\gamma \in (0, 1)$, $\tau = x^T z / n$ e $\beta > 1$.

Até agora, o método proposto resolverá o KKT escalado (3.4) e além disso usará a função de mérito $\hat{\varphi}$ dada em (3.27) como guia para a escolha das variáveis (α, μ, σ) e por conseguinte do próximo ponto. Por conta do exposto acima, fazer este próximo ponto pertencer à vizinhança $\mathcal{N}_s(\gamma, \beta)$ é uma garantia de que os iterandos estarão numa boa distância da trajetória central. Para isso, basta que seja possível escrever funções nas variáveis (α, μ, σ) que sirvam de restrições para o subproblema de minimização da função de mérito $\hat{\varphi}$ e que garantam que o ponto escolhido esteja em $\mathcal{N}_s(\gamma, \beta)$. Isso é possível já que tal vizinhança é definida com base nos resíduos lineares e complementares – $\|\rho_L\|$ e $x_i z_i$ – de KKT. O seguinte Teorema garante isso.

Teorema 3.9. *Um ponto $(x, y, z) \in \mathcal{Q}^+$ pertence à $\mathcal{N}_s(\gamma, \beta)$ para o sistema KKT escalado se valerem as seguintes desigualdades*

$$\overline{\rho_L}(x, y, z) \leq \beta_L \overline{\rho_C}(x, y, z), \quad (3.30a)$$

$$\gamma \overline{\rho_C}(x, y, z) \leq (\rho_C)_i(x, y, z) \leq \frac{1}{\gamma} \overline{\rho_C}(x, y, z), \quad (3.30b)$$

em que

$$\beta_L = \frac{\beta}{m+n} \frac{\|\rho_L^0\|}{\overline{\rho_{C0}}}.$$

Demonstração. Para facilitar a clareza, deixa-se de mostrar os vetores em questão como dependentes de (x, y, z) . Para demonstrar, comece por considerar que $\overline{\rho_L} = \|\rho_L\|_1 / (m+n)$. Assim, $\overline{\rho_L} \leq \beta_L \overline{\rho_C}$ implica que $\|\rho_L\|_1 \leq \beta \frac{\|\rho_L^0\|}{\overline{\rho_{C0}}} \overline{\rho_C}$. Por equivalência de normas temos que

$$\|\rho_L\| \leq \|\rho_L\|_1 \leq \beta \frac{\|\rho_L^0\|}{\overline{\rho_{C0}}} \overline{\rho_C}.$$

Note finalmente que $\rho_C = XZe$ e portanto $(\rho_C)_i = x_i z_i$ e $\overline{\rho_C} = x^T z / n$. Claramente, se (3.31) for satisfeita então a primeira propriedade que define $\mathcal{N}_s(\gamma, \beta)$. Por sua vez (3.32) corresponde à vizinhança simétrica, o que finaliza a demonstração. ■

Quando cada ponto (x, y, z) pertence à sequência w^k , então podemos escrever $\overline{\rho_{C_{k+1}}} = \hat{\varphi}_C$ e $\overline{\rho_{L_{k+1}}} = \hat{\varphi}_L$. Portanto,

$$\hat{\varphi}_L = (1 - \alpha)\overline{\rho_{L_k}}$$

e

$$\hat{\varphi}_C = (1 - \alpha)\overline{\rho_{C_k}} + \alpha\mu + \alpha(\alpha - \sigma)\overline{L_{0,0}} + \alpha^2\overline{\Lambda(\mu, \sigma)}.$$

Assim as restrições da Teorema 3.9 podem ser reescritas como

$$\hat{\varphi}_L \leq \beta_L \hat{\varphi}_C, \quad (3.31)$$

$$\gamma \hat{\varphi}_C \leq (\rho_C)_i \leq \frac{1}{\gamma} \hat{\varphi}_C. \quad (3.32)$$

3.6. Subproblema de Otimização de Polinômios

A escolha de (α, μ, σ) será feita através do seguinte subproblema de otimização: minimizar a função de mérito $\hat{\varphi}$, dada pelo Teorema 3.7 restrita às desigualdades dadas no Teorema 3.9 – sempre levando em conta o teste da razão.

