# IFT 3515 Fonctions à plusieurs variables Optimisation avec contraintes Conditions d'optimalité – 2<sup>e</sup> ordre

Fabian Bastin DIRO Université de Montréal

#### Contexte

Notes partiellement basées sur http://www.numerical.rl.ac.uk/people/nimg/course/ lectures/raphael/lectures/lec10slides.pdf

Nous considérons à nouveau le problème d'optimisation nonlinéaire (PNL) général

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$
t.q.  $g_i(x) = 0, \ i \in \mathcal{E}$ 
 $g_i(x) \leq 0, \ i \in \mathcal{I}$ 

Hypothèse : f et  $g_i$  ( $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ ) sont des fonctions deux fois continûment différentiables.

# Chemin de sortie réalisable : rappel

#### **Définition**

Soit  $x^* \in \mathbb{R}^n$  un point réalisable pour le problème de PNL et définissons  $x \in C^2((-\epsilon, \epsilon), \mathbb{R}^n)$  un chemin tel que

$$egin{aligned} x(0) &= x^* \ d &:= rac{d}{dt} x(0) 
eq 0 \ g_i(x(t)) &= 0, \ i \in \mathcal{E}, \ t \in (-\epsilon, \epsilon) \ g_i(x(t)) &\leq 0, \ i \in \mathcal{I}, \ t \in [0, \epsilon) \end{aligned}$$

x(t) est un chemin de sortie réalisable à partir de  $x^*$  et le vecteur tangent  $d = \frac{d}{dt}x(0)$  est une direction de sortie réalisable à partir de  $x^*$ .

# Optimalité au second ordre

L'analyse d'optimalité au second ordre est basée sur l'observation suivante : si  $x^*$  est un minimiseur local du problème de PNL et x(t) est un chemin de sortie réalisable à partir de  $x^*$ , alors  $x^*$  doit aussi être un minimiseur local pour le problème d'optimisation sous contraintes avec une variable

$$\min_t f(x(t)) \text{ t.q. } t \geq 0.$$

Analysons d'avantage les directions de sortie réalisables à partir de  $x^*$ . La définition implique

$$d^{\mathsf{T}} \nabla g_i(x^*) = \frac{d}{dt} g_i(x(t))|_{t=0} = \begin{cases} \frac{d}{dt} 0 = 0 & i \in \mathcal{E} \\ \lim_{t \to 0^+} \frac{g_i(x(t)) - 0}{t} & i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \end{cases}$$

#### Conditions nécessaires

Dès lors, les conditions suivantes sont nécessaires pour que  $d \in \mathbb{R}^n$  soit une direction de sortie réalisable à partir de  $x^*$ :

$$d \neq 0$$

$$d^{T} \nabla g_{i}(x^{*}) = 0, i \in \mathcal{E}$$

$$d^{T} \nabla g_{i}(x^{*}) \leq 0, i \in \mathcal{A}(x^{*}) \cap \mathcal{I}$$

#### Conditions suffisantes

D'autre part, si la LICQ tient en  $x^*$ , du Lemme sur la LICQ, nous avons l'existence d'un chemin de sortie réalisable x(t) à partir de  $x^*$  tel que

$$x(0) = x^*$$

$$\frac{d}{dt}x(0) = d$$

$$g_i(x(t)) = td^T \nabla g_i(x^*), i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*), t \in (-\epsilon, \epsilon)$$

Dès lors, lorsque la LICQ tient, les conditions nécessaires sur d sont aussi suffisantes, et fournissent par conséquent une caractérisation exacte pour que d soit une direction de sortie réalisable à partir de  $x^*$ .

Soit  $x^*$  un minimum local tel que la LICQ tienne. Les conditions KKT indiquent qu'il existe un vecteur de multiplicateurs de Lagrange  $\lambda^*$  tel que

$$\nabla_{x}L(x^{*},\lambda^{*}) = 0$$

$$g_{i}(x^{*}) = 0, i \in \mathcal{E}$$

$$g_{i}(x^{*}) \leq 0, i \in \mathcal{I}$$

$$\lambda_{i}^{*}g_{i}(x^{*}) = 0, i \in \mathcal{I}$$

$$\lambda_{i}^{*} \geq 0, i \in \mathcal{I}$$

οù

$$L(x^*, \lambda) = f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{T}} \lambda_i^* g_i(x^*).$$

Soit x(t) un chemin de sortie réalisable à partir de  $x^*$  avec la direction de sortie d, et considérons le problème restreint

min 
$$f(x(t))$$
  
t.g.  $t > 0$ .

