METODA SLEDOVÁNÍ CESTY PRO KONTAKTNÍ ÚLOHU VE 3D

Pavel Ženčák [1], Radek Kučera [2]

Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky, PřF UP Olomouc
17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
Katedra matematiky a deskriptivní geometrie, VŠB-TU Ostrava,
17. listopadu 15, 708 33, Ostrava-Poruba
Email: pavel.zencak@upol.cz, radek.kucera@vsb.cz

Abstrakt: V článku je popsáno použití metody sledování cesty k řešení optimalizační úlohy vznikající při řešení kontaktní úlohy ve 3D a jsou ukázány výsledky numerických testů této metody.

Abstract: This article treats the usage of the path following method for solution the optimization problem, which originates in solution of contact problems with Tresca friction in 3 dimensions. Moreover the results of numerical simulations are presented.

1 Úvod

V celém článku se zabýváme řešením optimalizační úlohy konvexního programování s kvadratickou účelovou funkcí a jednoduchými lineárními a kvadratickými omezeními

$$\text{minimalizovat } \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - x^\mathsf{T}b \tag{1a}$$

$$\text{za podmínek } x_{2,i}^2 + x_{3,i}^2 \leqslant g_i^2 \qquad \text{pro } i \in \{1,2,\ldots,m\}, \tag{1b}$$

$$x_{1,i} \geqslant l_i \qquad \text{pro } i \in \{1,2,\ldots,m\}, \tag{1c}$$

kde $n := 3m$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je symetrická pozitivně definitní matice, $b \in \mathbb{R}^n$, a l_i, g_i jsou prvky vektorů $l, g \in \mathbb{R}^m$.

Tato úloha vzniká při řešení kontaktní úlohy s daným třením ve 3D a na sekvenci takových úloh vede i kontaktní úloha s Culombovským třením.

[1] Supported by the Council of Czech Government MSM 6198959214.
[2] Supported by grants GAČR 101/08/0574, and MSM6198910027.

2 Metoda sledování cesty pro speciální úlohu

2.1 Formulace nutných a postačujících podmínek minima

Lagrangeova funkce úlohy (1) je definována předpisem

$$\mathscr{L}(x,\lambda,\mu) \;:=\; \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - x^\mathsf{T}b + \mu^\mathsf{T}\left(X_2^2 + X_3^2 - G^2\right)e + \lambda^\mathsf{T}(l - x_1),$$

kde $\lambda \in \mathbb{R}^m$ a $\mu \in \mathbb{R}^m$ jsou nezáporné vektory Lagrangeových multiplikátorů, $G = diag(g)$, $X_2 = diag(x_2)$, $X_3 = diag(x_3)$ a $e = (1,1,\dots,1)^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^m$.

Je známo, že nutnými a postačujícími podmínkami existence minima úlohy konvexního programování jsou tzv. Karush-Kuhn-Tuckerovy podmínky (zkráceně KKT podmínky), které v našem případě mají tvar

$$\left.\begin{array}{l}
\nabla_x\mathcal{L}(x,\lambda,\mu) = 0,\\
\nabla_\lambda\mathcal{L}(x,\lambda,\mu) \leqslant 0,\ \lambda \geqslant 0,\ \lambda^\top\nabla_\lambda\mathcal{L}(x,\lambda,\mu) = 0,\\
\nabla_\mu\mathcal{L}(x,\lambda,\mu) \leqslant 0,\ \mu \geqslant 0,\ \mu^\top\nabla_\mu\mathcal{L}(x,\lambda,\mu) = 0.
\end{array}\right\} \tag{2}$$

Nechť matice A a vektor b jsou rozděleny do bloků $A_{i,j} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ a $b_i \in \mathbb{R}^m$ pro $i,j \in \{1,2,3\}$ v souladu s rozdělením vektoru x. Definujme doplňkové proměnné $s = -\nabla_\lambda\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)$ a $d = -\nabla_\mu\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)$ a označme $\nu := (\lambda^\top,\mu^\top)^\top$, $z := (s^\top,d^\top)^\top$. Pak lze KKT podmínky (2) přepsat ve tvaru

$$F(x,\nu,z) = 0, \quad \nu, z \geqslant 0, \tag{3}$$

přičemž funkce $F : \mathbb{R}^{n+4m} \mapsto \mathbb{R}^{n+4m}$ je dána předpisem