Portanto, para expressar tal problema de forma apropriada, note que assim como $\hat{\varphi}$, as inequações (3.30) podem ser calculadas em termos de (α, μ, σ) , utilizando-se das desigualdades dadas em (3.32), produzindo um conjunto de $2n + 1$ restrições. Expandindo-se (3.32) tem-se:

$$(1 - \alpha)(\rho_C)_i + \alpha\mu + \alpha(\alpha - \sigma)(L_{0,0})_i + \alpha^2\Lambda(\mu, \sigma)_i - \frac{1}{\gamma}\hat{\varphi}_C(\alpha, \mu, \sigma) \leq 0 \quad (3.33a)$$

$$\gamma\hat{\varphi}_C(\alpha, \mu, \sigma) - [(1 - \alpha)(\rho_C)_i + \alpha\mu + \alpha(\alpha - \sigma)(L_{0,0})_i + \alpha^2\Lambda(\mu, \sigma)_i] \leq 0 \quad (3.33b)$$

para $i = 1, \dots, n$, e

$$(1 - \alpha)\overline{\rho_L} - \beta_L \hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma) \leq 0 \quad (3.33c)$$

Seja $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^{2q+1}$, $(\alpha, \mu, \sigma) \mapsto (\psi_1(\alpha, \mu, \sigma), \dots, \psi_{2n+1}(\alpha, \mu, \sigma))$ a função vetorial que representa o lado esquerdo das inequações (3.33). Note que cada ψ_ℓ é um polinômio nas

variáveis (α, μ, σ) . De fato é possível escrever cada ψ_ℓ como o seguinte polinômio

$$\psi_\ell(\alpha, \mu, \sigma) = \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^2 \sum_{p=0}^2 b_{i,j,p} \alpha^i \mu^j \sigma^p,$$

onde nem todos os coeficientes $b_{i,j,p}$ são diferentes de zero. Mais que isso, os coeficientes que são diferentes de zero são os que estão relacionados com os mesmos monômios dados na Equação (3.28), i.e., ψ_ℓ pode ser expandido como

$$\begin{aligned} \psi_\ell(\alpha, \mu, \sigma) = & b_{0,0,0} + b_{1,0,0}\alpha + b_{1,1,0}\alpha\mu + b_{1,0,1}\alpha\sigma \\ & + b_{2,0,0}\alpha^2 + b_{2,1,0}\alpha^2\mu + b_{2,0,1}\alpha^2\sigma \\ & + b_{2,2,0}\alpha^2\mu^2 + b_{2,0,2}\alpha^2\sigma^2 \\ & + b_{2,1,1}\alpha^2\mu\sigma. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Portanto, o subproblema de otimização global pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \min_{(\alpha, \mu, \sigma)} \quad & \hat{\varphi}(\alpha, \mu, \sigma) \\ \text{s.t.} \quad & \begin{cases} \psi(\alpha, \mu, \sigma) \leq 0 \\ \xi_l \leq (\alpha, \mu, \sigma) \leq \xi_u \end{cases} \end{aligned} \tag{3.35}$$

em que ξ_l e ξ_u são as canalizações de (α, μ, σ) . Para α , a canalização é do tipo $[0, 1]$. De fato, não queremos $\alpha = 0$ e por isso mesmo, no Capítulo ??, garantimos que é possível reduzir a função de mérito usando $\alpha > 0$. Por outro lado, para μ e σ as canalização são do tipo $[0, \xi_u]$, em que ξ_u é um escalar positivo que pode ou não ser diferente para esses dois parâmetros.

O algoritmo proposto neste capítulo pode ser resumido no Pseudo-código 3.

