Programmazione non-lineare

Giovanni Righini

Ricerca Operativa

Università degli Studi
di Milano

Programmazione non-lineare (PNL)

La programmazione non-lineare, o PNL (Non-linear Programming, NLP) studia problemi di ottimizzazione in cui la funzione obiettivo o alcuni vincoli sono non-lineari.

Applicazioni:

- economie di scala,
- minimizzazione dell'errore quadratico medio in problemi di
  - controllo ottimo,
  - classificazione automatica,
  - machine learning,
  - fitting di dati sperimentali,
- riformulazioni quadratiche,
- modelli di sistemi fisici non lineari,
- modelli che implicano l'uso di distanza Euclidee,
- eccetera...

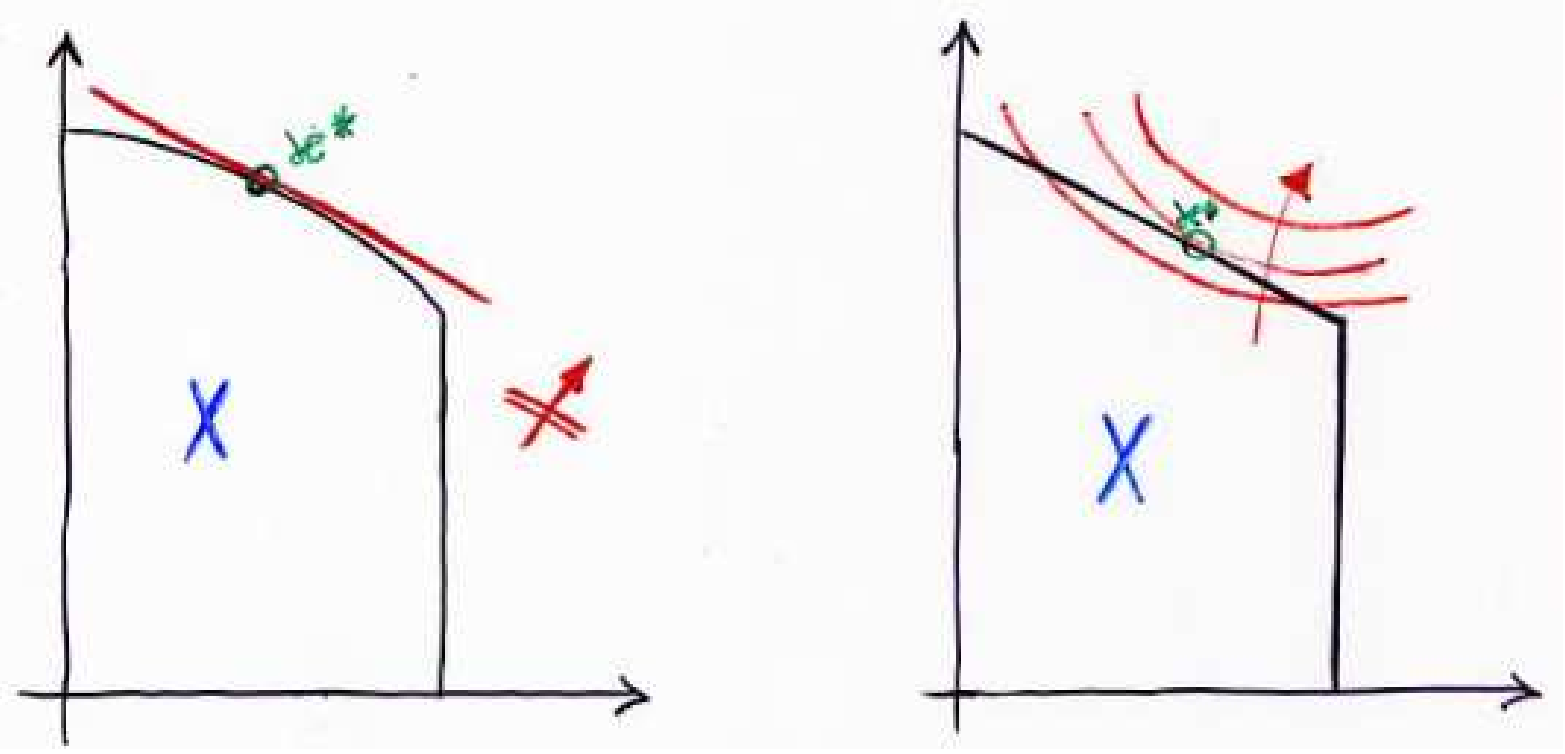
Programmazione non-lineare (PNL)

