Санкт-Петербургский
Государственный
Политехнический
Университет

Исследование эффективности применения методов внутренней точки для решения специального класса контактных задач

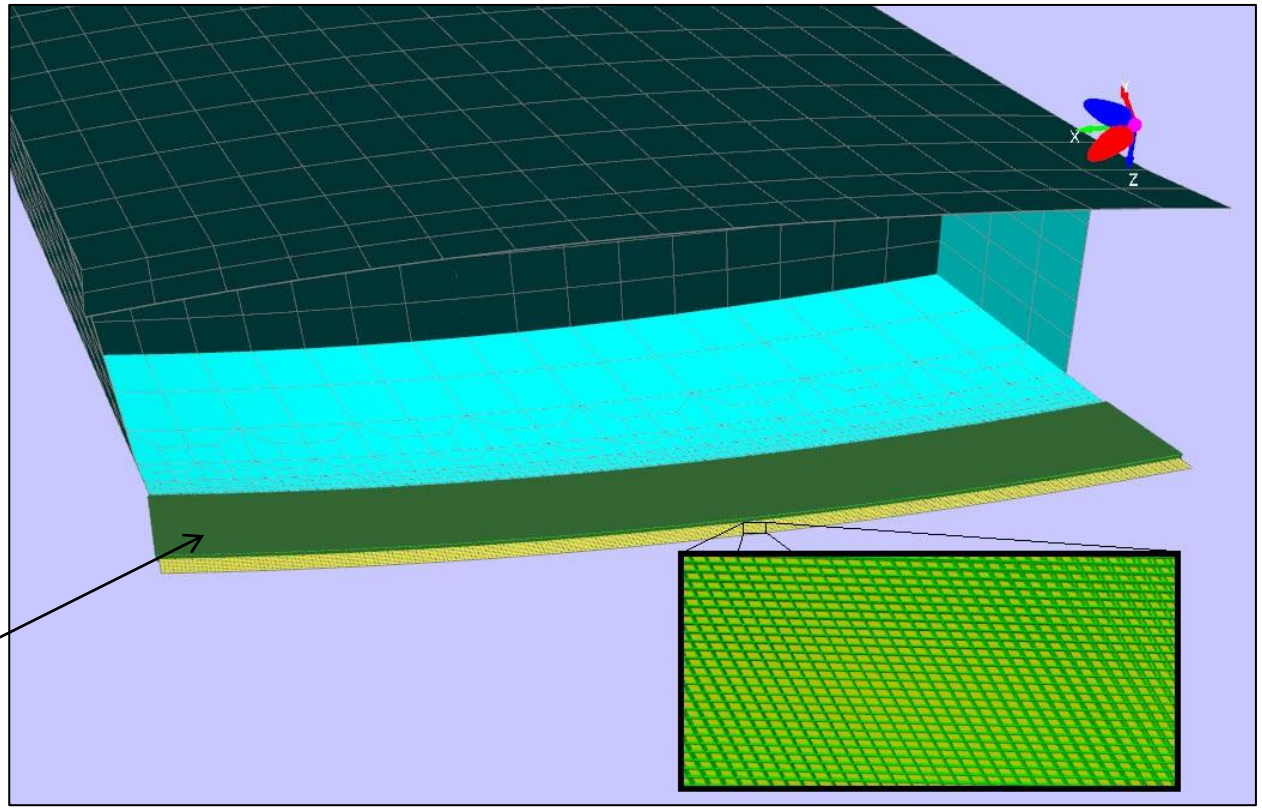
Выполнил: студент группы 63601/1 Якунин С.А.

Научный руководитель: Петухова М.В.

Актуальность задачи

Программный комплекс для моделирования соединения деталей с помощью клепки:

- Ключевой этап - решение задачи квадратичного программирования;
- Точность расчетов зависит от сгущенности сетки в возможной зоне контакта.



конечно-элементная модель соединения

Цели и задачи

Цель: исследование применимости нового подхода к решению возникающей оптимизационной задачи, основанного на методе внутренней точки, для разработки нового решателя, предназначенного для задач большой размерности.

Задачи:

- Провести обзор различных методов внутренней точки;
- Реализовать версию метода внутренней точки, наиболее подходящую для решения поставленной задачи;
- Модифицировать алгоритм, используя специфику задачи;
- Провести сравнение разработанного алгоритма с используемым и сделать выводы об эффективности.

