Métodos de Penalidade Exacta para Resolução de Problemas de Optimização não Linear

Aldina Correia [*] João Matias [†] Carlos Serôdio [‡]

[*] Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Felgueiras
Instituto Politécnico do Porto
e Centro de Matemática da UTAD (CM-UTAD)
aldinacorreia@eu.ipp.pt

[†] Centro de Matemática da UTAD (CM-UTAD)
Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro
j_matias@utad.pt

[‡] Centro de Investigação e de Tecnologias Agro-Ambientais e Biológicas (CITAB)
Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro
cserodio@utad.pt

Abstract

In this work we present a classification of some of the existing Penalty Methods (denominated the Exact Penalty Methods) and describe some of its limitations and estimated.

With these methods we can solve problems of optimization with continuous, discrete and mixing constrains, without requiring continuity, differentiability or convexity.

The boarding consists of transforming the original problem, in a sequence of problems without constrains, derivate of the initial, making possible its resolution for the methods known for this type of problems.

Thus, the Penalty Methods can be used as the first step for the resolution of constrained problems for methods typically used in by unconstrained problems.

The work finishes discussing a new class of Penalty Methods, for nonlinear optimization, that adjust the penalty parameter dynamically.

Resumo

Neste trabalho pretende apresentar-se uma classificação dos Métodos de Penalidade existentes (salientando os Métodos de Penalidade Exacta) e descrever algumas das suas limitações e pressupostos.

Esses métodos permitem resolver problemas de optimização com restrições contínuas, discretas e mistas, sem requerer continuidade, diferenciabilidade ou convexidade.

A abordagem consiste em transformar o problema original, numa sequência de problemas sem restrições, derivados do inicial, possibilitando a sua resolução pelos métodos conhecidos para este tipo de problemas.

Assim, os Métodos de Penalidade podem ser usados como o primeiro passo para a resolução de problemas de optimização permitindo a resolução de problemas com restrições por métodos tipicamente utilizados em problemas sem restrições.

O trabalho termina com a discussão de uma nova classe de Métodos de Penalidade, para optimização não linear, que ajustam o parâmetro de penalidade dinamicamente.

Keywords: Optimização não linear com restrições, Métodos de Penalidade, Métodos de Penalidade Exacta, Métodos de Penalidade Dinâmica.

Title: Exact Penalty Methods for Nonlinear Optimization Problems

---

1 Introdução

A modelação matemática tem sido utilizada para o estudo e compreensão de muitos problemas e fenómenos reais, na engenharia, economia, medicina, entre outras. Os problemas de optimização são abundantes, havendo a necessidade de determinar soluções que correspondam o melhor possível à realidade. Podem encontrar-se alguns desses problemas, por exemplo, em Ferris (1997).

As técnicas ou estratégias utilizadas em cada método dependem da quantidade de informação disponível, e passível de ser utilizada, da maior ou menor eficiência e robustez do algoritmo a utilizar, da facilidade de implementação, e, obviamente, das especificidades do próprio problema.

Quando o problema tem restrições (NLPs, do inglês *NonLinear Programming Problems*) são, muitas vezes, usadas as funções de penalidade, que vêm permitir efectuar uma transformação ao problema original, para que a solução seja obtida pela resolução, não de um, mas de uma sequência de outros problemas, derivados do inicial, todos eles sem restrições. Esta abordagem, possibilita, assim, a utilização de outro tipo de métodos ou algoritmos, nomeadamente a classe dos Métodos dos Gradientes ou a classe dos Métodos de Pesquisa Directa.

Aliás, as estratégias existentes para a resolução de problemas não lineares com restrições, consistem, em geral, em os transformar em problemas sem restrições, de resolução mais fácil, cuja solução é igual ou se relaciona de alguma forma com a solução do problema original.

Os métodos disponíveis para efectuar este procedimento são diversos, por exemplo:

1. Métodos de Penalidade;
2. Métodos Barreira;
3. Método dos gradientes reduzidos;
4. Método de projecção do gradiente;
5. Métodos baseados em funções Lagrangeanas aumentadas;
6. Métodos de Lagrangeanas projectadas;
7. Método dos filtros.

Neste trabalho começam por abordar-se, genericamente, os Métodos de Penalidade, para seguidamente se apresentar uma classificação de alguns dos Métodos de Penalidade existentes, apresentando algumas das suas limitações e pressupostos.

Nos últimos anos surgiu um grande interesse nos Métodos de Penalidade (em 2006, Byrd (2006), em 2005 Chen (2005), em 2002 (2002), em 2003 Gould (2003), Leyffer (2006) em 2006 , Klatte (2002) em 2002, em 1995 Mongeau (1995) e em 2005 Zaslavski (2005), entre outros), por causa da sua capacidade de resolução de problemas degenerados e com restrições não lineares.

