IFT 3515
Fonctions à plusieurs variables
Optimisation avec contraintes
Méthodes de pénalité

Fabian Bastin
DIRO
Université de Montréal

Motivations

Partiellement basé sur `https://courses.maths.ox.ac.uk/node/view_material/1377`

De nombreux problèmes présentent un ensemble réalisable sur lequel il est difficile de calculer des projections, même si cet ensemble est convexe.

Nous allons tenter de construire des problèmes plus simples, mais permettant d'approcher les solutions des véritables problèmes avec une précision arbitraire (au moins en théorie).

Problèmes non-linéaires avec contraintes d'égalité

Nous nous intéressons dans un premier temps aux problèmes présentant uniquement des contraintes d'égalité, de la forme

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \; & f(x) \\ \text{t.q. } & g_i(x) = 0, \; i \in \mathcal{E} \end{aligned}$$

où $f : \mathcal{R}^N \to \mathcal{R}$, $g_i : \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$, $i \in \mathcal{E}$. De plus, nous supposons que f et g_i ($i \in \mathcal{E}$) sont des fonction "douces" (typiquement deux fois continûment différentiables).

Notre but est de trouver des solutions locales, ou à tout le moins des points KKT.

Dans le cas de contraintes d'égalité générales (non linéaires), il est souvent très difficile, voire impossible, de générer des points réalisables.

Problèmes non-linéaires avec contraintes d'égalité

Nous allons déplacer les contraintes dans l'objectif et former un nouveau problème sans contraintes, paramétrisé pour tenir compte du double objectif de minimisation et de satisfaction des contraintes.

Regroupons les contraintes en une multifonction $g(x) : \mathcal{R}^m \to \mathcal{R}$, avec $m = \#\mathcal{E}$:

$$g(x) = \begin{pmatrix} g_1(x) \\ g_2(x) \\ \vdots \\ g_m(x) \end{pmatrix}$$

Le problème d'optimisation se réécrit

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$
$$\text{t.q. } g(x) = 0.$$

Pénalisation quadratique

Le problème avec pénalité quadratique s'écrit

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \Phi_\mu(x) = f(x) + \frac{1}{2\mu}\|g(x)\|^2$$

où $\mu > 0$ est le paramètre de pénalisation.

Nous pouvons voir le nouveau problème comme un problème bi-objectif où μ pénalise la violation des contraintes, et $\mu \to 0$ force les contraintes à être satisfaites, tout en atteignant l'optimalité sur f.

Φ_μ peut cependant avoir d'autres points stationnaires qui ne sont pas solutions du problème initial, par exemple si $g(x) = 0$ est non consistant (il n'y a pas de solution réalisable pour le problème initial).

Méthode de pénalisation quadratique

Étant donné $\mu^0 > 0$, soit $k = 0$. Jusqu'à "convergence", répéter

1. Choisir $0 < \mu^{k+1} < \mu^k$.
2. En partant de x_0^k (possiblement $x_0^k := x^k$), utiliser un algorithme de minimisation sans contrainte pour trouver un minimiseur approximatif x^{k+1} de $\Phi_{\mu^{k+1}}$. Poser $k := k + 1$.

On doit avoir $\mu^k \to 0$ comme $k \to \infty$. Par exemple : $\mu^{k+1} := 0.1\mu^k$, $\mu^{k+1} := (\mu^k)^2$, etc.

Algorithmes de minimization

- recherche linéaire, méthode de région de confiance
- μ petit : Φ_μ est très raide dans la direction des contraintes des gradients, aussi observons-nous de rapides changements de Φ_μ dans ces directions ; implication pour la "forme" de la région de confiance.

Convergence

Théorème (Convergence globale de la méthode de pénalité)

Appliquons la méthode de pénalisation quadratique au programme avec contraintes d'égalité. Supposons que $f, g \in C^1$,

$$y_i^k = \frac{g_i(x^k)}{\mu^k}, i \in \mathcal{E},$$

et

$$\left\| \nabla \Phi_{\mu^k}(x^k) \right\| \leq \epsilon^k,$$

où $\epsilon^k \to 0$, *comme* $k \to \infty$ *et* $\mu^k \to 0$, *comme* $k \to \infty$.
Supposons de plus que $x^k \to x^*$, *où* $\nabla g_i(x^*)$, $i \in \mathcal{E}$, *sont linéairement indépendants.*
Alors x^* *est un point KKT du problème avec contraintes d'égalité, et* $y^k \to y^*$, *où* y^* *est le vecteur de multiplicateurs de Lagrange des contraintes d'égalité.*

