

# Software zur nichtlinearen Optimierung

**Torsten Schütze**

<http://www.math.tu-dresden.de/~schuetze>

2. Arbeitstagung der DFG-Forschergruppe

4./5. Juni 1998

## Ziel des Vortrags

- ☞ Übersicht über ausgewählte Optimierungsprogramme, insbesondere neuere Entwicklungen
- ☞ Auswahlkriterien:
  - „production code“, kein „research code“
  - Verfügbarkeit
  - Verbreitungsgrad
- ☞ Hinweise auf WWW/Literatur zur Auswahl geeigneter Software

## Übersicht

### **Bibliotheken/Systeme mit Optimierungsalgorithmen**

NAG

Matlab

Port 3

### **Kleine bis mittlere Systeme**

CFSQP/FFSQP

NPSOL

### **Große Systeme**

SNOPT

MINOS

LANCELOT

### **Optimierungsumgebungen/Testbeispiele**

CUTE

NEOS

### **Hilfe zur Selbsthilfe**

**Bibliotheken  
und Systeme  
mit Optimierungsalgorithmen**

NAG Library

Matlab Optimization Toolbox

Port 3

## NAG Library

### Verfügbarkeit:

C Library: Mark 4

Chapter E04

Fortran 77 Library: Mark 18 (seit 20. Mai am URZ installiert)

Chapter E04+H

Fortran 90 Library: Release 3

Rel. 1 am URZ

- sehr umfangreiche Bibliotheken für alle Bereiche der Optimierung
- On-line Dokumentation über NAG TextWare
- Landeslizenz
- Problem: Administratoren sind angehalten, Quellen nach Installation zu löschen

## Matlab Optimization Toolbox

Version 1.5.2 (Matlab 5.2)

Problemklassen und Algorithmen

lp	linear programming	simplex method
qp	quadratic programming	active set strategy
fminu	unconstrained minimization	quasi-newton
fmins	unconstrained minimization	direct search method
constr	constrained optimization	SQP method

### Nachteile

- keine Methoden für Large Scale Optimization
- keine Unterscheidung von einfachen, linearen und nichtlinearen Nebenbedingungen

⇒ **Version 2.0 Beta**

## Matlab Optimization Toolbox Version 2.0 Beta

☞ geplant für Matlab 5.3 Ende des Jahres

☞ neue Features:

- veränderte Funktionsnamen und Aufrufsyntax
- große schwachbesetzte Systeme
- Innere-Punkt-Verfahren für lineare Optimierung
- Ausnutzung von einfachen und linearen Nebenbedingungen
- Ableitungen in gleichem M-File wie Funktion
  - ⇒ Code sharing
- bessere Diagnose und graphische Analyse

### Literatur

Optimization Toolbox User's Guide, The Mathworks, Inc., 1997.

## PORT 3 Library

= Portable, Outstanding, Reliable, Tested

Lucent Technologies (AT&T Bell Labs)

- Release 3, 1984
- früher nur ausgewählte Teile frei verfügbar  
seit kurzem (November 1997) vollständig  
non-exclusive limited use
- Fortran 77 Programme für viele Bereiche der Mathematik, u.a.  
Differentialgleichungen, Lineare Algebra,  
Approximation und Optimierung
- Besonderheiten: keine großen Systeme, aber z.B. separable  
QMP
- Vorteil: kostenfreie Software hoher Qualität, gute Dokumentation

### Literatur

PORT Manual:

<http://www.bell-labs.com/project/PORT/doc/port3doc.tar.gz>

PORT Mathematical Subroutine Library:

<http://www.bell-labs.com/project/PORT/>

## **Software für kleine bis mittlere Systeme**

CFSQP/FFSQP

NPSOL



## CFSQP/FFSQP

Feasible Sequential Quadratic Programming

A. Tits, University of Maryland, College Park

CFSQP Version 2.5d, Februar 1998

FFSQP Version 3.7b, Januar 1998

### Aufgabengebiet

$$\min_x \max_{i \in \mathcal{I}} f_i(x) \quad \text{s.t.} \quad g_j(x) \leq 0 \quad \text{und} \quad h_j(x) = 0$$

