ИНТЕРВАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ОГРАНИЧЕНИЙ
МКВМ-2004 РАБОЧИЕ СОВЕЩАНИЯ С. 231–239

Средство для решения полиномиальных ограничений в решателе Sibcalc

П.В. Манкевич*

Введение

Многие приложения в науке и технике требуют нахождения всех изолированных решений системы полиномиальных ограничений (СПО) на множестве вещественных чисел. В частности, многие механические системы, включающие в себя почти всех роботов-манипуляторов, описываются множеством состояний, заданным некоторой СПО. Это справедливо для любого механизма, состоящего из жестких конструкций, соединенных шарнирами. Поэтому решение СПО является центральным моментом при анализе движения механических систем и при их проектировании.

В последние два десятка лет появилось несколько методов нахождения всех изолированных корней полиномиальных систем, среди которых можно выделить интервальные методы [1–4], гомотопные методы (homotopic methods) [5], [6] и методы исключения (elimination methods) [7].

Недостатком методов исключения является их большая ресурсоемкость и зависимость от символьных вычислений [7], что делает их непригодными для решения больших полиномиальных систем.

Гомотопные методы непригодны для решения больших систем и систем ограничений большой степени в силу необходимости прохождения путей, число которых есть произведение степеней имеющихся ограничений.

Кроме указанных выше недостатков классических численных методов, их использование часто бывает неприемлемым по нескольким причинам, в том числе и из-за накопления ошибок округления. В частности, может случиться так, что накопленные ошибки округления приводят к тому, что ни одна из цифр полученного результата не будет значимой [1].

С другой стороны, интервальный подход позволяет получить гарантированное приближенное множество решений рассматриваемой проблемы [1]. В силу базовых свойств интервальных операций результирующий интервал каждой конкретной арифметической операции над интервалами содержит все возможные значения. Поэтому по окончании работы интервального метода полученный интервал всегда содержит истинное решение задачи. Если полученный интервал достаточно узкий, то он может рассматриваться как требуемое решение, в противном случае этот интервал может включать несколько решений и для их разделения может потребоваться разбиение результата на подынтервалы.

*Новосибирский государственный университет, mpv@ngs.ru.

Традиционные интервальные подходы, позволяя получить гарантированное решение, обычно работают медленнее своих численных аналогов. По этой причине все чаще создаются алгоритмы, объединяющие интервальные методы с другими подходами. Одной из наиболее успешных таких комбинаций для решения систем полиномиальных ограничений многих переменных является объединение одномерного интервального метода Ньютона с методами распространения ограничений [8].

В данной работе рассматривается реализация этого метода решения полиномиальных ограничений в решателе Sibcalc [9]. Статья организована следующим образом. Во второй главе описываются базовые понятия интервальной математики, дается понятие интервального расширения и приводятся основные определения из области распространения ограничений, необходимые для дальнейшего изложения. В следующей главе излагаются алгоритмы и методы решения поставленной задачи. Четвертая глава содержит описание численных экспериментов, в ней приводятся сравнительные результаты решения полиномиальных систем решателем Sibcalc и с помощью рассматриваемого подхода. В заключение подводятся итоги проделанной работы и описываются направления дальнейших работ.

1. Основные определения и понятия

Рассмотрим множество вещественных чисел расширенное двумя символами положительной и отрицательной бесконечности $R^\infty = R \cup \{-\infty, +\infty\}$. Также рассмотрим конечное подмножество F множества R^∞, содержащее $\pm\infty$ и 0. На практике множество F соответствует вещественным числам в машинном представлении.

Определение 1. Интервалом $[l, u]$, где l, $u \in F$ называется множество вещественных чисел $\{r \in R \mid l \leq r \leq u\}$.

Множество интервалов обозначается символом $I(R)$. Левый и правый концы интервала $I \in I(R)$ обозначаются как l и u: $I = [l, u]$. Символы $\in$, $\cup$, $\cap$, $\subset$ и т.п. понимаются в обычном теоретико-множественном смысле. Отношение порядка на множестве $I(R)$ определяется следующим образом: I_1 не превосходит I_2, если $I_1 \subseteq I_2$.

