Trends in Computational and Applied Mathematics, **25** (2024), e01729 Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional Online version ISSN 2676-0029 www.scielo.br/tcam ARTIGO ORIGINAL doi: 10.5540/tcam.2024.025.e01729

Resolução de problemas de otimização com restrições de igualdade e desigualdade utilizando a Inicialização Global Topográfica

M. S. RÊGO^{1*}, J. I. C. RÊGO², L. N. H. G. OLIVEIRA³, A. M. N. JUNIOR⁴ e M. S. NETO⁵

Recebido em 14 de dezembro de 2022 / Aceito em 1 de dezembro de 2023

RESUMO. Os métodos para otimização restrita desenvolvidos a partir da análise matemática clássica, são geralmente algoritmos numéricos muito eficientes. Entretanto, tais métodos dependem fortemente da localização dos pontos iniciais. Neste trabalho, utilizamos a Inicialização Global Topográfica para gerar bons pontos iniciais para o método de busca local utilizado na resolução de problemas restritos de minimização global. Para realizar as tarefas de busca local, usamos o Algoritmo de Direções Viáveis e Pontos Interiores (FDIPA). Em seguida, utilizamos oito problemas descritos na literatura para avaliar a eficácia da metodologia apresentada. Os resultados indicaram que a presente abordagem é uma estratégia eficiente para encontrar as soluções globais de problemas de otimização com restrições mistas.

Palavras-chave: FDIPA, otimização restrita, inicialização topográfica.

1 INTRODUÇÃO

O problema de otimização com restrições de igualdade e desigualdade que será considerado no presente trabalho, pode ser expresso como,

minimizar
$$f(x)$$
 sujeito a $x \in D$, (1.1)

onde $D \subset \mathbb{R}^n$ é o conjunto de restrições dado por,

$$D = \{x \in S; g_i(x) \le 0 \text{ e } h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, l\}.$$

^{*}Autor correspondente: M. S. RÊGO - E-mail: marroni.rego@ifpa.edu.br

¹Instituto Federal do Pará, Rod. PA 437, S/N, 68250-000, Óbidos, PA, Brasil – E-mail: marroni.rego@ifpa.edu.br https://orcid.org/0000-0001-9121-7202

²Instituto Politécnico do Rio de Janeiro, IPRJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, R. Hormindo Silva, 25, 28625-570, Nova Friburgo, PA, Brasil – E-mail: janainaimbiriba@gmail.com https://orcid.org/0000-0002-0151-4738

³Instituto Politécnico do Rio de Janeiro, IPRJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, R. Hormindo Silva, 25, 28625-570, Nova Friburgo, PA, Brasil – E-mail: neliohenderson@gmail.com https://orcid.org/0000-0002-3355-8356

⁴Instituto Federal do Pará, Rod. PA 437, S/N, 68250-000, Óbidos, PA, Brasil – E-mail: aldo.nascimento@ifpa.edu.br https://orcid.org/0000-0002-6681-8994

⁵Instituto Federal do Pará, Av. Dos Cedros, S/N, 68625-000, Paragominas, PA, Brasil – E-mail: manoel.sarmanho@ifpa.edu.br https://orcid.org/0000-0001-9590-9070

Aqui, $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ são por hipótese funções continuamente diferenciáveis, mas não necessariamente convexas [8]. O subconjunto *S* é um hipercubo definido por $S = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times ... \times [a_n, b_n]$, onde $[a_j, b_j]$ é o intervalo real no qual a variável x_j está definida e "×" denota o produto cartesiano.

Dado um ponto $x^* \in D$, se $f(x^*) \leq f(x)$, para todo $x \in D$, então x^* é dito minimizador global de fem D. Assim, resolver o problema descrito na Eq. (1.1), significa obter um minimizador global. Por outro lado, se $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x^* \in V$, onde $V \subset D$ é uma vizinhança de x^* , então x^* é dito minimizador local de f em D. Naturalmente, todo minimizador global é também minimizador local. Entretanto, a recíproca não é verdadeira. Sob certas condições de qualificação, as soluções locais do problema (1.1) satisfazem o sistema de equações e inequações conhecido como sistema de Karush-Kuhn-Tucker (KKT). Tal sistema expressa a condição necessária de otimalidade de primeira ordem [15].

Para resolver o problema (1.1) pode-se utilizar os métodos clássicos de otimização, como os métodos tipo Newton, que a cada iteração realizam uma busca local partindo de um determinado ponto inicial [15]. Devido as características locais da teoria matemática utilizada no desenvolvimento desses métodos, não é dada preferência às soluções globais de (1.1), sendo esta uma severa limitação ao uso direto de tais métodos para solução do problema (1.1), pois dependendo da estimativa inicial o método pode convergir para uma solução local e não global. Tal dificuldade pode ser contornada utilizando pontos iniciais suficientemente próximos das soluções globais de (1.1). Entretanto, pontos iniciais apropriados nem sempre estão disponíveis na formulação dos problemas.

Para contornar tal dificuldade, uma alternativa é utilizar métodos heurísticos de agrupamento que visam refinar as estimativas iniciais, selecionando aquelas que forem mais adequadas. Nesse contexto, em [19] foi proposto um método de agrupamento para otimização contínua chamado Inicialização Global Topográfica (IGT). Tal algoritmo de agrupamento utiliza uma abordagem baseada em conceitos elementares da teoria dos grafos, a fim de gerar bons pontos de partida para os métodos de busca local, a partir de pontos distribuídos de modo uniforme no interior da região viável.

Recentemente, a IGT foi utilizada para resolver problemas de otimização com restrições de desigualdade [7], calcular soluções múltiplas de sistemas de equações não lineares com restrições [5] e para obter os minimizadores globais em problemas de otimização com restrições de caixa [6]. Além disso, a heurística IGT foi aplicada a problemas da termodinâmica do equilíbrio de fases, mais precisamente, no cálculo de pontos críticos [12] e na análise de estabilidade de fases de misturas termodinâmicas [4, 18].