Os Métodos de Penalidade Exacta foram usados com sucesso para resolver problemas com restrições de Complementaridade (MPCCs - do inglês *Mathematical programs with complementary constrains*), por Benson (2003) e por Leyffer (2006), e, por Byrd (2006) e por Chen (2005), foram usados em programação não linear com restrições (CNLP, do inglês *Constrained NonLinear Programming*) para assegurar a admissabilidade de subproblemas e melhorar a robustez da iteração.

Assim, os Métodos de Penalidade podem ser usados como o primeiro passo para a resolução de problemas de optimização, pois permitem a resolução de problemas com restrições por métodos tipicamente utilizados em problemas sem restrições.

2 Formulação Matemática do Problema

De uma forma geral, a formulação de um problema, P, de optimização não linear com restrições, não lineares de igualdade, desigualdade e limites simples, pode ser posta na seguinte forma, Matias (2003):

$$\begin{array}{lll} \underset{x\in\mathbb{R}^n}{minimizar} & f(x) & \\ \text{sujeito a} & e_i(x) \geq 0, & i=1,2,...,s \\ & d_j(x)=0, & j=1,2,...,t \\ & a_k \leq x_k, & k=1,2,...,n \\ & x_l \leq b_l, & l=1,2,...,n \end{array} \tag{2.1}$$

onde $f:\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é a função objectivo do problema, $e_i:\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, com $i=1,2,...,s$, são as s restrições de desigualdade, $d_j:\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, com $j=1,2,...,t$, representam as t funções das restrições de igualdade, e as duas últimas condições representam os limites simples impostos às variáveis.

3 Métodos de Penalidade

Os Métodos de Penalidade foram criados para resolver um problema, P, resolvendo uma sequência de problemas sem restrições especialmente escolhidos. Ou seja, é efectuada uma transformação ao problema original e é feita a resolução de uma sequência de outros problemas, sem restrições, derivados do inicial, pelos métodos conhecidos para este tipo de problemas.

Assim, é construída uma nova função objectivo, Φ, que contém informação relativa à função objectivo inicial, f, e, simultaneamente, às restrições do problema. São, desta forma, construídos problemas sucessivos sem restrições, que dependem de um parâmetro positivo, r, cujas correspondentes soluções, $x^*(r)$, convergirão para a solução do problema inicial, x^*.

A **região admissível** de P é o conjunto R definido pelas condições:

$$\begin{array}{ll} e_i(x) \geq 0, & i=1,2,...,s \\ d_j(x)=0, & j=1,2,...,t \\ a_k \leq x_k, & k=1,2,...,n \\ x_l \leq b_l, & l=1,2,...,n. \end{array} \tag{3.2}$$

Nos Métodos de Penalidade, a região admissível, R, é expandida a todo o $\mathbb{R}^n$, mas é aplicada uma grande penalização à função objectivo nos pontos que estão fora da região admissível original, R.

Considere-se o problema P, (2.1). Convertendo as restrições, $e_i(x) \geq 0$ em $-e_i(x) \leq 0$, $d_j(x) = 0$ em $d_j(x) \leq 0$ e $-d_j(x) \leq 0$ e $a_k \leq x_k$ e $x_l \leq b_l$ em $a_k - x_k \leq 0$ e $x_l - b_l \leq 0$, podemos assumir P na forma:

$$\begin{array}{ll} \underset{x\in\mathbb{R}^n}{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & C_i(x) \leq 0, \end{array} \tag{3.3}$$

onde $C_i(x)$ representa o conjunto de todas as $m = s + t + 2n$ restrições, $c_i(x) \leq 0$, $i = 1, 2, ..., m$, do problema.

Assim, o problema original, com restrições de todo o tipo, é agora um problema com restrições apenas de desigualdade da forma *menor ou igual*.

Então pode construir-se uma nova função objectivo, Φ, que contém informação relativa à função objectivo inicial, f, e simultaneamente, às restrições do problema:

$$\Phi(x, r) = f(x) + \Theta(x, r), \tag{3.4}$$

onde $\Theta : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^n$ é uma função de r, parâmetro real positivo, denominado **parâmetro de penalidade** e da função de penalidade, sendo $\Theta(x, r) = rp(x)$.

Definição 1 *- Freund (2004)*

*Uma função $p : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diz-se **função de penalidade** para P, se verifica:*

- $p(x) = 0$ ***se*** $c_i(x) \leq 0$
- $p(x) > 0$ ***se*** $c_i(x) > 0$

Assim, o problema a resolver, que subtitui o problema P, é um problema, P_m, com uma nova função objectivo e sem restrições:

$$P_m : \underset{x\in\mathbb{R}^n}{minimizar}\ f(x) + r_m p(x), \tag{3.5}$$

representando r_m uma sucessão crescente de constantes tal que $r_m \to +\infty$.

