Akademie věd České republiky

AUTOREFERÁT DOKTORSKÉ DISERTAČNÍ PRÁCE

v oboru Matematická analýza a příbuzné obory

Efektivní algoritmy kvadratického programování a výpočetní mechaniky

Ostrava, říjen 2003

Zdeněk DOSTÁL

Úvod

Předložený soubor vznikl při rozpracovávání algoritmů vhodných pro efektivní řešení practických problémů. Práce v něm obsažené vznikaly od poloviny osmdesátých let v rámci výzkumu, který jsem tehdy vedl v Hornickém ústavu ČSAV v Ostravě s cílem rozpracovat efektivní algoritmy pro řešení rozsáhlých prostorových úlohy geomechaniky. Pozdější práce byly motivovány také snahou rozpracovat algoritmy, které by dokázaly využít možností moderních paralelních počítačů a které by byly použitelné pro řešení dalších praktických úloh, zejména kontaktních úloh a úloh kontaktní tvarové optimalizace. Později se stal hlavním cílem vývoj kvalitativně nových škálovatelných algoritmů pro řešení variačních nerovnic.

Do souboru bylo zařazeno 18 prací, z nichž 14 vyšlo v recenzovaných časopisech, 3 jsou v tisku v recenzovaných časopisech, a jedna vyšla v recenzovaném sborníku v nakladatelstní Birkhäuser. Veškeré práce v souboru, pokud jsem je nenapsal sám, vycházejí z mé samostatné práce, dal jsem k jejich napsání rozhodující podnět a napsal jsem je z větší části, což je vyjádřeno tím, že jsem uveden jako první autor. Vyjímku tvoří aplikační paráce s J. Kruisem a K. Matoušem, kde svůj podíl specifikuji dále v textu. Můj podíl na práci lze vysledovat i ze seznamů literatury v těchto článcích.

Předložené práce jsou tématicky členěny do pěti částí. V první části je jediná práce věnovaná využití předpodmínění projektorem pro řešení rozsáhlých soustav lineárních rovnic. Při psaní první práce jsem se snažil najít jednoduché zdůvodnění relativní úspěšnosti "kaskádového" iteračního algoritmu s počáteční redukcí rezidua pomocí agregací, který jsme od počátku osmdesátých let používali v Hornickém ústavu. Do souboru je práce zařazena pro její překvapivou úlohu, kterou měla při vývoji FETI algoritmu.

Ve druhé části je pět prací věnovaných kvadratickému programování s omezením ve tvaru jednoduchých nerovností, rovností a kombinace jednoduchých nerovností a rovností. Zabývají se jednak efektivní implementací metody aktivních množin, zejména využití projektorů s efektivním určením přesnosti řešení pomocných problémů při řešení úloh s jednoduchými nerovnostmi, jednak přesností řešení vnitřní smyčky u metody rozšířených Lagrangiánů a dalšími detaily implementace této metody, jako je efektivností využívání větších penalizačních parametrů. Práce jsou založeny na drobných pozorováních a aplikacích spektrální teorie symetrických matic. Přestože se jedná vesměs o modifikaci dobře známých algoritmů, znamenají tyto modifikace často jejich mnohonásobné zrychlení a kvalitativní zlepšení. Prezentovaná teorie je současně efektivním vodítkem k praktické implementaci algoritmů.

Aplikace na řešení kontaktních úloh bez tření jsou popsány v pracích tvořících třetí část předloženého souboru. Tyto práce jsou založeny, s vyjímkou první práce, na duální (reciproké) formulaci kontaktních úloh. I když základní teoretické výsledky týkající se zejména aproximace kontaktních úloh v reciproké formulaci jsou u nás dobře známé [35], v předložených pracech se ukazuje, že duální formulaci lze využít i pro vývoj efektivních algoritmů s kvalitativně novými konvergenčními vlastnostmi. Duální formulace totiž vede na úlohy kvadratického programování studované ve druhé části souboru s maticí duálního Schurova komplementu, o němž je známo, že má příznivě rozložené spektrum. Plný význam tohoto přístupu však vynikne teprve v kontextu metod rozložení oblasti založených na dualitě, známých v inženýrské veřejnosti jako FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting) metody, které patří mezi nejúspěšnější paralelní algoritmy pro řešení parciálních diferenciálních rovnic.

Výsledkem jsou algoritmy, který jsou plně podloženy teorií, dokážeou bez problémů řešit semikoercivní problémy diskretizované metodou konečných i hraničních prvků, a pro které byla experimentálně (a nejnověji i teoreticky) doložena vysoká efektivnost, včetně numerické a paralelní škálovatelnosti.

Do čtvrté části byly zařazeny dvě práce zabývající se rozšířením výše popsaných postupů na řešení úloh s Coulombovským třením.

Poslední část souboru je věnována aplikacím. Zahrnuje dvě práce věnované řešení úloh kontaktní tvarové optimalizace a paralelnímu algoritmu pro modelování laminovaných materiálů.

1 Předpodmínění projektorem [4]

1.1 Sdružené gradienty s předpodmíněním projektorem

Práce [4] se zabývá řešením soustavy

$$Ax = b \tag{1}$$

s řídkou positivně definitní maticí. Je v ní navrženo předpodmínění matice A pomocí konjungovaného projektoru Q.

Algoritmus samotný sestává ze dvou kroků. Nejprve se definuje podprostor $\mathcal{U}$ jako obor hodnot obdélníkové matice U a najde se projekce x^0 řešení (1) na $\mathcal{U}$ pomocí konjungovaného projektoru P na $\mathcal{U}$. Korekce x^c k počítační aproximaci x^0 se hledá pomocí metody sdružených gradientů aplikovaných k rovnici

$$AQy = r^0,$$

kde $Q = I - P$ a $r^0 = b - Ax^0$. Korektnost tohoto algoritmu vyplývá z toto, že ortogonální komplement $\mathcal{V}$ k $\mathcal{U}$ je invariantní podprostor AQ, $r^0 \in \mathcal{V}$ a konečně z toho, že restrikce $AQ|\mathcal{V}$ je regulární, jak je v práci dokázáno.

