代数方程式系の数値解を求めるためのソフトウェア(PHoM)の紹介

東京工業大学　数理・計算科学専攻
武田朗子

共同研究:　郡司貴之, 小島政和, 水谷友彦　(東工大)
Sunyoung Kim　(Ewha Univ.)
藤澤克樹　(東京電機大)

[Huber & Sturmfels 95]

Polyhedral Homotopy Method を用いて
代数方程式系の孤立解 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ を求める

n 個の変数を持つ n 本の代数方程式

$$P(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} p_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ \cdots \\ p_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \end{cases}$$

$$P(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{C}^n$$

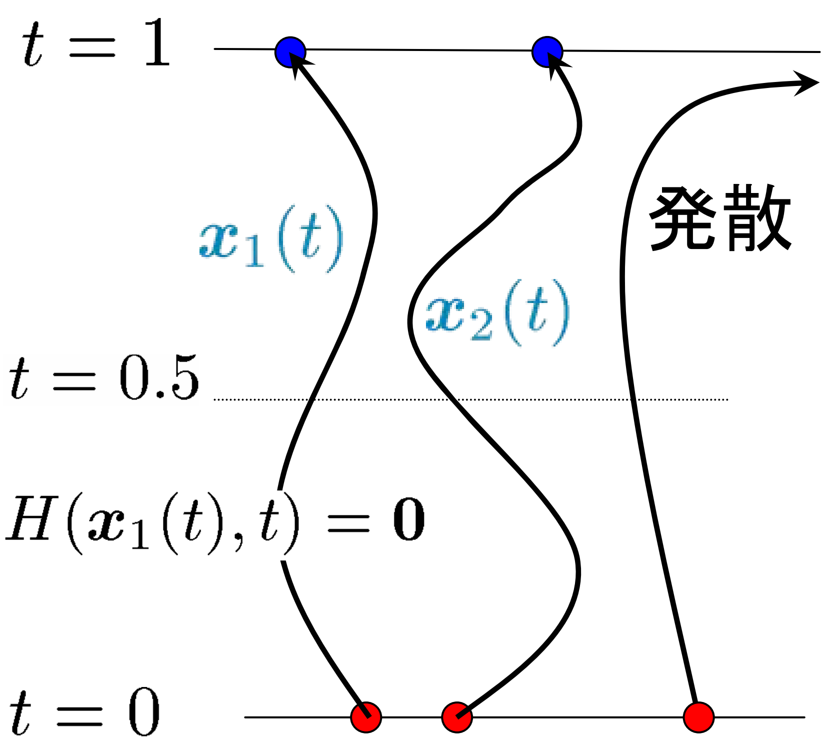
例えば…

$$p_i(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 - (2.1 + i)x_1 x_2 x_3^2 + 8.5$$

ホモトピー法

Phase 1:　ホモトピー関数 $H(x,t)$ を構築

Phase 2:　ホモトピーパスを追う



$H(\boldsymbol{x},1)=P(\boldsymbol{x})=\mathbf{0}$

解きたい系の解

$P(\boldsymbol{x})=\mathbf{0}$ の孤立解の数

$\leqq H(\boldsymbol{x},0)=\mathbf{0}$ の初期解の数

初期システムの解

$H(\boldsymbol{x},0)=\mathbf{0}$

Polyhedral Homotopy Method

[Huber & Sturmfels 95]

古くからのホモトピー法 (Linear Homotopy) に比べて

- $H(x,t)$ の構築に時間がかかる

Phase 1 の計算時間 : 大

- ホモトピーパスの数が少ない

= 初期解の数

Phase 2 の計算時間 : 小

$P(x) = \mathbf{0}$ の解の数 $\leqq$ 初期解の数 = $P(x)$の混合体積

Bernsteinの定理 [Bernshtein '75]

Polyhedral Homotopy Methodのソフトウェア

Phase 1 & 2 のソフトウェア:

PHCpack [Verschelde 99], HOM4PS [Gao, Li & Li 02], PHoM [Gunji et al. 04]

Phase 1 のソフトウェア:

mvol [Li & Li 01], MixedVol [Gao & Li 05], DEMiCs [Mizutani & Takeda 07]