Seja $r_k \geq 0, k = 1, 2, ..., \infty$ a sucessão de parâmetros de penalidade, tal que, $r_{k+1} > r_k, \forall k$ e $\underset{k\to+\infty}{lim}\ r_k = +\infty$.

Sejam $q(x, r) = f(x) + rp(x)$, x^k a solução exacta do problema $P(r_k)$ e x^* a solução óptima de P.

Nestas condições prova-se o **Teorema da Convergência dos Métodos de Penalidade**, com f a função objectivo, c_i as funcões restrição e p a função de penalidade:

Teorema 1 *- Freund (2004)*

Suponha-se que f, c_i e p são funções contínuas. Seja $\left\{x^k\right\}, k = 1, 2, ..., \infty$ uma sucessão de soluções de $P(r_m)$, então qualquer ponto limite $\bar{x}$ de $\left\{x^k\right\}$ é solução óptima de P.

3.1 Funções de Penalidade usadas frequentemente

Uma classe de Funções de Penalidade usada frequentemente é:

$$p(x) = \sum_{i=1}^{m} \left[max\left\{0, c_i(x)\right\}\right]^{\rho}, \rho \geq 1, \tag{3.6}$$

- se $\rho = 1$, $p(x)$ em (3.6) diz-se **função de penalidade linear**.

  Nota: Esta função pode não ser diferenciável nos pontos onde $c_i(x) = 0$, para algum i.

- (3.6) com $\rho = 2$, é a função de penalidade mais usada na prática e, diz-se **função de penalidade quadrática**.

3.2 Métodos de Penalidade Exacta - Definição

A característica principal dos Métodos de Penalidade Exacta é que, ao contrário dos Métodos de Penalidade Inexacta, apresentados anteriormente, que transformavam o problema original numa sequência infinita de problemas, a sequência de problemas é finita, ou seja, a solução do problema NLP é determinada resolvendo um número finito de problema sem restrições.

Definição 2 *- Zaslavski (2005)*

Um Método de Penalidade Exacta é um método que escolhe a função de penalidade $p(x)$ e o parâmetro r de tal forma a que a solução óptima $\tilde{x}$ do problema sem restrições, P_m, seja também a solução óptima, x^*, do correspondente problema com restrições, P.

4 Classificação de alguns dos Métodos de Penalidade existentes

Nesta secção faz-se uma revisão e apresenta-se uma classificação para alguns dos Métodos de Penalidade existentes. São ainda apresentados alguns dos seus pressupostos e limitações.

Na tabela seguinte apresenta-se resumidamente essa classificação.

Tabela 1: Uma Classificação de alguns dos Métodos de Penalidade existentes

<table>
<tr><td rowspan="4">Optimização Global</td><td rowspan="2">Penalidade Exacta</td><td>Penalidade Estática</td></tr>
<tr><td>Penalidade Dinâmica</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Penalidade Inexacta</td><td>Penalidade de Recusa</td></tr>
<tr><td>Penalidade Discreta</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Optimização Local</td><td rowspan="2">Penalidade Exacta</td><td>Lagrangeana</td></tr>
<tr><td>Penalidade l_1</td></tr>
</table>

Uma das dificuldades dos Métodos de Penalidade é encontrar parâmetros de penalidade convenientes de forma a que a solução $\tilde{x}$, que minimiza o problema sem restrições corresponda, de alguma forma, ao mínimo do respectivo problema com restrições.

Se o mínimo do problema sem restrições é admissível e correspondente ao mínimo global do problema com restrições (CGM, do inglês *Constrained Global Minimum*), ou seja, se é o ponto da região admissível com melhor valor da função objectivo, diz-se que o método utilizado é um *Método de Optimização Global*. Se esse mínimo, correspondente a um mínimo local do problema com restrições (CLM, do inglês *Constrained Local Minimum*), ou seja, se é o ponto de uma vizinhança admissível pré-definida, com melhor valor da função objectivo, diz-se que o método utilizado é um *Método de Optimização Local*.

Assim, os Métodos de Penalidade podem ser classificados como:

- MÉTODOS DE PENALIDADE DE OPTIMIZAÇÃO GLOBAL, (GOPM, do inglês *Global Optimal Penalty Methods*), se permitem obter soluções globais, CGM, de P

- MÉTODOS DE PENALIDADE DE OPTIMIZAÇÃO LOCAL, (LOPM, do inglês *Local Optimal Penalty Methods*), se permitem obter soluções locais, CLM, de P.

Por outro lado, podem ser (Bertsekas (1999)):

- MÉTODOS DE PENALIDADE INEXACTA, nos quais a minimização da nova função objectivo, Φ, não encontra os pontos CGM e CLM exactos, apenas caminha para pontos infinitamente próximos destes, pela minimização sucessiva dos problemas obtidos;

- MÉTODOS DE PENALIDADE EXACTA, se permitem encontar os CGM e CLM exactos, através de uma sequência finita de problemas de penalidade.