Постановка задачи квадратичного программирования

Контактная задача сводится к задаче квадратичного программирования [1]:

$$\frac{1}{2}x^T Kx + f^T x \to \min, \qquad (1)$$
$$A^T x + g \geq 0.$$

- $x \in R^n$ - вектор перемещений;
- K - редуцированная матрица жесткости;
- f - вектор внешних сил;
- $A = (a_1 \quad a_2 \quad \cdots \quad a_n)$ - матрица ограничений;
- $g \in R^m$ - вектор начального зазора.

[1] Petukhova M., Lupuleac S., Shinder Y., Smirnov A., Yakunin S., Bretagnol B. Numerical approach for airframe assembly simulation // Journal of Mathematics in Industry 2014, 4:8 (3 June 2014).

Двойственная задача

Двойственная задача также является задачей квадратичного программирования:

$$-\frac{1}{2}\lambda^T Q\lambda - p^T\lambda + c \to \min,$$
$$\lambda \geq 0. \qquad (2)$$

- $\lambda \in R^m$ – вектор множителей Лагранжа;
- $Q = A^T K^{-1} A$;
- $p = g - A^T K^{-1} f$;
- $c = \frac{1}{2} f^T K^{-1} f$ – константа.

Матрица ограничений двойственной задачи всегда единичная.

Необходимые и достаточные условия оптимальности

Теорема (Каруш, Кун, Таккер). Точка $x \in R^n$ является точкой оптимума задачи (1) тогда и только тогда, когда существует вектор $\lambda \in R^m$ такой, что выполнены четыре условия:

- Условие стационарности

$$Kx + f = A\lambda;$$

- Условие допустимости прямой переменной

$$A^T x + g = y \geq 0;$$

- Условие неотрицательности двойственной переменной

$$\lambda \geq 0;$$

- Условие дополнительности

$$y_i \cdot \lambda_i = 0, \ \forall i \in \overline{1, m}.$$

Реализованный подход к решению

Методы активного набора	
Алгоритм Гольдфарба-Иднани с модификацией Пауэлла [2][3]	
Преимущества	Недостатки
• Сходится за конечное число шагов; • Может использовать решение предыдущих задач как начальное приближение.	• Время работы зависит от размера зоны контакта; • Требуется большой объем памяти для промежуточных вычислений.

[2] D. Goldfarb, A. Idnani. A numeriacally stable dual method for solving strictly convex quadratic programs. Mathematical Programming 27 (1983) p 1-33.
[3] M. J. D. Powell. On the quadratic programming algorithm of Goldfarb and Idnani. Mahematical Programming Study 25 (1985) p 46-61.

Методы внутренней точки

Метод Кармаркара [4]	
Барьерные методы	Замена задачи (1) последовательностью задач безусловной оптимизации: $$F_\mu(x) = \frac{1}{2}x^T Kx + f^T x - \mu \sum_{i=1}^{m} \ln(a_i^T x + g_i).$$
Прямо-двойственные методы внутренней точки [5]	Решение последовательности систем: $$S(x, y, \lambda) = \begin{pmatrix} Kx + f - A\lambda \\ A^T x + g - y \\ \Lambda \mathrm{Y} e - \mu e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$ $$\lambda \geq 0, y \geq 0.$$

[4] N. K. Karmarkar. A new polymomial-time algorithm for linear programming. Combinatorica, 4 (1984), pp. 373-395
[5] S. J. Wright. Primal-Dual Interior-Point Methods, SIAM, Philadelphia, PA, 1997.

Прямо-двойственный метод внутренней точки

Итерация прямо-двойственного метода

1. Определение направления

$$\nabla\begin{pmatrix} Kx+f-A\lambda \\ A^T x+g-y \\ \Lambda Ye-\mu e \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\lambda \end{pmatrix}=-S(x,\lambda,y) \Rightarrow \begin{pmatrix} K & 0 & -A \\ A^T & -I & 0 \\ 0 & \Lambda & Y \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\lambda \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -Kx-f+A\lambda \\ -A^T x-g+y \\ \sigma\mu e-\Lambda Ye \end{pmatrix}$$

