

Fundamentos de otimização restrita

Marina Andretta

ICMC-USP

30 de setembro de 2014

Baseado no livro Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright.

Problema restrito

Em **minimização restrita**, queremos minimizar uma função de variáveis reais a um valor real com restrições aos valores das variáveis.

Ou seja, estamos interessados em resolver o seguinte problema:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) \\ \text{Sujeita a} & c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \\ & c_i(x) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}, \end{array} \quad (1)$$

onde

- $x \in \mathbf{R}^n$,
- $f, c_i : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ funções suaves,
- \mathcal{E} e \mathcal{I} conjuntos de índices das restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente.

Como no caso de problemas irrestritos, chamamos f de **função objetivo**.

Definimos o conjunto viável Ω como o conjunto dos pontos x que satisfazem as restrições. Ou seja,

$$\Omega = \{x \mid c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}; c_i(x) \geq 0, i \in \mathcal{I}\}.$$

Já vimos que soluções globais são difíceis de encontrar quando estamos lidando com problemas irrestritos.

Esta situação poderia mudar ao acrescentarmos restrições, já que o conjunto viável pode excluir minimizadores locais e pode ser comparativamente mais fácil encontrar minimizadores globais.

No entanto, **acrescentar restrições pode deixar o problema muito mais difícil de ser resolvido.**

Por exemplo, considere o problema

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & \|x\|_2^2 \\ \text{Sujeita a} & \|x\|_2^2 \geq 1. \end{array}$$

Sem a restrição, a função objetivo é uma quadrática convexa, com apenas um minimizador $x^* = 0$.

Com a restrição, qualquer vetor x que satisfaça $\|x\| = 1$ é solução do problema. Há infinitos minimizadores locais para $n \geq 2$.

Considere agora o seguinte exemplo:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & (x_2 + 100)^2 + 0.01x_1^2 \\ \text{Sujeita a} & x_2 - \cos x_1 \geq 0. \end{array}$$

Sem a restrição, o problema tem uma única solução $x^* = (0, -100)^T$.

Com a restrição, há soluções locais perto dos pontos

$$(x_1, x_2) = (k\pi, -1), \quad k = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$$

Definição de diferentes tipos de soluções locais são simplesmente extensões das definições correspondentes às de otimização irrestrita. No entanto, agora nos restringimos a pontos viáveis na vizinhança de x^* .

Temos a seguinte definição:

Um ponto x^* é uma solução local para o problema (1) se $x^* \in \Omega$ e existe uma vizinhança \mathcal{N} de x^* tal que $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in \mathcal{N} \cap \Omega$.

De maneira similar, temos também as seguintes definições:

Um ponto x^* é uma solução local estrita (ou forte) para o problema (1) se $x^* \in \Omega$ e existe uma vizinhança \mathcal{N} de x^* tal que $f(x^*) < f(x)$ para todo $x \in \mathcal{N} \cap \Omega$, $x^* \neq x$.

Um ponto x^* é uma solução local isolada para o problema (1) se $x^* \in \Omega$ e existe uma vizinhança \mathcal{N} de x^* tal que x^* é a única solução local em $\mathcal{N} \cap \Omega$.

Usaremos os termos **solução** e **minimizador** como sinônimos.

Suavidade, tanto da função objetivo como das restrições, é importante para caracterizar soluções, como no caso de problemas sem restrições.

Isso garante que a função objetivo e as restrições se comportam de maneira razoavelmente previsível, o que permite que os **algoritmos façam boas escolhas para direções de busca**.

Quando uma função não é suave, ela possui “quinas” e “pulos” nos pontos não-diferenciáveis.

Se fizermos o desenho de uma região viável, geralmente observamos várias “quinas”. Isso significa que as funções de restrição que definem a região viável não são suaves?

A resposta, em geral, é não. **Bordas não suaves** podem, muitas vezes, ser descritas por uma **coleção de funções de restrição suaves**.

Considere, por exemplo, a região definida pela restrição não suave

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| \leq 1.$$

Ela pode ser descrita como o conjunto de restrições suaves

$$x_1 + x_2 \leq 1, \quad x_1 - x_2 \leq 1, \quad -x_1 + x_2 \leq 1, \quad -x_1 - x_2 \leq 1.$$

Em geral, as funções de restrição são escolhidas de modo que cada uma represente uma parte suave da borda de Ω .