Puisque  $x^*$  est un minimiseur local du problème de PNL, t=0 doit aussi être un minimiseur local du problème restreint. Du développement de Taylor autour de t=0 et des conditions KKT.

$$f(x(t)) = f(x(0)) + (t - 0)\frac{d}{dt}f(x(t))|_{t=0} + O(t^{2})$$

$$= f(x^{*}) + t\left(\frac{d}{dt}x(t)|_{t=0}\right)^{T} \nabla_{x}f(x(t))|_{t=0} + O(t^{2})$$

$$= f(x^{*}) + td^{T}\nabla f(x^{*}) + O(t^{2})$$

$$= f(x^{*}) - t\sum_{i \in \mathcal{E} \cap \mathcal{T}} \lambda_{i}^{*}d^{T}\nabla g_{i}(x^{*}) + O(t^{2})$$

Nous souhaiterions dès lors montrer que pour  $t \ge 0$  assez petit,

$$-t\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i^*d^T\nabla g_i(x^*)+O(t^2)\geq 0$$

Notons que

$$\lambda_i^* d^T \nabla g_i(x^*) = 0, \ i \in \mathcal{E} \cup (\mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(x^*))$$

de sorte que ces termes peuvent être omis.

Mais qu'en est-il des indices  $j \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ ? Nous savons déjà que  $\lambda_i^* d^T \nabla g_i(x^*) \leq 0, \ i \in \mathcal{A}(x^*).$ 

Nous allons distinguer deux cas.

Cas 1 : il existe un indice  $j \in \mathcal{A}(x^*)$  tel que  $\lambda_j^* d^T \nabla g_j(x^*) < 0$ .

Alors, pour tout  $0 < t \ll 1$ ,

$$f(x(t)) = f(x^*) - t \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* d^T \nabla g_i(x^*) + O(t^2)$$
  
 
$$\geq f(x^*) - t \lambda_j^* d^T \nabla g_j(x^*) + O(t^2)$$
  
 
$$> f(x^*)$$

Dès lors, dans ce cas, f est strictement croissante le long du chemin x(t) pour t suffisamment petit, même si  $\frac{d^2}{dt^2}f(x(0))$  était négatif.

Cas 2:

$$\lambda_i^* d^T \nabla g_i(x^*) = 0, \ i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}.$$

Dans ce cas, l'argument précédent ne peut garantir que f est localement croissante le long du chemin x(t). Nous savons seulement que  $\frac{d}{dt}f(x(0))=0$ , c'est-à-dire que  $x^*$  est un point stationnaire du problème restreint.

Mais il pourrait très bien s'agir d'un maximiseur local ou d'un point selle du problème restreint!

Les dérivée secondes  $\frac{d^2}{dt^2}f(x(0))$  déterminent à présent si t=0 est un minimiseur local du problème restreint, conduisant à une information additionnelle nécessaire.

Nous noterons

$$N^{+} = \left\{ d \neq 0 \middle| \begin{array}{l} d^{T} \nabla g_{i}(x^{*}) = 0, & i \in \mathcal{E} \cup \{j \in \mathcal{A}(x^{*}) \cap \mathcal{I} \mid \lambda_{j}^{*} > 0\} \\ d^{T} \nabla g_{i}(x^{*}) \leq 0, & \{i \in \mathcal{A}(x^{*}) \cap \mathcal{I} \mid \lambda_{i}^{*} = 0\} \end{array} \right\}$$

Dès lors,  $d \in N^+$  implique  $\lambda_i^* d^T \nabla g_i(x^*) = 0$ ,  $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ .

# Théorème (Conditions nécessaires d'optimalité au second ordre)

Soit  $x^*$  un minimiseur local du PNL où la LICQ tient. Soit  $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$  un vecteur de multiplicateurs de Lagrange tel que  $(x^*, \lambda^*)$  satisfaisant les conditions KKT. Alors nous avons

$$d^T \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*) d \ge 0$$

pour tout  $d \in N^+$ .



Soit  $d \in N^+$  et soit  $x(\cdot) \in C^2((-\epsilon, \epsilon), \mathbb{R}^n)$  un chemin de sortie réalisable à partir de  $x^*$  correspondant à d. Alors

$$L(x(t), \lambda^*) = f(x(t)) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* g_i(x(t))$$
$$= f(x(t)) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* t d^T \nabla g_i(x^*)$$
$$= f(x(t))$$

Le développement de Taylor de  $L(x(t), \lambda^*)$  autour de t=0 implique

$$f(x(t)) = L(x^*, \lambda^*) + t \nabla_x L(x^*, \lambda^*)^T d + \frac{t^2}{2} \left( d^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d + \nabla_x L(x^*, \lambda^*)^T \frac{d^2}{dt^2} x(t)|_{t=0} \right) + O(t^3)$$