4.1 Métodos de Penalidade de Optimização Global - GOPM

Os GOPM podem ser Inexactos ou Exactos. Nesta classe de métodos estão Métodos de Penalidade Estática e Métodos de Penalidade Dinâmica.

4.1.1 Métodos de Penalidade Estática

Os MÉTODOS DE PENALIDADE ESTÁTICA foram propostos inicialmente por Homaifar (1994). Nestes métodos é considerada uma família de níveis da violação para cada tipo de restrição. Cada nível da violação impõe um nível diferente da penalidade. A desvantagem deste método é o número de parâmetros a ser seleccionado. O número de parâmetros aumenta rapidamente com o número de restrição e de níveis da violação.

Nestes métodos é fixado um parâmetro de penalidade, r para todo o processo. Existem duas dificuldades associadas a esta abordagem, Deb (2001), Godfrey (2004):

- A solução da função objectivo depende do parâmetro de penalidade, r. Diversos autores procuraram encontrar o melhor valor para r, nestes métodos, para conduzir a procura dentro da região admissível. Isto requereu uma extensa experimentação para encontrar uma solução razoável. Este problema é tão indomável que alguns investigadores usaram diferentes valores de r, dependendo do nível de violação das restrições, enquanto outros actualizaram o parâmetro de penalidade a cada iteração a partir de parâmetros que fixavam o raio de evolução (métodos de penalidade dinâmica)
- A inclusão do termo de penalidade distorce a função objectivo, Deb (2001). Para valores pequenos de r, a distorção é pequena, mas o óptimo de $\Phi(x,r)$ pode não estar perto do verdadeiro óptimo. Por outro lado, se é usado um r grande, o óptimo de $\Phi(x,r)$ é próximo do mínimo, mas a distorção pode ser tão grande que $\Phi(x,r)$ pode ter mínimos fictícios.

Considerando, as retrições $a_i(x) \geq 0$ como $-a_i(x) \leq 0$, $i = 1,2,...,s$; $a_k - x_k \leq 0, k = 1,2,...,n$ e $x_l - b_l \leq 0, l = 1,2,...,n$, como restrições do tipo *menor ou igual*, $g_i(x) \leq 0, i = 1,2,...,s+2n$, (2.1), pode ser escrito como:

$$\begin{array}{lll} \underset{x\in\mathbb{R}^n}{minimizar} & f(x) & \\ \text{sujeito a} & d_j(x) = 0, & j = 1,2,...,t \\ & g_i(x) \leq 0, & i = 1,2,...,s+2n \end{array} \tag{4.7}$$

Com os vectores de penalidade α e β, um exemplo de Problema de Penalidade Estática, para (4.7), $\rho \geq 1$, é:

$$\underset{x\in\mathbb{R}^n}{minimizar}\ L_s(x,\alpha,\beta) \tag{4.8}$$

com

$$L_s(x,\alpha,\beta) = f(x) + \sum_{j=1}^{t} \alpha_j \left|d_j(x)\right|^\rho + \sum_{i=1}^{s+2n} \beta_i \left(max(0, g_i(x))\right)^\rho . \tag{4.9}$$

Um Método de Penalidade Estática pode ser Exacto ou Inexacto. Por exemplo, no Problema (4.8), se $\rho = 1$ em (4.9), estamos na presença de um Método de Penalidade Estática Exacto, se $\rho > 1$ é um Método de Penalidade Estática Inexacto, Bertsekas (1999).

Isto é, quando $\rho = 1$ existem valores de penalidade α e β tais que o ponto que minimiza a função de penalidade é exactamente o CGM de P.

Contudo, quando $\rho > 1$, o Método de Penalidade Estática é um Método Inexacto e convergirá para CGM como aproximação infinita dos valores de penalidade.

O Método de Penalidade Estática de Homaifar, Homaifar (1994), resolve um problema semelhante a (4.8), mas requer a escolha de um número muito grande de parâmetros e além disso é um Método de Penalidade Inexacta.

Assim, a limitação comum de todos os métodos de penalidade estática é que geralmente é muito difícil escolher os valores apropriados de penalidade estaticamente. Além disso, estes métodos foram desenvolvidos para encontrar CGM e não permitem encontrar um CLM de P. Portanto, são computacionalmente dispendiosos porque envolvem a procura de um mínimo global de uma função de penalidade não linear.

Como alternativa à procura de parâmetros de penalidade por tentativa em erro existem os Métodos de Penalidade Dinâmica.

4.1.2 Métodos de Penalidade Dinâmica

Os MÉTODOS DE PENALIDADE DINÂMICA, Wang (2006), discutidos na secção 5, incrementam as penalidades em (4.8) gradualmente encontrando o mínimo global $\tilde{x}$ de (4.8), para cada combinação de penalidades, terminando quando $\tilde{x}$ é uma solução admissível de P.