Problemas de otimização irrestrita não suaves podem, às vezes, ser reformulados como problemas restritos suaves.

Considere o problema

$$\text{Minimizar } f(x) = \max\{x^2, x\}.$$

A função f possui “quinas” em $x = 0$ e $x = 1$. A solução é dada por $x^* = 0$.

Podemos obter uma formulação restrita e suave para o problema adicionando uma variável artificial t e escrevendo

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & t \\ \text{Sujeita a} & t \geq x, \\ & t \geq x^2. \end{array}$$

Estas técnicas de reformulação são comumente usadas quando f é o máximo de uma coleção de funções ou quando f é a norma 1 ou a norma infinito de uma função vetorial.

Para verificar como são caracterizadas as soluções de problemas de otimização restrita, veremos três exemplos.

Uma definição que será bastante usada é: dado um ponto viável x , a restrição de desigualdade $i \in \mathcal{I}$ é dita

- ativa, se $c_i(x) = 0$ e
- inativa, se $c_i(x) > 0$.

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Considere o problema de duas variáveis e uma única restrição de igualdade

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) = x_1 + x_2 \\ \text{Sujeita a} & c_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0. \end{array} \quad (2)$$

Temos, então, que $\mathcal{E} = \{1\}$ e $\mathcal{I} = \emptyset$.

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

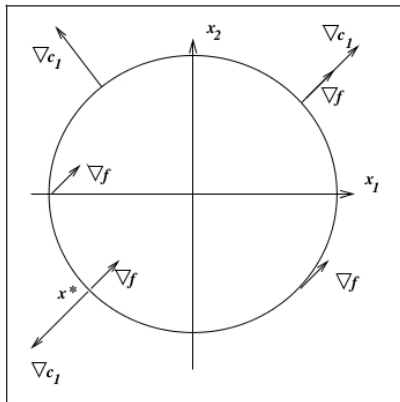


Figura : Exemplo de problema com uma restrição de igualdade (Figura 12.3 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Podemos verificar que o conjunto viável é uma circunferência de raio $\sqrt{2}$ centrada na origem - apenas a borda da circunferência, não seu interior.

A solução é $x^* = (-1, -1)^T$. É fácil ver que, a partir de qualquer outro ponto na circunferência, podemos “andar” por pontos viáveis que fornecem valor de função objetivo menor.

Por exemplo, a partir do ponto $x = (\sqrt{2}, 0)^T$, qualquer movimento em sentido horário na circunferência produz decréscimo na função objetivo.

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Podemos ver que, na solução x^* , a **normal da restrição** $\nabla c_1(x^*)$ é paralela a $\nabla f(x^*)$. Ou seja, existe um escalar λ_1^* tal que

$$\nabla f(x^*) = \lambda_1^* \nabla c_1(x^*). \quad (3)$$

Neste caso, $\lambda_1^* = -\frac{1}{2}$.

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Podemos obter (3) examinando a aproximação de primeira ordem da série de Taylor da função e da restrição.

Para manter viabilidade em relação à restrição $c_1(x) = 0$, pedimos que $c_1(x + d) = 0$. Ou seja,

$$0 = c_1(x + d) \approx c_1(x) + \nabla c_1(x)^T d = \nabla c_1(x)^T d.$$

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Portanto, a **direção d** mantém viabilidade em relação a c_1 , em primeira ordem, quando satisfaz

$$\nabla c_1(x)^T d = 0. \quad (4)$$

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Além disso, queremos que a direção d produza decréscimo na função objetivo:

$$0 > f(x + d) - f(x) \approx \nabla f(x)^T d.$$

Ou seja,

$$\nabla f(x)^T d < 0.$$

(5)

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Se, em um ponto x_k , existe uma **direção d que satisfaz (4) e (5)**, podemos diminuir o valor da função objetivo mantendo a viabilidade. Ou seja, **x_k não é um minimizador**.

Daí segue uma condição de otimalidade necessária de primeira ordem para problemas restritos:

se x^* é solução de (1) então não existe direção d que satisfaça tanto (4) como (5).

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

É possível mostrar que, se uma direção d não satisfaz nem (4) nem (5), temos que $\nabla f(x)$ e $\nabla c_1(x)$ são paralelos. Ou seja, $\nabla f(x) = \lambda_1 \nabla c_1(x)$, para algum λ_1 .

