Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 5, N. 1, 2017.

Trabalho apresentado no CNMAC, Gramado - RS, 2016.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Modificação no Cálculo do Parâmetro de Correção de Falhas na Diagonal da Fatoração Controlada de Cholesky aplicado ao Método de Pontos Interiores

Manolo Rodriguez Heredia[1]
IMECC, UNICAMP, Campinas, SP
Aurelio R.L. Oliveira[2]
Departamento de Matemática Aplicada, UNICAMP, Campinas, SP

Resumo. O objetivo deste estudo é reduzir o número de reinícios no cálculo do precondicionador Fatoração Controlada de Cholesky (FCC) que é usado na resolução dos sistemas lineares oriundos do método primal-dual de pontos interiores (MPI). Quando existe falha na diagonal a fatoração é reiniciada, aumentando dessa forma o tempo de precondicionamento. O cálculo dos novos parâmetros é feito considerando a relação que existe entre a FCC obtida antes e depois da falha na diagonal. A melhoria obtida usando esta nova modificação reduziu o número de reinícios como será apresentado nos experimentos numéricos com problemas de grande porte. As novas propostas procuram que o incremento evite a falha na coluna corrente e, portanto, o incremento global necessário para construir o precondicionador FCC seja atingido. A implementação destas abordagens mostrou resultados competitivos.

Palavras-chave. Métodos de pontos interiores, Precondicionadores, Fatoração Controlada de Cholesky.

1 Introdução

Os métodos de pontos interiores do tipo primal-dual (MPI) são uma ótima ferramenta para resolver problemas de otimização de grande porte, pois apresentam um pequeno número de iterações. Cada iteração pode ser computacionalmente cara devido ao mal condicionamento dos sistemas lineares que são resolvidos para encontrar a direção de busca, veja [9].

Neste trabalho para melhorar o condicionamento destes sistemas lineares em cada iteração do MPI são usados precondicionadores. Para tanto, é usada uma abordagem híbrida proposta por [2]. Esta abordagem tem duas fases, na primeira é usado a FCC proposto por [3] e na segunda fase, trabalha-se com o Precondicionador Separador (PS), veja [6]. A FCC é um precondicionador construído com base na Fatoração Incompleta de Cholesky (FIC) e, portanto, é possível encontrar falhas na diagonal. Na abordagem

[1]rodriguezhmanolo@hotmail.com
[2]aurelio@ime.unicamp.br

híbrida proposta em [2] as falhas que ocorrem durante a fatoração são corrigidas com um incremento exponencial e o cálculo dos elementos da matriz precondicionadora é reiniciado. Por outro lado, baseado no trabalho de [1], existe o precondicionador FCCβ que evita reinícios, esta proposta é apresentada em [7]. Os resultados obtidos pela FCCβ não são competitivos com os obtidos pela construção original porqué o tempo computacional em alguns problemas cresce consideravelmente.

Propõe-se uma modificação na FCC alterando a maneira do cálculo do parâmetro de correção das falhas que ocorrem na diagonal. O objetivo é reduzir o número de reinícios da fatoração durante a construção da FCC para reduzir o tempo de precondicionamento dos sistemas lineares.

A justificativa destes novos parâmetros utiliza ferramentas algébricas e geométricas. Estes parâmetros utilizam a relação que existe entre os elementos que ocasionaram a falha e as novas componentes que evitam a falha na diagonal, veja equação (5). Assim, pode-se calcular uma aproximação para os elementos que deveriam estar no próximo reinicio.

2 Método de Pontos Interiores Primal-Dual

Considere o problema primal , (P) $\left\{\min c^T x \quad \text{s. a } Ax = b \text{ e } x \geq 0\right\}$ e o problema dual (D) $\left\{\max y^T b \quad \text{s. a } A^T y + z = c\,, z \geq 0 \text{ e } y \in \mathbb{R}^m\right\}$, na forma padrão, onde $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ com $m < n$, é uma matriz $m \times n$ de posto completo, x, z e $c \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}^m$.