Tal como os Métodos de Penalidade Estáticos, os Métodos de Penalidade Dinâmica podem ser métodos exactos ou inexactos, dependendo do valor de ρ. Além disso, têm uma limitação comum com os anteriores, uma vez que também só permitem encontrar um mínimo global de funções não lineares.

Existem muitas variantes dos Métodos de Penalidade Dinâmica.

Uma variante amplamente conhecida é o *Método de não estacionaridade*, que resolve uma sequência de problemas do tipo de (4.8), verificando em cada iteração de cada subproblema k, as condições que se seguem, com $C > 0$ e $\rho > 1$ parâmetros constantes:

$$\alpha_j(k+1) = \alpha_j(k) + C.\,|d_j(x)| \tag{4.10}$$

$$\beta_i(k+1) = \beta_i(k) + C.\,(max(0, g_i(x)) \tag{4.11}$$

Outro Métodos de Penalidade Dinâmica é o *Método de Penalidade Adaptativa*, que faz uso do *feedback* do processo de pesquisa. Este método resolve o seguinte problema na iteração k:

$$\underset{x\in\mathbb{R}^n}{minimizar}\ L_k(x, \alpha, \beta) \tag{4.12}$$

com

$$L_k(x, \alpha, \beta) = f(x) + \sum_{j=1}^{t} \alpha_j(k)(d_j(x))^2 + \sum_{i=1}^{s+2n} \beta_i(k)\,(max(0, g_i(x))^2\,, \tag{4.13}$$

onde $\alpha_j(k)$ é, respectivamente, incrementado, decrementado ou deixado inalterado quando a restrição $d_j(z) = 0$ é, respectivamente, não admissível ou admissível ou nenhuma delas, nas últimas l iterações. Isto é:

- $\alpha_j(k+1) = \alpha_j(k)/\lambda_1$
  - se $d_j(x(i)) = 0$ é uma iteração admissível $k - l + 1, ..., k$

- $\alpha_j(k+1) = \lambda_2.\alpha_j(k)$
  - se $d_j(x(i)) = 0$ é uma iteração não admissível $k-l+1, ..., k$
- $\alpha_j(k+1) = \alpha_j(k)$
  - caso contrário.

onde l é um inteiro positivo, $\lambda_1, \lambda_2 > 1$ e $\lambda_1 \neq \lambda_2$ (para evitar ciclos nas actualizações). O parâmetro β é actualizado de forma similar.

Existem outras duas variações de penalidade global, ambas abordagens exactas, são os Métodos de Penalidade de Recusa e os Métodos de Penalidade Discreta.

4.1.3 Métodos de Penalidade de Recusa e Métodos de Penalidade Discreta

Um MÉTODO DE PENALIDADE DE RECUSA (*Death penalty Methods*), Hu (2002), Zhang (2005), é um método de penalidade que rejeita simplesmente todos os pontos não admissíveis. Começa com um ou mais pontos admissíveis e procura novos pontos, se o novo ponto não for admissível é rejeitado.

Nesta categoria, a dificuldade reside em gerar os pontos admissíveis iniciais e computacionalmente é ainda mais complicado, nomeadamente quando a região admissível é muito pequena.

Assim, este método resolve o Problema (4.7) considerando:

$$L_p(x, \alpha, \beta) = f(x) + \alpha^T P(d(x)) + \beta^T Q(g(x)),$$

onde

$$\begin{gathered} P(d(x)) = +\infty \text{ se } d(x) \neq 0 \\ \text{e} \\ P(d(x)) = 0 \text{ se } d(x) = 0 \\ \text{e} \\ Q(g(x)) = +\infty \text{ se } g(x) > 0 \\ \text{e} \\ Q(d(x)) = 0 \text{ se } g(x) \leq 0. \end{gathered}$$

Este método é um Método de Penalidade Exacta. Para quaisquer valores finitos dos parâmetros de penalidade α e β, o ponto mínimo da função penalidade será admissível e terá o menor valor da função objectivo, sendo dessa forma exactamente o CGM de P.

Outro Método de Penalidade Exacta é o MÉTODO DE PENALIDADE DISCRETA que usa o número de restrições que foram violadas em vez do grau de violações na função penalidade. Este tipo de métodos é usada muitas vezes em Métodos de Elementos Finitos, Dai (2007).

Conclui-se assim, que os Métodos de Optimização Global de (4.7) têm aplicação prática limitada, porque a procura do mínimo global é computacionalmente dispendiosa e as técnicas de optimização global, como o método de não estacionaridade, também são lentas pois só alcançam óptimos globais com convergência assimptótica, Kirkpatrick (1983).

