



COMPARAÇÃO ENTRE ABORDAGENS DIRETAS E ITERATIVAS NA SOLUÇÃO DOS SISTEMAS LINEARES EM MÉTODOS DE PONTOS INTERIORES

Aurelio R. L. Oliveira

UNICAMP

R. Sergio Buarque de Holanda, 651, Campinas SP

aurelio@ime.unicamp.br

Porfirio Suñagua

Universidad San Andres

Avenida Villazon, 1995, La Paz, Bolívia

psunagua@umsa.bo

RESUMO

O passo mais caro dos métodos de pontos interiores para programação linear consiste na solução de sistemas lineares a cada iteração. Os métodos de solução desses sistemas lineares estão divididos em duas classes principais: métodos diretos e métodos iterativos. No primeiro caso, destaca-se a fatoração de Cholesky, enquanto que no segundo caso o método dos gradientes conjugados é mais utilizado. Nesse trabalho esses dois métodos são comparados em problemas de programação linear de grande porte. Os experimentos numéricos mostram que os métodos iterativos, devidamente preconditionados, são os mais indicados para esse tipo de problemas.

PALAVRAS CHAVE. Métodos de pontos interiores, Sistemas lineares, Problemas de grande porte.

Programação Matemática

ABSTRACT

The most expensive step in interior point method for linear programming consists in the solution of linear systems at each iteration. The solution methods of such linear systems are classified in two main approaches: direct and iterative methods. The Cholesky factorization raises as the method of choice for the former, while for the later, the conjugate gradient method is more often adopted. In this work both approaches are compared for large-scale linear programming problems. Numerical experiments show that the conjugate gradient method, with proper preconditioning achieve better performance than the direct approach for such problems.

KEYWORDS. Interior point methods, Linear systems, Large-scale problems.

Mathematical Programming



1. Introdução

Os métodos de pontos interiores vem sendo utilizado com sucesso na resolução de sistemas lineares de grande porte praticamente desde o seu surgimento. A direção de busca desses métodos é obtida resolvendo sistemas lineares a cada iteração. Esse cálculo pode representar até 90% do custo total da iteração [Gondzio, 2012]. Na maioria das implementações, esses sistemas lineares são resolvidos via fatoração de Cholesky [Adler et al., 1989; Berti et al., 2016, 2017; Gondzio, 1996; Mehrotra, 1992]. No entanto, para problemas de muito grande porte a fatoração de Cholesky pode ficar muito densa e métodos iterativos podem ser mais apropriados [Bocanegra et al., 2007; Oliveira e Sorensen, 2005]. Em particular, nas abordagens por métodos iterativos, é crucial preconditionar de forma adequada para que a convergência seja rápida ou mesmo possa ser obtida [Gondzio, 2012].

Em [Oliveira e Sorensen, 2005] é realizada uma comparação entre a fatoração de Cholesky e o método dos gradientes conjugados preconditionado pelo preconditionador separador. Nos testes realizados, conclui-se que a abordagem por métodos iterativos é mais rápida na maioria dos problemas testados, embora não seja mais robusta. Em [Bocanegra et al., 2007] a abordagem híbrida é introduzida ao acrescentar a fatoração controlada de Cholesky nas iterações iniciais, proporcionando mais robustez e velocidade a esta abordagem. Desde então, as duas abordagens sofreram evolução e os computadores ganharam capacidade tanto na quantidade de memória disponível quanto na velocidade de processamento.

O objetivo desse trabalho consiste em apresentar algumas das evoluções no desenvolvimento de preconditionadores e realizar experimentos computacionais com códigos representando o atual estado da arte.

Na Seção 2 os métodos de pontos interiores são descritos, assim como os sistemas lineares resultantes da aplicação desses métodos. A Seção 3 descreve o preconditionador separador, especialmente desenvolvido para as iterações finais dos métodos de pontos interiores. A fatoração controlada de Cholesky, utilizada nas iterações iniciais, é descrita na Seção 4. Os experimentos numéricos comparando a abordagem com métodos iterativos e métodos diretos são apresentados na Seção 5. Finalmente, as conclusões são apresentadas na Seção 6.