$\sigma \in [0;1]$ – параметр центрирования

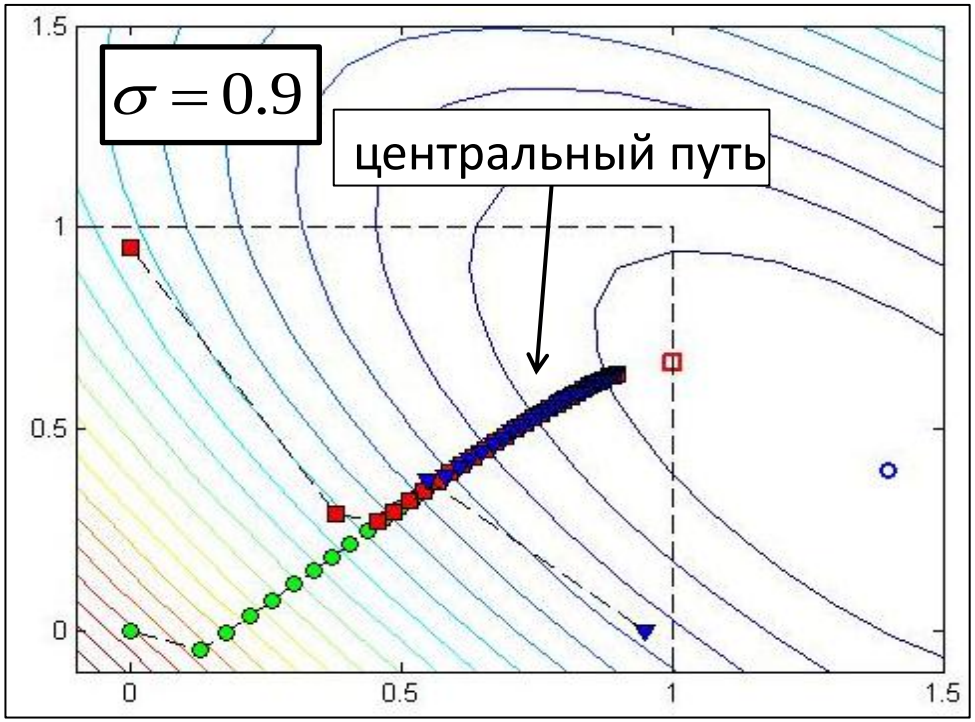
2. Определение длины шага $\alpha:\ y+\alpha\Delta y \geq 0, \quad \lambda+\alpha\Delta\lambda \geq 0$

3. Обновление значений переменных $\begin{pmatrix} x \\ y \\ \lambda \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} x \\ y \\ \lambda \end{pmatrix}+\alpha\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\lambda \end{pmatrix}$

4. Обновление интервала двойственности $\mu \leftarrow \dfrac{\lambda^T y}{m}$

Прямо-двойственный метод отслеживания пути

- ***Центральный путь*** – множество всех решений задачи (3) для различных значений интервала двойственности μ .
- Точка (x, y, λ) называется ***допустимой***, если для нее выполнены условия: $Kx + f - A\lambda = 0,\ A^T x + g - y = 0,\ y \geq 0,\ \lambda \geq 0.$



Методу отслеживания пути требуется

$$O\left(\sqrt{n}\right)$$

итераций, для получения каждой новой цифры решения [6].

[6] Jacec Gondzio. Interior Point Methods 25 Years Later. European Journal of Operation Research (2012), pp 587-601.

Схема предиктор-корректор

Двухшаговая схема предиктор-корректор уменьшает количество итераций, сохраняя условие сходимости.

1. Выбрать $x:\ y = A^T x + g \geq 0,\quad \lambda \geq 0$ и ε_μ
2. **ПОКА** $\mu = \lambda^T y / m \geq \varepsilon_\mu$
3. **Итерация прямо-двойственного метода ($\sigma = 0.0$)**
4. **Итерация прямо-двойственного метода ($\sigma = 1.0$)**
5. **ПОВТОРИТЬ**
6. **ВЕРНУТЬ** x

Шаг предиктора обеспечивает близость к точке оптимума

Шаг корректора обеспечивает близость к центральному пути

Наиболее эффективной является схема Меротры [7] с адаптивным выбором параметра центрирования на втором шаге.

[7] S. Mehrorta. On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Method // SIAM J. Optimization, Vol. 2, No. 4, pp 575-601, November 1992.

