Génération automatique de procédures numériques pour les fonctions D-finies

ou Évaluation numérique à grande précision des fonctions holonomes

Marc Mezzarobba

Stage à l'Inria Rocquencourt, projet Algo,
sous la direction de Bruno Salvy

Master parisien de recherche en informatique, 2006–2007

Problème

Évaluer à grande précision 10^{-N} des fonctions spéciales.

Exemples — $\cos(z)$, $\arctan(z)$, $\operatorname{erf}(z)$, $\operatorname{Ai}(z)$... $(z \in \mathbb{Q}(i))$

Objectifs

- Toute la classe des fonctions holonomes
- Complexité quasi-optimale $O^{\sim}(N)$
- Automatisation complète

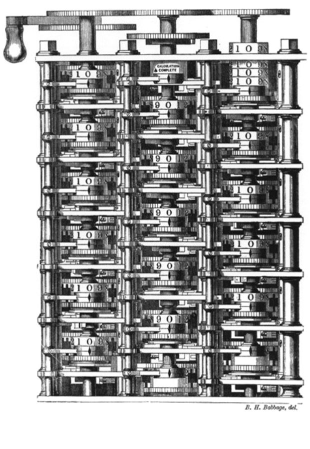
D.V. and G.V. Chudnovsky. Computer algebra in the service of mathematical physics and number theory. 1990.

J. van der Hoeven. Fast evaluation of holonomic functions. 1999.

Résultats

- Fonctions d'onde sphéroïdales
  - Solutions de $(1 - z^2)y''(z) - 2(b+1)z\,y'(z) + (c - 4qz^2)\,y(z) = 0$
  - 1000 chiffres décimaux de $y(1/3)$ en 0,54 seconde $(b = 1, c = 0, q = 1, y(0) = 1, y'(0) = 0)$
  - Code générique, entrée = équation ci-dessus
- Un million de chiffres décimaux de π
  - Même noyau de code + formule *ad hoc*
    $$\frac{1}{\pi} = 12 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (6k)!(13591409 + 545140134k)}{(3k)!(k!)^3 640320^{3k+3/2}}$$
  - 30 secondes

(Pentium 4 2.8GHz, Maple 10)



Fonctions spéciales, holonomie

Prolongement analytique en complexité quasi-optimale

Calcul de bornes et contrôle de la précision

Définition des fonctions holonomes

Définition

Une fonction $y(z) : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ est holonome (D-finie) si elle est solution d'une équation différentielle linéaire (homogène) à coefficients polynomiaux :

$$a_r(z)\, y^{(r)}(z) + \cdots + a_1(z)\, y'(z) + a_0(z)\, y(z) = 0, \qquad a_j \in \mathbb{Q}(i)[z].$$

Équation différentielle = structure de données
Manipulation en Maple avec gfun

Exemple

$$y(z) = \arctan(z) \quad \leftrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} (1+z^2)\, y''(z) + 2z\, y'(z) = 0 \\ y(0) = 0,\ y'(0) = 1 \end{array} \right\}$$

Singularités des fonctions holonomes

Théorème de Cauchy

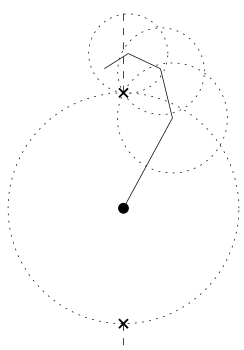
Si $a_r(z_0) \neq 0$, l'équation différentielle

$$a_r(z)\, y^{(r)}(z) + \cdots + a_1(z)\, y'(z) + a_0(z)\, y(z) = 0$$

admet un espace de dimension r de solutions analytiques au voisinage de z_0.

- Singularités = zéros de a_r
- Solutions analytiques : $y(z) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n\, (z - z_0)^n$ (solutions formelles convergentes)
- Le disque de convergence des solutions s'étend jusqu'à la plus proche singularité.

