Oracle de Boltzmann effectif

Carine Pivoteau

avec Bruno Salvy et Michèle Soria

LIP6 - UPMC

11 décembre 2008

Exemple

Spécification combinatoire d'un langage algébrique :

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{C}_0 & = & \mathcal{Z}\mathcal{C}_1\mathcal{C}_2\mathcal{C}_3(\mathcal{C}_1+\mathcal{C}_2) \\ \mathcal{C}_1 & = & \mathcal{Z}+\mathcal{Z}\textsc{Seq}(\mathcal{C}_1^2\mathcal{C}_3^2) \\ \mathcal{C}_2 & = & \mathcal{Z}+\mathcal{Z}^2\textsc{Seq}(\mathcal{Z}C_2^2\textsc{Seq}(\mathcal{Z}))\textsc{Seq}(\mathcal{C}_2) \\ \mathcal{C}_3 & = & \mathcal{Z}+\mathcal{Z}(3\mathcal{Z}+\mathcal{Z}^2+\mathcal{Z}^2\mathcal{C}_1\mathcal{C}_3)\textsc{Seq}(\mathcal{C}_1^2) \end{array}$$

Le système de séries génératrices associé :

$$\begin{array}{l} C_0(z)=zC_1(z)C_2(z)C_3(z)(C_1(z)+C_2(z)) \\ C_1(z)=z+z/(1-C_1(z)^2C_3(z)^2) \\ C_2(z)=z+z^2/((1-zC_2(z)^2/(1-z))(1-C_2(z))) \\ C_3(z)=z+z(3z+z^2+z^2C_1(z)C_3(z))/(1-C_1^2(z)) \end{array}$$

Exemple

Spécification combinatoire d'un langage algébrique :

$$
\begin{aligned}
\mathcal{C}_0 &= \mathcal{Z}\mathcal{C}_1\mathcal{C}_2\mathcal{C}_3(\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) \\
\mathcal{C}_1 &= \mathcal{Z} + \mathcal{Z}\textsc{Seq}(\mathcal{C}_1^2\mathcal{C}_3^2) \\
\mathcal{C}_2 &= \mathcal{Z} + \mathcal{Z}^2\textsc{Seq}(\mathcal{Z}C_2^2\textsc{Seq}(\mathcal{Z}))\textsc{Seq}(\mathcal{C}_2) \\
\mathcal{C}_3 &= \mathcal{Z} + \mathcal{Z}(3\mathcal{Z} + \mathcal{Z}^2 + \mathcal{Z}^2\mathcal{C}_1\mathcal{C}_3)\textsc{Seq}(\mathcal{C}_1^2)
\end{aligned}
$$

Le système de séries génératrices associé : avec $z = 0.27$

$$
\begin{aligned}
&C_0(z) = zC_1(z)C_2(z)C_3(z)(C_1(z) + C_2(z)) \\
&C_1(z) = z + z/(1 - C_1(z)^2C_3(z)^2) \\
&C_2(z) = z + z^2/((1 - zC_2(z)^2/(1 - z))(1 - C_2(z))) \\
&C_3(z) = z + z(3z + z^2 + z^2C_1(z)C_3(z))/(1 - C_1^2(z))
\end{aligned}
$$

Exemple

Spécification combinatoire d'un langage algébrique :

$$
\begin{array}{rcl}
\mathcal{C}_0 & = & \mathcal{Z}\mathcal{C}_1\mathcal{C}_2\mathcal{C}_3(\mathcal{C}_1+\mathcal{C}_2) \\
\mathcal{C}_1 & = & \mathcal{Z}+\mathcal{Z}\textsc{Seq}(\mathcal{C}_1^2\mathcal{C}_3^2) \\
\mathcal{C}_2 & = & \mathcal{Z}+\mathcal{Z}^2\textsc{Seq}(\mathcal{Z}C_2^2\textsc{Seq}(\mathcal{Z}))\textsc{Seq}(\mathcal{C}_2) \\
\mathcal{C}_3 & = & \mathcal{Z}+\mathcal{Z}(3\mathcal{Z}+\mathcal{Z}^2+\mathcal{Z}^2\mathcal{C}_1\mathcal{C}_3)\textsc{Seq}(\mathcal{C}_1^2)
\end{array}
$$

