Algebraic polynomial system solving and applications

Summary

The problem of computing the solutions of a system of multivariate polynomial equations can be approached by the Stetter-Möller matrix method which casts the problem into a large eigenvalue problem. This Stetter-Möller matrix method forms the starting point for the development of computational procedures for the two main applications addressed in this thesis:

- The *global* optimization of a multivariate polynomial, described in Part II of this thesis, and

- the H_2 model-order reduction problem, described in Part III of this thesis.

Part I of this thesis provides an introduction in the background of algebraic geometry and an overview of various methods to solve systems of polynomial equations.

In Chapter 4 a global optimization method is worked out which computes the global minimum of a Minkowski dominated polynomial. The Stetter-Möller matrix method transforms the problem of finding solutions to the system of first-order conditions of this polynomial into an eigenvalue problem. This method is described in [48], [50] and [81]. A drawback of this approach is that the matrices involved in this eigenvalue problem are usually very large.

The research question which plays a central role in Part II of this thesis is formulated as follows: *How to improve the efficiency of the Stetter-Möller matrix method, applied to the global optimization of a multivariate polynomial, by means of an nD-systems approach?* The efficiency of this method is improved in this thesis by using a matrix-free implementation of the matrix-vector products and by using an iterative eigenvalue solver instead of a direct eigenvalue solver.

The matrix-free implementation is achieved by the development and implementation of an nD-system of difference equations as described in Chapter 5. This yields a routine that computes the action of the involved large and sparse matrix on a given

vector. This routine is used as input for the iterative eigenproblem solvers to compute the matrix-vector products in a matrix-free fashion.

To study the efficiency of such an nD-system we have set up a corresponding shortest path problem. It turns out that this will quickly become huge and difficult to solve. However, it is possible to set up a relaxation of the shortest path problem that is easier to solve. This is described in the Sections 5.3.1 and 5.3.2. The conclusions about these shortest paths problems lead to some heuristic methods, as discussed in Section 5.3.3, to arrive cheaply at suboptimal paths with acceptable performance.

Another way to improve the efficiency of an nD-system is to apply parallel computing techniques as described in Section 5.3.4. However, it turns out that parallelization is not very useful in this application of the nD-system.

Iterative eigenvalue solvers are described in Chapter 6. An advantage of such an iterative eigenvalue solver is that it is compatible with an nD-systems approach and that it is able to focus on a subset of eigenvalues such that it is no longer necessary to compute all the eigenvalues of the matrix. For global polynomial optimization the most interesting eigenvalue is the smallest real eigenvalue. Therefore this feature is developed and implemented in a Jacobi–Davidson eigenproblem solver, as described in Section 6.3. In Section 6.4 some procedures are studied to project an approximate eigenvector to a close-by vector with Stetter structure to speed up the convergence process of the iterative solver.

The development of the `JDCOMM` method, a Jacobi–Davidson eigenvalue solver for commuting matrices, is described in Section 6.5. The most important new implemented features of this matrix-free solver are that: (i) it computes the eigenvalues of the matrix of interest while iterating with a another, much sparser (but commuting), matrix which results in a speed up in computation time and a decrease in the required amount of floating point operations, and, (ii) it focuses on the smallest real eigenvalues first.

In Chapter 7 we present the results of the numerical experiments in which the global minima of various Minkowski dominated polynomials are computed using the approaches and techniques mentioned in Part II of this thesis. In the majority of the test cases the `SOSTOOLS` software approach is more efficient than the nD-systems approach in combination with an iterative eigenvalue solver. Some test cases however can not accurately be solved by the `SOSTOOLS` software since they produce large errors. These large errors can limit the actual application of this software. In general our approach tends to give more accurate results. In Section 7.5 four experiments are described in which the newly developed `JDCOMM` method is used to compute the global minima. The result here is that the `JDCOMM` method has a superior performance over the other methods: the `JDCOMM` method requires fewer matrix-vector operations and therefore also uses less computation time.

The H_2 model-order reduction problem, described in Part III of this thesis, deals with finding an approximating system of reduced order $N-k$ to a given system of order N. This is called the co-order k case. In [50] an approach is introduced where the H_2 global model-order reduction problem for the co-order $k = 1$ case is reformulated as the problem of finding solutions of a quadratic system of polynomial equations.

