Bollettino
Unione Matematica Italiana

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

Giovanni Fasano

Uso delle Direzioni Coniugate negli algoritmi per l'Ottimizzazione Non Vincolata a grande dimensione

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. **4-A**—*La Matematica nella Società e nella Cultura* (2001), n.3 (Fascicolo Tesi di Dottorato), p. 447–450.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2001_8_4A_3_447_0>

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2001.

Bollettino U. M. I.
La Matematica nella Società e nella Cultura
Serie VIII, Vol. IV-A, Dicembre 2001, 447-450

Uso delle *Direzioni Coniugate* negli algoritmi per l'Ottimizzazione Non Vincolata a grande dimensione.

GIOVANNI FASANO

1. – Introduzione.

Il presente lavoro è dedicato allo studio degli aspetti analitici ed algoritmici di alcuni metodi iterativi per la soluzione di problemi di ottimizzazione non vincolata a grandi dimensioni. Più in dettaglio la trattazione ha avuto per oggetto la risoluzione del problema generale:

$$\min_{x \in R^n} f(x) \tag{1}$$

dove $f: R^n \to R$ e la funzione è due volte continuamente differenziabile, i.e. $f \in C^2(R^n)$. In particolare, mediante opportuni algoritmi si è interessati a determinare una successione convergente $\{x_k\} \to x^* \in R^n$, ove si richiede che il punto x^* verifichi le condizioni necessarie di minimo locale per il problema (1):

$$\begin{aligned} &(I) \qquad \nabla f(x^*) = 0 \\ &(II) \qquad \nabla^2 f(x^*) \geqslant 0 \end{aligned} \tag{2}$$

Nella trattazione si assume che la funzione $f(x)$ sia *altamente non lineare*, inoltre è nostro scopo studiare problemi a *larga scala*, nei quali cioè il numero delle variabili è sufficientemente elevato da non consentire l'uso di comuni metodi diretti, basati sull'inversione o la fattorizzazione di matrice.

Si sottolinea che, sebbene apparentemente le relazioni (2) risultino di facile utilizzo, dal punto di vista algoritmico-applicativo determinare il punto x^* che soddisfi (I) e (II) presenta notevoli problemi. Quest'ultimo inconveniente si manifesta in una duplice forma: anzitutto sorgono consistenti difficoltà teoriche nel definire algoritmi convergenti a punti che verificano le (2), per problemi a grande dimensione. Inoltre, si presentano per tali algoritmi notevoli problemi implementativi che in parte inficiano le proprietà teoriche per essi dedotte. Conseguentemente questo ha portato, in letteratura, ad una proliferazione di algoritmi convergenti a punti che verificano condizioni più deboli delle (2). In particolare sono state ampiamente studiate le condizioni di convergenza a punti stazionari che verificano la (I) e che non sono massimi locali per la $f(x)$. In definitiva quindi dobbiamo constatare che non sono noti algoritmi al contempo efficaci ed efficienti, che risolvano il problema

(1) generando punti che verificano le (2). In aggiunta il malcondizionamento del problema in questi casi rende lo stesso assai più complesso da trattare.

Questo schema introduttivo è stato preliminarmente valutato ed ha imposto di considerare: in primo luogo lo studio degli aspetti analitici ad esso legati, nonchè successivamente lo sviluppo di algoritmi dedicati, i quali tenessero adeguatamente in considerazione le informazioni del secondo ordine relative alla funzione.

Per risolvere il problema (1), nel presente lavoro si sono utilizzati alcuni schemi nella classe dei metodi tipo Newton-troncato; tale scelta è stata dettata dalla ben nota efficienza che tali metodi hanno largamente mostrato nelle applicazioni [1]. In particolare la soluzione del problema (1), mediante tali metodi iterativi, richiede che al passo k-simo venga risolto approssimativamente il sistema lineare denso (equazione di Newton):

$$\nabla^2 f(x_k)\, d = -\nabla f(x_k) \qquad d \in R^n \tag{3}$$

ed a causa dei valori elevati di n, lo sforzo computazionale per risolvere il problema (3) risulta essere dominante rispetto al carico computazionale complessivo per ogni passo. Ne consegue che per mettere a punto algoritmi efficienti, è necessario che i metodi iterativi adottati siano in grado di risolvere il sistema (3), estraendo la massima informazione possibile relativa all'andamento locale della funzione $f(x)$.