Le système de séries génératrices associé : avec $z = 0.27$

$$C_0 = 0.27C_1C_2C_3(C_1+C_2)$$

$$C_1 = 0.27+0.27/(1-C_1^2C_3^2)$$

$$C_2 = 0.27+0.0729/((1-0.2754211138C_2^2)(1-C_2))$$

$$C_3 = 0.27+0.27(0.8829+0.0729C_1C_3)/(1-C_1^2)$$

en Maple

$$sys := \left[C0 = x\, C3\, C1\, C2\, (C1 + C2),\ C3 = x + \frac{x\,(3\,x + x^2 + C1\, C3\, x^2)}{1 - C1^2},\right.$$
$$\left. C2 = x + \frac{x^2}{\left(1 - \frac{x\, C2^2}{1 - x}\right)(1 - C2)},\ C1 = x + \frac{x}{1 - C1^2\, C3^2} \right]$$

```
solve(subs(x=0.27,sys));
```

$\{C2 = 0.3988484105, C3 = 0.643292746, C0 = 0.03981177934, C1 = 0.5844488219\},$
$\{C2 = 0.3988484105, C0 = 0.08483583330, C1 = 0.7669225413, C3 = 0.881136046\},$
$\{C2 = 0.3988484105, C1 = 3.827601486, C3 = 0.25115016, C0 = 0.4375296896\},$
$\{C3 = 0.643292746, C1 = 0.5844488219, C2 = 0.8243443421, C0 = 0.1178894124\},$
$\{C1 = 0.7669225413, C3 = 0.881136046, C2 = 0.8243443421, C0 = 0.2393370429\},$
$\{C1 = 3.827601486, C3 = 0.25115016, C2 = 0.8243443421, C0 = 0.9953303530\},$
$\{C3 = 0.643292746, C1 = 0.5844488219, C2 = 1.702776766, C0 = 0.3953535314\},$
$\{C1 = 0.7669225413, C3 = 0.881136046, C2 = 1.702776766, C0 = 0.7672908697\},$
$\{C1 = 3.827601486, C3 = 0.25115016, C2 = 1.702776766, C0 = 2.444198592\}$

Principe

Calcul par itération

Oracle de Boltzmann :
itération numérique qui converge
vers l'unique solution pertinente

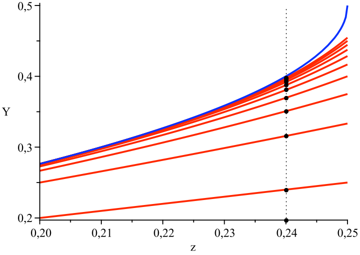
$\Uparrow$

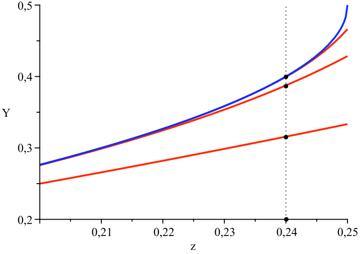
convergence de l'itération sur
les séries de dénombrement

$\Uparrow$

convergence de l'itération pour
les systèmes d'équations combinatoires

Oracle efficace : itération de Newton





Arbres binaires : $B(z) = z + B(z)^2$

Théorème (Transfert de convergence – PiSaSo08)

