

IFT 3515
Fonctions à plusieurs variables
Optimisation avec contraintes
Conditions d'optimalité

Fabian Bastin
DIRO
Université de Montréal

Multiplicateurs de Lagrange : contraintes d'égalité

Considérons le problème de programmation mathématique suivant

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathcal{X}} f(x) \\ \text{t.q. } g_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

où $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$.

Le **Lagrangien** associé à ce problème est obtenu en associant un multiplicateur de Lagrange λ_i à chaque fonction de contrainte g_i :

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x).$$

Sans faire d'hypothèse particulière sur \mathcal{X} ou sur les fonctions f et g_i , nous pouvons obtenir des conditions très générales pour qu'un point x^* soit une solution optimale du problème.

Optimalité

Théorème

Supposons que le Lagrangien associé au problème

$$\min_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

$$\text{t.q. } g_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

possède un minimum local $x^ \in \mathcal{X}$ lorsque le vecteur de multiplicateurs λ vaut λ^* . Si $g_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$, alors x^* est un minimum local de $f(x)$.*

Optimalité

Démonstration.

La preuve se fait par contradiction en supposant que x^* n'est pas un minimum local de $f(x)$. Alors $\forall \epsilon > 0, \exists \bar{x} \in \mathcal{B}(x^*, \epsilon)$ tel que $g_i(\bar{x}) = 0, i = 1, \dots, m$ et $f(\bar{x}) < f(x^*)$.

Par conséquent, pour tout λ ,

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\bar{x}) = 0.$$

Dès lors,

$$f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\bar{x}) < f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x^*).$$

En prenant $\lambda = \lambda^*$, la relation précédente contredit le fait que est un minimum local du Lagrangien lorsque $\lambda = \lambda^*$.

Multiplicateurs de Lagrange : contraintes d'inégalité

Considérons le problème de programmation mathématique suivant

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathcal{X}} f(x) \\ \text{t.q. } g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

où $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$.

Théorème

Supposons que le Lagrangien associé au problème

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathcal{X}} f(x) \\ \text{t.q. } g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

possède un minimum local $x^ \in \mathcal{X}$ lorsque le vecteur de multiplicateurs λ vaut λ^* . Si $g_i(x^*) = 0$, $\lambda_i^* \geq 0$, et $\lambda_i^* g_i(x^*) = 0$, $i = 1, \dots, m$ alors x^* est un minimum local de $f(x)$.*

Multiplicateurs de Lagrange : contraintes d'inégalité

Démonstration.

Comme précédemment, la preuve se fait par contradiction en supposant que x^* n'est pas un minimum local de $f(x)$. Alors $\forall \epsilon > 0, \exists \bar{x} \in \mathcal{B}(x^*, \epsilon)$ tel que $g_i(\bar{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m$ et $f(\bar{x}) < f(x^*)$. Par conséquent, pour $\lambda = \lambda^* \geq 0$,

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\bar{x}) \leq 0 \text{ et } \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x^*) = 0.$$

Dès lors,

$$f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\bar{x}) < f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x^*).$$

La relation précédente contredit le fait que est un minimum local du Lagrangien lorsque $\lambda = \lambda^*$.

Généralisation

Considérons à présent un problème ayant des contraintes d'égalité et d'inégalité :

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ \text{t.q. } g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, r \end{aligned}$$

Nous définissons le Lagrangien comme

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{i=1}^r \mu_i h_i(x)$$

et la fonction duale lagrangienne

$$\mathcal{L}(\lambda, \mu) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \lambda, \mu)$$

Problème dual

Le problème dual est

$$\begin{aligned} \max_{\lambda \in \mathbb{R}^m, \mu \in \mathbb{R}^r} \quad & \mathcal{L}(\lambda, \mu) \\ \text{tel que} \quad & \lambda \geq 0. \end{aligned}$$

Propriétés importantes :

- Le problème dual est toujours convexe, i.e. \mathcal{L} est toujours concave (même si la problème primal n'est pas convexe).
- Les valeurs optimales (globales) primale et duale, f^* et \mathcal{L}^* , satisfont toujours la dualité faible : $f^* \geq \mathcal{L}^*$.
- **Condition de Slater** : pour un problème primal convexe, s'il existe un x tel que $g_i(x) < 0$, $i = 1, \dots, m$ et $h_i(x) = 0$, $i = 1, \dots, r$, alors la dualité forte tient : $f^* = \mathcal{L}^*$ (admis dans le cadre de ce cours).