Se esta condição não é satisfeita, a direção definida por

$$d = - \left(I - \frac{\nabla c_1(x) \nabla c_1(x)^T}{\|\nabla c_1(x)\|^2} \right) \nabla f(x)$$

satisfaz (4) e (5).

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Defina a **função Lagrangiana** como

$$\mathcal{L}(x, \lambda_1) = f(x) - \lambda_1 c_1(x).$$

Note que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda_1) = \nabla f(x) - \lambda_1 \nabla c_1(x).$$

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Podemos, então, reformular a condição de otimalidade necessária de primeira ordem como

se x^* é solução de (1), então existe um escalar λ_1^* tal que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda_1^*) = 0. \quad (6)$$

O escalar λ_1 é chamado de multiplicador de Lagrange para a restrição $c_1(x) = 0$.

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Esta observação sugere que podemos encontrar soluções para o problema restrito (1) procurando pontos estacionários da função Lagrangiana.

Apesar de a **condição (3)** ser **necessária** para que um ponto x seja solução, ela **não é suficiente**.

No exemplo (2), o ponto $(1, 1)^T$ **satisfaz (3) com $\lambda_1 = \frac{1}{2}$** . No entanto, este ponto não é uma solução do problema. De fato, $(1, 1)^T$ é um **maximizador** da função f restrita a c_1 .

Exemplo de problema com uma restrição de igualdade

Não podemos tornar a condição (3) suficiente apenas impondo uma condição sobre o sinal de λ_1 .

Tome o problema (2), trocando a restrição $x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0$ por $-x_1^2 - x_2^2 + 2 = 0$.

A solução para este novo problema continua sendo $(-1, -1)^T$, já que o conjunto viável é o mesmo do exemplo (2).

No entanto, o valor de λ_1^* que satisfaz (3) passa de $\lambda_1^* = -\frac{1}{2}$ para $\lambda_1^* = \frac{1}{2}$.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

Considere agora uma pequena variação do exemplo (2):

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) = x_1 + x_2 \\ \text{Sujeita a} & c_1(x) = 2 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0. \end{array}$$

(7)

Temos, então, que $\mathcal{E} = \emptyset$ e $\mathcal{I} = \{1\}$.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

Neste problema, o conjunto viável é tanto a borda como o interior do círculo centrado na origem, de raio $\sqrt{2}$.

Note que, para todo ponto x na borda da região viável, a normal da restrição $\nabla c_1(x)$ aponta para o interior da região viável.

Podemos verificar que a **solução** para este problema ainda é $x^* = (-1, -1)^T$ e que a condição (3) vale para $\lambda_1^* = \frac{1}{2}$.

No entanto, este problema com uma restrição de desigualdade difere do problema (2), que tem uma restrição de igualdade, pelo fato de o **sinal do multiplicador de Lagrange ter significado**, como veremos a seguir.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

Mais uma vez, conjecturamos que um ponto x não é solução se podemos encontrar uma direção d que mantém viabilidade e diminui o valor da função objetivo em primeira ordem.

A principal **diferença** entre os problemas (2) e (7) está em **como lidar com a viabilidade**.

Como em (4), a direção **d melhora a função objetivo**, em primeira ordem, se **$\nabla f(x)^T d < 0$** .

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

A direção d mantém viabilidade se

$$c_1(x) + \nabla c_1(x)^T d \geq 0. \quad (8)$$

Para determinar se uma direção d satisfaz (5) e (8), vamos considerar **dois casos**:

- 1 x está estritamente no interior do círculo.
- 2 x está na borda do círculo.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

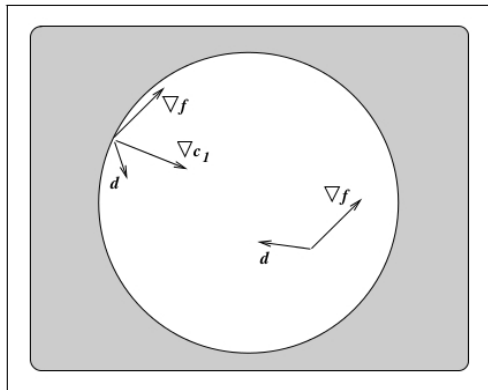


Figura : Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade (Figura 12.4 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

Se x está estritamente no interior do círculo, temos que $c_1(x) > 0$.