2. – Metodi iterativi ed algoritmi «planari».

Per la soluzione del problema (3) si è reso necessario adottare algoritmi iterativi, i quali fossero in grado di trattare al contempo sistemi lineari indefiniti e/o malcondizionati a grande dimensione. Questo ha suggerito l'impiego di schemi cosiddetti «planari» [2] [3], per i quali sono state studiate alcune varianti particolarmente efficienti e sono state derivate alcune salienti proprietà teoriche che ne hanno chiarito il comportamento. In questa classe di metodi gli algoritmi procedono generando iterativamente *direzioni coniugate* rispetto alla matrice $\nabla^2 f(x_k)$; tale procedimento ha la particolarità di non arrestarsi qualora la matrice Hessiana $\nabla^2 f(x_k)$ risulta *indefinita*. Considerata la generalità di applicazioni che richiedono la soluzione del sottoproblema indefinito (3), si è riscontrata in letteratura una sostanziale carenza di tecniche specifiche per il problema in esame, da qui la necessità di analizzare il comportamento di questi schemi planari. In particolare i metodi da noi adottati richiedono ad ogni passo il calcolo di due vettori, ricavati a partire dal solo sistema lineare (3):

(i) un'approssimazione della direzione d_k, soluzione di (3), la quale verifichi opportune proprietà teoriche dalle quali dipende l'efficienza dell'algoritmo nel suo complesso;

(ii) un vettore $s_k \in V_k \doteq \{s \in R^n \colon s^T \nabla^2 f(x_k)\, s < 0,\ \nabla f(x_k)^T s \leq 0\}$, cui è strettamente legata la convergenza verso punti che verificano la proprietà (II).

Tali direzioni vengono poi combinate linearmente con appropriate tecniche di «ricerca unidimensionale curvilinea», le quali garantiscono la convergenza globale dell'algoritmo verso punti stazionari che verificano le condizioni di ottimalità (2). Questo risultato complessivamente consente di migliorare le prestazioni degli schemi tipo Newton-troncato, basati sulla «ricerca unidimensionale», volendo fornire un'alternativa al classico approccio del tipo «trust region».

3. – Contributo innovativo ed originale della tesi.

È stata preliminarmente sviluppata una modifica dell'algoritmo proposto in [2]; tale modifica preserva le medesime proprietà di convergenza dal punto di vista teorico, mostrando anche incoraggianti performance computazionali. È stato inoltre definito un nuovo algoritmo planare globalmente convergente, che presenta una complessità computazionale inferiore rispetto a quella degli altri algoritmi planari presenti nella letteratura citata.

Nel capitolo successivo, per i metodi planari nella loro generalità, sono state studiate alcune proprietà analitiche legate alle caratteristiche strutturali della matrice $\nabla^2 f(x_k)$ (autovalori, autovettori, autospazi, ecc.). In particolare, è stato analizzato il caso in cui la matrice $\nabla^2 f(x_k)$ risulti singolare: è stato così possibile definire il calcolo di un'approssimazione della pseudoinversa di Moore-Penrose della matrice $\nabla^2 f(x_k)$, sul sottospazio di Krilov generato iterativamente a partire dalla coppia $\{\nabla^2 f(x_k), \nabla f(x_k)\}$. Le proprietà così ricavate generalizzano alcuni noti risultati, ottenuti per il metodo del gradiente coniugato. In questa fase è stato identificato anche un preciso legame, tra le direzioni iterativamente generate ed una stima dell'autovettore associato al minimo autovalore della matrice $\nabla^2 f(x_k)$. Tale risultato costituisce elemento indispensabile per definire criteri di arresto, all'interno di algoritmi del tipo Newton-troncato; inoltre stabilisce una prima analogia con l'algoritmo di Lanczos, utilizzato in letteratura per risolvere il sistema (3).

