

Relatório Técnico

**Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Matemática – INCTMat
Otimização Continua**

Coordenadores: Alfredo Iusem, José Mario Martínez

Período – março a dezembro de 2009

Publicações:

1 Desenvolvimento do projeto

Durante o primeiro ano de vigência, este projeto se desenvolveu de acordo com suas principais linhas de pesquisa, na forma descrita na sequência.

1.1 Programação não-linear geral

Foi desenvolvido um método para minimização com restrições com controle dinâmico da viabilidade em cada iteração (Bielschowsky-Gomes 2008).

1.2 Métodos de Restauração Inexata

Estes métodos para minimização com restrições foram desenvolvidos originariamente em Campinas e em outros centros do Brasil. Nesta etapa foi conseguido um novo procedimento pelo qual se obtém convergência global mediante uma busca linear bastante simples (Fischer-Friedlander).

Por outro lado, foram elucidadas relações entre os métodos de restauração inexata e algoritmos de gradiente espectral projetado, com aplicações a problemas de alocação de pontos em esferas (GomesRuggiero- Martínez- Santos).

1.3 Qualificação de Restrições e condições de otimalidade

Foram analisadas condições de regularidade para otimização vetorial (Maciel-Santos-Sottosanto).

Foram introduzidas novas condições sequenciais de otimalidade e estabelecido um sistema completo de relações entre elas (Andreani-Haesler-Martínez).

1.4 Aperfeiçoamentos algorítmicos em métodos consolidados de minimização

Foi introduzido um novo esquema quase-Newton com memória minimal estruturada e preconditionadores secantes para ser usado nos subproblemas de minimização em caixas usados no pacote Algencan (Birgin-Martínez).

Foi desenvolvido um método quase Newton estruturado para minimização

com restrições de igualdade (FerreiraMendonça-Lopes-Martínez).

As etapas finais, próximas de convergência, das execuções de Algencan foram aceleradas com uma estratégia Newtoniana (Birgin-Martínez).

Foi introduzida uma variação de segunda ordem de Algencan (Andreani-Birgin-Martínez-Schuverdt).

Foi introduzido um novo método de restrições ativas com gradientes espectrais para minimização com restrições lineares (Andretta-Birgin-Martínez).

1.5 Aplicações em Química e Física

Foi desenvolvido um método para alinhamento de proteínas baseado na técnica LOVO (Low-Order-Value Optimization) (Andreani-Martínez-Martínez-Yano).

Foi melhorado o pacote Packmol para empacotamento molecular com a incorporação de processamento paralelo (Martínez-Andrade-Birgin-Martínez).

Foi desenvolvido um método para a estimativa de parâmetros em filmes superpostos (Andrade-Birgin-Chambouleyron-Martínez-Ventura).

1.6 Minimização sem derivadas

Foi desenvolvido um método para minimização sem derivadas baseado em buscas lineares e componentes aleatórias (DinizEhrhardt-Martínez-Raydan).

1.7 Otimização global

Foi introduzido um novo método de Lagrangiano Aumentado com convergência a minimizadores globais (Birgin-Floudas-Martínez).

1.8 Subproblemas de região de confiança

Foi consolidado um método para resolver problemas de região de confiança de grande porte (Rojas-Santos-Sorensen).

1.9 Empacotamento

Vários problemas de empacotamento foram desenvolvidos mediante o emprego de algoritmos originais (Birgin-Gentil, Birgin-Lobato-Morabito, Birgin-Sobral).

2 Software

O grupo continua ativo na introdução e manutenção de software. Destacamos o projeto Tango, que inclui algoritmos de minimização sem e com restrições, com destaque para Algencan (ver www.ime.usp.br/~egbirgin/tango) e os projetos LovoAlign (de alinhamento de proteínas), Packmol (de empacotamento de moléculas) e Puma (de estimativa de parâmetros em filmes finos). Todos estes são pacotes computacionais mantidos pelos membros da equipe e com ampla

difusão na comunidade científica.

3 Teses de doutorado em andamento

Estão em andamento as teses de doutorado de Mael Sanchine, Paulo Gouveia, Viviana Ramirez, Rodrigo Lima, Giovane Silva, Felipe Bueno, Leandro Prudente, Larissa Xavier, Francisco Sobral, Jefferson Divino Gonçalves de Melo, Roger Behling, Orestes Bueno Gamboa.

