Sujet de thèse de doctorat

Titre : Résolution numérique fiable des systèmes d'équations polynomiales

Mots-clefs : algorithmes symboliques-numériques ; calcul fiable ; systèmes polynomiaux.

Contacts

Joris van der Hoeven <vdhoeven@lix.polytechnique.fr>
Grégoire Lecerf <lecerf@lix.polytechnique.fr>

Adresse

Laboratoire d'informatique de l'École polytechnique, LIX, UMR 7161 CNRS
Campus de l'École polytechnique, Bâtiment Alan Turing, CS35003
1, rue Honoré d'Estienne d'Orves
91120 Palaiseau, France

Directeur du laboratoire : M. Gilles Schaeffer (schaeffe@lix.polytechnique.fr)

Équipe d'accueil : MAX, Modélisation algébrique et calcul symbolique

Nous recherchons d'excellents candidats dotés d'une solide formation en mathématiques et en informatique. Le candidat doit être familier avec au moins une de thématiques suivantes : les algorithmes élémentaires en calcul formel, les principes du calcul haute performance, les bases de la géométrie algébrique.

Description

Tant en calcul formel qu'en analyse numérique, la résolution des systèmes d'équations polynomiales est un problème central. En calcul formel, ce problème est souvent abordé à l'aide de techniques dites de réécriture, telles que les bases de Gröbner ou les chaînes régulières. En analyse numérique, l'une des méthodes les plus efficaces utilise des déformations. L'idée est assez simple et fonctionne comme suit.

À partir d'un système d'entrée, on construit d'abord un système « plus simple » avec les « mêmes caractéristiques ». Par exemple, pour le système

$$\begin{cases} P_1(x,y) &= x^2-y^2+x+3=0 \\ P_2(x,y) &= x^2+2xy+7y^2-8y+2=0, \end{cases} \tag{1}$$

on peut prendre

$$\begin{cases} Q_1(x,y) &= x^2-\alpha_1=0 \qquad (\alpha_1=1+\mathrm{i}) \\ Q_2(x,y) &= y^2-\alpha_2=0 \qquad (\alpha_2=2-\mathrm{i}) \end{cases} \tag{2}$$

comme système plus simple. Les deux systèmes ont des caractéristiques proches dans le sens où $\deg Q_1 = \deg P_1 = 2$ et $\deg Q_2 = \deg P_2 = 2$. De ce fait on s'attend à ce qu'ils aient le même nombre de solutions. Par construction, les solutions $(x,y) \in \{(\sqrt{\alpha_1}, \sqrt{\alpha_2}), (\sqrt{\alpha_1}, -\sqrt{\alpha_2}), (-\sqrt{\alpha_1}, \sqrt{\alpha_2}), (-\sqrt{\alpha_1}, -\sqrt{\alpha_2})\}$ de (2) sont faciles à obtenir. L'idée principale est maintenant de déformer en continu le deuxième système en le premier système en utilisant l'homotopie suivante :

$$\begin{cases} H_1^t(x,y) &= (1-t)\,P_1(x,y)+t\,Q_1(x,y)=0 \\ H_2^t(x,y) &= (1-t)\,P_2(x,y)+t\,Q_2(x,y)=0. \end{cases} \tag{3}$$

En fait, à $t = 1$ et $t = 0$, le système (3) n'est autre que (2) et (1), respectivement. Afin d'obtenir les solutions de (1), il suffit ainsi de suivre les solutions de (3) depuis $t = 1$ jusque $t = 0$, en utilisant une méthode numérique standard. Par exemple, partir d'une solution approchée de (1) au temps $t = t_0$, on peut obtenir une solution approchée pour le temps $t = t_0 + \delta$ en appliquant la méthode de Newton sur l'approximation à $t = t_0$. Il est bien sûr possible de concevoir des méthodes d'ordre supérieur (e.g. de type Euler), qui permettent d'utiliser un pas δ plus grand.

Contexte

Il existe une abondante littérature sur les homotopies numériques [1, 3, 4, 20, 22]. Les problèmes pratiques ne sont généralement pas génériques, ce qui signifie qu'il peut y avoir plusieurs solutions ou trajectoires de solution $z(t)$ qui partent à l'infini (c'est-à-dire qu'il y a moins de solutions isolées que prévu par la borne de Bézout). Les stratégies spéciales, appelées phases finales (*end game*, en anglais), doivent être utilisées à proximité du point de référence pour faire face à des solutions multiples. Les trajectoires de solution qui partent à l'infini se produisent généralement pour les systèmes creux, lorsque les supports du polynôme P_k sont spéciaux. Des raffinements de la borne de Bézout existent pour cette situation et des déformations spéciales peuvent être construites afin de préserver les propriétés de support et le nombre de solutions prévus par cette limite affinée. Enfin, il existe plusieurs techniques pour certifier les solutions numériques à $t = 0$ [7, 9, 14, 19] ou tout au long du chemin [2, 6, 9, 23].