(P1) Auffinden eines zulässigen Punktes

(P2) Standard-Nichtlineare Programmierung

(P3) restringierte Minimax-Probleme

### Algorithmus

- SQP-Verfahren mit stets zulässigen Punkten
- nichtlineare Gleichheitsnebenbedingungen werden in Ungleichheitsnebenbedingungen umgewandelt und über diff.bare exakte Straffunktion behandelt

## Warum Zulässigkeit?

- Anwender
  - Zielfunktion evtl. außerhalb des zulässigen Bereiches nicht definiert
  - zulässige, d.h. physikalisch bedeutungsvolle Lösung bei vorzeitigem Abbruch erwünscht
  - Erfüllung harter NB wichtiger als kleiner Zielfunktionswert (z.B. restringierte Splineapproximation)
- Algorithmus
  - keine künstliche „merit function“ bei der Strahlsuche
  - QP-Teilproblem hat stets zulässige Lösung

## Features

- Auswahl monotone/nichtmonotone Strahlsuche
- große Anzahl von Zielfunktionen/NB (z.B. diskretisierte semi-infinite Probleme)  $\implies$  CFSQP
- **ADIFFSQP = Interface FFSQP  $\leftrightarrow$  ADIFOR 2.0**

## Verfügbarkeit

- FFSQP: Fortran 77, CFSQP: ANSI C
- kostenlos nach Rücksprache mit Autor

## Nachteile

- prinzipbedingt langsam bei dünnem, langgestrecktem zulässigen Bereich
- Schwierigkeiten bei bestimmten Startpunkten und nichtlinearen Gleichheitsnebenbedingungen
- QP-Solver QLD Schittkowski[86] bei Bedarf durch langsameren, aber robusteren QPSOL Gill et.al.[84] ersetzen

## Literatur

FSQP Homepage, <http://www.isr.umd.edu/Labs/CACSE/FSQP/fsqp.html>

J. L. Zhou, A. L. Tits, C. T. Lawrence, User's Guide for FFSQP Version 3.7, 1997.

C. T. Lawrence, J. L. Zhou, A. L. Tits, User's Guide for CFSQP Version 2.5, 1997.

## NPSOL

Ph. Gill, W. Murray, M. Saunders, M. Wright

Version 5.02, September 1995

(Version 1.1, 1983)

### Aufgabengebiet

$$\text{minimize } F(x) \quad \text{s.t.} \quad l \leq \begin{Bmatrix} x \\ A_L x \\ c(x) \end{Bmatrix} \leq u$$

### Algorithmus

- SQP-Verfahren mit erweiterter Lagrange-Funktion als Merit-Funktion
- BFGS-Update der Hesse-Matrix
- Matrizen werden als vollbesetzt behandelt  $\implies$  Optimierungsprobleme kleiner bis mittlerer Dimension, möglicherweise hoch nichtlinear
- Lösung der quadrat. Teilprobleme durch LSSOL

## Features

- Matlab-Interface verfügbar
- umfangreiche Protokollmöglichkeiten
- NPSOL=NAG E04UCF (ab Mark 13)

## Verfügbarkeit

- Fortran 77
- kostenpflichtiger Code  $\implies$  Stanford Business Software, Inc.  
z.B. NPSOL+LSSOL (+NLSSOL)  
= 350\$ single academic license

## Literatur

P. E. Gill, W. Murray, M. A. Saunders, M. H. Wright, User's Guide for NPSOL (Version 4.0): A Fortran package for nonlinear programming, 1986.

## Software für große Systeme

SNOPT

MINOS

LANCELOT

## **SNOPT**

Ph. Gill, W. Murray, M. Saunders

Version 5.3, Oktober 1997

- Weiterentwicklung von NPSOL für große, schwachbesetzte Optimierungsprobleme
- ähnliche Funktionalität und Bedienung
- quadratische Teilprobleme: SQOPT

### **Verfügbarkeit**

- Fortran 77
- kostenpflichtiger Code, Preis ?

### **Literatur**

P. E. Gill, W. Murray, M. A. Saunders, SNOPT: An SQP algorithm for large-scale constrained optimization, Report SOL 97-3, Dept. of EESOR, Stanford University, 1997.

P. E. Gill, W. Murray, M. A. Saunders, User's Guide for SNOPT 5.3: a Fortran Package for Large-Scale Nonlinear Programming, Report NA 97-5, Dept. of Mathematics, University of California, San Diego, 1997.

