PRES LUNAM
Ecole Doctorale STIM
Sciences et Technologies de l'Information et Mathématiques

Spécialité : Informatique
Laboratoire : LINA
Equipe : OPTI

Continuation certifiée par domaines de parallélotopes

Martin Benjamin
Mél : benjamin.martin@univ-nantes.fr

Résumé : Les méthodes de continuation s'intéressent à la résolution de systèmes d'équations possédant moins d'équations que de variables. Les solutions de tels systèmes forment, sous-condition de régularité, des variétés (i.e. des courbes, des surfaces, etc). De nombreux problèmes sont modélisables sous la forme de tels systèmes. Ainsi, ces méthodes sont utilisées dans de nombreux domaines. En revanche, la majeure partie des méthodes de la littérature sont non-certifiées : elle n'assurent pas qu'entre deux solutions du système, découverte par continuation, qu'il existe une variété de solutions entre elles. Ce point n'est pas critique dans certaines applications mais l'est dans d'autres où de telles pertes d'informations peuvent engendrer des calculs incomplets ou inexacts. On propose ici une méthode de continuation certifiée utilisant des avancées récente de la programmation par contraintes : les domaines de parallélotopes. Cette méthode propose de construire un pavage d'une variété de dimension 1, définie comme étant les solutions d'un système d'équation, et s'assure de la continuité des solutions découvertes. La méthode est présentée synthétiquement dans cet article, et une expérimentation est montrée. La conclusion s'intéressera aux perspectives de ces travaux.

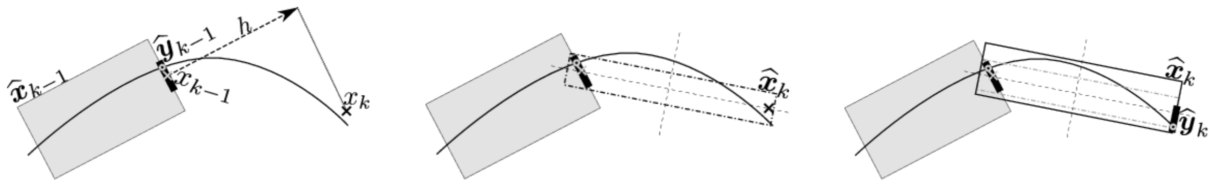
Mots clés : *Continuation numérique, Analyse par Intervalle, Programmation par contraintes*

1 Introduction

Les méthodes de continuation [1] permettent d'explorer et d'approximer pas à pas une variété de solutions, habituellement définies par un système d'équations sous contraint $F(x) = 0$ avec $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ et $m < n$. Dans le cas où les solutions du système sont régulières, le théorème des fonctions implicites précise que la variété de solutions du système est de dimensions $n - m = k$. Plus précisément, quand $k = 1$, les variétés sont des courbes ; quand $k = 2$ ce sont des surfaces, etc. On s'intéressera au cas où $k = 1$, où les variétés sont des courbes, et on propose une méthode robuste et certifiée de continuation. La continuation a un large champs d'applications, par exemple la recherche des racines de polynômes via homotopie [2], les problèmes de valeurs propres non-linéaire [3], la planification de trajectoire en robotique [4], l'optimisation non-linéaire multi-objectif [5, 6], etc.

Parmi les méthodes classiques, la plus simple et efficace est la méthode de prédiction-correction. Elle fonctionne en deux étapes : la prédiction d'un point le long de la variété à une distance h d'une solution initiale, et la correction du point prédit afin de le rapprocher de la variété. Le processus est répété en partant du point corrigé comme solution initiale. Parmi les méthodes de prédiction-correction, on note les méthodes de changement de paramètres [7, 8] et les méthodes "pseudo-arclength" qui ont l'avantage par rapport aux premières de suivre plus naturellement la forme de la variété [9]. Toutes ces méthodes sont toutefois sujet à sauter entre deux composants non-connectés de la variété. Dans certains contextes, ce n'est pas un problème majeur car des solutions du système sont néanmoins calculées. Toutefois, d'une part, cela contredit la nature même de la continuation, et d'autre part, s'assurer de la connectivité des solutions détectées est importante dans certaines applications, par exemple dans les méthodes d'homotopie afin de s'assurer de retrouver toutes les racines d'un polynôme.