Dérivées de la fonction de pénalité

- Soit
$$y(\mu) := \frac{g(x)}{\mu}$$
des estimateurs des multiplicateurs de Lagrange.
- Soit L la fonction lagrangienne du problème avec contraintes d'égalité :
$$L(x, y) := f(x) + y^T g(x)$$
- Le gradient de la fonction pénalisée
$$\Phi_\mu(x) = f(x) + \frac{1}{2\mu}\|g(x)\|^2$$
vaut
$$\nabla\Phi_\mu(x) = \nabla f(x) + \frac{1}{\mu}J(x)^T g(x) = \nabla_x L(x, y(\mu)),$$
où $J(x)$ est la matrice jacobienne, de dimensions $m \times n$, des contraintes $g(x)$.

Dérivées de la fonction de pénalité

- La matrice hessienne de Φ_μ est

$$\nabla^2\Phi_\mu(x) = \nabla^2 f(x) + \frac{1}{\mu}\sum_{i\in\mathcal{E}} g_i(x)\nabla^2 g_i(x) + \frac{1}{\mu}J(x)^T J(x)$$
$$= \nabla^2_{xx}L(x, y(\mu)) + \frac{1}{\mu}J(x)^T J(x)$$

- Comme $\mu \to 0$,
  - généralement, $g_i(x) \to 0$ ou $\nabla^2 g_i(x) \to 0$ au même taux avec μ pour tous les indices i. Dès lors, généralement, $\nabla^2_{xx}L(x, y(\mu))$ se comporte bien.
  - Mais
$$\frac{1}{\mu}J(x)^T J(x) \to \frac{1}{0}J(x^*)^T J(x^*) = \infty$$

Mauvais conditionnement

Estimateurs asymptotiques des valeurs propres de $\nabla^2 \Phi_{\mu^k}(x^k)$: m valeurs propres de $\nabla^2 \Phi_{\mu^k}(x^k)$ sont en $O(1/\mu^k)$ et dès lors, tendent vers l'infini comme $k \to \infty$ (i.e. $\mu^k \to 0$) ; les $m - n$ valeurs propres restantes sont en $O(1)$. Dès lors, le nombre de conditionnement de $\nabla^2 \Phi_{\mu^k}(x^k)$ est en $O(1/\mu^k)$ et explose comme $k \to \infty$.

Il n'est pas clair que nous puissions calculer précisément les changements sur x^k. En particulier, que ce soit avec des techniques de recherche linéaire ou de région de confiance, asymptotiquement, nous souhaitons minimiser $\Phi_{\mu^{k+1}}(x)$ au moyen d'un pas de Newton, i.e. en résolvant le système

$$\nabla^2 \Phi_\mu(x) s = -\nabla \Phi(x)$$

pour obtenir le pas s à partir de la solution actuelle $x = x_i^k$ et $\mu = \mu^{k+1}$. Malgré le mauvais conditionnement présent, il est toujours possible de calculer s avec précision.

Calcul du pas de Newton

En utilisant les calculs de dérivées, le système

$$\nabla^2 \Phi_\mu(x) s = -\nabla \Phi(x)$$

est équivalent à

$$\left(\nabla^2_{xx} L(x, y(\mu)) + \frac{1}{\mu} J(x)^T J(x)\right) s = -\left(\nabla f(x) + \frac{1}{\mu} J(x)^T g(x)\right)$$

où $y(\mu) = g(x)/\mu$. Définissons la variable auxiliare w

$$w = \frac{1}{\mu}\left(J(x)s + g(x)\right)$$

Alors, le système de Newton peut être réécrit comme

$$\begin{pmatrix} \nabla^2_{xx} L(x, y(\mu)) & J(x)^T \\ J(x) & -\mu I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ w \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \nabla f(x) \\ g(x) \end{pmatrix}$$

Ce système est essentiellement indépendant de μ pour de petites valeurs de μ, et dès lors ne souffre pas de mauvais conditionnement comme $\mu \to 0$.

Calcul du pas de Newton

Il faut toujours être prudent lors de la minimisation de Φ_μ pour de petits μ.

Par exemple, en utilisant des régions de confiance, il est bon d'utiliser comme test de contrainte de région de confiance $\|s\|_B \leq \Delta$, où B prend en compte les termes mal-conditionnés de la Hessienne afin d'encourager une décroissance égale du modèle dans toutes les directions.

