## ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ФГАОУ ВО НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

Факультет компьютерных наук Образовательная программа «Прикладная математика и информатика»

#### ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Программный проект на тему:

Оптимизация и распараллеливание алгоритма F4 поиска базиса Грёбнера

#### Выполнил студент:

группы #БПМИ205, 4 курса

Стёпкин Степан Максимович

#### Принял руководитель ВКР:

Колесниченко Елена Юрьевна

Доцент

Факультет компьютерных наук НИУ ВШЭ

#### Соруководитель:

Трушин Дмитрий Витальевич

Доцент

Факультет компьютерных наук НИУ ВШЭ

# Содержание

A	ннот	ация	4		
1	Вве	едение	5		
2	Баз	висы Грёбнера и алгоритм Бухбергера	5		
	2.1	Основные определения	5		
	2.2	Алгоритм Бухбергера	7		
3	Опт	гимизации алгоритма Бухбергера	9		
	3.1	Основные идеи	S		
	3.2	GMI [5]	11		
4	Pea	ализация алгоритма Бухбергера	12		
	4.1	Term	12		
	4.2	Monomial	13		
	4.3	Polynomial	13		
	4.4	Benchmark	14		
5	Алі	горитм F4	15		
	5.1	CriticalPair	15		
	5.2	Select	15		
	5.3	Reduce	16		
	5.4	Symbolic Preprocessing	17		
6	Оп	гимизация алгоритма F4	17		
	6.1	GBLA[8]	18		
	6.2	Simplify	19		
	6.3	Extended Criteria	19		
	6.4	NOTGBLA	20		
7	Реализация алгоритма F4				
	7.1	UpdateL	21		
	7.2	Matrix	22		
	7.3	FillMatrix	22		
	7.4	NOTGBLA	24		

	7.5	Распараллеливание	24			
8	Опт	гимизация имплементации алгоритма F4	25			
	8.1	TermHash	25			
	8.2	TermRef	25			
	8.3	CriticalPair	25			
9	Ben	nchmarks	26			
	9.1	Профилирование	26			
	9.2	Результаты	27			
10 Итоги						
Cı	писо	к литературы	29			
${f A}$	Сем	лейства примеров	30			

# Аннотация

Базис Грёбнера - одно из важнейших понятий вычислительной алгебры. Для любой системы полиномиальных уравнений базис Гребнера может определить, имеет ли она решения и бесконечно ли это число. Существует несколько методов нахождения базиса Гребнера. Одним из самых быстрых является алгоритм F4. Скорость важна для любой алгебраической системы, поэтому авторы стараются реализовать алгоритмы с минимальной задержкой, насколько это возможно. В этой работе мы подробно обсудим реализацию F4. Кроме того, мы реализуем эти алгоритмы в библиотеке с открытым исходным кодом и сравним производительность с другими реализациями.

# Annotation

The Gröbner basis is one of the most important concepts in computational algebra. For any system of polynomial equations, Gröbner bases can tell whether it has solutions and whether their number is infinite. There are several methods for finding the Gröbner basis. One of the fastest is the F4 algorithm. Speed is important for any algebraic system, so authors try to implement algorithms with as minimal latency as possible. In this paper, we discuss implementation of F4 in details. Futhermore, we implement these algorithms in an open source library.

# Ключевые слова

Базис Грёбнера, алгоритм F4, С++, оптимизация программного обеспечения

# 1 Введение

Алгоритмы по поиску базисов Грёбнера находятся на стыке линейной алгебры и программирования. За всё время существования базисов Грёбнера было придумано несколько алгоритмов и множество оптимизаций по их вычислению.

В данной работе мы реализуем алгоритм F4 со всеми возможными идейными оптимизациями, попытаемся оптимизировать его архитектурно и распараллелим его. При этом мы хотим позволить пользователю максимальную свободу - самому выбирать поле и порядок мономов. Подробно разберем как устроены алгоритмы и какие их части стоит оптимизировать. Весь код и бенчмарки можно найти на GitHub<sup>1</sup>. Библиотека называется FF4, и далее по работе будет использоваться именно это название.

Работа написана в следующем порядке — сначала идут основные определения, затем подробно обсуждается алгоритм Бухбергера, его оптимизации, имплементации и бенчмарки. После этого идет аналогичный анализ F4 — подробно объясняется алгоритм, приводятся все его оптимизации, обсуждается эффективность каждой из них. Затем подробно рассказывается о удачных и неудачных попытках оптимизровать алгоритм, о подробностях имплементации, о распараллеливании и приводится множество бенчмарков. Кроме того, нас ожидает достаточно неожиданный вывод.

Алгоритм реализован как библиотека на языке C++, протестирован на macOS и linux. Все бенчмарки были произведены на MacBook Pro 23, Apple M2 Pro, 32Gb.

# 2 Базисы Грёбнера и алгоритм Бухбергера

Считается, что математика зародилась вместе с человеком. Тем не менее, даже в наше время продолжают совершаться важные и в то же время доступные широкой публике открытия. Одним из таких примеров является базис Грёбнера, который был представлен вместе с алгоритмом Бухбергера Бруно Бухбергером в рамках его докторской диссертации в 1965 году [1].

## 2.1 Основные определения

Для базисов Грёбнера необходимо понятие порядка на одночленах и старшего члена. Для многочленов от одной переменной понятие старшего члена изучается в школе - например в  $x^3+13x^2-21x+6$  старшим членом является  $x^3$ . Тем не менее для многочленов от нескольких

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>https://github.com/KaurkerDevourer/ff4

переменных ответ уже не является очевидным. Что является старшим членом у многочлена  $x_0^3 + x_0 x_1^2 + x_2^4$ ? Для ответа на этот вопрос были придуманы порядки на мономах. Самым базовым из них является **лексикографический**. Перед тем как мы перейдем к определению порядков, поясним, что одночлен  $x_0^3$  представляет собой слово [3],  $x_1^2 x_3^4$  слово [0204]. Тогда назовем переменные алфавитом, а одночлены словом.

Определение 1. Лексикографическим порядком, называют порядок в котором слово А меньше слова B, если

- слово A является префиксом слова B.

  или
- первые k символов слов совпадают, но k+1-символ слова A меньше k+1-символа слова B.

