# IFT 3515
# Fonctions à plusieurs variables
# Optimisation sous contraintes
# Méthodes de projection

Fabian Bastin
DIRO
Université de Montréal

# Cadre de travail

Jusqu'à présent, nous n'avons considéré que des problèmes d'optimisation sans contraintes. La plupart des problèmes pratiques présentent toutefois des contraintes, et il convient d'adapter nos méthodes pour en tenir compte.

Nous considérons dans un premier temps des contraintes simples, définissant une région convexe.

Soit le programme

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

où $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ est l'ensemble réalisable, supposé fermé et non vide.

# Ensemble convexe

De plus, nous supposons pour le moment que $\mathcal{X}$ est convexe, et qu'il est relativement aisé de projeter n'importe quel point sur cet ensemble.

Rappel : un ensemble $\mathcal{X}$ est convexe ssi toute combinaison convexe de points dans $\mathcal{X}$ est également dans $\mathcal{X}$ :

$$\forall\, x, y \in \mathcal{X},\ \forall\, \lambda \in [0,1],\ \lambda x + (1-\lambda) y \in \mathcal{X}.$$

# Conditions d'optimalité au premier ordre

Lecture suggérée : Nocedal et Wright, Chapitre 12.

Nous devons tout d'abord revoir nos conditions d'optimalité pour le cas contraint.

**Théorème (Condition nécessaire au premier ordre)**

*Soit $f$ continûment différentiable sur $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^n$, avec $\mathcal{X}$ fermé et non vide. Si $x^*$ est un minimum local de $f$, alors*

$$-\nabla_x f(x^*) \in \mathcal{N}_{\mathcal{X}}(x^*),$$

*où $\mathcal{N}_{\mathcal{X}(x^*)}$ est le cône normal à $\mathcal{X}$ en $x^*$.*

Si $f$ est convexe, la condition est nécessaire et suffisante.

# Définitions

## Définition (Cône)

*Un sous-ensemble $\mathcal{C}$ d'un espace vectoriel $V$ est un cône linéaire ssi $\alpha x$ appartient à $\mathcal{C}$ pour tout $x \in C$ et tout scalaire strictement positif $\alpha$.*
*Le cône est pointé si $\alpha$ peut être égal à zéro.*

## Définition (Cône convexe)

*Un cône convexe $\mathcal{C}$ est un cône fermé sous les combinaisons convexes, i.e. ssi $\alpha x + \beta y \in \mathcal{C}$, $\forall \alpha,\ \beta > 0$, avec $\alpha + \beta = 1$.*

# Cône tangent et cône normal

## Définition (Vecteur tangent)

*Un vecteur $w \in \mathbb{R}^n$ est tangent à $\mathcal{X}$ en $x \in \mathcal{X}$ si pour toute séquence de vecteurs $\{x_i\}$ avec $x_i \to x$ et $x_i \in \mathcal{X}$, et toute séquence de scalaires positifs $t_i \downarrow 0$, il existe une séquence $w_i \to w$ telle que $x_i + t_i w_i \in \mathcal{X}$ pour tout $i$.*

## Définition (Cône tangent)

*Le cône tangent $T_{\mathcal{X}}(x)$ est la collection des vecteurs tangents à $\mathcal{X}$ en $x$.*

## Définition (Cône normal)

*Le cône normal $N_{\mathcal{X}}(x)$ est le complément orthogonal de $T_{\mathcal{X}}(x)$, i.e.*

$$N_{\mathcal{X}}(x) = \{v \mid v^T w \leq 0,\ \forall w \in T_{\mathcal{X}}(x)\}.$$

# Cas convexe : cône normal

La définition de cône normal peut être simplifiée si $\mathcal{X}$ est convexe. Nous avons en effet alors

$$N_{\mathcal{X}}(x) = \begin{cases} \{v \mid v^T(x - x_0) \geq 0, \ \forall x_0 \in \mathcal{X}\} & \text{si } x \in \mathcal{X}, \\ \emptyset & \text{sinon.} \end{cases}$$

La condition nécessaire d'optimalité devient alors

$$\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0 \ \forall x \in \mathcal{X}$$

.

Si $f$ est convexe (i.e. nous sommes dans le cadre de la programmation convexe), la condition est aussi suffisante.

