

UMA NOVA PROPOSTA PARA MODIFICAR A FATORAÇÃO CONTROLADA DE CHOLESKY NO MÉTODO DE PONTOS INTERIORES

Manolo Rodriguez Heredia

Departamento de Matemática Aplicada -IMECC - UNICAMP
13083-859, Campinas, SP
rodriguezhermanolo@hotmail.com

Aurelio Ribeiro Leitte Oliveira

Departamento de Matemática Aplicada -IMECC - UNICAMP
13083-859, Campinas, SP
aurelio@ime.unicamp.br

RESUMO

Propõe-se uma modificação na Fatoração Controlada de Cholesky para reduzir o tempo computacional na resolução dos sistemas lineares oriundos do método primal-dual de pontos interiores. Esta proposta modifica o cálculo do parâmetro de correção das falhas que ocorrem na diagonal e diminui o número de reinícios da fatoração durante a construção do preconditionador. A melhoria obtida usando esta nova modificação será apresentada em experimentos numéricos com problemas de grande porte.

PALAVRAS CHAVE. Métodos de pontos interiores, Precondicionadores, Fatoração Controlada de Cholesky.

Área Principal: Programação Matemática.

ABSTRACT

We propose a change in the Controlled Cholesky Factorization computation to reduce the computational time in solving linear systems from the primal-dual interior point method. This proposal modifies the calculation of the correction parameter when failures occur on the diagonal and reduces the number of restarts during construction of the preconditioner. The improvement obtained using this new modification will be shown in numerical experiments with large-scale problems.

KEYWORDS. Interior Point Method. Preconditioner. Controlled Cholesky Factorization.

Main Area: Mathematical Programming.

1. Introdução

Os métodos de pontos interiores do tipo primal-dual são uma ótima ferramenta para resolver problemas de grande porte pois apresentam um moderado número de iterações, porém cada iteração pode resultar cara devido ao mau condicionamento dos sistemas lineares que precisam ser resolvidos para encontrar a direção de busca.

Com o objetivo de melhorar o condicionamento destes sistemas lineares e, por tanto, melhorar o tempo computacional em cada iteração são usados os preconditionadores. Neste trabalho é usada uma abordagem híbrida proposta por Bocanegra et. al. (2007). Esta abordagem tem duas fases, na primeira é usado o preconditionador Fatoração Controlada de Cholesky proposto por Campos (1998) e na segunda fase trabalha-se com o preconditionador Separador proposto por Oliveira et. al. (2005).

O preconditionador Fatoração Controlada de Cholesky é muito eficiente nas iterações iniciais do método de pontos interiores porém durante o processo de fatoração é possível que existam falhas na diagonal do preconditionador. Isto é uma desvantagem pois aumenta consideravelmente o tempo de preconditionamento do problema e do método de pontos interiores.

Propõe-se uma modificação na Fatoração Controlada de Cholesky 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 do preconditionador.

2. Programação Linear

Considere o problema de programação linear primal-dual na forma padrão:

$$(P) \begin{cases} \text{minimizar} & c^T x \\ \text{sujeito a} & A x = b \\ & x \geq 0 \end{cases} \quad (D) \begin{cases} \text{maximizar} & y^T b \\ \text{sujeito a} & A^T y + z = c \\ & z \geq 0 \\ & y \in \mathbb{R}^m \end{cases}$$

onde $m \leq n$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é uma matriz $m \times n$ de posto completo, x, z e $c \in \mathbb{R}^n$, $y, b \in \mathbb{R}^m$.

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

$$\begin{bmatrix} Ax - b \\ A^T y + z - c \\ XZe \end{bmatrix} = 0 \quad (x, z) \geq 0, \quad (1)$$

onde X e Z são matrizes diagonais com as componentes dos vetores x e z . O vetor $e \in \mathbb{R}^n$ tem todas suas componentes iguais a um.

2.1. Método de Pontos Interiores Primal-Dual

Os métodos de pontos interiores encontram uma solução ótima do problema de programação linear seguindo uma trajetória no interior do ortante positivo, chamada de *Trajétoria Central* e aproximam-se da fronteira desta região apenas no limite. Como a maioria dos métodos iterativos em otimização, os métodos de pontos interiores primal-dual também realizam dois passos básicos: um procedimento para determinar uma direção de busca e uma estratégia para determinar o tamanho de passo.