Например, для лексикографического порядка верно

$$x_0^3 > x_0^2 x_1 > x_0^2 x_2 > x_1^2 x_2 > x_2^3 > x_2.$$

У лексикографического порядка есть большой минус — он не смотрит на суммарные степени одночленов, например  $x_0 > x_1^{100}x_2^{200}$ . Таким образом, смотря на старший член в лексикографическом порядке, сложно выявить какие-то свойства многочлена. Было ясно, что такой простой порядок не может быть самым эффективным. Поэтому был придуман порядок, который в данный момент применяется во всех вычислениях базисов Грёбнера (и не только). Академически он называется степенно обратным лексикографическим порядком, но во всех работах его называют просто grevlex (от англ. Graded reverse lexicographic order).

**Определение 2.** grevlex порядком, называют порядок в котором слово A меньше слова B, если

 $\bullet$  сумма степеней всех переменных в одночлене A меньше суммы степеней всех переменных в одночлене B.

u n u

• последние k символов слова совпадают, но k+1 символ слова A с конца больше k+1-го символа c конца слова B.

Например, в порядке grevlex верно

 $x_3^3 > x_2^2 > x_0$ , так как суммарные степени мономов соответственно равны 3,2,1.

Если же суммарные степени равны, то *grevlex* считает меньшим то слово, в котором обратный лексикографический порядок больше. То есть

$$x_0^2 > x_0 x_1 > x_1^2 > x_0 x_2 > x_1 x_2 > x_2^2$$
.

 $x_1^2 > x_0 x_2$ , так как суммарные степени равны 2, а слова [020] и [101] сравниваются лексикографически в обратном порядке. Так как второе слово больше, то *grevlex* объявляет, что и стоит оно позже.

Таким образом, суммарные степени всех мономов в полиноме будут не больше чем суммарная степень старшего члена. *grevlex* является основным порядком для измерения скорости работы алгоритмов по вычислению базиса Грёбнера.

Определение 3. Пусть  $\{f_1, \ldots, f_n\}$  множество полиномов из идеала  $I = (f_1, \ldots, f_n)$ . Они называются базисом Грёбнера идеала I если для каждого полинома f из I существует полином  $f_i$  из множества  $(f_1, \ldots, f_n)$  такой, что старший член f делится на старший член  $f_i$ .

Определение 4. Базис Грёбнера называется минимальным, если никакой старший член базиса Грёбнера не делит ни один другой старший член.

Например  $(x_0, x_1, x_2)$  и  $(x_0x_1, x_0, x_1, x_2)$  являются базисами Грёбнера для идеала  $I = (x_0, x_1, x_2)$ , но второй базис не является минимальным.

Несмотря на неочевидные свойства базис Грёбнера невероятно ценен, благодаря двум теоремам

**Теорема 1.** Система полиномиальных уравнений не имеет решений тогда и только тогда, когда в базисе Грёбнера присутствует ненулевая константа.

**Теорема 2.** Количество комплексных решений для системы уравнений конечно тогда и только тогда, когда для кажсдой переменной  $x_i$  в базисе  $\Gamma$ рёбнера присутствует полином, со старшим членом вида  $x_i^k$ .

Таким образом базис Грёбнера отвечает на важнейшие вопросы для алгебры замкнутого поля - есть ли у системы полиномиальных уравнений решения и конечно ли их количество.

# 2.2 Алгоритм Бухбергера

Первый алгоритм по вычислению базиса Грёбнера был предложен в той же работе, что и сам базис, уже упомянутым Бруно Бухбергером. Однако, прежде чем перейти к алгоритму, приведем основные обозначения и ключевую теорему, на которой основывается алгоритм.

Моном без коэффициента далее будем называть термом.

lm(f) - leading monomial, то есть старший член многочлена f.

lt(f) - leading term, то есть старший терм полинома f.

lot(f) = f - lm(F) - то есть полином f без старшего члена.

mon(f) - множество всех термов многочлена f.

lcm - least common multiple, наименьшее общее кратное термов.

gcd - greatest common divisor, наибольший общий множитель термов.

 $S \xrightarrow{F} d$  - результатом редукции S по S является d.

Определение 5. *S-многочленом*  $S(f_i, f_j)$ , называется многочлен

$$S(f_i, f_j) = \frac{L}{lt(f_i)} f_i - \frac{L}{lt(a_i)} f_j$$
,  $\epsilon \partial e \ L = LCM(lt(f_i), lt(f_j))$ .

Например

$$S(xy - z, x^{2} - y) = x * (xy - z) - y(x^{2} - y) = x^{2}y - xz - x^{2}y + y^{2} = -xz + y^{2}.$$

То есть lt=xz, хотя до этого был xy и  $x^2$ . Напомним, что при любых двух упомянутых выше порядках  $x^2>xy>xz$ .

**Теорема 3.** (Критерий Бухбергера) Пусть  $F = \{f_1, \ldots, f_k\}$  порождают идеал I. Если  $S(f_i, f_j)$  редуцируются  $\kappa$  нулю относительно F для всех пар (i, j), то F является базисом Грёбнера для I.

Таким образом мы уже умеем проверять для данного набора полиномов, является ли он базисом Грёбнера своего идеала - перебираем все пары (i,j) и проверяем, редуцируются ли S-многочлены к нулю.

Заметим, что редуцированный S-многочлен лежит в идеале. Почему бы его не добавить в текущую систему полиномов и продолжить перебор пар? Ровно на такой идее и основан первый алгоритм по вычислению базисов Грёбнера - алгоритм Бухбергера.

### Algorithm 1: Buchberger algorithm

```
Input: Set of polynomials F for ideal I

Output: Groebner basis F for ideal I

P = \{S(F_i, F_j) \mid 0 \le i < j < size(F)\}

while P.size() > 0 do

S_{ij} = first(P)

P = P \setminus \{S_{ij}\}

h = Reduce(S_{ij}, G)

if h \ne 0 then

F = F \cup h

P = P \cup \{S(F_i, h) \mid 0 \le i < size(F)\}

end

end
```

На вход алгоритм Бухбергера получается множество полиномов, после чего добавляет элементы в множество, пока оно не станет базисом Грёбнера. Для начала ответим на самый базовый вопрос - почему алгоритм завершится. Исторически и формально это вытекает из леммы Диксона, которая гласит, что в идеале можно выбрать базис из конечного числа одночленов[2].

# 3 Оптимизации алгоритма Бухбергера

Так как алгоритм Бухбергера появился одновременно с базисами Грёбнера, несложно поверить, что он работает не оптимально. В этой работе не будет обсуждаться О-сложность алгоритмов. Связано это в основном с тем, что оценка О-сложности приведенных алгоритмов слишком тяжеловесна для работы такого объема и уровня. Если читателю интересно ознакомиться с подобными работами, то вот пару примеров: [3, 4]. В этой работе, как и в большинстве работ по базисам Грёбнера упор будет делаться на оптимизацию времени выполнения алгоритмов.

