Metoda funcțiilor de penalizare

Această clasă de metode de optimizare are la bază următoarea teoremă:

Tr. Fie $F : R^n \to R$ o funcție continuă, strict convexă pentru care $\lim\limits_{\|x\| \to \infty} F(x) = \infty$, $U \subset R^n$ mulțime convexă şi nevidă, $\Psi : R^n \to R$ astfel încât $\Psi(v) \geq 0 \quad \forall\, v \in R^n$, $\quad \Psi(u) = 0 \quad \forall\, u \in U$.

Atunci $\forall\, \varepsilon > 0 \quad \exists\, u_\varepsilon$ unic astfel încât să fie soluția problemei de optimizare fără restricții:

$$\begin{aligned} &\min F_\varepsilon(u) = F(u) + \frac{1}{\varepsilon}\Psi(u) \\ &u \in R^n \end{aligned} \qquad (10.1)$$

şi $\lim\limits_{\varepsilon \to 0} u_\varepsilon = u$, unde *u* este soluția problemei de optimizare:

$$\begin{aligned} &\min F(u) \\ &u \in U \end{aligned} \qquad (10.2)$$

Principiul metodelor funcțiilor de penalizare constă, deci, în înlocuirea problemei de optimizare inițiale, care are anumite restricții impuse variabilelor, printr-o familie de probleme de optimizare fără restricții, fiecare dintre problemele care aparțin acestei familii fiind caracterizată de o anumită valoare a parametrului ε.

Astfel, dacă se consideră problema de optimizare:

$$\min F(x) \qquad (10.3)$$

cu următoarele restricții:

$$\begin{aligned} & g_i(x) = 0 \quad i = \overline{1,m} \\ & h_j(x) \le 0 \quad j = \overline{m+1,q} \end{aligned} \tag{10.4}$$

se pot defini funcțiile:

$$\begin{aligned} & \varphi(y) = \begin{cases} 0 & y = 0 \\ \infty & y \neq 0 \end{cases} \\ & \xi(y) = \begin{cases} 0 & y \le 0 \\ \infty & y > 0 \end{cases} \end{aligned} \tag{10.5}$$

şi se consideră problema fără restricții:

$$\begin{aligned} & \min \Phi(x) \\ & x \in R^n \end{aligned} \tag{10.6}$$

unde:

$$\Phi(x) = F(x) + \sum_{i=1}^{m} \sigma_i \varphi(g_i(x)) + \sum_{j=m+1}^{q} \sigma_j \xi(h_j(x)) \tag{10.7}$$

în care cu σ_i, σ_j s-au notat ponderile corespunzătoare diferitelor restricții (care au valori pozitive nenule) iar $\varphi(g_i(x))$ şi $\xi(h_j(x))$ reprezintă funcțiile de penalizare.

Deoarece în interiorul domeniului soluțiilor admisibile ale problemei inițiale funcțiile $\varphi(g_i(x))$ şi $\xi(h_j(x))$ au valori nule, valorile minime ale funcțiilor $F(x)$ şi $\Phi(x)$ pe acest domeniu vor fi egale şi vor fi realizate în acelaşi punct.

În afara domeniului soluțiilor admisibile cel puțin una dintre restricții este încălcată şi, în consecință, funcția de penalizare corespunzătoare ia o valoare infinită. Din această cauză funcția de optimizare modificată ia, la rândul ei, o valoare infinită şi, în consecință, nu poate atinge minimul într-unul din aceste puncte. Deci, cele două probleme vor avea aceeaşi soluție.

Dezavantajul funcțiilor de penalizare φ şi ξ rezultă din faptul că nu sunt derivabile în origine, deci pentru determinarea minimului funcției obiectiv modificate $\Phi(x)$ nu poate fi folosită nici una din metodele performante care impun evaluarea derivatelor de ordinul întâi sau doi. De aceea s-au căutat alte funcții de penalizare care să elimine acest dezavantaj, rezultând mai multe metode care se deosebesc prin funcția de penalizare folosită.