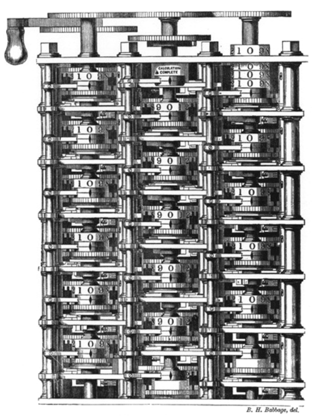
Prolongement analytique



$$(1+z^2)\, y''(z) + 2z\, y'(z) = 0$$

- Singularités : $\pm i$
- Coupes : $\pm[i, i\infty]$

- Dans le disque de convergence, $y(z) =$ somme de la série
- Au-delà, prolongement analytique
- (Autre détermination)



Fonctions spéciales, holonomie

Prolongement analytique en complexité quasi-optimale

Calcul de bornes et contrôle de la précision

Prolongement analytique effectif

- Base de solutions en z_0

$$y_{[z_0,j]}(z) = (z - z_0)^j + \square \cdot (z - z_0)^r + \cdots \qquad j \in [\![0, r-1]\!]$$

- Matrice de passage

$$M_{z_0 \to z_1} = \begin{bmatrix} y_{[z_0,0]}(z_1) & \dots & y_{[z_0,r-1]}(z_1) \\ y'_{[z_0,0]}(z_1) & \dots & y'_{[z_0,r-1]}(z_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{(r-1)!} y^{(r-1)}_{[z_0,0]}(z_1) & \dots & \frac{1}{(r-1)!} y^{(r-1)}_{[z_0,r-1]}(z_1) \end{bmatrix}$$

- Composition des matrices de passage
  = prolongement analytique

$$M_{z_0 \to z_1 \to \cdots \to z_m} = M_{z_{m-1} \to z_m} \cdots M_{z_1 \to z_2} \cdot M_{z_0 \to z_1}$$

Évaluation dans le disque de convergence

- On a ramené le prolongement analytique à des évaluations dans le disque de convergence.
- Coefficients indéterminés :
  $a_r y^{(r)} + \cdots + a_0 y = 0, \qquad y(z) := \sum_n y_n z^n$
  ➥ récurrence linéaire à coefficients polynomiaux
  $b_s(n)\, y_{n+s} + \cdots + b_0(n)\, y_n = 0$

  Exemple — arctan $z = y(z) = \sum y_n z^n$
  $(1 + z^2)\, y''(z) + 2z\, y'(z) = 0 \quad \Rightarrow \quad (n+2) y_{n+2} + n y_n = 0$
- Sommer la série

Complexité ?

Écriture matricielle de la récurrence

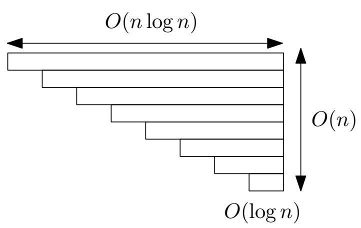
- Récurrence sur les coefficients :
  $y_{n+s} z^{n+s} + z b_{n+s-1}(n) y_{n+s-1} z^{n+s-1} + \cdots + z^s b_0(n) y_n z^n = 0$
- Sommes partielles $S_n = \sum_{k=0}^{n-1} y_n z^n$
  $S_{n+1}(z) = S_n(z) + y_n\, z^n$
- Écriture matricielle ($v_n = y_n z^n$) :

$$\begin{bmatrix} v_{n+1} \\ \vdots \\ v_{n+r-1} \\ v_{n+r} \\ S_{n+1} \end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{q(n)} \begin{bmatrix} & q & & & 0 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & q & \vdots \\ \square & \square & \dots & \square & 0 \\ q & 0 & \dots & 0 & q \end{bmatrix}}_{A(n)} \begin{bmatrix} v_n \\ \vdots \\ v_{n+r-2} \\ v_{n+r-1} \\ S_n \end{bmatrix}.$$