Soit $\mathcal{Y} = \mathcal{H}(\mathcal{Z}, \mathcal{Y})$ un système tel que $\mathcal{H}(0, \mathbf{0}) = \mathbf{0}$ et $\partial\mathcal{H}/\partial\mathcal{Y}(0, \mathbf{0})$ est nilpotente. Si l'itération combinatoire :

$$\mathcal{Y}^{[n+1]} = \mathcal{F}(\mathcal{Z}, \mathcal{Y}^{[n]}), \quad \text{avec} \quad \mathcal{Y}^{[0]} = \mathbf{0},$$

converge vers la famille d'espèces $\mathcal{Y}$, solution de $\mathcal{Y} = \mathcal{H}(\mathcal{Z}, \mathcal{Y})$, alors l'itération :

$$\boldsymbol{Y}^{[n+1]}(z) = \boldsymbol{F}(z, \boldsymbol{Y}^{[n]}(z)), \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{Y}^{[0]}(z) = \mathbf{0},$$

converge vers le vecteur de séries génératrices $\boldsymbol{Y}(z)$ de $\mathcal{Y}$. De plus, si $\mathcal{F}$ est analytique, pour tout α tel que $|\alpha| < \rho$, l'itération :

$$\boldsymbol{y}^{[n+1]} = \boldsymbol{F}(\alpha, \boldsymbol{y}^{[n]}), \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{y}^{[0]} = \mathbf{0},$$

converge vers le vecteur $\boldsymbol{Y}(\alpha)$ des valeurs des séries $\boldsymbol{Y}(z)$ au point α.

[PiSaSo08] *Boltzmann oracle for combinatorial systems*, C. Pivoteau, B. Salvy et M. Soria.

Validité de l'approche

Convergence combinatoire

- Théorème des espèces implicites [Joyal 81] : existence et unicité de la solution du système $\boldsymbol{\mathcal{Y}} = \boldsymbol{\mathcal{H}}(\mathcal{Z}, \boldsymbol{\mathcal{Y}})$:
  - $\boldsymbol{\mathcal{H}}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \mathbf{0}$,
  - la matrice jacobienne $\frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{H}}}{\partial \boldsymbol{\mathcal{Y}}}(\mathbf{0}, \mathbf{0})$ est nilpotente.
- Mesure de convergence : contact entre les classes combinatoires.

Séries génératrices

- Énumération des structures combinatoires.
- Contact $\Leftrightarrow$ valuation des séries.

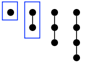
Itération numérique

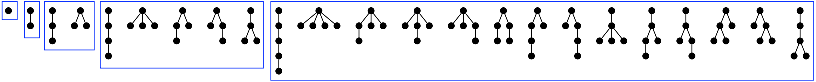
- Valeurs numériques $\Leftrightarrow$ évaluation des séries au point α.
- Analyticité de $\boldsymbol{H}$ en α et $\boldsymbol{y}^{[n]}$.

Exemple des arbres généraux planaires (Newton)

$$\mathcal{T} = \mathcal{Z} \times \mathrm{SEQ}(\mathcal{T})$$

$\mathcal{Y}^{[0]} = \varnothing$

$\mathcal{Y}^{[1]} =$  $\cdots$

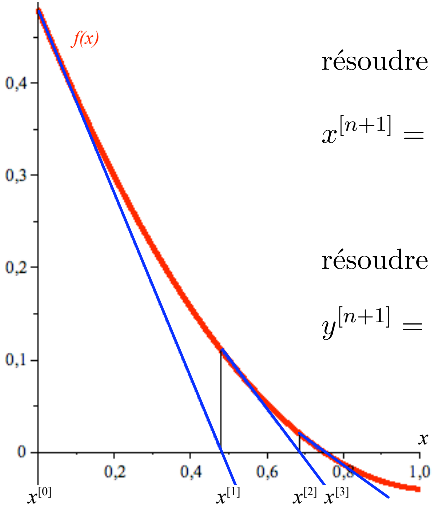
$\mathcal{Y}_{[2]} =$  $\cdots$

$$Y^{[0]}(z) = \mathbf{0}$$
$$Y^{[1]}(z) = z + z^2 + z^3 + z^4 + z^5 + z^6 + z^7 + z^8 + z^9 + \cdots$$
$$Y^{[2]}(z) = z + z^2 + 2\,z^3 + 5\,z^4 + 14\,z^5 + 42\,z^6 + 131\,z^7 + 417\,z^8 + 1341\,z^9 \cdots$$
$$Y^{[3]}(z) = z + z^2 + 2\,z^3 + 5\,z^4 + 14\,z^5 + 42\,z^6 + 132\,z^7 + \cdots + 742900\,z^{14} + \cdots$$
$$Y^{[4]}(z) = z + z^2 + 2\,z^3 + 5\,z^4 + 14\,z^5 + 42\,z^6 + \cdots + 1002242216651368\,z^{30} + \cdots$$