No presente trabalho, usamos a Inicialização Global Topográfica, para obter as estimativas iniciais adequadas para o método de busca local FDIPA (Algoritmo de Direções Viáveis e Pontos Interiores), utilizado aqui para encontrar as soluções globais do problema (1.1). Para avaliar o desempenho do método proposto, experimentos computacionais foram realizados usando 8 problemas. Em todos os experimentos realizados neste trabalho, o método foi capaz de obter as soluções globais.

Este artigo está estruturado da seguinte forma. O método de busca local FDIPA é apresentado e em seguida é descrita a Inicialização Global Topográfica. Após a descrição do método, são apresentados os resultados numéricos, e por fim são feitas as conclusões.

2 ALGORITMO DE DIREÇÕES VIÁVEIS E PONTOS INTERIORES

O método FDIPA foi desenvolvido para resolver o problema de otimização descrito na Eq. (1.1)[8]. Como as restrições de igualdade devem ser satisfeitas na solução, o FDIPA faz uso da função de penalidade ϕ , dada por,

$$\phi(x) = f(x) + \sum_{j=1}^{l} c_j |h_j(x)|,$$

onde $c_j > 0$, j = 1, ..., l. Neste caso, existe $c \in \mathbb{R}^l$ tal que o valor mínimo de ϕ sujeito apenas a restrições de desigualdade ocorre na solução do problema (1.1). No entanto, embora não existam parâmetros de penalidade indefinidamente crescentes, a função ϕ não possui derivadas em pontos onde as restrições de igualdade estão ativas [8].

Para superar essa limitação e permitir o uso da função de penalidade ϕ , considera-se apenas os pontos onde as funções h_j , j = 1, ..., l, apresentam o mesmo sinal (não positivo). Assim, o conjunto viável do problema assume a forma:

$$\Omega = \left\{ x \in S; \ g_i(x) \le 0 \ e \ h_j(x) \le 0, \ i = 1, \dots, m, \ j = 1, \dots, l \right\},$$
(2.1)

onde o interior de Ω é denotado por Ω^0 . Aqui, assumimos que o conjunto viável Ω possui o interior não vazio. Além disso, por definição, tal conjunto é limitado e fechado, garantindo a existência de soluções do problema de minimização restrita, ver [10]. Note que minimizar f em Ω não equivale a resolver o problema (1.1), pois os conjuntos soluções desses problemas podem ser diferentes. De fato, as soluções de (1.1) encontram-se na fronteira de Ω . Por isso, utiliza-se a função ϕ , buscando obter pontos para os quais as restrições $h_j(x) \leq 0, j = 1, ..., l$ são ativas.

Conforme descrito em [8], as seguintes hipóteses deverão ser observadas: (i) Existe um número real *a* tal que o conjunto $\Omega_a = \{x \in \Omega; f(x) \le a\}$ é compacto; (ii) as funções *f*, *g* e *h* são continuamente diferenciáveis em Ω_a e têm derivadas que satisfazem a condição de Lipschitz, e (iii) dado $x \in \Omega_a$, para todo *i* tal que $g_i(x) = 0$, i = 1, ..., m, os vetores $\nabla g_i(x)$ são linearmente independentes.

Sob essas hipóteses, o método FDIPA gera, a partir de um ponto $x_0 \in \Omega^0$, uma sequência de pontos $\{x_k\} \subset \Omega^0$ tal que $\phi(x_{k+1}) < \phi(x_k)$ [8]. Esta sequência converge para um ponto que satisfaz as condições de otimalidade de primeira ordem de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) do problema (1.1), dadas por,

$$\nabla f(x) + \nabla g(x)\lambda + \nabla h(x)\mu = 0, \qquad (2.2)$$

$$G(x)\lambda = 0, \qquad (2.3)$$

$$h_j(x) = 0, \ j = 1, ..., l,$$
 (2.4)
 $g_i(y) \le 0, \ i = 1, ..., m,$
 $\lambda_i \ge 0, \ i = 1, ..., m,$

onde $G(x) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ é uma matriz diagonal, com $G_{ii}(x) = g_i(x)$, para todo $i = 1, ..., m, \lambda$ e μ são as variáveis duais associadas às restrições de desigualdade e igualdade, respectivamente.

As equações (2.2)-(2.4) descrevem um sistema não linear em (x, λ, μ) que pode ser resolvido utilizando o método de Newton, com ponto inicial (x_0, λ_0, μ_0) . Definindo $d_k^{\alpha} = x_{k+1} - x_k$, $\lambda_k^{\alpha} = \lambda_{k+1}$ e $\mu_k^{\alpha} = \mu_{k+1}$, a *k*-ésima iteração de Newton é dada por

$$\begin{bmatrix} B_k & \nabla g(x_k) & \nabla h(x_k) \\ \Lambda_k \nabla g^T(x_k) & G(x_k) & 0 \\ \nabla h^T(x_k) & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_k^{\alpha} \\ \lambda_k^{\alpha} \\ \mu_k^{\alpha} \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} \nabla f(x_k) \\ 0 \\ h(x_k) \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

onde $\Lambda_k \in \mathbb{R}^{m \times m}$ é a matriz diagonal com $\Lambda_{k_{ii}} = \lambda_{k_i}$, i = 1, ..., m, e $B_k = H(x_k, \lambda_k, \mu_k) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, onde H é a Hessiana da função Lagrangiana associada ao problema (1.1). No entanto, devido ao alto custo computacional para calcular H, podemos definir B_k como uma aproximação quasi-Newton de H ou a matriz identidade I_n [8]. Note que o sistema definido na Eq. (2.5) independe do valor atual de μ .

De acordo com [8], o vetor d_k^{α} é uma direção de descida para ϕ , mas pode não ser viável em relação a Ω . Para garantir a viabilidade da direção de busca, utiliza-se o vetor $d_k^{\beta} \in \mathbb{R}^n$ para desviar o vetor $d_k^{\alpha} \in \mathbb{R}^n$ para o interior da região viável. O vetor d_k^{β} é obtido resolvendo o seguinte sistema linear

$$\begin{bmatrix} B_k & \nabla g(x_k) & \nabla h(x_k) \\ \Lambda_k \nabla g^T(x_k) & G(x_k) & 0 \\ \nabla h^T(x_k) & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_k^\beta \\ \lambda_k^\beta \\ \mu_k^\beta \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} 0 \\ \Lambda_k \omega^g \\ \omega^h \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

onde $\omega^g > 0$ e $\omega^h > 0$ são fatores de deflexão associados a restrições de desigualdade e igualdade, respectivamente.