➥ Calculer la « factorielle » $A(n-1) \cdots A(1) \cdot A(0)$

Scindage binaire

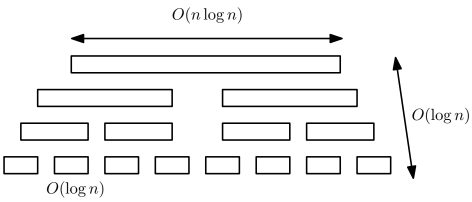
$$A(n-1) \cdots A(1) \cdot A(0) = \big(A(n-1) \cdots A(\lfloor \tfrac{n}{2} \rfloor + 1)\big) \cdot \big(A(\lfloor \tfrac{n}{2} \rfloor) \cdots A(0)\big)$$



Produit naïf
$\Omega(n^2 \log n)$

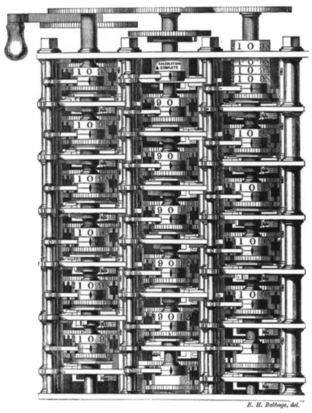
Scindage binaire

$$A(n-1)\cdots A(1)\cdot A(0) = \big(A(n-1)\cdots A(\lfloor \tfrac{n}{2}\rfloor + 1)\big)\cdot\big(A(\lfloor \tfrac{n}{2}\rfloor)\cdots A(0)\big)$$



$$\begin{aligned}&\mathrm{M}(n\log n)\\ +\ &2\,\mathrm{M}(\tfrac{n}{2}\log n)\\ +\ &\cdots\\ +\ &n\,\mathrm{M}(\log n)\\ =\ &O\big(\mathrm{M}(n\log n)\log n\big)\end{aligned}$$

Multiplication par FFT : $\mathrm{M}(n) = n\,(\log n)\,2^{O(\log^* n)}$



Fonctions spéciales, holonomie

Prolongement analytique en complexité quasi-optimale

Calcul de bornes et contrôle de la précision

Vitesse de convergence des séries de Taylor

- But : $\left|y(z) - \sum_{k=0}^{n-1} y_n z^n\right| \leqslant 10^{-p}$
- Si $|y_n| \leqslant \alpha^n \varphi(n)$, alors $\left|\sum_{k=n}^{\infty} y_k z^k\right| \leqslant |\alpha z|^n \overbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \varphi(n+k)|\alpha z|^k}^{\psi(n)}$
- Rayon de convergence $\rho = 1/\limsup_{n\to\infty} |y_n|^{1/n}$

  ➥ meilleur $\alpha = 1/\rho$
- Nombre de termes : $n \simeq \dfrac{p}{\log(\rho/|z|)}$

Calculer une borne du bon ordre ?

Bornes sur les restes

Algorithme de calcul

Entrée $\{a_r y^{(r)} + \cdots + a_0 y = 0, y(0) = u_0, \ldots\}$

Sortie	$\left\lvert\sum_{k=n}^{\infty} y_k z^k\right\rvert \leqslant \cdots$	Nombre de termes
Cas général ($\rho < \infty$)	$A\left(\frac{\lvert z\rvert}{\rho}\right)^n \exp(Kn^\beta)$ $(0 \leqslant \beta < 1)$	$\left.\right\}\ \dfrac{p}{\log(\rho/\lvert z\rvert)} + o(p)$
Point singulier régulier	$A\left(\frac{\lvert z\rvert}{\rho}\right)^n n^N$	
$\rho = \infty$	$\dfrac{A}{n!^{1/N}}$	$O\left(\dfrac{p}{\log p}\right)$

Résultats

Nombre de chiffres décimaux corrects

		$\arctan \frac{1}{2}$	$\arctan \frac{3}{4}$	$\frac{\cos z}{1-z}, z = \frac{1}{3}$	$(\alpha C + \beta S)(\frac{\pi}{3})$ $(*)$
100	M.	104	104	103	104
	vdH01	177	194	165	167
1000	M.	1004	1005	1004	1006
	vdH01	1716	1874	1591	1595

$(*)$ $\{(1-z^2)y''(z) - zy'(z) + 2(1-2z^2)y(z) = 0, y(0) = 1, y'(0) = 0\}$
(forme algébrique de l'équation de Mathieu) en $z = 1/2$.