Jelikož v iteracích působí pouze $AQ|\mathcal{V}$, lze odhadnout rychlost konvergence metody sdružených gradientů pomocí podmíněnosti restrikce $AQ|\mathcal{V}$. V práci je odvozena horní hranice čísla podmíněnosti $\kappa(AQ|\mathcal{V})$ pomocí úhlu γ podrostoru $A\mathcal{V}$ a podprostoru, který je generován vlastními vektory A odpovídajícími m nejmenším vlastním vektorům matice A, přičemž m je dimenze $\mathcal{V}$. Konkrétně je dokázáno, že

$$\kappa(AQ|\mathcal{V}) \leq \lambda_n/((1-\gamma^2)\gamma_{m+1} + \gamma^2\lambda_i^2)^{1/2}, \tag{2}$$

kde $\lambda_1 \leq \lambda_2 \cdots \leq \lambda_n$ jsou vlastní čísla matice A.

Práce je doplněna poznámkami o implementaci a numerickým experimentem, který ukazuje, že metoda může být účinná pro realistické problémy.

Jak se později ukázalo, podobné nápady měl ve stejné době např. P. Nicolaides [40], který též analyzoval některé speciální případy. Obecný a geometrický přístup této práce se uplatnil teprve později a v jiném kontextu než bylo původně zamýšleno. Práce byla jedním ze zdrojů inspirace pro zavedení předpodmíňovačů používajících "přirozenou hrubou síť" z jader matic tuhosti pro FETI metody rozložení oblasti. Práce byla poměrně často citována ve zprávách a publikacích prof. Ch. Farhata a jeho spolupracovníků z University of Colorado v Boulderu např. [32]. Práci jsem také využil ke studiu souvislosti mezi multigridovými metodami a metodami rozložení oblasti [5], společně s J. Malíkem k návrhu algoritmu na propojení hraničních prvků s konečnými prvky [28] a k vývoji níže popsaného algoritmu pro řešení kontaktních problémů [6].

2 Kvadratické programování

2.1 Penalizace v kvadratickém programování s rovnostmi [11]

Práce [11] se zabývá optimalizací kvadratického funkcionálu

$$q(x) = \tfrac{1}{2}x^T(A + \rho C^T C)x - b^T x,$$

s pozitivně definitní maticí A a $\rho \geq 0$ metodou sdružených gradientů. Práce je motivována snahou překonat problémy, vznikající při implementaci metody rozšířených Lagrangiánů s iteračním řešením pomocných problémů.

Základem práce je jednoduché lemma, které tvrdí, že spektrum matice $A+\rho C^TC$ lze rozložit do dvou intervalů, z nichž jeden je omezen extremními vlastními čísly matice A a druhý závisí ρ. S pomocí klasických výsledků O. Axelssona se pak ukáže, jak toto lemma využít k efektivní minimalizaci $q(x)$. Hlavním výsledkem článku je tvrzení, že počet iterací metody sdružených gradientů, který je potřebný k minimalizaci q s danou přesností, lze omezit nezávisle na ρ i na hodnosti matice C. Práce využívá efektivní spektrální číslo podmíněnosti zavedené O. Axelssonem.

Práce je doplněna numerickými experimenty, které ukazují, že postup popsaný v článku může být efektivní alternativou k předpodmínění matice $A + \rho C^T C$ ve smyslu zmenšení čísla podmíněnosti. Experimenty potvrzují, že velké číslo podmíněnosti matice soustavy nemusí být překážkou rychlé konvergence metody sdružených gradientů.

2.2 Implementace metody rozšířených Lagrangiánů s nepřesným řešením pomocných úloh pro kvadratické programování s omezením ve tvaru rovnosti [18]

Práce [18] se zabývá minimalizací kvadratického funkcionálu

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \tag{3}$$

s pozitivně definitní maticí na množině

$$\Omega = \{x \in \mathcal{R}^n : Cx = d\} \tag{4}$$

pomocí metody rozšířených Lagrangiánů s iteračním řešením úloh ve vnitřní smyčce. Hlavním cílem práce bylo najít efektivní určování přesnosti řešení pomocných úloh. Vycházeli jsme přitom z klasických výsledků o konvergenci metody rozšířených Lagrangiánů s nepřesným řešením problémů ve vnitřní smyčce, které dávaly odhad rychlosti konvergence obsahující člen pro chyby řešení pomocných úloh.

Hlavním výsledkem práce je důkaz tvrzení, že existuje $\rho > 0$ a $M_1 > 0$ tak, že je-li přesnost minimalizace rozšířeného Lagrangiánu $L(x^k, \lambda^k, \rho_k)$ určena vztahem

$$\| \nabla_x L(x^k, \rho^k, \lambda_k)\| \le M\|Cx - d\|,$$

kde $M > 0$ je předem daný parametr algoritmu, pak pro Lagrangeův multiplikátor $\overline{\lambda}$ řešení problému a $\rho^k \ge \rho$ platí

$$\|\bar{\lambda} - \lambda_{k+1}\| \leq \frac{M_1}{\rho_k}\|\bar{\lambda} - \lambda_k\|. \tag{5}$$

To je odhad, který je v knize Bertsekase [2] dokázán jen pro přesné řešení pomocných problémů. Je dokázána i omezenost penalizačního parametru ρ^k.

Numerický experiment potvrzuje efektivnost algoritmu. Má-li matice C ortonormální řádky, je k nalezení řešení obvykle třeba jen o málo (v našich experimentech nejvýše o 50 procent) větší počet iterací, než pro přesné řešení jedné vnitřní úlohy. Důležitou roli zde hraje možnost použití velkých penalizačních parametrů na základě článku [11], což je proti obecně přijatým doporučením.

V práci je drobná chyba, která byla odhalena mým postgraduálním studentem K. F. Alsawim a opravena v článku [19]. Technika práce byla využita i k analýze "least square update" a otestována na řešení Stokesova problému [1].