Assim, a nova direção de busca é dada por $d_k = d_k^{\alpha} + \rho_k d_k^{\beta}$, onde $\rho_k > 0$ é um escalar positivo que determina o grau de deflexão no sentido do interior da região viável, garantindo que d_k seja também uma direção de descida para ϕ . As etapas do FDIPA são descritas no Algoritmo 1.

Note que uma vez obtida a direção de busca *d*, realiza-se uma busca linear inexata que obedece a condição de Armijo [8]. Assim, o novo ponto é determinado por $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$, onde t_k é o comprimento do passo.

No passo 3, *B* (simétrica e definida positiva) é atualizada usando a fórmula de atualização quasi-Newton BFGS [1, 10]. Para garantir *B* definida positiva, a atualização BFGS utiliza a chamada condição de curvatura $\delta^T \gamma > 0$, que pode não ser satisfeita quando a função objetivo é a Lagrangiana. Para solucionar esse problema, em [8], recomenda-se o uso da fórmula BFGS com a modificação de Powell [2, 17], conforme descrito no passo 3.

Algorithm 1 FDIPA

Dados: $\varepsilon > 0$, $\varphi > 0$, $v \in (0, 1)$, $\xi \in (0, 1)$ e $\eta \in (0, 1)$, $x_0 \in \Omega^0$, $0 < \lambda_0 \in \mathbb{R}^m$, $0 < c \in \mathbb{R}^l$, $0 < \omega^g \in \mathbb{R}^m$, $0 < \omega^h \in \mathbb{R}^l$ e $B_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e definida positiva.

Resultado: Solução x obtida utilizando o ponto inicial x₀

1 Faça k = 0 e calcule $\nabla L_x(x_k, \lambda_k, \mu_k) = \nabla f(x_k) + \nabla g(x_k) \lambda_k + \nabla h(x_k) \mu_k$.

- 2 Passo 1. Cálculo da direção de busca d.
- 3 Calcule $d_k^{\alpha} \in \lambda_k^{\alpha}$ resolvendo o sistema linear (2.5).
- **4** se $||d_k^{\alpha}|| \leq \varepsilon$ então retorna x_k . Pare;
- 5 Calcule $d_k^{\beta} \in \lambda_k^{\beta}$ resolvendo o sistema linear (2.6).
- 6 se $c_j < 1, 2\mu_k^{\alpha}$ então $c_j = -2\mu_k^{\alpha}, j = 1, ..., l;$ 7 se $\nabla \phi^T(x_k) d_k^{\beta} > 0$ então

$$\mathbf{s} \mid \boldsymbol{\rho}_{k} = \min\{\boldsymbol{\varphi} \left\| d_{k}^{\alpha} \right\|^{2}; (\boldsymbol{\xi} - 1) \nabla \boldsymbol{\phi}^{T}(\boldsymbol{x}_{k}) d_{k}^{\alpha} / \nabla \boldsymbol{\phi}^{T}(\boldsymbol{x}_{k}) d_{k}^{\beta} \}.$$

- 9 senão
- 10 $| \rho_k = \varphi || d_k^{\alpha} ||^2$.
- 11 **fim**
- 12 Faça $d_k = d_k^{\alpha} + \rho_k d_k^{\beta}$ e $\overline{\lambda}_k = \lambda_k^{\alpha} + \rho_k \lambda_k^{\beta}$.
- 13 **Passo 2.** (Busca Linear) Calcule *t*, o primeiro número da sequência $\{1, v, v^2, v^3, ...\}$ que satisfaz

$$\phi(x_k + t_k d_k) \le \phi(x_k) + t_k \eta \nabla \phi^T(x_k) d_k,$$

$$h_j(x_k + t_k d_k) \le 0, \ j = 1, \dots, l,$$

$$g_i(x_k + t_k d_k) < 0, \ \text{se } \overline{\lambda}_{k_i} \ge 0,$$

$$g_i(x_k + t_k d_k) \le g_i(x_k), \ \text{se } \overline{\lambda}_{k_i} < 0.$$

14 **Passo 3.** (Atualizações) Faça $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$ e

$$\nabla L_x(x_{k+1}, \lambda_k, \mu_k) = \nabla f(x_{k+1}) + \nabla g(x_{k+1}) \lambda_k + \nabla h(x_{k+1}) \mu_k$$
$$\gamma = \nabla L_x(x_{k+1}, \lambda_k, \mu_k) - \nabla L_x(x_k, \lambda_k, \mu_k),$$
$$\delta = t_k d_k,$$

$$\zeta = \begin{cases} 1, & \text{se } \delta^T \gamma \ge 0, 2\delta^T B_k \delta \\ (0, 8\delta^T B_k \delta) / (\delta^T B_k \delta - \delta^T \gamma), & \text{se } \delta^T \gamma < 0, 2\delta^T B_k \delta \end{cases}$$
$$\sigma = \zeta \gamma + (1 - \zeta) B_k \delta, \\B_{k+1} = B_k - \frac{B_k \delta \delta^T B_k}{\delta^T B_k \delta} + \frac{\sigma \sigma^T}{\delta^T \sigma}. \end{cases}$$

15 para todo i = 1, ..., m faça $\lambda_{k+1_i} = -1/g(x_{k+1});$

- 16 se $\lambda_{k+1_i} > 1$ então $\lambda_{k+1_i} = 1$;
- 17 se $||x_{k+1} x_k|| < \varepsilon$ então retorna x_{k+1} . Pare;
- 18 senão k = k + 1. Volte para o Passo 1;

Por outro lado, as variáveis duais associadas às restrições de desigualdade são incrementadas no passo 3 conforme a restrição correspondente tende para zero. Desta forma, em lugar da direção de busca apontar para a fronteira da restrição, ela desliza ao longo da fronteira, tornando os passos mais longos e consequentemente melhorando a eficiência do algoritmo [8]. Por sua vez, a atualização das variáveis duais associadas às restrições de igualdade, μ , não é considerada, uma vez que o sistema de equações (2.5), independe destas variáveis.