2. Métodos de pontos interiores para programação linear

Considere o problema de programação linear na forma padrão

$$\begin{aligned} (P) \quad & \text{Min} \quad c^T x \\ & \text{s.a.} \quad Ax = b \\ & \quad \quad x \geq 0 \end{aligned} \tag{1}$$

onde A é a matriz de restrições de dimensão $m \times n$ com posto m , $b \in \mathcal{R}^m$, $x, c \in \mathcal{R}^n$, n representa o número de variáveis do problema e m o número de restrições do problema, enquanto c é conhecido como o vetor de custos. Na terminologia de programação linear, x é chamado variável primal.

Associado ao problema primal (P) temos o problema dual:

$$\begin{aligned} (D) \quad & \text{Max} \quad b^T y \\ & \text{s.a.} \quad A^T y + z = c \\ & \quad \quad z \geq 0, y \text{ livre} \end{aligned} \tag{2}$$

onde $y \in \mathcal{R}^m$ e $z \in \mathcal{R}^n$ são conhecidos como variáveis duais.



As condições de otimalidade para esses problemas podem ser escritas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} Ax &= b, \\ x &\geq 0, \\ A^T y + z &= c, \\ z &\geq 0, \\ x_i z_i &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (3)$$

Nos métodos de pontos interiores, supondo que $x > 0$ e $z > 0$ podemos dizer de forma simplificada que as direções de busca são calculadas aplicando o método de Newton em:

$$\begin{cases} Ax - b = 0, \\ A^T y + z - c = 0, \\ XZe = 0, \end{cases} \quad (4)$$

onde $X = \text{diag}(x)$, $Z = \text{diag}(z)$ e $e = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathcal{R}^n$.

As direções de Newton para esse sistema não linear são dadas por:

$$\begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_p \\ r_d \\ r_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - Ax \\ c - A^T y \\ -XZe \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Uma vez obtidas as equações de Newton e eliminadas facilmente as direções de busca dz no último conjunto de equações, o cálculo da direção de busca se reduz a resolver o sistema aumentado:

$$\begin{pmatrix} -D^{-1} & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_d - X^{-1}r_a \\ r_p \end{pmatrix}, \quad (6)$$

ou o sistema de equações normais, após eliminar dx :

$$ADA^T dy = r. \quad (7)$$

Onde $D = Z^{-1}X$ e $r = r_p + A(Dr_d - Z^{-1}r_a)$. Além disso, ADA^T resulta uma matriz definida positiva. Portanto, o primeiro sistema (aumentado) é simétrico, indefinido e mantém a esparsidade da matriz A , enquanto a matriz do sistema de equações normais é simétrica, definida positiva, em geral mais densa que A e é mais mal-condicionada que a matriz do sistema aumentado devido ao produto de matrizes pela matriz diagonal mal escalada D .

O uso de métodos iterativos por sua vez exige a utilização de preconditionadores pois os sistemas lineares são muito mal condicionados, principalmente próximo a uma solução do problema de programação linear.

Os preconditionadores são utilizados para transformar um sistema linear mal condicionado em um sistema equivalente com uma matriz bem condicionada de tal forma que a solução de ambos sistemas lineares possam ser facilmente relacionadas. Por exemplo, o sistema linear $Cw = v$ com C uma matriz simétrica, pode ser convertido no sistema $PCP^T \tilde{w} = Pv$, onde $\tilde{w} = P^{-T}w$. A matriz P é escolhida de tal forma que PCP^T seja melhor condicionada que C e seja também fácil de trabalhar, por exemplo, P pode ser triangular.



3. Precondicionador separador

Em [Oliveira e Sorensen, 2005] é introduzido o precondicionador separador. Este precondicionador é construído a partir de m colunas linearmente independentes da matriz A . Essas colunas são obtidas a partir do reordenamento das colunas de A por algum critério pré-estabelecido.