		$\exp \frac{z}{1-z^2}, z = \frac{1}{3}$	$\operatorname{erf} \frac{z}{1-z}, z = \frac{1}{3}$	e^{-100}	$\mathrm{Ai}(4i+4)$
100	M.	107	123	102	238
	vdH01	152	146	316	357
1000	M.	1015	1081	1003	1764
	vdH01	1555	1501	4232	> 4000

J. van der Hoeven. Fast evaluation of holonomic functions near and in regular singularities.

Équations majorantes

Méthode de Cauchy-Kovalevskaïa

La série $f \in \mathbb{C}[[z]]$ est majorée par $g \in \mathbb{R}_+[[z]]$ (on note $f \trianglelefteq g$) lorsque $|f_n| \leqslant g_n$ pour tout n.

Proposition

Si

$$\begin{aligned} f^{(r)} &= a_{r-1} f^{(r-1)} + \cdots + a_0 f \\ g^{(r)} &= b_{r-1} g^{(r-1)} + \cdots + b_0 g \end{aligned} \qquad \text{avec } \forall j,\ a_j \trianglelefteq b_j$$

et

$$|f(0)| \leqslant g(0), \quad \ldots, \quad |f^{(r-1)}(0)| \leqslant g^{(r-1)}(0),$$

alors $f \trianglelefteq g$.

Séries majorantes pour les fonctions holonomes

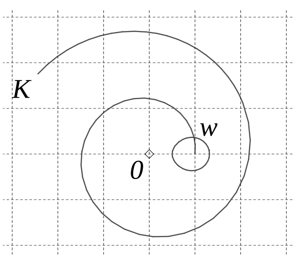
Choix de borne dirigé par le comportement asymptotique

- $y^{(r)} = -\dfrac{a_{r-1}}{a_r} y^{(r-1)} - \cdots - \dfrac{a_0}{a_r} y$
- Identifier une équation majorante dont les solutions aient le même rayon de convergence
  - Même ordre r, solutions simples
- Majorer ($\trianglelefteq$) finement les fractions rationnelles a_j/a_r
  - Récurrence (coef. constants) sur leurs développements

Majorants calculés

	irrégulier	régulier	$\rho = \infty$
$y(z) \trianglelefteq$	$A \exp \dfrac{M}{(1-\alpha z)^N}$	$\dfrac{A}{(1-\alpha z)^N}$	$A\, e^{M\left(z + \cdots + \frac{z^N}{N}\right)}$

Choix du chemin de prolongement analytique



- Une singularité, en 0
- Chemin $1 \rightsquigarrow K \in \mathbb{C}$
- Discrétisation : w^m
- Heuristiquement optimal
- Généralise les chemins optimaux publiés [CC87]

Spirale $e^{\omega t}$ $(\omega \in \mathbb{C})$

Ovale $|w-1| \log|w-1| + \mathrm{Re}\left(|w-1| \frac{w}{w-1} \log(w)\right) = 0$

D.V. and G.V. Chudnovsky. Computer assisted number theory with applications. 1987.

Résumé

- Évaluation efficace de fonctions holonomes (code disponible)
- Bornes fines sur les coefficients et les restes de leurs développements de Taylor

Application : monodromie

Perspectives

- Points singuliers
  - Bornes, matrices de connexion, matrices de Stokes
- Code efficace en toute précision
- Bornes pour la combinatoire
- ...

Merci !