

Projeto de Pesquisa

Algoritmo Duas-Fases em Otimização Global

Aluno: Gabriel Haeser

Orientadora: Prof. Dra. Márcia A. Gomes-Ruggiero

1 Resumo

Nas aplicações de técnicas em otimização, como por exemplo na área de Engenharia Química, a solução de interesse é o ótimo global dos problemas que representam o modelo real. A dificuldade central da busca pelo ótimo global resulta do fato que os algoritmos usuais em otimização dependem fortemente do ponto inicial e a sequência de aproximações converge a um ponto estacionário, ótimo local, que pode ou não ser o ótimo global. A proposta nesta pesquisa é elaborar um algoritmo de otimização global do tipo duas-fases, isto é, ciclos que envolvem uma etapa onde são acionadas as heurísticas e uma etapa local onde será acionado um otimizador local. Os algoritmos propostos serão aplicados à resolução de um conjunto de problemas da Engenharia Química e a expectativa é a de obter bons métodos, oferecendo alternativas competitivas para a resolução de modelos que requerem ótimo global.

2 Justificativa e Objetivos

O Grupo de Otimização em Matemática Aplicada, sob coordenação do prof. José Mario Martínez conta atualmente com 09 professores colaboradores, 13 alunos de pós-graduação e 05 alunos bolsistas em Iniciação Científica. Além dos vários projetos individuais de pesquisa, temos em vigência o projeto temático 01/04597-4, *Métodos Computacionais em Otimização*. Os pesquisadores do grupo desenvolvem trabalhos com temas diversos dentro da Otimização sendo que a otimização de problemas restritos e a resolução de sistemas não lineares podem ser citados como temas centrais tanto através de propostas de novos algoritmos como sob a elaboração de softwares e resolução de problemas aplicados.

A realização desta pesquisa permite a integração do aluno a este grupo, iniciando seus trabalhos em otimização em nível de pós-graduação. Na graduação teve um desempenho excelente nas disciplinas que cursou e com relação a trabalhos de pesquisa, o aluno

trabalhou em dois projetos de iniciação científica sendo que o primeiro projeto teve financiamento Pibic/CNPq e foi elaborado no período agosto de 2001 a julho de 2002 com tema em Álgebra Linear e Aplicações e o segundo projeto contou com o financiamento da Fapesp e teve como tema Técnicas Multigrid para Resolução de Sistemas Lineares e Não Lineares e foi elaborado no período setembro de 2002 a agosto de 2003. O aluno já foi admitido no programa de pós-graduação em Matemática Aplicada através de um processo de seleção realizado por exame e cartas de recomendação.

O objetivo deste projeto é a elaboração de uma pesquisa que visa a ampliação dos conhecimentos do aluno na área de Otimização. O tema proposto, Otimização Global permite a realização de um trabalho que envolve a proposta de algoritmos, a elaboração computacional dos mesmos e testes em problemas clássicos e aplicados.

3 Detalhamento do Tema

3.1 Introdução

Os problemas que serão tratados nesta pesquisa são: problemas de minimização com restrições de canalização:

$$\min f(x), \quad \ell \leq x \leq u, \quad f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R},$$

problemas restritos de minimização com restrições gerais e de canalização:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \quad f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \\ \text{s. a.:} \quad & h(x) = 0 \\ & g(x) \leq 0 \\ & \ell \leq x \leq u \end{aligned}$$

e problemas com formulação MINLP: problemas não lineares restritos com variáveis contínuas e inteiras.

Em pesquisas na literatura especializada sobre aplicações de técnicas em otimização, principalmente na área de Engenharia Química, é possível constatar que um grande número de problemas resulta em modelos não lineares com funções não convexas e as não convexidades levam a múltiplos ótimos locais tornando difícil a tarefa de identificar o ótimo global, que é a solução de interesse nestas aplicações, [?], [?], [?] e [?]. A dificuldade central da busca pelo ótimo global resulta do fato que os algoritmos usuais em otimização dependem fortemente do ponto inicial e a sequência de aproximações converge a um ponto estacionário, ótimo local, que pode ou não ser o ótimo global.