Considere que B seja a matriz formada por essas m colunas e N representa as demais colunas de A , então para $A = [B, N]$, $D = \text{diag}(D_B, D_N)$. É interessante encontrar uma base B tal que $D_B^{-1} \approx 0$ e D_N^{-1} com elementos muito grandes, de modo que, $D_N \approx 0$, então a matriz dos coeficientes do sistema aumentado, assim como a matriz das equações normais seriam aproximadas por:

$$\begin{bmatrix} D_B^{-1} & 0 & B^T \\ 0 & D_N^{-1} & N^T \\ B & N & 0 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0 & 0 & B^T \\ 0 & D_N^{-1} & N^T \\ B & N & 0 \end{bmatrix},$$

e $ADA^T = BD_B B^T + ND_N N^T \approx BD_B B^T$, respectivamente.

O precondicionador separador, proposto para o sistema aumentado, é a matriz por blocos:

$$\begin{pmatrix} D_B^{1/2} & 0 & D_B^{-1/2} B^{-1} \\ 0 & D_N^{1/2} & 0 \\ D_B^{1/2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Em [Velazco et al., 2011] as colunas de A são ordenadas de acordo com a norma 2 de $A D e_j$, melhorando os resultados propostos em [Oliveira e Sorensen, 2005].

As colunas linearmente independentes são obtidas pela *fatoração LU retangular* aplicada à matriz A . Para evitar um preenchimento excessivo na matriz L , baseado no critério de mínimo grau o método reordena às colunas já encontradas e o processo de fatoração LU reinicia. Esse processo termina quando completa uma base B de colunas de A .

Em [Suñagua e Oliveira, 2017] a fatoração LU com pivoteamento parcial é aplicada na matriz $D^{\frac{1}{2}} A^T$. Esta matriz tem posto completo, porque as colunas de A^T são linearmente independentes, de modo que, a fatoração LU com pivoteamento parcial sempre existirá, logo, as linhas pivôs serão a base procurada. Essa abordagem adicionou velocidade e robustez ao precondicionador separador e será utilizada nos experimentos computacionais.

4. Fatoração controlada de Cholesky

O precondicionador separador foi especialmente desenvolvido para as iterações finais dos métodos de pontos interiores não sendo eficiente nas iterações iniciais. Em [Oliveira e Sorensen, 2005] um precondicionador diagonal é usado nas iterações iniciais. Em [Bocanegra et al., 2007] essa abordagem é aperfeiçoada adotando nas iterações iniciais a Fatoração controlada de Cholesky [Campos e Birkett, 1998.].

Esta fatoração é uma generalização de outras fatorações incompletas de Cholesky [Jones e Plassmann, 1995; Golub e Van Loan, 1996], onde o número de elementos não nulos permitido por coluna é controlado. Esse número, denominado η pode variar de 0 até m , produzindo um precondicionador que pode ser desde diagonal até a fatoração completa de Cholesky.

A escolha dos elementos não nulos que permanecerão na fatoração controlada é feita por valor e não por posição como nas fatorações clássicas. Desta forma, os elementos não nulos de



maior valor absoluto de uma determinada coluna são mantidos na fatoração conforme o valor de η . Esta forma de escolha minimiza a norma de Frobenius da matriz $L - \tilde{L}$ que representa a diferença entre a fatoração de Cholesky completa e a fatoração controlada de Cholesky \tilde{L} .

Na abordagem híbrida proposta em [Bocanegra et al., 2007] a fatoração controlada de Cholesky é utilizada nas iterações iniciais dos métodos de pontos interiores, começando com poucos elementos não nulos por coluna e aumentando gradativamente à medida que o método progride. Se o método dos gradientes conjugados necessita mais que $\frac{m}{6}$ iterações para converdir, η é aumentado em 10 unidades. Quando os sistemas lineares se tornam muito mal condicionados, o preconditionador separador passa a ser utilizado por ser mais apropriado nas iterações finais dos métodos de pontos interiores. Em [Velazco et al., 2011] a matriz é considerada mal condicionada quando η atinge o valor máximo permitido.

Com a adoção do preconditionador híbrido, a abordagem por métodos iterativos para resolver os sistemas lineares ficou ainda mais rápida e robusta.

