Impacto da ordenação de matrizes por *nested dissection* nos métodos de pontos interiores

Wellington Barbosa Rodrigues, Marta Ines Velazco Fontova

Mestrado em Ciência da Computação – Faculdade Campo Limpo Paulista [FACCAMP]
Rua Guatemala, 167 - Campo Limpo Paulista – SP – 13231-230 – Brasil

wellbar2@yahoo.com.br, marta.velazco@gmail.com

Abstract. *Interior point methods are efficient for solving linear programming problems. The calculation search directions requires the solution of one or more linear systems. This is the most computationally expensive step; the systems involve sparse and poorly conditioned matrices. To solve the systems, direct methods using the Cholesky decomposition or iterative methods using conjugate gradient may be used. Results show that the system matrix reordering brings advantages in the solution calculation of direct methods. This project will investigate the impact of the nested dissection ordination on linear systems solution from interior point method, using the conjugate gradient method.*

Resumo. *Os métodos de pontos interiores são eficientes na solução de problemas de programação linear de grande porte. O cálculo das direções de busca requer a solução de um ou mais sistemas lineares. Este é o passo mais caro computacionalmente; os sistemas envolvem matrizes esparsas e mal condicionadas. Para solução dos sistemas podem ser utilizados métodos diretos por fatoração de Cholesky ou métodos iterativos por meio do método do gradiente conjugado. Resultados mostram que a reordenação da matriz do sistema traz vantagens no cálculo da solução por métodos diretos. Este projeto investigará o impacto da ordenação* nested dissection *na solução de sistemas lineares oriundos de métodos de pontos interiores, através do método do gradiente conjugado.*

1. Introdução

Por muitos anos o método simplex foi o mais eficiente para solução de problemas de programação linear. Este método se movimenta pelos pontos extremos do politopo, definido pelas restrições do problema, até uma solução ótima. No pior caso, ele percorre todos os pontos extremos o que caracteriza um método de ordem não polinomial (Vanderbei, 2001).

Karmarkar (Karmarkar, 1984) propôs o primeiro método de pontos interiores de ordem polinomial. Esse método, como o próprio nome diz, trabalha exclusivamente nos pontos interiores da região factível do problema. O passo de maior custo computacional é a resolução de um ou mais sistemas lineares a cada iteração no cálculo das direções de busca (Vanderbei, 2001). Por meio da escolha de métodos eficientes para resolução dos sistemas lineares e da preparação das matrizes, tanto o tempo de solução quanto o consumo de requisitos computacionais podem ser reduzidos.

O uso de métodos de reordenação das matrizes envolvidas no processo da resolução dos sistemas lineares tem apresentado bons resultados em métodos diretos. Alguns dos métodos de reordenação mais utilizados são: mínimo grau (George & Liu, 1994), Cuthill-McKee (Carvalho *et al*., 2009) e *Nested Dissection* (George & Liu, 1994).

Para a solução de sistemas lineares oriundos de métodos de pontos interiores por métodos diretos é utilizada a fatoração de Cholesky. Este método, em problemas esparsos cria fatores com maior quantidade de elementos não nulos da matriz. Nesses casos, a reordenação da matriz do sistema proporciona menor preenchimento (George & Liu, 1994).

Em (Carmo, 2005) foi feito um estudo do impacto dos métodos de ordenação na solução de sistemas lineares pelo método do gradiente conjugado precondicionado, utilizando um precondicionador por fatoração controlada de Cholesky. Os resultados mostraram que o método de mínimo grau foi o método de ordenação com melhores resultados após a fatoração controlada de Cholesky; a matriz teve o menor preenchimento causando redução nas iterações do gradiente conjugado.

Este trabalho está organizado em seções. Na Seção 2 são apresentados os métodos de pontos interiores. A Seção 3 descreve os sistemas lineares oriundos de método de pontos interiores. Dois métodos de ordenação para matrizes esparsas serão mostrados na Seção 4. A Seção 5 descreve uma proposta de testes a serem realizados para comparativo entre os métodos de ordenação. Por fim, a Seção 6 apresenta as considerações finais e estudos futuros.

2. Métodos de pontos interiores

Um problema de otimização linear pode ser representado na forma padrão do primal:

$$\begin{array}{ll} min & c^T.x \\ sujeito\ a & A.x = b \\ & x \geq 0 \end{array}$$

Sendo $\boldsymbol{A} \in \mathfrak{R}^{\mathbf{mxn}}$ a matriz de restrições de $\boldsymbol{m}$ linhas e $\boldsymbol{n}$ colunas, $\boldsymbol{c} \in \mathfrak{R}^{\mathbf{n}}$ o vetor de coeficiente da função objetivo, $\boldsymbol{b} \in \mathfrak{R}^{\mathbf{m}}$ o vetor das restrições e $\boldsymbol{x} \in \mathfrak{R}^{\mathbf{n}}$ é o vetor de variáveis a serem determinas (Vanderbei, 2001).