Os algoritmos em otimização global [?] podem ser classificados em técnicas estocásticas e determinísticas. Métodos estocásticos, apresentam a vantagem de não fazer qualquer exigência sobre as funções que definem o problema e requerem heurísticas em seus procedimentos de busca, convergindo para o ótimo global à medida que o tempo de execução tende a infinito. Entre os métodos estocásticos destacam-se métodos de busca aleatória, clustering e as metaheurísticas: simulated annealing [?], [?], algoritmos genéticos e tabu search [?], [?] e [?]. As técnicas determinísticas procuram tirar proveito da estrutura do problema, das particularidades das funções envolvidas e em geral garantem convergência finita a um nível pré-estabelecido de precisão. Entre os processos determinísticos podemos citar os métodos do tipo branch-and-bound e algoritmos de decomposição, [?], [?].

A proposta nesta pesquisa é elaborar um algoritmo de otimização global do tipo duas-fases, isto é, ciclos que envolvem uma etapa onde são acionadas as heurísticas e uma etapa local onde será acionado um otimizador local.

As heurísticas têm por objetivo:

- a) identificar boas regiões de busca que contenham boas aproximações iniciais para um otimizador local;
- b) evitar que um mesmo ótimo local seja obtido repetidas vezes pelo otimizador local;
- c) identificar sub- e super-soluções e incorporar estas informações no processo de resolução;
- d) gerar sequências que não caiam em armadilhas de ótimos locais e busquem com mais intensidade as direções que conduzem ao ótimo global.

Identificada uma boa aproximação inicial, a investigação será realizada através de **Box-Quacan**, [?], [?] e [?]. O algoritmo implementado neste software é do tipo Lagrangeano Aumentado e se aplica a problemas de otimização com restrições gerais. Em cada iteração externa é resolvido um subproblema de minimização com restrições de canalização através de **Box**. Este algoritmo possui propriedade de convergência global, isto é, a partir de qualquer chute inicial gera uma sequência convergente a um ponto estacionário (ótimo local) e comprovou em trabalhos anteriores [?] que é um pacote robusto e competitivo na resolução de problemas de programação não linear constituindo um bom solver local para o algoritmo de otimização.

3.2 Estratégias

As seguintes estratégias que serão analisadas na composição dos algoritmos [?]:

- **Multiple Random Search ou Multistart**
Esta técnicas têm por objetivo gerar conjuntos de pontos e selecionar aproximações

iniciais para o otimizador local. Tais pontos podem ser gerados de forma aleatória ou sistemática e a seleção de aproximações iniciais usa como informações os valores da função objetivo e/ou os critérios de factibilidade. Considerando que o algoritmo **Box-Quacan** para problemas restritos baseia-se em técnicas de Lagrangeano aumentado, o procedimento de geração de pontos deve considerar apenas as restrições de canalização das variáveis. A idéia é bastante simples e deve ser acoplada a outras técnicas em otimização global, principalmente para evitar que um mesmo ótimo local seja obtido repetidas vezes pelo otimizador local.

- **Clustering**

É uma forma modificada da técnica **multistart** com o objetivo de evitar a obtenção de um mesmo ótimo local. Para isto a seleção de um ponto inicial é mais cuidadosa pois adota critérios (clustering) para identificar grupos de pontos que estão em uma mesma vizinhança de um mesmo ótimo local e somente um ponto de cada grupo será usado como aproximação inicial para o solver local.

- **Tunneling e Cutting**

As idéias básicas destas duas estratégias têm por objetivo evitar a obtenção de um ótimo local previamente obtido. Considerando o problema com restrições de canalização, em técnicas baseadas em *tunneling*, [?], a proposta é obter uma sequência ótimos locais com valores decrescentes para a função objetivo: $f(x_1^*) \geq f(x_2^*) \dots \geq f(x_k^*)$. Em sua forma original, esta estratégia consiste em duas etapas: *minimização local* onde é acionado o otimizador local e *tunneling* onde o objetivo é encontrar um ponto em outra região, com valor menor para a função objetivo. Esta proposta pode ser estendida para problemas restritos ou então a restrição $f(x) < f_{best}$ pode ser incorporada ao conjunto de restrições, e neste caso, estaremos trabalhando com técnicas conhecidas como **Cutting Plane** ou **Cut Region**, [?].