# MINOS

B. Murtagh, M. Saunders

Version 5.5

(MINOS 5.1, 1983)

## Aufgabengebiet

$$\begin{aligned} & \text{minimize}_{x,y} F(x) + c^T x + d^T y \\ \text{s.t. } & f(x) + A_1 y = b_1, \quad A_2 x + A_3 y = b_2 \\ & l \leq \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \leq u \end{aligned}$$

$x$  – nichtlineare Variable,  $y$  – lineare Variable

## Algorithmen

Lineare Programmierung

primale Simplexmethode

Linear restringierte Optimierung

Methode der reduzierten Gradienten + Quasi-Newton-Verfahren

Nichtlineare Optimierung

projiziertes erweitertes Lagrange-Verfahren



## Features

- schwachbesetzte Faktorisierungen  $\implies$  große Systeme
- MPS-Format für Lineare Programmierung (=Industriestandard)
- umfangreiche Protokollmöglichkeiten
- „warm start“

## Verfügbarkeit

- Fortran 77
- kostenpflichtiger Code  $\implies$  Stanford Business Software, Inc.  
z.B. 350\$ single academic license

## Literatur

B. A. Murtagh, M. A. Saunders, MINOS 5.4 User's Guide, Technical Report SOL 83-20R, Dept. of Operations Research, Stanford University, 1993.

**L**arge                      Ph. Toint, Namur, Belgium  
**A**nd                         A. Conn, IBM  
**N**onlinear                 N. Gould, Rutherford Appleton Laboratory  
**C**onstrained  
**E**xtended                 Januar 1998  
**L**agrangian  
**O**ptimization  
**T**echniques

### Algorithmus

sequentielle Minimierung der erweiterten Lagrange-Funktion bez. einfacher Nebenbedingungen

### Features

- Lösung der quadratischen Teilprobleme
  - direkte Faktorisierung von Untermatrizen der Hesse-Matrix
  - vorkonditionierte iterative Verfahren
- $l_1$  und  $l_\infty$  trust region

## ➤ Interface

- Problembeschreibung durch SIF (Standard Input Format)
- herkömmlicher subroutine call

## Verfügbarkeit

Fortran 77

Fortran 90 (Beta, u.a. mit AD-Interface (Cowey/Reid [Harwell]))

## Lizenzbedingungen (academic use)

- frei verfügbar, keine Weitergabe
- Einsendung eines repräsentativen Beispiels  
⇒ große Testbasis (CUTE)

## Vorteile

- stabiler, effizienter Code
- sehr gute Dokumentation
- einfache Problemspezifikation

## Nachteile

lineare NB werden nicht gesondert ausgenutzt

## Literatur

LANCELOT Homepage, <http://www.dci.clrc.ac.uk/Activity.asp?LANCELOT>

A. R. Conn, N. I. M. Gould, Ph. L. Toint, LANCELOT: a Fortran Package for Large-Scale Nonlinear Optimization (Release A), Springer Verlag (Heidelberg, New York), ISBN 3-540-55470-X, 1992.

## **Optimierungsumgebungen und Testbeispiele**

CUTE

NEOS

<b>C</b> onstrained and	I. Bongartz	
<b>U</b> nconstrained	A. Conn	
<b>T</b> esting	N. Gould	
<b>E</b> nvironment	Ph. Gould	Version 2.x, Mai 1998

➤ ursprünglich: Sammlung von Testbeispielen für LANCELOT  
⇒ SIF

➤ heute: Datenbank mit vielfältigen Abfragemöglichkeiten und Interfaces zu anderen Paketen