Les conditions KKT impliquent

$$\nabla_{\mathsf{x}} \mathsf{L}(\mathsf{x}^*, \lambda^*) = 0$$

Dès lors

$$f(x(t)) = L(x^*, \lambda^*) + \frac{t^2}{2} d^T \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*) d + O(t^3)$$

et par les conditions d'optimalité au premier ordre (dans le cas convexe, la dualité forte),  $L(x^*, \lambda^*) = f(x^*)$ 

Si  $d^T \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*) d < 0$  alors pour t suffisamment petit,  $f(x(t)) < f(x^*)$ , contredisant l'hypothèse que  $x^*$  est un minimiseur local.

Dès lors, nous devons avoir

$$d^T \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*) d \geq 0$$



## Conditions suffisantes d'optimalité au second ordre

Théorème (Conditions suffisantes d'optimalité au second ordre)

Soit  $(x^*, \lambda^*) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$  satisfaisant les conditions KKT, et sous une hypothèse de qualification de contrainte, si

$$d^{\mathsf{T}}\nabla^2_{xx}L(x^*,\lambda^*)d>0$$

pour toute direction  $d \in N^+$ . Alors  $x^*$  est un minimiseur local strict.

Supposons par contradiction que  $x^*$  n'est pas un minimiseur local. Il existe alors une séquence de points réalisables  $\{x_k\}$ ,  $k=1,\ldots$ , telle que  $x_k \neq x^*$  pour tout k,  $\lim_{k \to \infty} x_k = x^*$  et

$$f(x_k) \leq f(x^*), \ \forall k \in \mathbb{N}.$$

La séquence

$$\frac{x_k - x^*}{\|x_k - x^*\|}$$

tient sur la sphère unité, qui est un ensemble compact, et dès lors nous pouvons extraire une sous-séquence  $\{x_{k_i}\}$ ,  $i \in \mathbb{N}$ ,  $k_i < k_j$  (i < j), tel qu'il existe une direction limite  $d := \lim_{k \to \infty} d_{k_i}$  existe, avec

$$d_{k_i} = \frac{x_{k_i} - x^*}{\|x_{k_i} - x^*\|}$$

Puisque d tient sur la sphère unité, nous avons  $d \neq 0$ . En ne considérant que la sous-séquence ainsi construite, nous pouvons supposer sans perte de généralité que  $k_i = i$ .

Vérifions que  $d \in N^+$ . Considérons tout d'abord les contraintes d'égalité.  $\forall i \in \mathcal{E}$ , en utilisant le développement de Taylor, nous avons

$$0 = \frac{g_i(x_k)}{\|x_k - x^*\|}$$

$$= \frac{1}{\|x_k - x^*\|} \left( g_i(x^*) + \|x_k - x^*\| \nabla g_i(x^*)^T d_k + O(\|x_k - x^*\|^2) \right)$$

$$= \nabla g_i(x^*)^T d_k + O(\|x_k - x^*\|)$$

En faisant tendre k vers l'infini, nous obtenons

$$\nabla g_i(x^*)^T d_k = 0$$

 $\forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ , en utilisant le développement de Taylor, nous avons de manière similaire

$$0 \ge \frac{g_i(x_k)}{\|x_k - x^*\|}$$

$$= \frac{1}{\|x_k - x^*\|} \left( g_i(x^*) + \|x_k - x^*\| \nabla g_i(x^*)^T d_k + O(\|x_k - x^*\|^2) \right)$$

$$= \nabla g_i(x^*)^T d_k + O(\|x_k - x^*\|)$$

En faisant tendre k vers l'infini, nous obtenons

$$\nabla g_i(x^*)^T d \leq 0$$

Ainsi, d est une direction de sortie réalisable. Montrons que  $d \in N^+$ .

Si  $d \notin N^+$ , alors  $\exists j \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$  tel que

$$\lambda_j^* \nabla g_j(x^*)^T d < 0$$

En vertu du développement de Taylor,

$$\lambda_{j}^{*}g_{j}(x_{k}) = \lambda_{j}^{*}g_{j}(x^{*}) + \lambda_{j}^{*}\|x_{k} - x^{*}\|\nabla g_{j}(x^{*})^{T}d_{k} + O(\|x_{k} - x^{*}\|^{2})$$
$$= \lambda_{j}^{*}\|x_{k} - x^{*}\|\nabla g_{i}(x^{*})^{T}d_{k} + O(\|x_{k} - x^{*}\|^{2})$$