Решение СЛАУ

Наиболее трудоемким этапом является решение СЛАУ для определения направления шага метода Ньютона:

$$\begin{pmatrix} K & 0 & -A \\ A^T & -I & 0 \\ 0 & \Lambda & Y \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Kx - f + A\lambda \\ -A^T x - g + y \\ \sigma\mu e - \Lambda Y e \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} H & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ A^T\Delta x - f_2 \\ Y^{-1}(f_3 - \Lambda\Delta y) \end{pmatrix}$$

$$H = K + AY^{-1}\Lambda A^T$$

Прямой метод	Итерационный метод
$O(n^3)$	$O(kn^2)$

Применяется ***метод сопряженных градиентов***.

Решение СЛАУ

1. Пусть $A = I$

$$H = K + Y^{-1}\Lambda = K + \underline{D}$$

плохо обусловлена

$$H\Delta x = f_1 \to \tilde{H}\Delta\tilde{x} = \tilde{f}_1,$$

где $\tilde{H} = V^{-T} H V^{-1}, \Delta\tilde{x} = V\Delta x, \tilde{f}_1 = V^{-T} f_1$

- Разложение Холецкого для $K = U^T U$:

$V = U$ – верхняя треугольная матрица;

- Учет информации о диагонали:

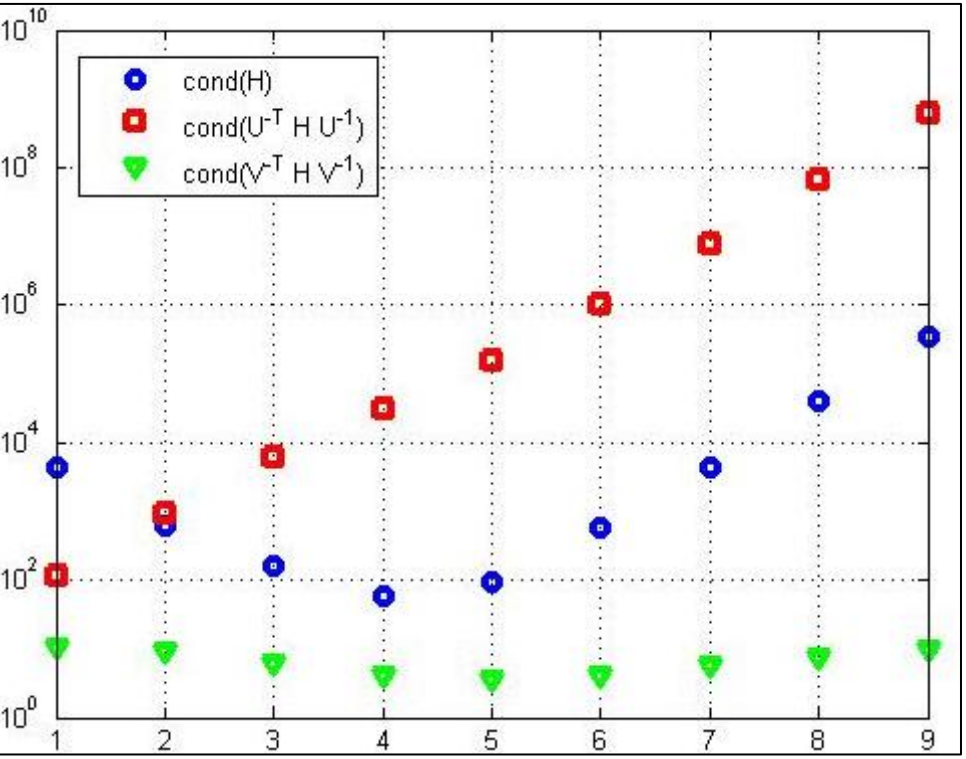
$$\boxed{V = U + \sqrt{D}.}$$

2. Если $A \neq I$, то переходим к двойственной задаче и применяем ту же технику.