Pseudo-Código 3 Resumo do Método de Escolha Adiada.

```

1: procedure RESOLVELP( $A, b, c$ )
2:    $k \leftarrow 0$ 
3:    $(x^0, y^0, z^0) \leftarrow \text{PONTOINICIAL}(A, b, c)$ . ▷ Assegure que  $(x^0, z^0) > 0$ .
4:   Repita
5:     Resolva (3.6) e encontre  $((\Delta x^{\text{af}})^k, (\Delta y^{\text{af}})^k, (\Delta z^{\text{af}})^k)$ .
6:     Encontre  $((\Delta x^\mu)^k, (\Delta y^\mu)^k, (\Delta z^\mu)^k)$  e  $((\Delta x^\sigma)^k, (\Delta y^\sigma)^k, (\Delta z^\sigma)^k)$  utilizando (3.17).
7:     Calcule  $\hat{\varphi}(\alpha_k, \mu_k, \sigma_k)$  usando (3.27) e  $\psi(\alpha_k, \mu_k, \sigma_k)$  usando (3.33).
8:     Encontre  $(\alpha_k, \mu_k, \sigma_k)$  resolvendo o subproblema de otimização global (3.35).
9:     Dê próximo o passo conforme

$$\begin{aligned}
x^{k+1} &= x^k + \alpha_k((\Delta x^{\text{af}})^k + \mu_k(\Delta x^\mu)^k + \sigma_k(\Delta x^\sigma)^k) \\
y^{k+1} &= y^k + \alpha_k((\Delta y^{\text{af}})^k + \mu_k(\Delta y^\mu)^k + \sigma_k(\Delta y^\sigma)^k) . \\
z^{k+1} &= z^k + \alpha_k((\Delta z^{\text{af}})^k + \mu_k(\Delta z^\mu)^k + \sigma_k(\Delta z^\sigma)^k)
\end{aligned}$$

10:     $k \leftarrow k + 1$ 
11:  Até O critério de parada ser satisfeito.
12: fim procedure

```

Considerações Finais

Para a finalização da tese, pretende-se ainda terminar de demonstrar e descrever os resultados de convergência do método bem como realizar experimentos numéricos que comparem o método com códigos mais maduros, como PCx. Os passos que pretendem ser dados nessas duas fases seguem descritos abaixo.

Resultados de Convergência

- A convergência do método proposto no Pseudo-código 3 está em fase de demonstração. Seguem um roteiro do que pretende ser seguido para finalizar a demonstração.

- **Roteiro para a demonstração**

- Supor $\bar{\sigma} = 0$ e $\bar{\mu} = \eta x^T z / n$ e encontrar $\alpha_k \in (0, 1]$ tal que

$$\varphi_{k+1} = (1 - \theta(\alpha_k))\varphi_k.$$

em que $\theta(\alpha_k) \in (0, 1)$. Como consequência, a sequência $\{\varphi_k\}$ satisfaz

$$\varphi_{k+1} < \varphi_k.$$

e logo ter-se-á convergência Q-linear.

- Esta é a abordagem usada por Zhang [52] para um método infactível.
- Na prática o método deve ter desempenho melhor do que Q-linear, já que se buscará, em cada iteração k , o minimizador global de φ_k , dado por $(\alpha^*, \mu^*, \sigma^*)$ e portanto $\varphi_k(\alpha^*, \mu^*, \sigma^*) \leq \varphi_k(\alpha_k, \bar{\mu}, \bar{\sigma})$.
- Pretende-se também encontrar estimativas para um limitante superior para $\|(x^*, z^*)\|_\infty$. Este limitante é mencionado nas demonstrações de convergência de métodos de pontos interiores infactíveis e indica como escolher um ponto inicial que dependa desse limitante e é utilizado na garantia da convergência. Não há porém – pelo menos de nosso conhecimento –, estimativas para o esse limitante.

- As matrizes H_P e H_D (veja Equação (3.3)) podem ser adaptadas, não só garantido a não-negatividade dos resíduos primais e duais bem como como fator de escala. Esse escalamento pode ser feito, tal que se $\varphi_k < \varepsilon$, para algum k , então o critério de parada do PCx (veja Equação (2.29)) também será satisfeito.

Experimentos Numéricos

- Descrever a heurística utilizada para resolver o subproblema de otimização global de polinômios. Artigo escrito em conjunto com os orientadores está sendo finalizado para submissão em que tal subproblema também aparece, porém num método similar. Tal trabalho contempla também uma biblioteca para resolver o subproblema de otimização de polinômios.
 - Este método similar, já em fase final de implementação, demonstra-se competitivo com o PCx nos testes preliminares
- Implementação do método proposto, utilizando-se da biblioteca supra citada para resolver os subproblemas de otimização de polinômios.
- Realizar testes numéricos com conjunto de teste da `Netlib` e complementares, com comparação ao PCx e com o método desenvolvido pelo grupo.