Aplica-se o método de Newton às condições em (1). Dado um ponto inicial x^0 , o próximo ponto será $x^1 = x^0 - J(x^0)^{-1} F(x^0)$, onde $F: \mathbb{R}^{2n+m} \rightarrow \mathbb{R}^{2n+m}$ é uma aplicação dada por:

$$(x, y, z) \mapsto \begin{bmatrix} A^T y + z - c \\ Ax - b \\ XZe \end{bmatrix}$$

e J é o Jacobiano da aplicação F . Além disso, define-se $r(x, y, z) = -F(x, y, z)$; isto é,

$$r_p = b - Ax \quad r_d = c - A^T y - z \quad e \quad r_a = -XZe.$$

Se estes resíduos (r_p, r_d, r_a) são nulos, obtém-se uma solução ótima. Logo, a equação do passo de Newton pode ser reescrita como:

$$\begin{bmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z & 0 & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -XZe \end{bmatrix} \quad (2)$$

O método realiza uma busca linear ao longo da direção de Newton obtendo

$$(x^1, y^1, z^1) = (x^0, y^0, z^0) + \alpha(\Delta x, \Delta y, \Delta z).$$

onde $\alpha \in (0, 1]$. Na prática, considera-se um passo na direção de Newton para o qual $x_i z_i = \sigma \mu$, onde μ é a medida do gap de dualidade definida como

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i z_i = \frac{x^T z}{n},$$

e $\sigma \in [0, 1]$ é o fator de redução na medida do gap de dualidade chamado de parâmetro de centragem. Assim, o lado direito da equação (2) fica $(r_p, r_d, -XZe + \sigma \mu e)^T$.

No entanto, pode-se usar a variante preditora-corretora de Mehrotra, pois esta possui melhores propriedades teóricas e computacionais, veja Wright (1997).

2.2. Método Preditor-Corretor de Mehrotra

No método preditor-corretor de Mehrotra as condições KKT são modificadas de modo a manter a não negatividade das componentes (x, z) e incorporar o parâmetro de centragem. Em cada iteração k do método a direção de busca é obtida pela resolução de dois sistemas lineares com a mesma matriz.

Primeiro, calcula-se a direção afim-escala $(\Delta_a x^k, \Delta_a y^k, \Delta_a z^k)$

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z^k & 0 & X^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_a x^k \\ \Delta_a y^k \\ \Delta_a z^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_p^k \\ r_d^k \\ r_a^k \end{bmatrix}, \quad (3)$$

onde $r_p^k = b - Ax^k$, $r_d^k = c - A^T y^k - z^k$ e $r_a^k = -XZe$. Logo, o lado direito do sistema (3) é modificado fazendo $r_p^k = r_d^k = 0$ e substituindo r_a^k por

$$r_c^k = \mu^k e - \Delta_a X^k \Delta_a Z^k e,$$

onde σ^k é o parâmetro de centragem, $\Delta_a X^k = \text{diag}(\Delta_a x^k)$ e $\Delta_a Z^k = \text{diag}(\Delta_a z^k)$. Assim, o sistema obtido é

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z^k & 0 & X^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_a x^k \\ \Delta_a y^k \\ \Delta_a z^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ r_c^k \end{bmatrix}. \quad (4)$$

A direção de centragem $(\Delta_c x^k, \Delta_c y^k, \Delta_c z^k)$ é obtida quando resolve-se esse novo sistema. Finalmente, a direção de busca $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ é obtida da soma das duas direções anteriores.

A estrutura da matriz do sistema (3) permite reformulá-lo de modo a obter sistemas lineares com matrizes que são simétricas. Essa reformulação é possível porque em cada ponto

(x^k, y^k, z^k) as componentes (x^k, z^k) são estritamente positivas e assim as matrizes diagonais X^k e Z^k são não-singulares. Assim, depois de eliminar a variável Δz^k em (4), tem-se o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} -(\Theta^k)^{-1} & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x^k \\ \Delta y^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_d^k - (X^k)^{-1}r_a^k \\ r_p^k \end{bmatrix}, \quad (5)$$

onde $\Theta^k = X^k(Z^k)^{-1}$, isto implica que para cada $i = 1, \dots, n$ cumpre-se $\theta_{ii} = x_i^k/z_i^k$. O sistema (5) é conhecido como sistema aumentado. Da primeira equação, depois de eliminar Δx , cumpre-se

$$A\Theta^k A^T \Delta y^k = r_p^k + A((\Theta^k)^{-1}r_d^k - (Z^k)^{-1}r_a^k). \quad (6)$$

Esta equação é chamada de equações normais.