4.2 Métodos de Penalidade de Optimização Local - LOPM

Para evitar a dispendiosa optimização global têm sido desenvolvidos métodos de optimização local. Estes incluem, por exemplo, os Métodos dos Multiplicadores de Lagrange e os Métodos de Penalidade l_1, que são ambos Métodos de Penalidade Exacta. Estes métodos foram criados para resolver problemas de optimização não linear contínuos, isto é problemas do tipo (4.7), onde f é contínua e diferenciável e g e d podem ser descontínuas, não-diferenciáveis.

Nestes métodos o objectivo é encontrar um mínimo local $\breve{x}$, relativamente à vizinhança $N(\breve{x}) = \{x^* : \|x^* - \breve{x}\| \leq \epsilon \text{ e } \epsilon \to 0\}$ de x^*.

Definição 3 *- Gould (2003)*

Um ponto $\breve{x}$ diz-se um mímimo local de P_m relativamente à vizinhança $\mathrm{N}(\breve{x})$, se $\breve{x}$ é admissível e $f(\breve{x}) \leq f(x)$ para todo o x admissível dessa vizinhança.

4.2.1 Métodos dos Multiplicadores de Lagrange

A Teoria Lagrangeana tradicional funciona para (4.7) com funções restrição g e h contínuas e diferenciáveis.

A Função Lagrangeana de (4.7) com multiplicadores de Lagrange λ e μ é definida por:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T d(x) + \mu^T g(x).$$

Assumindo a continuidade e diferenciabilidade, o CLM satisfaz a condição necessária de Karush-Kunh-Tucker (KKT) e a condição suficiente de ponto sela, Bertsekas (1999).

Esta abordagem é, portanto, limitada à resolução de CNLPs com funções contínuas e diferenciáveis e não pode ser aplicada a problemas discretos ou a problemas onde não se conheçam as derivadas das funções. Esta limitação deve-se ao facto da existência dos multiplicadores de Lagrange depender da existência dos gradientes das restrições e da função objectivo e da regularidade das restrições (independência linear dos gradientes das restrições) nos pontos solução.

Além disso, é difícil encontrar pontos e multiplicadores que satisfaçam a condição suficiente de ponto sela, porque esta é expressa como sistema de desigualdades não lineares, nem sempre fácil de resolver. Assim, esta condição é usada simplesmente para verificar se as soluções encontradas pela condição KKT são, efectivamente, soluções óptimas.

4.2.2 Métodos de Penalidade l_1

O MÉTODOS DE PENALIDADE l_1 é outro método de penalidade exacta de minimização local e que permite, portanto, resolver CNLPs. Este método resolve problemas de minimização com a seguinte função, Gould (2003):

$$l_1(x, \mu) = f(x) + \mu \sum_{j=1}^{t} |d_j(x)| + \mu \sum_{i=1}^{s+2n} max[g_i(x), 0] \tag{4.14}$$

A teoria desenvolvida à volta desta expressão mostra que existe uma correspondência bijectiva entre o CLMs e o mínimo global da função l_1 (4.14), quando μ é suficientemente grande, Bertsekas (1999).

Como é sabido, para valores apropriados do parâmetro de penalidade μ, os pontos estacionários de $l_1(x,\mu)$ são também pontos KKT do problema não linear (4.7) ou pontos estacionários não admissíveis, ver por exemplo, Byrd (2003). Esta propriedade é a mais apelativa destes métodos de penalização exacta porque uma escolha adequada de μ deverá ser adequada para todo o processo de minimização.

Este como os outros Métodos de penalização exacta são, assim, menos dependentes no parâmetro de penalidade do que os métodos de penalização quadrática para os quais é necessário resolver uma sucessão de subproblemas com séries divergentes de parâmetros de penalidade.

A função (4.14) serviu de base a muitos métodos de penalidade propostos na literatura.

Apresenta-se de seguida o correspondente Algoritmo, Byrd (2006):

Algoritmo: Método de penalidade l_1 clássico

- Dados:
  - $\mu_0 > 0$
  - a tolerância $\tau > 0$
  - um ponto inicial x_0^s
- **Para** $k = 0, 1, 2, ...$
  Encontrar um minimizante aproximado x_k de $l_1(x,\mu)$, começando em x_k^s;
  Se $\sum_{j=1}^{t} |d_j(x)| + \sum_{i=1}^{s+2n} max[-g_i(x), 0] \leq \tau$
  Parar e considerar a solução aproximada x_k;
  Senão
  - Escolher um novo parâmetro de penalidade $\mu_{k+1} > \mu_k$;
  - Escolher um novo ponto inicial x_{k+1}^s;

A minimização da função de penalidade l_1, $l_1(x,\mu)$, é difícil porque é não diferenciável. Como resultado destes obstáculos, esta aproximação sem restrições, não é infelizmente viável como técnica para a programação não linear.