L'analyse par intervalle [10] peut être utilisée pour obtenir des certificat d'existence de solutions d'un système (et de continuité si ce système est sous-contraint) a l'intérieur d'un encadrement intervalle via par l'exemple le test d'existence de Newton. Une méthode certifiée utilisant des boîtes (i.e. des vecteurs d'intervalles) a été proposée dans [11]. Cette méthode propose de construire pas à pas un encadrement certifiée, avec des boîtes, d'une composante connexe d'une variété de dimension 1 vue comme solution d'un système d'équations. Cette méthode souffre néanmoins d'une difficulté à être paramétrée correctement, et l'encadrement par boîtes capture difficilement la forme de la variété. Dans [12], les domaines de parallélotopes ont été introduits. Ils permettent de construire des encadrements certifiés épousant l'orientation locale d'une variété. En revanche, les parallélotopes sont utilisées dans [12] a l'intérieur d'un module de résolution de problèmes de satisfaction de contraintes. On propose ici une continuation certifiée, utilisant



(a) Prédiction-Correction afin d'obtenir une solution approximée x_k.

(b) Construction d'un parallélotope initial $\widehat{\boldsymbol{x}}_k$.

(c) Certification de $\widehat{\boldsymbol{x}}_k$. Encadrement de la solution sur la face de sortie.

FIGURE 1 – Étapes principales de ParCont.

l'analyse par intervalle et les domaines de parallélotopes, afin de construire des encadrements de variétés de solutions de systèmes sous contraints.

2 Continuation par parallélotopes

On propose ici un algorithme de continuation certifié, utilisant les domaines de parallélotopes, appelé ParCont. Cet algorithme superpose des constructions de parallélotopes, suivit de plusieurs tests ayant pour finalité d'assurer la connectivité entre deux parallélotopes consécutifs. L'algorithme reçoit en entrée : un système F dont les solutions forment une variété de dimension 1, une solution initiale et approximative x_0 du système, et un domaine $\boldsymbol{x}^{\text{init}}$ dans lequel la variété sera encadrée. L'algorithme construit ensuite itérativement deux séquences de parallélotopes $(\widehat{\boldsymbol{x}}_k)$ et $(\widehat{\boldsymbol{y}}_k)$. Chaque parallélotope $\widehat{\boldsymbol{x}}_k$ est traversé, depuis une face d'entrée jusqu'a une face de sortie opposée, par un morceau de la variété de solutions. Les parallélotopes $\widehat{\boldsymbol{y}}_k$ encadrent eux la solution sur la face de sortie de $\widehat{\boldsymbol{x}}_k$ (exception de $\widehat{\boldsymbol{y}}_0$ qui encadre la solution d'entrée du tout premier parallélotope $\widehat{\boldsymbol{x}}_1$). La connexion entre deux parallélotopes consécutifs $\widehat{\boldsymbol{x}}_k$ et $\widehat{\boldsymbol{x}}_{k+1}$ est assurée par la construction de $\widehat{\boldsymbol{x}}_{k+1}$ qui doit contenir $\widehat{\boldsymbol{y}}_k$.