Несмотря на то, что работа посвящена F4, на изучению Бухбергера и его оптимизаций было потрачено много времени, так как это основа для эффективного F4.

#### 3.1 Основные идеи

Одной из идей является оптимизация выбора пары. Утверждается, что выбирая пару с минимальным старшим членом среди всех S-пар алгоритм завершится быстрее. Это важно

и дает улучшения в производительности, но тривиально. Гораздо интереснее оптимизировать S-редукции.

С самого существования алгоритмов по вычислению базисов Грёбнера и до сих пор, большой упор ведется в предсказание того, что S-полином будет отредуцирован к нулю. Связано это с тем, что большинство S-полиномов (90%) будут отредуцированы к нулю, и как следствие, проведя время вычислений алгоритм не изменит свой базис. Поэтому стараются находить всё большие способы заранее понимать, что определенный S-полином будет отредуцирован к нулю, тем самым сокращая время работы алгоритма.

Существуют два основных критерия, по которым можно быстро понять, что вычисления для определенного S-полинома не нужны, так как он будет отредуцирован к нулю. Во многих источниках они называются и определяются по-разному, являясь по-сути одним и тем же. Мы сохраним первоначальную терминологию.

Критерий 1. НОД критерий Бухбергера (Buchberger's qcd criterion).

Если  $p_1$  и  $p_2$  полиномы у которых  $gcd(lt(p_1), lt(p_2)) = 1$ , то  $S(p_1, p_2) \xrightarrow{\{p_1, p_2\}} 0$ .

Доказательство. Пусть  $p_1$  и  $p_2$  полиномы с взаимно простыми старшими членами. Тогда  $S(p_1,p_2) = lt(p_2)p_1 - lt(p_1)p_2 = lt(p_2)lot(p_1) - lt(p_1)lot(p_2) \xrightarrow{p_2} lt(p_2)lot(p_1) - p_2lot(p_1) - lt(p_1)lot(p_2) = -lot(p_2)lot(p_1) - lt(p_1)lot(p_2) = -p_1lot(p_2) \xrightarrow{p_1} 0$ 

Критерий 2. НОК критерий Бухбергера (Buchberger's lcm criterion).

Ecли  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$  полиномы в F, при этом  $S(p_1,p_2) \xrightarrow{F} 0$  и  $S(p_2,p_3) \xrightarrow{F} 0$  и  $It(p_2) \mid lcm(lt(p_1),lt(p_3)) \mod S(p_1,p_3) \xrightarrow{F} 0$ .

Доказательство. Пусть  $p_1, p_2$  и  $p_3$  вышеупомянутые полиномы.

$$k = lcm(lt(p_1), lt(p_3)), k_1 = lcm(lt(p_1), lt(p_2)), k_2 = lcm(lt(p_3), lt(p_2)).$$

lcm(lcm(a,b),lcm(b,c)) = lcm(a,b,c), но если b делит lcm(a,c), то lcm(a,b,c) = lcm(a,c).

$$S(p_1, p_2) = \frac{k_1}{lt(p_1)} p_1 - \frac{k_1}{lt(p_2)} p_2 \xrightarrow{F} 0$$

$$S(p_2, p_3) = \frac{k_2}{lt(p_2)} p_2 - \frac{k_2}{lt(p_3)} p_3 \xrightarrow{F} 0$$

$$\tfrac{lcm(k_1,k_2)}{k_2}S(p_2,p_3) + \tfrac{lcm(k_2,k_1)}{k_1}S(p_1,p_2) = \tfrac{lcm(k_1,k_2)}{lt(p_1)}p_1 - \tfrac{lcm(k_1,k_2)}{lt(p_3)}p_3 =$$

$$=\frac{k}{lcm(k_1,k_2)}S(p_1,p_3) = S(p_1,p_3) \xrightarrow{F} 0$$

## 3.2 GMI [5]

На основе этих двух критериев был придуман алгоритм обновления пар (i,j), которые нужно проверять на редуцируемость и позже возможно добавлять в базис.

```
Algorithm 2: Gebauer-Möller installation (GMI)
```

```
Input: Current set of polynomials F, new element h to add into set of polynomials,
            current set of pairs to check P
Output: Updated set of polynomials F, updated set of pairs to check P
P' = \{ S(F_i, h) \mid 0 \le i \le size(F) \}
for (f,g) \in P do
   L = lcm(lt(f), lt(g))
    if lt(h) \mid L and lcm(lt(h), lt(f)) \neq L and lcm(lt(h), lt(g)) \neq L then
    P = P \setminus \{(f,g)\}
    \mathbf{end}
end
for (f,h) \in P' do
    for (g,h) \in P' \setminus \{(f,h)\} do
        if lcm(lt(f), lt(h)) \mid lcm(lt(g), lt(h)) then \mid P' = P' \setminus \{(g, h)\}
        end
    end
end
for (f,h) \in P' do
    \mathbf{if}\ gcd(lt(f),lt(h))=1\ \mathbf{then}
    | P' = P' \setminus \{(f, h)\}
    end
\quad \text{end} \quad
F \cup \{h\}
```

GMI позволяет не производить вычисления для некоторых S-полиномов, предсказывая их редуцируемость к нулю. Первые два цикла — lcm критерий, последний — gcd критерий. Корректность таких действий мы доказали выше. Тогда модифицированный алгоритм Бухбергера, не делающий часть нулевых редукций, и выбирающий S-полином с минимальным старшим членом выглядит следующим образом:

# Algorithm 3: Improved buchberger algorithm Input : Set of polynomials F for ideal IOutput: Groebner basis F for ideal I $P = \{\}$ for $h \in F$ do |GMI(F, h, P)|end while P.size() > 0 do $S_{ij} = Select_{min}(P)$ $P = P \setminus \{S_{ij}\}$ $h = Reduce(S_{ij}, G)$ if $h \neq 0$ then |GMI(F, h, P)|end

# 4 Реализация алгоритма Бухбергера

В этой главе мы поговорим о деталях имплементации алгоритма Бухбергера — какие части есть и что они значат. Вся имплементация произведена на C++ и находится в репозитории. Реализованы поля **Rational** и **PrimeModular**, порядки **GrevLex** и **Lexicographical** - на деталях их реализации мы останавливаться не будем.