# Cas convexe : cône tangent

Dans le cas convexe, le cône tangent en $x \in \mathcal{X}$ devient

$$T_{\mathcal{X}}(x) = cl\{\theta(x_0 - x) \,|\, \theta \geq 0 \text{ et } x_0 \in \mathcal{X}\},$$

où $cl\{\mathcal{S}\}$ désigne la fermeture (closure) de l'ensemble $\mathcal{S}$ :

$$cl\{\mathcal{S}\} = \{x \,|\, \forall\, \epsilon > 0,\, \mathcal{S} \cap \mathcal{B}(x, \epsilon) \neq \emptyset\}.$$

Décomposition de Moreau avec $y \in \mathcal{X}$ :

$$x = P_{T_{\mathcal{X}}(y)}(x) + P_{\mathcal{N}_{\mathcal{X}}(y)}(x).$$

# Cas tangent : interprétation

Rappelons que $d$ est une direction réalisable en $x \in \mathcal{X}$ s'il existe un scalaire $\alpha_{\max}$ tel que $x + \alpha d \in \mathcal{X}$ pour tout $\alpha \in [0, \alpha_{\max}]$.

Le cône tangent peut encore être interpétré comme la fermeture du cône de toutes les directions réalisables.

# Théorème de projection

Étant donné $x_0 \in \mathbb{R}^n$, nous voudrions identifier le point le plus proche de $x_0$ appartenant à $\mathcal{X}$. Le théorème suivant caractérise ce point.

## Théorème (Projection pour des ensembles convexes)

*Soit $x_0 \in \mathbb{R}^n$ et $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble convexe, fermé et non vide. $\overline{x} \in \mathcal{X}$ résoud le problème*

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \frac{1}{2} \|x - x_0\|_2^2$$

*si et seulement si, $\forall y \in \mathcal{X}$.*

$$\langle \overline{x} - x_0, y - \overline{x} \rangle \geq 0$$

*De plus, la solution $\overline{x}$ existe toujours, et est unique.*

# Preuve

Soit

$$f(x) = \frac{1}{2}\|x - x_0\|_2^2$$

L'existence d'un minimum de $f(x)$ vient la compacité de l'ensemble

$$\{x \in \mathcal{X} \mid \|x - x_0\|_2 \leq \|\hat{x} - x_0\|_2\}$$

pour n'importe quel $\hat{x} \in \mathcal{X}$.

D'autre part, $f$ est strictement convexe, et donc admet un minimum unique, qui s'obtient en appliquant les conditions d'optimalité au premier ordre, or

$$\nabla f(x) = x - x_0.$$

# Projection

## Définition (Projection)

*Soit $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble convexe, fermé et non vide. La projection $P_{\mathcal{X}}$ est le mapping $P_{\mathcal{X}} : \mathbb{R}^N \to \mathcal{X}$ donné par*

$$\|P_{\mathcal{X}} - x\|_2^2 = \min_y \{\|y - x\|_2^2 \mid y \in \mathcal{X}\}$$

# Contraintes de bornes

Un des cas les plus simples est la situation où les variables de décision sont bornées inférieurement et supérieurement.

$$\mathcal{X} = \{x \,|\, x_\ell \leq x \leq x_u\}$$

où les inégalités sont à comprendre composante par composante.

Nous autorisons certaines composantes de $x_\ell$ à être égale à $-\infty$ et certaines composantes de $x_u$ à être égale à $+\infty$.

Soit $y \in \mathbb{R}^n$. La projection de $y$ sur $\mathcal{X}$ est extrêmement facile à obtenir :

$$[P_{\mathcal{X}}(y)]_i = \begin{cases} [x_\ell]_i & \text{si } [y]_i \leq [x_\ell]_i \\ [y]_i & \text{si } [x_\ell]_i \leq [y]_i \leq [x_u]_i \\ [x_u]_i & \text{si } [y]_i \geq [x_u]_i \end{cases}$$

où $[\cdot]_i$ représente la $i^e$ composante.

# Autres domaines simples

Il existe d'autres domaines sur lesquels projeter est relativement simple.

Par exemple, les projections sur une sphère sont triviales. Soit

$$\mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x_0\|_2 \leq \delta\}.$$

La projection est donnée par

$$P_{\mathcal{X}}(y) = \begin{cases} y & \text{if } y \in \mathcal{X}, \\ x_0 + \delta \frac{y - x_0}{\|y - x_0\|_2} & \text{otherwise.} \end{cases}$$

# Chemin du gradient projeté

De ce qui précède, un point $x^*$ est un point critique au premier ordre si $-\nabla f(x^*) \in N_{\mathcal{X}}(x)$.