Analýza výsledků práce [18] a [19] naznačuje, že lineární konvergence (5) je dosažena pro velké penalizační parametry v závislosti na podmíněnosti matice omezení C, což však v experimentech nebylo pozorováno. V pozdější práci [13] se tento jev podařilo vysvětlit a dokázat i výsledky, které nezávisí na formě C a dokonce připouští matici C se závislými řádky. Pro modifikovaný algoritmus byla též nalezena mez na penalizační parametr, která nezávisí na C.

2.3 "Proporcionalizace" v kvadratickém programování s jednoduchými nerovnostmi [9]

Práce [9] shrnuje první vlastní výsledky ve vývoji algoritmů pro řešení rozsáhlých úloh konvexního kvadratického programování na kartézském součinu intervalů (box constraints). Práce je založena na modifikaci klasického Poljakova algoritmu, který kombinuje metodu sdružených gradientů s metodou aktivních množin. Poljak sice dokázal, že jeho algoritmus najde řešení v konečném počtu kroků, avšak jednoduchý rozbor jeho argumentů ukazuje, že se tak může stát až po ohromném počtu kroků, který může být srovnatelný s $n2^n$, kde n je dimenzí úlohy. Zřejmé slabiny původního algoritmu jsou dvě. První z nich je neefektivní technika rozšíření tzv. aktivní množiny, tj. množiny indexů neznámých splňujících nerovnosti jako rovnosti, neboť Poljakův algoritmus přidává do aktivní množiny typicky jen jeden index. Tento nedostatek byl překonán několika autory pomocí projekcí jako např. Moré a Toraldo [39]. Jejich práce vyžaduje délku kroku, která zaručuje tzv. podmínku dostatečného poklesu, která jim dokonce umožnila vypracovat teorii konvergence bez kombinatorických argumentů.

Práce [9] se zaměřila na druhý problém Poljakova algoritmu - předpoklad, že pomocné lineární úlohy se řeší přesně. Poznamenejme, že Moré a Toraldo se tento problém nepokusili řešit, ačkoliv byly známy experimentální výsledky O'Leary [41], které naznačovaly velké možnosti zvýšení efektivnosti algoritmu s nepřesným řešením pomocných úloh, ovšem bez jakékoliv teorie.

V práci [9] vybrané do tohoto souboru je navržena kontrola přesnosti řešení pomocných úloh pomocí poměru dvou částí gradientu, které narušují Karush-Kuhn-Tuckerovy podmínky (KKT). Ukázalo se, že při splnění těchto podmínek nahrazuje krok uvolnění vazeb potenciálně nákladnou podmínku dostatečného poklesu v konvergenční teorii Morého a Toralda, takže projekce musí splňovat pouze mnohem jednodušší podmínkou monotónnosti. Práce nejen dokazuje pro levnější výpočetní kroky stejné konvergenční výsledky jako Moré, Toraldo a další autoři, ale dokazuje i zcela novou vlastnost, a to schopnost nalezení přesného řešení v konečném počtu kroků i v případě, že úloha má tzv. duálně degenerované řešení, tj. že některé Lagrangeovy multiplikátory spojené s aktivními vazbami jsou nulové. Tím se práce odlišuje i od práce brazilských matematiků Friedlanderové a Martíneze, kteří měli obdobné nápady nezávisle a v prakticky stejnou dobu, jak se ukázalo na konferenci ICIAM v Hamburku v roce 1995, kde jsme se poprvé setkali a zahájili plodnou spolupráci.

Algoritmus byl poměrně úspěšný a byl používán či alespoň testován na mnohých předních zahraničních pracovištích (např. si ho vyžádala B. Wohlmuthová při pobytu v Courantově Institutu, D. Braess z Bochumi, J. Schoeberl z Lince atd.). Později byl prohlouben výsledek o jeho schopnosti nalézt řešení v konečném počtu kroků pro duálně degenerované problémy [10]. Tento výsledek mimo jiné vyvrací rozšířenou představu o "oscilaci" algoritmů založených na aktivních množinách a ukazuje, že algoritmus může využít informace o řešení dříve než ho má k dispozici.

2.4 Algoritmus s rychlostí konvergence založený na "proporcionalizaci" pro kvadratickém programování s jednoduchými nerovnostmi [12]

Práce [12] se opět zabývá minimalizací konvexní kvadratické funkce pro jednoduchá omezení. S pomocí výsledku J. Schöberla [42], který odvodil rychlost konvergence v energetické normě pro projekci gradientu, je v práci popsána další modifikace Poljakova algoritmu, jehož rychlost konvergence lze vyjádřit pomocí spektrálního čísla podmíněnosti Hessiánu funkce q. K ilustraci významu této práce v aplikacích uveďme, že zatímco použití původního Poljakova algoritmu pro řešení koercitivních kontaktních úloh pomocí DP-

FETI metod s krokem diskretizace h by podle původní teorie zaručovalo něco jako $O(2^{1/h})$ kroků, s novým algoritmem lze řešení dané přesnosti při vhodné diskretizaci dosáhnout v $O(1)$ kroků sdružených gradientů. V přesné aritmetice je algoritmus schopen najít přesné řešení v konečném počtu kroků v případě, že řešení je nedegenerované. Poslední podmínka je odstraněna v nové společné práci s J. Schöberlem [29], ve které je dán nový důkaz zlepšeného odhadu rychlosti konvergence projekce gradientu a algoritmus je modifikován tak, že najde řešení v konečném počtu kroků i pro degenerované řešení. Algoritmus se stal základem škálovatelných algoritmů pro řešení kontaktních úloh.