Referências Bibliográficas

- [1] I. Adler, M. G. C. Resende, G. Veiga, e N. Karmarkar. An implementation of Karmarkar's algorithm for linear programming. *Mathematical Programming*, 44(1-3):297–335, 1989.
- [2] D. A. Bayer e J. C. Lagarias. The Nonlinear Geometry of Linear Programming. I Affine and Projective Scaling Trajectories. *Transactions of the American Mathematical Society*, 314(2):499–526, Aug. 1989.
- [3] D. A. Bayer e J. C. Lagarias. The Nonlinear Geometry of Linear Programming. II Legendre Transform Coordinates and Central Trajectories. *Transactions of the American Mathematical Society*, 314(2):527–581, Jan. 1989.
- [4] M. S. Bazaraa, J. J. Jarvis, e H. D. Sherali. *Linear Programming and Network Flows*. Wiley, New York, 4 edition, Dec. 2009.
- [5] R. G. Bland, D. Goldfarb, e M. J. Todd. The ellipsoid method: A survey. *Operations Research*, 29(6):1039–1091, 1981.
- [6] M. Colombo. *Advances in Interior Point Methods for Large-Scale Linear Programming*. PhD thesis, University of Edinburgh, Edinburgh, 2008.
- [7] M. Colombo e J. Gondzio. Further development of multiple centrality correctors for interior point methods. *Computational Optimization and Applications*, 41(3):277–305, 2008.
- [8] J. Czyzyk, S. Mehrotra, M. Wagner, e S. J. Wright. PCx: an interior-point code for linear programming. *Optimization Methods and Software*, 11(1):397–430, 1999.
- [9] G. B. Dantzig. Maximization of a linear function of variables subject to linear inequalities. In T. C. Koopmans, editor, *Activity Analysis of Production and Allocation: Proceedings of a Conference.*, pages 339–347. John Wiley & Sons, New York, 1951.
- [10] G. B. Dantzig. *Linear Programming and Extensions*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1 edition, 1963.
- [11] G. B. Dantzig. Linear programming. *Operations Research*, 50(1):42–47, 2002.

- [12] M. D'Apuzzo, V. Simone, e D. Serafino. Starting-point strategies for an infeasible potential reduction method. *Optimization Letters*, 4(1):131–146, Oct. 2009.
- [13] A. Deza, E. Nematollahi, R. Peyghami, e T. Terlaky. The central path visits all the vertices of the Klee-Minty cube. *Optimization Methods and Software*, 21(5):851–865, 2006.
- [14] I. I. Dikin. Iterative solution of problems of linear and quadratic programming. *Soviet Mathematics Doklady*, 8(3):674–675, 1967.
- [15] S.-C. Fang e S. Puthenpura. *Linear optimization and extensions. theory and algorithms*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.
- [16] A. V. Fiacco e G. P. McCormick. *Nonlinear programming: sequential unconstrained minimization techniques*. John Willey & Sons, New York, 1968.
- [17] K. R. Frisch. The logarithmic potential method of convex programming. Technical report, University Institute of Economics, Oslo, 1955.
- [18] E. M. Gertz e S. J. Wright. Object-oriented software for quadratic programming. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 29(1):58–81, Mar. 2003.
- [19] E. M. Gertz, J. Nocedal, e A. Sartenaer. A starting point strategy for nonlinear interior methods. *Applied Mathematics Letters*, 17(8):945–952, 2004.
- [20] J. Gondzio. Multiple centrality corrections in a primal-dual method for linear programming. *Computational Optimization and Applications*, 6(2):137–156, 1996.
- [21] J. Gondzio. Interior point methods 25 years later. *European Journal of Operational Research*, 218(3):587–601, May 2012.
- [22] J. Gondzio e T. Terlaky. A computational view of interior point methods. In J. E. Beasley, editor, *Advances in linear and integer programming*, pages 103–144. Oxford University Press, Inc., Oxford, UK, 1996.
- [23] C. C. Gonzaga. Path-Following Methods for Linear Programming. *Siam Review*, 34(2):167–224, 1992.
- [24] O. Güler. Generalized Linear Complementarity Problems. *Mathematics of Operations Research*, 20(2):441–448, May 1995.
- [25] O. Güler, C. Roos, T. Terlaky, e J.-P. Vial. A survey of the implications of the behavior of the central path for the duality theory of linear programming. *Management science*, 41(12):1992–1934, May 1995.