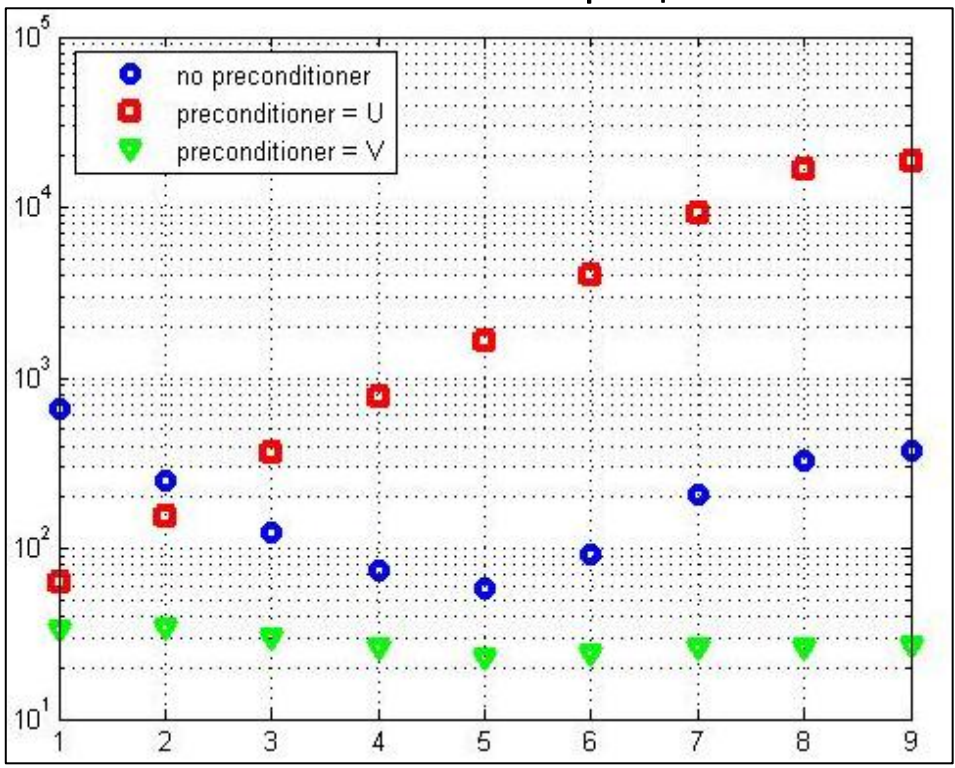
Решение СЛАУ

Рассмотрим эффективность предобуславливателей на задаче размерности 1473.

Число обусловленности



Количество итераций



итерации прямо-двойственного метода

Выбор начального приближения

Начальное приближение выбирается исходя из физических соображений.

Прямая задача	**Двойственная задача**
Как правило: $f \geq 0, g > 0.$ $\begin{pmatrix} x_0 = 0 \\ y_0 = g \\ \lambda_0 = f \end{pmatrix}$ – допустимая точка.	Выберем $\tilde{f}$ так, чтобы $A^T(f + \tilde{f})$ было строго положительным $\lambda_0 = A^T(f + \tilde{f}),$ $\nu_0 = g - A^T K^{-1} \tilde{f}.$