### **Verfügbarkeit**

public domain, Fortran 77

### **Literatur**

CUTE Homepage, <http://www.dci.clrc.ac.uk/Activity.asp?CUTE>

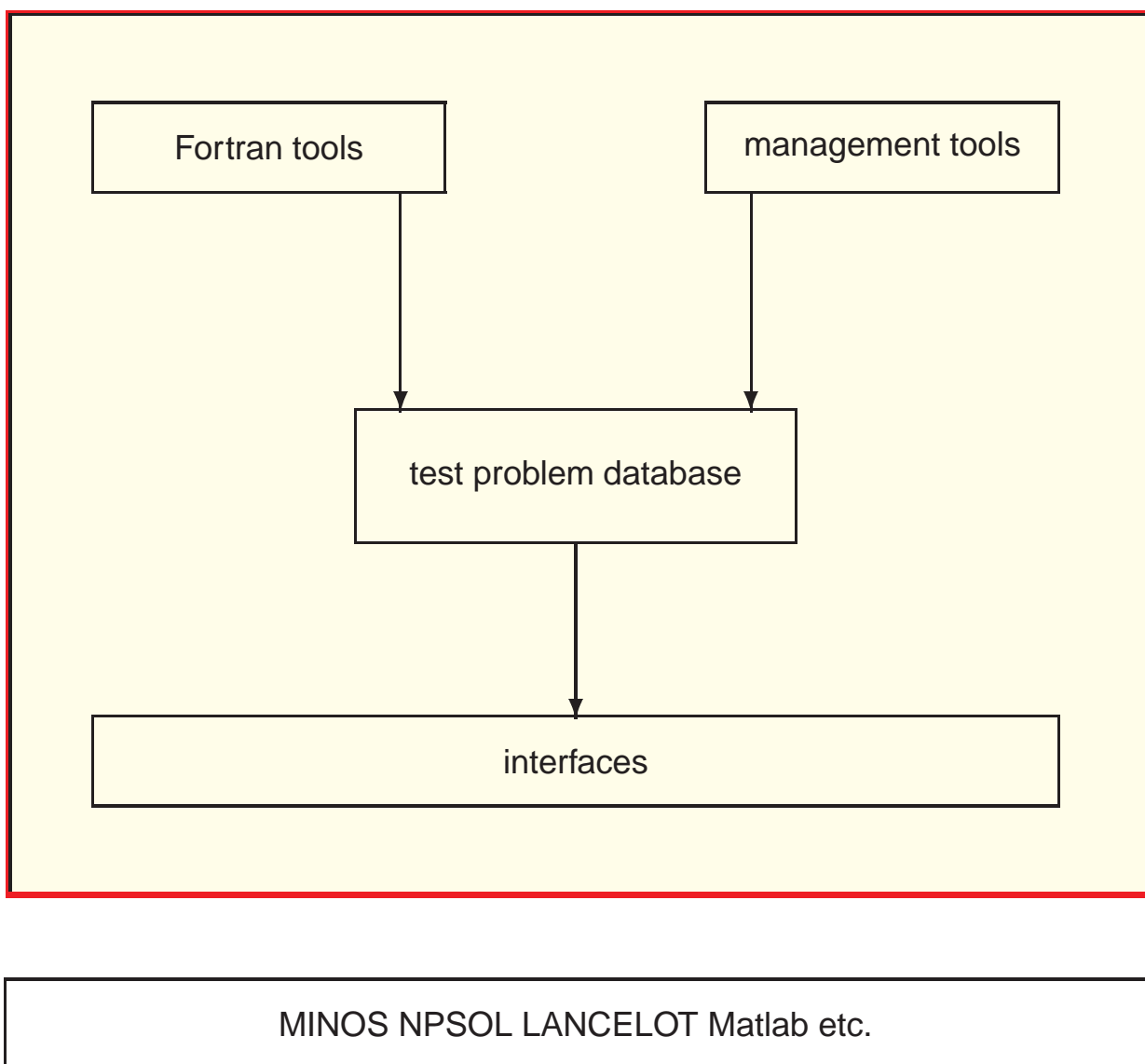


Abbildung 1: Architektur von CUTE

## Datenbank der Testprobleme

- umfaßt viele Standardtestprobleme, z.B.
  - Argonne test set Moré[81]
  - Hock/Schittkowski[81]
  - Schittkowski[87]
- Originalprobleme von Nutzern (vgl. LANCELOT-Lizenz)

## Klassifikation und Datenbanktools

X	X	X	r	-	X	X	-	n	-	m
1	2	3	4		5	6		7		8

- |                                  |                        |
|----------------------------------|------------------------|
| 1. Typ der Zielfunktion          | 5. Problemursprung     |
| 2. Typ der NB                    | 6. partiell separabel? |
| 3. reguläres/irreguläres Problem | 7. Anzahl Variable     |
| 4. höchste verfügbare Ableitung  | 8. Anzahl NB           |

- Welche Probleme sind restringiert und haben nur lineare NB?
- Welche Probleme haben mehr als 1000 NB und explizite 2. Ableitungen?

