

Bando per Finanziamento Giovani Ricercatori - GNCS 2013

Responsabile: Margherita Porcelli
Qualifica: Assegnista di Ricerca
Università di Bologna, Dipartimento di Matematica,
Piazza Porta S. Donato 5, 40127 Bologna, Tel: +39 051 2094423
`margherita.porcelli@unibo.it`

22 Settembre 2014

Tematica di ricerca: Identificazione automatica dei parametri algoritmici ottimali
Finanziamento ottenuto: 1200 euro

1 Descrizione dell'attività di ricerca svolta e risultati ottenuti.

Il principale obiettivo del Progetto è stato analizzare la dipendenza di alcuni metodi numerici da un certo insieme di parametri. A tale scopo, abbiamo considerato due tipi di parametri: quelli che descrivono la modellizzazione di problemi applicativi e quelli che invece nascono nello sviluppo di algoritmi numerici per il calcolo scientifico.

Il primo caso è stato analizzato nella linea tematica a) in cui è stata analizzata la dipendenza di nuovi preconditionatori per sistemi di tipo punto sella rispetto ai parametri che descrivono la discretizzazione di problemi di controllo ottimo vincolati da PDE. Nel secondo caso, linea tematica b), è stato sviluppato un algoritmo che permette di identificare i parametri ottimali di un metodo numerico, cioè quei parametri che forniscono le migliori prestazioni del metodo su una certa classe di problemi.

a) Preconditionatori robusti per sistemi KKT nei problemi di controllo ottimo vincolati

La ricerca ha riguardato lo sviluppo di preconditionatori per sequenze di sistemi lineari che nascono nella risoluzione di problemi di ottimizzazione non lineare mediante metodi di tipo Newton.

Abbiamo considerato metodi ai vincoli attivi per la seguente famiglia di problemi di

controllo ottimo

$$\begin{aligned} & \min_{y,u} \frac{1}{2} \|y - y_d\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\nu}{2} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ & \text{s.t.} \quad \begin{cases} -\Delta y - \beta \cdot \nabla y = u & \text{in } \Omega \\ y = \bar{y} & \text{on } \partial\Omega \\ a \leq \alpha_u u + \alpha_y y \leq b & \text{a.e. in } \Omega, \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

dove $\nu > 0$ è un parametro di regolarizzazione, y_d rappresenta “the desired state”, Ω è un dominio in \mathbb{R}^3 . Lo stato y e il controllo u sono legati da una PDE di tipo convezione-diffusione con direzione di convezione $\beta \in \mathbb{R}^d$. α_u, α_y sono scalari non negativi tali che $\max\{\alpha_y, \alpha_u\} > 0$. Variando i parametri α_u, α_y , otteniamo problemi di controllo con diversi vincoli di disuguaglianza. In particolare, i più noti in letteratura si ottengono con $(\alpha_u, \alpha_y) = (1, 0)$ (box solo sul controllo), $(\alpha_u, \alpha_y) = (0, 1)$ (box solo sullo stato), $(\alpha_u, \alpha_y) = (1, \epsilon)$ (box mista sul controllo e sullo stato), con $\epsilon > 0$ ulteriore parametro di regolarizzazione.

La presenza dei vincoli di tipo box conduce alla risoluzione di una sequenza di sistemi lineari di tipo punto sella i cui blocchi dipendono dall’insieme dei vincoli attivi all’iterazione corrente. In [PST] sono stati proposti nuovi preconditionatori (uno simmetrico e definito positivo e uno indefinito) e ne sono state mostrate le proprietà sia teoriche che pratiche con particolare riferimento alla dipendenza dei parametri del problema considerato: il parametro di discretizzazione h , i parametri di regolarizzazione ν, ϵ e il termine di convezione β . Dal punto di vista teorico, per molti problemi della famiglia (1) sono state presentate stime spettrali ottimali e indipendenti dai parametri, dimostrandone pertanto l’ottimalità e la robustezza. Dal punto di vista pratico, è stata fatta un’approfondita sperimentazione numerica considerando un ampio insieme di valori dei parametri che ha validato i risultati teorici. Preconditionatori per sequenze di sistemi lineari sono state considerati anche in [BP].

Il lavoro [PST] da poco inviato per la pubblicazione ed è stato argomento di due comunicazioni su invito a convegni (vedi sezione successiva).

b) Ricerca di parametri algoritmici ottimali

L’attività di ricerca ha riguardato lo sviluppo di un nuovo algoritmo di tipo “derivative-free” denominato BFO (Brute-Force Optimizer) per la risoluzione di problemi di ottimizzazione con vincoli di tipo box sulle variabili della forma

$$\min_{l \leq x \leq u} f(x) \quad (2)$$

con $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Il problema considerato è molto generale: non si fanno alcune ipotesi di regolarità sulla funzione obiettivo, si assume pertanto che le derivate di f non siano disponibili e ammettiamo che le variabili possano essere sia continue o discrete. Tale generalità permette di considerare problemi black-box molto diffusi, per es. in ambito ingegneristico, in cui il valore della funzione è dato dall’output di una simulazione numerica. Un altro campo di applicazione è dato dalla progettazione di codici avanzati che ci si aspetta di rendere di disponibili con un insieme di parametri di default che garantiscano buone prestazioni del codice. Per ottenere questo, una possibilità è risolvere un problema black-box della forma (2) in cui la funzione obiettivo è una qualche misura

di performance dell'algoritmo su una certa insieme di problemi (per es. il tempo CPU totale) e le variabili sono i parametri dell'algoritmo che si sta sviluppando che possono essere reali, interi o categorici (es. booleani).