- **Simulated Annealing**

O conceito desta heurística está fundamentado na analogia entre o processo de resfriamento de um metal, [?] e o procedimento para minimizar uma função, [?]. No caso do metal dois parâmetros são fundamentais: taxa de resfriamento e o tempo de permanência em cada nível para que seja atingido o equilíbrio térmico. Para a otimização de funções acréscimos no valor da função são aceitos de forma controlada (na tentativa de não cair em armadilhas de ótimos locais), mas a probabilidade de aceitar um aumento em f diminui a medida em que aumenta o número de iterações. Por analogia com o caso físico, no início do processo a tolerância (*temperatura*) é alta o que possibilita que um grande número de pontos sejam aceitos como potenciais (para aproximações iniciais do otimizador local, por exemplo). Com o desenrolar do processo (execução das iterações) esta tolerância diminui (*processo de resfriamento*) até atingir o nível zero, no qual somente pontos que resultem em decréscimos estrito em f serão aceitos. Alguns parâmetros são fundamentais para este processo,

notadamente a tolerância inicial, a duração de cada nível e a função que ajusta a tolerância ao final de cada nível. Esta técnica tem sido explorada com sucesso em alguns trabalhos, [?] e [?].

- **Multilevel Annealing**

As técnicas ou métodos Multigrid foram originalmente propostas ([?], [?]) para a resolução de problemas de valor de contorno. Atualmente, os fundamentos básicos desta técnica têm sido também empregados para resolução de sistemas algébricos que modelam outras aplicações além dos problemas de valor de contorno.

Em técnicas multigrid aplicadas à resolução numérica de problemas de valor de contorno a proposta fundamental é trabalhar não apenas sobre a malha resultante da discretização do problema com espaçamento h , mas, com malhas mais grossas (*coarse grids*), obtidas ao se usar espaçamentos maiores como por exemplo $2h, 4h$. A vantagem nestes casos, é que os sistemas lineares resultantes serão menores, e a matriz de coeficientes será melhor condicionada. Contudo, existe a necessidade de se definir operadores que permitam a transição de uma malha para a outra: *operadores de Prolongação ou Interpolação* e *operadores de Restrição*. Um algoritmo pode ser composto de modo a realizar iterações em diferentes níveis, sendo que se a sequência de malhas resultar em uma malha com poucas variáveis, o sistema linear resultante pode ser resolvido exatamente através de um método direto.

Além de poder fornecer melhores aproximações para o problema na malha h as iterações realizadas em malhas mais grossas permitem uma aceleração no processo resultando em número menor de iterações. Esta aceleração se deve à propriedade da *suavização do erro* descrita em [?].

Em [?] e [?] são descritas algumas possíveis estratégias de otimização global associadas à técnicas multigrid. As aplicações que tornam possível esta composição é dependente do problema, isto é aqueles que permitem a resolução em subespaços de dimensões menores ou aqueles que possuem uma formulação que permite o processamento separado em cada escala do problema, combinado com interações entre estas escalas. Neste caso, o correto é usar o termo *multiscale* em lugar de *multigrid*.

A composição das duas técnicas: multigrid e simulated annealing baseia-se nas propostas básicas de cada uma estabelecendo uma analogia entre os níveis de *temperatura* do processo simulated annealing e a dimensão do problema, *multiscale*, a ser trabalhado em cada um destes níveis.

Denotando por X_c o conjunto das variáveis originais do problema escolhidas para

compor o nível em menor dimensão e adotando como heurística o simulated annealing, a monitoração do conjunto X_c é uma tarefa necessária em cada nível de *temperatura* (ou *tolerância*). Esta monitoração consiste em avaliar estas variáveis através de alguma medida de equilíbrio (ou estagnação). Uma vez que esta situação é identificada, novas variáveis devem ser associadas ao sistema. As candidatas podem ser escolhidas a partir de seu significado físico ou por alguma critério que envolva sua correlação com as demais variáveis. Ou, como ocorre com as estratégias multigrid, a incorporação de novas variáveis pode ser realizada através de processos de interpolação, e neste caso, é preciso estabelecer estes operadores.

3.3 Aplicações

A partir do exposto é possível perceber que centralizando um mesmo otimizador local, vários algoritmos poderão ser propostos e é esta a intenção. Os algoritmos propostos serão aplicados à resolução de um conjunto de problemas extraídos da Engenharia Química. Trabalharemos inicialmente com um modelo específico, por exemplo, as formulações não lineares (NLP) resultantes de redes de troca de calor: *Heat exchanger network synthesis*, [?]. Numa etapa mais avançada, a proposta é trabalhar com formulações destes problemas que envolvam variáveis de decisão (variáveis 0-1), uma vez que a formulação mais completa do problema mencionado acima é do tipo MINLP (mixed integer nonlinear programming) com variáveis binárias. Em seguida, o objetivo é aplicar e/ou adaptar o algoritmo a outros modelos da Engenharia Química.