3 INICIALIZAÇÃO GLOBAL TOPOGRÁFICA

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ o conjunto descrito na Eq. (2.1). O primeiro passo na Inicialização Global Topográfica consiste em gerar, de modo uniforme, \overline{N} pontos no hipercubo *S*. Aqui, os pontos amostrais são gerados usando uma sequência, conhecida como sequência de Sobol, ver [11, 14]. Tal sequência é de baixa discrepância, ou seja, para \overline{N} suficientemente grande a medida do desvio da uniformidade da sequência, distribuídos dentro de um conjunto de pontos, torna-se pequena. Desse modo, os pontos gerados pela sequência de Sobol, preenchem uniformemente a região de busca [7].

Note que o conjunto viável Ω possui restrições de desigualdades e os pontos amostrais podem não ser todos viáveis, ou seja, apenas N pontos amostrais pertencem a $\Omega, N \leq \overline{N}$. Portanto, o próximo passo diz respeito à viabilidade dos pontos gerados. Nessa etapa, pode-se utilizar duas abordagens dependendo da característica do método de busca local. Na primeira abordagem, todos os pontos gerados no hipercubo serão utilizados pela Inicialização Global Topográfica. Nesse caso, na etapa de busca local deve-se avaliar a viabilidade das soluções. Uma outra abordagem, consiste em restringir a região viável utilizando as restrições do problema. Tal abordagem visa limitar a violação das restrições por parte dos pontos iniciais, o que é necessário especialmente para métodos de pontos interiores, como é o caso do FDIPA. No presente trabalho, utilizaremos tal abordagem, conforme descrito a seguir.

Os *N* pontos amostrais viáveis são denotados por P_i , i = 1, 2, ..., N. Para cada ponto P_i , é construída uma lista de referência (uma lista de índices dos pontos). Isto é feito para organizar os outros (N-1) pontos, através da chamada ordem do vizinho mais próximo. Assim, para P_i , o *j*-ésimo elemento desta lista é o índice do *j*-ésimo ponto amostral mais próximo de P_i . Essa lista é ainda complementada pela atribuição de um sinal para cada índice *j*, do seguinte modo:

$$j = \begin{cases} +j, \operatorname{se} \phi(P_j) \ge \phi(P_i) \\ -j, \operatorname{se} \phi(P_j) < \phi(P_i) \end{cases}$$
(3.1)

As *N* listas de referências constituem uma matriz $N \times (N - 1)$, que é chamada de matriz topográfica (t - matriz) da função ϕ associada aos pontos de amostragem. A matriz topográfica pode ser interpretada por um grafo orientado, chamado de grafo topográfico (ou simplesmente topografo) de ϕ . Caso o índice *j* tenha sinal positivo na *i*-ésima linha da t - matriz, então o ponto P_i será a "ponta final" de um arco cuja "ponta inicial" é o ponto P_i .

Dado um inteiro $1 \le k \le (N-1)$, a submatriz $N \times k$ obtida considerando apenas os k vizinhos mais próximos é chamada de k-t-matriz, cujo grafo correspondente é o k^+ -topografo. Se a i-ésima linha da k-t-matriz é uma linha positiva, então o ponto amostral P_i é dito um minimizador local de ϕ no k^+ -topografo. Aqui, todos os minimizadores locais de ϕ no k^+ -topografo serão selecionados como estimativas iniciais para o método de busca local.

Pela Eq. (3.1), temos que o k^+ -topografo de ϕ é um grafo direcionado mesmo quando a função ϕ é constante nos pontos amostrais. Nesse caso, de cada ponto P_i do grafo partem exatamente k arcos, ou seja, todos os N pontos são minimizadores locais de ϕ no k^+ -topografo. Por esse motivo, assumimos como hipótese que a função ϕ não é constante nos pontos amostrais.

Para exemplificar o uso da Inicialização Global Topográfica, consideremos o seguinte problema: obter $x \in \Omega$, que minimiza a função

$$\phi(x) = 10(x_1 - 2)^2 + 0.1(x_2^2 - 1)^2 + \cos^2(\pi x_2) + 100|x_1x_2^2 - 2|$$

onde

 $\Omega = \left\{ x \in [-2, 2] \times [-2, 2]; g_1(x) = x_1 + x_2 + x_2^2 - 4 \le 0 \text{ e } h_1(x) = x_1 x_2^2 - 2 \le 0 \right\}.$

Esse problema possui duas soluções globais, a saber: (2,1) e (2,-1). Assim, o objetivo é determinar tais minimizadores.

Utilizando a sequência de Sobol, foram gerados $\overline{N} = 10$ pontos amostrais na caixa $[-2, 2] \times [-2, 2]$. Verificando a viabilidade desses pontos, observou-se que o ponto (1,5;1,5) não é viável. Os N = 9 pontos restantes, denotados por P_i , i = 1, ..., N, pertencem a Ω e são descritos na Tabela 1 com os respectivos valores de ϕ .

i	P_i	$f(P_i)$			
1	(-2; -2)	1161,9			
2	(0; 0)	241,1			
3	(1; -1)	111			
4	(-1; 1)	391			
5	(-0,5; -0,5)	275,056			
6	(0,5; -1,5)	110,156			
7	(-1,5; 0,5)	360,056			
8	(-1,25; -0,75)	376,457			
9	(0,75; 1,25)	98,9691			

Tabela 1: Pontos amostrais P_i com os respectivos valores de ϕ .