À medida que o método de pontos interiores se aproxima de uma solução ótima $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$, as variáveis primais e as variáveis duais convergem para os seus respectivos valores ótimos; assim, o conjunto de índices $\{1, 2, \dots, n\}$ se particiona em dois subconjuntos \mathcal{B} e \mathcal{N} , tal que

$$\begin{aligned} \text{para cada } i \in \mathcal{B}: & \quad x_i^k \rightarrow \tilde{x}_i > 0 \quad \text{e} \quad z_i \rightarrow \tilde{z}_i = 0 \\ \text{e para cada } i \in \mathcal{N}: & \quad x_i^k \rightarrow \tilde{x}_i = 0 \quad \text{e} \quad z_i \rightarrow \tilde{z}_i > 0. \end{aligned} \quad (7)$$

No primeiro caso, à medida que o método converge, cumpre-se $\theta_{ii}^k \rightarrow \infty$ e no segundo $\theta_{ii}^k \rightarrow 0$. Assim, as matrizes dos sistemas (5) e (6) ficam mal condicionadas à medida que o método se aproxima de uma solução ótima.

Como mencionado antes, os métodos iterativos podem ser utilizados com sucesso para a resolução dos sistemas lineares oriundos do método dos pontos interiores. No caso das equações normais o método dos gradientes conjugados é escolhido. No entanto, sabe-se que a matriz diagonal Θ fica muito mal condicionada ao longo das iterações do método dos pontos interiores, causando o mau condicionamento da matriz $A\Theta A^T$. Além disso, o método dos gradientes conjugados não tem um bom desempenho quando utilizado com matrizes mal condicionadas; assim, o sucesso da implementação, usando métodos iterativos, depende de uma boa escolha do preconditionador.

2.3. Precondicionadores para as Equações Normais

Na seção 2.2 foi visto que o sistema de equações normais tem matriz simétrica definida positiva e que a mesma fica muito mal condicionada à medida que o método de pontos interiores se aproxima de uma solução.

Nas iterações iniciais será usada uma classe de preconditionador chamada de Fatoração Controlada de Cholesky, proposta por Campos (1998) e nas iterações finais, quando as matrizes se tornam muito mal condicionadas, usa-se o preconditionador Separador proposto em Oliveira (2005). Uma heurística proposta por Bocanegra et. al. (2007) determinará a regra para mudança de um preconditionador para outro. Esta heurística é usada pois nas equações normais (6) a matriz Θ^{-1} se altera muito rapidamente e nas iterações finais se torna mal condicionada.

Esta abordagem híbrida consiste de duas fases, utiliza o método dos gradientes conjugados e trabalha com o preconditionador M para resolver o sistema de equações normais. O sistema preconditionado tem a seguinte forma:

$$M^{-1}(A\Theta^{-1}A^T)M^{-T}\bar{y} = M^{-1}(A\Theta^{-1}X(r_d - X^{-1}r_a) + r_p),$$

onde $\bar{y} = M^T \Delta y$. Usa-se na primeira fase a Fatoração Controlada de Cholesky para construir a matriz M e depois da mudança de fase o preconditionador Separador constrói a matriz M .

2.4. Fatoração Controlada de Cholesky

Considere a fatoração de Cholesky e a fatoração Incompleta de Cholesky da matriz $A\Theta A^T$; isto é,

$$LL^T = A\Theta A^T = \tilde{L}\tilde{L}^T + R$$

onde L é o fator obtido quando a fatoração é completa, \tilde{L} quando a fatoração é incompleta e R é a matriz resíduo. Define-se a matriz E como a diferença $L - \tilde{L}$; logo, tem-se

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

Quando a matriz \tilde{L} se aproxima de L , E se aproxima da matriz nula; logo, $\tilde{L}^{-1}(A\Theta A^T)\tilde{L}^{-T}$ se aproxima da matriz identidade I . A Fatoração Controlada de Cholesky é baseada na minimização da norma de Frobenius da matriz E . Logo, considere o seguinte problema:

$$\text{minimizar } \|E\|_F^2 = \text{minimizar } \sum_{j=1}^n c_j, \quad (8)$$

onde c_j denota o somatório $\sum_{i=1}^m |\ell_{ij} - \tilde{\ell}_{ij}|^2$. Reescrevendo o problema acima, deve-se resolver o problema

$$\text{minimizar } \sum_{j=1}^n \left(\sum_{k=1}^{t_j+\eta} |\ell_{ikj} - \tilde{\ell}_{ikj}|^2 + \sum_{k=t_j+\eta+1}^n |\ell_{ikj}|^2 \right) \quad (9)$$

onde t_j representa 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. Observa-se que o primeiro somatório contém todas as $t_j + \eta$ componentes não nulas da j -ésima coluna de \tilde{L} e o segundo somatório contém apenas as entradas restantes do fator completo L que não tem componentes correspondentes na matriz \tilde{L} .