⇒ select-Tool + WWW-Interface



**N**etwork                      Argonne National Laboratory  
**E**nabled                        J. Moré et.al.  
**O**ptimization  
**S**ystem

## Ziele

- definitive site for optimization information and technology
- not only up-to-date literature, but ready access to software

Unconstrained optim.

Complementarity problems

Bound constrained optim.

Network optim.

Nonlinearly constrained optim.

Linear programming

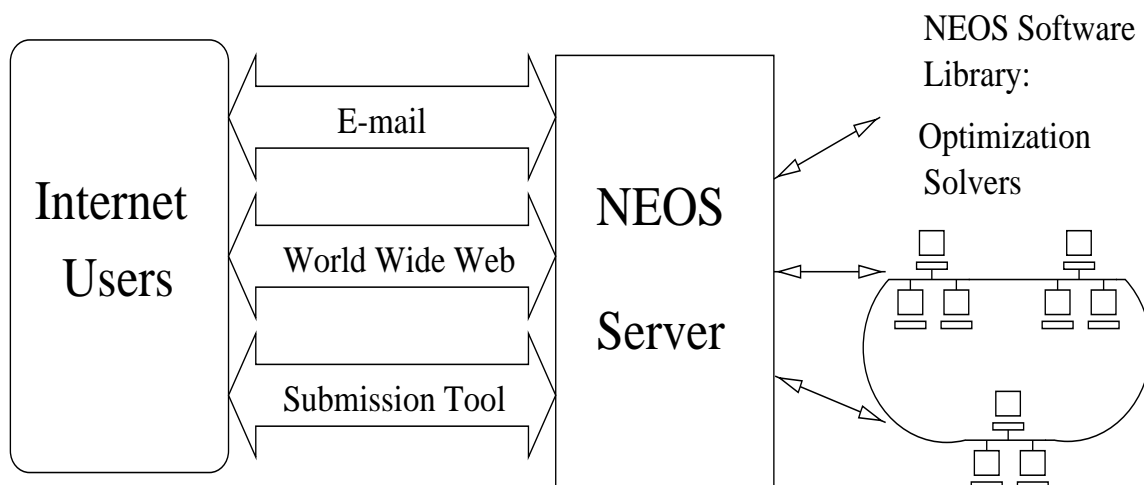


Abbildung 2: NEOS Server: Interaction with Internet users

**Form #1 - LANCELOT**

File Help

Type of Input  
 Fortran  
 SIF

Number of Variables

Number of Constraints

Number of Element Functions

Initial Point Subroutine: ./initpt.f **browse >>**

Function Subroutine: ./fcn.f **browse >>**

Constraint Subroutine: ./cfcn.f **browse >>**

Bounds on Variables Subroutine: ./xbound.f **browse >>**

Bounds on Constraints Subroutine: ./cbound.f **browse >>**

Options specification file: ./SPEC.SPC **browse >>**

SIF file: ./LANCELOT.SIF **browse >>**

Options specification file: ./SPEC.SPC **browse >>**

Comments

**idle** submit to NEOS close

Abbildung 3: The NEOS Submission Tool

## Vorteile

- Nutzer braucht nur Zielfunktion, Nebenbedingungen und Startpunkt zu spezifizieren
- Ableitungen werden im Hintergrund von ADIFOR und ADOL-C berechnet
- stets aktuelle, auch kostenpflichtige Software  
⇒ ideal um Software für eigene Verwendung zu testen

## Probleme

- Verfügbarkeit
- Einbau in eigene Programme ⇒  
NEXUS = Client zur Kommunikation mit NEOS-Server über RPC

## Hilfe zur Selbsthilfe

- J. Moré, S. Wright, Optimization Software Guide, SIAM Publications, 1993.
- NEOS Guide to Optimization Technology:  
<http://www-c.mcs.anl.gov/home/otc/Guide/>
- Decision Tree for Optimization Software:  
<http://plato.la.asu.edu/guide.html>
- Global (and Local) Optimization:  
<http://solon.cma.univie.ac.at/~neum/glopt.html>
- Linear/Nonlinear Programming FAQs:  
<http://www-c.mcs.anl.gov/home/otc/Guide/faq/>
- Netlib:  
<http://www.netlib.org/>
- GAMS: Guide to Available Mathematical Software:  
<http://gams.nist.gov/>