As condições de Karush-Kuhn-Tucker (1) para os problemas (P) e (D) são

$$\begin{array}{ll} Ax - b & = 0 \\ A^T y + z - c & = 0 \quad (x,z) \geq 0\,, \\ XZ\mathrm{e} & = 0 \end{array} \tag{1}$$

onde X e Z são matrizes diagonais com as componentes dos vetores x e z e o vetor $\mathrm{e} \in \mathbb{R}^n$ tem todas suas componentes de uns. A direção de busca é obtida aplicando o método de Newton a (1) ligeiramente modificado para evitar a perda da não negatividade das variáveis primal e dual. Após aplicar o método de Newton e isolar variáveis, a direção de busca será obtida de um sistema chamado de equações normais, cuja matriz é simétrica e definida positiva:

$$A\Theta^k A^T \Delta y^k = r_p^k + A\big(\Theta^k r_d^k - (Z^k)^{-1} r_a^k\big)\,. \tag{2}$$

onde $\Theta^k = X^k \left(Z^k\right)^{-1}$, $r_p^k = b - Ax^k$, $r_d^k = c - A^T y^k - z^k$ e $r_a^k = -XZ\mathrm{e}$. Dado que a matriz $A\Theta^k A^T$ é mal condicionada, o sucesso da implementação usando métodos iterativos, depende da boa escolha de precondicionadores. Nas iterações iniciais será a FCC e nas iterações finais, quando as matrizes se tornam muito mal condicionadas, usa-se o PS. A regra para mudança de um precondicionador para outro é determinada pela heurística proposta por [8]. Esta abordagem híbrida utiliza o método dos gradientes conjugados e trabalha com o precondicionador M para resolver o sistema (2):

$$M^{-1}\big(A\Theta A^T\big)M^{-T}\overline{y} = M^{-1}\big(r_p^k + A\big(\Theta^k r_d^k - (Z^k)^{-1} r_a^k\big)\big)\,, \tag{3}$$

onde $\overline{y} = M^T \Delta y$. Logo, calcula-se as outras componentes da direção de busca.

2.1 Fatoração Controlada de Cholesky

Considere a Fatoração de Cholesky $A\Theta A^T = LL^T$ e a FIC $A\Theta A^T = \tilde{L}\tilde{L}^T + R$, ou seja, $LL^T = A\Theta A^T = \tilde{L}\tilde{L}^T + R$, onde L é a matriz da fatoração completa, $\tilde{L}$ a matriz da fatoração incompleta e R é a matriz resíduo. Define-se E como a diferença $E = L - \tilde{L}$; logo,

$$\tilde{L}^{-1}\big(A\Theta A^T\big)\tilde{L}^{-T} = (I + \tilde{L}^{-1}E)(I + \tilde{L}^{-1}E)^T\,. \tag{4}$$

Quando a matriz $\tilde{L}$ se aproxima de L, E e $\tilde{L}^{-1}\big(A\Theta A^T\big)\tilde{L}^{-T}$ se aproximam da matriz nula e identidade I, respectivamente. A FCC é baseada na minimização da norma de Frobenius de E, para isso considere: min $\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{k=1}^{m_j+\eta}|\ell_{i_kj} - \tilde{\ell}_{i_kj}|^2 + \sum_{k=m_j+\eta+1}^{n}|\ell_{i_kj}|^2\right)$, onde m_j é o número de componentes não nulas abaixo da diagonal da j-ésima coluna da matriz $A\Theta A^{-T}$ e η representa o número de componentes extras permitidas por coluna.

A FCC está construída com base na FIC, assim é possível encontrar falhas na diagonal. Para evitar isto, usa-se o fato de que se uma matriz V é simétrica e definida positiva, existe $\alpha > 0$ tal que a FIC de $V + \alpha\mathrm{diag}(V)$ existe, veja [5]. Na abordagem híbrida proposta em [2] as falhas que ocorrem durante a construção da FCC são corrigidas com um incremento exponencial, cujo valor é determinado por $\alpha_t = 5\cdot 10^{-4}\cdot 2^{t-1}$, onde $t = 1,\ldots,15$ representa o número de reinícios permitidos na FCC. Por otro lado, baseado em [1], existe a FCCβ que evita reinícios quando existe falhas na diagonal da FCC, veja [7]. O desempenho da FCCβ é discrepante em relação à FCC, pois evitar reinícios acarreta num precondicionador ineficiente. Assim, procura-se melhorar a FCC original com novas propostas que permitem reinícios e calculam $\alpha > 0$ com base em ferramentas algébricas e geométricas.