Forma generale:

$$\begin{aligned} \text{minimize } z = & f(x) \\ \text{s.t. } & h_i(x) = 0 \qquad \forall i \\ & g_j(x) \leq 0 \qquad \forall j \\ & x \in \Re^n \end{aligned} \tag{1}$$

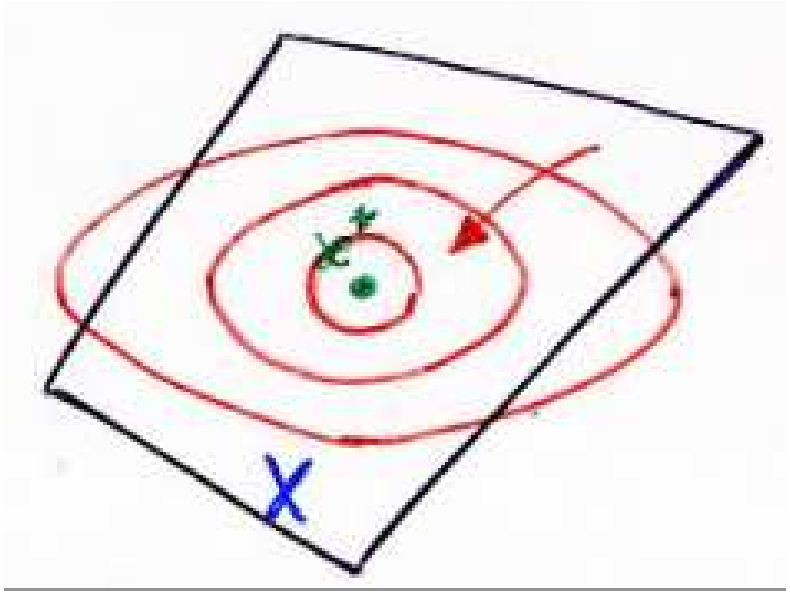
dove $f(x)$, $g(x)$ e $h(x)$ possono essere funzioni non-lineari.

Programmazione non-lineare (PNL)