Considérons les points de long de l'arc de Cauchy à partir de $x$ :

$$\{x - t\nabla f(x)\}, \ \forall t \geq 0\}$$

et définissons le chemin du gradient projeté :

$$p(t, x) := P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)), \ \forall t \geq 0.$$

Si $\mathcal{X}$ est convexe et $x^*$ est critique au premier ordre, alors $\forall t \geq 0$

$$\nabla f(x^*)^T(x^* - P_{\mathcal{X}}(x^* - t\nabla f(x^*))) \leq 0.$$

Si $P_{\mathcal{X}}(x^* - t\nabla f(x^*)) = x^*$, l'inégalité est trivialement satisfaite. Est-ce à dire que tout point critique au premier ordre satisfait cette dernièr égalité ?

# Optimalité et projection

## Théorème (Projections et cône normal)

*Soit $\mathcal{X}$ un sous-ensemble fermé convexe et non-vide de $\mathbb{R}^n$ et soit $P_{\mathcal{X}}$ l'opérateur de projection sur $\mathcal{X}$. Alors, pour $x \in \mathbb{R}^n$, nous avons $z = P_{\mathcal{X}}(x)$ si et seulement si*

$$(x - z) \in N_{\mathcal{X}}(z)$$

# Optimalité et projection

## Démonstration.

En vertu du théorème de projection, pour tout $y \in \mathcal{X}$,

$$\langle P_{\mathcal{X}}(x) - x, y - P_{\mathcal{X}}(x) \rangle \geq 0.$$

$\boxed{\Rightarrow}$ Si $z = P_{\mathcal{X}}(x)$, $x - z = x - P_{\mathcal{X}}(x)$, et dès lors

$$\langle x - z, z - y \rangle \geq 0, \ \forall y \in \mathcal{X}.$$

Par définition de $N_{\mathcal{X}}(z)$, $(x - z) \in N_{\mathcal{X}}(z)$.

$\boxed{\Leftarrow}$ Supposons maintenant $(x - z) \in N_{\mathcal{X}}(z)$, ou de manière équivalente

$$\langle x - z, z - y \rangle \geq 0, \ \forall y \in \mathcal{X}.$$

En vertu du théorème de projection, $z = P_{\mathcal{X}}(x)$. $\square$

## Optimalité et projection

### Corollaire

*Soit* $x \in \mathcal{X}$, $z \in N_{\mathcal{X}}(x)$ *et* $t \geq 0$. *Alors,* $P_{\mathcal{X}}(x + tz) = x$.

### Démonstration.

Du théorème de projection, $P_{\mathcal{X}}(x + tz)$ est l'unique point t.q. $\forall y \in \mathcal{X}$,

$$\langle x + tz - P_{\mathcal{X}}(x + tz), P_{\mathcal{X}}(x + tz) - y \rangle \geq 0.$$

Dès lors, $P_{\mathcal{X}}(x + tz) = x$ ssi $\forall y \in \mathcal{X}$,

$$\langle x + tz - x, x - y \rangle \geq 0.$$

ou

$$\langle tz, x - y \rangle \geq 0.$$

Cette dernière inégalité est satisfaite comme $tz \in N_{\mathcal{X}}(x)$. $\square$

# Optimalité et projection

**Corollaire**

*$x^*$ est solution de*

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

*ssi pour tout $t \geq 0$,*

$$P_{\mathcal{X}}(x^* - t\nabla f(x^*)) = x^*.$$

## Optimalité et projection

**Démonstration.**
Supposons tout d'abord que $x^*$ est solution. Des conditions d'optimalité au premier ordre,

$$-\nabla f(x^*) \in N_{\mathcal{X}}(x^*)$$

Il suffit alors d'appliquer le théorème précédent.

D'autre part, si $\forall t \geq 0$,

$$P_{\mathcal{X}}(x^* - t\nabla f(x^*)) = x^*$$

alors

$$x^* - t\nabla f(x^*) - P_{\mathcal{X}}(x^* - t\nabla f(x^*)) = -t\nabla f(x^*) \in N_{\mathcal{X}}(x^*)$$

.

# Gradient projeté et descente

**Théorème**

*Soit* $x \in \mathcal{X}$ *et* $d = P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)) - x$. $d$ *est une direction de descente.*

Le résultat tient en particulier pour $t = 1$.

## Gradient projeté et descente

**Démonstration.**
Le résultat suit de l'observation

$$\nabla f(x)^T d \leq -\frac{\|P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)) - x\|_2^2}{t}$$

En effet,

$$\begin{aligned}
&\|P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)) - x\|_2^2 \\
&= \langle P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)) - x, P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)) - x\rangle \\
&= \langle P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)) - x, d\rangle + t\nabla f(x)^T d - t\nabla f(x)^T d \\
&= -t\nabla f(x)^T d + \langle P_{\mathcal{X}}(x - t\nabla f(x)) - (x - t\nabla f(x)), d\rangle \\
&\leq -t\nabla f(x)^T d
\end{aligned}$$

où la dernière inégalité résulte du vertu du théorème de projection, comme $x \in \mathcal{X}$.