A limitação maior deste método, tal como nos Métodos de Multiplcadores de Lagrange, é que só se aplicam a problemas contínuos e diferenciáveis e é difícil encontrar um valor de μ consistente para todos os subproblemas.

As alternativas a estes métodos têm vindo a aparecer, nomeadamente no que diz respeito à procura de soluções para o problema da escolha de parâmetros de penalidade.

5 Uma nova classe de Métodos de Penalidade Dinâmica

Os métodos de penalidade cresceram em três etapas de desenvolvimento desde que foram introduzidas em 1950. Primeiro foram vistos como meio de resolução de problemas de optimização com restrições através de técnicas de optimização sem restrições. Esta abordagem não provou ser efectiva, execepto para classes especiais de aplicações.

Na segunda etapa, os problemas de penalidade foram substituídos por uma sucessão de subproblemas com restrições lineres. Estas técicas, descritas nas abordagens de programação quadrática sequencial, são muito mais eficientes do que as aproximações sem restrições, mas deixam em aberto a questão de como escolher o parâmetro de penalidade.

Infelizmente a escolha dos parâmetros de penalidade era, frequentemente, muito difícil porque a maioria das técnicas utilizadas são estratégias heurísticas.

Como alternativa a estas estratégias apareceu o método dos filtros, introduzidos por Fletcher and Leyffer, Fletcher (2002). Desde aí, as técnicas de filtros foram aplicadas a métodos SLP (Sequential Linear Programming) e SQP (Sequential Quadratic Programming), porque constituíam métodos menos dependentes de parâmetros do que os métodos de Penalidade.

Na etapa mais recente do desenvolvimento, os métodos de penalidade ajustam o parâmetro de penalidade em cada iteração, com o intuito de atingir um nível estipulado de admissibilidade linear. A escolha do parâmetro de penalidade deixa de ser heurística e torna-se parte integral do processo de cálculo.

Um exemplo deste tipo de abordagem é a apresentada em Byrd (2006), no contexto do algoritmo da progressão linear quadrática sequencial (SLQP). Neste artigo é feita uma análise e generalização desta estratégia para a a sua aplicação em outros métodos.

A estratégia consiste em ajustar o parâmetro de penalidade dinamicamente; por controlo do grau de linearidade admissível considerado em cada iteração, elas promovem um progresso balanceado de optimabilidade e admissibilidade. Para escolher um parâmetro de penalidade que permita cumprir o objectivo deve resolver-se um subproblema adicional em cada iteração.

Em contraste com as aproximações clássicas, a escolha do parâmetro de penalidade deixa de ser uma heurística e é determinado, através de um subproblema com objectivos claramente definidos. A nova estratégia de actualização da penalidade é apresentada no contexto de métodos de programação quadrática sequencial (SQP) e programação linear quadrática sequêncial (SLQP), métodos que usam regiões admissíveis para promover a convergência.

A abordagem apresentada em Byrd (2006), consiste em fazer uma reformulação do problema linearizando as restrições, depois, exigindo que em cada passo haja progresso na admissibilidade flexível (*linear feasibility*) que é proporcional ao possível progresso óptimo. Esta nova estratégia, incrementa automaticamente o parâmetro de penalidade e supera o comportamento indesejável da dificuldade de escolher valores apropriados para μ_k nos métodos de penalidade. Esta dificuldade, causou que os métodos de penalidade não diferenciáveis perdessem o interesse durante os anos 90 e originaram o desenvolvimento do método dos filtros, Gonzaga (2003), Wachter (2004), que não exigem um parâmetro de penalidade.

Outras estratégias de actualização de penalidade foram propostas recentemente. Chen e Goldfarb, Chen (2005), propuseram regras que actualizam o parâmetro de penalidade baseadas na admissibilidade e no tamanho dos multiplicadores. Leyffer, Leyffer (2006), considera métodos de penalidade descrevendo critérios dinâmicos para actualizar parâmetros de penalidade baseado no decrescimento médio das restrições penalizadas.

6 Conclusão

Neste trabalho apresenta-se uma Classificação dos Métodos de Penalidade existentes e descrevem-se algumas das suas limitações e pressupostos.

Esta Caracterização baseia-se essencialmente na distinção dos métodos de acordo com o tipo de óptimo que permitem encontrar (global ou local) e na distinção no que diz respeito à exactidão das soluções encontradas (Métodos exactos ou inexactos).

Se o mínimo do problema sem restrições é admissível e correspondente ao mínimo global do problema com restrições (CGM) diz-se que o método utilizado é um Método de Optimização Global (GOPM). Se esse mínimo, correspondente a um mínimo local do problema com restrições (CLM), diz-se que o método utilizado é um Método de Optimização Local (LOPM).