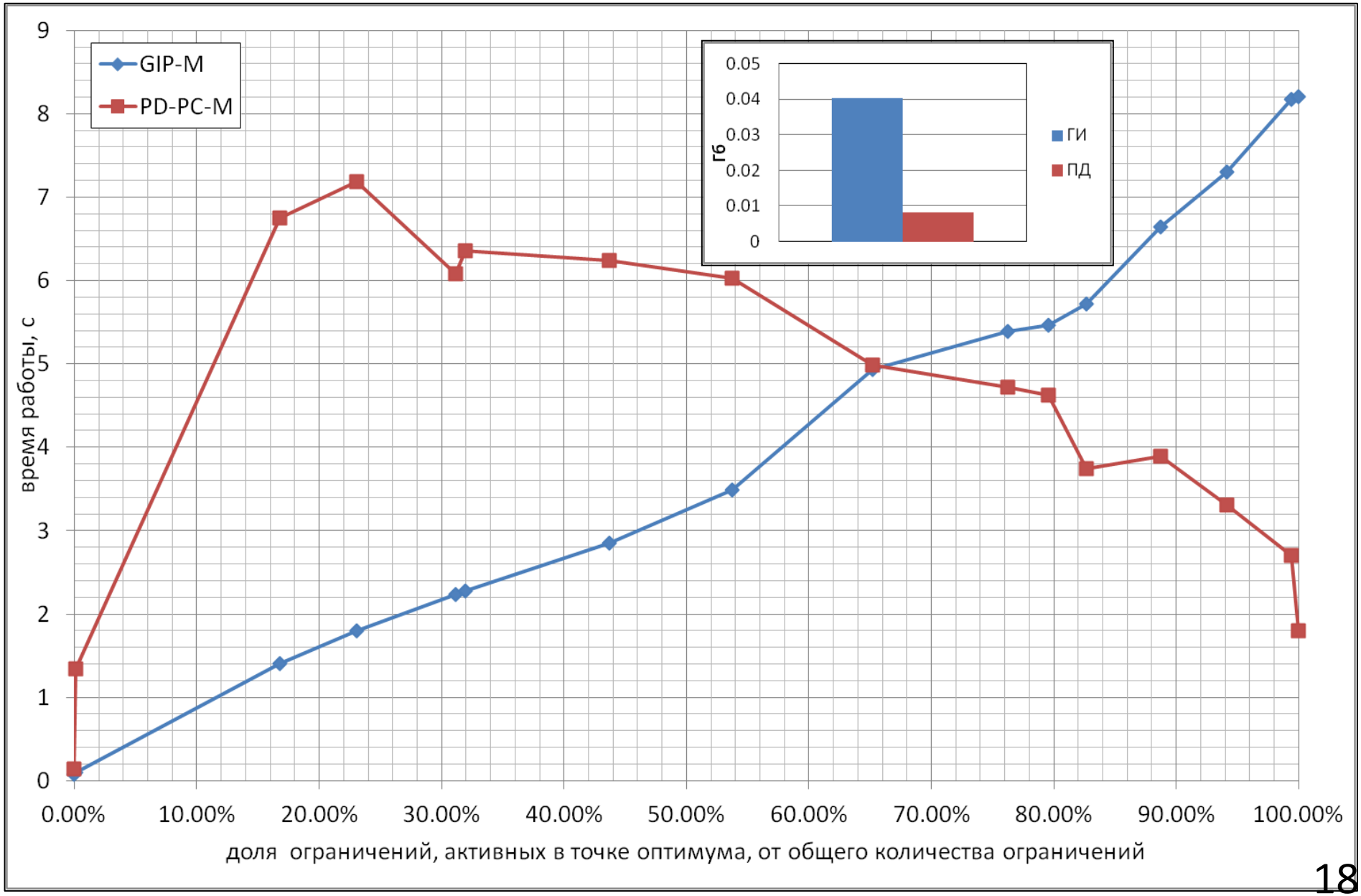
Сравнение алгоритмов

	Алгоритм Гольдфарба-Иднани	**Прямо-двойственный метод**
Время предобработки данных	$O(n^3)$ разложение Холецкого и обращение	$O(n^3)$ разложение Холецкого
Время работы	$O\left(n_{act} n^2\right)$ $0 \le n_{act} \le m$	$O\left(n^{2.5}\right)$
Требуемая память	$O(n^2)$	$O(n)$