## Algorithme basique du gradient projeté

Comme $d$ est une direction de descente, nous pouvons construire un algorithme de recherche linéaire l'exploitant.

Étape 0. Soit $x_0 \in \mathcal{X}$, et $k = 0$.

Étape 1. Calculer

$$d_k = P_{\mathcal{X}}(x_k - \nabla f(x_k)) - x_k.$$

Étape 2. Résoudre approximativement

$$\min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k)$$

en satisfaisant la condition d'Armijo.

Étape 3. Poser

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$

Arrêt si un critère de convergence est satisfait. Sinon, retour à l'Étape 1.

# Convergence

Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \in C^1$, et soit $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ non-vide, fermé et convexe. Supposons aussi que $\nabla f(x)$ est lipschitzienne sur $\mathbb{R}^n$. Alors, pour les itérés générés par la méthode de recherche linéaire avec pas d'Armijo, une des trois situations suivantes a lieu :

1. il existe un $k_0$ tel que $-\nabla f(x_{k_0}) \in N_{\mathcal{X}}(x_{k_0})$.
2. $\lim_{k\to\infty} f(x_k) = -\infty$
3. Il existe une sous-séquence $\{x_{k_j}\} \subseteq \{x_k\}$ telle que

$$\lim_{j\to\infty} \|P_{\mathcal{X}}(x_{k_j} - \nabla f(x_{k_j})) - x_{k_j}\| = 0.$$

# Chemin du gradient projeté

Un inconvénient de l'approche précédente est que si $d_k = P_{\mathcal{X}}(x_k - \nabla f(x_k)) - x_k \neq -\nabla f(x_k)$, même pour une faible longueur de pas, la direction de descente ne correspondra jamais à la plus forte pente.

Nous pouvons décider de suivre la plus forte pente jusqu'à rendre une contrainte active, et alors seulement projecter le pas.

Pour se faire, nous devons modifier l'étape 2 en calculant

$$\min_{\alpha \geq 0} f(P_{\mathcal{X}}(x_k + \alpha d_k)).$$

La fonction

$$\phi(\alpha) = f(P_{\mathcal{X}}(x_k + \alpha d_k))$$

n'est cependant plus linéaire en $\alpha$ et est seulement différentiable par morceaux.

# Chemin du gradient projeté

La longueur du pas devra être sélectionnée pour produire une décroissance suffisante de la valeur de la fonction objectif, mais nous devons être vigilant avec la formule d'Armijo :

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha_k \beta \nabla f(x_k)^T d_k$$

En effet, la recherche ne se fait pas le long de $x_k + \alpha d_k$, avec $d_k = P_{\mathcal{X}}(x_k - \nabla f(x_k)) - x_k \neq -\nabla f(x_k)$, et nous devons modifier le critère comme

$$f(x_k + s_k) \leq f(x_k) + \beta \nabla f(x_k)^T s_k$$

avec

$$s_k = P_{\mathcal{X}}(x_k + \alpha d_k) - x_k.$$

La condition est alors appelée condition de Goldstein.

# Approche par région de confiance

L'algorithme de région de confiance peut aussi être adaptée en considérant en ajoutant au sous-problème à résoudre les contraintes du problème :

$$
\begin{aligned}
\min_{s} \;& m_k(x_k + s) \\
\text{t.q. } & \|s_k\|_k \leq \Delta_k \\
& x_k + s \in \mathcal{X},
\end{aligned}
$$

où $m_k$ est le sous-problème à résoudre, habituellement sous forme quadratique

$$m_k(x_k + s) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s.$$

Plus de détails peuvent être trouvés dans le chapitre 12 de "Trust-Region Methods".

# Point de Cauchy généralisé

Nous allons étendre la recherche linéaire de Goldstein pour tenir compte de la contrainte de région de confiance.