$$F(x,\nu,z) := \left(\begin{array}{l}
A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + A_{13}x_3 - \lambda - b_1\\
A_{21}x_1 + (A_{22} + 2M)x_2 + A_{23}x_3 - b_2\\
A_{31}x_1 + A_{32}x_2 + (A_{33} + 2M)x_3 - b_3\\
\hline
-x_1 + s + l\\
(X_2^2 + X_3^2 - G^2)e + d\\
\hline
\Lambda S e\\
M D e
\end{array}\right),$$

kde $\Lambda, S, M, D \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\Lambda = diag(\lambda)$, $S = diag(s)$, $M = diag(\mu)$, $D = diag(d)$. Jakobián této funkce budeme značit $J(x,\nu,z)$.

2.2 Metoda sledování cesty

Při aplikaci metody sledování cesty vycházíme z postupů pro úlohu lineárního programování uvedených v [3] a [4]. Metoda zavádí tzv. **centrální cestu**, což je množina bodů (x^τ, y^τ), které jsou pro každou hodnotu parametru τ, $\tau > 0$ řešením úlohy

$$F(x,\nu,z) = (0^\top, 0^\top, \tau e^\top)^\top, \quad \nu, z > 0. \tag{4}$$

Hodnotu parametru τ neurčujeme přímo, ale v každé počítáme ji ze vztahu $\tau_k = \sigma_k\vartheta_k$, kde k je číslo iterace, ϑ_k je tzv. **míra duality** a σ_k je tzv. **centrující parametr**, který může nabývat hodnot z intervalu $[0,1]$. Míru duality počítáme jako

$$\vartheta_k = \left((\nu^{(k)})^\mathsf{T} z^{(k)}\right) / 2m. \tag{5}$$

Hodnotu centrujícího parametru určujeme adaptivně pomocí modifikace předpisu známého ze softwaru LOQO

$$\sigma_k = 0.1 \cdot \min\left\{(0.05 \cdot (1-\xi)/\xi)^3, 5\right\}, \quad \text{kde } \xi = \min_{i=1,\dots,2m}\{\nu_i^{(k)} z_i^{(k)}\}/\vartheta_k. \qquad (6)$$

Velikost centrujícího parametru tak závisí na odchylce individuálních podmínek komplementarity od jejich průměru (tj. od míry duality).

Kvůli důkazu konvergence se v metodách tohoto typu navíc omezuje délka kroku požadavkem, aby každá iterace ležela v okolí centrální cesty

$$\begin{aligned}\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma,\beta) \;=\; & \{(x,\nu,z) : \|\nabla_x \mathcal{L}(x,\nu)\| \leqslant \beta\vartheta, \|\nabla_\nu \mathcal{L}(x,\nu) + z\| \leqslant \beta\vartheta, \\ & \nu \geqslant 0, z \geqslant 0, \nu_i z_i \geqslant \gamma\vartheta, i = 1,\dots,2m\},\end{aligned}$$

kde $\beta > 0$ a $\gamma \in (0,1)$ jsou parametry nastavující velikost okolí. Pro zajištění poklesu míry duality se předepisuje Armijova podmínka, která může mít například tvar

$$\vartheta_{k+1} \;\leqslant\; [1 - \alpha\omega(1-\sigma_k)]\vartheta_k \qquad (7)$$

kde $\omega \in (0,1)$ je vhodný parametr.

ALGORITMUS METODY SLEDOVÁNÍ CESTY:
Zvolíme $x^{(0)} \in \mathbb{R}^{3m}$, $\nu^{(0)}, z^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{2m}$, $\delta \in (0,1)$, $\omega \in (0,1)$, $\beta > 0$ a $\gamma \in (0,1)$, hodnotu ukončovacího kritéria $\epsilon > 0$ a položíme $k := 0$.

(1°) Vypočítáme ϑ_k z (5) a σ_k z (6)

(2°) Vyřešíme lineární soustavu

$$J(x^{(k)}, \nu^{(k)}, z^{(k)}) \begin{pmatrix} \Delta x^{(k+1)} \\ \Delta \nu^{(k+1)} \\ \Delta z^{(k+1)} \end{pmatrix} = -F(x^{(k)}, \nu^{(k)}, z^{(k)}) + (0^\mathsf{T}, 0^\mathsf{T}, \sigma_k \vartheta_k e^\mathsf{T})^\mathsf{T} \qquad (8)$$