Conditions d'optimalité perturbées

Reprenons le problème

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

Des conditions KKT, nous pouvons considérer le système

$$\begin{cases} \nabla f(x) + J(x)^T y = 0 & \text{(annulation du gradient du Lagrangien)} \\ g(x) = 0 & \text{(faisabilité primale)} \end{cases}$$

Considérons le problème perturbé

$$\begin{cases} \nabla f(x) + J(x)^T y = 0 & \text{(annulation du gradient du Lagrangien)} \\ g(x) - \mu y = 0 & \text{(faisabilité primale)} \end{cases}$$

Pour trouver les racines de ce système non-linéaire comme $\mu \to 0$ ($\mu > 0$), nous pouvons utiliser la méthode de Newton de recherche de racine.

Conditions d'optimalité perturbées

La méthode de Newton pour le problème pertubé calcule les changements $(\Delta x, \Delta y)$ en résolvant le système

$$\begin{pmatrix} \nabla^2_{xx} L(x,y) & J(x)^T \\ J(x) & -\mu I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla f(x) + J(x)^T y \\ g(x) - \mu y \end{pmatrix}$$

donnant

$$\begin{aligned} \nabla^2_{xx} L(x,y)\Delta x + J(x)^T \Delta y &= -\nabla f(x) - J(x)^T y \\ J(x)\Delta x - \mu \Delta y &= -g(x) + \mu y \end{aligned}$$

La deuxième équation permet d'obtenir

$$\Delta y = \frac{1}{\mu} J(x)\Delta x + \frac{1}{\mu} g(x) - y$$

Conditions d'optimalité perturbées

En remplaçant Δy dans l'égalité précédente, nous avons

$$\nabla^2_{xx} L(x, y)\Delta x + J(x)^T \left(\frac{1}{\mu} J(x)\Delta x + \frac{1}{\mu} g(x) - y \right)$$
$$= -\nabla f(x) - J(x)^T y$$

ce qui donne

$$\left(\nabla^2_{xx} L(x, y) + \frac{1}{\mu} J(x)^T J(x) \right) \Delta x = - \left(\nabla f(x) + \frac{1}{\mu} J(x)^T g(x) \right)$$

Similaire au système de Newton pour la pénalité quadratique !

Conditions d'optimalité perturbées

Primal :

$$\left(\nabla^2_{xx} L(x, y(\mu)) + \frac{1}{\mu} J(x)^T J(x)\right) s = -\left(\nabla f(x) + \frac{1}{\mu} J(x)^T g(x)\right)$$

où $y(\mu) = g(x)/\mu$.

Primal-Dual :

$$\left(\nabla^2_{xx} L(x, y) + \frac{1}{\mu} J(x)^T J(x)\right) \Delta x = -\left(\nabla f(x) + \frac{1}{\mu} J(x)^T g(x)\right)$$

La différence réside dans la liberté de choisir y dans $\nabla^2_{xx} L(x, y)$ dans les méthodes primales-duales. En termes computationnels, cela fait une différence importante.

Autres fonctions de pénalité

Considérons le problème général avec contraintes

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

Fonction de pénalité exacte : $\Phi(x, \mu)$ est dite exacte s'il existe un $\mu^* > 0$ tel que si $0 < \mu < \mu^*$, n'importe quel minimiseur local du problème avec contraintes est aussi minimiseur local de $\Phi(x, \mu)$.

Note : la pénalité quadratique est inexacte.

Autres fonctions de pénalité

Exemples de pénalités exactes :

- fonction de pénalité ℓ_2 si $\mathcal{I} = \emptyset$:

$$\Phi(x, \mu) = f(x) + \frac{1}{\mu}\|g(x)\|_2$$

- fonction de pénalité ℓ_1 : notant $z^+ = \max\{z, 0\}$,

$$\Phi(x, \mu) = f(x) + \frac{1}{\mu}\sum_{i\in\mathcal{E}} |g_i(x)| + \frac{1}{\mu}\sum_{i\in\mathcal{I}} [g_i(x)]^+$$

Extension de la pénalité quadratique :

$$\Phi(x, \mu) = f(x) + \frac{1}{2\mu}\|g(x)\|_2^2 + \frac{1}{2\mu}\sum_{i\in\mathcal{I}} \left([g_i(x)]^+\right)^2$$

Il s'agit d'une pénalité inexacte, et non nécessairement douce (en particulier, elle peut ne pas être différentiable en tout point).