2.5 Implementace metody rozšířených Lagrangiánů s nepřesným řešením pomocných úloh pro kvadratické programování s omezením ve tvaru rovností a nezápornosti [20]

Společná práce [20] vznikla v roce 1996 během mého pobytu na University of Campinas, jehož cílem bylo rozšířit naše výsledky pro řešení úloh kvadratického programování s jednoduchými nerovnostmi na úlohy s rovnostmi a jednoduchými nerovnostmi. Z podnětu M. Martíneze jsme se rozhodli adaptovat metodu rozšířených Lagrangiánů na základě práce Conna, Goulda a Tointa [3]. Jejich algoritmus řeší pomocnou úlohu s jednoduchými nerovnostmi ve vnitřní smyčce, zatímco ve vnější smyčce se generují Lagrangeovy multiplikátory pro rovnosti. Původní algoritmus byl navržen pro obecnější, ale menší úlohy a nebyl efektivní pro aplikace v kontaktní mechanice, o nichž jsme uvažovali. Hlavní modifikace je adaptativní řízení přesnosti pomocných úloh srovnáním normy projektovaného gradientu cenové funkce s normou narušení rovností. Ukázalo se, že s touto strategií je možno účelně aktualizovat multiplikátory v každém kroku vnější smyčky. Byla dokázána konvergence pro úlohy s regulárním řešením, byl nalezen asymptotický odhad rychlosti konvergence neobsahující člen pro nepřesné řešení pomocných úloh a byla dokázána omezenost penalizačního parametru. Výsledek však nestačil k odvození teorie škálovatelných algoritmů řešení kontaktních úloh, neboť odhady závisely, ostatně stejně jako v klasické teorii, na podmíněnosto vazeb.

Numerický experiment ukázal, že zvolená strategie řízení přesnosti je tak účinná, že počet iterací sdružených gradientů je prakticky roven případu, kdy je počáteční apoximace Lagrangeova multiplikátoru pro rovnosti inicializována přesnou hodnotou. Program byl použít v kombinaci s FETI k vývoji algoritmů, pro řešení kontaktních úloh pro které byla experimentálně ukázána numerická škálovatelnost.

Další výzkum

Po sedmiletém úsilí se nedávno podařilo algoritmus modifikovat tak, že bylo možné dokázat výsledky o rychlosti konvergence vnější smyčky nezávisle na reprezentaci rovností, tedy i pro řešení, které není regulární, pouze pomocí hranic spektra Hessiánu cenové funkce [14]. Dohromady s výsledky pro řešení úloh s jednoduchým omezením tak byl vytvořen algoritmus pro kvadratické programování s rovnostmi a nerovnostmi s rychlostí konvergence.

3 Kontaktní úlohy bez tření

3.1 Předpodmínění projektorem pro kontaktní úlohy v primární formulaci [6]

Práce [6] kombinuje předpodmínění projektorem s klasickým Poljakovým algoritmem k vývoji algoritmu pro řešení úloh lineární pružnosti s jednostranným kontaktem bez tření. Předpokládáme, že skutečné kontaktní plochy, ve kterých se tělesa dotýkají nejsou předem známy.

Z matematického hlediska se jedná o úlohu kvadratického programování, která vzniká z konečněprvkové diskretisace variační nerovnosti, která definuje podmínky rovnováhy. Cílem je minimalizovat energetický funkcionál $j(u) = \frac{1}{2}u^TKu - f^Tu$ na množině $\mathcal{B} = \{u : B^Tu \leq c\}$, kde K je matice tuhosti, f je vektor uzlových sil, u jsou uzlová posunutí a B společně s c definují přírůstkové kontaktní podmínky.

Vhodnou volbou podprostoru $\mathcal{U}$ se dosáhne toho, že se iterace redukují na uzly s možným kontaktem. Byla to (možná nejen moje) první práce která využívala metody rozložení oblasti Dirichlet-Dirichletova typu k řešení kontaktních úloh. S její pomocí se podařilo zredukovat počet iterací, potřebný pro řešení modelové geomechanické úlohy z 1140 na 85. V práci je ukázána korektnost navrženého algoritmu a je diskutována jeho efektivnost. Jednoznačně se ukázalo, že aplikace metody rozložení oblasti Dirichlet-Dirichletova typu je pro řešení variačních nerovnic ještě efektivnější než pro řešení rovnic, neboť poměrně nákladné sestavení faktorizovaného Schurova komplementu se provádí pouze jednou.

Současně se ukázalo, že metoda má velmi omezené možnosti, neboť pracuje s poměrně složitou přípustnou množinou. Zejména nebylo jasné s jakou přesností by se měly řešit pomocné lineární úlohy a jak zvětšovat aktivní množimu. Teoretický podklad Polyakovy metody, zaručené nalezení kontaktu v konečném počtu kroků při zcela přesném řešení pomocných úloh, byl z praktického hlediska nedostatečný. V termínech iterací například zaručoval, že řešení úlohy s n body na hranici bude dosaženo za něco jako $n2^n$ kroků, což při n rovno tisícům rozhodně není uspokojivé. Další výzkum jsem proto zaměřil jinam.

3.2 Využití metody rozložení oblasti založené na dualitě k k řešení variační nerovnice [7]

Článek [7] je první časopisecká práce, která využívá nových výsledků v řešení úloh kvadratického programování [9] k numerickému řešení variačních nerovností s využitím duální formulace. Jasně se ukázaly výhody duální (reciproční) formulace, a to jednak poměrně dobrá podmíněnost Hessiánu duální kvadratické formy ($O(h^{-1})$ pro modelové úlohy) ve srovnání s podmíněností Hessiánu původní energetické formy ($O(h^{-2})$), a zejména to, že obecné lineární nerovnosti přejdou na nezápornost, takže lze použít, alespoň v koercitivním případě, projekce a nové algoritmy. K řešení semikoercitivní úlohy byla použita těžkopádná regularizační technika navržená Farhatem, Chenem a Rouxem, která je v pozdějších pracích úspěšně nahrazena rozšířenými Lagrangiány, ale i tak bylo dosaženo do té doby nevídaných experimentálních výsledků: pouhých 12 iterací metody sdružených gradientů pro koercitivní úlohu a 13 iterací pro semikoercitivní úlohu při relativní přesnosti 10^{-4}. V práci [8] byl řešen i geomechanický benchmark z práce [6] a potvrdila se vysoká účinnost duálního přístupu i nových algoritmů, neboť počet iterací klesl 85 na pouhých 19, a to při prakticky stejné pracnosti jedné iterace.