BFO è un metodo di tipo “direct-search” che genera una sequenza di iterate ammissibili la cui funzione obiettivo è non crescente. Ad ogni iterazione, la funzione obiettivo è valutata in un numero finito di punti alla ricerca di un punto che porti una decrescita nel valore della funzione. L'obiettivo finale è quello di determinare un minimo locale. I punti sono valutati su una mesh definita ad ogni passo tenendo conto della storia di convergenza e di eventuali elementi di ricerca random. Inoltre, BFO ammette di utilizzare una strategia ricorsiva di ricerca in cui si esplorano sottospazi relativi alle variabili discrete.

Nel corso del Progetto, l'algoritmo è stato utilizzato in due contesti applicativi: la determinazione automatica di parametri algoritmici ottimali (in particolare quelli di BFO stesso) e la ricerca della configurazione ottimale di magneti nella progettazione del “Lorentz-force flowmeter” nell'ambito di una collaborazione con la Technische Universität Ilmenau, Ilmenau (Germania).

Sono state effettuati numerosi esperimenti numerici per l'ottimizzazione dei parametri di BFO e confronti numerici tra BFO e lo stato dell'arte degli algoritmi derivative-free (NOMADm). La relativa implementazione MATLAB con interfaccia per l'identificazione automatica dei parametri, sarà presto resa di dominio pubblico.

Il lavoro è svolto in collaborazione con il Prof. Ph. Toint (Università di Namur). È tutt'ora in corso la stesura dell'articolo [M. Porcelli, Ph.L. Toint, *BFO, a Brute Force Optimizer for mixed variable nonlinear bound-constrained optimization and its self tuning*] che è stato presentato (su invito) ad una conferenza (vedi sezione successiva).

1.1 Attività svolta

I risultati dell'attività di ricerca sono stati presentati alle seguenti conferenze (su invito):

- First Joint International Meeting RSME-SCM-SEMA-SIMAI-UMI
Periodo: 30 Giugno - 4 Luglio 2014
Luogo: Bilbao (Spagna).
Sito web: <http://www.ehu.es/en/web/fjim2014/>
Titolo della Comunicazione: “Robust Preconditioners for Optimal Control problems with State and Control Constraints”
- Optimization 2014
Periodo: 28-30 Luglio 2014
Luogo: Guimaraes, Portogallo
Sito web: <http://optimization2014.dps.uminho.pt/>
Titolo della Comunicazione: “The BFO derivative-free algorithm and its application to parameter tuning in algorithm design”
- 4th IMA Conference on Numerical Linear Algebra and Optimisation
Periodo: 3-5 Settembre 2014

Luogo: Birmingham, Regno Unito

Sito web: http://www.ima.org.uk/conferences/conferences_calendar/4th_ima_conference_on_numerical_linear_algebra_and_optimisation.cfm.html

Titolo della Comunicazione: “Preconditioning of Primal-Dual Active-Set methods for PDE-constrained Optimal Control Problems”

2 Budget utilizzato

Il finanziamento ottenuto di 1200 Euro è stato così utilizzato

- First Joint International Meeting RSME-SCM-SEMA-SIMAI-UMI
Quota: 450 euro ca. (volo, iscrizione, pasti)
- Optimization 2014
Quota: 440 euro ca. (iscrizione, alloggio, pasti)
- 4th IMA Conference on Numerical Linear Algebra and Optimisation
Quota: 300 euro ca. (volo, pasti)

3 Lavori prodotti

I seguenti lavori sono stati prodotti nel periodo Settembre 2013 - Settembre 2014 e presentano la dicitura “This work was partially supported by *National Group of Computing Science (GNCS-INDAM)*”

- [PST] M. Porcelli, V. Simoncini, M. Tani, *Preconditioning of active-set Newton methods for PDE-Constrained optimal control problems*, pp.1-27, July 2014, arXiv:1407.1144.
- [BP] S. Bellavia, M. Porcelli, *Preconditioning issues in the numerical solution of nonlinear equations and nonlinear least-squares*, *Pesquisa Operacional*, 34:3 (2014), pp. 1-25.
- [PR] M. Porcelli, F. Rinaldi, *A variable fixing version of the two-block nonlinear constrained Gauss-Seidel algorithm for l_1 -regularized least-squares*, *Computational Optimization and Applications*, (2014) DOI: 10.1007/s10589-014-9653-0 (pubblicato on line).
- [PBGPP] M. Porcelli, V. Binante, M. Girardi, C. Padovani, G. Pasquinelli, *A solution procedure for constrained eigenvalue problems and its application within the structural finite-element code NOSA-ITACA*, *CALCOLO*, (2014) DOI: 10.1007/s10092-014-0112-1 (pubblicato on line).