#### 4.1 Term

end

```
class Term {
    ...
    private:
        std::vector<uint16_t> data;
}
```

Класс одночленов без коэффициентов. data[i] хранит степень для  $x_i$  переменной в терме. Выделяется в отдельный класс он по многим причинам, основной из которых является корректность операций. Так, например lcm и gcd определены для Term, но не для мономов. Главное за чем следит Term - корректность состояние data. В data не допускаются нули на конце, кроме случая data.size() == 1. data = [0] соответствует константе. Нужно это для экономии памяти. Приведем примеры для большего понимания:

```
x_0x_1x_2 будет лежать в data как [1,1,1]. x_2^3 будет лежать в data как [0,0,2]. l=lcm(x_0x_1x_2,x_2^3)=lcm([1,1,1],[0,0,2])=[1,1,2]. l/x_2^3=[1,1,2]-[0,0,2]=[1,1,0]=[1,1]. [1,1]/[1]=[0,1]. [1,1]*[1]=[1,2]. gcd([1,2],[0,3,1])=[0,2,0]=[0,2]
```

#### 4.2 Monomial

```
template <typename TCoef>
class Monomial {
    ...
    private:
        Term term;
        TCoef coef;
}
```

Класс одночлена с коэффициентом. Класс шаблонизирован для разных полей **TComp**. Напомним, что в библиотеке присутствуют основные для базисов Грёбнера типы **Rational** и **PrimeModular**.

# 4.3 Polynomial

```
template <typename TCoef, typename TComp>
class Polynomial {
    ...
    private:
        std::vector<Monomial<TCoef>> monomials;
}
```

Класс многочлена. Шаблонизирован для полей и для разных порядков. Мономы в векторе лежат строго в **TComp** порядке. Это позволяет работать с многочленами за **O(monomials.size())**. Например, при сложении/вычитании двух полиномов мы можем использовать метод двух указателей:

```
size_t i = 0, j = 0;
std::vector<Monomial<TCoef>> newMonomial;
while (i < left.size() && j < right.size()) {
    if (left[i] < right[j]) {
        newMonomial.push_back(left[i]);
        i++;
    } else if (right[j] < left[i]) {
        newMonomial.push_back(right[j]);
        j++;
} else {
        newMonomial.push_back(left[i] + right[j]);
        i++;
        j++;
}</pre>
```

#### 4.4 Benchmark

Несмотря на простоту подхода, во многих библиотеках одночлены хранятся в **std::list** или **std::set**. Кроме лучшей асимптотики, подход с **std::vector** хранит одночлены в векторе эффективно по памяти - лишний раз не проиграем по кэшу и будем всегда точно знать сколько памяти используем. Также подобное хорошо сочитается с моделью памяти **Term**. Сравним это с реализацеий на **std::set** GroebnerBasisLib<sup>2</sup>.

Тест	ff4::Buchberger	GroebnerBasisLib::Buchberger	ff4::ImprovedBuchberger
cyclic4	1.04 мс	2.42 мс	2.15 мкс
sym3-3	217 мкс	2.85 мс	3.65 мкс
katsura4	21.95 мс	20.98 мс	58 мкс
katsura5	139.62 мс	392.34 мс	4.7 мс

Таблица 4.1: Измерения производительности алгоритмов Бухбергера для p=31, grevlex

ff4::Buchberger кратно лучше GroebnerBasisLib::Buchberger на многих тестах (за счет

 $<sup>^2 \</sup>verb|https://github.com/cdraugr/GroebnerBasis|$ 

модели памяти), в то время как ff4::ImprovedBuchberger за счет **GMI** для них просто недостижим. Далее в работе будем сравнивать именно ff4::ImprovedBuchberger с F4.

# 5 Алгоритм F4

Алгоритм F4 был опубликован Jean-Charles Faugère в 1999 [6]. Отличиет алгоритм F4 от алгоритма Бухбергера - функции **Select** и **Reduce**. Если есть желание ознакомиться с оригинальной работой, для начала порекомендую ознакомиться с её кратким описанием [7], после чего чтение изначальной работы упростится кратно.

Для начала опишем все методы, а затем подробно объясним как работает алгоритм. Во-первых введем новый объект - **CriticalPair**.

#### 5.1 CriticalPair

По сути, это будет всё та же пара (i,j), только мы сразу подсчитаем **TotalDegree**.  $TotalDegree(term) = \sum_{i=0}^{size(term)} term[i].$  Далее будем обозначать это как deg(term).

```
class CriticalPair {
    ...
    private:
        Polynomial left; // Left polynomial
        Polynomial right; // Right polynomial
        Term lcm; // lcm(lt(left), lt(right))
        Term::Degree degree; // deg(lcm)
}
```

#### 5.2 Select

Отметим, что сам алгоритм F4 позволяет использовать любую функцию **Select**. Тем не менее наиболее эффективной считается следующая:

#### Algorithm 4: Select

```
Input: Current set of critical pairs P

Output: Set of critical pairs to check on current step P', Updated set of critical pairs P

P' = \{\}

d = min_{deg}(P)

for cp \in P do

| if deg(cp) == d then
| P = P \cup \{cp\}
| end

end

P = P \setminus P'
```

Таким образом мы выбираем все критические пары, с минимальной суммарной степенью. Отличие от улучшенного Бухбергера - выбираются сразу все такие пары, а не одна. Более того, если выбирать ровно 1 такую пару, то алгоритм сводится к улучшенному алгоритму Бухбергера.

#### 5.3 Reduce

```
Algorithm 5: Reduce

Input : Set of critical pairs P', set of polynomials F

Output: New polynomials to add into the basis G

L = SymbolicPreprocessing(P', F)

M = \text{matrix with rows as polynomials in } L

M' = Reduce(M)

L' = \text{Polynomials}(M')

G = \{g \mid LT(g) \neq LT(F) \forall f \in F\}
```

Если раньше мы просто редуцировали один полином другими, то теперь мы сделали матрицу M, где строки это полиномы, столбцы это термы отсортированные в заданном порядке начиная с наибольшего, а значения в матрице - коэффициент терма в полиноме. И точно так же редуцируем (приводим к треугольному виду) только теперь матрицу. Но что такое SymbolicPreprocessing?