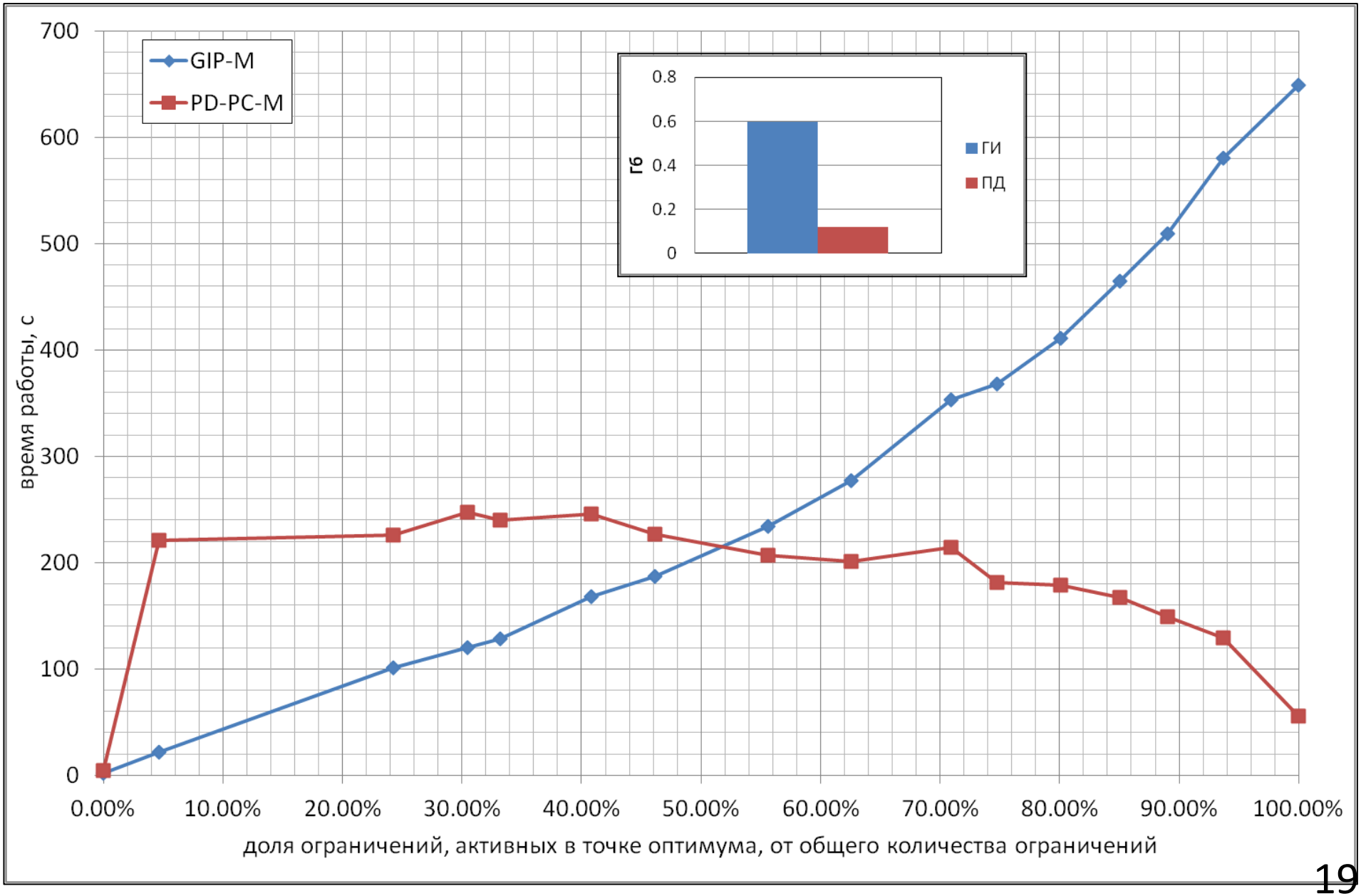
Тестовые задачи

№	Матрица	Размерность	Количество ограничений
1	K_{1473}	1473x1473	1473
2	K_{5654}	5654x5654	5654
3	K_{8481}	8481x8481	8481