- [26] J. A. J. Hall e K. I. M. McKinnon. Hyper-sparsity in the revised simplex method and how to exploit it. *Computational Optimization and Applications*, 32(3):259–283, 2005.
- [27] R. A. Horn e C. R. Johnson. *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge; New York, 1 edition, 1985.
- [28] B. Jansen. *Interior Point Techniques in Optimization: Complementarity, Sensitivity and Algorithms*, volume 6 of *Applied Optimization*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1 edition, 1997.
- [29] B. Jansen, C. Roos, e T. Terlaky. A family of polynomial affine scaling algorithms for positive semidefinite linear complementarity problems. *SIAM Journal on Optimization*, 7(1):126–140, 1997.
- [30] F. Jarre e M. Wechs. Extending Mehrotra’s corrector for linear programs. *Advanced Modeling and Optimization*, 1(2):38–60, 1999.
- [31] N. Karmarkar. A new polynomial-time algorithm for linear programming. *Combinatorica*, 4(4):373–395, 1984.
- [32] L. G. Khachiyan. A polynomial algorithm in linear programming. *Soviet Mathematics Doklady*, 20:191–194, 1979.
- [33] V. Klee e G. J. Minty. How good is the simplex algorithm? In O. Shisha, editor, *Inequalities III: Proceedings of the Third Symposium on Inequalities*, pages 159–175. Academic Press, New York, 1972.
- [34] M. Kojima, S. Mizuno, e A. Yoshise. A polynomial-time algorithm for a class of linear complementarity problems. *Mathematical Programming*, 44:1–26, 1989.
- [35] M. Kojima, N. Megiddo, e S. Mizuno. A primal-dual infeasible-interior-point algorithm for linear programming. *Mathematical Programming*, 61(3):263–280, 1993.
- [36] N. Megiddo. Pathways to the optimal set in linear programming. In N. Megiddo, editor, *Progress in Mathematical Programming Interior-point and related methods*, pages 131–158. Springer-Verlag, New York, 1989.
- [37] S. Mehrotra. On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Method. *SIAM Journal on Optimization*, 2(4):575–601, 1992.
- [38] R. D. C. Monteiro e I. Adler. Interior path following primal-dual algorithms. Part I: Linear programming. *Mathematical Programming*, 44:27–41, 1989.

- [39] R. D. C. Monteiro, I. Adler, e M. G. C. Resende. A polynomial-time primal-dual affine scaling algorithm for linear and convex quadratic programming and its power series extension. *Mathematics of Operations Research*, 15(2):191–214, 1990.
- [40] J. L. Nazareth. Homotopy techniques in linear programming. *Algorithmica*, 1(1-4):529–535, 1986.
- [41] G. L. Nemhauser e L. A. Wolsey. *Integer and combinatorial optimization*. Integer and combinatorial optimization. John Wiley & Sons, New York, 1999.
- [42] A. Schrijver. *Theory of Linear and Integer Programming*. John Wiley & Sons, New York, 1986.
- [43] R. Shamir. The Efficiency of the Simplex Method: A Survey. *Management science*, 33(3):301–334, Mar. 1987.
- [44] G. Sonnevend. An “analytical centre” for polyhedrons and new classes of global algorithms for linear (smooth, convex) programming. In A. Prékopa, J. Szelezsáan, e B. Strazicky, editors, *System Modelling and Optimization: proceedings of the 12th IFIP Conference, Budapest, Hungary, September 2-6, 1985*, pages 866–875. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 1986.
- [45] R. J. Vanderbei. *Linear programming: foundations and extensions*. International Series in Operations Research and Management Science. Springer-Verlag, New York, 3 edition, 2007.
- [46] S. A. Vavasis e Y. Ye. A primal-dual interior point method whose running time depends only on the constraint matrix. *Mathematical Programming*, 74(1):79–120, July 1996.
- [47] F. R. Villas-Bôas. *Escolha adiada do parâmetro de penalização e do tamanho de passo em algoritmos de Pontos Interiores*. PhD thesis, IMECC/Unicamp, Campinas, 2000.
- [48] F. R. Villas-Bôas e C. Perin. Postponing the choice of penalty parameter and step length. *Computational Optimization and Applications*, 24(1):63–81, 2003.
- [49] S. J. Wright. *Primal-dual interior point methods*. SIAM, Philadelphia, PA, 1 edition, 1997.
- [50] Y. Ye, M. J. Todd, e S. Mizuno. An $\mathcal{O}(\sqrt{n}L)$ -Iteration Homogeneous and Self-Dual Linear Programming Algorithm. *Mathematics of Operations Research*, 19(1):53–67, Feb. 1994.