4 Pos-doutorados

Realizaram estágio de pós-doutorado no contexto deste projeto: Esdras Carvalho, Marina Andretta, Damián Fernández, Feodor Pisnitchenko.

5 Publicações em revistas especializadas, 2009

1. R. Andreani, S. L. C. Castro, J. L. Chela, A. Friedlander, S. A. Santos. An inexact-restoration method for nonlinear bilevel programming problems. *Computational Optimization and Applications* 43, pp. 307--328 (2009).
2. J. Y. Bello Cruz, A. N. Iusem. A strongly convergent direct method for monotone variational inequalities in Hilbert spaces. *Numerical Functional Analysis and Optimization* 30, pp. 23-36 (2009).
3. M. A. Gomes-Ruggiero, J. M. Martínez, S. A. Santos. Spectral Projected Gradient Method with Inexact Restoration for Minimization with Nonconvex Constraints, *SIAM Journal on Scientific Computing* 31, pp. 1628-1652 (2009).
4. A. N. Iusem, G. Kassay, W. Sosa. On certain conditions for the existence of solutions of equilibrium problems. *Mathematical Programming* 116, pp. 259-273 (2009).
5. A. N. Iusem, G. Kassay, W. Sosa. An existence result for equilibrium problems with some surjectivity consequences. *Journal of Convex Analysis* 16, pp. 807-826 (2009).
6. A. N. Iusem, A. Seeger. Searching for critical angles in a convex cone. *Mathematical Programming* 120, pp. 3-25 (2009).
7. M. C. Maciel, S. A. Santos, G. N. Sottosanto. Regularity Conditions in Differentiable Vector Optimization Revisited. *Journal of Optimization Theory and Applications* 142, pp. 385-398 (2009).

8. L. Martínez, R. Andrade, E. G. Birgin, J. M. Martínez, PACKMOL: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations, *Journal of Computational Chemistry* 30, pp. 2157-2164 (2009).

6 Artigos aceitos em revistas especializadas, anos 2008 e 2009

1. R. Andreani, E. G. Birgin, J. M. Martnez, M. L. Schuverdt. Second-order negative-curvature methods for box-constrained and general constrained optimization. To appear in *Computational Optimization and Applications*.

2. R. Andreani, G. Haeser, J. M. Martnez. On sequential optimality conditions for smooth constrained optimization. To appear in *Optimization*.

3. R. Andreani, J. M. Martnez, L. Martnez. Trust-Region Superposition Methods for Protein Alignment. To appear in *IMA Journal on Numerical Analysis*.

4. R. Andreani, J. M. Martnez, L. Martnez, F. S. Yano. Low Order-Value Optimization and applications. To appear in *Journal of Global Optimization*.

5. M. Andretta, E. G. Birgin, J. M. Martnez. Partial Spectral Projected Gradient Method with Active-Set Strategy for Linearly Constrained Optimization. To appear in *Numerical Algorithms*.

6. R. G. Begiato, M. A. Gomes-Ruggiero, Um método Newton-Inexato com estratégia híbrida para globalização. To appear in *Tema*.

7. J. Y. Bello Cruz, A. N. Iusem. Convergence of direct methods for paramonotone variational inequalities. To appear in *Computational Optimization and Applications*.

8. E. G. Birgin, C. A. Floudas, J. M. Martnez. Global minimization using an Augmented Lagrangian method with variable lower-level constraints. To appear in *Mathematical Programming*

9. E. G. Birgin and J. M. Gentil. New and improved results for packing identical unitary radius circles within triangles, rectangles and strips. To appear in *Computers & Operations Research*.

10. E. G. Birgin, R. D. Lobato, R. Morabito. An effective recursive partitioning approach for the packing of identical rectangles in a rectangle. To appear in *Journal of the Operational Research Society*.

11. R.S. Burachik, A. N. Iusem, J. D. G. Melo. A primal dual modified

subgradient method with sharp Lagrangian. To appear in *Journal of Global Optimization*.

12. E. V. Castelani, A. L. Martinez, J. M. Martnez, B. F. Svaiter. Addressing the greediness phenomenon in nonlinear programming by means of proximal augmented Lagrangians. To appear in *Computational Optimization and Applications*.