3 Uma Nova Proposta para o cálculo do incremento na Fatoração Controlada de Cholesky

Nesta seção, denota-se por A à matriz $A\Theta A^T$ da equação (3); isto é, A é simétrica e definida positiva de ordem m; além disso, A é considerada escalada, isto é, $a_{jj} = 1$ para $j = 1\ldots,m$. Na FCC, a condição $d_j < \mathrm{tol}$ para algum $j = 1\ldots,m$ é chamada falha na diagonal, onde $\mathrm{tol} = 10^{-8}$. Para o incremento na diagonal α_t, considera-se $t = 1,\ldots,15$.

3.1 Modificação no Cálculo do Incremento

A atualização proposta está baseada na fatoração LDL^T da matriz $A + \alpha I$. Para simplificar notação, denota-se a matriz $A + \alpha I$ por $\overline{A}$. Usa-se a fatoração LDL^T da matriz A para calcular as novas componentes da matriz $\overline{L}$ e $\overline{D}$, onde $\overline{A} = \overline{L}\,\overline{D}\,\overline{L}^T$. Assim, tem-se:

$$\begin{aligned}
\overline{d}_j &= d_j + \alpha + \sum_{k=1}^{j-1}\left(d_k\ell_{jk}^2 - \overline{d}_k\overline{\ell}_{jk}^2\right);\\
\overline{\ell}_{ij} &= \ell_{ij}\frac{d_j}{\overline{d}_j} + \frac{1}{\overline{d}_j}\sum_{k=1}^{j-1}\left(\ell_{ik}d_k\ell_{jk} - \overline{\ell}_{ik}\overline{d}_k\overline{\ell}_{jk}\right).
\end{aligned} \tag{5}$$

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0476

para $j = 1, \dots m$ e $i = j+1, \dots, m$. Se existe uma falha na diagonal do precondicionador FCC correspondente à coluna j, as seguintes Proposições são úteis na construção dos novos incrementos. Suas provas são feitas pela redução ao absurdo.

Proposição 3.1. *Se $d_j < 0$ para algum $j = 1, \dots, m$, então existe $\alpha > 0$ tal que $\sum_{k=1}^{j-1} \overline{d}_k \overline{\ell}_{jk}^2 > 0$.*

A seguinte Proposição é usada para estabelecer que se valores grandes de α são adicionados à diagonal de A, então a falha na diagonal depois do reinício é superada.

Proposição 3.2. *Quando $d_j < \mathrm{tol}$, a função $F_t : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, dada por $\alpha \longmapsto \sum_{k=1}^{t-1} \overline{d}_k \overline{\ell}_{tk}^2$ é decrescente, onde $t = 2, \dots, j$ e $F_t(0) = \sum_{k=1}^{t-1} d_k \ell_{tk}^2$.*

Por outro lado, como consequência da Proposição 3.2, pode-se estabelecer um incremento que seja igual à diferença $\mathrm{tol} - d_j$ ou inclusive que seja maior o igual que tol para que o novo elemento na coluna j seja maior que a tolerância:

Proposição 3.3. *Se existe falha na diagonal na coluna j, para cada $\alpha \geq \mathrm{tol} - d_j$ se satisfaz $\overline{d}_j > \mathrm{tol}$. Além disso, se $0 < d_j < \mathrm{tol}$, para cada $\alpha \geq \mathrm{tol}$ se satisfaz $\overline{d}_j > \mathrm{tol}$.*

Procura-se que o incremento α_t seja próximo de zero, pois $\overline{A}$ deve estar próximo de A, mas nada garante que $\mathrm{tol} - d_j$ seja um número pequeno. A seguir, apresenta-se as novas propostas para calcular o incremento que evita as falhas na diagonal.