Neste caso, qualquer direção d satisfaz (8), dado que seu tamanho seja suficientemente pequeno.

Em particular, sempre que $\nabla f(x) \neq 0$, podemos obter uma direção d que satisfaz tanto (5) como (8) fazendo

$$d = -c_1(x) \frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}.$$

Esta direção não existe apenas quando $\nabla f(x) = 0$.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

Se x está na borda do círculo, temos que $c_1(x) = 0$.

Neste caso, as condições (5) e (8) se tornam

$$\nabla f(x)^T d < 0, \quad \nabla c_1(x)^T d \geq 0.$$

A primeira destas condições define um semi-espaço aberto e a segunda define um semi-espaço fechado.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

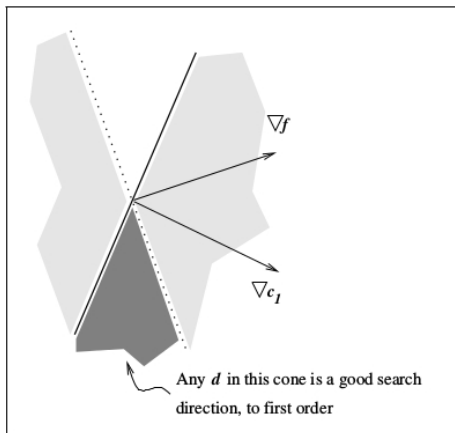


Figura : Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade (Figura 12.5 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

Podemos verificar que estas duas regiões não se intersectam apenas quando $\nabla f(x)$ e $\nabla c_1(x)$ apontam para a mesma direção. Ou seja, quando

$$\nabla f(x) = \lambda_1 \nabla c_1(x), \text{ para algum } \lambda_1 \geq 0.$$

Note que o sinal do multiplicador é importante neste caso.

Se a condição (5) fosse satisfeita para um valor negativo de λ_1 , $\nabla f(x)$ e $\nabla c_1(x)$ apontariam para direções opostas. Neste caso, as direções que satisfazem as condições (5) e (8) formam um semi-plano aberto.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

As condições de otimalidade tanto para o caso 1 (x no interior da região viável) como para o caso 2 (x na borda da região viável) podem ser resumidas usando a função Lagrangiana.

Quando não existe uma direção de descida de primeira ordem viável a partir de um ponto x^* , temos que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda_1^*) = 0, \text{ para algum } \lambda_1^* \geq 0.$$

(9)

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

Também pedimos que

$$\lambda_1^* c_1(x^*) = 0. \quad (10)$$

Esta condição é conhecida como **condição de complementaridade**.

Ela implica que os multiplicadores de Lagrange λ_1 podem ser **estritamente positivos apenas quando a restrição correspondente é ativa**.

Exemplo de problema com uma restrição de desigualdade

No **primeiro caso**, temos que $c_1(x^*) > 0$. Então (10) pede que $\lambda_1^* = 0$.

Portanto, por (9), temos que $\nabla f(x^*) = 0$, como queríamos.

No **segundo caso**, (10) permite que λ_1^* seja negativo, o que faz com que (9) seja equivalente a (6).

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Considere agora uma variação do exemplo (7):

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) = x_1 + x_2 \\ \text{Sujeita a} & c_1(x) = 2 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0, \\ & c_2(x) = x_2 \geq 0. \end{array} \quad (11)$$

Neste caso, temos $\mathcal{E} = \emptyset$ e $\mathcal{I} = \{1, 2\}$.

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

O conjunto viável é composto pelos pontos com $x_2 \geq 0$ que pertencem ao círculo centrado na origem e de raio $\sqrt{2}$.

A **solução** para este problema é $x^* = (-\sqrt{2}, 0)^T$. Neste ponto, **ambas as restrições são ativas**.

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

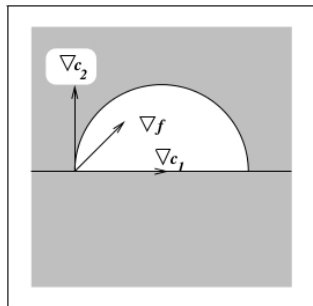


Figura : Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade (Figura 12.6 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Pelos argumentos usados nos exemplos anteriores, concluímos que uma direção d é viável e de descida, em primeira ordem, se d satisfaz as condições

$$\nabla f(x)^T d < 0, \quad \nabla c_i(x)^T d \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}. \quad (12)$$

É fácil ver que nenhuma direção que satisfaz estas condições pode ser encontrada em $x = (-\sqrt{2}, 0)^T$.