(3°) Najdeme $\alpha_k \leqslant \min_{\Delta\nu_i^{(k+1)}, \Delta z_i^{(k+1)} < 0}\{1, -\delta\frac{\nu_i^{(k)}}{\Delta\nu_i^{(k+1)}}, -\delta\frac{z_i^{(k)}}{\Delta z_i^{(k+1)}}\}$ a takové, že

$$(x(\alpha_k), \nu(\alpha_k), z(\alpha_k)) = (x^{(k)}, \nu^{(k)}, z^{(k)}) + \alpha_k(\Delta x^{(k+1)}, \Delta\nu^{(k+1)}, \Delta z^{(k+1)})$$

splňuje

$$(x(\alpha_k), \nu(\alpha_k), z(\alpha_k)) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma,\beta) \quad \text{a} \quad \vartheta(\alpha_k) \leqslant [1 - \alpha_k\omega(1-\sigma_k)]\vartheta_k.$$

(4°) Položíme

$$(x^{(k+1)}, \nu^{(k+1)}, z^{(k+1)}) = (x(\alpha_k), \nu(\alpha_k), z(\alpha_k)).$$

(5°) Je-li $\|(\Delta x^{(k+1)}, \Delta\nu^{(k+1)}, \Delta z^{(k+1)})\| \leqslant \epsilon$ ukončíme výpočet a vrátíme optimální řešení $(x^{(k+1)}, \nu^{(k+1)}, z^{(k+1)})$. Jinak položíme $k := k+1$ a pokračujeme krokem $(1°)$.

3 Numerická realizace

3.1 Modelová úloha

Máme ocelovou kostku v $\Omega = (0,3) \times (0,1) \times (0,1) \in \mathbb{R}^3$ ležící na pevné podložce. Její hranice $\partial\Omega$ je rozdělena na tři různé části $\Gamma_u = \{0\} \times (0,1) \times (0,1)$, $\Gamma_c = (0,3) \times (0,1) \times \{0\}$ a $\Gamma_p = \partial\Omega \backslash (\bar{\Gamma}_u \cup \bar{\Gamma}_c)$ s různými okrajovými podmínkami. Na Γ_u je předepsáno nulové posunutí, na Γ_p je dáno plošné zatížení a na části Γ_c dochází ke kontaktu, tj. působí zde tření a platí podmínky nepronikání. Chování kostky popisuje Lamého rovnice. Její diskretizací metodou konečných prvků dostaneme symetrickou pozitivně definitní matici tuhosti $K \in \mathbb{R}^{3n_c \times 3n_c}$ a vektor zatížení $f \in \mathbb{R}^{3n_c}$. Navíc dostaneme matice $N, T_1, T_2 \in \mathbb{R}^{m \times 3n_c}$ s plnou hodností, které projektují posunutí v kontaktních uzlech na normálové a tečné směry. Podrobnosti lze najít v [1].

Úlohu lze převést na duální úlohu v napětích na kontaktní hranici. V případě úlohy s daným třením se problém redukuje na optimalizační úlohu (1), kde $A = BK^{-1}B^\top$, $b = BK^{-1}f$, $B = \left(N^\top, T_1^\top, T_2^\top\right)^\top \in \mathbb{R}^{3m \times 3n_c}$, $l = 0$ a $g_i \geqslant 0$. Neznámé x_1 resp. x_2, x_3 zde reprezentují normálová resp. tečná napětí na kontaktní hranici.

3.2 Vnitřní řešič užívající tzv. rozšířenou matici

V metodě sledování cesty musíme opakovaně řešit lineární systém (8) s Jakobiho maticí $J(x, \nu, z)$. Tuto soustavu lze eliminací z převést na soustavu s tzv. **rozšířenou maticí** $J_A = J_A(x, \nu)$, kterou lze psát ve tvaru

$$J_A = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \left(\begin{array}{ccc|cc} 0 & 0 & 0 & -I & 0 \\ 0 & 2M & 0 & 0 & 2X_2 \\ 0 & 0 & 2M & 0 & 2X_3 \\ \hline -I & 0 & 0 & -\Lambda^{-1}S & 0 \\ 0 & 2X_2 & 2X_3 & 0 & -M^{-1}D \end{array}\right). \tag{9}$$

Soustavu s rozšířenou maticí řešíme metodou konjugovaných gradientů, jejíž výhodou je, že nepotřebujeme matici J_A přímo sestavovat. Stačí umět vypočítat součin matice J_A s vektorem, k čemuž využijeme rozklad J_A na součet (9). To nám umožní násobit oba sčítance zvlášť a vyhnout se sestavování matice $A = BK^{-1}B^\top$. Jelikož matice J_A je symetrická, regulární ale indefinitní, nelze použít metodu konjugovaných gradientů přímo, ale je nutné použít vhodné předpodmínění, např. tzv. indefinitní předpodmínění (viz. [2]). Různým způsobem aproximace matice A jsme získali tři předpodmínění tohoto typu.