Na Fig. 1, são apresentadas as curvas de nível da função de penalidade ϕ na caixa $[-2, 2] \times [-2, 2]$. Também são apresentados os pontos obtidos pela sequência de Sobol em Ω . Os pontos amostrais viáveis, dados na Tabela 1, são representados por quadrados brancos. A cruz branca marca a localização do ponto amostral não viável e os círculos vermelhos indicam as soluções

globais do problema. A curva amarela é formada pelos pontos que satisfazem $g_1(x_1, x_2) = 0$. Por sua vez, a curva pontilhada magenta é formada pelos pontos que satisfazem $h_1(x_1, x_2) = 0$. A escala de cores indica a magnitude de ϕ . Observando as curvas, vê-se duas bacias de mínimo da função ϕ , e como tal, espera-se que as soluções globais do problema sejam encontradas nestas regiões. Note também que existem 3 pontos amostrais P_3 , P_6 e P_9 , localizados nessas bacias.



Figura 1: Curvas de nível da função de penalidade ϕ na caixa $[-2, 2] \times [-2, 2]$.

	-8	-5	-6	-7	-2	-3	-4	-9	\leftarrow	1
	5	-3	4	8	-9	7	-6	1	\leftarrow	2
	-6	2	5	-9	8	4	7	1	\leftarrow	3
	-7	-2	-5	-8	-9	-3	-6	1	\leftarrow	4
t - matriz =	-2	8	-6	7	-3	4	1	-9	\leftarrow	5.
	3	5	2	8	1	-9	7	4	\leftarrow	6
	4	8	-5	-2	-9	1	-6	-3	\leftarrow	7
	-5	-7	1	-2	4	-6	-3	-9	\leftarrow	8
	2	4	5	3	7	6	8	1	\leftarrow	9

O próximo passo é obter a matriz topográfica. Para esse exemplo, tal matriz é dada por

Observe que cada linha corresponde a um dos 9 pontos amostrais viáveis, onde os elementos de cada linha são ordenados de acordo com a ordem do vizinho mais próximo e os índices receberam um sinal de acordo com o valor de ϕ . Por exemplo, pela linha 1 temos que a distância entre os pontos P_8 e P_1 é menor ou igual à distância entre os pontos P_5 e P_1 . Além disso, $\phi(P_8) < \phi(P_1)$ implicando a atribuição do sinal "-" ao índice 8 na linha 1. Por outro lado, $\phi(P_5) \ge \phi(P_2)$ resultando na atribuição do sinal "+" ao índice 5 na linha 2.

Note que na t – matriz, apenas a linha 9 é positiva. Nesse caso, apenas o ponto P_9 deverá ser selecionado como estimativa inicial. Por outro lado, considerando apenas os k = 2 vizinhos mais próximos, obtemos a submatriz 2 - t - matriz dada por,

$$2-t - \text{matriz} = \begin{bmatrix} -8 & -5 \\ 5 & -3 \\ -6 & 2 \\ -7 & -2 \\ -2 & 8 \\ 3 & 5 \\ 4 & 8 \\ -5 & -7 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \xleftarrow{} 4$$

Na 2-t-matriz temos que as linhas 6, 7 e 9 são positivas. Assim, utilizando k = 2 teremos três estimativas iniciais, a saber P_6 , P_7 e P_9 . Por sua vez, se k = 4 obtemos a submatriz 4-t-matriz que possui apenas duas linhas positivas.

$$4-t-\text{matriz} = \begin{bmatrix} -8 & -5 & -6 & -7 \\ 5 & -3 & 4 & 8 \\ -6 & 2 & 5 & -9 \\ -7 & -2 & -5 & -8 \\ -2 & 8 & -6 & 7 \\ 3 & 5 & 2 & 8 \\ 4 & 8 & -5 & -2 \\ -5 & -7 & 1 & -2 \\ 2 & 4 & 5 & 3 \end{bmatrix} \xleftarrow{\leftarrow 1} \xleftarrow{\leftarrow 2}$$

Geometricamente, a 4 - t - matriz pode ser representada por um grafo orientado, chamado de 4^+ -*topografo*, apresentado na Fig. 2.

Como ilustrado na Fig. 2, os nós correspondentes aos pontos P_6 e P_9 , são os únicos dos quais partem 4 arcos. Isso ocorre porque na 4 - t - matriz apenas as linhas 6 e 9 são positivas. Assim, os pontos P_6 e P_9 são os minimizadores locais de ϕ no 4^+ -topografo e devem ser selecionados como estimativas iniciais para o método de busca local FDIPA.

Note pelo exemplo anterior, que o número de estimativas iniciais depende do valor de k. De fato, para valores pequenos de k, a k - t - matriz pode apresentar várias linhas positivas, resultando em um grande número de estimativas iniciais. Por outro lado, para valores de k mais próximos de N, a quantidade de linhas positivas da k - t - matriz tende a diminuir, o que implica poucas estimativas iniciais. Além disso, a uniformidade da distribuição dos pontos amostrais no interior do conjunto viável influencia no número de estimativas iniciais selecionadas pela Inicialização Global Topográfica. De fato, em [19] os autores inferem experimentalmente que, conforme o valor de k cresce, o número de estimativas decresce mais rapidamente quando utilizadas amostras uniformes.

De acordo com observações feitas por [19], uma vez que o número de minimizadores locais de ϕ no k^+ -topografo aumenta conforme o valor de k decresce, este procedimento pode levar a um grande custo computacional no passo de busca local para valores pequenos de k. Por outro lado, para valores maiores de k pode ocorrer do número de estimativas iniciais ser insuficiente, comprometendo assim a eficácia do método. Tais observações mostram que o parâmetro k deve ser escolhido de forma adequada. Nesse contexto, em [7] foi proposta uma fórmula para calcular um valor apropriado para k.

Seja $k_1^{\#}$ o número de minimizadores locais de ϕ no 1^+ -*topografo* e $k_j^{\#}$ o número de minimizadores locais de ϕ no j^+ -*topografo*, onde j é o menor elemento do conjunto $\{2, ..., (N-1)\}$ para o qual $k_1^{\#} - k_j^{\#} \neq 0$ e $0 < \varepsilon_j < 1$, com

$$\varepsilon_j = \frac{jk_j^\#}{k_1^\# - k_j^\#},\tag{3.2}$$



Figura 2: O 4⁺-topografo de ϕ . Os pontos P_6 e P_9 são os minimizadores locais de ϕ neste topografo.