# 5.4 SymbolicPreprocessing

```
Algorithm 6: Symbolic Preprocessing
  Input: Set of critical pairs P', set of polynomials F
  Output: Set of polynomials L
  L = \{\}
  for p \in P' do
      L = L \cup \{\frac{p.lcm}{lt(p.left)} \cdot p.left\}
L = L \cup \{\frac{p.lcm}{lt(p.right)} \cdot p.right\}
  end
  done = \{lt(l)|l \in L\}
  while done \neq mon(L) do
       t = max_{term}(L \setminus done)
       done = done \cup \{t\}
       for f \in F do
            if t \mid lt(f) then
                L = L \cup \{ \frac{t}{lt(f)} \cdot f \}
            \quad \text{end} \quad
       \quad \text{end} \quad
```

Так определяется метод **Symbolic Preprocessing**. Потом L подаётся на вход в матрицу. Первый цикл, по сути добавляет S-пару в матрицу — если вычесть из верхнего нижнее:  $\frac{p.lcm}{lt(p.left)} \cdot p.left \ - \frac{p.lcm}{lt(p.right)} \cdot p.right = S(left, right)$ 

Второй цикл добавляет в матрицу все возможные редукторы этих S-пар. Так, получается, что за одну редукцию матрицы мы редуцируем сразу множество S-пар.

# 6 Оптимизация алгоритма F4

end

Несмотря на то, что стандартный алгоритм F4 относительно Бухбергера работает на порядки быстрее, некоторые идеи позволяют ускорить его кратно. Во-первых, всё тот же **GMI**. Он абсолютно идентичен, поэтому мы его не обсуждаем. Самое интересное - оптимизация матричных вычислений

## 6.1 GBLA[8]

Для начала вспомним, как строятся матрицы - сначала добавляются S-пары, а потом их редукторы.

Рис. 6.1: Внутренняя структура матрицы F4 [9]

Заметим, что для такой матрицы очень легко найти pivot row and columns. А давайте их переставим!

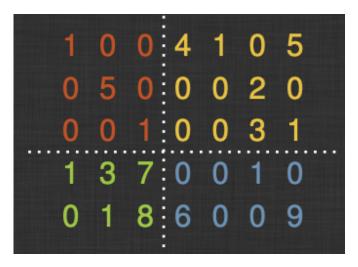


Рис. 6.2: Переставленные ряды и строки матрицы [9]

Теперь, скажем что матрица выглядит следующим образом:  $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ . Тогда вместо просто редукции матрицы, сделаем следующие операции:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \xrightarrow{TRSM} \begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ C & D \end{pmatrix} \xrightarrow{AXPY} \begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{pmatrix} \xrightarrow{reduce(D)} \begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ 0 & red(D - CA^{-1}B) \end{pmatrix}$$

Вся эта красота нам нужна для скорости. А сильно быстрее мы, потому что для любой матрицы в F4 верно (N - количество строк, M - количество столбцов, piv - количество строк квадратной матрицы A):

$$piv >> N - piv$$
 и  $piv >> M - piv$ 

Таким образом вместо первоначальной  $O(N^3)$ , мы получаем  $O(piv^2*(M-piv))+O(piv(M-piv)(N-piv))+O((N-piv)^3)\approx O(piv^2)$ . То есть кроме того, что мы уменьшили

степень, мы еще и уменьшили переменную от которой зависит оценка (хоть и не сильно).

В частности, такая оптимизация дала ускорение в 4 раза на katsura-9.

# 6.2 Simplify

В работах по алгоритму F4 и в его имплементациях на каждом шаге встречается метод **Simplify**. Он запоминает все изначальные полиномы которые вошли в матрицу, а затем результат редукции. Далее он пытается переиспользовать эти результаты, чтобы еще быстрее редуцировать полиномы. В некоторых работах даже утверждается, что F4 такой быстрый, именно благодаря данному методу. Тем не менее мои результаты сильно расходятся с этой теорией.

Реализация алгоритма была произведена на F4 с GBLA и сильно замедлила алгоритм. Связано это с тем, что очень дорого хранить результаты всех вычислений. Далее, будет понятно, почему это не проблема и почему нормально не использовать **Simplify**.

#### 6.3 Extended Criteria

В 2007 году была опубликована работа "An extension of Buchberger's criteria for Gröbner basis decision"[10, 11, 12]. На протяжении 18 страниц, там доказывается новый **Extended Criteria**, который включает в себя **gcd** и **lcm** критерии Бухбергера. Приведем сам критерий:

**Критерий 3.** (Extended criteria). Пусть  $p_1, p_2$  и  $p_3$  полиномы в F, и  $t_1 = lt(p_1), t_2 = lt(p_2), t_3 = lt(p_3)$ . Мы говорим что они соответствуют **расширенному критерию** если выполнены оба условия:

- $t2 \mid gcd(t_1, t_3) \ unu \ lcm(t_1, t_3) \mid t_2.$
- Для всех переменных  $x_i$  выполнено одно из двух условий:
  - $min(t_1[i], t_3[i]) = 0$
  - $-t_2[i] \leq max(t_1[i], t_3[i])$

Такой критерий легко добавить в GMI, рядом с LCM критерием.

Тут стоит чуть подробнее написать про критерии Бухбергера как сущность в линейной алгебре и в программировании. Если обратиться к источникам, то там можно найти, что **lcm** критерий и **расширенный критерий** определены для некоторой цепочки  $(t_1, \dots, t_k)$ . Что это за цепочки и почему они не встречаются ни в одной из реализаций алгоритмов?

Цепочки можно представлять как путь, в котором ребрами связаны полиномы, которые отредуцировались к нулю. Во всех реализациях же, цепочки содержат максимум 3 полинома. Связано это на самом деле с простым фактом - **любой** полином в алгоритмах по вычислению базиса Грёбнера когда-то отредуцируется к нулю. Действительно, если какой-то S-полином не отредуцировался к нулю, то мы его добавили в базис. А значит, уже с новым базисом он редуцируется к нулю. Поэтому не имеет смысла поддерживать никакие цепочки, достаточно лишь смотреть на пары  $(p_1, p_2), (p_2, p_3)$ .

Именно благодаря такому свойству, есть разница между теорией и имплементацией в критериях. Утверждать, что любой полином отредуцируется к нулю в текущем базисе нельзя, потому в теоретических работах возникают цепочки.

Имлементирован **Extended criteria** был последним, и стал решающим фактором, благодаря которому ff4 догнала openf4 по перфомансу. Если говорить о цифрах, то алгоритм стал работать на 30% быстрее. Объясняется это просто — если оптимизации матричных вычислений позволяют быстрее производить то или иное действие на конкретной матрице, то критерии позволяют исключить множество полиномов из этих матриц в самом начале.