Définissons

$$s_k(t) \stackrel{def}{=} p(t, x_k) - x_k.$$

et simplifions la définition du modèle quadratique comme

$$m_k(s) = \nabla f(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s.$$

Notre but est de déterminer un $t_j > 0$ tel que les deux conditions suivantes soient satisfaites

$$\|s_k(t_j)\|_2 \leq \Delta_k$$
$$m_k(p(t_j, x_k)) \leq \beta_1 \nabla f(x_k)^T s_k(t_j),$$

et au moins une des conditions

# Point de Cauchy généralisé

$$\begin{aligned}
\|s_k(t_j)\|_2 &\geq \mu\Delta_k \\
m_k(p(t_j, x_k)) &\geq \beta_2 \nabla f(x_k)^T s_k(t_j), \\
\left\| P_{T(p(t_j, x_k))}(-\nabla f(x_k)) \right\|_2 &\leq \nu \frac{\left|\nabla f(x_k)^T s_k(t_j)\right|}{\Delta_k},
\end{aligned}$$

avec $0 < \beta_1 < \beta_2 < 1$, $\mu \in (0, 1)$, et $\nu \in (0, \frac{1}{2})$.

Le point

$$x_k^{GC} = p(t_j, x_k)$$

est le point de Cauchy généralisé (approximatif).

# Calcul du point de Cauchy généralisé

**Étape 0** Soient $\Delta_k$, $x_k \in \mathcal{X}$, $m_k(x_k + s)$, $0 < \beta_1 < \beta_2 < 1$, $\mu \in (0,1)$ et $\nu \in (0, \frac{1}{2})$. Poser $t_0 = \Delta_k / \|\nabla f(x_k)\|$, et $j = 0$.

**Étape 1** Calculer $m_k(p(t_j, x_k))$.

**Étape 2** Si $\|s_k(t_j)\| > \Delta_k$ ou $m_k(p(t_j, x_k)) > \beta_1 \nabla f(x_k)^T s_k(t_j)$, poser $t_{\max} = t_j$ et aller à l'étape 3.
Si $\|s_k(t_j)\|_2 < \mu \Delta_k$, $m_k(p(t_j, x_k)) < \beta_2 \nabla f(x_k)^T s_k(t_j)$ et $\left\| P_{T(p(t_j, x_k))}(-\nabla f(x_k)) \right\|_2 > \nu \frac{\left|\nabla f(x_k)^T s_k(t_j)\right|}{\Delta_k}$, poser $t_{\min} = t_j$ et aller à l'étape 3. Sinon retourner $x_k^{GC} = p(t_j, x_k)$.

**Étape 3** Si $t_{\max} = +\infty$, poser $t_{j+1} = 2t_j$. Sinon, poser $t_{j+1} = (t_{\min} + t_{\max})/2$. Incrémenter $j$ de 1 et retourner à l'étape 1.

# Calcul du point de Cauchy généralisé

$t_0$ est choisi à la longueur de pas maximale dans le cas où le chemin du gradient projeté se réduit à la direction de plus forte pente à l'intérieur de la région de confiance.

Sous certaines hypothèses de régularité, tout point d'accumulation d'accumulation génération par l'algorithme de région de confiance avec le point de Cauchy généralisé est un point critique au premier ordre.

L'algorithme suppose que la projection sur le cône tangent est facile à obtenir. Si $\mathcal{X}$ est simple, par exemple délimité par des contraintes de bornes, c'est le cas. D'autres situations sont plus complexes.

# Projection sur le cône tangent : contraintes de bornes

Considérons à nouveau l'ensemble

$$\mathcal{X} = \{x \,|\, x_\ell \leq x \leq x_u\}$$

Nous avons

$$[P_{T_{\mathcal{X}}(x)}(d)]_i = \begin{cases} [d]_i & \text{si } [x_\ell]_i < [x]_i < [x_u]_i, \\ \max\{0, [d]_i\} & \text{si } [x]_i = [x_\ell]_i, \\ \min\{0, [d]_i\} & \text{si } [x]_i = [x_u]_i. \end{cases}$$

# Contraintes actives - gradient conjugué

Il est possible d'étendre les techniques de projection à l'algorithme de gradient conjugué.

Question principale : si un itéré du gradient conjugué rend une contrainte active, comment procéder pour générer les directions de recherche ultérieures ?

Il va falloir à nouveau projeter les directions de recherche, et non seulement les itérés.

# Méthode du gradient conjugué projeté

Il est possible d'adapter l'algorithme du gradient conjugué tronqué pour tenir compte de contraintes de bornes, comme expliqué dans Lin et Moré, *Newton's method for large bound-constrained optimization problems*, SIAM Journal on Optimization, 9(1999), 1100-1127 :
`http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/papers/tron.pdf`

Idée de base : appliquer l'algorithme du gradient conjugué jusqu'à ce qu'une contrainte soit rencontrée, auquel cas l'ensemble actif est mis à jour et on recommence les itérations du gradient conjugué dans l'espace réduit (les contraintes actives restent actives).

Voir aussi Algorithme 16.2 de Nocedal et Wright.