Dès lors

$$L(x_{k}, \lambda^{*}) = f(x_{k}) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_{i}^{*} g_{i}(x_{k})$$

$$\leq f(x_{k}) + \lambda_{j}^{*} g_{j}(x_{k})$$

$$= f(x_{k}) + \lambda_{i}^{*} ||x_{k} - x^{*}|| \nabla g_{i}(x^{*})^{T} d_{k} + O(||x_{k} - x^{*}||^{2})$$

D'autre part, le développement de Taylor de  $L(x_k, \lambda^*)$  autour de  $(x^*, \lambda^*)$  donne

$$L(x_k, \lambda^*) = L(x^*, \lambda^*) + ||x_k - x^*|| d_k^T \nabla_x L(x^*, \lambda^*)$$
  
+ 
$$\frac{||x_k - x^*||^2}{2} d_k^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d_k + O(||x_k - x^*||^3)$$

De part les conditions KKT,  $\nabla_x L(x^*, \lambda^*) = 0$  et  $L(x^*, \lambda^*) = f(x^*)$ . Dès lors, nous obtenons

$$L(x_k, \lambda^*) = f(x^*) + \frac{\|x_k - x^*\|^2}{2} d_k^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d_k + O(\|x_k - x^*\|^3)$$

En combinant ces expressions,

$$f(x_k) \ge L(x_k, \lambda^*) - \lambda_j^* ||x_k - x^*|| \nabla g_i(x^*)^T d_k + O(||x_k - x^*||^2)$$
  
=  $f(x^*) - \lambda_j^* ||x_k - x^*|| \nabla g_i(x^*)^T d_k + O(||x_k - x^*||^2)$ 

et pour k assez grand,  $f(x_k) > f(x^*)$  contredisant nos hypothèses de travail.



Ainsi  $d \in N^+$ , et des hypothèses du théorème, nous avons

$$d^T \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*) d > 0.$$

D'autre part, des conditions KKT et  $d \in N^+$ ,

$$\nabla f(x^*)^T d = -d^T \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i \nabla g_i(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i (-d^T \nabla g_i(x^*)) = 0$$

De plus, de nos hypothèses de départ et des conditions KKT,

$$f(x^*) \ge f(x_k) \ge f(x_k) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* g_i(x_k) = L(x_k, \lambda^*)$$

et, reprenant le développement de  $L(x_k, \lambda^*)$ 

$$f(x^*) \ge f(x^*) + \frac{\|x_k - x^*\|^2}{2} d_k^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d_k + O(\|x_k - x^*\|^3)$$



Il s'ensuit

$$d_k^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d_k \le O(\|x_k - x^*\|)$$

en passant à la limite comme  $k \to \infty$ 

$$d^T \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*) d \le 0$$

Ceci contredit l'hypothèse du théorème

$$d^T \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*) d > 0$$

et donc l'hypothèse d'existence de la séquence  $\{x_k\}$  ne tient pas. Dès lors,  $x^*$  est minimiseur local.

# Complémentarité stricte

Il est courant, et commode, de supposer que la condition de complémentarité stricte s'applique. Celle-ci requiert que le multiplicateur de Lagrange ne peut s'annuler pour une contrainte active, i.e.

$$\lambda_j^* \neq 0 \ \forall j \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$$

La complémentarité stricte permet de réexprimer  $N^+$  de manière très commode. Rappelons que

$$N^{+} = \left\{ d \neq 0 \middle| \begin{array}{l} d^{T} \nabla g_{i}(x^{*}) = 0, & i \in \mathcal{E} \cup \{j \in \mathcal{A}(x^{*}) \cap \mathcal{I} \mid \lambda_{j}^{*} > 0\} \\ d^{T} \nabla g_{i}(x^{*}) \leq 0, & \{i \in \mathcal{A}(x^{*}) \cap \mathcal{I} \mid \lambda_{i}^{*} = 0\} \end{array} \right\}$$

sous la complémentarité stricte, nous avons

$$N^{+} = \left\{ d \neq 0 \mid d^{T} \nabla g_{i}(x^{*}) = 0, i \in \mathcal{A}(x^{*}) \right\}$$

# Complémentarité stricte

Autrement dit, d appartient au noyau du Jacobien des contraintes actives :

$$d \in Ker(J), \ J = (\nabla g_i(x^*)^T, i \in A(x^*))$$

Comme

$$d \in N^+ \Rightarrow \lambda_i^* d^T \nabla g_i(x^*) = 0, \ i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I},$$

nous avons également

$$d \in N^+ \Leftrightarrow \lambda_i^* d^T \nabla g_i(x^*) = 0, \ i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I},$$