В дальнейшем вещественные числа будут обозначаться строчными латинскими буквами (x, y, z), интервалы – прописными (X, Y, Z).

Определение 2. Пусть множество $S \subset R$. Замыкание S – это наименьший интервал $I \in I(R)$, содержащий $S : S \subset I$. Замыкание объединения двух интервалов I_1 и I_2 обозначается как $I = I_1 \nabla I_2 : I_1 \cup I_2 \subset I$. Наименьший интервал, содержащий вещественное число x, обозначим как $\{x\}$.

Определение 3. Пусть I_1, $I_2 \in I(R)$. Тогда операции сложения, вычитания, умножения и деления задаются следующим образом:

$$I_1 + I_2 = \{x + y \mid x \in I_1,\ y \in I_2\},$$
$$I_1 - I_2 = \{x - y \mid x \in I_1,\ y \in I_2\},$$

$$I_1 \times I_2 = \{x \times y \mid x \in I_1,\ y \in I_2\},$$
$$I_1/I_2 = \{z \mid \exists x \in X,\ y \in Y:\ y \neq 0,\ z = x/y\}.$$

Заметим, что результатом деления интервалов может быть объединение двух интервалов:

$$\{1\}/\{x \mid x \leq 1\} = \{x \mid x < 0\} \cup \{x \mid 1 \leq x\}.$$

Определение 4. Пусть $I_1, \ldots, I_n, L_1, \ldots, L_m \in I(R)$. Тогда обобщенное пересечение

$$(I_1 \cup \ldots \cup I_n) \& (L_1 \cup \ldots \cup L_m) = (I_1 \cap L_1) \nabla \ldots \nabla (I_n \cap L_m).$$

Результат такой операции может быть точнее, чем операции вида

$$(I_1 \nabla \ldots \nabla I_n) \cap (L_1 \nabla \ldots \nabla L_m).$$

Например, если $I = [-5, -1], I_1 = [-\infty, -3], I_2 = [3, +\infty]$, то $I \& (I_1 \cup I_2) = [-5, -3]$, в то время как $I \cap (I_1 \nabla I_2) = [-5, -1]$, т.к. $I_1 \nabla I_2 = [-\infty, +\infty]$.

Определение 5. Функция $F : I(R)^n \to I(R)$ – это интервальное расширение функции $f : R^n \to R$, если и только если

$$\forall I_1, \ldots, I_n \in I(R) : r_1 \in I_1, \ldots, r_n \in I_n \Rightarrow\ f(r_1, \ldots, r_n) \in F(I_1, \ldots, I_n).$$

Интервальное отношение $C : I(R)^n \to \{\text{true}, \text{false}\}$ – это интервальное расширение отношения $c : R^n \to \{\text{true}, \text{false}\}$, если и только если

$$\forall I_1, \ldots, I_n \in I(R) : \{\exists r_1 \in I_1, \ldots, \exists r_n \in I_n c(r_1, \ldots, r_n)\} \Rightarrow C(I_1, \ldots, I_n).$$

Например, интервальная функция $\oplus$, определенная как

$$[a, b] \oplus [c, d] = [a + c, b + d]$$

есть интервальное расширение функции сложения вещественных чисел.

Естественное интервальное расширение вещественной функции f обозначается $\hat{f}$, отношения c обозначается $\hat{c}$. Данное интервальное расширение сохраняет ограничения в том виде, в котором их задает пользователь.

Другим интервальным расширением является дистрибутивное интервальное расширение, которое приводит ограничения к другой форме записи. Основным преимуществом этого расширения является то, что оно позволяет устанавливать совместность по брусам (см. п. 2), используя интервальный метод Ньютона для функций одной переменной.

Определение 6. Ограничение c находится в дистрибутивной форме, если оно представлено в виде суммы

$$m_1 + \ldots + m_k = 0,$$

где каждое слагаемое $m_i = q x_1^{e_1} \ldots x_n^{e_n}$, $q \in Q$, $e_i \in N$.