As condições $\nabla c_i(x)^T d \geq 0$, $i = 1, 2$, são ambas satisfeitas apenas quando d está no quadrante definido por $\nabla c_1(x)$ e $\nabla c_2(x)$. Mas todo vetor d neste quadrante satisfaz $\nabla f(x)^T d \geq 0$.

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

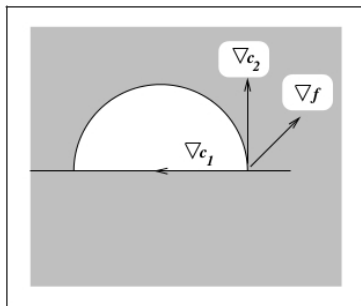


Figura : Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade (Figura 12.7 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Vejam agora como a função Lagrangiana e sua derivada se comportam no problema (11) e na solução $(-\sqrt{2}, 0)^T$.

Primeiramente, incluímos um termo adicional $\lambda_i c_i(x)$ na função Lagrangiana para cada restrição adicional. Temos então

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda_1 c_1(x) - \lambda_2 c_2(x),$$

onde $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)^T$ é o vetor de multiplicadores de Lagrange.

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

A extensão da condição (9), neste caso, é

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0, \quad \text{para algum } \lambda^* \geq 0. \quad (13)$$

A inequação $\lambda^* \geq 0$ diz que **todas as componentes de λ^* devem ser não-negativas.**

A condição de complementaridade para ambas as restrições é

$$\lambda_1^* c_1(x^*) = 0, \quad \lambda_2^* c_2(x^*) = 0. \quad (14)$$

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Para $x^* = (-\sqrt{2}, 0)^T$, temos que

$$\nabla f(x^*) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} 2\sqrt{2} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_2(x^*) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

É fácil verificar que, usando $\lambda^* = (1/(2\sqrt{2}), 1)^T$, temos que $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0$ e $\lambda^* \geq 0$.

Além disso, como $c_1(x^*) = 0$ e $c_2(x^*) = 0$, **valem as condições de complementaridade.**

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Vamos considerar agora outros pontos viáveis do problema (11) que não são solução e analisar as propriedades da função Lagrangiana e de seu gradiente nestes pontos.

Tomando o ponto $x = (\sqrt{2}, 0)^T$, temos novamente que **ambas as restrições são ativas**.

No entanto, o gradiente da função objetivo $\nabla f(x)$ não mais fica no quadrante definido pelas condições $\nabla c_i(x)^T d \geq 0$, $i = 1, 2$.

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Uma das **direções viáveis de descida** de primeira ordem a partir deste ponto (ou seja, um vetor d que satisfaz (12)) é $d = (-1, 0)^T$.

Para este valor de x é fácil verificar a condição $\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = 0$ é satisfeita apenas **quando** $\lambda = (-1/(2\sqrt{2}), 1)^T$.

Note que a primeira componente de λ é negativa, então a **condição (13) não é satisfeita para x** .

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Analisemos agora o ponto $x = (1, 0)^T$, para o qual apenas a segunda restrição do problema (11) é ativa.

Neste ponto, a linearização de f e c fornece as seguintes condições para que uma direção d seja viável e de descida em primeira ordem

$$c_1(x) + \nabla c_1(x)^T d \geq 0, \quad c_2(x) + \nabla c_2(x)^T d \geq 0, \quad \nabla f(x)^T d < 0.$$

(15)

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

A primeira desigualdade se torna

$$1 + \nabla c_1(x)^T d \geq 0,$$

que pode ser satisfeita para qualquer d multiplicado por um escalar positivo suficientemente pequeno.

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Como

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_2(x) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

é fácil verificar que $d = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right)^T$ satisfaz (15) e é, portanto, uma direção viável de descida.

Exemplo de problema com duas restrições de desigualdade

Para verificar que x não satisfaz as condições de otimalidade (13) e (14), note que, como $c_1(x) > 0$, temos que $\lambda_1 = 0$.