PHoM

Phase 1

$H(x,t)$ の構築

(武田,水谷)

DEMiCs

Phase 2

パスを追う

(Kim,小島)

並列計算

(郡司,藤澤)

PHoMの特徴

我々のグループで蓄積された最適化研究を活用

- ホモトピー関数構築 (Phase 1) のために
  沢山の線形計画問題を解く必要あり

- predictor-corrector法によるパス追跡 (Phase 2)

- PCクラスタによる並列計算

Phase 1は他ソフトウェアに比べてかなり速くなった
→ DEMiCsとして公開準備中

PHoMによる計算時間

master

Problem	#workers	計算時間 (s)			ratio
		Phase 1	Phase 2	Total	
Eco-14	1	13,620	9,033	22,653	1.0
	10	1,383	909	2,292	9.9
	20	718	460	1,178	19.2
	40	388	238	626	36.2
Katsura-11	1	637	3,923	4,550	1.0
	10	87	395	482	10.0
	20	68	211	279	19.6
	40	58	102	160	34.9

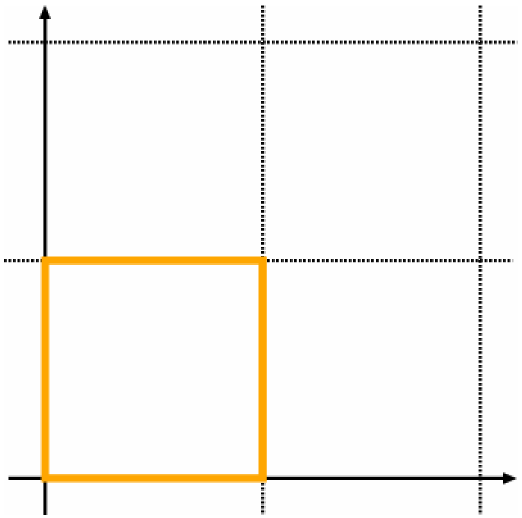
13,620s = 3h47m
DEMiCsでは
Eco-18....19m31s

637s = 10m37s
DEMiCsでは
Katsura-13....7m37s

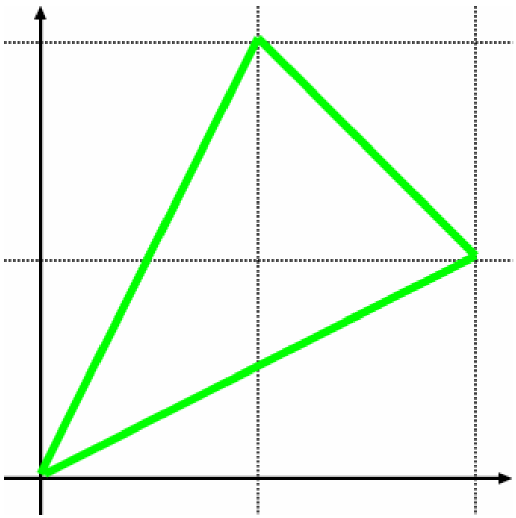
PCクラスタ（AMD Athlon 2.0GHz）, グリッドRPCシステム Ninf を使用

ホモトピー関数の構築 1/3

$$
\begin{aligned}
p_1 &= c_{11}x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_1x_2 + c_{14} = 0 \\
p_2 &= c_{21}x_1^2x_2 + c_{22}x_1x_2^2 + c_{23} = 0
\end{aligned}
$$



