Mac 5701 - Tópicos em Ciência da Computação
Plano de estudos: Um método de restrições ativas para minimização em caixas

16 de setembro de 2002

Orientador: Ernesto G. Birgin

Aluna: Marina Andretta

Resumo

Recentemente, foi introduzido um novo método de restrições ativas para a minimização de problemas com restrições de caixa [6]. O algoritmo combina um método irrestrito com Gradiente Espectral Projetado para eliminar restrições do conjunto das variáveis livres. O algoritmo irrestrito inclui uma busca linear que tenta acrescentar muitas restrições no conjunto de restrições ativas a cada iteração. Dentro das faces, utiliza-se um método do tipo Newton truncado que, desenhado para problemas de grande porte, aproxima os produtos hessiana-vetor por quocientes incrementais. Experimentos computacionais mostraram que esta alternativa não é a mais adequada para problemas de médio porte, com hessianas esparsas ou com gradientes computacionalmente custosos. No presente trabalho, estudaremos os métodos de restriçoẽs ativas, em particular o proposto em [6], e proporemos e implementaremos uma alternativa para o método utilizado na minimização dentro das faces. Algumas opções são: direção de Newton truncado usando produtos hessiana-vetor verdadeiros e direção de Newton.

1 Desenvolvimento

O problema considerado neste trabalho consiste na minimização de uma função suave $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com limitantes nas variáveis. O conjunto viável é definido por

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \ell \leq x \leq u\}. \tag{1}$$

Algoritmos para minimização em caixas são utilizados como subalgoritmos para resolver os subproblemas que aparecem em muitos métodos de Lagrangeano Aumentando e penalização para problemas com restrições gerais. Veja [10, 11, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 23, 25]. Os métodos introduzidos em [10] e [22] são do tipo regiões de confiança. Para cada iterando $x_k \in \Omega$, uma aproximação quadrática de f é minimizada na caixa de uma região de confiança. Se o valor da função objetivo no ponto tentativo é suficientemente menor que $f(x_k)$, o ponto tentativo é aceito. Senão, a região de confiança é reduzida. A diferença entre [10] e [22] é que, em [10], o ponto tentativo está na face definida pelo "Ponto de Cauchy", enquanto que, em [22], o ponto tentativo é obtido através de um método específico para resolver problemas quadráticos com restrições de caixa chamado QUACAN. Veja [1, 13, 20, 21, 25] e [12] (p. 459). Outros métodos para minimização em caixas foram introduzidos em [2, 24].

QUACAN é um método de restrições ativas que utiliza gradientes conjugados e minimizações aproximadas dentro das faces, projeções para adicionar restrições ao conjunto ativo e uma direção ortogonal à face para abandonar a face atual quando um minimizador aproximado é encontrado. Em [15] é dada uma interpretação física desta direção.

Experimentos numéricos em [14] sugeriram que a eficiência do algoritmo [22] deve-se, não à estratégia de restrições ativas, mas à estratégia de QUACAN para lidar com as restrições. Esta observação nos motiva a adaptar a estratégia de QUACAN a problemas gerais com restrições de caixa. Esta adaptação envolve duas decisões principais. Por um lado, precisamos escolher um método de minimização irrestrita para trabalhar com a função objetivo dentro das faces. Por outro lado, é necessário definir estratégias robustas e eficientes para abandonar as faces e para adicionar restrições ativas. Em [5] e [9] foram feitas tentativas para a primeira decisão. Em [9] um algoritmo de *secant multipoint minimization* é utilizado e em [5] os autores utilizam o algoritmo de minimização de segunda ordem de Zhang e Xu [30].

Em [6] foi adotado o critério para abandonar as faces de [5], que utiliza o gradiente Espectral Projetado definido em [7, 8]. Veja também [3, 4, 28, 29]. Para a minimização dentro das faces utilizou-se um novo algoritmo com uma busca linear que combina *backtracking* com extrapolações. O compromisso em todo algoritmo de busca linear é entre precisão na localização do mínimo local unidimensional e economia em termos de avaliações de função. Algoritmos de busca linear do tipo *backtracking* são baratos mas, às vezes, tendem a gerar passos extremamente pequenos. Por esse motivo, o *backtracking* é complementado com um processo simples de extrapolação. A direção escolhida a cada passo é arbitrária, desde que satisfaça uma condição de ângulo. Nos experimentos foi utilizada uma direção de Newton truncado cujo cômputo, desenhado para problemas de grande porte, aproxima os produtos hessiana-vetor por quocientes incrementais. Experimentos computacionais posteriores mostraram que esta alternativa não é a mais adequada para problemas de médio porte, com hessianas esparsas ou com gradientes computacionalmente custosos. No presente trabalho, proporemos e implementaremos alguma alternativa para a direção escolhida dentro das faces.

Seguindo o cronograma de estudos elaborado para o Mestrado, a aluna irá-se familiarizar com a bibliografia, estudando algoritmos para minimização de funções sem restrições baseados em região de confiança, propostos em [26] e no capítulo 4 de [27].

References

[1] R. H. Bielschowsky, A. Friedlander, F. M. Gomes, J. M. Martínez and M. Raydan. An adaptive algorithm for bound constrained quadratic minimization. *Investigación*

Operativa 7, pp. 67–102 (1998).

[2] R. H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal and C. Zhu, A limited memory algorithm for bound constrained minimization. *SIAM Journal on Scientific Computing* 16, pp. 1190–1208 (1995).