#### 6.4 NOTGBLA

Несмотря на то, что такой подход описан в работе  $\mathbf{GBLA}$ , по какой-то причине на него не обращено должного внимания. Даже названия для него не выделили. Так что назовем его

**NOTGBLA**. Напомним результат **GBLA**: 
$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \xrightarrow{GBLA} \begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ 0 & red(D-CA^{-1}B) \end{pmatrix}$$

Вспомним что вообще делает алгоритм матричной редукции — какие полиномы являются результатом редукции? Только полиномы из правой нижней части. Тогда **NOTGBLA** предлагает делать следующее:

$$\begin{pmatrix} AB \\ CD \end{pmatrix} \xrightarrow{reduce(CD) \ by \ (AB)} \begin{pmatrix} AB \\ CD - C \cdot AB \end{pmatrix} \xrightarrow{reduce(D') \ by \ itself} \begin{pmatrix} A & B \\ 0 \ reduce(D') \end{pmatrix}$$

Если посмотреть на ассимптотику, то получим  $O(piv*(N-piv)*M) + O((N-piv)^3) \approx O(piv*M)$ . Выглядит больше чем было.

Так и есть. Первая попытка была неудачной и матричная редукция сильно замедлилась.

В этот момент в игру вступает разряженность матриц. У изначальной входной матрицы, примерно 95% значений равны нулю. Тогда, давайте для каждой строчки из (АВ) заранее посчитаем где нули, а где нет. И будем обновлять в (С D) используя только ненулевые значения из (АВ). Заметим, что в данном подходе (АВ) не изменяется, а значит мы

сможем использовать предподсчет в течении всей редукции.

Подобный подсчет ненулевых коэффициентов в **GBLA** не работает эффективно, так как значения постоянно везде изменяются, а там где не изменяются, таких значений в любом случае очень мало N-piv или же M-piv.

В итоге, **NOTGBLA** обгоняет **GBLA** подход на 25%.

Заметим, что в данном подходе, **Simplify** является абсолютно неэффективным, так как большая часть матрицы не изменяется.

# 7 Реализация алгоритма F4

Так как алгоритм большой, то опишем только интересные и неочевидные части. С полной версией можно ознакомиться на  ${\rm Git}{\rm Hub}^3$ .

Реализации порядков, полей и внутренних классов уже обсудили выше, в части про реализацию алгоритма Бухбергера.

## 7.1 UpdateL

Функция используемая для нахождения редукторов в SymbolicPreprocessing

```
void UpdateL(TPolynomials& L,
            Term& term,
            TPolynomialSet& polynomials,
            TTermHashSet& diff,
            TTermHashSet& done) {
    for (const auto& polynomial : polynomials) {
        const auto& t = polynomial.GetLeadingTerm();
        if (term.IsDivisibleBy(t)) {
            Polynomial reducer = (term / t) * polynomial;
            L.push_back(std::move(reducer));
            for (const auto& m : L.back().GetMonomials()) {
                if (!done.contains(m.GetTerm())) {
                    diff.insert(m.GetTerm());
                }
            }
            break;
```

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>https://github.com/KaurkerDevourer/ff4

```
}
}
```

done - уже обработанные термы, diff - термы которые еще нужно обработать.

#### 7.2 Matrix

**Matrix** реализована на стандартном векторе, обращение к элементам идет через operator(). Были попытки хранить A, B, C, D отдельно, или немного внутренне переставить индексацию, но самым быстрым вариантом оказалось ничего подобного не делать.

#### 7.3 FillMatrix

Эта функция интересна тем, что мы сразу заполняем матрицу в формате **GBLA**, вместо того, чтобы потом переставлять ряды и столбцы.

```
template <typename TCoef, typename TComp>
size_t FillMatrix(TPolynomials < TCoef, TComp >& F,
                Matrix < TCoef > & matrix ,
                 std::vector<Term>& vTerms,
                 const std::vector<Term>& diffSet,
                 std::vector<std::vector<size_t> >& nnext) {
    size_t cnt = 0;
    size_t swp = 0;
    std::vector<bool> not_pivot(F.size());
    TTermHashSet leadingTerms;
        // storing leading terms, to find pivots
    std::unordered_map < Term, size_t > Mp;
        // mapping term -> column
    for (size_t i = 0; i < F.size(); i++) {</pre>
        auto [_, inserted] =
            leadingTerms.insert(F[i].GetLeadingTerm());
        if (!inserted) {
            not_pivot[i] = true;
            swp++;
            continue;
        }
```

```
Mp[F[i].GetLeadingTerm()] = cnt;
    vTerms[cnt] = F[i].GetLeadingTerm();
    cnt++;
}
cnt = diffSet.size() - 1;
for (auto& term : diffSet) {
    if (Mp.find(term) == Mp.end()) {
        Mp[term] = cnt;
        vTerms[cnt] = term;
        cnt --;
    }
}
nnext.reserve(F.size() - swp);
for (size_t i = 0, j = 0; i < F.size(); i++) {</pre>
    if (not_pivot[i]) {
        j++;
        continue;
    }
    std::vector<size_t> next;
    next.reserve(F[i].GetMonomials().size());
    for (const auto& m : F[i].GetMonomials()) {
        const auto& term = m.GetTerm();
        size_t column = Mp[term];
        matrix(i - j, column) = m.GetCoef();
        next.push_back(column);
    }
    nnext.push_back(std::move(next));
    }
}
for (size_t i = 0, j = 0; i < F.size(); i++) {</pre>
    if (!not_pivot[i]) {
        continue;
    }
```

```
for (const auto& m : F[i].GetMonomials()) {
        const auto& term = m.GetTerm();
        matrix(F.size() - 1 - j, Mp[term]) = m.GetCoef();
    }
    j++;
}
return F.size() - swp;
}
```

#### 7.4 NOTGBLA

Приведем метод редукции нижних рядов верхними **NOTGBLA**, из интересного - std::vector<size\_t> next, тот самый предподсчитанный вектор который делает этот алгоритм быстрее GBLA.

```
template <typename TCoef >
void NOTRSM(Matrix<TCoef>& matrix,
            size_t pivots,
            const std::vector<std::vector<size_t> >& nnext) {
    for (size_t i = 0; i < pivots; i++) {</pre>
        const auto& next = nnext[i];
        for (size_t j = pivots; j < matrix.N_; j++) {</pre>
             if (matrix(j, i) != 0) {
                 TCoef factor = matrix(j, i);
                 for (size_t k = 0; k < next.size(); k++) {</pre>
                     matrix(j, next[k]) -= factor * matrix(i, next[k]);
                 }
            }
        }
    }
}
```

## 7.5 Распараллеливание

Неожиданным стало, что распараллеливать в полученном алгоритме в общем то нечего. То есть, конечно, можно распараллелить **NOTRSM**, а именно часть с вычитанием полинома, но, оказывается, что так как это очень маленькая часть, то threading только замедляет. Ознакомиться можно в пулл-реквесте GitHub<sup>4</sup>. В матричных вычислениях кроме **NOTRSM** нечего распараллеливать, как и во всем остальном коде. Поэтому результат данной работы - просто оптимизированный алгоритм F4.