-
- [51] E. A. Yildirim e M. J. Todd. Sensitivity analysis in linear programming and semidefinite programming using interior-point methods. *Mathematical Programming*, 90(2, Ser. A): 229–261, 2001.
- [52] Y. Zhang. On the convergence of a class of infeasible interior-point methods for the horizontal linear complementarity problem. *SIAM Journal on Optimization*, 4(1):208–227, 1994.
- [53] Y. Zhang e R. A. Tapia. A superlinearly convergent polynomial primal-dual interior-point algorithm for linear programming. *SIAM Journal on Optimization*, 3(1):118–133, 1993.

Apêndice A.

Resultados Técnicos

A.1. Lemas para a prova Teorema 3.3

A prova do Teorema 3.3 é consequência direta dos Lemas A.1 e A.2, cujas demonstrações seguem abaixo.

Lema A.1. *O resíduo da parte linear de (3.4), para o próximo iterando é escrito como*

$$\hat{\rho}_L(\alpha, \mu, \sigma) = (1 - \alpha)\rho_L$$

Demonstração. Para a equação (3.4a) temos

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_P &= H_P(A\hat{x} - b) = H_P(A(x + \alpha(\Delta x^{\text{af}} + \Delta x^c)) - b) \\ &= H_P(A(x + \alpha\Delta x^{\text{af}}) - b) + \alpha H_P A \Delta x^c.\end{aligned}$$

Como $A\Delta x^{\text{af}} = b - Ax$, vale a seguinte igualdade:

$$\begin{aligned}H_P(A(x + \alpha\Delta x^{\text{af}}) - b) &= H_P((1 - \alpha)A\Delta x^{\text{af}}) \\ &= H_P((\alpha - 1)(b - Ax)) \\ &= (1 - \alpha) \underbrace{H_P(Ax - b)}_{\rho_P} \\ &= (1 - \alpha)\rho_P.\end{aligned}$$

Por outro lado, pela equação (3.12), $A\Delta x^c = 0$. Logo $\hat{\rho}_P = (1 - \alpha)\rho_P$.

A prova para parte dual da factibilidade é similar. Com efeito,

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_D &= H_D(A^T \hat{y} + \hat{z} - c) \\
&= H_D \left[A^T \left(y + \alpha(\Delta y^{\text{af}} + \Delta y^c) \right) + \left(z + \alpha(\Delta z^{\text{af}} + \Delta z^c) \right) - c \right] \\
&= H_D \left[A^T y + z - c + \alpha(A^T \Delta y^{\text{af}} + \Delta z^{\text{af}}) \right] + \\
&\quad + H_D \underbrace{\left(A^T \Delta y^c + \Delta z^c \right)}_{=0 \text{ por (3.12)}}
\end{aligned} \tag{A.1}$$

Como $A^T \Delta y^{\text{af}} + \Delta z^{\text{af}} = c - A^T y - z$, a equação (A.1) torna-se

$$H_D \left[A^T y + z - c + \alpha(A^T \Delta y^{\text{af}} + \Delta z^{\text{af}}) \right] = (1 - \alpha)H_D(A^T y + z - c) = (1 - \alpha)\rho_D.$$

Portanto,

$$\hat{\rho}_D = (1 - \alpha)\rho_D.$$

■

Lema A.2. *O resíduo da parte da complementaridade de (3.4), para o próximo iterando é escrito como*

$$\hat{\rho}_C = (1 - \alpha)\rho_C + \alpha\mu e + \alpha(\alpha - \sigma)L_{0,0} + \alpha^2\Lambda(\mu, \sigma). \tag{A.2}$$

em que os vetores $L_{i,k}$, $i, k \in 0, 1, 2$ são definidos por (3.22).