Para a técnica **Multilevel Annealing** a proposta é buscar por aplicações em que seja natural a resolução de problemas em dimensões menores *coarse variables* isto é, aqueles que a própria natureza física possibilita a identificação das variáveis que compõem os conjuntos de variáveis em níveis de menor dimensão.

Temos expectativa de obter bons algoritmos, oferecendo alternativas competitivas para resolução de problemas resultantes de aplicações em Otimização.

4 Cronograma e Plano de Trabalho

1^o semestre de 2004:

- cursar disciplinas Matrizes, Análise Aplicada, Métodos Computacionais de Álgebra Linear;
- assistir ao Seminário de Otimização;
- realizar revisão de literatura em Otimização Global.

2^o semestre de 2004:

- cursar Análise Numérica I, Métodos de Otimização, e disciplina de Tópicos;
- assistir ao Seminário de Otimização;
- completar a revisão de literatura e iniciar a elaboração de algoritmos envolvendo um otimizador local e estratégias para ótimos globais;

Janeiro-Fevereiro de 2005:

- iniciar redação da tese e preparação para exame de qualificação.

Março 2005:

- exame de qualificação;
- redação do primeiro relatório anual para a entidade financiadora.

1^o semestre de 2005:

- cursar Análise Numérica II e disciplina de Tópicos;
- participar dos seminários em Otimização;
- organizar os testes computacionais: busca e resolução de problemas reais e elaboração de gráficos comparativos.

2^o semestre de 2005:

- finalizar as implementações computacionais e comparações.

Janeiro-Fevereiro de 2006:

- finalização da redação da tese.

Final de fevereiro de 2006:

- defesa de tese.

5 Material e Métodos

O material de apoio teórico é constituído por livros clássicos em otimização, [?], [?], [?], [?], [?] e artigos com os temas específicos citados na seção 3. Todo este material faz parte do acervo da biblioteca do Imecc. O material de apoio computacional é composto pelo software MatLab (versão 6.1) que está instalado nos computadores dos laboratórios de Ensino do Imecc e o software **Box-Quacan** disponível em todos os laboratórios.

6 Forma de Análise

O acompanhamento do projeto será realizado através de reuniões semanais entre o aluno e a orientadora e a partir do segundo semestre de 2004 o aluno apresentará um seminário por semestre na disciplina Seminários em Otimização. A participação nestes seminários é fundamental para a integração do aluno ao grupo e também por possibilitar discussões do material apresentado, resultando em contribuições para o desenvolvimento da tese.

Referências

- [1] A. BRANDT, Multiscale Scientific Computation: Review 2000, disponível em <http://www.wisdom.weizmann.ac.il/~achi/>
- [2] A. BRANDT AND D. RON, Multigrid Solvers and Multilevel Optimization Techniques, disponível em <http://www.wisdom.weizmann.ac.il/~achi/>.
- [3] W. L. BRIGGS, V. E. HENSON AND S. F. MCCORMICK, A Multigrid Tutorial, SIAM, second edition, 2000.
- [4] L. CASTELLANOS AND S. GOMEZ, A new implementation of the Tunneling Methods for bound constrained global optimization, Submitted to ACM-TOMS, 2000.
- [5] R. CHELOUAH & P. SIARRY, Tabu Search applied to global optimization, *European Journal of Operational Research* **123**, pp. 256–270, 2000.
- [6] M. F. CARDOSO, R. L. SALCEDO, S. FEYO DE AZEVEDO & D. BARBOSA, A simulated annealing to the solution of MINLP problems, *Computers and Chemical Engineering* **12**, pp. 1349–1364, 1997.
- [7] M. A. DINIZ–EHRHARDT, Z. DÓSTAL, M. A. GOMES–RUGGIERO J. M. MARTÍNEZ & S. A. SANTOS, Nonmonotone strategy for minimization of quadratics with simple constraints, *aceito para publicação em Applications of Mathematics*
- [8] M. A. DINIZ–EHRHARDT, M. A. GOMES–RUGGIERO & S. A. SANTOS, Comparing the numerical performance of two trust-region algorithms for large-scale bound-constrained minimization, *Investigación Operativa* **7**, pp. 23–54, 1997.
- [9] M. A. DINIZ–EHRHARDT, M. A. GOMES–RUGGIERO & S. A. SANTOS, Numerical analysis of leaving-face parameters in bound-constrained quadratic minimization, *Optimization Methods and Software* **15**, pp. 45–66, 2001.
- [10] J. E. DENNIS JR. AND R. B. SCHNABEL, Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [11] C. A. FLOUDAS, Global optimization in design and control of chemical process systems, *Journal of Process Control* **10**, pp. 125–134, (2000).
- [12] C. A. FLOUDAS, A. AGGARWAL & A. R. CIRIC, Global optimum search for nonconvex NLP and MINLP problems, *Computers and Chemical Engineering* **13** 10, pp. 1117–1132, 1989.