Transformarea funcției obiectiv prin folosirea unei funcții de penalizare continuă şi derivabilă are şi ea un dezavantaj: valoarea funcției obiectiv modificate nu mai are un salt brusc de la valoarea funcției obiectiv inițiale (în interiorul domeniului soluțiilor admisibile) la o valoare foarte mare (în exteriorul acestui domeniu). Din această cauză metodele funcțiilor de penalizare produc:

a. fie mărirea valorii funcției obiectiv în imediata apropiere a frontierei domeniului soluțiilor admisibile pentru puncte situate în interiorul acestui domeniu, ceea ce conduce la mutarea punctului de minim al funcției modificate în raport cu funcția inițială mai spre interiorul domeniului;
b. fie păstrarea egalității între valorile celor două funcții obiectiv în interiorul domeniului de admisibilitate însoțită de o creştere mică a valorii funcției obiectiv modificate pentru puncte situate în afara acestui domeniu dar aflate în imediata apropiere a frontierei, ceea ce poate conduce modificarea poziției soluției optimale spre exteriorul domeniului.

Deci se poate obține sau eliminarea unor soluții admisibile ale problemei inițiale sau extinderea domeniului de admisibilitate, cele două probleme nemaiavând obligatoriu aceeaşi soluție.

Metodele care produc modificarea funcției obiectiv începând cu puncte situate în interiorul domeniului de admisibilitate se numesc metode de penalizare interioare iar cele care modifică valoarea acestei funcții doar în exteriorul acestui domeniu se numesc metode de penalizare exterioare.

Eliminarea dezavantajului neconcordanței soluțiilor optimale ale celor două probleme se face prin rezolvarea succesivă a mai multor probleme modificate aparținând aceleiaşi familii şi corespunzând unor valori diferite ale ponderilor σ, din ce în ce mai mici. În acest fel contribuția –funcției de penalizare va fi din ce în ce mai mică, permițând soluției obținute să se apropie oricât de mult de soluția problemei inițiale, până la o eroare care poate fi acceptată din punct de vedere tehnic. Pentru fiecare pas soluția obținută va fi considerată ca estimare inițială pentru rezolvarea următoarei probleme din familie.

Această metodă este foarte utilă în domeniul energetic unde nu interesează obținerea soluției exacte deoarece punerea sa în practică se realizează prin utilizarea unor echipamente care au o anumită clasă de precizie. În aceste condiții obținerea unei soluții cu o eroare sub precizia pe care o asigură echipamentele reprezintă un efort inutil.

Pentru prezentarea principalelor metode aparținând acestei clase considerăm problema de optimizare:

$$\begin{aligned} &\min F(x) \\ &g_i(x) \le 0 \quad i = \overline{1,m} \quad x \in R^n \end{aligned} \tag{10.8}$$

unde restricțiile g_i sunt presupuse a fi continue şi cu derivate de ordinul II continue.

Metoda lui Frisch transformă această problemă într-o problemă de minimizare fără restricții a funcției:

$$F(x) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \ln(-g_i(x)) \qquad \alpha_i > 0 \tag{10.9}$$

O varianța a metodei lui Frisch foloseşte aceeaşi valoare a coeficientului de ponderare pentru toate restricțiile:

$$F(x) - \alpha \sum_{i=1}^{m} \ln(-g_i(x)) \qquad \alpha > 0 \tag{10.10}$$

În acest caz se poate arăta că dacă:

a. Funcțiile F, $g_1, \ldots, g_m$ sunt convexe şi derivabile

b. Domeniul soluțiilor admisibile este mărginit

vom avea:

1. $\varphi_\alpha = F(x) - \alpha \sum_{i=1}^{m} \ln(-g_i(x))$ este convexă şi diferențiabilă

2. Dacă $\overline{x}_\alpha$ este valoarea variabilei care minimizează fără restricții pe φ_α atunci:

$$F(\overline{x}_\alpha) \geq \overline{F} \geq F(\overline{x}_\alpha) - m\alpha \qquad (10.11)$$

unde $\overline{F}$ este valoarea minimă a funcției obiectiv inițiale, deci dacă $\alpha \to 0$ rezultă că $\overline{x}_\alpha$ converge spre soluția optimă a problemei date.