13. A. Fischer, A. Friedlander. Inexact Restoration method with line searches for constrained optimization. To appear in *Computational Optimization and Applications*.

14. A. N. Iusem, M. Nasri. Augmented Lagrangian methods for equilibrium problems in Banach spaces. To appear in *RAIRO, Recherche Opérationnelle*.

15. A. N. Iusem, E. Resmerita. A proximal point method in nonreflexive Banach spaces. To appear in *Set-Valued and Variational Analysis*.

16. A. N. Iusem, A. Seeger. Distances between closed and convex cones: old and new results. To appear in *Journal of Convex Analysis*.

17. A. N. Iusem, W. Sosa. A proximal point method for equilibrium problems in Hilbert spaces. To appear in *Optimization*.

18. V. L. R. Lopes, M. A. Gomes-Ruggiero, J. V. T. Benavides. A safeguard approach to detect stagnation of the GMRES(m) with applications in the Newton-Krylov methods. To appear in *Computational and Applied Mathematics*.

19. F. I. Pisnitchenko, I. A. Pisnichenko, J. M. Martnez, S. A. Santos. Continuous dynamic assimilation of the inner region data in hydrodynamics modelling: Optimization approach. To appear in *Nonlinear Processes in Geophysics*.

7 Teses de Mestrado defendidas Outubro -- Setembro 2009

1. Fernanda Téles Nunes, "Programação quadrática sequencial e condições de qualificação", DMA-Unicamp, março 2009. Orientadora: Maria Aparecida Diniz Ehrhardt.

2. Rafael Lobato, "Algoritmos para problemas de programação não linear com variáveis inteiras e contínuas", IME-USP, março 2009. Orientador: Ernesto Birgin.

3. Fernando Camargo, ``Estudo comparativo de passos espectrais e buscas nao monotonas'', IME-USP, março 2009. Orientador: Ernesto Birgin.
4. Ricardo Abrantes, ``Aplicações de computação paralela em otimização contínua'', IME-USP, março 2009. Orientador: Ernesto Birgin.
5. Francisco Sobral, ``Programação em dois níveis: reformulação utilizando as condições KKT''. IME-USP, março 2009. Orientador: Ernesto Birgin.
6. Heloísa Vieira, ``Metaheurísticas para solução de problemas de roteamento de veículos com janelas de tempo'', DMA-UNICAMP dezembro 2008. Orientador: Francisco Gomes.
7. Pedro F. Villela, ``Um algoritmo exato para a otimização de carteiras de investimento com restrições de cardinalidade'', DMA-Unicamp, dezembro 2008. Orientador: Francisco Gomes.
8. Thadeu A. Senne, ``Otimização topológica de mecanismos flexíveis'', DMA-UNICAMP maio 2009. Orientador: Francisco Gomes.

8 Teses de doutorado defendidas. Outubro 2008 - Setembro 2009

1. Marina Andretta, ``Tópicos em otimização com restrições lineares'', IME-USP, Outubro 2008. Orientador: Ernesto G. Birgin.
2. José Yunier Bello Cruz, ``Direct methods for monotone variational inequalities'', IMPA, Julho 2009, Orientador: A. N. Iusem
3. Emerson Castelani, ``Métodos de região de confiança externos para otimização com restrições'', DMA-Unicamp, Julho 2009. Orientador: J. M. Martínez.
4. Gabriel Haeser, ``Condições sequencias de otimalidade em otimização com restrições'', DMA-Unicamp, Setembro 2009. Orientador: J. M. Martínez.
5. André L. Martinez, ``O fenomeno da voracidade em otimização com restrições'', DMA-Unicamp, Abril 2009. Orientador: J. M. Martínez.
6. Luiz A. Medeiros, ``Aceleração de métodos para problemas de quadrados mínimos em caixas'', DMA-Unicamp, Fevereiro 2009. Orientador: F. A. M. Gomes.

7. Lucas G. Pedroso, "Programação não-linear sem derivadas", DMA-Unicamp, Agosto 2009. Orientador: J. M. Martínez, Co-orientadora: M. A. Diniz Ehrhardt.

8. Wesley V. I. Shirabayashi, "Estratégias de Segunda Ordem para Problemas de Complementaridade", DMA-Unicamp, Setembro 2009. Orientadora: Sandra A. Santos, Co-orientador: Roberto Andreani.