A partir do problema primal, define-se o problema dual:

$$\begin{array}{ll} max & b^T.y \\ sujeito\ a & A^T.y + z = c \\ & z \geq 0 \end{array}$$

Onde $\boldsymbol{y} \in \mathfrak{R}^{m}$ é o vetor de variáveis duais livres e $\boldsymbol{z} \in \mathfrak{R}^{\mathbf{n}}$ é o vetor de variáveis de folga (Vanderbei, 2001).

O método preditor-corretor calcula duas direções a cada iteração para as variáveis primais e duais [***x***,***y***,***z***]. As direções são obtidas aplicando o método de Newton no sistema não linear formado pelas condições de otimalidade descritas em (1).

$$\begin{pmatrix} Ax - b \\ A^T y + z - c \\ XZe \end{pmatrix} = 0; \qquad [x, z] \geq 0 \tag{1}$$

Definindo os resíduos [$\boldsymbol{r_p}$, $\boldsymbol{r_d}$, $\boldsymbol{r_a}$] como $\boldsymbol{r_p} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}$, $\boldsymbol{r_d} = \boldsymbol{c} - \boldsymbol{A^T y} - \boldsymbol{z}$ **e** $\boldsymbol{r_a} = -\boldsymbol{XZe}$, uma solução ótima será obtida quando os mesmos forem nulos.

3. Solução de sistemas lineares

No cálculo das direções de busca nos métodos de pontos interiores, o sistema linear obtido ao aplicar o método de Newton em (1) é reduzido por substituição em um sistema de equações normais como segue:

$$(ADA^t)dy = r_p + A(Dr_d - Z^{-1}r_a) \tag{2}$$

Para a solução de tal sistema são utilizados métodos diretos ou métodos iterativos. Como a matriz ADA^t é simétrica e definida positiva a fatoração de Cholesky (Golub & Loan, 2013) é a abordagem direta utilizada. Porém, em problemas de grande porte com matrizes de restrições muito esparsas temos aumento no preenchimento do fator gerando um maior custo computacional (George & Liu, 1994).

Outra forma de solucionar este sistema é por métodos iterativos. Pelas características da matriz, o método mais utilizado é o método do gradiente conjugado. Porém, este método pode ter problemas de convergência pelo mal condicionamento da matriz do sistema (2) (Golub & Loan, 2013), fazendo necessário o uso de precondicionadores.

Os métodos de reordenação também buscam reduzir o efeito de preenchimento, chamados *fill-in*, durante o processo de fatoração das matrizes esparsas. Isto traz vantagens na solução dos sistemas por meio da fatoração de Cholesky (George & Liu, 1994) assim como na solução pelo gradiente conjugado precondicionado com precondicionadores que usam fatoração incompleta (Carmo, 2005).

4. Métodos de ordenação

Rothberg em (Rothberg & Hendrickson, 1998) mostra que o método *nested dissection* apresenta melhores ordenações que os métodos comumente utilizados, como mínimo grau, para a ordenação das matrizes específicas de métodos de pontos interiores. Os resultados são apresentados utilizando a fatoração de Cholesky para a solução dos sistemas. Este trabalho investigará o impacto do método *nested dissection* na solução dos sistemas lineares, mas utilizando métodos iterativos. A seguir serão descritos os dois métodos de ordenação que serão utilizados.

4.1. Método de Mínimo grau

Na ordenação pelo método de mínimo grau, a matriz simétrica ADA^t é representada em um grafo. O primeiro vértice na reordenação será o de menor grau. Este vértice é eliminando, assim como todas as arestas incidentes. O que em sua representação através de matriz, indica que a linha de maior esparsidade foi permutada com a primeira linha (George & Liu, 1994). Seguidamente, o grafo é atualizado criando novas arestas entre cada par de vértices adjacentes ao vértice eliminado. Esse processo é repetido até termos apenas um vértice, que será o último vértice na ordenação, com isso mantendo as linhas mais densas da matriz nas últimas posições. Este método tem como vantagem o baixo custo computacional para a tomada de decisão sobre qual será o próximo vértice a ser escolhido na ordenação.