Finalmente, usa-se a seguinte heurística para resolver o problema (8):

- i) Aumenta-se o fator η . Desta forma, c_j decresce, pois a primeira soma contém mais elementos;
- ii) Escolhe-se os maiores $t_j + \eta$ elementos de \tilde{L} em valor absoluto para η fixo;
- iii) Uma coluna do preconditionador é calculada por vez sendo armazenados os maiores elementos em valor absoluto.

As principais características do preconditionador Fatoração Controlada de Cholesky (FCC) são:

- a) Escolha das componentes por valor. A FCC não considera o padrão de esparsidade da matriz original;
- b) Generalização da melhora da fatoração incompleta de Cholesky. Pode-se ver a FCC como uma generalização do método proposto por Jones e Plasmann (1995);
- c) Incremento exponencial. A Fatoração Controlada de Cholesky não está livre da presença de pivôs muito pequenos ou não positivos durante o processo de fatoração;
- d) Preconditionador versátil. O parâmetro η pode variar de $-n$ até n . Essa versatilidade pode ser aproveitada no preconditionamento de sistemas lineares no método de pontos interiores;
- e) Armazenamento previsível. As matrizes são armazenadas em três vetores. Outro vetor, usado como espaço de trabalho, ainda é necessário para a construção de \tilde{L} .

2.5. Preconditionador Separador

O preconditionador Separador foi proposto por Oliveira et. al. (2005) para a matriz do sistema aumentado e para a matriz das equações normais. A principal característica deste preconditionador é que ele trabalha bem quando está próximo a uma solução ótima, onde as matrizes

são mal condicionadas e encontra uma solução através de métodos iterativos. O preconditionador Separador evita ainda o armazenamento das equações normais.

A construção do preconditionador Separador se baseia na partição que ocorre com os elementos da matriz Θ nas iterações finais do método de pontos interiores, veja (7). Essa partição é utilizada para construir uma matriz não singular B .

Suponha que esteja disponível a partição $A = [B \ N]$, onde B é uma matriz quadrada não singular e de ordem m . Essa partição induz a separação da matriz Θ ; assim, tem-se

$$A\Theta A^T = B\Theta_B B^T + N\Theta_N N^T.$$

Multiplicando a equação acima por $\Theta_B^{-1/2} B^{-1}$ e pós-multiplicando pela transposta, cumpre-se:

$$T = \Theta_B^{-1/2} B^{-1} (A\Theta A^T) B^{-T} \Theta_B^{-1/2} = I + WW^T,$$

onde $W = \Theta_B^{-1/2} B^{-1} N \Theta_N^{1/2}$. Observa-se que a matriz preconditionada é definida positiva e tem autovalores maiores ou iguais a um; isto é, não tem autovalores próximos de zero. Determinar a matriz B não é simples. Para calcular a matriz B veja Oliveira et. al. (2005).

2.6. Mudança de fase

A mudança de fase é importante para o desempenho desta abordagem. Para usar a mudança de fase, usa-se o critério desenvolvido por Velazco et. al. (2010). Esta heurística se baseia no número de iterações dos gradientes conjugados. Quando este número es maior ou igual a $m/6$ o parâmetro η é aumentado em 10. Assim, a mudança de fase ocorre quando η excede um valor fixado.

Na próxima seção, apresenta-se propostas para tratar o problema da presença de pivôs pequenos o não positivos na diagonal o que ocasiona a falha da Fatoração Controlada de Cholesky.

3. Uma nova abordagem para a correção na diagonal na fatoração de Cholesky

Considere a matriz quadrada A de ordem n simétrica e definida positiva e considere que a fatoração $A = LL^T$ existe, onde L é uma matriz triangular inferior com todos os elementos da diagonal positivos; isto é, a fatoração de Cholesky existe. Porém pode não existir um fator \tilde{L} da fatoração incompleta de Cholesky, tal que $A = \tilde{L}\tilde{L}^T$, pois essa fatoração é suscetível à falhas na diagonal. Essas falhas ocorrem quando pivôs muito pequenos, nulos ou negativos são encontrados durante a fatoração. Isso pode provocar instabilidade numérica o resultar em uma matriz preconditionada que poderia ser indefinida.