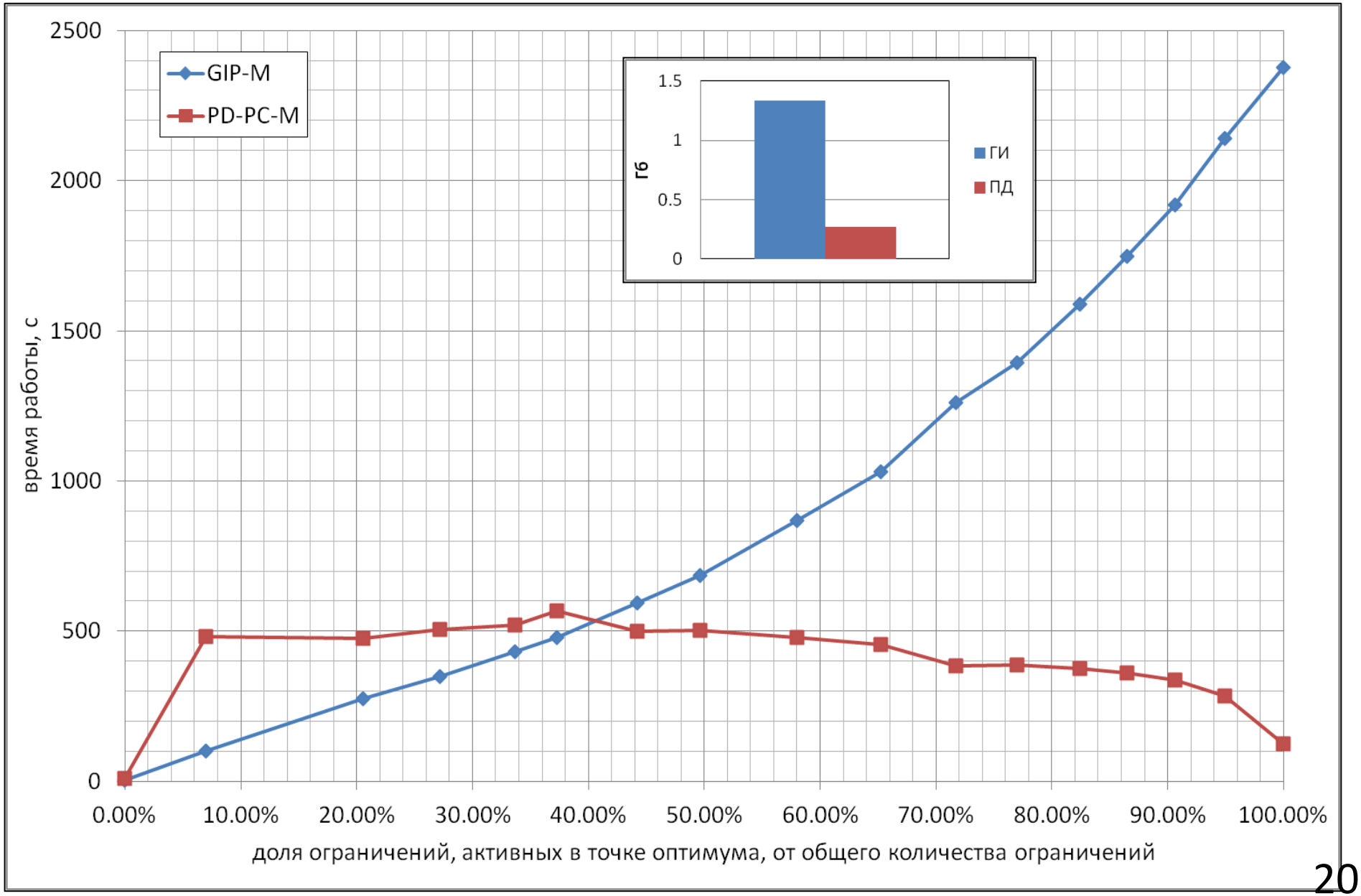
Время работы алгоритмов для матрицы K_{1473}



Время работы алгоритмов для матрицы K_{5654}



Время работы алгоритмов для матрицы K_{8481}



Выводы

В работе исследована эффективность применения метода внутренней точки для решения специального класса контактных задач:

- Проведен обзор различных версий метода внутренней точки;
- Реализован алгоритм на основе прямо-двойственного метода внутренней точки, использующий схему предиктор-корректор;
- Построен предобуславливатель, позволяющий быстро решать систему уравнений на шаге для данного типа задач;
- Проведён анализ производительности алгоритмов активного набора и внутренней точки на тестовых задачах.

Проведенные исследования позволили построить решатель, основанный на прямо-двойственном методе внутренней точки, который:

- На задачах большой размерности работает в несколько раз быстрее используемого ранее;
- Требует незначительных затрат оперативной памяти;
- Время его работы практически не зависит от размера зоны контакта.

Спасибо за внимание!

Список литературы

1. Petukhova M., Lupuleac S., Shinder Y., Smirnov A., Yakunin S., Bretagnol B. Numerical approach for airframe assembly simulation // Journal of Mathematics in Industry 2014, 4:8 (3 June 2014).
2. D. Goldfarb, A. Idnani. A numeriacally stable dual method for solving strictly convex quadratic programs. Mathematical Programming 27 (1983) p 1-33.
3. M. J. D. Powell. On the quadratic programming algorithm of Goldfarb and Idnani. Mahematical Programming Study 25 (1985) p 46-61.
4. N. K. Karmarkar. A new polymomial-time algorithm for linear programming. Combinatorica, 4 (1984), pp. 373-395
5. S. J. Wright. Primal-Dual Interior-Point Methods, SIAM, Philadelphia, PA, 1997.
6. Jacec Gondzio. Interior Point Methods 25 Years Later. European Journal of Operation Research (2012), pp 587-601.
7. S. Mehrorta. On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Method // SIAM J. Optimization, Vol. 2, No. 4, pp 575-601, November 1992.