3.3 Řešní variačních nerovností pomocí základní FETI metody [17]

Práci [17] tvoří obsah pozvané plenární přednášky, kterou jsem přednesl na 10. konferenci o metodách rozložení oblasti, která se konala v Boulderu. Přednáška je věnována využití nových výsledků v kvadratickém programování [9], [20] k implementaci FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting) metod k řešení kontaktních úloh. Přednášku jsme původně přihlásil jako řadový příspěvek, ale členové programového výboru patrně ocenili potenciál našeho přístupu pro využití mimořádných výsledků, kterých bylo v té době dosaženo v řešení lineárních úloh s pomocí FETI s tzv. přirozenou hrubou sítí. V práci je popsáno několik experimentů včetně 3D pružnosti a aplikace BEM pro 2D pružnost, které naznačují vysokou efektivnost daného přístupu.

3.4 Řešní kontaktních úloh pružnosti pomocí symetrické metody hraničních prvků a rozšířených Lagrangiánů [15]

Práce [15] vznikla z podnětu prof. Kamiya, který mi navrhl, abych popsal naše algoritmy pro kontatkní problémy pro řešení metodou konečných prvků. Symetrická formulace a diskretizace byl převzata z dřívější společné práce s J. Malíkem o spojení hraničních a konečných prvků s využitím předpodmínění projektorem [28]. V práci je mimo jiné též stručně vysvětleno, s využitím argumentu o mezeře ve spektru, proč velké penalizační parametry nemusí zpomalovat konvergenci. Tento aspekt byl později podrobně vyložen v práci [11] zařazené do tohoto souboru.

3.5 Řešní kontaktních úloh pružnosti pomocí FETI metody s přirozenou hrubou sítí [22]

Práce [22] byla napsána během mého pobytu v Campinas v roce 1998 se dvěmi mladými kolegy. Práce kombinuje naše předchozí výsledky s předpodmíněním pomocí přirozené hrubé sítě. Připomeňme, že FETI s přirozenou hrubou sítí se stala daleko nejúspěšnější metodou pro paralelní řešení lineárních úloh. Bylo proto přirozené očekávat, že náš přístup bude patřit k nejúspěšnějším metodám řešení kontaktních úloh, neboť využívá navíc toho, že dualita převádí obecné nerovnosti na jednoduché podmínky nezápornosti, čehož naše algoritmy dokážou významně využít, a to prakticky spolu se vším, co se vymyslí pro lineární problémy.

V práci jsou také první systematické experimentální výsledky, naznačující numerickou škálovatelnost algoritmu. Připomeňme, že algoritmus se nazývá numericky škálovatelný pokud existuje mez na počet iterací, která nezávisí na diskretizaci. Pro FETI odtud plyne lineární složitost. Poznamenejme, že tyto výsledky byly i pro nás velkým překvapením a pro mně určily další cíl výzkumu.

3.6 Škálovatelnost a algoritmy založené na FETI pro diskretizované variační nerovnosti

Škálovatelnost našeho algoritmu je demonstrována na systematických experimentech, provedených mým studentem Davidem Horákem v práci [24]. Počty kroků, potřebných pro řešení modelové variační nerovnosti diskretizované postupně sítěmi od 50 uzlů do 8.454.272 uzlů, kolísaly od 7 do 65, a to při stejné relativní přesnosti 10^{-4}. Algoritmus byl také implementován paralelně a potvrdila se očekávaná paralelní škálovatelnost, tedy to, že čas výpočtu je zhruba nepřímo úměrný počtu procesorů. V práci je také zmínka o teoretickém zdůvodnění škálovatelnosti vnitřní smyčky, založeném na práci [12], která byla tehdy v rukopise.

3.7 Škálovatelné algoritmy pro koercitivní variační nerovnosti založené na FETI a optimální duální penaltě [24]

Práce [24] se omezuje na koercitivní úlohy a na aproximaci omezení na rovnosti pomocí penalty, takže diskretizovaná variační nerovnost je aproximována úlohou kvadratického programování s jednoduchým omezením tvaru $\lambda_i \geq c_i$. Ukazuje se, že použití penalty v duální formulaci má kvalitativně lepší vlastnosti než běžně používaná penalta v primární formulaci, a sice, že danou relativní přesnost omezení ve tvaru rovnosti lze dosáhnout s penalizačním parametrem, jehož velikost nezáleží na diskretizačním parametru. Důkaz tohoto tvrzení využívá výsledku, který byl skryt v důkazech J. Mandela, R. Tezaura i A. Klawonna (např. [38]), a sice, že existuje dolní mez na spektrum Hessiánu duálního Schurova komplementu. Dohromady s novými výsledky [12] a [29] odtud plyne, že navržený algoritmus je škálovatelný. Je to první důkaz škálovatelnosti algoritmu založeného na FETI. Experimenty jsou v naprostém souladu s teorií a demonstrují optimalitu duální penalty i škálovatelnost výsledků algoritmu pro diskretizaci od 50 do 2.130.048 uzlových neznámých. O výsledku jsem referoval na konferenci PMOCCO 2002 v plenární přednášce na pozvání prof. O. Axelssona.

3.8 Škálovatelné algoritmy pro semi-koercitivní variační nerovnosti založené na FETI a optimální duální penaltě [26]

Práce [26] rozšiřuje výsledky práce [25] na řešení semikoercitivních úloh. Výsledky i teorie jsou prakticky obdobné, i když se při jejich odvození musí zohlednit jiná struktura existenčních výsledků, které už nejsou zaručeny koercitivitou kvadratického členu, ale závisí na detailní struktuře lineárního členu.