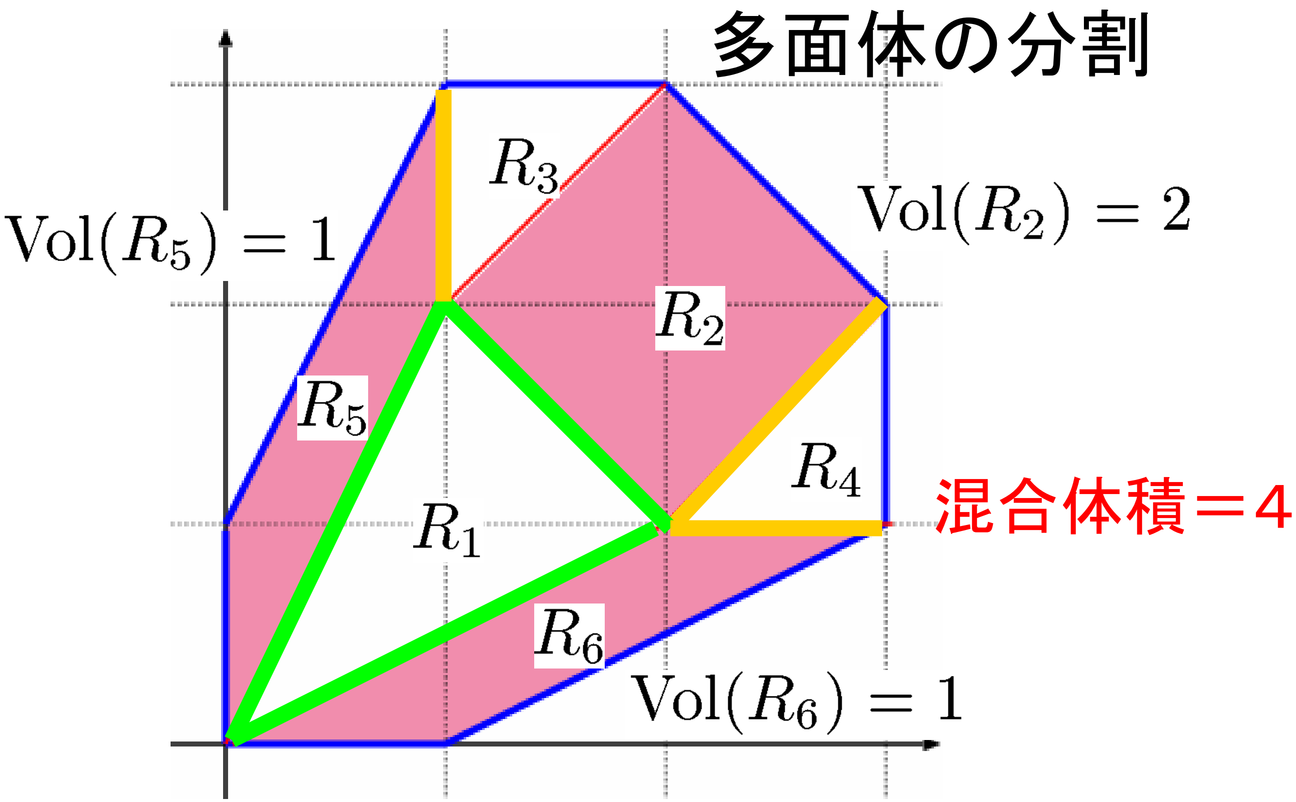
$P_1 = \mathrm{conv}(S_1)$

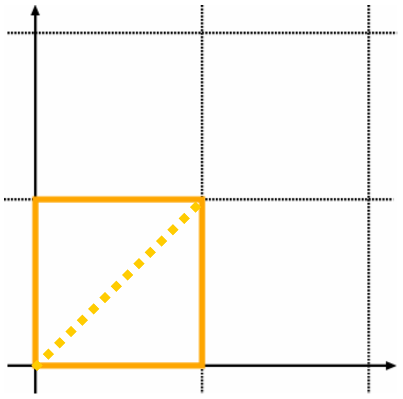


$P_2 = \mathrm{conv}(S_2)$

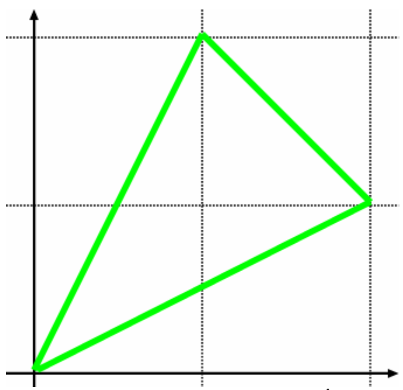
$$S_1 = \left\{ \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix} \right\} \quad S_2 = \left\{ \begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix} \right\}$$