Nel quarto capitolo con le tecniche proposte in precedenza è stato possibile *tridiagonalizzare* iterativamente la matrice $\nabla^2 f(x_k)$ e conseguentemente calcolare efficientemente la coppia di direzioni (d_k, s_k) che verifichi le (2). Più in dettaglio si è dimostrato che mediante l'ausilio di un qualsiasi algoritmo planare, è possibile ottenere una tridiagonalizzazione della matrice Hessiana, qualora questa risulti indefinita e non singolare. Inoltre si è studiato come la complessità di calcolo sia fortemente legata all'algoritmo planare scelto e come alcuni test interni condizionino sensibilmente la tridiagonalizzazione stessa. Questo risultato è stato comparato con i risultati presenti in letteratura, basati su analoghi metodi che adottano l'algoritmo iterativo di Lanczos al loro interno.

Infine nel quinto capitolo è stata largamente sfruttata la tridiagonalizzazione definita in precedenza, per il calcolo delle due direzioni d_k ed s_k. Relativamente al calcolo della direzione d_k, il nostro approccio presenta evidenti miglioramenti in termini di complessità computazionale; ciò deriva dal fatto che in generale il metodo del gradiente coniugato, utilizzato come solutore di sistemi lineari, risulta essere meno costoso dell'algoritmo di Lanczos. Inoltre per il calcolo del vettore s_k, l'algoritmo di Lanczos richiede al passo k-simo la memorizzazione di una matrice $L_k \in R^{n \times k}$ [4]. Questa richiesta è particolarmente pesante quando la dimensione n tende a crescere ($n \geqslant 10^3$) ed in definitiva, inficia le prestazioni complessive dell'algoritmo; è pertanto auspicabile il tentativo di attenuare o quantomeno limitare la portata di tale inconveniente. In tal senso i due algoritmi da noi proposti richiedono rispettivamente al più la memorizzazione di due e quattro vettori, anzichè dell'intera matrice densa L_k; inoltre per il primo di essi è stato possibile definire una precisa legge che pone in correlazione: da un lato l'accuratezza nel calcolo della direzione s_k a curvatura negativa per l'Hessiano $\nabla^2 f(x_k)$, dall'altro il numero di vettori di cui è richiesta la memorizzazione. Nuovamente per ottenere questo risultato è stata utilizzata la struttura della matrice tridiagonale ricavata nel capitolo precedente, avvalendosi anche dei risultati in [5]. Tale struttura consente il calcolo della direzione a curvatura negativa s_k in maniera iterativa, pertanto l'occupazione di memoria risulta così limitata ai soli «vettori di lavoro» che sono necessari durante la fase di calcolo.

BIBLIOGRAFIA

[1] S. G. Nash, *A Survey of Truncated-Newton Methods* Systems Engineering and Operations Research Dept., George Mason University, (1999).
[2] M. R. Hestenes, *Conjugate Direction Methods in Optimization*, Springer Verlag, New York Heidelberg Berlin (1980), 259-273.
[3] D. G. Luenberger, *Hyperbolic pairs in the Method of Conjugate Gradients,* SIAM J. Appl. Math., **17**, No. 6 (1969), 1263-1267.
[4] S. Lucidi, F. Rochetich and M. Roma, *Curvilinear stabilization techniques for Truncated Newton methods in large scale unconstrained Optimization,* SIAM J. Optim., 8(4) (1999), 916-939.
[5] J. J. More, D. C. Sorensen, *On the use of directions of negative curvature in a modified Newton method,* Mathematical Programming, **16** (1979), 1-20.

Dipartimento di Informatica e Sistemistica «A. Ruberti», Università di Roma «La Sapienza»
e-mail: fasano@dis.uniroma1.it
Dottorato in Ricerca Operativa (sede amministrativa: Roma «La Sapienza») - Ciclo XIII
Direttore di Ricerca: Prof. Stefano Lucidi, Università di Roma «La Sapienza»