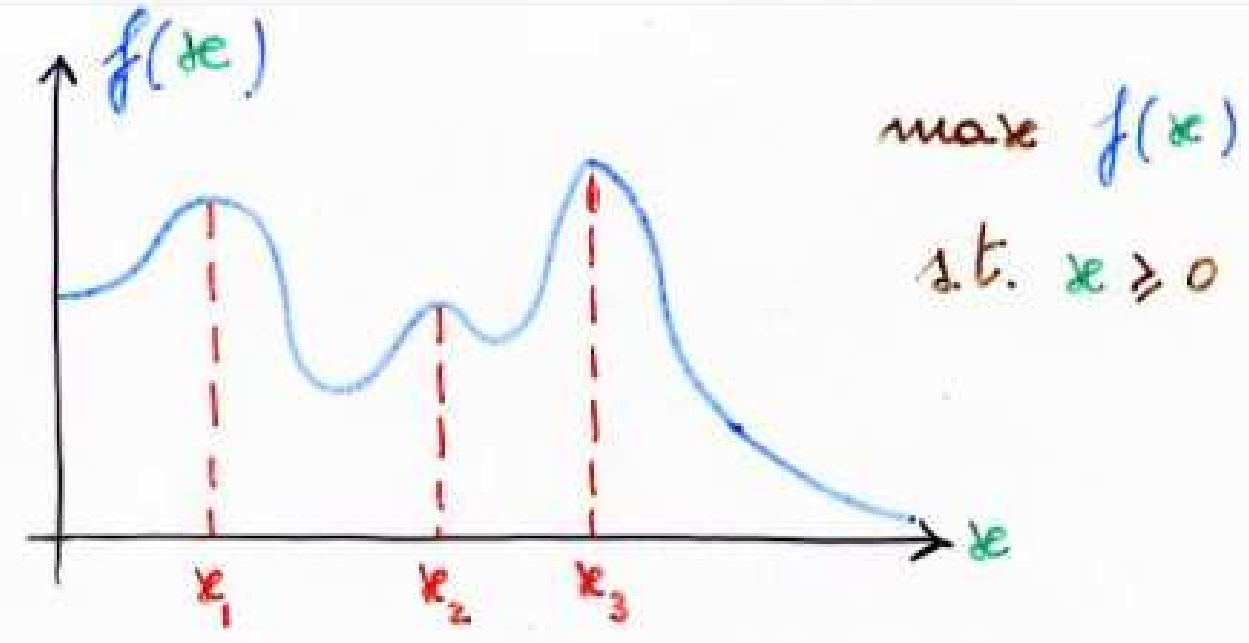
In generale, la soluzione ottima può non essere all’intersezione dei vincoli.

Programmazione non-lineare (PNL)



Non è neppure detto che sia necessariamente sulla frontiera della regione ammissibile.

Ottimalità locale e globale



Le soluzioni x_1 e x_2 sono ottimi locali.
La soluzione x_3 è un ottimo globale.

Ottimalità locale e globale

Ottimalità globale. Una soluzione $x^* \in X$ è un minimo globale se e solo se

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in X.$$

Ottimalità locale. Una soluzione $\overline{x} \in X$ è un minimo locale se e solo se

$$\exists \epsilon > 0 : f(\overline{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in X : ||\overline{x} - x|| \leq \epsilon.$$

L'insieme delle soluzioni $x \in X : ||\overline{x} - x|| \leq \epsilon$ è un intorno di $\overline{x}$.

Ottimalità locale e globale

Per trovare un ottimo globale si dovrebbero enumerare tutti gli ottimi locali e scegliere il migliore.

Tuttavia, l'enumerazione completa degli ottimi locali in generale non è fattibile in pratica

- per il loro grande numero;
- perché non è noto un metodo algoritmico per eseguirla in modo efficiente.

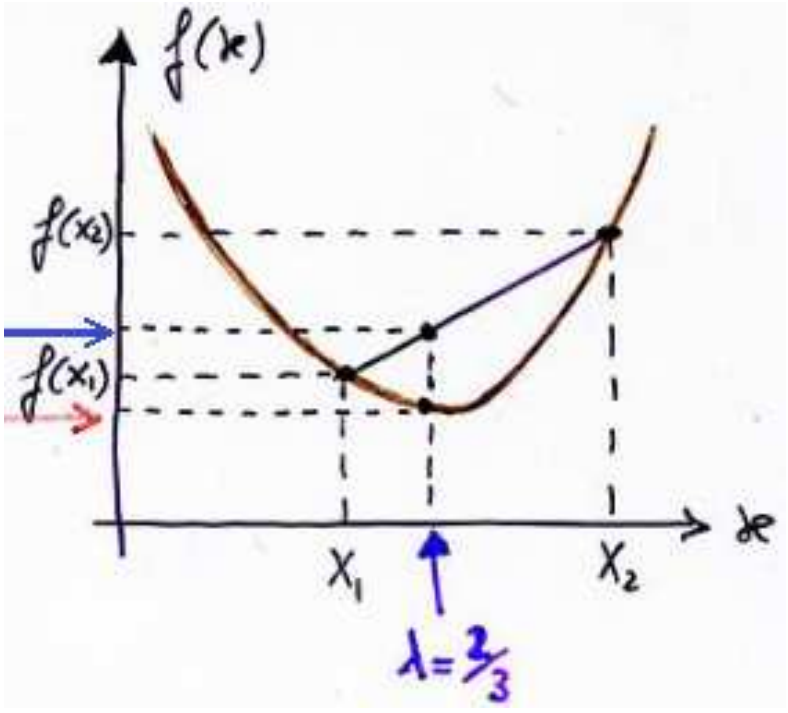
Un'importante eccezione positiva è la programmazione convessa. Un problema di minimizzazione non-lineare è convesso quando