Определение 7. Распределенное интервальное расширение функции f – это естественное интервальное расширение ее дистрибутивной формы. Оно обозначается как $\tilde{f}$.

Еще одно интервальное расширение основано на разложении функции f в ряд Тейлора. Данное интервальное расширение имеет много важных свойств и исследовано многими авторами [8]. Это расширение предполагает наличие у функции непрерывных частных производных на некотором интервале.

Определение 8. Пусть ограничение c имеет вид $f(x) = 0$, f имеет непрерывные частные производные. $I = \langle I_1, \ldots, I_n \rangle$ – брус и $m_i = \mathrm{mid}(I_i)$ – центры соответствующих интервалов. Интервальное расширение Тейлора ограничения c на брусе I задается как интервальное ограничение вида

$$\hat{f}(m_1, \ldots, m_n) + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \hat{f}}{\partial x_i}(I_1, \ldots, I_n)(X_i - m_i) = 0.$$

Одним из преимуществ полиномиальных систем ограничений является их простое автоматическое дифференцирование. Это значит, что при усечении каждого из измерений исходного бруса можно воспользоваться простым и эффективным интервальным методом Ньютона.

В алгоритме, рассматриваемом в данной работе, используется комбинация интервальных методов и методов удовлетворения ограничений, основным понятием которых является понятие совместности. Например, при сужении каждого отдельного измерения используется одномерный метод Ньютона с применением условия совместности по брусам, которое является приближением условия совместности по дугам [10]. Нестрого говоря, ограничение $c(x_1, \ldots, x_n)$ совместно по дугам, если не одна из D_i областей определения переменных $x_1, \ldots, x_n$ не может быть больше сужена, используя проекции ограничения c. Ниже будут даны необходимые определения, используемые в методах распространения ограничений.

Определение 9. Проекция ограничения c – это пара ограничения c и индекса

$$i : \langle c, i \rangle, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Определение 10. Проекция ограничения $\langle c, i \rangle$ совместна по дугам в области $D_1 \times \ldots \times D_n$, если и только если

$$D_i = D_i \cap \{r_i \mid \exists r_1 \in D_1, \ \ldots, \ \exists r_{i-1} \in D_{i-1}, \ \exists r_{i+1} \in D_{i+1}, \ \ldots, \\ \exists r_n \in D_n : \ c(r_1, \ldots, r_n)\}.$$

Определение 11. Ограничение c совместно по дугам в области $D_1 \times \ldots \times D_n$, если каждая его проекция совместна в этой области. Система ограничений совместна в области $D_1 \times \ldots \times D_n$, если каждое ограничение совместно в данной области.

По некоторой начальной области $D_1 \times \ldots \times D_n$ алгоритм совместности по дугам вычисляет наибольшую подобласть начальной области, на которой все ограничения совместны. Такая подобласть всегда существует и единственна. Алгоритм совместности по дугам эффективен для решения дискретных комбинаторных задач. Тем не менее, условие совместности по дугам не может быть вычислено в общем случае на вещественных областях с полиномиальными ограничениями. [8]

Условие совместность по брусам является некоторой аппроксимацией совместности по дугам. Для начала введем понятие интервальной проекции ограничения.

Определение 12. Назовем интервальной проекцией ограничения $\langle C, i\rangle$ пару интервального ограничения C и индекса i $(i = 1, \ldots, n)$.

Определение 13. Интервальная проекция ограничения совместна по брусам на брусе $I = \langle I_1, \ldots, I_n\rangle$, если и только если

$$C\big(I_1, \ldots, I_{i-1}, [l, l^+], I_{i+1}, \ldots, I_n\big) \ \& \ C\big(I_1, \ldots, I_{i-1}, [u^-, u], I_{i+1}, \ldots, I_n\big),$$

где $l = \mathrm{left}(I_i), u = \mathrm{right}(I_i)$. Интервальное ограничение совместно по брусам на брусе I, если каждая из его интервальных проекций совместно по брусам на I. Система интервальных ограничений совместна по брусам на брусе I, если каждое интервальное ограничение совместно по брусам на I.