The research question answered in Part III, is: *How to find the global optimum to the H_2 model-order reduction problem for a reduction of order N to order $N-k$, using the techniques of the Stetter-Möller matrix method in combination with an nD-system and an iterative eigenvalue solver?* Furthermore, we give answers to the following questions: *How to improve the performance for co-order $k = 1$ reduction?*, and *How to develop new techniques or extensions for co-order $k = 2$ and $k = 3$ reduction?*

The approach introduced in [50] for the co-order $k = 1$ case is generalized and extended in Chapter 8 which results in a joint framework in which to study the H_2 model-order reduction problem for various co-orders $k \geq 1$. In the co-order $k \geq 1$ case the problem is reformulated as finding the solutions to the system of quadratic equations which contains $k - 1$ additional parameters and whose solutions should satisfy $k - 1$ additional linear constraints. The Stetter-Möller method is used to transform the problem of finding solutions of this system of quadratic equations into an eigenvalue problem containing one or more parameters. From the solutions of such an eigenvalue problem the corresponding feasible solutions for the real approximation $G(s)$ of order $N - k$ can be selected. A generalized version of the H_2-criterion is used to select the *globally* best approximation.

In Chapter 9 this approach leads in the co-order $k = 1$ case to a large conventional eigenvalue problem, as described in [50]. We improve the efficiency of this method by a matrix-free implementation by using an nD-system in combination with an iterative eigenvalue solver which targets the smallest real eigenvalue. In Section 9.3 the potential of this approach is demonstrated by an example which involves the efficient reduction of a system of order 10 to a system of order 9.

In Chapter 10 we describe how the Stetter-Möller matrix method in the co-order $k = 2$ case, when taking the additional linear constraint into account, yields a rational matrix in one parameter. We can set up a polynomial eigenvalue problem and to solve this problem it is rewritten as a generalized and singular eigenvalue problem. To accurately compute the eigenvalues of this singular matrix, the singular parts are split off by computing the Kronecker canonical form. In Section 10.6 three examples are given where this co-order $k = 2$ approach is successfully applied to obtain a globally optimal approximation of order $N - 2$.

Applying the Stetter-Möller matrix method for the co-order $k = 3$ case in Chapter 11 yields two rational matrices in two parameters. This is cast into a two-parameter polynomial eigenvalue problem involving two matrices and one common eigenvector. Both matrices are joined together into one rectangular and singular matrix. Now the ideas of Chapter 10 regarding the Kronecker canonical form computations are useful to compute the values ρ_1 and ρ_2 which make these matrices simultaneously singular. An important result is described in this chapter: the solutions to the system of equations are determined by the values which make the transformation matrices, used in the Kronecker canonical form computations, singular. With these values the globally optimal approximation $G(s)$ of order $N-3$ is computed. An example is worked out at the end of this chapter where the co-order $k=3$ technique exhibits a better performance on this example than the co-order $k=1$ and $k=2$ techniques.

Chapter 12 provides concluding remarks and directions for further research of the results described in the Parts II and III of this thesis.

Samenvatting

Het probleem van het berekenen van de oplossingen van een stelsel van polynomiale vergelijkingen kan worden benaderd met behulp van de Stetter–Möller matrix methode die het probleem omvormt tot een groot eigenwaarde probleem. Deze Stetter–Möller matrix methode vormt het uitgangspunt voor de ontwikkeling van computationele procedures voor de twee toepassingen die in dit proefschrift aan bod komen:

- De *globale* optimalisatie van een polynomiale functie in meerdere variabelen, zoals beschreven in deel II van deze thesis, en

- het H_2 model-orde reductie probleem, beschreven in deel III van deze thesis.

Deel I van deze thesis verstrekt een inleiding in de achtergrond van de algebraïsche meetkunde en een overzicht van diverse methodes om een stelsel van polynomiale vergelijkingen op te lossen.

In hoofdstuk 4 wordt een globale optimalisatiemethode uitgewerkt die het globale minimum van een Minkowski gedomineerde polynomiale functie berekent. De Stetter–Möller matrix methode transformeert het probleem van het vinden van oplossingen van het stelsel eerste-orde afgeleiden van deze polynomiale functie naar een eigenwaarde probleem. Deze aanpak is eerder beschreven in [48], [50] en [81]. Een nadeel van deze aanpak is dat de matrices in dit eigenwaarde probleem gewoonlijk zeer groot zijn.

De onderzoeksvraag die een centrale rol speelt in deel II van dit proefschrift is als volgt geformuleerd: *Hoe kan de efficiëntie van de Stetter–Möller matrix methode, toegepast op de globale optimalisatie van een polynomiale functie, verbeterd worden door middel van een nD–systeem aanpak?* De efficiëntie van deze methode is in dit proefschrift verbeterd door middel van een 'matrix–vrije' implementatie van de matrix–vector producten en door het gebruik van een iteratieve eigenwaarde solver in plaats van een directe eigenwaarde solver.