Dans les cas favorables, les logiciels existants pour les homotopies numériques [1, 5, 16, 17, 21] sont beaucoup plus rapides que les logiciels symboliques pour le calcul des bases de Gröbner. Cependant, beaucoup de choses peuvent mal tourner pendant le suivi numérique des trajectoires : il peut y avoir des singularités sur ou à proximité des chemins, des phases finales pour des multiplicités élevées peuvent entraîner une pénalité de performance importante, la précision de calcul peut être insuffisante, le conditionnement numérique pourrait être mauvais, etc. Les logiciels existants nécessitent généralement un réglage manuel des paramètres internes afin de traiter les exemples les plus intéressants.

Dans le cadre du projet ERC ODELIX (qui finance cette proposition de thèse), nous nous intéressons aux systèmes polynomiaux vérifiés par des coefficients de séries formelles tronquées, et solutions d'équations différentielles. De tels systèmes ont une structure spéciale que nous souhaitons mieux comprendre et exploiter.

Méthodologie

La thèse commencera par rassembler la littérature récente sur la résolution numérique des systèmes polynomiaux, ainsi que les principales implantations logicielles. Nous nous concentrerons sur le cas des systèmes homogènes carrés avec des solutions régulières. Plus précisément, en s'appuyant sur [9], la question théorique suivante sera abordée : comment réaliser des suivis de trajectoires fiables de la manière la plus efficace possible ?

La deuxième partie de la thèse sera consacrée à des solutions non régulières (quelles sont les méthodes les plus efficaces pour calculer numériquement des zéros multiples et les certifier ?) et aux systèmes issus d'équations différentielles (comment exploiter cette structure particulière et que devient la complexité des méthodes d'homotopie pour cette application ?).

La partie pratique de la thèse concerne l'implémentation logicielle de méthodes d'homotopie fiables. L'implémentation se fera sous forme d'une bibliothèque dédiée, librement distribuée sous la licence publique générale GNU. Plusieurs outils pour l'arithmétique fiable sont déjà disponibles dans MATHEMAGIX [8, 12, 15], qui peuvent potentiellement être utilisés pour ce travail d'implémentation.

Plus précisément, dans le cadre de cette implantation, nous prévoyons de travailler sur les problèmes suivants :

- Développement d'algorithmes pour l'évaluation efficace des polynômes d'entrée pour divers types de données numériques et fiables, éventuellement en utilisant la génération automatique de code et la compilation à la volée.

- Mise en œuvre de types de données supplémentaires et fiables pour la certification efficace des étapes d'homotopie numérique, telles que des modèles de Taylor [18] et l'arithmétique de boules [11].

- Mise au point de solveurs par homotopie multi-threads.

- Faire en sorte que les solveurs par homotopie bénéficient d'instructions vectorielles matérielles SIMD (Single Instruction Multiple Data) en utilisant potentiellement les outils existants dans le système MATHEMAGIX [10, 13].

Résultats attendus

En ce qui concerne la partie théorique, un premier article sera consacré à un nouvel algorithme pour la résolution fiable de systèmes carrés homogènes avec des solutions régulières, ainsi qu'un prototype de logiciel : la complexité sera étudiée en terme de nombres de conditionnement et ne devrait pas dépasser les limites les plus défavorables prouvées par Shub et Smale.

D'autres articles théorique porteront sur des solutions multiples et en grappes et/ou des systèmes issus des équations différentielles. Les articles théoriques seront soumis à des revues ou conférences en algèbre appliquée ou en informatique.

La composante pratique de la thèse sera un solveur de haut niveau qui sélectionnera automatiquement la ou les méthodes de bas niveau les plus efficaces pour résoudre le problème spécifique en entrée. En particulier, il ne devra pas nécessiter de réglage manuel des paramètres ou supposer que nous sommes effectivement dans une zone où la validité numérique est garantie. En outre, il devrait rivaliser avec les meilleures implantations purement numériques. Cette bibliothèque logicielle sera présentée dans un journal à large audience comme *ACM Transactions on Mathematical Software*.

Bibliographie

[1] D. J. Bates, J. D. Hauenstein, A. J. Sommese, et C. W. Wampler. *Numerically Solving Polynomial Systems with Bertini*. SIAM, 2013.