ホモトピー関数の構築 2/3





$P_1 = \mathrm{conv}(S_1)$



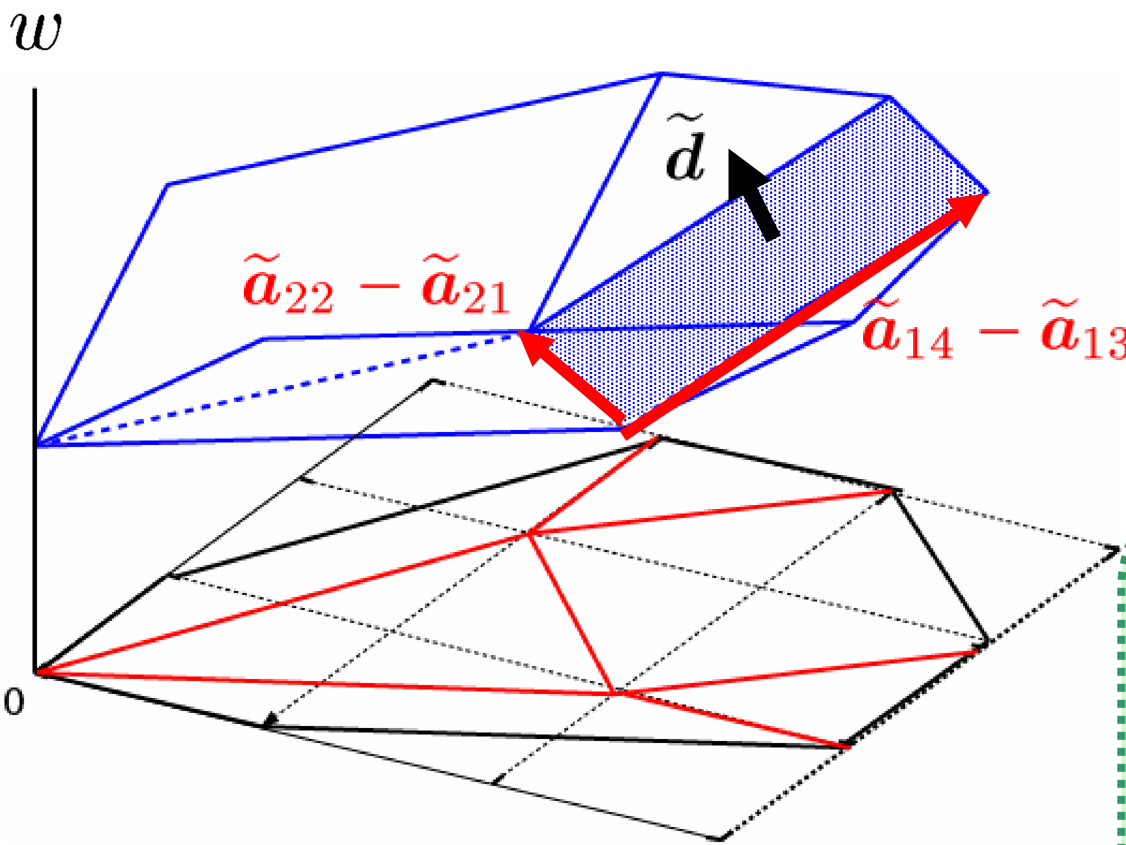
$P_2 = \mathrm{conv}(S_2)$

Minkowski和： $P = P_1 + P_2$

ホモトピー関数構築に貢献するのは R_2, R_5, R_6

これらを列挙したい！

ホモトピー関数の構築 3/3



$\widetilde{P}$ の下側の面が
Pの分割を与える

$\widetilde{P} = \widetilde{P}_1 + \widetilde{P}_2$

リフティング

$$
\begin{aligned}
(\widetilde{a}_{14} - \widetilde{a}_{13})^\top \widetilde{d} &= 0 \\
(\widetilde{a}_{11} - \widetilde{a}_{13})^\top \widetilde{d} &> 0 \\
(\widetilde{a}_{12} - \widetilde{a}_{13})^\top \widetilde{d} &> 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(\widetilde{a}_{22} - \widetilde{a}_{21})^\top \widetilde{d} &= 0 \\
(\widetilde{a}_{23} - \widetilde{a}_{21})^\top \widetilde{d} &> 0
\end{aligned}
$$