Определение 14. Пусть $\langle C, i\rangle$ интервальная проекция ограничения и $\langle I_1, \ldots, I_n\rangle$ – брус, тогда оператор сужения

$$\mathrm{Red}\big(\langle C, i\rangle, \langle I_1, \ldots, I_n\rangle\big) = \langle I_1, \ldots, I_{i-1}, I, I_{i+1}, \ldots, I_n\rangle, I \subset I_i$$

есть наибольшее подмножество, такое что интервальная проекция ограничения $\langle C, i\rangle$ совместна по брусам на брусе $\langle I_1, \ldots, I_{i-1}, I, I_{i+1}, \ldots, I_n\rangle$.

2. Описание подхода

В данной работе рассматривается задача нахождения всех изолированных решений системы полиномиальных ограничений

$$p_1(x_1, \ldots, x_n) = 0, \quad \ldots, \quad p_n(x_1, \ldots, x_n) = 0$$

в интервальном брусе $I = \langle I_1^0, \ldots, I_n^0\rangle$. Эта задача может быть рассмотрена в следующей форме: найти все брусы $I_1, \ldots, I_k$, удовлетворяющие системе вида

$$P_1(I) \ni 0, \quad \ldots, \quad P_n(I) \ni 0,$$

где P_i – интервальные расширения полиномов p_i, $i = 1, \ldots, n$.

Большинство интервальных методов представляют собой алгоритмы глобального поиска, состоящего из двух основных частей: усечения исходного бруса и разбиение его на два подбруса для дальнейшего их усечения.

Процедура Solve

Вход: S – система полиномиальных ограничений (интервальных расширений), I_0 – начальный брус.

Выход: Набор всех брусов удовлетворяющих системе.

Начало:
1. I =Prune(S, I_0) *! сузить интервал*
2. `if` (I – непустой) `then`
3. {`if` (I – достаточно мал) вернуть I}
4. `else`
   $\langle I_1, I_2\rangle$ =Branch(I) *! разбить брус на два подбруса*
   вернуть Solve$(S, I_1)\cup$Solve(S, I_2).

Конец.

Предложение 1. *Пусть C интервальное расширение ограничения c, $\langle C, i\rangle$ – интервальная проекция ограничения, $\langle I_1, \ldots, I_n\rangle$ брус и*

$$\langle I_1, \ldots, I_{i-1}, I, I_{i+1}, \ldots, I_n\rangle = \mathrm{Red}\big(\langle C, i\rangle, \langle I_1, \ldots, I_n\rangle\big).$$

Тогда

$$\big\{r_1 \in I_1, \ldots, r_n \in I_n \ \&\ c(r_1, \ldots, r_n)\big\} \Rightarrow r_i \in I.$$

Доказательство. Предположим, $r_1 \in I_1, \ldots, r_n \in I_n$ и $r_i \notin I$. Тогда либо $r_i < l$, либо $r_i > u$, где $I = [l, u]$. Если $r_i < l$, то

$$C(I_1, \ldots, I_{i-1}, \{r_i\}, I_{i+1}, \ldots, I_n)$$

по определению интервального расширения и

$$C(I_1, \ldots, I_{i-1}, [u^-, u], I_{i+1}, \ldots, I_n)$$

по предположению. Таким образом, C удовлетворяет условию совместности по брусам на брусе $\langle I_1, \ldots, I_{i-1}, I\nabla\{r_i\}, I_{i+1}, \ldots, I_n\rangle$, что противоречит тому, что I задает наибольший интервал из I_i, такой что $\langle C, i\rangle$ удовлетворяет условию совместности по брусам на брусе $\langle I_1, \ldots, I_{i-1}, I, I_{i+1}, \ldots, I_n\rangle$. Случай $r_i > u$ доказывается аналогично. □

Теперь переходим к следующему шагу – описанию алгоритма усечения. Данный алгоритм состоит из применения оператора сужения на каждую проекцию ограничения до тех пор, пока усечение возможно.