Saut de dualité

Étant donné une solution primale réalisable x et une solution duale réalisable (λ, μ) , la quantité $f(x) - \mathcal{L}(\lambda, \mu)$ est appelé le saut de dualité entre x et (λ, μ) . Notons que

$$f(x) - f^* \leq f(x) - \mathcal{L}(\lambda, \mu)$$

de sorte que si le saut de dualité est nul, alors x est optimal primal (et similairement, λ et μ sont optimaux duaux).

D'un point de vue algorithmique, dans le cas convexe, ceci fournit un critère d'arrêt : si $f(x) - \mathcal{L}(\lambda, \mu) \leq \epsilon$, nous avons alors la garantie que $f(x) - f^* \leq \epsilon$.

Conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

Étant donné le problème général

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} & f(x) \\ \text{t.q.} & g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, r \end{aligned}$$

les conditions de Karush-Kuhn-Tucker, ou conditions KKT, sont :

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x, \lambda, \mu) &= 0 && \text{(stationarité)} \\ \lambda_i g_i(x) &= 0 && \text{(écarts de complémentarités)} \\ g_i(x) \leq 0, h_j(x) = 0 &\forall i, j && \text{(faisabilité primale)} \\ \lambda_i &\geq 0 \forall i && \text{(faisabilité duale)} \end{aligned}$$

Dans le cas non convexe, seule la dualité faible est garantie.

Nécessité cas convexe

Soit x^* , (λ^*, μ^*) , des solutions globales primale et duale, avec un saut de dualité nul (la dualité forte tient). Alors

$$\begin{aligned} f(x^*) &= \mathcal{L}(\lambda^*, \mu^*) \\ &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left(f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* h_i(x) \right) \\ &\leq f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* h_i(x^*) \\ &\leq f(x^*) \end{aligned}$$

Dès lors, x^* est un minimum (global) de $L(x, \lambda^*, \mu^*)$ sur \mathbb{R}^n .

Par conséquent, $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = 0$. Nous retrouvons les conditions de stationarité.

Nous devons aussi avoir $\sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) = 0$ puisque

$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) \geq 0$. Ceci implique que pour tout i , $\lambda_i^* g_i(x^*) = 0$.

Nous retrouvons les conditions de complémentarité.

Nécessité

Théorème (Nécessité des conditions KKT)

Si x^ , (λ^*, μ^*) sont des solutions primale et duale, avec un saut de dualité nul (la dualité forte tient), alors x^* , (λ^*, μ^*) satisfont les conditions KKT.*

Dans le cas non-convexe, le saut de dualité n'est pas nécessairement nul. Les conditions KKT restent toutefois nécessaires, sous certaines hypothèses de qualification de contraintes. La plus courante, mais aussi la plus forte, est la condition d'indépendance linéaire des gradients à la solution.

Nécessité (cas non convexe)

Théorème (Nécessité des conditions KKT)

Si x^ est une solution locale de*

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathcal{X}} f(x) \\ \text{t.q. } g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, r, \end{aligned}$$

où les fonctions f , g_i et h_i , $i = 1, \dots, m$, sont continûment différentiables, et qu'une condition de qualification de contrainte tient en x^ . Alors, il existe un vecteur de multiplicateurs de Lagrange (λ^*, μ^*) tel que les conditions KKT sont satisfaites en (x^*, λ^*, μ^*) .*

Démonstration.

Preuve : technique ! Voir par exemple Nocedal & Wright, "Numerical Optimization", Section 12.4.