を満たす $\widetilde{d}$ が存在する

Polyhedral Homotopies

\# 1st poly.の項 = 4, # 2nd poly.の項 = 3

$$\{k_1, k_2\} = \{3, 4\}, \quad \{\ell_1, \ell_2\} = \{1, 2\}$$

$$\begin{cases} (\widetilde{\boldsymbol{a}}_{14} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{13})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} = 0 \\ (\widetilde{\boldsymbol{a}}_{11} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{13})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} > 0, \quad (\widetilde{\boldsymbol{a}}_{12} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{13})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} > 0 \\ \\ (\widetilde{\boldsymbol{a}}_{22} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{21})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} = 0 \\ (\widetilde{\boldsymbol{a}}_{23} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{21})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} > 0 \end{cases}$$

⇩ この系を満たす解 $\widetilde{\boldsymbol{d}}$ が存在

$$\boxed{t^{(\widetilde{\boldsymbol{a}}_{14} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{13})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}}} = t^0 = 1}$$

ホモトピー $H(\boldsymbol{x}, t) =$

$$\begin{pmatrix} c_{11}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_{11}} t^{(\widetilde{\boldsymbol{a}}_{11} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{13})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}}} & + c_{12}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_{12}} t^{(\widetilde{\boldsymbol{a}}_{12} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{13})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}}} & + c_{13}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_{13}} + c_{14}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_{14}} \\ c_{21}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_{21}} & + c_{22}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_{22}} & + c_{23}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_{23}} t^{(\widetilde{\boldsymbol{a}}_{23} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{21})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}}} \end{pmatrix}$$

Phase 1に必要な計算

✓ペアの組を選ぶ $\{k_1, k_2\} \subseteq \{1, \ldots, 4\}$, $\{\ell_1, \ell_2\} \subseteq \{1, 2, 3\}$

✓ $\{k_1, k_2\}$, $\{\ell_1, \ell_2\}$ について**実行可能性テスト**を行う

${}_4C_2 \times {}_3C_2 = 18$ の実行可能性テストは必要？ ➡ NO!

$\{k_1, k_2\}$と $\{\ell_1, \ell_2\}$のあらゆる組み合わせ

✓Dynamic enumeration ➡ 実行可能性テスト回数↓

✓最適解 $\tilde{d}$ の使いまわし ➡ テストにかかる計算コスト↓

実行可能性テスト

\# 1^{st} poly. の項 = 4
\# 2^{nd} poly.の項 = 3

(★)