Další výzkum

Výzkum ve vývoji škálovatelných algoritmů intenzivně pokračuje. V současné době byly provedeny ve spolupráci s Danem Stefanicou z New York University experimenty s DP-FETI. Pro koercitivní úlohy vyplývá škálovatelnost ze známých výsledků o rychlosti konvergence úloh kvadratického programování s jednoduchými vazbami [12] a [29]. Příklad experimentů je na obr. 1. Pro semikoercitivní úlohy a pro algoritmy založené na rozšířených Lagrangiánech vyplývá škálovatelnost z nejnovějších výsledků o kvadratickém programování [14]. Tento výzkum si v současné době získal podporu MŠMT i NSF a bude pokračovat ve spolupráci s C. Farhatem, J. Mandelem, M. Lesoinnem, D. Stafanicou a dalšími.

4 Kontaktní úlohy se třením

4.1 Řešení kontaktních úloh s Coulombovým třením založené na dualitě [30]

V práci [30] je popsána využití algoritmu pro řešení úloh kvadratického programování [9] k řešení koercitivních kontaktních úloh s Coulombovým třením. Základem je diskretní duální formulace pro úlohu s daným třením, jejíž řešení je využito pro hledání pevného bodu zobrazení, které je spojeno s Coulombovým třením. Práce je napsána s mým doktorandem Vítem Vondrákem, který provedl numerické experimenty.

4.2 Algoritmus s rozštěpením pro řešení kontaktních úloh s Coulombovým třením ve 2D [23]

Práce [23] popisuje významné zlepšení algoritmu pro řešení kontaktních úloh s Coulombovým třením. Základem je pozorování, že hlavní problém při řešení pomocných úloh s daným třením spočívá ve špatné podmíněnosti příslušného duálního komplementu, způsobené tím, že spojuje tečné i normálové složky kontaktních sil. V předloženém článku se tečné a normálové složky rozdělí obdobně jako při použití blokové Gauss-Seidelovy metody v kombinaci s metodou pevného bodu. V práci je použito spojité duální formulace, takže spojité multiplikátory jsou pak diskretizovány, narozdíl od běžných "mortar" metod, nezávisle na primárních proměnných. Práce obsahuje zajímavé experimentální výsledky, které nejen demonstrují vysokou efektivnost použitých metod kvadratického programování, ale i významnou úlohu použitých aproximačních prostorů. Proti základnímu algoritmu se podařilo dosáhnout až tisícnásobného zrychlení. Spojitá reciproká formulace a návrh experimentů změřených na přesnost aproximace vycházel z práce J. Haslingera, R. Kučera realizoval numerické experimenty.

J. Haslinger později našel důkaz konvergence algoritmu s rozštěpením [34]. S použitím nápadu z knihy R. Glowinského, kterého si povšiml J. Haslinger, se podařilo převést úlohu s daným třením v 3D na úlohu kvadratického programování s jednoduchými nerovnostmi a rovnostmi [33]. Poznamenejme, že duální formulace úlohy s daným třením v 3D vede na minimalizaci kvadratické funkce s kvadratickým omezením. V současné době se studují další přístupy.

5 Aplikace

5.1 Modelování kompozitů [36]

Z aplikací je do souboru zařazena společná práce s J. Kruisem a K. Matoušem o využití metod rozložení oblasti při numerickém modelování laminovaných kompozitů. Spolupráce vznikla z podnětu prof. Marka. Můj přínos v této práci spočíval v tom, že jsem navrhl využít specifické struktury problému a ortonormalizovat matici vazeb. Ukázalo se, že pro řešení daného problému byl tento nápad mimořádně účinný a zrychlil konvergenci multiplikátorů spojujících jednotlivé vrstvy tak, že místo původních tisíců iterací bylo třeba pouze asi 150 iterací. V práci je i stručně vysvětleno, proč tomu tak je.

5.2 Kontaktní tvarová optimalizace [31]

Poslední práce souboru je aplikace dříve rozpracovaných algoritmů na řešení [31] úloh kontaktní tvarové optimalizace. Ukazuje se, že analýza citlivosti energetického funkcionálu považovaného za funkci návrhových proměnných popisujících tvar tělesa vede na postupné řešení úloh kvadratického programování s rovnostmi a nerovnostmi. Ukazuje se, že aplikace metod typu FETI je pro řešení těchto úloh ještě efektivnější než pro řešení přímých úloh, neboť v každém návrhovém kroku se řeší posloupnost úloh (počet členů je roven počtu návrhových proměnných plus jedna) se stejným Hessiánem, takže poměrně nákladné sestavení duálního Schurova komplementu stačí provést pouze jednou. Numerické experimenty provedl můj doktorand Vít Vondrák.

Další aplikace

Podílel jsem se i na mnoha dalších aplikacích. Jako příklad uvádím analýzu blokové struktury horského masívu [21], modelování mechaniky člověka v rámci projektu AnyBody [43] ve spolupráci s universitou v Aalborgu, modelování kompozitů s inkluzemi [27] atd.

Reference

[1] K. Alesawi and Z. Dostál, *Augmented Lagrangian with the Least Square Update for quadratic programming and the Stokes problem*, Transactions of the VŠB-Technical University Ostrava, Computer Science and Mathematics Series. To appear.

[2] D. P. Bertsekas, *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*, Academic Press, London (1982).

[3] A.R. Conn, N.I.M. Gould, Ph.L. Toint, A globally convergent augmented Lagrangian algorithm for optimization with general constraints and simple bounds, *SIAM J. Num. Anal.* **28** (1991) 545-572.

[4] Z. Dostál, *Conjugate Gradient Method with Preconditioning by Projector.* Int.J.Computer Math. 23 (1988), pp. 315-324.

[5] Z. Dostál, *Projector Preconditioning and Domain Decomposition Methods.* Appl. Math. Comput. 37, 2-II (1990), pp. 75-81.

[6] Z. Dostál, *Conjugate Projector Preconditioning for Solution of Contact Problems,* Int. J. Num. Meth. Engrg. 34 (1992), pp.271-277.

[7] Z. Dostál, *Duality Based Domain Decomposition with Proportioning for the Solution of Free Boundary Problems,* J. Comp. Appl. Math 63(1995), pp 203 - 208.