3.3 Vnitřní řešič užívající tzv. normální matici

Jakobiho matici $J(x, \nu, z)$ je možné převést eliminací ν a z i na tzv. **normální matici** $J_{SC} = J_{SC}(x)$, kterou lze také zapsat ve tvaru součtu

$$J_{SC} = A + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2M & 0 \\ 0 & 0 & 2M \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S^{-1}\Lambda & 0 & 0 \\ 0 & 4X_2D^{-1}MX_2 & 4X_2D^{-1}MX_3 \\ 0 & 4X_3D^{-1}MX_2 & 4X_3D^{-1}MX_3 \end{pmatrix}.$$

Je zřejmé, že matice J_{SC} je pozitivně definitní pro libovolné $\nu > 0$ a $z > 0$, takže metoda konjugovaných gradientů může počítat i bez předpodmínění. Pro zajištění její efektivity je ovšem třeba předpodmínění použít.

3.4 Numerické testy

Numerické testy jsme prováděli na počítači se čtyřjádrovým procesorem Core i7 (2.8 GHz) a se 4GB paměti. V testu jsme porovnávali výpočet užívající normální matici a tři výpočty užívající rozšířenou matici, které se lišily způsobem předpodmínění. Hodnoty parametrů byly nastaveny následovně: $\delta = 0.9$, $\omega = 0.01$, $\sigma = 0.001$ a hodnota parametru β byla vypočtena na základě počátečního řešení následovně

$$\beta = 10^7 \cdot \max\{\|\nabla_x \mathcal{L}(x^0, \nu^0)\|/\vartheta^0, \|\nabla_\nu \mathcal{L}(x^0, \nu^0) + z^0\|/\vartheta^0\}$$

Výpočetní časy a celkové počty vnitřních iterací pro různé metody jsou v tabulce. Testovány byly různé úlohy lišící se počtem proměnných v primární a duální formulaci kontaktní úlohy v závislosti na diskretizaci.

ROZMĚRY PRIM./DUÁL.	NORMÁLNÍ MATICE		ROZŠÍŘENÁ MATICE					
			PŘEDPOD. 1		PŘEDPOD. 2		PŘEDPOD. 3	
$3n/3m$	*čas*	*iter*	*čas*	*iter*	*čas*	*iter*	*čas*	*iter*
36/18	0.44	237	0.09	106	0.14	106	0.20	87
162/54	0.16	153	0.2	148	0.22	140	0.19	88
900/180	0.51	166	0.55	108	0.60	108	0.51	86
2646/378	5.68	390	2.6	115	2.7	115	2.2	91
5832/648	29.9	621	8.03	109	8.3	107	7.4	97
10890/990	120.7	908	21.4	95	23.3	106	22.2	100
18252/1404	659.9	1944	54.8	92	55.2	92	57.3	99
28350/1890	1359	1974	114	94	117	94	126	113
41616/2448	2144	1599	230	97	229	97	246	114

Závěr: Z tabulky je zřejmé, že výpočet s rozšířenou maticí a všemi třemi způsoby indefinitního předpodmínění funguje velmi efektivně. Výpočet s normální maticí funguje hůře, neboť je mnohem citlivější na špatnou podmíněnost Jakobiho matic, když se řešení blíží k optimálnímu řešení. Vhodnější předpodmínění by ovšem mohlo tuto efektivitu zvýšit.

Literatura

[1] Haslinger J, Dostál Z., Kučera R.: *An algorithm for the numerical realization of 3D contact problems with Coulomb frictions*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 164-165, 2004, pp. 387-408

[2] L. Lukšan, C. Matonoha, J. Vlček: Interior point methods for large-scale nonlinear programming. TR No. 917, Academy of Sciences of the Czech Republic 2004.

[3] Nocedal J., Wright S. J.: *Numerical Optimization*, Springer-Verlag, New York, 1999

[4] Wright S. J.: *Primal-dual interior-point methods*, SIAM, 1997