De acordo com [7], o valor de k pode ser estimado utilizando a fórmula

$$k = \eth\left(\frac{-(\varepsilon_j - 1) + \sqrt{(\varepsilon_j - 1)^2 + 80\varepsilon_j}}{2}\right) + 1,$$

onde \eth denota o operador menor inteiro e ε_j é dado na Eq. (3.2). Uma vez que $\varepsilon_j > 0$, nota-se que $(\varepsilon_j - 1)^2 + 80\varepsilon_j > 1$, e $k_c \ge 1$. Utilizando esta fórmula, os autores obtiveram, na maioria dos seus experimentos, k = 4. Por esse motivo, no presente trabalho utilizamos apenas os 4 vizinhos mais próximos.

4 RESULTADOS

Para avaliar a eficácia da metodologia aqui apresentada, utilizamos oito exemplos descritos na literatura. Os problemas 1-5 foram retirados de [3] e [9], os problemas 6 e 8 são modificações dos problemas MCB6 e HS29 descritos em [7] e o problema 7 é uma modificação do problema MCB6 descrito em [13]. Tais problemas foram escolhidos pois apresentam soluções conhecidas e descritas na literatura, sendo que os problemas 1-5 apresentam soluções únicas e os problemas 6-8 mais de uma solução. Aqui, o método FDIPA equipado com a Inicialização Global Topográfica é denotado por IGT-FDIPA.

Para solucionar tais problemas foram utilizados os seguintes parâmetros no método FDIPA: $\varepsilon = 10^{-12}$, $\varphi = 0.8$, v = 5/8, $\xi = 0.7$, $\eta = 0.1$, $B_0 = I_n$ e $c_0 = 100$. Os sistemas descritos nas Eqs. (2.5) e (2.6) foram resolvidos utilizando o método de Eliminação de Gauss [16]. Os resultados numéricos foram obtidos utilizando um computador equipado com o processador Intel® CoreTM i7-4510U, 8 GB de memória e sistema operacional Ubuntu 15.04. O código foi desenvolvido em linguagem C.

Problema 1:

$$\begin{aligned} f(x) &= 3x_1 + 0,00001x_1^3 + 2x_2 + (0,000002/3)x_2^3 \\ g_1(x) &= -x_4 + x_3 - 0,55 \le 0, \\ g_2(x) &= -x_3 + x_4 - 0,55 \le 0, \\ h_1(x) &= 1000sen \left(-x_3 - 0,25\right) + 1000sen \left(-x_4 - 0,25\right) + 894, 8 - x_1 = 0, \\ h_2(x) &= 1000sen \left(x_3 - 0,25\right) + 1000sen \left(x_3 - x_4 - 0,25\right) + 894, 8 - x_2 = 0, \\ h_3(x) &= 1000sen \left(x_4 - 0,25\right) + 1000sen \left(x_4 - x_3 - 0,25\right) + 1294, 8 = 0, \\ 0 \le x_1, x_2 \le 1200; -0,55 \le x_3, x_4 \le 0,55. \end{aligned}$$

Problema 2:

$$\begin{cases} f(x) = -9x_5 - 15x_8 + 6x_1 + 16x_2 + 10(x_6 + x_7) \\ g_1(x) = x_9x_3 + 0,02x_6 - 0,025x_5 \le 0, \\ g_2(x) = x_9x_4 + 0,02x_7 - 0,015x_8 \le 0, \\ h_1(x) = x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 0, \\ h_2(x) = 0,03x_1 + 0,01x_2 - x_9(x_3 + x_4) = 0, \\ h_3(x) = x_3 + x_6 - x_5 = 0, \\ h_4(x) = x_4 + x_7 - x_8 = 0, \\ 0 \le x_1, x_2, x_6 \le 300; 0 \le x_4, x_8 \le 200; \\ 0 \le x_3, x_5, x_7 \le 100; 0,01 \le x_9 \le 0,03. \end{cases}$$

Problema 3:

$$f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$$

$$g_1(x) = 0,25x_1^2 + x_2^2 - 1 \le 0,$$

$$h_1(x) = x_1 - 2x_2 + 1 = 0,$$

$$-10 \le x_1, x_2 \le 10$$

Problema 4:

$$\begin{split} f(x) &= 24x_1 + 26,75x_2 + 39x_3 + 40,5x_4\\ g_1(x) &= -2,3x_1 - 5,6x_2 - 11,1x_3 - 1,3x_4 + 5 \leq 0,\\ g_2(x) &= 1,645\sqrt{(0,28x_1^2 + 0,19x_2^2 + 20,5x_3^2 + 0,62x_4^2)} - 12x_1 - 11,9x_2 - \\ &41,8x_3 - 52,1x_4 + 21 \leq 0,\\ h_1(x) &= x_1 + x_2 + x_3 + x_4 - 1 = 0,\\ &0 \leq x_1,x_2,x_3,x_4 \leq 1 \end{split}$$

Problema 5:

$$\begin{array}{l} f(x) = 3x_1 + 0,00001x_1^3 + 2x_2 + (0,00002/3)x_2^3 \\ g_1(x) = -x_4 + x_3 - 0,48 \le 0, \\ g_2(x) = -x_3 + x_4 - 0,48 \le 0, \\ h_1(x) = 1000sen(-x_3 - 0,25) + 1000sen(-x_4 - 0,25) + 894,8 - x_1 = 0, \\ h_2(x) = 1000sen(x_3 - 0,25) + 1000sen(x_3 - x_4 - 0,25) + 894,8 - x_2 = 0, \\ h_3(x) = 1000sen(x_4 - 0,25) + 1000sen(x_4 - x_3 - 0,25) + 1294,8 = 0, \\ 0 \le x_1, x_2 \le 1200; -0,48 \le x_3, x_4 \le 0,48. \end{array}$$