A fatoração de Cholesky de uma matriz A quadrada de ordem n , simétrica e definida positiva existe. Meijerink (1980) estendeu esse resultado para uma outra classe de matrizes conhecidas como H -matrizes. Quando uma falha ocorre na fatoração devido a presença de pivôs pequenos o não positivos, um incremento global é aplicado na diagonal de A antes de tentar uma nova fatoração. Assim, a nova fatoração incompleta é calculada com a matriz $A + \alpha \text{diag}(A)$, onde $\alpha > 0$. Se para um determinado valor de α a fatoração falha, então este valor é aumentado novamente à diagonal da matriz e a fatoração é reiniciada. O processo é repetido até que a fatoração incompleta seja calculada com sucesso, porém a escolha de um valor α não é uma tarefa simples.

A Fatoração Controlada de Cholesky é um preconditionador construído com base na fatoração incompleta de Cholesky e é possível encontrar falhas na diagonal. Na abordagem híbrida para o condicionamento do método de pontos interiores as falhas que ocorrem durante a fatoração são corrigidas com um incremento exponencial. O valor do incremento é $\sigma_i = 5 \cdot 10^{-4} \cdot 2^{i-1}$, onde $i = 1, \dots, 15$ representa o número de reinícios permitidos na fatoração.

No entanto, é possível calcular um valor para σ_i que evite reinícios, esta abordagem foi proposta por Silva (2014). A ideia está baseada no trabalho de Bellavia et. al. (2012). Quando ocorre uma falha na coluna j durante o processo da Fatoração Controlada de Cholesky; isto é, $d_j \leq \text{tol}$, onde $\text{tol} = 10^{-8}$, o cálculo do preconditionador é realizado efetuando as seguintes etapas:

1. Calcule um valor de α tal que $d_j + \alpha > \text{tol}$. Faça $d_j^{\text{nov}} = d_j + \alpha$;
2. Atualize os elementos das colunas $k = 1, \dots, j - 1$ de L usando as seguintes fórmulas:

$$d_k = d_k + \alpha, \quad \text{para } k = 1, \dots, j - 1 \quad \text{e} \quad \ell_{ik} = \ell_{ik} \frac{d_k}{d_k + \alpha}, \quad \text{para } i = k + 1, \dots, m ;$$

3. Finalize o cálculo dos elementos da coluna j com $d_j = d_j + \alpha$;
4. Atualize os elementos da diagonal de A , $a_{kk} = a_{kk} + \alpha$, para $k = j + 1, \dots, m$;
5. Continue o processo de fatoração para as colunas $k = j + 1, \dots, n$.

Na próxima seção são apresentados novos valores para o incremento na Fatoração Controlada de Cholesky.

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

Na Fatoração Controlada de Cholesky o valor do incremento na diagonal é denotado por σ_i , onde $i = 1, \dots, 15$. Propõe-se novos valores para σ_i , estes novos valores não evitam o reinício na Fatoração Controlada de Cholesky, porém o número de reinícios necessários para realizar a fatoração é diminuído. As novas propostas são as seguintes:

1. Calcula-se o novo valor de σ_i usando a fórmula $\sigma_i = 5 \cdot 10^{-i-1}$ tal que $d_j + \sigma_i > \text{tol}$, onde $d_j < \text{tol}$. Este novo preconditionador é denotado por FCC10. Dessa forma, este valor evita que novos reinícios sejam realizados, pois as primeiras vezes que é calculado permite uma correção com valores de σ_i maiores do que σ_i original; logo, o valor é reduzido nos próximos reinícios para evitar que o aumento na diagonal seja muito grande;
2. Denota-se FCCe ao preconditionador obtido pela adição do valor $\text{tol} = 10^{-8}$ ao σ_i original; isto é, $\sigma_i = 5 \cdot 10^{-4} \cdot 2^{i-1} + \text{tol}$. Esta pequena perturbação no incremento σ_i melhora o preconditionador Fatoração Controlada de Cholesky pois reduz o número de iterações do método dos gradientes conjugados.
3. O novo valor de σ_i é calculado baseado na construção de uma parábola, denota-se este preconditionador por FCCp. Quando ocorre uma falha na diagonal, usa-se o algoritmo LDL^T para calcular este incremento σ_i .

Considere a matriz A simétrica definida positiva de ordem n . A fatoração LDL^T é dada pelo seguinte algoritmo:

Algoritmo 1: Fatoração LDL^T

Entrada: A e a ordem n da matriz A .