Suffisance des conditions KKT

S'il existent x^* , (λ^*, μ^*) satisfaisant les conditions KKT, alors

$$\begin{aligned} L(\lambda^*, \mu^*) &= f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* h_i(x^*) \\ &= f(x^*) \end{aligned}$$

Dès lors, le saut de dualité est nul (**dualité forte**) si

$L(\lambda^*, \mu^*) = \mathcal{L}(\lambda^*, \mu^*)$, ce qui est le cas si x^* est un minimum global de $\mathcal{L}(\lambda^*, \mu^*)$.

Dans le cas convexe, cela implique que x^* et (λ^*, μ^*) sont des solutions globales primale et duale, respectivement.

Dans la cas non-convexe, x^* est un minimum local, pas nécessairement global, voire un point-selle.

Contraintes linéaires

Revenons à la méthode de projection. Un autre cas important de contraintes relativement faciles à traiter sont les contraintes d'égalité

$$Ax = b$$

avec $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ de rang plein.

Nous pouvons généraliser le problème de projection de y sur l'ensemble

$$\mathcal{X} = \{x \mid Ax = b\}$$

en considérant la norme-2 ou la norme engendré par une matrice H définie positive

$$\min_x \frac{1}{2} \|y - x\|_H \text{ tel que } Ax = b.$$

Nous allons résoudre ce problème en utilisant les conditions d'optimalité de Karush-Kuhn-Tucker (KKT).

Projection sur contraintes linéaires

Considérons le problème

$$\min_x \frac{1}{2} \|y - x\|_H \text{ tel que } Ax = b.$$

Le problème est convexe, et satisfait la condition de Slater s'il existe au moins un point réalisable.

Les conditions KKT s'écrivent

$$\begin{aligned} \nabla_x \frac{1}{2} \langle y - x, H(y - x) \rangle + \nabla_x (Ax - b)^T \lambda &= 0 \\ Ax - b &= 0 \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} H(y - x) + A^T \lambda &= 0 \\ Ax &= b \end{aligned}$$

Projection sur contraintes linéaires

Le problème peut être réorganisé comme

$$\begin{aligned} Hx - A^T \lambda &= Hy \\ Ax + 0\lambda &= b \end{aligned}$$

donnant lieu au système linéaire

$$\begin{pmatrix} H & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ -\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Hy \\ b \end{pmatrix}$$

Si H est inversible, ce qui sera le cas dans nos problèmes comme nous prendrons H définie positive, nous pouvons résoudre le système en isolant x et en le substituant. Tout d'abord, nous avons

$$x = H^{-1}Hy + H^{-1}A^T \lambda = y + H^{-1}A^T \lambda$$

et donc

$$A \left(y + H^{-1}A^T \lambda \right) = b$$

Projection sur contraintes linéaires

On en tire

$$AH^{-1}A^T\lambda = b - Ay$$

puis, une fois λ déterminé

$$Hx = Hy + A^T\lambda$$

Application

Considérons le problème

$$\begin{aligned} \min_x & f(x) \\ \text{t.q.} & Ax = b \end{aligned}$$

J. B. Rosen, "The Gradient Projection Method for Nonlinear Programming. Part I. Linear Constraints", Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, 8(1), pp. 181-217, 1960.

Supposons que nous avons un point de départ x_0 tel que $Ax_0 = b$.
Nous souhaitons garder tous les itérés réalisables, i.e. $Ax_k = b$.

Étant donné la direction de recherche d_k , nous devons dès lors avoir $Ad_k = 0$

Projection de la plus forte pente

Considérons $d_k = -\nabla f(x_k)$.

De ce qui précède, en prenant $H = I$, et en notant \bar{d}_k la projection de d_k ,

$$\begin{aligned}\bar{d}_k &= d_k + A^T \lambda \\ &= d_k - A^T (AA^T)^{-1} A d_k \\ &= \left(I - A^T (AA^T)^{-1} A \right) d_k \\ &= - \left(I - A^T (AA^T)^{-1} A \right) \nabla f(x_k)\end{aligned}$$

Algorithme

- **Étape 0** Soit x_0 . Poser $k = 0$.
- **Étape 1** Calcul de la direction de recherche :

$$\bar{d}_k = - \left(I - A^T (AA^T)^{-1} A \right) \nabla f(x_k).$$

Si $\|\bar{d}_k\| = 0$, arrêt : x_k est optimal. Sinon, aller à l'étape 2.