Portanto, para satisfazer $\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = 0$, precisamos encontrar λ_2 tal que $\nabla f(x) - \lambda_2 \nabla c_2(x) = 0$.

Como não existe um valor de λ_2 que satisfaça esta equação, o ponto x não satisfaz as condições de otimalidade.

Condições de otimalidade de primeira ordem

Os 3 exemplos apresentados sugerem algumas condições para a caracterização de soluções para problemas de minimização restrita (1).

Entre elas, $\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = 0$, a não-negatividade de λ_i para todas as restrições de desigualdade $c_i(x)$ e a condição de complementaridade $\lambda_i c_i(x) = 0$.

Vamos agora generalizar estas condições e definir as condições de otimalidade de primeira ordem de maneira mais rigorosa.

Condições de otimalidade de primeira ordem

Para o problema geral de minimização com restrições (1), a função Lagrangiana é dada por

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x).$$

O conjunto de (índices das) restrições ativas $\mathcal{A}(x)$, em qualquer ponto viável x , é a união do conjunto de (índices das) restrições de igualdade \mathcal{E} e os índices das restrições de desigualdade que valem por igualdade em x :

$$\mathcal{A}(x) = \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} \mid c_i(x) = 0\}$$

Condições de otimalidade de primeira ordem

O vetor $\nabla c_i(x)$ é comumente chamado de vetor normal à restrição $c_i(x)$, pois ele geralmente é perpendicular às curvas de nível de c_i em x e, no caso de restrições de desigualdade, ele aponta para o lado viável desta restrição.

No entanto, é possível que $\nabla c_i(x)$ se anule devido à representação algébrica de c_i .

Com isso, $\lambda_i \nabla c_i(x) = 0$ para todo valor de λ_i e não aparece no gradiente da função Lagrangiana $\nabla_x \mathcal{L}$.

Condições de otimalidade de primeira ordem

Por exemplo, se trocamos a restrição $c_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0$ pela restrição equivalente $c_1(x) = (x_1^2 + x_2^2 - 2)^2 = 0$ no exemplo (2), temos que $\nabla c_1(x) = 0$ para todo ponto viável x .

Em particular, a condição $\nabla f(x) = \lambda_1 \nabla c_1(x)$ não vale no ponto ótimo $(-1, -1)^T$.

Geralmente fazemos suposições chamadas **condições de qualificação de restrição** (*constraint qualifications*) para garantir que este tipo de comportamento degenerado não aconteça no ponto x em questão.

Condições de otimalidade de primeira ordem

Uma **condição de qualificação de restrição**, provavelmente a mais usada no desenvolvimento de algoritmos, é a seguinte:

Definição 1 (LICQ): *Dados um ponto x^* e o conjunto de restrições ativas $\mathcal{A}(x^*)$, dizemos que a condição de qualificação de restrição de independência linear (LICQ) vale se o conjunto dos gradientes das restrições ativas $\{\nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{A}(x^*)\}$ é linearmente independente.*

Note que, quando esta condição vale, **nenhum dos gradientes das restrições ativas pode ser nulo**.

Condições de otimalidade de primeira ordem

A **condição LICQ** nos permite definir **condições de otimalidade** para o problema de programação não-linear geral (1)

As condições a seguir são ditas de primeira ordem pois utilizam apenas informação do gradiente da função objetivo e das restrições.

Teorema 1 (Condições necessárias de primeira ordem):

Suponha que x^ seja uma solução local de (1) e que LICQ vale em x^* . Então, existe um vetor de multiplicadores de Lagrange λ^* , com componentes λ_i^* , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, tal que as seguintes condições são satisfeitas:*

$$\begin{aligned}\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) &= 0, \\ c_i(x^*) &= 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}, \\ c_i(x^*) &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}, \\ \lambda_i^* &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}, \\ \lambda_i^* c_i(x^*) &= 0, \quad \forall i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}.\end{aligned}\tag{16}$$

Condições necessárias de primeira ordem

As condições (16) são conhecidas como **condições Karush-Kuhn-Tucker**, ou **condições KKT**.

Como a complementaridade implica que os multiplicadores de Lagrange correspondentes às restrições de desigualdade inativas são zero, podemos omitir os termos com índices $i \notin \mathcal{A}(x^*)$ na primeira equação das condições KKT.