5. Experimentos numéricos

Os testes realizados em [Bocanegra et al., 2007; Velazco et al., 2011; Suñagua, 2014] para verificar os aperfeiçoamentos da abordagem com métodos iterativos comparam cada nova versão com a melhor versão por métodos iterativos existente até aquele momento. Nessa seção a melhor versão atual por métodos iterativos, descrita em [Suñagua e Oliveira, 2017], é comparada com uma versão atual de implementação da fatoração de Cholesky (Pardiso) [Kuzmin et al., 2013].

Tabela 1: Comparação entre as abordagens

Problema	Linhas	Colunas	nnz	GCP	Cholesky
pds-30	49944	154998	333260	267	626
pds-20	33874	105728	226494	313	158
rou20	7359	33840	152980	496	445
nug15	6330	22275	85470	720	263
qap15	6330	22275	85470	767	*
pds-70	114944	382311	822526	1432	1941
ken18	105127	154699	297886	1439	112
pds-80	129181	426278	916852	1873	2061
pds-90	142823	466671	1002902	2126	2614
pds-100	156243	505360	1060567	3153	2813
kra30a	18059	72675	337920	6699	8044
ste36a	27683	109656	512640	6912	29524
ste36b	27683	109656	512640	8306	28802
kra30b	18059	72675	337920	9326	8237
ste36c	27683	109656	512640	9987	32033
nug20	15240	72600	281960	10651	*

* Significa que o método não convergiu

Ambas abordagens, direta e iterativa foram introduzidas no código PCx [Czyzyk et al., 1999] substituindo as rotinas de solução dos sistemas lineares originais. No cálculo da matriz B do preconditionador separador utiliza-se o UMFSPACK [Davis, 2004].

Os testes foram realizados em uma máquina Intel Core i7-X990, com 24GB e Linux Debian. Os problemas teste foram retirados entre os maiores das bibliotecas NETLIB, QAPLIB e PDS.

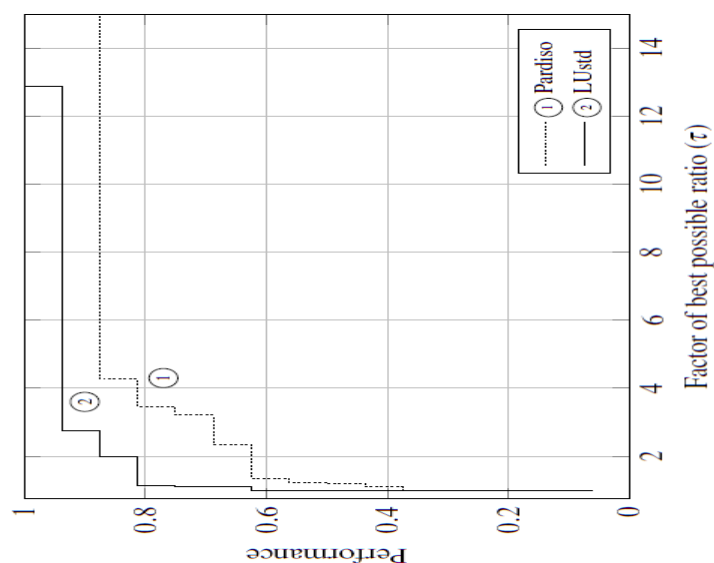


Figura 1: Perfil de desempenho: GCP (*LUstd*) e Cholesky (Pardiso)

A Tabela 1 resume os dados dos 16 problemas teste e o tempo total em segundos obtido pelas duas abordagens. As colunas *linhas*, *colunas* e *nnz* contêm as dimensões da matriz de restrições *A* e número de elementos não nulos após o pré-processamento, respectivamente. As colunas *GCP* e *Cholesky* exibem o tempo total de solução do problema em segundos, respectivamente. Para 10 dos problemas testados observamos que o método iterativo obtém os menores tempos, em particular nos problemas de maior porte que apresenta diferenças de tempo consideráveis. Adicionalmente, a implementação utilizando o método direto não foi capaz de resolver dois dos problemas testes, enquanto que por métodos iterativos todos eles foram resolvidos.

Na Figura 1 estes resultados são apresentados em um gráfico de perfil de desempenho Dolan e Moré [2002]. Nota-se que a versão com método iterativo resolve todos os problemas, atingindo o valor 1 no gráfico, enquanto que por Cholesky, pouco mais que 80% dos problemas são resolvidos. Os tempos menores correspondem à curva do método iterativo acima do método direto mostrando a melhor eficiência além da robustez do método iterativo nos problemas testados.