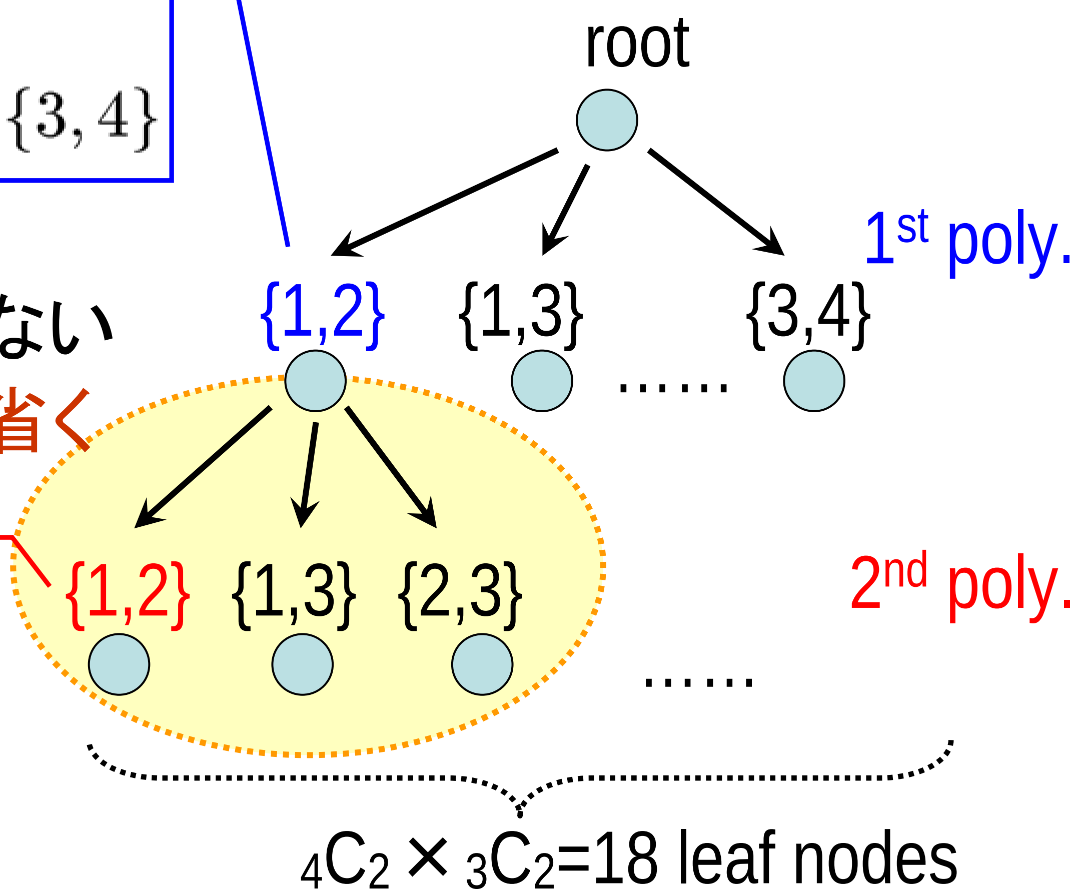
$$\begin{aligned}(\widetilde{\boldsymbol{a}}_{12} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{11})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} &= 0\\ (\widetilde{\boldsymbol{a}}_{1i} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{11})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} &\geq 0, \quad i \in \{3, 4\}\end{aligned}$$

(★)の解 $\tilde{d}$ が存在しない

➡ 実行可能性テストを省く

(★)

$$\begin{aligned}(\widetilde{\boldsymbol{a}}_{22} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{21})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} &= 0\\ (\widetilde{\boldsymbol{a}}_{23} - \widetilde{\boldsymbol{a}}_{21})^\top \widetilde{\boldsymbol{d}} &\geq 0\end{aligned}$$