Problema 6:

$$\begin{cases} f(x) = \left(4 - 2, 1x_1^2 + x_1^4/3\right) x_1^2 + x_1x_2 + \left(4x_2^2 - 4\right) x_2^2 \\ g_1(x) = x_1x_2^3 \le 0, \\ g_2(x) = x_1^3 - x_2^2 \le 0, \\ g_3(x) = x_1 + x_2^2 + 2x_2 - 3 \le 0, \\ h_1(x) = 8x_1 - 8, 4x_1^3 + 2x_1^5 + x_2 + x_3x_2^3 + 3x_4x_1^2 + x_5 = 0, \\ h_2(x) = x_1 - 8x_2 + 16x_2^3 + 3x_1x_2^2x_3 - 2x_2x_4 + x_5(2x_2 + 2) = 0, \\ h_3(x) = x_3\left(x_1x_2^3\right) = 0, \\ h_4(x) = x_4\left(x_1^3 - x_2^2\right) = 0, \\ h_5(x) = x_5\left(x_1 + x_2^2 + 2x_2 - 3\right) = 0, \\ -3 \le x_1 \le 3; -2 \le x_2 \le 2; 0 \le x_3, x_4, x_5 \le 5. \end{cases}$$

Problema 7:

$$\begin{cases} f(x) = 1\\ g_1(x) = -8x_1 + x_3x_1 + x_2 \le 0,\\ g_2(x) = -3x_1 - 4x_2 + x_3x_2 \le 0,\\ h_1(x) = -8x_1^2 + x_3x_1^2 + x_2x_1 = 0,\\ h_2(x) = -3x_1x_2 - 4x_2^2 + x_3x_2^2 = 0,\\ h_3(x) = x_1 + x_2 - 1 = 0,\\ 0 \le x_1, x_2 \le 1; -9 \le x_3 \le 9. \end{cases}$$

Problema 8:

$$\begin{aligned} f(x) &= -x_1 x_2 x_3 \\ g_1(x) &= x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_3^2 - 48 \le 0, \\ h_1(x) &= -x_2 x_3 + 2x_1 x_4 = 0, \\ h_2(x) &= -x_1 x_3 + 4x_2 x_4 = 0, \\ h_3(x) &= -x_1 x_2 + 8x_3 x_4 = 0, \\ h_4(x) &= x_4 \left(x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_3^2 - 48 \right) = 0, \\ -5 \le x_1 \le 5; -4 \le x_2 \le 4; -3 \le x_3 \le 3; -2 \le x_4 \le 2. \end{aligned}$$

Na Tabela 2, são apresentadas as soluções obtidas utilizando o IGT-FDIPA. Para cada problema teste, apresentamos os minimizadores globais (denotados por x^*) com os respectivos valores da função de penalidade ϕ (denotados por ϕ^*), o número de pontos amostrais gerados (indicado por \overline{N}) e o número de estimativas iniciais (denotado por N_0).

Problema	\overline{N}	N ₀	x*	ϕ^*	
1	10000	1	(679,953; 1026,06; 0,118871; -0,396236)	5126,5	
2	30000	2	(0; 100; 0; 100; 0; 0; 100; 200; 0,01)	-400	
3	1500	1	(0,822867; 0,91144)	1,39479	
4	500	2	(0,6355; 0; 0,3127; 0,05178)	29,8944	
5	50000	1	(776,159; 925,195; 0,05111; -0,42889)	5174,41	
6	1500	1500 19	(0,089842; -0,712656; 0; 0; 0)	1 02162	
			(-0,089842; 0,712656; 0; 0; 0)		-1,05105
7	500			(0,25; 0,75; 5)	
		25	(0,5; 0,5; 7)	1	
			(1, 0, 8)		
8	10000			(4; 2,8284; 2; 0,70711)	
		10000 125	(4; -2,8284; -2; 0,70711)	-22,6274	
			(-4; -2,8284; 2; 0,70711)		
			(-4; 2,8284; -2; 0,70711)		

Tabela 2: Soluções obtidas para os problemas 1-8 utilizando a metodologia aqui apresentada.

Observe que quanto mais rígidas as restrições de desigualdade, maior o valor de N de forma a obter pontos no interior da região viável. Por esse motivo, por exemplo, apesar do problema 6 apresentar mais restrições que o problema 1, o número \overline{N} é menor.

Na Tabela 3 são apresentados os números de avaliações (NAF) da função ϕ necessárias para determinar as soluções de cada problema utilizando a metodologia aqui apresentada. Para os problemas 1 e 2, são apresentados os números médios de avaliações da função ϕ feitas por quatro métodos descritos em [3], a saber: DE-CC que é uma combinação dos métodos DE (*Differential Evolution*) e CC (*Constraint Consensus*), os métodos híbridos DE-DB e DE-FD, onde DB (*Direction Based maximum*) e FD (*Feasibility Distance far*) são variações de CC, e

o método MCC-CV que é uma variação do método CC utilizando SQP (*Sequential Quadratic Programming*).

Problema	NAF	NAF _{DE-CC} NAF _{DE-DB} NAF _{DE-FD}		NAF _{MCC-CV}	
1	2338	42100	42420,83	42312,5	24612
2	5985	240000	240000	239875	151080
3	49	-	-	-	-
4	1168	-	-	-	-
5	525	-	-	-	-
6	3074	-	-	-	-
7	2252	-	-	-	-
8	28592	-	-	-	-

Tabela 3: Número de avaliações da função de mérito necessários para obter as soluções descritas na Tabela 2.

Note que dependendo do custo computacional de cada avaliação da função ϕ , um número muito grande de avaliações pode tornar inviável o uso prático do método devido ao tempo necessário para convergência. Por isso, busca-se reduzir o número de avaliações da função de mérito. Nesse sentido, nos problemas 1 e 2 temos $NAF < NAF_{DE-CC}$, $NAF < NAF_{DE-DB}$, $NAF < NAF_{DE-FD}$ e $NAF < NAF_{MCC-CV}$, indicando que com as configurações utilizadas, o IGT-FDIPA foi mais efetivo na busca das soluções desses problemas pois apresentou menos avaliações da função de mérito.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

No presente trabalho, estudamos o problema de otimização com restrições de igualdade e desigualdade. Para resolver esse problema, utilizamos a Inicialização Global Topográfica (IGT) para gerar pontos iniciais adequados para o Algoritmo de Direções Viáveis e Pontos Interiores (FDIPA), que foi empregado na busca local. A metodologia aqui proposta, foi denominada IGT-FDIPA.