Metoda lui Caroll modifică problema inițială sub forma:

$$F(x) - \mu \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(x)} \qquad \mu > 0 \quad \mu \to 0 \qquad (10.12)$$

După cum se observă, pentru aceste două metode modificarea funcției obiectiv începe încă din interiorul domeniului, funcția modificată atingând valori infinite pe frontieră. Din această cauză ele aparțin clasei metodelor de penalizare interioară (numite şi metode de tip barieră).

O funcție de penalizare foarte simplă şi cu proprietăți de continuitate şi derivabilitate remarcabile este funcția de gradul doi:

$$\begin{gathered} F(x) + \mu \sum_{i=1}^{m} \left[g_i^+(x)\right]^2 \qquad \mu > 0 \\ g_i^+(x) = \max(0, g_i(x)) \end{gathered} \qquad (10.13)$$

dar are dezavantajul unei creşteri relativ lente, ceea ce face să nu fie eficientă în toate cazurile.

În condițiile în care $\lim\limits_{\|x\|\to\infty} F(x)=\infty$ şi $g_i(x)$-continue, dacă se notează:

$$P_k(x)=F(x)+k\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^{+}(x)\right]^2 \qquad (10.14)$$

se poate arăta că:

1. $\exists\, \overline{x}_k$ care minimizează $P_k(x)$

P_k continuă, $P_k(X)\geq F(X)$ $\Rightarrow$ $\lim\limits_{\|x\|\to\infty} P_k(x)=\infty$ $\Rightarrow$ $\exists\, \overline{x}_k$ care minimizează P_k pe R^n.

2. Şirul $\left\{P_k\left(\overline{x}_k\right)\right\}$ este crescător şi mărginit superior de valoarea optimă a lui F pe domeniul soluțiilor admisibile.

Pentru a demonstra această proprietate se scrie că:

$$P_k\left(\overline{x}_k\right)=\min_{x\in R^n} P_k(x)\leq P_k\left(\overline{x}_{k+1}\right)=F\left(\overline{x}_{k+1}\right)+k\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^{+}\left(\overline{x}_{k+1}\right)\right]^2\leq$$

$$\leq F\left(\overline{x}_{k+1}\right)+(k+1)\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^{+}\left(\overline{x}_{k+1}\right)\right]^2=P_{k+1}\left(\overline{x}_{k+1}\right)$$

deci şirul este crescător.

Fie x care verifică toate restricțiile g_i, deci $g_i^{+}(x)=0$; din modul de definire al lui $\overline{x}_k$ rezultă că:

$$P_k\left(\overline{x}_k\right)\leq F(x)+k\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^{+}(x)\right]^2 \quad \forall\, x\in R^n \qquad (10.15)$$

prin particularizare pentru x soluție admisibilă:

$$P_k\left(\overline{x}_k\right)\leq F(x) \qquad (10.16)$$

deci:

$$P_k\left(\overline{x}_k\right) \le \inf\left\{F(x) \middle| g_i(x) \le 0 \quad i = \overline{1,m}\right\} \tag{10.17}$$

Dar, valoarea din partea dreaptă a inegalității reprezintă tocmai valoarea optimă a funcției *F,* notată $\overline{F}$.

3. $\lim\limits_{k \to \infty} \sum\limits_{i=1}^{m} \left[g_i^+\left(\overline{x}_k\right)\right]^2 = 0$

Fie r un minorant al lui F pe R^n; atunci:

$$r + k\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^+\left(\overline{x}_k\right)\right]^2 \le F\left(\overline{x}_k\right) + k\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^+\left(\overline{x}_k\right)\right]^2 \le P_k\left(\overline{x}_k\right) \le \overline{F}$$

de unde rezultă:

$$0 \le \sum_{i=1}^{m}\left[g_i^+\left(\overline{x}_k\right)\right]^2 \le \frac{\overline{F} - r}{k} \tag{10.18}$$

Deci, atunci când $k \to \infty$

$$\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^+\left(\overline{x}_k\right)\right]^2 \to 0 \tag{10.19}$$