De matrix–vrije implementatie is bereikt door de ontwikkeling en de implementatie van een nD–systeem van differentie vergelijkingen zoals beschreven in hoofdstuk 5. Dit resulteert in een routine die de actie berekent van de grote en ijle matrix op een gegeven vector. Deze routine wordt gebruikt als input voor de iteratieve eigenwaarde solvers om de matrix–vector producten te berekenen op een matrix–vrije manier.

Om de efficiëntie van een dergelijke nD–systeem aanpak te bestuderen hebben we een overeenkomstig kortste pad probleem geformuleerd. Het blijkt dat dit kortste pad probleem al snel groot en moeilijk op te lossen is. Het is echter mogelijk om een relaxatie van het kortste pad probleem te formuleren die makkelijker op te lossen is. Dit is beschreven in de Secties 5.3.1 en 5.3.2. De conclusies met betrekking tot de kortste pad aanpak leiden tot een aantal heuristische methodes, zoals besproken in Sectie 5.3.3, om goedkoop suboptimale paden te berekenen met een aanvaardbare prestatie.

Een andere manier om de efficiëntie van de nD–systeem aanpak te verbeteren is het toepassen van parallelle rekentechnieken zoals die in Sectie 5.3.4 worden beschreven. Het blijkt echter dat deze parallellisatie niet erg nuttig is om toe te passen bij de nD–systeem aanpak.

Iteratieve eigenwaarde solvers worden beschreven in Hoofdstuk 6. Een voordeel van een dergelijke iteratieve eigenwaarde solver is dat het compatibel is met de nD–systeem aanpak en dat deze in staat is te focussen op een subset van eigenwaardes zodat het niet langer nodig is om alle eigenwaardes van de matrix te berekenen. De meest interessante eigenwaarde voor de globale optimalisatie van een polynomiale functie is de kleinste reële eigenwaarde. Daarom is deze functie ontwikkeld en geïmplementeerd in een Jacobi–Davidson eigenwaarde solver zoals beschreven in Sectie 6.3. In Sectie 6.4 worden enkele procedures bestudeerd om een benaderende eigenvector te projecteren op een nabije eigenvector met Stetter structuur om zodoende het convergentieproces van de iteratieve solver te versnellen.

De ontwikkeling van de `JDCOMM` methode, een Jacobi–Davidson eigenwaarde solver voor een set van commuterende matrices, wordt beschreven in Sectie 6.5. De belangrijkste nieuwe eigenschappen geïmplementeerd in deze matrix–vrije solver zijn de volgende: (i) de methode berekent de eigenwaardes van de matrix, terwijl deze itereert met een andere, veel ijlere (maar commuterende) matrix, wat resulteert in versnelling van de rekentijd en een afname in het vereiste aantal floating-point operaties, en (ii) de methode richt zich enkel op het berekenen van de kleinste reële eigenwaarde.

In Hoofdstuk 7 worden de resultaten gepresenteerd van de numerieke experimenten waarin de globale minima van verschillende Minkowski gedomineerde polynomen worden berekend met behulp van de aanpak en de ontwikkelde technieken zoals beschreven in deel II van dit proefschrift. In de meerderheid van de experimenten is de `SOSTOOLS` software efficiënter dan de nD–systeem aanpak in combinatie met een iteratieve eigenwaarde solver. Sommige experimenten kunnen echter niet nauwkeurig worden opgelost door de `SOSTOOLS` software omdat in deze gevallen grote afwijkingen ontstaan, wat de daadwerkelijke toepassing van deze software beperkt. In het algemeen leidt onze aanpak tot nauwkeurigere resultaten. In Sectie 7.5 worden vier experimenten beschreven waarin de nieuw ontwikkelde `JDCOMM` methode wordt gebruikt om de globale minima te berekenen. Het resultaat hiervan is dat de `JDCOMM` methode superieure prestaties heeft ten opzichte van andere methodes: de `JDCOMM` methode vereist minder matrix–vector operaties en benodigt daarom ook minder rekentijd.

Het H_2 model-orde reductie probleem, beschreven in deel III van dit proefschrift, behandelt het vinden van een benaderend systeem van gereduceerde orde $N - k$, gegeven een systeem van orde N. Dit geval zal het co-orde k geval genoemd worden. In [50] is een aanpak geïntroduceerd waar het globale H_2 model-orde reductie probleem voor het co-orde $k = 1$ geval geherformuleerd is als het probleem van het vinden van oplossingen van een kwadratisch stelsel van polynomiale vergelijkingen.