On peut ainsi résumer les étapes d'une itération k de l'algorithme de la manière suivante :

1. **Prédiction-Correction :** En partant d'une solution approximée $x_{k-1} \in \widehat{\boldsymbol{y}}_{k-1}$, cette étape prédit une solution a distance h le long de la variété, puis la corrige (la rapproche de la variété). On obtient ainsi une solution approximée x_k (cf Figure 1(a)).
2. **Construction d'un parallélotope initial :** Construction d'un parallélotope contenant $\widehat{\boldsymbol{y}}_{k-1}$ et x_k et orienté suivant la pente de la variété (cf. Figure 1(b)).
3. **Certification et validation du parallélotope :** Application d'un test d'existence de type Newton intervalle sur le parallélotope à l'instar de [12]. Si la preuve d'existence et de connectivité est obtenue, le parallélotope suit une étape de validation assurant, entre autres, que le pas de continuation n'a pas effectué un retour en arrière (cf. Figure 1(c)).
4. **Encadrement fin du bord de sortie du parallélotope :** Connaissant l'orientation du parallélotope et le sens de la continuation, cette étape construit d'un encadrement précis $\widehat{\boldsymbol{y}}_k$ sur la face de sortie du parallélotope (cf. Figure 1(c)).
5. **Mise à jour :** Les critères d'arrêts de la méthode sont évalués, et le pas h mis à jour suivant la réussite (validation) ou l'échec (non-validation) du pas courant. En cas d'échec, le pas h est réduit et l'itération k est recommencée. En cas de succès, le pas h est augmenté et l'algorithme passe à l'itération $k+1$.

L'algorithme s'arrête quand le pas h est trop faible (i.e. en cas d'un trop grand nombre d'échecs consécutifs), si la continuation sort du domaine $\boldsymbol{x}^{\text{init}}$, ou bien quand un parallélépipède contenant $\widehat{\boldsymbol{y}}_0$ est validé (dans ce cas, la variété est cyclique).

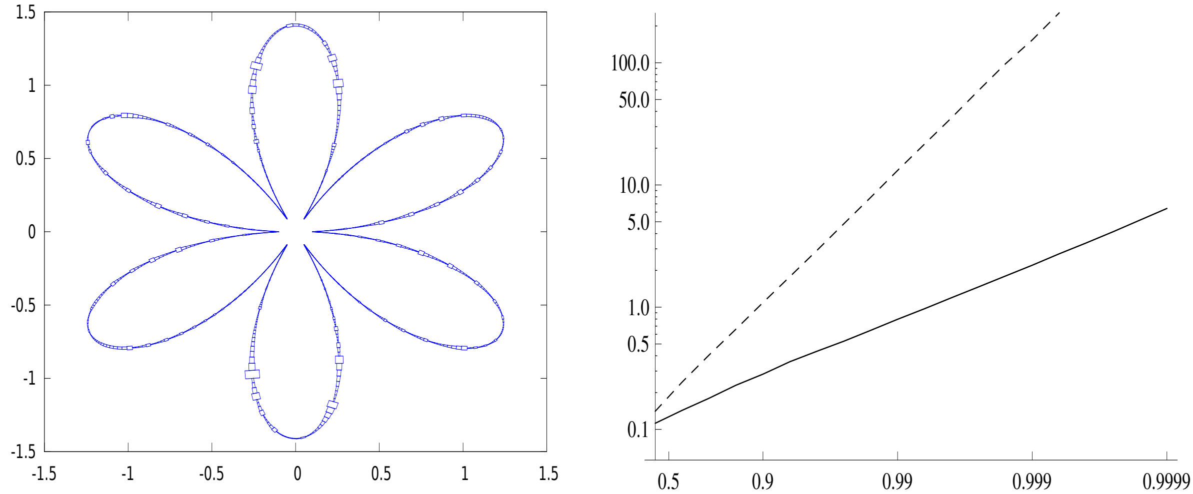
Soit K la dernière itération effectuée avant l'arrêt de ParCont. Le théorème suivant assure que les parallélotopes construit par ParCont encadrent un morceau continu de la variété de solutions de $F(x) = 0$, représentable par une courbe paramétrée par sa longueur.