Demonstração. Para encontrar o resíduo da parte complementar para o próximo iterando, considere que pode-se escrever $\hat{\rho}_C = \hat{x}\hat{z}$. Então

$$\begin{aligned}
\hat{x}\hat{z} &= \left(x + \alpha(\Delta x^{\text{af}} + \Delta x^c) \right) \left(z + \alpha(\Delta z^{\text{af}} + \Delta z^c) \right) \\
&= \alpha^2(\Delta x^{\text{af}} + \Delta x^c)(\Delta z^{\text{af}} + \Delta z^c) + \alpha \left[(x\Delta z^{\text{af}} + z\Delta x^{\text{af}}) + (x\Delta z^c + z\Delta x^c) \right] + xz
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Note que $(x\Delta z^{\text{af}} + z\Delta x^{\text{af}}) = -xz$ por (3.6). Além disso usando a equação (3.16), claramente $x\Delta z^{\mu} + z\Delta x^{\mu} = e$ e $x\Delta z^{\sigma} + z\Delta x^{\sigma} = -\Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}}$. Então $(x\Delta z^c + z\Delta x^c) = \mu e - \sigma\Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}}$.

Assim, a equação (A.3) torna-se

$$\begin{aligned}
\hat{x}\hat{z} &= \alpha^2(\Delta x^{\text{af}} + \Delta x^c)(\Delta z^{\text{af}} + \Delta z^c) + \alpha(-xz + \mu e - \sigma\Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}}) + xz \\
&= (1 - \alpha)xz + \alpha\mu e + \alpha(\alpha - \sigma)\Delta x^{\text{af}}\Delta z^{\text{af}} +
\end{aligned} \tag{A.4a}$$

$$+ \alpha^2 \left(\Delta x^{\text{af}}\Delta z^c + \Delta z^{\text{af}}\Delta x^c + \Delta x^c\Delta z^c \right). \tag{A.4b}$$

Note que como $\Delta w^c = \mu \Delta w^\mu + \sigma \Delta w^\sigma$, então

$$\begin{aligned}\Delta x^{\text{af}} \Delta z^c &= \mu \Delta x^{\text{af}} \Delta z^\mu + \sigma \Delta x^{\text{af}} \Delta z^\sigma, \\ \Delta z^{\text{af}} \Delta x^c &= \mu \Delta z^{\text{af}} \Delta x^\mu + \sigma \Delta z^{\text{af}} \Delta x^\sigma,\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\Delta x^c \Delta z^c &= (\mu \Delta y^\mu + \sigma \Delta y^\sigma)(\mu \Delta z^\mu + \sigma \Delta z^\sigma) \\ &= \mu^2 \Delta x^\mu \Delta z^\mu + \mu \sigma (\Delta x^\mu \Delta z^\sigma + \Delta x^\sigma \Delta z^\mu) + \sigma^2 \Delta x^\sigma \Delta z^\sigma.\end{aligned}$$

Consequentemente a equação (A.4b) pode ser expressa como

$$\begin{aligned}\alpha^2 (\mu^2 \Delta x^\mu \Delta z^\mu + \mu \sigma (\Delta x^\mu \Delta z^\sigma + \Delta x^\sigma \Delta z^\mu) + \\ + \mu (\Delta x^{\text{af}} \Delta z^\mu + \Delta z^{\text{af}} \Delta x^\mu) + \sigma (\Delta x^{\text{af}} \Delta z^\sigma + \Delta z^{\text{af}} \Delta x^\sigma) + \sigma^2 \Delta x^\sigma \Delta z^\sigma) .\end{aligned}\quad (\text{A.5})$$

Basta agora somar (A.5) e (A.4a). Definindo os vetores $\Lambda(\mu, \sigma)$ como em (3.21) e $L_{i,j}$ como em (3.22) e substituindo onde for possível, finalmente encontra-se a equação (A.2) levando em conta que $\rho_C = xz$. ■