Процедура усечения Prune

Вход: S – система полиномиальных ограничений (интервальных расширений), I_0 – начальный брус.

Выход: Наибольший брус $I \subset I_0 : S(I)$.

Начало:
1. `Repeat`
2. $I_p = I$
3. Box_prune$(\{\langle \hat{c}, i\rangle \mid c \in S,\ i = 1, \ldots, n\}, I)$
4. `Until` $(I = I_p)$.

Конец.

Procedure Box_prune

Вход: P – множество интервальных проекций ограничений, I – входной брус.

Выход: I – усеченный брус.

Начало:
1. `Repeat`
2. $I_p = I$
3. $I = \bigcap\{\mathrm{Red}(p, I) \mid p \in P\}$
4. `Until` $(I = I_p)$

Конец.

Для реализации оператора сужения воспользуемся следующим утверждением.

Предложение 2. *Каждый ноль функции f на интервале I лежит также в интервале $N(F, F', I)$.*

Здесь $N(F, F', I) = I \nabla \Big[\{\mathrm{mid}(I)\} - \dfrac{F(\{\mathrm{mid}(I)\})}{F'(I)}\Big]$. Интервальная функция одной переменной F получается из функции f, $\hat{f}$ и интервальной проекции ограничения $\langle C, i\rangle$ следующим образом: все переменные X_k интервальной функции $\hat{f}$, за исключением X_i, заменяются соответствующими интервалами I_k сужаемого бокса $I = \langle I_1, \ldots, I_n\rangle$. Аналогично, функция F' получается из естественного интервального расширения производной функции f.

Таким образом, оператор сужения бруса для естественного интервального расширения можно задать в виде

$$\mathrm{Red}\big(\langle C, i\rangle, I\big) = N(F, F', I_i).$$

Для каждого из описанных выше интервальных расширений (см. определение 5) можно определить свой оператор сужения. Известно, что интервальный метод Ньютона для естественного интервального расширения хорошо зарекомендовал себя на широких интервалах. В то же время, интервальное расширение Тейлора хорошо работает на узких интервалах. Для реализации оператора сужения для распределенного интервального расширения можно воспользоваться особенностями этого интервального расширения. Так же как и при использовании естественного интервального расширения, рассмотрим функцию

$$F(X) = \tilde{f}(I_1, \ldots, I_{i-1}, X, I_{i+1}, \ldots, I_n).$$

Далее необходимо отыскать нули этой функции. Основная идея, используемая здесь, состоит в ограничении данной интервальной функции F двумя вещественными функциями одной вещественной переменной f_l и f_u, определенными следующим образом:

$$f_l(x) = \mathrm{left}\,\big(F(\{x\})\big), \qquad f_r(x) = \mathrm{right}\,\big(F(\{x\})\big).$$

Заметим теперь, что усечение i-го измерения можно проводить при помощи поиска самого левого нуля интервального расширения F_l функции f_l и самого правого нуля интервального расширения F_r функции f_r.

Основным преимуществом распределенного интервального расширения является то, что функции f_l и f_r могут быть легко найдены. Функция $F(X)$ имеет вид

$$F(X) = I_1 X^{n_1} + \ldots + I_p X^{n_p},$$

Тогда функция f_l определяется следующим образом:

$$f_l = \mathrm{low}(I_1, x, n_1) + \ldots + \mathrm{low}(I_p, x, n_p),$$

где

$$\mathrm{low}(I, x, n) = \begin{cases} \mathrm{left}(I)x^n, & x \geq 0 \text{ или } n - \text{четное}, \\ \mathrm{right}(I)x^n, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Функция f_u определена как

$$f_u(x) = \mathrm{high}(I_1, x, n_1) + \ldots + \mathrm{high}(I_p, x, n_p),$$

где

$$\mathrm{high}(I, x, n) = \begin{cases} \mathrm{right}(I)x^n, & x \geq 0 \text{ или } n - \text{четное}, \\ \mathrm{left}(I)x^n, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Далее, аналогично оператору сужения для естественного интервального расширения, можно применять интервальный метод Ньютона на данных функциях для поиска их нулей.