- la funzione-obiettivo è una funzione convessa;
- la regione ammissibile è un insieme convesso.

Funzioni convesse

Una funzione $f(x)$ è convessa se e solo se per ogni coppia di punti x_1 e x_2 nel suo dominio e per $0 \leq \lambda \leq 1$

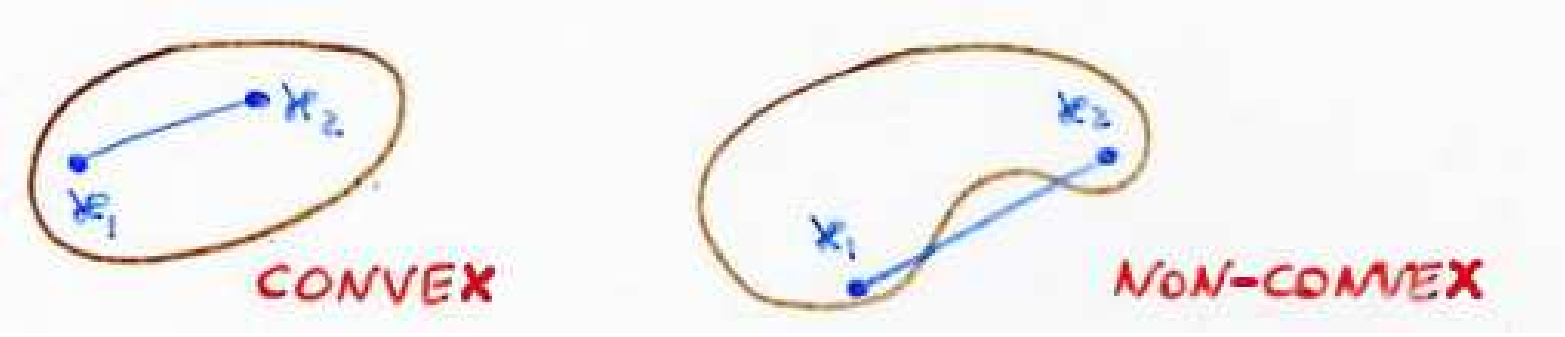
$$f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1-\lambda) f(x_2).$$



Insiemi convessi

Un insieme X è convesso se e solo se per ogni coppia di punti x_1 e x_2 in esso, tutte le loro combinazioni convesse appartengono all'insieme:

$$\forall x_1, x_2 \in X \quad \forall 0 \leq \lambda \leq 1 \quad \lambda x_1 + (1 - \lambda) x_2 \in X .$$



Programmazione convessa

La regione ammissibile è convessa quando

- tutti i vincoli di uguaglianza $h(x) = 0$ sono lineari;
- tutti i vincoli di disuguaglianza, riscritti in forma $g(x) \leq 0$ sono convessi.

La funzione-obiettivo da minimizzare deve essere convessa (deve essere concava in caso di massimizzazione).

Se entrambe queste condizioni sono soddisfatte, il problema è di programmazione convessa e quindi:

- l'ottimalità locale implica quella globale;
- se esistono più ottimi, essi formano un insieme convesso.