pour $z = 0.2$

$$y^{[0]} = \mathbf{0}$$
$$y^{[1]} = \mathbf{0.2}5000000000000000000000000000000\ldots$$
$$y^{[2]} = \mathbf{0.27}586206896551724137931034482758\ldots$$
$$y^{[3]} = \mathbf{0.27639}296187683284457478005865104\ldots$$
$$y^{[4]} = \mathbf{0.2763932022}4997168102435963404908\ldots$$
$$y^{[5]} = \mathbf{0.27639320225002103035908263}104683\ldots$$

Itération de Newton numérique “classique”



résoudre $f(x) = 0$:

$$x^{[n+1]} = x^{[n]} - \frac{f(x^{[n]})}{f'(x^{[n]})}$$

résoudre $y = f(y)$:

$$y^{[n+1]} = y^{[n]} + \frac{1}{1 - f'(y^{[n]})} \left(f(y^{[n]}) - y^{[n]}\right)$$

Itération de Newton combinatoire

Pour une seule équation [Décoste, Labelle, Leroux 82] :

$$\mathcal{Y}^{[n+1]} = \mathcal{Y}^{[n]} + \textsc{Seq}\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathcal{Y}}(\mathcal{Z},\mathcal{Y}^{[n]})\right) \times \left(\mathcal{H}(\mathcal{Z},\mathcal{Y}^{[n]}) - \mathcal{Y}^{[n]}\right), \qquad \mathcal{Y}^{[0]} = 0$$

▷ dérivée combinatoire

Pour un système :

$$\boldsymbol{\mathcal{Y}}^{[n+1]} = \boldsymbol{\mathcal{Y}}^{[n]} + \left(\mathbf{Id} - \frac{\partial\boldsymbol{\mathcal{H}}}{\partial\boldsymbol{\mathcal{Y}}}(\boldsymbol{\mathcal{Z}},\boldsymbol{\mathcal{Y}}^{[n]})\right)^{-1}\left(\boldsymbol{\mathcal{H}}(\boldsymbol{\mathcal{Z}},\boldsymbol{\mathcal{Y}}^{[n]}) - \boldsymbol{\mathcal{Y}}^{[n]}\right), \quad \boldsymbol{\mathcal{Y}}^{[0]} = \mathbf{0}$$

▷ matrice jacobienne

▷ éclosions combinatoires [Labelle 85]

Optimisation

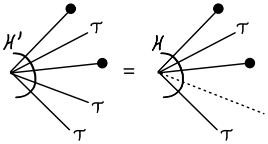
Calcul de la matrice $\left(\mathbf{Id} - \frac{\partial\boldsymbol{\mathcal{H}}}{\partial\boldsymbol{\mathcal{Y}}}(\boldsymbol{\mathcal{Z}},\boldsymbol{\mathcal{Y}}^{[n]})\right)^{-1}$ par itération de Newton

▷ itérations en parallèle.

Dérivée combinatoire

$\partial\mathcal{H}/\partial\mathcal{T}$: *dérivée* de $\mathcal{H}(\mathcal{Z},\mathcal{Y}_1,\ldots,\mathcal{Y}_m)$ par rapport à $\mathcal{T}$.