- **Étape 2** Résoudre (approximativement)

$$\min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha \bar{d}_k)$$

Soit α_k la solution. Poser $x_{k+1} = x_k + \alpha_k \bar{d}_k$, et $k := k + 1$.
Retour à l'étape 1.

Remarques

Nous avons ici directement projeté la direction de recherche. Il est possible de montrer que \bar{d}_k est solution du problème

$$\begin{aligned} \min_d \quad & \nabla f(x_k)^T d \\ \text{t.q.} \quad & Ad = 0, \quad \|d\| = 1. \end{aligned}$$

L'article de Rosen considère le cas plus général de contraintes sous la forme

$$\begin{aligned} a_i x &= b_i, \quad i = 1, \dots, m_1 \\ a_i x &\leq b_i, \quad i = m_1 + 1, \dots, m \end{aligned}$$

L'algorithme doit alors considérer quelles sont les contraintes actives.

Ensemble actif

Définition (Ensemble actif)

L'ensemble actif $\mathcal{A}(x)$ du problème d'optimisation

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathcal{X}} f(x) \\ \text{t.q. } g_i(x) \leq 0, \quad i \in \mathcal{I} \\ h_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \end{aligned}$$

en un point réalisable x est l'ensemble des indices des contraintes d'égalité et l'ensemble des indices i des contraintes d'inégalité telles que $g_i(x) = 0$, c'est-à-dire

$$\mathcal{A}(x) = \mathcal{E} \cup \{i \mid g_i(x) = 0\}$$

LICQ

Définition (LICQ)

Étant donné le point x et l'ensemble actif $\mathcal{A}(x)$, nous disons que la qualification de contraintes d'indépendance linéaire (linear independence constraint qualification – LICQ) tient si l'ensemble des contraintes actives $\nabla_x c_i(x), i \in \mathcal{A}(x)$ est linéairement indépendant.

Lemme

Soit x^* un point du problème de programmation nonlinéaire où la LICQ tient et soit $d \in \mathbb{R}^n$ un vecteur tel que

$$d \neq 0$$

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

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

LICQ

Lemme (suite)

Alors pour $\epsilon > 0$ assez petit, il existe un chemin $x(\cdot) \in C^2((-\epsilon, \epsilon), \mathbb{R}^n)$ tel que

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

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

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

de sorte que

$$g_i(x(t)) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \quad t \in (-\epsilon, \epsilon)$$

$$g_i(x(t)) \leq 0, \quad i \in \mathcal{I}, \quad t \in [0, \epsilon)$$

Preuve

Soit $\ell = \#\mathcal{A}$. Puisque la LICQ tient, il est possible de choisir $Z \in \mathbb{R}^{(n-\ell) \times n}$ telle que

$$\begin{pmatrix} (\nabla g_i(x^*)^T, i \in \mathcal{A}(x^*)) \\ Z \end{pmatrix}$$

soit une matrice nonsingulière.

Soit une fonction $h : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ définie par

$$h(x, t) = \begin{pmatrix} (g_i(x), i \in \mathcal{A}(x^*)) - t (\nabla g_i(x^*)^T, i \in \mathcal{A}(x^*)) d \\ Z(x - x^* - td) \end{pmatrix}$$

La matrice jacobienne de h en $(x^*, 0)$ vaut

$$Dh(x^*, 0) = (D_x h(x^*, 0) \quad D_t h(x^*, 0))$$

Rappel : matrice jacobienne

Soit

$$F : \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} f_1(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_m(x_1, \dots, x_n) \end{pmatrix}.$$

La matrice jacobienne de F est

$$DF = \begin{pmatrix} \nabla_x^T f_1 \\ \vdots \\ \nabla_x^T f_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Si $n = m$, le jacobien de F est le déterminant de DF .