De onderzoeksvraag beantwoord in deel III van dit proefschrift luidt als volgt: *Hoe kan het globale optimum van het H_2 model-orde reductie probleem van orde N naar orde $N - k$ bepaald worden met behulp van de technieken van de Stetter–Möller matrix methode in combinatie met een nD–systeem en een iteratieve eigenwaarde solver?* Voorts worden antwoorden gegeven op de volgende vragen: *Hoe kan de performance voor co-orde $k = 1$ verbeterd worden?* en *Hoe kunnen nieuwe technieken of uitbreidingen voor co-orde $k = 2$ en $k = 3$ ontwikkeld worden?*

De aanpak geïntroduceerd in [50] voor het co-orde $k = 1$ geval hebben we gegeneraliseerd en uitgebreid, zoals beschreven in Hoofdstuk 8, wat resulteert in een gezamenlijk kader waarin het H_2 model-orde reductie probleem bestudeerd kan worden voor diverse co-ordes $k \geq 1$. In het co-orde $k \geq 1$ geval is het probleem geherformuleerd als het vinden van de oplossingen van een stelsel van kwadratische vergelijkingen dat $k - 1$ additionele parameters bevat en waarvan de oplossingen moeten voldoen aan $k - 1$ additionele lineaire constraints. De Stetter–Möller matrix methode is gebruikt om het probleem van het vinden van oplossingen van dit stelsel van kwadratische vergelijkingen te transformeren in een eigenwaardeprobleem dat één of meer parameters bevat. Uit de oplossingen van een dergelijk eigenwaardeprobleem kunnen de bijbehorende feasible oplossingen voor de reële approximatie $G(s)$ van orde $N - k$ worden geselecteerd. Een gegeneraliseerde versie van het H_2–criterium is gebruikt om de *globaal* beste approximatie te selecteren.

In Hoofdstuk 9 leidt deze aanpak in het co-orde $k = 1$ geval tot een groot conventioneel eigenwaardeprobleem zoals beschreven in [50]. Wij verbeteren de efficiëntie van deze methode met behulp van een matrix–vrije implementatie gebruik makend van een nD–systeem in combinatie met een iteratieve eigenwaarde solver die de kleinste reële eigenwaarde berekent. In Sectie 9.3 wordt het potentieel van deze benadering gedemonstreerd door een voorbeeld dat de efficiënte reductie van een systeem van orde 10 naar een systeem van orde 9 behandeld.

In Hoofdstuk 10 wordt beschreven hoe de Stetter–Möller matrix methode in het co-orde $k = 2$ geval een rationale matrix in één parameter oplevert wanneer er rekening wordt gehouden met de additionele lineaire constraint. Op basis van deze rationale matrix kunnen we een polynomiaal eigenwaarde probleem formuleren. Om dit probleem op te lossen wordt het herschreven als een gegeneraliseerd en singulier eigenwaarde probleem. Om de eigenwaardes van deze singuliere matrix nauwkeurig te kunnen berekenen, worden de singuliere delen afgesplitst door de Kronecker canonieke vorm te berekenen. In Sectie 10.6 worden drie voorbeelden gegeven waar deze co-orde $k = 2$ aanpak met succes is toegepast om een globaal optimale benadering van orde $N - 2$ te verkrijgen.

Het toepassen van de Stetter–Möller matrix methode voor het co-orde $k = 3$ geval in Hoofdstuk 11 leidt tot twee rationale matrices in twee parameters. Dit wordt herschreven als een twee–parameter polynomiaal eigenwaarde probleem dat twee matrices en één gemeenschappelijke eigenvector bevat. Beide matrices worden samengevoegd tot één rechthoekige en singuliere matrix. Hier zijn de ideeën van Hoofdstuk 10 met betrekking tot de Kronecker canonieke vorm berekeningen nuttig om de waardes van ρ_1 en ρ_2, die beide matrices gelijktijdig singulier maken, te berekenen. Een belangrijk resultaat is beschreven in dit hoofdstuk: de oplossingen van het stelsel vergelijkingen worden bepaald door de waardes die de transformatie matrices, die voor de verkrijging van de Kronecker canonieke vorm gebruikt worden, singulier maken. Met behulp van deze waardes wordt de globaal optimale benadering $G(s)$ van orde $N - 3$ berekend. Aan het einde van dit hoofdstuk wordt een voorbeeld uitgewerkt waarbij de co-orde $k = 3$ techniek een betere performance laat zien dan de co-orde $k = 1$ en $k = 2$ technieken.

Hoofdstuk 12 biedt concluderende opmerkingen en aanwijzingen voor verder onderzoek met betrekking tot de resultaten beschreven in de delen II en III van dit proefschrift.