3.2 Primeira Abordagem

Denota-se a primeira proposta por FCC1. Quando $d_j < \mathrm{tol}$, usam-se as equações dadas em (5) para mostrar que para cada $\alpha > 0$ se satisfaz $\overline{d}_j > \mathrm{tol}$ se, e somente se, $\sum_{k=1}^{j-1} \overline{d}_k \overline{\ell}_{jk}^2 \leq a_{jj} + \alpha - \mathrm{tol}$. Como consequência desta desigualdade, deve-se resolver o problema: $(\overline{\mathrm{P}}_\alpha)\{\min \alpha \quad \text{s. a} \quad \sum_{k=1}^{j-1} \overline{d}_k \overline{\ell}_{jk}^2 \leq a_{jj} + \alpha - \mathrm{tol} \ ; \ \alpha > 0\}$, pois $\overline{A}$ deve estar próximo de A.

Quando $d_j < \mathrm{tol}$, para $k = 1, \dots, j-1$ não são conhecidos os valores $\overline{d}_k$ nem $\overline{\ell}_{jk}$. Em vez de resolver o problema $(\overline{\mathrm{P}}_\alpha)$, procura-se uma função que seja equivalente a $\sum_{k=1}^{j-1} \overline{d}_k \overline{\ell}_{jk}^2$ quando α se aproxima de zero[3].

Consideram-se as funções $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ e $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, dadas por $\alpha \mapsto \sum_{k=1}^{j-1} \frac{(d_k \ell_{jk})^2}{d_k + \alpha}$ e $\alpha \mapsto \sum_{k=1}^{j-1} \frac{\alpha}{d_k + \alpha} d_k \ell_{jk}^2$, respectivamente. Observe que $(f+g)(\alpha) = \sum_{k=1}^{j-1} d_k \ell_{tk}^2$. Dado que $f(\alpha) \sim \sum_{k=1}^{j-1} \overline{d}_k \overline{\ell}_{jk}^2$ quando α se aproxima de zero, procura-se a solução do problema $(\mathrm{P}_\alpha)\,\{\min \alpha \quad \text{s. a} \ \ f(\alpha) \leq a_{jj} - \mathrm{tol} \ ; \alpha > 0\}$ para obter $\sum_{k=1}^{j-1} \overline{d}_k \overline{\ell}_{jk}^2 \sim f(\alpha) < a_{jj} + \alpha - \mathrm{tol}$. Assim, uma solução de (P_α) será solução de $(\overline{\mathrm{P}}_\alpha)$.

Como f é uma função decrescente α é solução de (P_α) se, e somente se, $f(\alpha) = a_{jj} - \mathrm{tol}$. Usa-se o método de Newton para calcular numericamente este valor para usá-lo na FCC1.

[3] As funções $f(x)$ e $g(x)$ são equivalentes, isto é denotado por $f \sim g$, quando x se aproxima de a se

$$\lim_{x \longrightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = 1 \,.$$

3.3 Segunda Abordagem

O novo valor de α_t é calculado baseado na construção de uma parábola, denota-se este precondicionador por FCCp. De (5), usa-se a segunda equação para calcular $\bar{\ell}_{jk}$ e substituir na primeira igualdade para obter: $\bar{d}_j = d_j + \alpha + \sum_{k=1}^{j-1} d_k \ell_{jk}^2 \left(\bar{d}_k - d_k)/(\bar{d}_k)\right) + d\ell$. onde $d\ell = -\sum_{k=1}^{j-1} \sum_{t=1}^{k-1} \Big((2\ell_{jk} d_k + \ell_{jt} d_t \ell_{kt} - \bar{\ell}_{jt} \bar{d}_t \bar{\ell}_{kt}) \left(\ell_{jt} d_t \ell_{kt} - \bar{\ell}_{jt} \bar{d}_t \bar{\ell}_{kt} \right) / \bar{d}_k \Big)$. Logo, $\bar{d}_j$ é aproximado por $\hat{d}_j$, onde $\hat{d}_j = d_j + \alpha + \sum_{k=1}^{j-1} d_k \ell_{jk}^2 \left((\bar{d}_k - d_k)/(\bar{d}_k)\right)$, observe que $\left(\frac{\bar{d}_k - d_k}{\bar{d}_k}\right) = \frac{\tilde{\alpha}_k}{d_k + \tilde{\alpha}_k}$, com $\tilde{\alpha}_k = \alpha + \sum_{s=1}^{k-1} d_s \ell_{ks}^2 (\bar{d}_s - d_s)/(\bar{d}_s)$. Se r é o argumento máximo de $\max_{1 \le k \le j-1} \{\ell_{jk}\}$, então $\hat{d}_j > a_{jj} + \alpha - \sum_{\substack{k=1 \\ k \ne r}}^{j-1} d_k \ell_{jk}^2 - \frac{d_r}{d_r + \tilde{\alpha}_r} d_r \ell_{jr}^2$. Assim, para construir a FCCp, considera-se $\mathbf{d}_j$:

$$\mathbf{d}_j = \mathrm{K} + \alpha - \frac{d_r}{d_r + \alpha} d_r \ell_{jr}^2 \,, \tag{6}$$

onde, $\mathrm{K} = a_{jj} - \sum_{\substack{k=1 \\ k \ne r}}^{j-1} d_k \ell_{jk}^2$. Usando (6) com a condição $\mathbf{d}_j \ge \text{tol}$, obtem-se α. Finalmente, o cálculo de α_t será: $\alpha_t = \alpha + \text{tol}$, se $\alpha < \text{tol} - d_j$ e $\alpha_t = \text{tol} - d_j$, caso contrário, onde $t = 1, \ldots, 15$. Este cálculo está baseado na equação (6) e na Proposição 3.3. Observe que (6) é a parábola $\bar{y} = \mathrm{K} + \alpha - \frac{d_r}{d_r + \alpha} d_r x^2$, obtida de $y = \mathrm{K} - d_r x^2$, onde $y = d_j$ e $x = \ell_{jr}$.

4 Resultados Numéricos

Tabela 1: Problemas Testes e o Tempo Total de Processamento.

Problema	Linhas	Colunas	FCC	FCC1	FCCp	FCCβ
NL	6665	14680	33,74	30,13	32,81	79,86
stocfor3	15362	22228	89,50	78,71	97,67	81,06
BL	5729	12462	18,05	17,35	18,38	38,54
els19	4350	13186	43,51	42,61	46,99	44,84
chr22b	5587	10417	19,10	17,99	18,46	17,28
scr20	5079	15980	60,18	64,16	61,11	54,13
rou20	7359	37640	754,32	775,09	834,34	623,75
ste36a	27683	15980	10022,89	9468,18	11530,55	-
cre-b	5328	36382	43,33	48,99	49,89	51,67
cre-d	4094	28601	27,76	33,85	25,25	32,17
ex09	1821	18184	47,94	41,99	44,78	59,35
ken11	9964	16740	10,42	9,39	12,73	17,18
ken13	22365	36561	94,63	85,51	105,91	91,39
ken18	78538	128434	1052,51	1031,46	1395,86	1308,52
pds-06	9145	28472	8,34	9,55	13,97	39,29
pds-10	16558	48763	18,49	16,28	28,06	153,87
pds-20	32276	106180	212,79	322,21	298,79	928,28
pds-40	34265	214385	410,47	427,27	828,62	4202,66
pds-60	96503	332862	1096,77	1160,31	1601,91	13499.75
pds-80	126109	430800	1526,79	1620,97	2104,80	19505,97
pds-100	156243	514577	2631,49	2699,35	4196,98	38646,42

O código original do PCx, veja [4], e da FCC foram modificados para incorporar a FCC1 e FCCp. A modificação proposta por [7] é chamada de FCCβ. Os testes computacionais foram realizados em ambiente Linux, em uma máquina equipada com processador core i7 de 2.0 GHz e 8Gb de memória RAM. Os problemas utilizados para avaliar o desempenho das novas abordagens foram extraídos das bibliotecas: NETLIB, QAP e KENNINGTON. Para avaliar a eficiência das novas propostas, na Tabela 1 é apresentado o tempo de processamento . Em cada tabela o símbolo "−" significa que o problema não foi resolvido. Na Tabela 2, compara-se o total de reinícios em todas as iterações do MPI onde é calculada a FCC e o total de iterações do MPI para resolver o problema. Além disso, os símbolos "*" e "**" significam que em uma iteração e em mais de uma iteração do MPI o número total de reinícios foi maior que 15, respectivamente.