Preuve

Les éléments de

$$Dh(x^*, 0) = (D_x h(x^*, 0) \quad D_t h(x^*, 0))$$

sont

$$D_x h(x^*, 0) = \left(\begin{array}{c} (\nabla g_i(x^*))^T, i \in \mathcal{A}(x^*) \\ Z \end{array} \right)$$

et

$$D_t h(x^*, 0) = - \left(\begin{array}{c} (\nabla g_i(x^*))^T, i \in \mathcal{A}(x^*) \\ Z d \end{array} \right) d = -D_x h(x^*, 0) d$$

Puisque $D_x h(x^*, 0)$ est non singulier, le théorème des fonctions implicites implique que pour $\delta > 0$ assez petit, il existe une fonction unique $x \in C^2 : (-\delta, \delta) \rightarrow \mathbb{R}^n$ et un voisinage $\mathcal{V}(x^*)$ tel que pour $x \in \mathcal{V}(x^*)$, $t \in (-\delta, \delta)$,

$$h(x, t) = 0 \Leftrightarrow x = x(t)$$

Rappel : théorème des fonctions implicites

Soit $F \in C^k : \Omega \subseteq \mathcal{R}^n \times \mathcal{R}^p \rightarrow \mathcal{R}^p$, notée

$$F(x, y) = (F_1(x, y), F_2(x, y), \dots, F_p(x, y))$$

S'il existe (a, b) tel que $F(a, b) = 0$ et pour lequel le jacobien de $D_y F$ est non nul, alors

1. il existe un voisinage A de a dans \mathcal{R}^n et un voisinage B de b dans \mathcal{R}^p , une fonction $f \in C^k(A, B)$, tels que $A \times B \subseteq \Omega$ et que $\forall (x, y) \in A \times B$,

$$F(x, y) = 0 \Leftrightarrow y = f(x).$$

2. la matrice jacobienne de f au point x s'écrit

$$D_x f = -(D_y F(x, f(x)))^{-1} (D_x F(x, f(x))).$$

Preuve

En particulier, nous avons $h(x^*, 0) = 0$, et donc $x(0) = x^*$. De plus, $h(x(t), t) = 0$ donne, par définition de h ,

$$g_i(x(t)) = td^T \nabla g(x^*)$$

pour tout $i \in \mathcal{A}(x^*)$ et $t \in (-\delta, \delta)$. Les conditions du lemme sur d impliquent dès lors que

$$g_i(x(t)) = 0, \quad i \in \mathcal{E}$$

$$g_i(x(t)) \leq 0, \quad i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}, \quad t \in [0, \delta)$$

D'autre part, puisque $g_j(x^*) < 0$, $j \notin \mathcal{A}(x^*)$, la continuité de $x(t)$ implique qu'il existe $\epsilon \in (0, \delta)$ tel que

$$g_j(x^*) < 0, \quad j \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(x^*), \quad t \in (-\epsilon, \epsilon).$$

Finalement, du théorème des fonctions implicites, nous pouvons tirer que

$$\frac{d}{dt}x(0) = -(D_x h(x^*, 0))^{-1} D_t h(x^*, 0) = d$$

Retour au cône tangent

Il est également possible de montrer que sous la LICQ, le cône tangent à l'ensemble réalisable \mathcal{X} en x peut se réécrire comme

$$T_{\mathcal{X}}(x) = \{d \mid d^T \nabla g_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, d^T \nabla g_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{A}(x) \cap \mathcal{I}\}$$

Nous allons utiliser ce lemme pour introduire la notion de chemin réalisable, lequel nous permettra de caractériser les conditions prévalentes à une solution du problème d'optimisation.

Chemin de sortie réalisable

Définition

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

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

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

$$g_i(x(t)) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \quad t \in (-\epsilon, \epsilon)$$

$$g_i(x(t)) \leq 0, \quad i \in \mathcal{I}, \quad t \in [0, \epsilon)$$

$x(t)$ 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^* .

Nous pouvons imaginer que $x(t)$ est un morceau lisse de trajectoire d'une particule passant à travers x^* au temps $t = 0$ avec une vitesse non nulle d et qui se déplace dans le domaine réalisable.