	notation		dérivée	
atome	$\mathcal{Z}$ ou $\mathcal{E}$		$\varnothing$	
$\mathcal{Y}_i$	$\mathcal{Y}_i=\mathcal{T}$	$\mathcal{Y}_i\neq\mathcal{T}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{Y}'_i$
union	$\mathcal{Y}_i+\mathcal{Y}_j$		$\mathcal{Y}_i+\mathcal{Y}'_i+\mathcal{Y}'_j$	
produit	$\mathcal{Y}_i\times\mathcal{Y}_j$		$\mathcal{Y}'_i\times\mathcal{Y}_j+\mathcal{Y}_i\times\mathcal{Y}'_j$	
séquence	$\textsc{Seq}(\mathcal{Y}_i)$		$\textsc{Seq}(\mathcal{Y}_i)\times\mathcal{Y}'_i\times\textsc{Seq}(\mathcal{Y}_i)$	
cycle	$\textsc{Cyc}(\mathcal{Y}_i)$		$\textsc{Seq}(\mathcal{Y}_i)\times\mathcal{Y}'_i$	
ensemble	$\textsc{Set}(\mathcal{Y}_i)$		$\textsc{Set}(\mathcal{Y}_i)\times\mathcal{Y}'_i$	

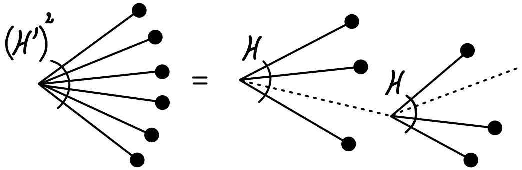


Exemple : $\mathcal{H}(\mathcal{Z},\mathcal{T})=\mathcal{T}^2$, $\qquad \partial\mathcal{H}/\partial\mathcal{T}(\mathcal{Z},\mathcal{T})=2\mathcal{T}$.

▷ Interprétation combinatoire du produit par une dérivée

Matrice jacobienne d'un système combinatoire

Interprétation combinatoire du produit par une dérivée : $\left(\partial\boldsymbol{\mathcal{H}}/\partial\boldsymbol{\mathcal{Y}}\right)^2$



$\partial\boldsymbol{\mathcal{H}}/\partial\boldsymbol{\mathcal{Y}}$: la *matrice Jacobienne* de $\boldsymbol{\mathcal{H}}(\mathcal{Z},\boldsymbol{\mathcal{Y}})$ par rapport à $\boldsymbol{\mathcal{Y}}$,
ses entrées sont les dérivées partielles $\partial\mathcal{H}_i(\mathcal{Z},\boldsymbol{\mathcal{Y}})/\partial\mathcal{Y}_j$.

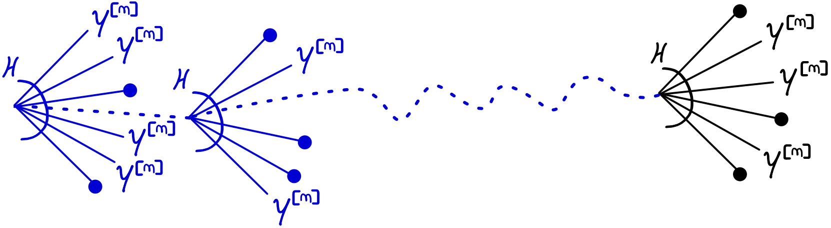
$$\partial\boldsymbol{\mathcal{H}}/\partial\boldsymbol{\mathcal{Y}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_1} & \frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_2} \\ \frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_1} & \frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_2} \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} \frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_1}\frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_1}+\frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_2}\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_1} & \frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_1}\frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_2}+\frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_2}\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_2} \\ \frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_1}\frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_1}+\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_2}\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_1} & \frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_1}\frac{\partial\mathcal{H}_1}{\partial\mathcal{Y}_2}+\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_2}\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\mathcal{Y}_2} \end{pmatrix}$$

Matrice *nilpotente* : une de ses puissances est $\varnothing$.

Convergence de l'itération de Newton combinatoire

Interprétation combinatoire de l'itération de Newton
[Décoste, Labelle, Leroux 82]

$$\mathcal{Y}^{[n+1]} = \mathcal{Y}^{[n]} + \textsc{Seq}\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathcal{Y}}(\mathcal{Z},\mathcal{Y}^{[n]})\right) \times \left(\mathcal{H}(\mathcal{Z},\mathcal{Y}^{[n]}) - \mathcal{Y}^{[n]}\right), \qquad \mathcal{Y}^{[0]} = 0$$



▷ convergence quadratique !