[2] C. Beltrán et A. Leykin. Robust certified numerical homotopy tracking. *Found. Comput. Math.*, 13(2):253–295, 2013.

[3] C. Beltrán et L. M. Pardo. Fast linear homotopy to find approximate zeros of polynomial systems. *Found. Comput. Math.*, 11:95–129, 2011.

[4] L. Blum, F. Cucker, M. Shub, et S. Smale. *Complexity and real computation*. Springer-Verlag, New York, 1998.

[5] P. Breiding et S. Timme. Homotopycontinuation.jl: a package for homotopy continuation in Julia. Dans *International Congress on Mathematical Software*, pages 458–465. Springer, 2018.

[6] J. D. Hauenstein, I. Haywood, et A. C. Liddell. An *a posteriori* certification algorithm for Newton homotopies. Dans *Proc. ISSAC '14*, ISSAC '14, pages 248–255. New York, NY, USA, jul 2014. ACM.

[7] J. D. Hauenstein et F. Sottile. Algorithm 921: AlphaCertified: certifying solutions to polynomial systems. *ACM Trans. Math. Softw.*, 38(4):28–1, 2012.

[8] J. van der Hoeven. *Journées Nationales de Calcul Formel (2011)*, volume 2 de *Les cours du CIRM*, chapitre Calcul analytique. CEDRAM, 2011. Exp. No. 4, 85 pages, http://ccirm.cedram.org/ccirm-bin/fitem?id=CCIRM_2011__2_1_A4_0.

[9] J. van der Hoeven. Reliable homotopy continuation. Technical Report, HAL, 2011. http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00589948.

[10] J. van der Hoeven et G. Lecerf. Faster FFTs in medium precision. Dans *22nd IEEE Symposium on Computer Arithmetic (ARITH)*, pages 75–82. June 2015.

[11] J. van der Hoeven et G. Lecerf. Evaluating straight-line programs over balls. Dans P. Montuschi, M. Schulte, J. Hormigo, S. Oberman, et N. Revol, éditeurs, *2016 IEEE 23nd Symposium on Computer Arithmetic*, pages 142–149. IEEE, 2016.

[12] J. van der Hoeven, G. Lecerf, B. Mourain, Ph. Trébuchet, J. Berthomieu, D. Diatta, et A. Mantzaflaris. Mathemagix, the quest of modularity and efficiency for symbolic and certified numeric computation. *ACM SIGSAM Communications in Computer Algebra*, 177(3), 2011.

[13] J. van der Hoeven, G. Lecerf, et G. Quintin. Modular SIMD arithmetic in Mathemagix. *ACM Trans. Math. Softw.*, 43(1):5–1, 2016.

[14] R. Krawczyk. Newton-algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehler-schranken. *Computing*, 4:187–201, 1969.

[15] G. Lecerf. Mathemagix: towards large scale programming for symbolic and certified numeric computations. Dans K. Fukuda, J. van der Hoeven, M. Joswig, et N. Takayama, éditeurs, *Mathematical Software - ICMS 2010, Third International Congress on Mathematical Software, Kobe, Japan, September 13-17, 2010*, volume 6327 de *Lecture Notes in Computer Science*, pages 329–332. Springer, 2010.

[16] T.-L. Lee, T.-Y. Li, et C.-H. Tsai. Hom4ps-2.0: a software package for solving polynomial systems by the polyhedral homotopy continuation method. *Computing*, 83(2):109–133, 2008.

[17] A. Leykin. Polynomial homotopy continuation in Macaulay2. *ACM Communications in Computer Algebra*, 50(3):113–116, 2016.

[18] K. Makino et M. Berz. Remainder differential algebras and their applications. Dans *Computational differentiation: techniques, applications and tools*, pages 63–74. SIAM, Philadelphia, 1996.

[19] S. M. Rump. *Kleine Fehlerschranken bei Matrixproblemen*. PhD thesis, Universität Karlsruhe, 1980.

[20] A. J. Sommese et C. W. Wampler. *The Numerical Solution of Systems of Polynomials Arising in Engineering and Science*. World Scientific, 2005.

[21] J. Verschelde. Algorithm 795: PHCPACK: A general-purpose solver for polynomial systems by homotopy continuation. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 25(2):251–276, 1999.

[22] J. Verschelde. PHCpack: a general-purpose solver for polynomial systems by homotopy continuation. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 25(2):251–276, 1999. Algorithm 795.

[23] J. Xu, M. Burr, et C. Yap. An approach for certifying homotopy continuation paths: univariate case. Dans *Proc. ISSAC '18*, ISSAC '18, pages 399–406. New York, NY, USA, jul 2018. ACM.