# 8 Оптимизация имплементации алгоритма F4

Даже после всех упомянутых выше математических оптимизаций, было видно что код неоптимален. Об оптимизациях кода поговорим именно в этой секции.

#### 8.1 TermHash

На первых стадиях, все структуры для поиска одинаковых элементов были реализованы через std::set. std::set — это красно-черное бинарное дерево. Проблема с Term - ordering. Как устроен поиск в бинарном дереве - спускаемся от корневой вершины либо влево, либо вправо, в зависимости от того, больше мы текущего значения, или нет. Для этого сравнения, в любом ордеринге нам нужно пройти по всем элементам в term. Таким образом, ассимптотика на самом деле  $O(logN \cdot term.size())$ . Поэтому выбор был сделан в сторону хеш таблицы. Для этого была реализована базовая хеш функция, перфоманс улучшился на 15%.

#### 8.2 TermRef

Однако после реализации хеша и перехода на хеш таблицы возникла новая проблема. Хеш таблицы реализованы так, что сначала они сравнивают хеш, а потом сами ключи. Поэтому они хранят копию ключа. **Term** - достаточно дорогой объект для копирования. Поэтому пришлось завести **TermRef**. Обычного указателя недостаточно, так как нужен кастомным орегator==, чтобы сравнивать именно внутренности терма, а не то, на что указывает указатель. Это не сильно ускорило код (пару процентов), зато мы сделали максимально аккуратно, а главное посору.

#### 8.3 CriticalPair

Внутри left и right лежат как ссылки. Достичь этого было не очень просто - есть много критериев, удалений, нужно внимательно следить за памятью. Такой подход дал большое ускорение, так как полиномы очень тяжелые.

<sup>4</sup>https://github.com/KaurkerDevourer/ff4/pull/14

# 9 Benchmarks

#### 9.1 Профилирование

Во время написания библиотеки, много времени было уделено на профайлинг. Делалось это стандартной утилитой valgrind. Картинки, которые вы увидите далее из qcachegrind. Приведем тут некоторые примеры. Итоговый профиль выглядит так:

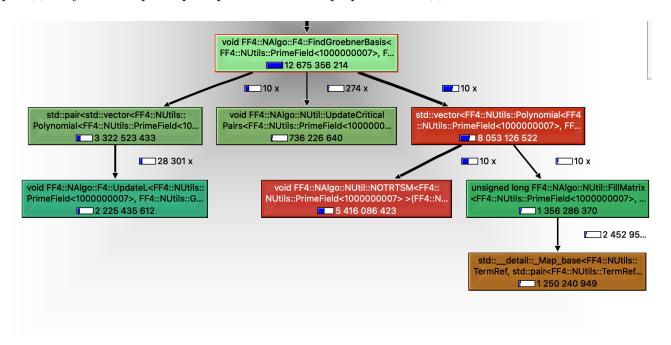


Рис. 9.1: Профиль ff4::F4

Для этого конкретного профиля использовался тест katsura-10. 25% занимает **SymbolicPreprocessing**. 65% занимают матричные вычисления. Из них - 9.5% занимают хеш мапы, 43% занимает **NOTRSM**. Если же использовать **GBLA**, то получается следующая картина:

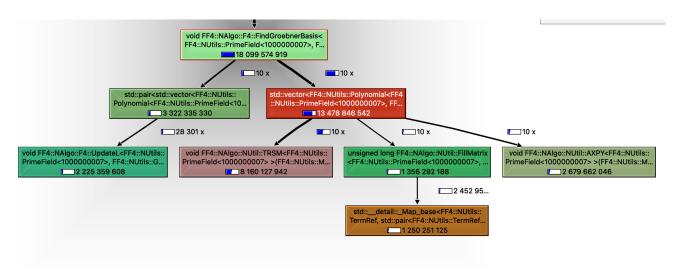


Рис. 9.2: Профиль ff4::F4 с GBLA

А вот так выглядил профиль до замены всех map на hash map:

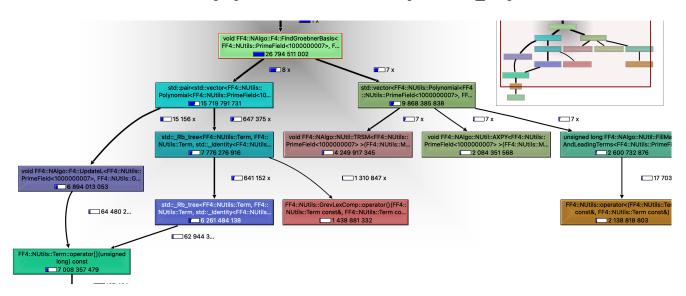


Рис. 9.3: Профиль ff4::F4 с map вместо hash\_map

Исходя из профайлинга можно сделать вывод, что только оптимизаций матричных вычислений недостаточно. В любой реализации, **SymbolicPreprocessing** занимает достаточно большую часть времени. Это еще один аргумент в пользу того, что **Simplify** метод переоценен, и на самом деле не нужен.

# 9.2 Результаты

Все бенчмарки проводились на MacBook Pro 23, Apple M2 Pro, 32Gb. Выглядяли они просто - запоминалось время входа в функцию замера, и время выхода из неё. Для маленьких тестов алгоритм запускался 1000 раз, для больших разово. В таблице приведено среднее время запусков. — в табличке означает, что алгоритм не завершился за разумное время. Все измерения в мс, для поля вычетов по простому модулю и grevlex порядка.