4. Şirul $\left\{\overline{x}_k\right\}$ este mărginit şi orice subşir convergent converge la soluția problemei de optimizare inițiale

Dacă $\left\|\overline{x}_{k_l}\right\| \to \infty$ atunci , $\lim\limits_{l \to \infty} P\left(\overline{x}_{k_l}\right) = +\infty$ deoarece $\lim\limits_{\|x\| \to \infty} F(x) = \infty$; dar, ținând cont că:

$$F\left(\overline{x}_{k_l}\right) \le P_{k_l}\left(\overline{x}_{k_l}\right) \le \overline{F} \tag{10.20}$$

rezultă că acest lucru nu este posibil, deci $\left\{\overline{x}_{k_l}\right\}$ este mărginit.

Considerăm $\left\{\overline{x}_{k_l}\right\}$ convergent: $\overline{x}_{k_l} \to \overline{x}$

$$g_i^+\left(\overline{x}\right) = \lim_{l\to\infty}\left(g_i^+\left(\overline{x}_{k_l}\right)\right) = 0 \quad \forall\, i = \overline{1,m} \tag{10.21}$$

deci $\overline{x}$ verifică restricțiile impuse în problema inițială.

Pe de altă parte:

$$F\left(\overline{x}_{k_l}\right) \le P_{k_l}\left(x_{k_l}\right) \le \overline{F} \tag{10.22}$$

deci şi:

$$F\left(\overline{x}\right) \le \overline{F} \tag{10.23}$$

Dar cum, pe domeniul soluțiilor admisibile, $\overline{F}$ este valoarea minimă, rezultă că:

$$F\left(\overline{x}\right) = \overline{F} \tag{10.24}$$

deci $\overline{x}$ este tocmai soluția optimă pentru problema inițială.

5. $\lim\limits_{k\to\infty} k\sum\limits_{i=1}^{m}\left[g_i^+\left(\overline{x}_k\right)\right]^2 = 0$

Presupunem că limita acestui şir este pozitivă, deci există un subşir $\left\{\overline{x}_{k_l}\right\}$ şi un număr α>0 astfel încât:

$$k_l\sum_{i=1}^{m}\left[g_i^+\left(\overline{x}_{k_l}\right)\right]^2 > \alpha \tag{10.25}$$

pentru orice *l*.

Ținând cont de modul de definire al lui P_k va rezulta:

$$P_{k_l}\left(\overline{x}_{k_l}\right) - F\left(\overline{x}_{k_l}\right) = k_l \sum_{i=1}^{m} \left[g_i^+\left(\overline{x}_{k_l}\right)\right]^2 \geq \alpha \qquad (10.26)$$

Deoarece s-a presupus acest subşir convergent, rezultă că limita lui este tocmai soluția optimă a problemei, deci:

$$\overline{F} - F\left(\overline{x}_{k_l}\right) \geq P_{k_l}\left(\overline{x}_{k_l}\right) - F\left(\overline{x}_{k_l}\right) \geq \alpha > 0 \qquad (10.27)$$

Pe de altă parte, când $l \to \infty$:

$$F\left(\overline{x}_{k_l}\right) \to \overline{F} \qquad (10.28)$$

deci:

$$\overline{F} - F\left(\overline{x}_{k_l}\right) \to 0 \qquad (10.29)$$

ceea ce reprezintă o contradicție.

6. Dacă F, $g_1, \ldots, g_m$ sunt convexe şi diferențiabile atunci funcțiile P_k rezultă convexe şi diferențiabile.

g_i convexe $\Rightarrow$ g_i^+ convexe $\Rightarrow \left[g_i^+\right]^2$ convexe

Deci P_k convexe ca sumă de funcții convexe.

Un raționament asemănător conduce la concluzia că P_k sunt şi diferențiabile.

În acest caz, condiția de minim pentru P_k se scrie:

$$\nabla F\left(\overline{x}_k\right) + 2k \sum_{i=1}^{m} g_i^+\left(\overline{x}_k\right) \nabla g_i\left(\overline{x}_k\right) = 0 \qquad (10.30)$$

relație care permite determinarea lui $\overline{x}_k$.