Saída: A matriz triangular L e a matriz diagonal D .

para $j \leftarrow 1$ **até** n **fazer**

$$d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{jk}^2 d_k$$

para $i \leftarrow j + 1$ **até** n **fazer**

$$\left[\ell_{ij} = \frac{1}{d_j} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{ik} d_k \ell_{jk} \right) \right]$$

retorna L, D .

Além disso, considere que a matriz A esteja escalada. De acordo com o algoritmo 1 para cada $j = 1, \dots, n$ os elementos d_j do fator D são determinados usando a seguinte fórmula:

$$d_j = 1 - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{jk}^2 d_k. \quad (10)$$

Pode-se escrever a igualdade acima como $d_j = K - d_{j-1} \ell_{j(j-1)}^2$, onde $K = 1 - \sum_{k=1}^{j-2} \ell_{jk}^2 d_k$. Logo, para calcular d_j é possível considerar a equação (10) como uma parábola

$$y = K - d_{j-1} x^2, \quad (11)$$

onde $y = d_j$ e $x = \ell_{j(j-1)}$. Se $d_j < \text{tol}$, usando esta parábola, propõe-se um método para

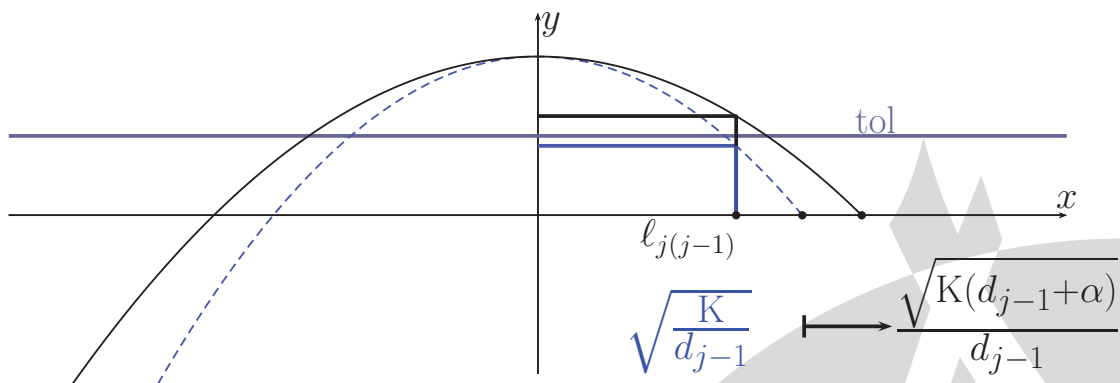


Figura 1: Desloca-se o ponto $(\sqrt{K/d_{j-1}}, 0)$ até $(\sqrt{K(d_{j-1} + \alpha/d_{j-1})}, 0)$ para calcular $d_j^{\text{nov}} > \text{tol}$.

calcular um valor α e construir uma nova parábola tal que $d_j^{\text{nov}} > \text{tol}$, veja Figura 1. Assim, a nova parábola será

$$y^{\text{nov}} = K^{\text{nov}} - \frac{d_{j-1}}{d_{j-1} + \alpha} d_{j-1} x^2.$$

onde $K^{\text{nov}} = \begin{cases} K & \text{se } K > 0; \\ K - d_j, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

O novo d_j^{nov} é maior que tol , quando

$$\alpha \geq \begin{cases} \frac{d_{j-1}(\text{tol} - d_j)}{d_{j-1} \ell_{j(j-1)}^2 - (\text{tol} - d_j)} & \text{se } K > 0; \\ \frac{1}{\ell_{j(j-1)}^2 - 1} & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Considera-se a igualdade para o cálculo de α na desigualdade acima. No entanto, o valor de α pode ser não positivo, basta considerar $|\ell_{j(j-1)}| < 1$. Logo, deve-se considerar um terceiro caso no qual o vértice $(K, 0)$ da parábola (11) é deslocado até $(K + \alpha^v, 0)$ mantendo fixo o ponto $(\sqrt{K/d_{j-1}}, d_j)$; assim, tem-se outra parábola

$$y = C(K - d_{j-1} x^2)$$

onde $C = (K + \alpha^v)/K$. Desta maneira, cumpre-se que $d_j^{\text{Novo}} > \text{tol}$ quando $\alpha^v \geq K(\text{tol}/d_j)$. Considera-se a igualdade para o cálculo de α^v na desigualdade anterior.

Portanto, na fatoração controlada Cholesky a nova atualização de σ_i será:

$$\sigma_i = \text{tol} + \begin{cases} \alpha & \text{se } \alpha > 0; \\ \alpha^v & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Testes numéricos para avaliar o desempenho destas novas propostas serão apresentados na próxima seção.