[3] E. G. Birgin, R. Biloti, M. Tygel and L.T. Santos. Restricted optimization: a clue to a fast and accurate implementation of the Common Reflection Surface stack method. *Journal of Applied Geophysics* 42, pp. 143–155 (1999).

[4] E. G. Birgin, I. Chambouleyron and J. M. Martínez. Estimation of the optical constants and the thickness of thin films using unconstrained optimization. *Journal of Computational Physics* 151, pp. 862–880 (1999).

[5] E. G. Birgin and J. M. Martínez. A box constrained optimization algorithm with negative curvature directions and spectral projected gradients. *Computing* Supplement 15, pp. 49–60 (2001).

[6] E. G. Birgin, and J. M. Martínez. Large-scale active-set box-constrained optimization method with spectral projected gradients. Por aparecer em *Computational Optimization and Applications* (2002).

[7] E. G. Birgin, J. M. Martínez and M. Raydan. Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets. *SIAM Journal on Optimization* 10, pp. 1196-1211 (2000).

[8] E. G. Birgin, J. M. Martínez and M. Raydan. SPG: Software for convex-constrained optimization. To appear in *ACM Transactions on Mathematical Software.*

[9] O. Burdakov, J. M. Martínez and E. A. Pilotta. A limited-memory multipoint secant method for bound-constrained optimization. Technical Report, Institute of Mathematics, University of Campinas.

[10] A. R. Conn, N. I. M. Gould and Ph. L. Toint. Global convergence of a class of trust region algorithms for optimization with simple bounds. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 25, pp. 433–460 (1988).

[11] A. R. Conn, N. I. M. Gould and Ph. L. Toint. A globally convergent augmented Lagrangean algorithm for optimization with general constraints and simple bounds, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 28, pp. 545–572 (1991).

[12] A. R. Conn, N. I. M. Gould and Ph. L. Toint. *Trust-Region Methods.* MPS-SIAM Series on Optimization, SIAM, Philadelphia, 2000.

[13] M. A. Diniz-Ehrhardt, Z. Dostál, M. A. Gomes-Ruggiero, J. M. Martínez and S. A. Santos. Nonmonotone strategy for minimization of quadratics with simple constraints. *Applications of Mathematics* 46, pp. 321–338 (2001).

[14] M. A. Diniz-Ehrhardt, M. A. Gomes-Ruggiero and S. A. Santos. Comparing the numerical performance of two trust-region algorithms for large-scale bound-constrained minimization, in *International Workshop of Numerical Linear Algebra and Optimization*, edited by R. J. B. Sampaio and J. Y. Yuan, Department of Mathematics, Universidade Federal do Paraná, Brazil, pp. 23–24 (1997).

[15] Z. Dostál. Box constrained quadratic programming with proportioning and projections. *SIAM Journal on Optimization* 7, pp. 871–887 (1997).

[16] Z. Dostál, A. Friedlander and S. A. Santos. Solution of coercive and semicoercive contact problems by FETI domain decomposition. *Contemporary Mathematics* 218, pp. 82–93 (1998).

[17] Z. Dostál, A. Friedlander and S. A. Santos. Augmented Lagrangians with adaptive precision control for quadratic programming with equality constraints. *Computational Optimization and Applications* 14, pp.1–17 (1999).

[18] Z. Dostál, A. Friedlander and S. A. Santos. Adaptive Precision Control in Quadratic Programming with Simple Bounds and/or Equalities. To appear in *High Performance Algorithms and Software in Nonlinear Optimization: Applied Optimization*, edited by R. De Leone, A. Murli, P. Pardalos, G. Toraldo, editors, Kluwer.

[19] Z. Dostál, F. A. M. Gomes and S. A. Santos. Solution of contact problems by FETI domain decomposition with natural coarse space projections, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 126, pp. 397–415 (2000).

[20] A. Friedlander and J. M. Martínez. On the maximization of a concave quadratic function with box constraints. *SIAM Journal on Optimization* 4, pp. 177–192 (1994).

[21] A. Friedlander, J. M. Martínez and M. Raydan. A new method for large-scale box constrained convex quadratic minimization problems. *Optimization Methods and Software* 5, pp. 57–74 (1995).

[22] A. Friedlander, J. M. Martínez and S. A. Santos. A new trust region algorithm for bound constrained minimization. *Applied Mathematics and Optimization* 30, pp. 235–266 (1994).

[23] N. Krejić, J. M. Martínez, M. P. Mello and E. A. Pilotta. Validation of an augmented Lagrangian algorithm with a Gauss-Newton Hessian approximation using a set of hard-spheres problems. *Computational Optimization and Applications* 16, pp. 247–263 (2000).

[24] C. J. Lin and J. J. Moré. Newton's method for large bound-constrained optimization problems. *SIAM Journal on Optimization* 9 pp. 1100–1127 (1999).

[25] J. M. Martínez. BOX-QUACAN and the implementation of Augmented Lagrangian algorithms for minimization with inequality constraints. *Computational and Applied Mathematics* 19, pp. 31–56 (2000).

[26] J. J. Moré and D. C. Sorensen. Computing a trust region step, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 4, pp. 553–572 (1983)

[27] J. Nocedal and S. J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer, 1999.

[28] M. Raydan. On the Barzilai and Borwein choice of steplength for the gradient method, *IMA Journal of Numerical Analysis* 13, pp. 321–326 (1993).

[29] M. Raydan. The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem. *SIAM Journal on Optimization* 7, pp. 26–33 (1997).

[30] J. Zhang and C. Xu. A class of indefinite dogleg path methods for unconstrained minimization. *SIAM Journal on Optimization* 9, pp. 646–667 (1999).