6. Conclusões

Neste trabalho comparamos duas abordagens para a solução de sistemas lineares oriundos dos métodos de pontos interiores. O método dos gradientes conjugados preconditionado por um preconditionador híbrido é comparado com a fatoração de Cholesky. Implementações do estado da arte das duas abordagens são utilizadas. Verificamos que para problemas de grande porte, a abordagem por métodos iterativos híbrida com cálculo eficiente do preconditionador separador é mais rápida que a abordagem por fatoração de Cholesky na maioria dos problemas testados. Adicionalmente, essa abordagem se mostrou mais robusta resolvendo todos os problemas de programação linear testados, enquanto que dois problemas não são resolvidos quando a fatoração de Cholesky é utilizada.

Agradecimentos

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

Referências

Adler, I., Resende, M. G. C., Veiga, G., e Karmarkar, N. (1989). An implementation of Karmarkar's algorithm for linear programming. *Mathematical Programming*, 44:297–335.



- Berti, L. F., Ghidini, C. T. L. S., e Oliveira, A. R. L. (2016). Use of continued iteration on the reduction of iterations of the interior point method. *Pesquisa Operacional*, 36:487–501.
- Berti, L. F., Oliveira, A. R. L., e Ghidini, C. T. L. S. (2017). A variation on the interior point method for linear programming using the continued iteration. *Mathematical Methods of Operations Research*, 85:61–75.
- Bocanegra, S., Campos, F. F., e Oliveira, A. R. L. (2007). Using a hybrid preconditioner for solving large-scale linear systems arising from interior point methods. *Computational Optimization and Applications*, 36(1–2):149–164.
- Campos, F. F. e Birkett, N. R. C. (1998.). An efficient solver for multi-right hand side linear systems based on the CCCG(η) method with applications to implicit time-dependent partial differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(1):126–138.
- Czyzyk, J., Mehrotra, S., Wagner, M., e Wright, S. J. (1999). PCx an interior point code for linear programming. *Optimization Methods and Software*, 11-2(1-4):397–430.
- Davis, T. A. (2004). Algorithm 832: Umfpack v4. 3—an unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 30:196–199.
- Dolan, E. D. e Moré, J. J. (2002). Benchmarking optimization software with performance profiles. *Mathematical programming*, 91(2):201–213.
- Golub, G. H. e Van Loan, C. F. (1996). *Matrix Computations Third Edition*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, Maryland.
- Gondzio, J. (1996). Multiple centrality corrections in a primal-dual method for linear programming. *Computational Optimization and Applications*, 6:137–156.
- Gondzio, J. (2012). Interior point methods 25 years later. *European Journal of Operational Research*, 218:587–601.
- Jones, M. T. e Plassmann, P. E. (1995). An improved incomplete Cholesky factorization. *ACM Trans. Math. Software*, 21:5–17.
- Kuzmin, A., Luisier, M., e Schenk, O. (2013). Fast methods for computing selected elements of the greens function in massively parallel nanoelectronic device simulations. In *Euro-Par 2013 Parallel Processing. Lecture Notes in Computer Science*, p. 533–544. Springer.
- Mehrotra, S. (1992). On the implementation of a primal-dual interior point method. *SIAM Journal on Optimization*, 2(4):575–601.
- Oliveira, A. R. L. e Sorensen, D. C. (2005). 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.
- Suñagua, P. e Oliveira, A. R. L. (2017). A new approach for finding a base for the splitting preconditioner for linear system from interior point methods. *Computational Optimization and Applications*, 67:111–127.
- Suñagua, P. (2014). *Uma Nova Abordagem para Encontrar a Base do Precondicionador Separador para Sistemas Lineares no Método de Pontos Interiores*. PhD thesis, IMECC – UNICAMP, Campinas SP.
- Velazco, M. I., Oliveira, A. R. L., e Campos, F. F. (2011). Heuristics for implementation of a hybrid preconditioner for interior-point methods. *Pesquisa Operacional*, 34(9):2553–2561.