[8] Z. Dostál, *Duality based domain decomposition with inexact sub-problem solver for contact problems*, Contact Mechanics II, Ferrara 1995, eds. M. H. Alibiadi and C. Alessandri, published by Computational Mechanics Publications, Southampton 1995, pp. 461-468. ISBN 1-85312-326-9.

[9] Z. Dostál, *Box Constrained Quadratic Programming with Proportioning and Projections.* SIAM J. Optimization 7,3 (1997) 871-887.

[10] Z. Dostál *Inexact solution of auxiliary problems in Polyak type algorithms*, Acta Univ. Palacki. Olomuc., Fac. rer. nat., Mathematica 38 (1999) 25 -30. Reviewed in Zentralblatt fur Math.991.65456. ISBN 80-244-0043-X.

[11] Z. Dostál, *On preconditioning and penalized matrices*, Num. Lin. Alg. Appl. 6 (1999) 109-114.

[12] Z. Dostál, *A proportioning based algorithm with rate of convergence for bound constrained quadratic programming*, accepted in Numerical Algorithms. IF 0.438.

[13] Z. Dostál *Semi-monotonic inexact augmented Lagrangians for quadratic programming with equality constraints*, submitted to Optimization Methods & Software.

[14] Z. Dostál *Inexact semi-monotonic augmented Lagrangians with optimal feasibility convergence for quadratic programming with simple bounds and equality constraints*, submitted.

[15] Z. Dostál, A. Friedlander, S.A. Santos and J. Malík, *Analysis of semicoercive contact problems using symmetric BEM and augmented Lagrangians*, Eng. Appl. Bound. Elements 18,3 (1996) 195-201.

[16] Z. Dostál, A. Friedlander and S.A. Santos, *Analysis of block structures by augmented Lagrangians with adaptive precision control*, Proceedings of GEOMECHANICS'96, ed. Z. Rakowski, A.A. Balkema, Rotterdam, pp. 175-180. ISBN 90 5410921.

[17] Z. Dostál, A. Friedlander and S.A. Santos, *Solution of contact problems of elasticity by FETI domain decomposition*, Contemporary Mathematics 218 (1998) 82-93.

[18] Z. Dostál, A. Friedlander and S. A. Santos, *Augmented Lagrangians with adaptive precision control for quadratic programming with equality constraints*, Comput. Optimiz. and Applications 14 (1999) 37-53.

[19] Z. Dostál, A. Friedlander, S. A. Santos and K. Alesawi, *Augmented Lagrangians with adaptive precision control for quadratic programming with equality constraints: corrigendum and addendum*, Comput. Optimiz. and Applications 23,1(2002)127-133. ISSN 0926-6003. IF 0.739.

[20] Z. Dostál, A. Friedlander and S. A. Santos, *Augmented Lagrangians with adaptive precision control for quadratic programming with simple bounds*

and equality constraints, SIAM Journal on Optimization 13,4(2003)1120-1140.

[21] Z. Dostál, A. Friedlander and S.A. Santos, *Analysis of block structures by augmented Lagrangians with adaptive precision control*, Proceedings of GEOMECHANICS'96, ed. Z. Rakowski, A.A. Balkema, Rotterdam, pp. 175-180.

[22] Z. Dostál, F.A.M.Gomes and S. A. Santos, *Solution of Contact problems by FETI domain decomposition with natural coarse space projection*, Computer Meth. in Appl. Mech. and Engineering 190,13-14 (2000) 1611-1627.

[23] Z. Dostál, J. Haslinger and R. Kučera, *Implementation of fixed point method for duality based solution of contact problems with friction*, J. Comput. Appl. Math. 140,1-2(2002)245-256.

[24] Z. Dostál and D. Horák, *Scalability and FETI based algorithm for large discretized variational inequalities*, Mathematics and Computers in Simulation 61 (3-6)(2003) 347-357.

[25] Z. Dostál and D. Horák, *Scalable FETI with Optimal Dual Penalty for a Variational Inequality*, accepted in Numerical Linear Algebra and Applications.

[26] Z. Dostál and D. Horák, *Scalable FETI with Optimal Dual Penalty for Semicoercive Variational Inequalities*, accepted in Contemporary Mathematics.

[27] Z. Dostál, D. Horák and O. Vlach, *A scalable FETI based algorithm for numerical solution of variational inequalities with applications to composites with inclusions*, Domain Decomposition in Science and Engineering, 14th International Conference on Domain Decomposition Methods, Cocoyoc 2002. Eds. I. Herrera, D. E. Keyes, O. B. Widlund, and R. Yates. Published by National Autonomous University of Mexico, Mexico City 2003, pp. 395-402. ISBN 970-32-0859-2.

[28] Z. Dostál and J. Malík, *Symmetric FE-BE Coupling with Iterations on the Interface.* Int. J. Num. Met. Eng. 38 (1995) 27-35. Reviewed in Zentralblatt fur Math. 823.73065. ISSN 0029-5981. IF 1.335.

[29] Z. Dostál and J. Schöberl, *Minimizing quadratic functions subject to bound constraints with the rate of convergence and finite termination*, submitted to Comput. Optimiz. and Applications. IF 0.739.

[30] Z. Dostál and V. Vondrák, *Duality Based Solution of Contact problems with Coulomb Friction,* Arch. Mech. 49,3 (1997) 453-460.

[31] Z. Dostál, V.Vondrák and J.Rasmussen, *FETI based semianalytic sensitivity analysis in contact shape optimization*, Fast Solution of Discretized Optimization Problems, eds. K. H. Hoffmann, R. H. W. Hoppe and V. Schulz, Birkhäuser, International Series of Numerical Mathematics 138, Basel 2001, pp. 98-106. ISBN 3-7643-6599-4.

[32] C. Farhat, P. S. Chen, F. Risler, A unified framework for accelerating the convergence of iterative substructuring methods with Lagrange multipliers.International Journal for Numerical Methods in Engineering 42,2(1998)257-288.

[33] J. Haslinger, R. Kučera and Z. Dostál, *An algorithm for the numerical realization of 3D contact problems with Coulomb friction*, accepted in J. Comput. Appl. Math.