$\{k_1, k_2\}$と$\{\ell_1, \ell_2\}$ のあらゆる組み合わせ

Static Enumeration Tree

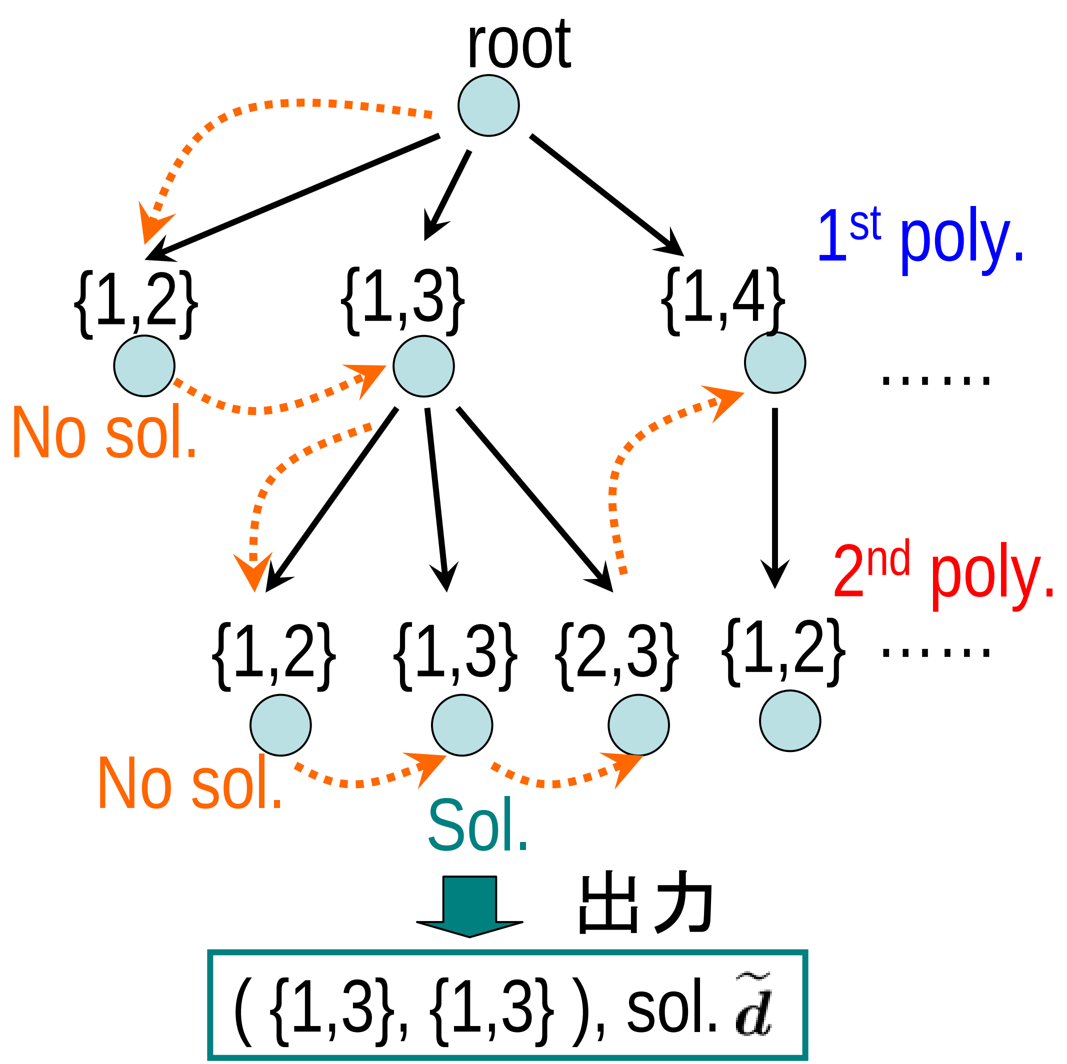
MixedVol [Gao & Li 05]