Théorème 1 *Soit* $(\widehat{\boldsymbol{x}}_1, \ldots, \widehat{\boldsymbol{x}}_K)$ *et* $(\widehat{\boldsymbol{y}}_0, \ldots, \widehat{\boldsymbol{y}}_K)$ *des séquences de parallelotopes produitent par ParCont. Il existe* $L > 0$ *et une courbe* $\gamma : [0, L] \to \cup_{k=1}^{K} \widehat{\boldsymbol{x}}_k$ *tel que :*

(i) $\forall t \in [0, L]$, $F(\gamma(t)) = 0$ *et* $F'(\gamma(t))$ *est de plein rang (*$\gamma(t)$ *est une solution régulière).*

(ii) γ *est dérivable dans* $]0, L[$, *et* $\|\gamma'(t)\| = 1$.

La preuve est obtenue grâce aux certifications basés sur les tests Newton intervalle [10] adaptée aux parallélotopes [12], et grâce a la connectivité entre deux parallélotopes consécutifs.



(a) Sortie de ParCont pour $\epsilon = 0.99$.

(b) Temps de calcul (s) vs ϵ. La ligne pleine correspond à ParCont, la ligne pointillée à BoxCont.

FIGURE 2 – Résultats de ParCont et BoxCont sur le problème définir par (1).

3 Résultats numériques

L'algorithme ParCont a été implémenté en C++ en utilisant l'API RealPaver [13], implémentant de nombreuses routines comme des méthodes de Newton intervalle, et qui utilise Gaol [14] comme librairie pour l'arithmétique intervalle ; et Lapack [15] comme librairie pour l'algèbre linéaire. Les résultats sont comparés à BoxCont, une version de ParCont utilisant les domaines de boîtes au lieu de parallélotopes, s'inspirant de [11].

Les deux algorithmes ont été testés sur divers problèmes. D'abord des problèmes académiques afin d'observer leurs comportements vis à vis d'une part de la topologie d'une variété, et d'autre part de la dimension de l'espace contenant une variété. ParCont a également été appliqué sur des problèmes de calcul de racines de polynôme complexes, dont les résultats ont été comparés à une autre méthode certifiée, sans analyse par intervalle, NAG4M2 [2]. Enfin, divers autres problèmes ont été considérés : certains s'inspirant de problèmes de robotique, d'autres de problèmes d'optimisation bi-objectif non-linéaire, en suivant [5]. On s'attardera ici sur un des problèmes académiques à la topologie paramétrable.

Soit le système à deux variables, et un paramètre $\epsilon \in [0, 1]$, suivant :

$$x^8 - (1-\epsilon)x^6 + 4x^6y^2 - (3+15\epsilon)x^4y^2 + 6x^4y^4 - (3-15\epsilon)x^2y^4 + 4x^2y^6 - (1+\epsilon)y^6 + y^8. \tag{1}$$

La variété de solutions de ce système prend l'apparence d'une fleur à 6 pétales dont ϵ détermine la taille du pistil : plus ϵ est proche de 1, plus les pétales sont long et plus les courbures de la variété sont fortes. En faisant varier la valeur de ϵ, on est en mesure de tester la robustesse de la continuation vis à vis des courbures (i.e. de la topologie) de la variété.

Les résultats sont présentés sur la Figure 2. On observe sur la Figure 2(b) l'avantage de l'utilisation des parallélotopes au lieu de boîtes. En effet, en s'adaptant mieux à la forme des courbures, beaucoup moins de parallélotopes sont nécessaires que de boîtes pour couvrir toute la variété. Il en résulte un temps de calcul bien moins prohibitif pour les parallélotopes sur des variétés complexes, et une capacité a bien s'adapter aux courbures très fortes.

4 Conclusion

La méthode de continuation par domaine de parallélotopes ParCont propose une manière efficace, et relativement simple, d'effectuer de la continuation certifiée. Les applications induite par cette méthode sont nombreuses. Néanmoins, le domaine qui nous intéresse particulièrement est l'optimisation bi-objectif non-linéaire. Dans ces problèmes d'optimisation, les solutions sont évaluées sur plusieurs critères contradictoire. Ainsi il n'existe pas une meilleure solution, mais un ensemble de solutions non-dominées, i.e. pour lesquelles il n'existe pas d'autres meilleures sur tout les critères.