4. Experimentos Numéricos

Os testes para avaliar o desempenho destas novas propostas foram realizados com a versão modificada do PCx que resolve os sistemas lineares utilizando uma abordagem híbrida no preconditionamento do método dos gradientes conjugados. 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.

Tabela 1: Tamanho dos problemas testes e tempo de processamento do método dos pontos interiores.

Problema	Tamanho		Tempo				
	Linhas	Colunas	FCC	FCC10	FCC _e	FCC _p	FCC _{β}
25fv47	788	1843	1,87	2,90	2,25	5,63	6,08
bnl2	1964	4008	1,87	3,11	2,45	3,79	3,77
degen3	1501	3604	5,40	4,09	4,88	4,84	3,89
NL	6665	14680	32,99	79,69	27,65	36,96	75,81
stocfor2	1980	2868	1,20	1,41	1,20	0,89	1,47
stocfor3	15362	22228	87,88	78,78	89,08	102,16	80,67
BL	5729	12462	18,04	16,16	17,50	17,16	38,61
els19	4350	13186	43,47	43,83	43,53	46,49	44,92
chr22b	5587	10417	19,76	19,35	18,55	18,38	17,15
chr25a	814	15325	42,48	41,61	42,00	43,41	36,24
scr15	2234	6210	7,76	6,63	7,70	8,37	6,33
scr20	5079	15980	60,98	55,73	59,40	69,78	54,35
rou20	7359	37640	755,41	625,90	845,45	775,43	663,19
ste36a	27683	15980	10022,89	—	6980,06	8781,23	—
cre-a	2989	6692	7,63	5,44	6,81	5,94	4,61
cre-b	5328	36382	43,28	52,84	40,54	46,66	51,98
cre-c	2370	5412	5,74	4,45	5,56	4,02	3,07
cre-d	4094	28601	27,91	33,23	27,40	27,75	32,85
ex05	832	7805	5,85	12,09	5,61	4,81	11,99
ex09	1821	18184	51,01	61,97	45,92	45,14	59,75
ken11	9964	16740	10,17	13,78	9,78	10,51	15,34
ken13	22365	36561	93,64	102,12	88,38	80,20	141,62
ken18	78538	128434	1014,74	1287,95	943,40	1120,57	1096,73
pds-06	9145	28472	8,19	7,37	8,17	17,52	38,98
pds-10	16558	48763	18,48	14,70	17,41	20,40	168,17
pds-20	32276	106180	214,59	213,91	209,32	229,33	928,28
pds-40	34265	214385	395,70	376,30	407,84	591,05	4521,67
pds-60	96503	332862	1076,86	1004,52	1082,16	1750,56	11160,55
pds-80	126109	430800	1509,34	1339,18	1551,40	2339,04	15848,94
pds-100	156243	514577	2573,59	2419,53	2322,75	4049,83	28371,93

Na Tabela 1 são apresentadas as dimensões dos problemas utilizados. Além disso, as novas propostas são chamadas de fatoração modificada 10 (FCC10); fatoração modificada e (FCC e) e fatoração modificada p (FCC p) e a modificação proposta por Silva (2014) é chamada de fatoração modificada β (FCC β). Para avaliar o desempenho da Fatoração Controlada de Cholesky (FCC), a fatoração modificada β (FCC β) e a eficiência de nossas propostas se apresenta o tempo de processamento das cinco abordagens no método primal-dual de pontos interiores.

Os problemas utilizados na Tabela 1 são problemas para os quais falhas no pivô durante a Fatoração Controlada de Cholesky foram detectadas. Estes problemas são extraídos das bibliotecas: NETLIB, QAP e KENNINGTON.

Na Tabela 2, compara-se o total de reinícios em cada interação onde é calculada a Fatoração Controlada de Cholesky e o total de iterações do método de pontos interiores. Na Tabela 1 e 2 o símbolo "–" significa que o problema não foi resolvido. Os símbolos "*" e "***" significam que o número de reinícios em uma e em dois ou mais iterações é maior que 15, respectivamente.

