Utilisation de techniques de programmation semi-définie positive au sein d'un solveur d'optimisation globale

Stage de recherche

LocalSolver,
24 avenue Hoche, 75008 Paris,
Julien Darlay, Nikolas Stott, Simon Boulmier
jdarlay/nstott/sboulmier@localsolver.com

1 Contexte

LocalSolver est une entreprise de service, de conseil et d'édition dans le domaine de la recherche opérationnelle. Elle développe un solveur programmation mathématique, traitant les problèmes d'optimisation sous contraintes :

$$(P)\ \min_{x \in X} f(x),$$

où $X \subset \mathbb{R}^n$ et $f : X \to \mathbb{R}^m$. Le solveur exploite de nombreux outils numériques et algorithmiques tels que la recherche locale, l'optimisation non linéaire, ou encore la programmation par contraintes. Il est utilisé pour résoudre des problèmes opérationnels dans des domaines variés de l'industrie, tels que les télécommunications, la logistique, les transport, l'énergie ou encore l'aérospatial.

Un solveur d'optimisation est dit global dès lors que ce dernier converge en temps fini même lorsque la fonction objectif f ou les contraintes définissant X sont non convexes. Les solveurs globaux utilisent différents ingrédients mathématiques pour obtenir la solution optimale, dont le plus important est la génération et la résolution de relaxations convexes. Ce stage s'intéresse à un certain type de relaxation convexe pour les fonctions quadratiques, et a pour but de les améliorer *via* l'utilisation de techniques de programmation semi-définie positive.

2 Relaxations quadratiques convexes

On s'intéresse plus précisément aux contraintes et objectifs de (P) qui sont quadratiques et non convexes. Une telle expression peut s'écrire :

$$g(x) = \sum_{i,j} q_{ij} x_i x_j + \sum_i c_i x_i + a = x^T Q x + c^T x + a,$$

où Q est une matrice réelle symétrique, c un vecteur et a un scalaire. La fonction g est convexe si et seulement si la matrice Q est semi-définie positive, c'est-à-dire si $\forall x, x^T Q x \geq 0$, ou encore si $\lambda_{\min}(Q)$, la plus petite valeur propre de Q, est positive.

Si la fonction g n'est pas convexe, il existe de nombreuses techniques permettant d'obtenir une relaxation convexe de l'ensemble admissible. L'une d'entre elle permet de générer des sous-estimateurs convexes de g, c'est-à-dire des fonctions convexes $\tilde{g}$ telles que $\tilde{g}(x) \leq g(x)$ pour tout $x \in X$. La technique consiste à exploiter la présence de contraintes de bornes $\ell \leq x \leq u$ dans tous les problèmes de type (P) traités par LocalSolver. On définit pour $\alpha \in \mathbb{R}^n_+$ la fonction $\phi_\alpha(x) = \sum_i \alpha_i (\ell_i - x_i)(u_i - x_i)$. Cette fonction est négative sur le domaine défini par les contraintes de bornes, et la matrice quadratique correspondante est

$\mathrm{Diag}(\alpha)$. Ainsi, la fonction $\tilde{g}_\alpha(x) = g(x) + \phi_\alpha(x)$ est une relaxation de g, et elle est convexe si et seulement si

$$Q + \mathrm{Diag}(\alpha) \succcurlyeq 0.$$

Des techniques classiques permettent alors de choisir α afin de satisfaire cette contrainte. Par exemple, on peut utiliser une perturbation diagonale uniforme :

$$\forall i,\ \ \alpha_i = -\lambda_{\min}(Q),$$

ou encore rendre la matrice diagonale dominante, une condition suffisante d'après le théorème de Gerschgorin, avec :

$$\alpha_i = \max\Big(0, -q_{ii} + \sum_{j \neq i} |q_{ij}|\Big).$$

3 Optimisation semi-définie positive

L'optimisation semi-définie positive concerne la résolution de programmes mathématiques dans lesquels l'objectif et les contraintes sont linéaires, à l'exception d'une contrainte non linéaire de type $X \succcurlyeq 0$, où les x_{ij} sont les variables du problème. La contrainte $Q + \mathrm{Diag}(\alpha) \succcurlyeq 0$, qui permet d'assurer qu'un sous-estimateur est convexe, rentre donc dans le cadre de l'optimisation semi-définie positive. On peut alors s'intéresser à des questions comme la recherche de la meilleure perturbation diagonale α pour certains critères. Par exemple, l'erreur commise en formant la relaxation convexe $g(x) + \phi_\alpha(x)$ est

$$\min_{\ell \leq x \leq u} \phi_\alpha(x) = -\frac{1}{2} \sum_i \alpha_i (u_i - \ell_i)^2.$$

Une piste pour améliorer les relaxations convexes élémentaires présentées en fin de paragraphe précédent serait alors de résoudre à la place le programme semi-défini suivant :

$$\begin{aligned} \min_{\alpha \in \mathbb{R}} \ & -\frac{1}{2} \sum_i \alpha_i (u_i - \ell_i)^2 \\ \text{s.c.} & \begin{cases} \alpha \geq 0, \\ Q + \mathrm{Diag}(\alpha) \succcurlyeq 0. \end{cases} \end{aligned}$$

La relaxation ainsi obtenue est plus serrée, elle commet moins d'erreur par rapport à la fonction initiale g.

L'implémentation de cette approche dans LocalSolver permettra d'obtenir de meilleures bornes inférieures sur les problèmes contenant des expressions quadratiques, ainsi que d'améliorer la recherche de solutions. La résolution des programmes semi-définis se fera d'abord grâce à des outils libres préexistants, avec la possibilité d'implémenter un solveur de programmation semi-définie positive dédié aux problèmes résolus. Enfin, une autre piste d'amélioration sera de considérer des sous-estimateurs où chaque coefficient de Q est modifié : pour $\alpha \in \mathbb{R}^{n \times n}$,

$$\phi_\alpha(x) = \sum_{ij} \alpha_{ij} (\ell_i - x_i)(u_j - x_j).$$