Tabela 2: Número total de Reínicios em cada Iteração e Total de Iterações do MPI

Problema	FCC	FCC1	FCCp	FCC	FCC1	FCCp	FCCβ
NL	284	73	65	41	42	42	47
stocfor3	199	73	52	32	32	32	32
BL	261	94	56	38	38	38	38
els19	78	32	29	31	31	31	31
chr22b	79	30	15	29	29	29	29
scr20	74	27	21	21	21	21	21
ste36a	125*	38	34*	37	37	37	-
cre-b	288	96	49	43	43	43	43
cre-d	281	128**	43	42	46	41	43
ex09	319	85	42	45	44	44	51
ken11	74	43	32	23	22	22	23
ken13	73	34	47	29	29	31	29
ken18	103	53	56	41	40	38	38
pds-06	216	60	41	39	39	40	38
pds-10	256	69	42	47	46	48	47
pds-20	322	90	61	60	61	61	59
pds-40	479	135	90	78	79	79	77
pds-60	492	150	107	84	84	83	84
pds-80	478	166	94	83	83	83	83
pds-100	508	193	113	87	88	86	79

A eficiência das novas modificações FCC1 e FCCp é destacada em alguns problemas quando é combinado com o PS, veja Tabela 1. Observa-se que o desempenho do precondicionador FFCβ foi discrepante em relação aos problemas pds, pois a mudança de fase implicou que o PS incrementasse o tempo computacional.

5 Conclusões

As modificações propostas FCC1 e FFCp reduziram o número de reinícios da FCC, além disso, foi possível resolver problemas como o ste36a. Os resultados obtidos mostram

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0476

que estas propostas são eficientes e robustas. Isto acontece pois em cada reinício não é aumentando um número na diagonal com a esperança de atingir o valor mínimo que sirva para construir o precondicionador sem considerar que exista a possibilidade de que o incremento seja insuficiente. Em vez disso as novas propostas procuram que o incremento evite que ocorra a falha na mesma coluna e, portanto, atingir o incremento global necessário para construir o precondicionador FCC.

Agradecimentos

Este trabalho contou com o apoio financeiro da FAPESP e do CNPq.

Referências

[1] S. Bellavia, V. Simone, D. Serafino, and B. Morini. A preconditioning framework for sequences of diagonally modified linear systems arising in optimization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 50(6):3280–3302, 2012.

[2] S. Bocanegra, F. F. Campos, and A. R. L. Oliveira. Using a hybrid preconditioner for solving large-scale linear systems arising from interior point methods. *Computational Optimization and Applications*, 36(2-3):149–164, 2007.

[3] F. F. Campos. *Analysis of conjugate gradients-type methods for solving linear equations.* Tese de Doutorado, University of Oxford, 1995.

[4] J. Czyzyk, S. Mehrotra, M. Wagner, and S. J. Wright. Pcx user guide. *Technical Report OTC 96/01*, 1996.

[5] T. A. Maunteuffel. An incomplete factorization technique for positive definite linear systems. *Mathematics of computation*, 34(150):473–497, 1980.

[6] A. R. L. Oliveira and D.C. Sorensen. A new class of preconditioners for large-scale linear systems from interior point methods for linear programming. *Linear Algebra and its applications*, 394:1–24, 2005.

[7] L. M. Silva. *Modificações na Fatoração Controlada de Cholesky para Acelerar o Precondicionamento de Sistemas Lineares no Contexto Pontos Interiores.* Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, 2014.

[8] M. I. Velazco, A. R. L. Oliveira, and F. F. Campos. Heuristics for implementation of a hybrid preconditioner for interior-point methods. *Pesquisa Operacional*, 31(3):579–591, 2011.

[9] S. J. Wrigth. *Primal-dual Interior-Point Methods:.* SIAM e-books. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 1997.

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0476