- ✓ Relation table
- ✓ 1-point test

前もって
木構造を決める

木のレベル
(方程式の順番)に注目

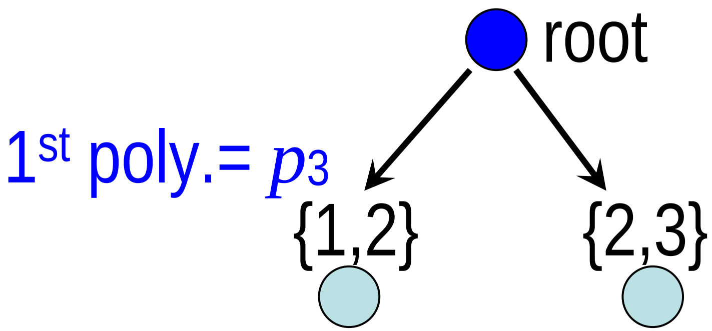
→ Dynamic enumeration



Dynamic Enumeration

$\# p_1$ の項 = 4
$\# p_2$ の項 = 4
$\# p_3$ の項 = 3

各方程式に対して
実行可能なノード数を調べる



Dynamic Enumeration Tree

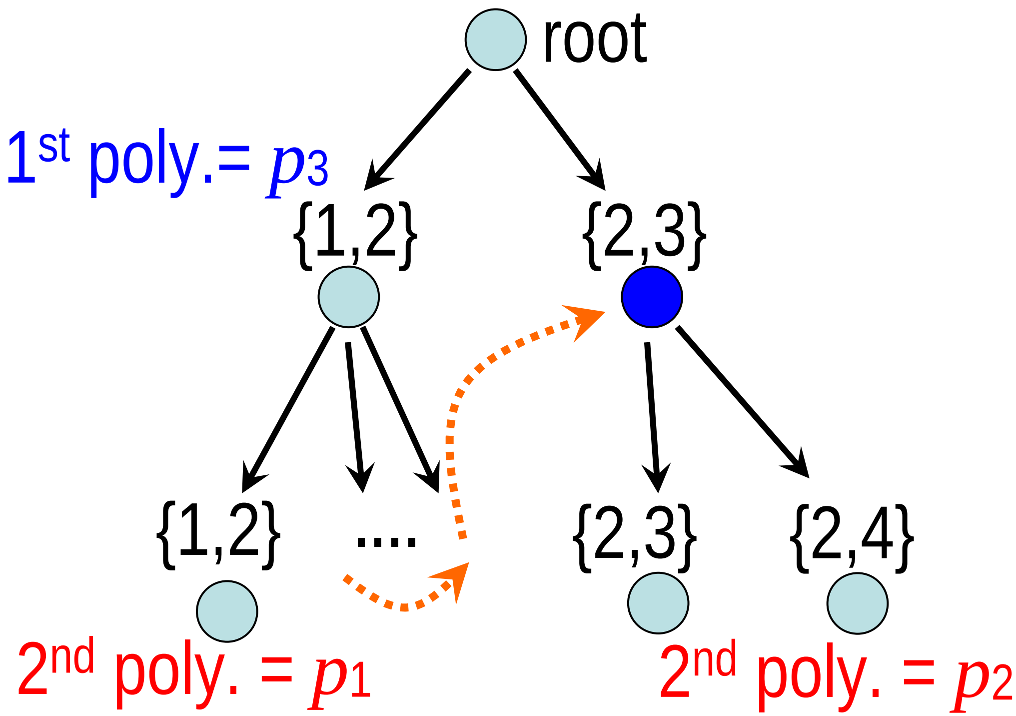
✓1st poly = p_1
→ {1,2}, {1,4}, ….., {3,4}
実行可能なノード数 = 4

✓1st poly = p_2
→ {1,2}, {1,3}, ….., {2,4}
実行可能なノード数 = 5

✓1st poly = p_3
→ {1,2}, {2,3}
実行可能なノード数 = 2

Dynamic Enumeration

各方程式に対して
実行可能なノード数を調べる



Dynamic Enumeration Tree

\# p_1 の項 = 4
\# p_2 の項 = 4
\# p_3 の項 = 3

$$(\tilde{\boldsymbol{a}}_{33} - \tilde{\boldsymbol{a}}_{32})^\top \tilde{\boldsymbol{d}} = 0$$
$$(\tilde{\boldsymbol{a}}_{31} - \tilde{\boldsymbol{a}}_{32})^\top \tilde{\boldsymbol{d}} \geq 0$$

この制約のもとで...

✓2nd poly = p_1

➡ {1,2}, {1,4}, {3,4}

実行可能なノード数 = 3

✓2nd poly = p_2

➡ {2,3}, {2,4}

実行可能なノード数 = 2

DEMiCsによる計算結果

Problem	Phase1	MixedVol (M)	DEMiCs (D)	M/D
Cyclic-12	44m 41s	4m 43s	1m 9s	4.1
Cyclic-13	9h 30m 26s	49m 57s	10m 55s	4.6
Cyclic-14	--	7h 14m 24s	1h 36m 37s	4.5
Katsura-12	25m 30s	14m 4s	1m 4s	13.2
Katsura-13	1h 54m 14s	1h 21m 19s	7m 37s	10.7
Katsura-14	11h 7m 25s	7h 54m 29s	37m 22s	12.7
Noon-15	2h 13m 6s	9m 41s	17s	34.2
Noon-16	8h 41m 54s	33m 55s	1m 5s	31.3
Noon-17	--	2h 25m 21s	3m 13s	45.2

(CPU: Opteron 850 2.4GHz, Memory: 8GB)

MixedVol [Gao & Li 05]

これから

PHoMのさらなる発展を目指す！

- 手法の改良:
  ホモトピー関数構築 (Phase 1) は充分に速い
  これから、パス追跡 (Phase 2)の改良

- 実装の改良:
  キャッシュメモリ、多倍長計算

- 使い勝手の改良:
  インターフェースの改良
  Online Solver、グリッドポータルシステム など…