- [13] C. A. FLOUDAS & P. M. PARDALOS, A Collection of Test Problems for Constrained Global Optimization Algorithm, *Lecture Notes in Computer Science* **455**, 1987.
- [14] A. FRIEDLANDER, Elementos de Programação Não Linear, Editora da Unicamp, 1994.
- [15] A. FRIEDLANDER & J. M. MARTÍNEZ, On the numerical solution of bound constrained optimization problems, *RAIRO Operations Research* **23**, pp. 319–341, 1989.
- [16] A. FRIEDLANDER & J. M. MARTÍNEZ, On the maximization of a concave quadratic function with box constraints, *SIAM Journal on Optimization* **4**, pp. 177–192, 1994.
- [17] A. FRIEDLANDER, J. M. MARTÍNEZ & S. A. SANTOS, A new trust region algorithm for bound constrained minimization, *Applied Mathematics & Optimization* **30**, pp. 235–266, 1994.
- [18] P. E. GILL, W. MURRAY AND M. WRIGHT, Practical Optimization, Academic Press, 1981.
- [19] F. GLOVER, Tabu search: Part I *ORSA Journal on Computing* **1** pp. 190–206, (1989).
- [20] F. GLOVER, Tabu search: Part II *ORSA Journal on Computing* **2** pp. 4–32, (1990).
- [21] P. GRAY, W. HART, L. PAINTON, C. PHILLIPS, M. TRAHAN AND J. WAGNER, A Survey of Global Optimization Methods, disponível em <http://www.cs.sandia.gov/opt/survey>
- [22] S. KIRKPATRICK, C. D. GELATT AND M. P. VECCHI, Optimization by simulated annealing, *Science*, 220, 4598, 671–680, 1983.
- [23] A. V. LEVY AND S. GOMEZ, The Tunneling Method Applied to Global Optimization, P. T. Boggs, R. H. Byrd and R. B. Schnabel (eds), Numerical Optimization, SIAM, 1985.
- [24] D. G. LUENBERGER, Linear and Nonlinear Programming, 2a. ed., Addison-Wesley, Reading Massachusetts, 1984.
- [25] A. NEUMAIER, Constrained Global Optimization, Chapter 4 of Algorithms for Solving Nonlinear constrained and Optimization Problems: The State of the Art - The COCONUT project.
- [26] J. M. MARTÍNEZ E S. A. SANTOS, Métodos Computacionais de Otimização, IMPA, 20º Colóquio Brasileiro de Matemática, Rio de Janeiro, SBM, 1995.

- [27] N. A. METROPOLIS, A. ROSENBLUTH, M. ROSENBLUTH, A. TELLER AND E. TELLER, Equation of state calculation by fast computing machines, *J. Chem. Phys.*, 21, 6, pp. 1087–1092, 1953.
- [28] P. M. PARDALOS, H. E. ROMEIJN & HOANG TUY, Recent developments and trends in global optimization, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **124**, pp. 209–228, 2000.
- [29] H. S RYOO & N. V. SAHINIDIS, Global optimization of Nonconvex NLPs and MINLPs with applications in process design, *Computers Chemical Engineering* **19** 5, pp. 551-566, 1995.
- [30] P. SIARRY, G. BERTHIAU, F. DURBIN & J. HAUSSE, Enhanced simulated annealing for globally minimizing functions for many-continuous variables, *ACM Transactions on Mathematical Software* **23**, 1997.

Gabriel Haeser

Márcia A. Gomes-Ruggiero