Se a minimização da nova função objectivo, Φ, não encontra os pontos CGM e CLM exactos, apenas caminha para pontos infinitamente próximos destes, pela minimização sucessiva dos problemas obtidos diz-se que o método utilizado é um Métodos de Penalidade Inexacta. Se o método permite encontar os CGM e CLM exactos, através de uma sequência finita de problemas de penalidade diz-se que o método utilizado é um Métodos de Penalidade Exacta.

O trabalho termina com a discussão de uma nova classe de Métodos de Penalidade, para optimização não linear, que ajustam o parâmetro de penalidade dinamicamente.

7 Referências

Benson, H.Y, Sen, A., Shanno, D.F and Vanderbei, R. J. (2003) Interior-Point Algorithms, Penalty Methods and Equilibrium Problems, Technical Report ORFE-03-02, Department of Operations Research and Financial Engineering, Princeton University, Princeton NJ, 08544.

Bertsekas, D. P. (1999) Nonlinear Programming, Athena Scientific, Belmont, Massachusetts.

Byrd, R. H., Nocedal, J. e Waltz, R. A. (2006) Steering Exact Penalty Methods for Optimization, Technical Report, Optimization Technology Center, Northwestern University, Evanston, IL 60208, USA.

Byrd, R. H., Gould, N. I., Nocedal, J. e Waltz, R. A. (2002) On the convergence of successive linear-quadratic programing algorithms, Technical Report OTC 2002/5, Optimization Technology Center, Northwestern University, Evanston, IL, USA.

Chen, L. and Goldfarb, D. (2005) Interior-point l2-penalty methods for nonlinear programming with strong global convergence properties, Mathematical Programming, Technical report, IEOR Dept, Columbia University, New York.

Dai, X. (2007) Finite element approximation of the pure Neumann problem using the iterative penalty method, Applied Mathematics and Computation, 186(2):1367-1373.

Deb, K. (2001) Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms, John Wiley and Sons.

Ferris, M. C. and Pang, J. S. (1997) Engineering and Economic Applications of Complementarity Problems, SIAM Review, 39-4: 669-713.

Fletcher, R. and Leyffer, S. (2002) Nonlinear Programming Without a Penalty Function, Mathematical Programming, 91(2):239-270.

Freund, Robert M. (2004) Penalty and Barrier Methods for Constrained Optimization, Massachusetts, Institute of Technology.

Godfrey C. Onwubolu, and Babu, B. V. (2004) New Optimization Techniques in Engineering, Springer.

Gonzaga, C.C., Karas, E. and Vanti, M. (2003) A Globally Convergent Filter Method for Nonlinear Programming, SIAM J. Optimization, 14(3):646-669.

Gould, N. I., Orban, D. e Toint, P. L. (2003) An interior-point l_1-penalty method for nonlinear optimization, Technical Report RAL-TR-2003-022 Rutherford Appleton Laboratory Chilton, Oxfordshire, UK.

Homaifar, A., Lai, S. H. V. and Qi, X. (1994) Constrained Optimizatin via generic algorithms; Simulation 62(4), 242-254.

Hu, X. and Eberhart, R. (2002) Solving constrained nonlinear optimization problems with particle swarm optimization,Proceedings of the Sixth World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics 2002 (SCI 2002), Orlando, USA.

Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. Jr. and Vecchi, M.P. (1983) Optimization by simulated annealing, Science, 220(4598):671-680.

Klatte, D. and Kummer (2002) Constrained Minima and Lipschitzian Penalties in Metric Spaces, SIAM J. on Optimization, 13(2):619-633.

Leyffer, S., López-Calva, G., and Nocedal (2006) Interior Methods for Mathematical Programs with Complementarity Constraints, SIAM J. on Optimization 17(1):52-77.

Matias, J. L. H. (2003) Técnicas de Penalidade e Barreira Baseadas em Métodos de Pesquisa Directa e a Ferramenta PNL-Pesdir, Tese de Doutoramento, UTAD.

Mongeau, M. and Sartenaer, A. (1995) Automatic decrease of the penalty parameter in exact penalty function methods, European Journal of Operational Research,83(3):686-699.

Wächter, A. and Biegler, L.T. (2004) On the Implementation of an Interior-Point Filter Line-Search Algorithm for Large-Scale Nonlinear Programming, Tech. Rep, RC 23149, IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown - USA.

Wang, F.Y.and Liu, D. (2006) Advances in Computational Intelligence: Theory and Applications, World Scientific, ISBN 9812567348.

Zaslavski,A. J. (2005) A Sufficient Condition for Exact Penalty in Constrained Optimization, SIAM Journal on Optimization, 16(1):250-262.

Zhang, S. (2005) Constrained Optimization by ϵ Constrained Hybrid Algorithm of Particle Swarm Optimization and Genetic Algoritnm, Proceedings of AI 2005: Advances in Artificial Intelligence, Springer.