Tabela 2: Número de reinícios e o número total de iterações

Problema	Reinícios				Iterações				
	FCC	FCC10	FCC e	FCC p	FCC	FCC10	FCC e	FCC p	FCC β
25fv47	81	14	81	17	29	34	28	32	47
bnl2	157	30	157	14	37	37	37	37	37
degen3	63	75*	63	14	16	16	16	16	16
NL	284	29	284	22	41	50	42	41	47
stocfor2	101	27*	101	11	21	23	21	21	21
stocfor3	199	25**	199	34	32	32	32	32	32
BL	261	32	261	33	38	39	38	39	38
els19	78	75**	78	29	31	31	31	31	31
chr22b	79	60**	79	17	29	29	29	29	29
chr25a	71	60**	71	15	29	28	28	28	29
scr15	62	75**	62	15	24	24	24	24	24
scr20	74	75**	74	12	21	21	22	21	21
rou20	81	90**	81	18	24	24	24	23	24
ste36a	125*	–	125*	24	37	–	37	37	–
cre-a	183	65**	183	32	27	27	27	27	27
cre-b	288	288	288	24	43	43	43	43	43
cre-c	185	65**	185	25	27	26	26	26	26
cre-d	281	45**	281	24	42	41	41	43	43
ex05	223	90**	223	59	39	39	39	39	65
ex09	319	75**	319	14	45	51	45	44	51
ken11	74	75**	74	22	23	22	22	22	23
ken13	73	36*	73	41	29	29	28	32	29
ken18	103	69*	103	40	41	41	40	39	38
pds-06	216	31	216	35	39	39	39	41	38
pds-10	252	36	252	49	47	47	47	47	47
pds-20	317	48	317	48	60	62	61	62	59
pds-40	88	10	88	18	78	77	78	78	77
pds-60	136	16	136	18	84	83	84	85	84
pds-80	128	16	128	18	83	83	83	83	83
pds-100	144	21	144	40	87	85	85	87	83

De acordo com os resultados obtidos pela FCC10, pode-se observar que a nova estratégia para o cálculo do parâmetro de correção $\sigma_i = 5 \cdot 10^{-i-1}$ melhora o desempenho da Fatoração Controlada de Cholesky no condicionamento de sistemas lineares originados no método de pontos interiores. Observa-se que o tempo do processamento foi reduzido. No entanto, quando foi usado este condicionador, depois da mudança de fase, o condicionador Separador não pôde resolver o problema ste36a.

Por outro lado, as abordagens FCCe e FCCp resolveram todos os problemas. Nos problemas pds não existe mudança de fase quando foram usados o FCC, FCC10, FCCe e FCCp. O tempo de processamento das novas propostas ficaram próximas do tempo da FCC. Enquanto o desempenho da FCC β foi discrepante em relação a estes problemas, pois existiu a mudança de fase o que implica que o condicionador Separador incrementou o tempo computacional.

Observa-se que as novas estratégias para o cálculo do parâmetro de correção melhoram o desempenho da Fatoração Controlada de Cholesky, pois o tempo de processamento foi reduzido em comparação com o condicionador FCC original. Além disso, o número de reinícios para o cálculo do condicionador FCC10 e FCCp em cada iteração é menor do que o FCC.

5. Conclusões

As modificações propostas mostraram que o número de iterações é mantido na maioria dos problemas. No entanto, foi possível diminuir o tempo de resolução nestes problemas, pois o número de reinícios na Fatoração Controlada de Cholesky foi reduzido como mostra a Tabela 2 apresentada na seção 4.

A modificação FCC10 é muito eficiente em problemas pequenos. No entanto, as modificações FCCe e FCCp são robustas, pois foi possível resolver problemas como o ste36a.

Embora os reinícios na fatoração foram feitos nas novas propostas, o tempo para resolver o problemas é menor do que o tempo utilizando a modificação FCC β , a qual não realiza reinícios. Novas formas de calcular a atualização desta modificação para evitar reinícios na Fatoração Controlada de Cholesky serão investigadas.

Agradecimento

Este trabalho contou com o apoio financeiro da FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo e pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Referências

- Bocanegra S, Campos F. F. Oliveira A. R. L.**(2007). 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,*Special issue on Linear Algebra Issues arising in Interior Point Methods*, (1-2), 149-164.
- Campos, F. F. e Birket, 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.
- Jones M.T. e Plassmann P.E.**(1995), An improved incomplete cholesky factorization, *ACM Transactions on Mathematical Software*,**34**(150), 473-497.
- Meijerink J. A.**(1980), An incomplete factorization technique for positive definite linear systems, *Mathematics of Computation*,**34**(150), 473-497.
- 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.

Velazco M.I., Oliveira R.L. e Campos F.F.(2010), A note on hybrid preconditioners for large-scale normal equations arising from interior-point methods. *Optimization Methods & Software*, **25**(2), 321-332.

Wright, S.J., Primal-Dual Interior-Point Methods, *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 1997.