4.2. Método *Nested Dissection*

O *nested dissection* leva vantagem em relação ao mínimo grau devido à velocidade de execução e menor consumo de recursos para armazenamento (George & Liu, 1994). Neste método, a matriz $\boldsymbol{A}$ é representada como um grafo $\boldsymbol{G^A}$. Primeiro, procura-se um conjunto de vértices $\boldsymbol{S}$ que separa o grafo em dois subgrafos $\boldsymbol{C}^1$ e $\boldsymbol{C}^2$, chamados de vértices separadores (George & Liu, 1994). Em seguida, os vértices de $\boldsymbol{C}^1$, $\boldsymbol{C}^2$ são reordenados e, por último, os vértices $\boldsymbol{S}$. Esse processo é aplicado recursivamente em $\boldsymbol{C}^1$ e $\boldsymbol{C}^2$. Na matriz, significa mover as linhas/colunas que representem os vértices $\boldsymbol{S}$ para o fim e as linhas/colunas que representem os vértices $\boldsymbol{C}^1$ e $\boldsymbol{C}^2$ para o começo da matriz. A maior dificuldade desse método de ordenação é encontrar os nós separadores para fazer a bisseção do grafo.

5. Testes numéricos

O estudo comparativo dos métodos de ordenação será realizado por meio de testes numéricos utilizando problemas das bibliotecas de domínio público: NETLIB (Mittelmann), QAP (Burkard *et al*., 1991). Para isto, os métodos de ordenação serão introduzidos no código PCX-Modificado (Bocanegra *et al*., 2007) (Velazco *et al*., 2010).

O código PCx é implementado nas linguagens C e Fortram (Mehrotra *et al*., 1999). Neste código, problemas de programação linear são resolvidos utilizando o método preditor-corretor com múltiplas correções; os sistemas envolvidos são resolvidos por fatoração de Cholesky e é utilizada a ordenação por mínimo grau. No PCx-modificado, as múltiplas correções e o método de ordenação são desligados e os sistemas são resolvidos utilizando uma abordagem iterativa pelo método do gradiente conjugado precondicionado. O precondicionador utilizado é o precondicionador híbrido (Bocanegra *et al*., 2007).

Os testes serão realizados em um processador Intel core I3 com 4Gb de memória com sistema operacional Linux.

6. Considerações finais e trabalhos futuros

O aumento do tamanho dos problemas de programação linear gera maior consumo de recursos computacionais e tempo de resolução. Através da escolha dos métodos mais eficientes para resolução dos sistemas lineares e preparação das matrizes, por exemplo com métodos de reordenação, podemos reduzir o número de operações.

Com isso se torna necessário para o estudo comparativo dos diversos métodos de ordenação utilizados durante o processo de resolução de sistemas lineares. Devido essa necessidade, os próximos passos desse estudo buscam verificar o impacto da ordenação de matrizes por *nested dissection* nos métodos de pontos interiores utilizando métodos iterativos para solução dos sistemas lineares.

Referências

Bocanegra, S., Campos, F. F. & Oliveira, A. R. L., 2007. Using a hybrid preconditioner for solving large-scale linear systems arising from interior pont methods. *Computional Optimization and Applications*, pp. 149-164.

Burkard, R. S., Karisch, S. & Rendl, F., 1991. QAPLIB - a quadratic assignment problem. *European Journal of Operations Research,* pp. 115-119.

Carmo, F. C. d., 2005. Análise da Influência de Algoritmos de Reordenação de Matrizes Esparsas no Desempenho do Método CCCG(η). *Dissertação de Mestrado,* Agosto.

Carvalho, M. A. M. d., Junqueira, N. M. P. & Soma, N. Y., 2009. Uma heuristica para o problema de minimização de largura de banda em matrizes. *XLI Simpósio Brasileiro de pesquisa Operacional*.

George, A. & Liu, J., 1994. *Compute Solution of Sparse Linear Systems.* s.l.:s.n.

Golub, G. H. & Loan, C. F. V., 2013. *Matrix Computation.* Baltimore: The Johns Hopkins University Press.

Karmarkar, N., 1984. A new polynomial-time algorithm for linear programming. *Symposium on Theory of Computing*, 09 Novembro.

Mehrotra, S., Czyzyk, J., Wagner, M. & Wright, S. J., 1999. PCx: an interior-point code for linear programming. *Opt. Methods & Soft*, pp. 397-430.

Mittelmann, H. D., s.d. *Miscellaneous LP models collect by Hans D. Mittelmann.* [Online] Available at: http://plato.asu.edu/ftp/lptestset/pds/

Oliveira, A. R. L. d. & 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*, pp. 1-24.

Rothberg, E. & Hendrickson, B., 1998. Sparse Matrix Ordering Methods for Interior Point Linear Programming. *INFORMS Journal of Computing*, pp. 107-113.

Vanderbei, R. J., 2001. *Linear Programming: Foundations and Extensions.* Princeton: Princeton University.

Velazco, M. I., Campos, F. F. & Oliveira, A. R. L. d., 2010. A note on hybrid preconditioner for large-scale normal equations arising from interior-point methods. *Optimization Methods & Software*, pp. 321—332.