Тест	ff4::F4	openf4	GroebnerBasisLib::F4
sym3-3	0.123	0.474	2
cyclic4	0.006	0.523	1.6
cyclic5	0.363	1.3	114
cyclic6	3	7.1	1.7
cyclic7	73	231	_
katsura4	0.004	0.472	2.1
katsura5	0.524	0.791	4.7
katsura9	127	106	_
katsura10	641	586	_
katsura11	3514	3520	_
katsura12	21300	22400	_

Таблица 9.1: Измерения производительности алгоритмов F4 для  $p = 10^9 + 7$ , grevlex

По ним заметно, что мы обгоняем **openf4** на всех тестах кроме тестов среднего размера семейства **katsura**. На самом деле, на самых маленьких тестах мы тоже не быстрее производим вычисления, но интерфейс **openf4** вводит его в рамки — ему приходится парсить строки, и из них составлять полиномы, что на маленьких тестах занимает большую часть времени. Интересно, что на **katsura12** мы уже быстрее **openf4**. Это говорит о том, что наш подход очень удачный — чем больше входные данные, тем мы ближе к **openf4**, а потом и вовсе быстрее.

ff4::ImprovedBuchberger на cyclic7 работает 23.6 секунды, а на katsura9 и вовсе ООМится.

## 10 Итоги

По результатам работы, мы оптимизировали алгоритм F4 настолько, что он стал работать быстрее стандартных open-source вариантов. Кроме того, мне не удалось найти ни одного open-source проекта с реализацией алгоритма F4, который работал бы быстрее приведенного в работе. Также, стоит заметить, что ff4 позволяет изменять поле и порядок, чем, не может похвастаться большинство библиотек, например, openf4.

Ещё одним из результатов работы является NOGBLA, показавший эффективность нетрадиционных подходов, и, что метод Simplify сильно переоценён многими авторами.

# Список литературы

- [1] Bruno Buchberger. "Ein Algorithmus zum Auffinden der Basiselemente des Restklassenringes nach einem nulldimensionalen Polynomideal". B: *Ph. D. Thesis, Math. Inst., University of Innsbruck* (1965).
- [2] ИВ Аржанцев. "Базисы Грёбнера и системы алгебраических уравнений". В: M.: M U H-MO 68 (2003).
- [3] Thomas W Dubé. "The structure of polynomial ideals and Gröbner bases". B: SIAM Journal on Computing 19.4 (1990), c. 750—773.
- [4] Ernst W Mayr и Albert R Meyer. "The complexity of the word problems for commutative semigroups and polynomial ideals". В: Advances in mathematics 46.3 (1982), с. 305—329.
- [5] Rüdiger Gebauer и H Michael Möller. "On an installation of Buchberger's algorithm". B: Journal of Symbolic computation 6.2-3 (1988), с. 275—286.
- [6] Jean-Charles Faugere. "A new efficient algorithm for computing Grobner basis". B: (F4) (2002).
- [7] Dylan Peifer. "The F4 Algorithm". B: (2017).
- [8] Brice Boyer, Christian Eder, Jean-Charles Faugere, Sylvian Lachartre и Fayssal Martani. "GBLA: Gröbner basis linear algebra package". B: Proceedings of the ACM on International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation. 2016, с. 135—142.
- [9] Christian Eder. Computing Gröbner Bases a short overview.
  Technische Universität Kaiserslautern, 11 ceht. 2014. URL: https://caramba.loria.fr/sem-slides/201409111030.pdf.
- [10] John Perry. "An extension of Buchberger's criteria for Gröbner basis decision". B: LMS Journal of Computation and Mathematics 13 (2010), c. 111—129.
- [11] Hoon Hong и John Perry. "Are Buchberger's criteria necessary for the chain condition?" В: Journal of Symbolic Computation 42.7 (2007), с. 717—732.
- [12] Hoon Hong и John Perry. "Corrigendum to? Are Buchberger? s criteria necessary for the chain condition??[J. Symbolic Comput. 42 (2007) 717? 732]". B: Journal of Symbolic Computation 43.3 (2008), c. 233.
- [13] Till Stegers. "Faugere's F5 algorithm revisited". B: Cryptology ePrint Archive (2006).
- [14] Jean-Pierre Merlet. *Polynomial systems*. URL: https://www-sop.inria.fr/coprin/logiciels/ALIAS/Benches/node1.html.

# А Семейства примеров

Я специально не определял, что это за семейства тестов мы используем. Нужно это для погружения в атмосферу, которой окружены базисы Грёбнера. Дело в том, что если вы проведете какое-то время изучая работы по базисам Грёбнера, вы наткнетесь на семейства тестов katsura, cyclic и другие. И очень сложно разобраться, откуда же берутся данные примеры и как их генерировать. Со второй проблемой помогают справиться специально написанные в этой работе генераторы<sup>5</sup>. Первая проблема гораздо серьезнее. Например, для cyclic даже интуитивно понятно, что это и как его строить:

Сп(
$$\mathbf{x}$$
) = 
$$\begin{cases} x_0 + x_1 + \dots + x_{n-1} = 0 \\ x_0 x_1 + x_1 x_2 + \dots + x_{n-2} x_{n-1} + x_{n-1} x_0 = 0 \\ i = 3, 4, \dots, n-1 : \sum_{j=0}^{n-1} \prod_{k=j}^{j+i-1} x_k \mod n = 0 \\ x_0 x_1 x_2 \cdots x_{n-1} - 1 = 0. \end{cases}$$

Рис. A.1: Cyclic

<sup>5</sup>https://github.com/KaurkerDevourer/ff4/tree/main/generators

Однако для **katsura**, непонятно уже ничего. Проблема семейств тестов - нет никакой общей базы. Лучшее что я смог найти, это примеры конкретных тестов в книге посвященной алгоритму F5: [13]. Важно понимать, что под h во всех тестах имеется ввиду константа. Тем не менее, так как книга старая, то многие ссылки уже не работают. Зная, как тяжело найти определение семейства **katsura**, очень хочется поделиться им в этой работе. Само определение находится на [14], и выглядит следующим образом:

for 
$$m \in \{-n+1, ..., n-1\}$$

$$\sum_{l=-n}^{l=n} u(l)u(m-l) = u(m)$$

$$\sum_{l=-n}^{l=n} u(l) = 1$$

$$u(l) = u(-l)$$

$$u(l) = 0 \text{ for } |l| > n$$

Рис. A.2: Katsura

Чтобы осознать что это за тесты, в любом случае придется немного посидеть с ручкой и бумажкой. Отрицательные числа тут определены, только для того, чтобы дать красивую формулу. На самом деле, тут отражается влево изначальный набор коэффициентов  $[0,1,2,3] \rightarrow [3,2,1,0,1,2,3]$ . Каждый полином состоит из произведения термов, у которых разница в индексах ровно l. Если посмотреть в приведенный выше генератор станет еще понятнее.

Надеюсь, этот кусочек поможет лучше разобраться с семействами тестов в будущих работах.