Ou seja, ela pode ser escrita como

$$0 = \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*).$$

Um caso especial de complementaridade é importante e merece uma definição.

Definição 2 (Complementaridade estrita): *Dada uma solução local x^* de (1) e um vetor λ^* que satisfaz (16), dizemos que vale a complementaridade estrita se exatamente um dos λ_i^* e $c_i(x^*)$ é zero para cada índice $i \in \mathcal{I}$. Em outras palavras, temos que $\lambda^* > 0$ para todo $i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)$.*

Condições necessárias de primeira ordem

Para um dado problema de programação não-linear (1) e uma solução x^* , vários vetores λ^* podem satisfazer as condições KKT (16).

No entanto, quando vale LICQ, o vetor λ^* ótimo é único.

Como exemplo, considere o problema

$$\text{Minimizar } f(x) = \left(x_1 - \frac{3}{2}\right)^2 + \left(x_2 - \frac{1}{8}\right)^4$$

$$\text{Sujeita a } c_1(x) = 1 - x_1 - x_2 \geq 0,$$

$$c_2(x) = 1 - x_1 + x_2 \geq 0,$$

$$c_3(x) = 1 + x_1 - x_2 \geq 0,$$

$$c_4(x) = 1 + x_1 + x_2 \geq 0.$$

(17)

A **solução** para este problema é $x^* = (1, 0)^T$.

Condições necessárias de primeira ordem

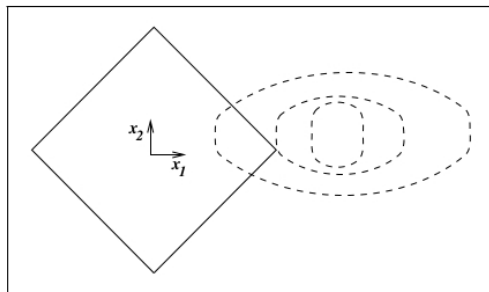


Figura : Exemplo de problema com restrições de desigualdade (Figura 12.8 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Condições necessárias de primeira ordem

As duas primeiras restrições são ativas em x^* . Temos então que

$$\nabla f(x^*) = \begin{bmatrix} -1 \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_2(x^*) = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Portanto, as condições KKT são satisfeitas com

$$\lambda^* = \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0, 0\right)^T.$$

Condições de otimalidade de segunda ordem

Para definir as condições de otimalidade de segunda ordem, precisamos definir o conjunto $F_2(\lambda^*)$:

$$w \in F_2(\lambda^*) \Leftrightarrow \begin{cases} \nabla c_i(x^*)^T w = 0, & \forall i \in \mathcal{E}, \\ \nabla c_i(x^*)^T w = 0, & \forall i \in \mathcal{A} \cap \mathcal{I} \text{ com } \lambda_i^* > 0, \\ \nabla c_i(x^*)^T w \geq 0, & \forall i \in \mathcal{A} \cap \mathcal{I} \text{ com } \lambda_i^* = 0, \end{cases}$$

com x^* e λ^* que satisfazem as condições KKT (16).

Condições de otimalidade de segunda ordem

O conjunto $F_2(\lambda^*)$ contém as direções w que tendem a “aderir” às restrições de igualdade e às restrições de desigualdade ativas para as quais o multiplicador de Lagrange é positivo.

Com esta definição, podemos definir as condições necessárias e suficientes de segunda ordem para solução do problema (1).

Teorema 2 (Condições necessárias de segunda ordem):

Suponha que x^ seja uma solução local de (1) e que LICQ vale em x^* . Seja λ^* o vetor de multiplicadores de Lagrange tal que as condições KKT (16) são satisfeitas e seja $F_2(\lambda^*)$ definido como anteriormente. Então*

$$w^T \nabla_{xx} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w \geq 0, \quad \forall w \in F_2(\lambda^*).$$

Teorema 3 (Condições suficientes de segunda ordem):

Suponha que, para um ponto viável $x^ \in \mathbf{R}^n$, exista um vetor de multiplicadores de Lagrange λ^* tal que as condições KKT (16) são satisfeitas. Suponha também que*

$$w^T \nabla_{xx} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) w > 0, \quad \forall w \in F_2(\lambda^*), \quad w \neq 0.$$

Então, x^ é uma solução local estrita.*