Ottimizzazione vincolata e non vincolata

Distinguiamo tra

- Unconstrained NLP: minimizzare una funzione non lineare senza ulteriori vincoli.
- Constrained NLP: minimizzare $f(x)$, con $x \in X$: le non-linearità possono essere tanto nell'obiettivo quanto nei vincoli.

Ottimizzazione non vincolata

Assumiamo che la funzione-obiettivo $f(x)$ da minimizzare sia continua e differenziabile.

Il gradiente di una funzione $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ è il vettore delle sue derivate parziali di primo ordine

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1} \; \frac{\partial f}{\partial x_2} \; \cdots \; \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T .$$

L'Hessiano di una funzione $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ è la matrice delle sue derivate parziali di secondo ordine

$$\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix} .$$

Caratterizzazione dei minimi locali

Condizioni necessarie del primo ordine.

$$\nabla f(\overline{x}) = 0$$

Condizioni necessarie del secondo ordine.

$$\nabla^2 f(\overline{x}) \geq 0$$

Condizioni sufficienti del secondo ordine.

$$\nabla^2 f(\overline{x}) > 0$$

Algoritmi

Se le derivate prime e seconde sono note (il che non è garantito, in generale), si possono enumerare i punti nei quali sono soddisfatte le condizioni analitiche.

Gli algoritmi per l'ottimizzazione non-lineare sono algoritmi iterativi, che convergono verso un minimo locale.
Partono da una soluzione data $x^{(0)}$ e calcolano una sequenza di soluzioni tali che il valore di $f(x)$ diminuisce monotonicamente.
Si fermano quando il miglioramento ottenuto o il passo compiuto sono più piccoli di una data soglia.

Ad ogni iterazione k, l'algoritmo calcola una direzione $d^{(k)}$ (vettore) e un passo s_k (scalare) tali che:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + s_k d^{(k)}.$$

Velocità di convergenza

Sia $\{x_k\}$ una sequenza in $\Re^n$ che converge a x^*.

Convergenza lineare:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = r < 1.$$

Convergenza superlineare:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0.$$

Convergenza quadratica:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} = M.$$

Algoritmi *line search*

Le due principali strategie sono:

- line search;
- trust regions.

Negli algoritmi *line search*, le scelte più comuni per definire la direzione $d^{(k)}$ sono:

- (metodo del gradiente): la direzione opposta a quella del gradiente, $-\nabla f(x^{(k)})$;
- (metodo di Newton): una direzione $-B^{-1}\nabla f(x^{(k)})$, dove B è una matrice semi-definita positiva;
- (metodo del gradiente coniugato): una direzione $-\nabla f(x^{(k)}) + \beta_k d^{(k-1)}$.

Metodo del gradiente

Per il teorema di Taylor

$$f(x^{(k)}+s_k d^{(k)}) = f(x^{(k)})+s_k d^{(k)T}\nabla f(x^{(k)})+\frac{1}{2}s_k^2 d^{(k)^T}\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)}+\dots$$

Trascurando i termini dal secondo ordine in poi, si ha l'approssimazione

$$f(x^{(k)} + s_k d^{(k)}) = f(x^{(k)}) + s_k d^{(k)T}\nabla f(x^{(k)})$$

che decresce più rapidamente nella direzione opposta a quella del *gradiente*.

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

Un vantaggio di questo metodo, detto *steepest descent method* (o *gradient method*) è che richiede solo il calcolo del gradiente, non delle derivate seconde.

Metodo di Newton

Assumendo $s_k = 1$ e trascurando i termini dal terzo ordine in poi, si ha l'approssimazione

$$f(x^{(k)} + d^{(k)}) = f(x^{(k)}) + d^{(k)T} \nabla f(x^{(k)}) + \frac{1}{2} d^{(k)T} \nabla^2 f(x^{(k)}) d^{(k)}.$$

La direzione che minimizza questa quantità è la *direzione di Newton*:

$$d^{(k)} = -\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)}).$$

Il *metodo di Newton* è veloce e accurato, ma richiede il calcolo dell'Hessiano $\nabla^2 f(x^{(k)})$ e può essere usato solo quando $\nabla^2 f(x^{(k)})$ è definito positivo.