3. Численные эксперименты

Для решения полиномиальных систем был реализован метод PR-Solver (Polynomial Relations) с использованием описанного в данной работе подхода. Этот метод сравнивался с решателем Sibcalc [9], в котором при решении данных задач использовался метод интервального распространения ограничений и бисекция. Сравнение проводилось на компьютере с процессором Celeron 4-2000 с 640 Мб оперативной памяти и операционной системой WindowsXP. В таблице представлены результаты тестирования метода на нескольких полиномиальных системах. Приведено время решения каждой системы. Погрешность вычислений задавалась равной 10^{-8}. Времена указаны в миллисекундах.

Анализируя приведенные результаты, можно сказать, что времена в целом сопоставимы, хотя Sibcalc имеет небольшое преимущество. Это можно объяснить тем, что в PR-Solver реализованы еще не все методы, позволяющие существенно улучшать эффективность алгоритма. Также отметим, что методы

Тип	PR-Solver	Sibcalc
$\{y = x,\ y = -x\}$	0.0	0.0
$\{y = x^2,\ y = x\}$	0.02	0.0
$\{y = x^2,\ y = -x^2 + 1\}$	0.04	0.015
$\{x^2 + y^2 = 4,\ y = 0\}$	0.02	0.01
$\{x^2 + y^2 = 4,\ x^2 - 4x + y^2 = 0\}$	0.03	0.02
$\{y = x^2,\ x^2 + y^2 = 4\}$	0.06	0.045

по техническим причинам не сравнивались на задачах с большим числом переменных и ограничений, в которых рассматриваемый подход имеет наибольший выигрыш.

Заключение

В работе продемонстрирована возможность применения метода деления и усечения наряду с классическим методом Ньютона для решения полиномиальных систем. С его помощью можно решать как полиномиальные уравнения одной переменной, так и системы полиномиальных уравнений.

На данном этапе разработки реализовано только естественное интервальное расширение и ведется работа над распределенным интервальным расширением. Следующим этапом для увеличения эффективности системы будет введено интервальное расширение Тейлора. Отдельным направлением будущих работ будет комплексное сравнение реализованного подхода с другими существующими пакетами решения систем полиномиальных уравнений.

Список литературы

[1] Hansen E. Global Optimization Using Interval Analysis. – New York: Marcel Dekker, 1992.

[2] Hansen E.R., Greenberg R.I. An interval Newton method // Appl. Math. Comput. – 1983. – № 12. – P.89–98.

[3] Hansen E.R., Sengupta S. Bounding Solutions of Systems of Equations Using Interval Analysis // BIT. – 1981. – № 21. – P. 203–211.

[4] Neumayer A. Interval Methods for Systems of Equations / PHI Series in Computer Science. – Cambridge: University Press, 1990.

[5] Morgan A.P. Solving Polynomial Systems Using Continuation for Scientific and Engineering Problems. – Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1987.

[6] Verschelde J., Verlinden P., Cools R. Homotopies Exploiting Newton Polytopes For Solving Sparse Polynomial Systems // SIAM J. Num. Anal. – 1994. – Vol. 31, № 3. – P. 915–930.

[7] Tien-Yien Li. Solving Polynomial Systems by Polyhedral Homotopies // Taiwanese J. Mathem. – 1999. – Vol. 3, № 3. – P. 251–279.

[8] Van Henteryck P., McAllester D., Kapur D. Solving Polynomial Systems Using a Branch and Prune Approach // SIAM J. Num. Anal. – 1997. – Vol. 34, № 2.

[9] Kleymenov A., Petunin D., Semenov A., Vazhev I. A Model of Cooperative Solvers for Computational Problems // Proc. 4th Intern. Conf. PPAM 2001, Poland, September / LNCS. – Vol. 2328. – P. 797–802.

[10] Tsang E. Foundations of Constraint Satisfaction. – Essex: Academic Press, 1993.