[34] J. Haslinger, Z. Dostál and R. Kučera, *On splitting type algorithm for numerical realization of contact problems with Coulomb friction: convergence analysis.* Computer Meth. in Appl. Mech. and Engng. 191 (2002)2261-2281.

[35] I. Hlaváček, J. Haslinger, J. Nečas, J. Lovíšek, *Solution of Variational Inequalities in Mechanics*, Springer Verlag, Berlin (1988).

[36] J. Kruis, K.Matouš and Z. Dostál, *Solving laminated plates by domain decomposition*, Advances in Engineering Software 33 (7-10) (2002) pp. 445-452.

[37] V. Vondrák, Z. Dostál and M. Damsgaard, *Solution of muscle-bone contact problem in biomechanics*, Workshop on Biomechanical Modelling and Simulation 2002, Praha 2002. To appear in proceedings.

[38] Mandel J, Tezaur R. Convergence of substructuring method with Lagrange multipliers. *Numerische Mathematik* 73, 1996; 473-487.

[39] J. J. Moré and G. Toraldo, *On the solution of large quadratic programming problems with bound constraints*, SIAM J. Optim. 1 (1991), pp. 93-113.

[40] B. A. Nicolaides, *Deflation of conjugate gradients with application to boundary value problems*, SIAM J. Num. Anal. 24,29(1987)355-365.

[41] D. P. O‘Leary, *A generalised conjugate gradient algorithm for solving a class of quadratic programming problems*, Lin. Alg. Appl. 34 (1980), pp. 371-399.

[42] J. Schöberl, Solving the Signorini problem on the basis of domain decomposition techniques, Computing 60,4(1998)323-344.

[43] V. Vondrák, Z. Dostál and M. Damsgaard, *Solution of muscle-bone contact problem in biomechanics*, Workshop on Biomechanical Modelling and Simulation 2002, Praha 2002. Submitted to proceedings.

English summary

The collection of papers presented here comprises eighteen papers. Fourteen papers were published in refereed international journals, three papers were accepted in refereed international journals, and one appeared in the refereed proceedings published by Birkhäuser. The papers are split into five parts of varying length.

In the first part, there is only one paper on preconditioning by conjugate projector. It describes a variant of what would now be called a cascadic algorithm that was successfully used for solution of 3D problems in geomechanics and mechanical engineering. The paper was selected because of its certain popularity especially in the FETI community. The main result is the rate of convergence described in geometrical terms accompanied by a numerical experiment demonstrating efficiency of the method.

The second part comprises five papers on numerical solution of quadratic programming problems with the equality and/or simple bound constraints. This research was motivated by en effort to find **algorithms for solution of quadratic programming problems with the rate of convergence in terms of matrix vector multiplications and bounds on the spectrum of the Hessian of the cost function** that can be applied in development of scalable algorithms for variational inequalities. The most important results concerning bound constrained quadratic programming include introduction of an efficient adaptive precision control into the active set strategy, so that the modified algorithm accepts inexact solution of auxiliary linear problems, and implementation of the reduced gradient projection. The rate of convergence of the resulting algorithm is expressed in terms of the spectral condition number of the Hessian of the cost function. The algorithms presented in these papers enjoy the finite termination property even for problems with dual degenerate solution. This shows that the algorithms presented need not suffer from oscillations often attributed to the active set based algorithms.

To enforce the equality constraints, we introduce in papers coauthored by A. Friedlander and S. A. Santos the Lagrange multipliers that are updated in the outer loop of the algorithm. In the inner loop, either the unconstrained or bound constrained quadratic programming problem for the augmented Lagrangian is solved approximately. The resulting algorithms are shown to converge to the solution and asymptotic rate of convergence without any term accounting for inexact solution of the auxiliary problems is given. Unfortunately, the results in the papers of the thesis depend on the conditioning of the constraints, but most recently this drawback was overcome. Another result concerns the rate of convergence of the conjugate gradients for problems with augmented Lagrangians. It is shown that even though the large penalty parameter destroys conditioning of the Hessian of the augmented Lagrangian, it is possible to give the bounds on the rate of convergence of the conjugate gradient methods that is independent of both the penalization parameter and the dimension of the constraint matrix.

Main results of the thesis are described in the third part concerned with numerical solution of contact problems. The papers exploit, with exception of the first paper that is based on preconditioning by projector (which may be interpreted as Dirichlet-Dirichlet domain decomposition method), the dual reciprocal formulation that is now part of the basic FETI methodology. Combining the FETI methodology with the new results on quadratic programming, we managed to develop three types of **algorithms for variational inequalities that enjoy both numerical and parallel scalability**. The one presented in the thesis is based on our **optimal dual penalty**. Since the basic FETI methodology yields bound and equality constrained quadratic programming problems with the Hessian whose spectrum is bounded independently of the discretization parameter, we proposed to impose the equality constraints by the penalty method and to solve the resulting bound constrained problem by the algorithm mentioned above. The analysis have shown that there is a bound on the relative feasibility error due to the penalty approximation that is independent of both the discretization and decomposition parameters, so that, using the above results, we can solve the discretized variational inequality to a given precision with a number of steps that is independent of the discretization and decomposition parameters. Let us point out that if we used the basic active set strategy, we would not get the solution in $O(1)$ steps, but rather in something like $O(2^{1/h})$ steps!

The approaches are applied in the third part to development of efficient algorithms for solution of 2D problems with Coulomb friction. In particular, an effective algorithm is proposed in a paper coauthored by J. Haslinger and R. Kučera that combines the approaches mentioned above with splitting tangential and normal components.

The thesis is completed by two applications. The first one concerns modelling of laminated plates in a paper coauthored by J. Kruis and K. Matouš where my asset is introduction of the orthonormalization into the set of constraints that improved essentially the performance of the original algorithm. The other one coauthored by V. Vondrák and J. Rasmussen describes exploitation of the above mentioned algorithms to the contact shape optimization. It turned out that the algorithms presented are even more efficient for the latter problem as compared with the direct problem as the costly decomposition may be carried out only once per each design step.