Ces ensembles de solutions non-dominées forment des variétés, de dimension 1 dans le cas bi-objectif, caractérisées par les contraintes d'optimalité de premier ordre [5]. Ainsi, pourvu qu'une solution dominée soit connu, il est possible avec ParCont d'explorer tout un ensemble de solutions non-dominées, et de prouver sa continuité et son existence. De telles preuves apportent une information importante, notamment dans le cadre de l'optimisation globale, afin d'élaguer l'espace de recherche une fois un ensemble de solutions détecté. Ces travaux s'orientent vers de telles perspectives d'utilisation de ParCont afin d'accélérer la résolution globale de problèmes bi-objectif non-linéaire. Le couplage de méthodes de continuation avec des méthodes d'optimisation Multi-Objectif a montré un certains intérêt dans la littérature récente, par exemple [6, 16]. Néanmoins, à notre connaissance, rien n'existe sur une continuation certifiée appliquée dans ce cadre.

Références

[1] E. L. Allgower and K. Georg. *Introduction to Numerical Continuation Methods.* Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.

[2] C. Beltrán and A. Leykin. Certified numerical homotopy tracking. *Exp. Math.*, 21(1) :69–83, 2012.

[3] W-J. Beyn, C. Effenberger, and D. Kressner. Continuation of eigenvalues and invariant pairs for parameterized nonlinear eigenvalue problems. *Numerische Mathematik*, 119 :489–516, 2011.

[4] J.P. Merlet. *Parallel robots.* Kluwer, Dordrecht, 2000.

[5] C. Hillermeier. Generalized homotopy approach to multiobjective optimization. *J. Optim. Theory Appl.*, 110(3) :557–583, September 2001.

[6] O. Schütze, C. A. C. Coello, S. Mostaghim, E-G. Talbi, and M. Dellnitz. Hybridizing evolutionary strategies with continuation methods for solving multi-objective problems. *Engineering Optimization*, 40 :383–402, 2008.

[7] W. C. Rheinboldt. Solution fields of nonlinear equations and continuation methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 17(2) :221–237, 1980.

[8] W. C. Rheinboldt. Numerical analysis of continuation methods for nonlinear structural problems. *Computers and Structures*, 13 :103–113, 1981.

[9] K. I. Dickson, C. T. Kelley, I. C. F. Ipsen, and I. G. Kevrekidis. Condition estimates for pseudo-arclength continuation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45(1) :263–276, 2007.

[10] A. Neumaier. *Interval Methods for Systems of Equations (Encyclopedia of Mathematics and its Applications).* Cambridge University Press, January 1991.

[11] R. B. Kearfott and Z. Xing. An interval step control for continuation methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(3) :pp. 892–914, 1994.

[12] A. Goldsztejn and L. Granvilliers. A new framework for sharp and efficient resolution of NCSP with manifolds of solutions. *Constraints*, 15(2) :190–212, 2010.

[13] L. Granvilliers and F. Benhamou. Algorithm 852 : Realpaver : an interval solver using constraint satisfaction techniques. *ACM Trans. Math. Softw.*, 32(1) :138–156, March 2006.

[14] F. Goualard. *GAOL 3.1.1 : Not Just Another Interval Arithmetic Library.* Laboratoire d'Informatique de Nantes-Atlantique, 4.0 edition, October 2006.

[15] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide.* Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, third edition, 1999.

[16] K. Harada, J. Sakuma, S. Kobayashi, and I. Ono. Uniform sampling of local pareto-optimal solution curves by pareto path following and its applications in multi-objective GA. In *Genetic and Evolutionary Computation Conference*, pages 813–820, 2007.