Com o objetivo de verificar a eficácia do IGT-FDIPA, realizamos experimentos computacionais usando 8 problemas testes que foram escolhidos para mostrar a eficiência do método IGT-FDIPA na resolução de problemas com diferentes características, como o número de variáveis, a linearidade, o tipo e a quantidade de restrições. Em todos os testes, a metodologia aqui apresentada foi capaz de obter as soluções.

Para cada um desses problemas, obtivemos o número de avaliações da função de penalidade ϕ , necessárias para obter as soluções globais. Nos problemas 1 e 2, foram feitas também comparações entre o número de avaliações feitas pelo IGT-FDIPA, com aqueles apresentados por 4 métodos descritos na literatura. Para as configurações utilizadas, o IGT-FDIPA realizou me-

nos avaliações de ϕ . Os resultados obtidos indicam que IGT-FDIPA é uma ferramenta numérica promissora para o cálculo das soluções globais do problema de otimização com restrições mistas.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro - FAPERJ e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq.

ABSTRACT. The constrained optimization methods, developed from the classical mathematical analysis, are generally very efficient numerical algorithms. However, such methods strongly depend on the location of the starting points. In this work we use the Topographical Initialization heuristic to generate adequate starting points for the local search method in order to solve global optimization problems with equality and inequality constraints. To perform the local search, we used the Feasible Direction Interior Point Algorithm (FDIPA). We performed computational experiments using 8 problems in order to test the method performance. The results show that the present methodology is feasible and efficient for the global minimization of functions subject to restrictions of equality and inequality.

Keywords: FDIPA, constrained optimization, topographical initialization

REFERÊNCIAS

- Y.H. Dai. A perfect example for the BFGS method. *Mathematical Programming*, 138 (2013), 501– 530.
- [2] I. Guo & A.S. Lewis. Nonsmooth Variants of Powell's BFGS Convergence Theorem. SIAM Journal on Optimization, 28 (2018), 1301–1311.
- [3] N. Hamza, R. Sarker & D. Essam. Differential evolution with multi-constraint consensus methods for constrained optimization. *Journal of Global Optimization*, 57 (2013), 583–611.
- [4] N. Henderson, J. Imbiriba & M.S. Rêgo. Finding Multiple Stationary Points of the Gibbs Tangent Plane Distance Function Via the Topographical Global Initialization. *Chemical Engineering Research* and Design, 124 (2017), 271–282.
- [5] N. Henderson, M.S. Rêgo & J. Imbiriba. Topographical global initialization for finding all solutions of nonlinear systems with constraints. *Applied Numerical Mathematics*, **112** (2017), 155–166.
- [6] N. Henderson, M.S. Rêgo, J. Imbiriba, M. de Sá & W. Sacco. Testing the topographical global initialization strategy in the framework of an unconstrained optimization method. *Optimization Letters*, 12 (2018), 727–741.
- [7] N. Henderson, M.S. Rêgo, W. Sacco & R. Rodrigues. A new look at the topographical global optimization method and its application to the phase stability analysis of mixtures. *Chem. Eng. Sci.*, 127 (2015), 151–174.

- [8] J. Herskovits. Feasible Direction Interior-Point Technique for Nonlinear Optimization. Journal of Optimization Theory and Applications, 99 (1998), 121–146.
- [9] W. Hock & K. Schittkowski. "Test Examples for Nonlinear Programming Codes, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems". Springer Verlag (1981).
- [10] A.F. Izmailov & M. Solodov. "Otimização: Condições de Otimalidade, Elementos de Análise Convexa e de Dualidade.". IMPA (2020).
- [11] S. Joe & F. Kuo. Remark on algorithm 659: Implementing Sobol's quasirandom sequence generator. ACM Transactions on Mathematical Software, 29 (2003), 49–57.
- [12] R.A.R.R. Júnior. "Cálculo de pontos críticos e tricríticos de misturas termodinâmicas via otimização global utilizando métodos estocásticos e determinísticos". Ph.D. thesis, IPRJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, RJ (2016).
- [13] C.F. Ma. The semismooth and smoothing Newton methods for solving Pareto eigenvalue problem. *Applied Mathematical Modelling*, **36** (2012), 279–287.
- [14] A. Navid, S. Khalilarya & M. Abbasi. Diesel engine optimization with multi-objective performance characteristics by non-evolutionary Nelder-Mead algorithm: Sobol sequence and Latin hypercube sampling methods comparison in DoE process. *Fuel*, **228** (2018), 349–367.
- [15] J. Nocedal & S.J. Wright. "Numerical Optimization". Springer, New York (2006).
- [16] S. Peters & J. Szeremet. "Cálculo numérico computacional.". Editora da UFSC (2017).
- [17] M.J.D. Powell. The convergence of variable metric methods for nonlinearly constrained optimization calculations. In O.L. Mangasarian, R.R. Meyer & S.M. Robinson (editors), "Nonlinear Programming". Academic Press, New York (1978), p. 27–64.
- [18] M.S. Rêgo. "Inicialização global topográfica aplicada a problemas da termodinâmica do equilíbrio de fases". Ph.D. thesis, IPRJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, RJ (2019).
- [19] A. Torn & S. Viitanen. Topographical global optimization using pre-sampled points. *Journal of Global Optimization*, 5 (1994), 267–276.

How to cite

M.S. Rêgo, J.I.C. Rêgo, L.N.H.G. Oliveira, A.M.N. Junior & M.S. Neto. Resolução de problemas de otimização com restrições de igualdade e desigualdade utilizando a Inicialização Global Topográfica. *Trends in Computational and Applied Mathematics*, **25**(2024), e01729. doi: 10.5540/tcam.2024.025.e01729.

(cc) BY