Itération de Newton pour les séries

$$\boldsymbol{Y}^{[n+1]}(z) = \boldsymbol{Y}^{[n]}(z) + \left(I - \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \boldsymbol{Y}}\left(z, \boldsymbol{Y}^{[n]}(z)\right)\right)^{-1}\left(\boldsymbol{H}\left(z, \boldsymbol{Y}^{[n]}(z)\right) - \boldsymbol{Y}^{[n]}(z)\right)$$

Algorithme efficace pour le calcul des coefficients !

Complexités arithmétique et binaire quasi-optimales

Théorème (Complexité arithmétique)

Coût du calcul des N premiers termes de $\boldsymbol{Y}(z)$: $O(\mathsf{M}(N))$

▷ $\mathsf{M}(N)$: coût de la multiplication de séries à l'ordre N.
▷ avec la FFT : $O(N \log N)$.

▷ amélioration de la complexité de la méthode récursive.

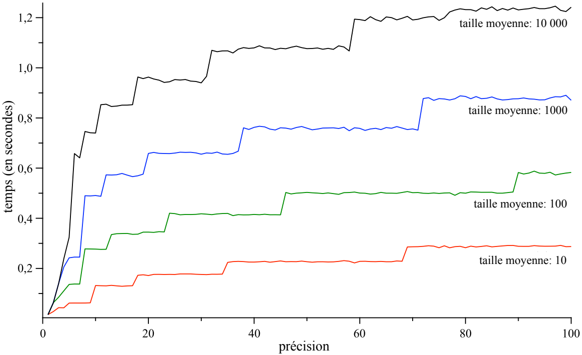
Oracle numérique

Théorème (Oracle de Boltzmann – PiSaSo08)

Soit $\mathcal{Y} = \mathcal{H}(\mathcal{Z}, \mathcal{Y})$ une spécification combinatoire (sans opérateur de Pólya). L'itération numérique suivante converge vers $\boldsymbol{Y}(\alpha)$:

$$\boldsymbol{y}^{[n+1]} = \boldsymbol{y}^{[n]} + \left(\boldsymbol{I} - \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \boldsymbol{Y}}(\alpha, \boldsymbol{y}^{[n]})\right)^{-1} \left(\boldsymbol{H}(\alpha, \boldsymbol{y}^{[n]}) - \boldsymbol{y}^{[n]}\right), \quad \boldsymbol{y}^{[0]} = \boldsymbol{0}$$

Évolution du temps de calcul de l'oracle pour les circuits SP en fonction de la précision souhaitée, pour différentes valeurs de α.



Implantation

Prototype en Maple
(pour les spécifications sans opérateurs de Pólya) :

- tests sur des grammaires aléatoires,
- grammaires XML, $\sim 10^3$ équations [Darrasse 08],
- chemins dans des grands graphes (systèmes concurrents) [Oudinet 07],
- ...

# équations	4	10	50		100		500
# constructions/eqn	10	10	10	50	10	50	50
taille moy. cfc max.	2.47	3.42	7.95	18.62	10.93	67.18	339.1
temps (0.99ρ)	0.05	0.11	0.17	0.47	0.23	7.29	61.73
temps (0.999999ρ)	0.08	0.16	0.19	0.56	0.25	8.11	61.86
espérance moy. taille	$4.1\,10^{14}$	$1.4\,10^{7}$	$2.2\,10^{5}$	$1.0\,10^{5}$	$1.2\,10^{6}$	$5.0\,10^{4}$	$3.3\,10^{4}$

en secondes, avec Maple 11, sur un processeur Intel à 3.2 GHz avec 2 Go de mémoire.

(Très) prochainement...

▷ Implantation d'une bibliothèque de générateurs de Boltzmann génériques incluant l'oracle.

En cours :

- opérateurs de Pólya,
- spécifications contenant des $\mathcal{E}$,
- complexité binaire (séries exponentielles).

Perspectives :

- Accélération de convergence.
- Calcul des singularités
  ▷ analyse asymptotique automatique.
- Réglage du paramètre de Boltzmann.