Metodi *quasi-Newton*, basati sull'approssimazione dell'Hessiano, sono stati ideati per ovviare a questo limite.

Metodi trust region

I metodi *trust region* richiedono di

- approssimare la funzione $f()$ con un modello $m_k()$, che viene aggiornato ad ogni iterazione k;
- cercare un minimo di $m_k()$ in un intorno di raggio p_k della soluzione corrente x_k.

Se la diminuzione del valore dell'obiettivo non è "grande abbastanza", il raggio viene diminuito e l'ottimizzazione viene ripetuta.

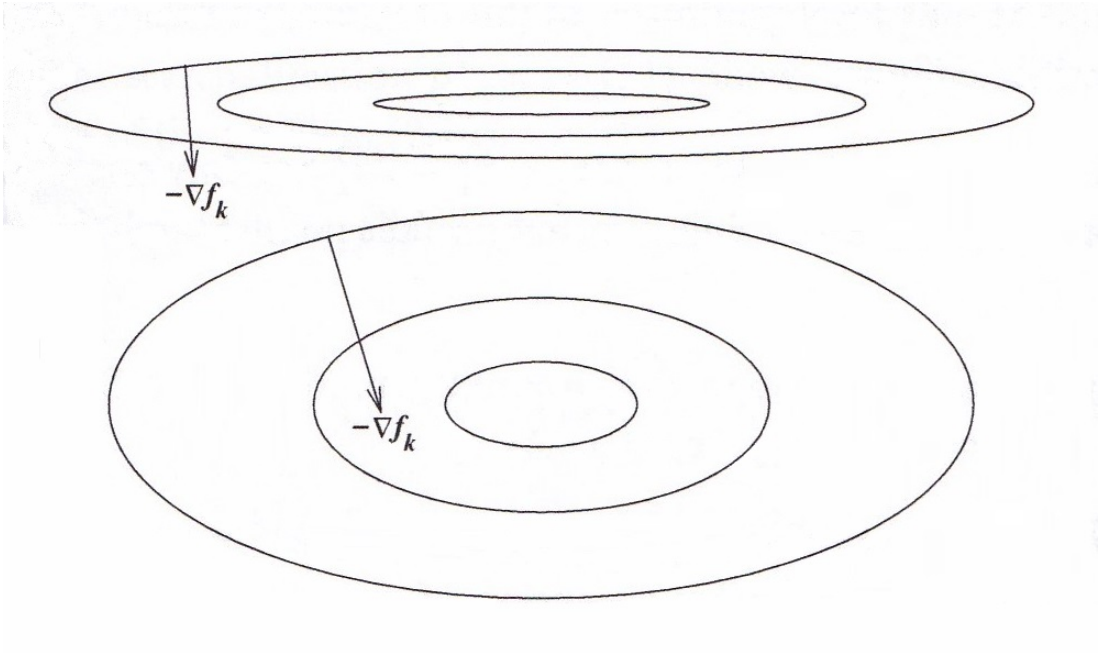
Di solito il modello m è quadratico

$$m_k(x_k + p) = f_k + p^T \nabla f_k + \frac{1}{2} p^T B_k p$$

e usa il gradiente ∇f_k e l'Hessiano o una sua approssimazione B_k.

Scaling

Gli algoritmi di programmazione non-lineare possono essere più o meno robusti rispetto allo scaling, che si ha, ad esempio, cambiando l'unità di misura di alcune grandezze.



L'invarianza di scala è una proprietà desiderabile degli algoritmi, che li rende più robusti.