

Séries de Taylor revisitées

Alexis Maffart¹ and Xavier Thirioux²

¹IRIT, Toulouse, France

²ISAE - Supaéro, Toulouse, France

June 7, 2021

Abstract

L'objectif de ce travail est de proposer une nouvelle approche pour modéliser les séries de Taylor dans le cadre d'approximations polynomiales. Nous introduisons un type coinductif qui, muni des opérations adaptées, constitue une algèbre dans laquelle nos séries de Taylor multivariées représentent des objets de premier ordre. En terme d'applications, en plus de fournir des développements classiques d'expressions algébriques ou intégral-différentielles mélangées à des fonctions élémentaires, on montre qu'il est possible de résoudre des Equations aux Dérivées Ordinaires (EDO) et Equations aux Dérivées Partielles (EDP) de manière directe, sans solveurs externes. Nous présentons également l'apport principal par rapport à [9] des erreurs certifiées dans les EDO.

1 Motivations

Nous proposons une approche où les séries de Taylor sont calculées *paresseusement* , sur demande et à un ordre arbitraire. Nous voulons également produire des erreurs certifiées (au sens de l'intégration garantie), qui regrouperaient les erreurs d'approximation et les erreurs numériques. Pour un utilisateur, un schéma classique d'utilisation serait de commencer par calculer une approximation certifiée d'une expression à un certain ordre, puis d'évaluer l'erreur maximale sur le domaine des variables et enfin éventuellement, de calculer une approximation plus fine à un ordre plus grand (sans recalculer les valeurs précédemment obtenues) si l'erreur n'était pas assez précise. On suppose que les expressions sur lesquelles on travaille sont analytiques et possèdent un développement de Taylor valide en un point donné et dans le domaine des variables. Si ce n'est pas le cas, l'erreur calculée ne diminuera pas en augmentant l'ordre et pourra même diverger.

De plus, nous visons à apporter autant de robustesse et de correction que possible, et ce grâce à une approche *correcte par construction*. Le système de type assure la correction en vérifiant à la compilation que les dimensions des différents tenseurs, fonctions, convolutions et séries entières soient conformes à leurs spécifications.

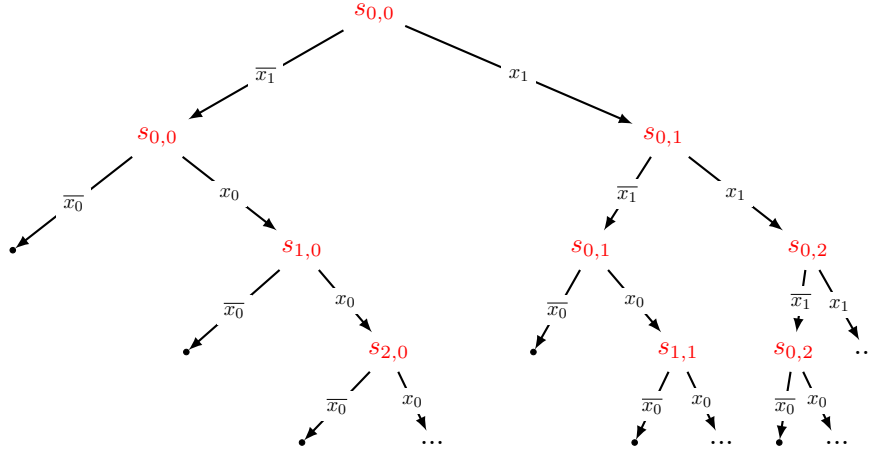
2 Formalisation

On rappelle la représentation canonique d’une série de Taylor multivariée à l’ordre R en dimension N . Cette série converge vers $f(\mathbf{x})$ quand $R \rightarrow +\infty$ pour une fonction **analytique** f seulement dans un certain voisinage autour de $\mathbf{0}$.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{|\alpha| < R} \mathbf{D}_f^\alpha(\mathbf{0}) \cdot \frac{\mathbf{x}^\alpha}{\alpha!} + \sum_{|\alpha|=R} \mathbf{D}_f^\alpha(\lambda * \mathbf{x}) \cdot \frac{\mathbf{x}^\alpha}{\alpha!} \quad (1)$$

Dans l’équation ci-dessus, $\mathbf{x} = (x_0, \dots, x_{N-1}) \in \mathbb{R}^N$, $\alpha = (\alpha_0, \dots, \alpha_{N-1}) \in \mathbb{N}^N$ indexe l’ordre de dérivation de f dans le tenseur symétrique des dérivées partielles $\mathbf{D}_f^\alpha$ et $\lambda \in [0, 1]$ est un coefficient inconnu qui caractérise le reste de Taylor exact. On doit alors calculer les dérivées au point $\mathbf{0}$ pour la partie polynomiale et au point $\lambda * \mathbf{x}$ pour l’erreur. Nous avons choisi d’utiliser une unique structure coinductive, qui est présentée ci-après, pour encoder toutes les dérivées possibles indexées par ces α . Les éléments de cette structure sont alors des paires $\langle \text{valeur}, \text{erreur} \rangle$. Notre cadre est agnostique vis-à-vis des erreurs, il est suffisamment abstrait pour être indépendant du domaine valeur/erreur. On suppose donc seulement que les éléments de notre structure forment une algèbre (addition, multiplication ainsi que des fonctions élémentaires).

Cette structure coinductive, que nous appelons “cotenseur” permet de calculer des approximations à la demande et de représenter les séries de solutions d’EDO et d’EDP quand elles sont exprimées sous forme dite “résolue”. Nous avons choisi une unique structure d’arbre pour représenter un cotenseur. Des coefficients sont présents dans chaque noeud et sont notés $s_{o_0, \dots, o_{N-1}}$ où o_i représente le nombre d’occurrences de la variable x_i dans le chemin vers l’élément considéré $s_{o_0, \dots, o_{N-1}}$.



Le principe de modélisation de la série de Taylor est le suivant : à chaque noeud qu’on parcourt en descendant dans l’arbre, on choisit, soit de garder la variable associée au noeud et la faire donc compter dans la série de Taylor finale (descente dans la branche de droite), soit de la laisser de côté et de répéter le processus sur les variables restantes de dimensions inférieures (descente à gauche). Ceci est illustré avec l’arbre de l’exemple ci-dessus où x_i est le premier cas et $\overline{x}_i$ le second. La

variable à la racine de l'arbre est $\mathbf{x}_n$ si la dimension est $n + 1$. L'arbre représente donc un cotenseur symétrique s de dimension 2. L'algorithmique propre à cette structure de données est détaillée dans [9].

3 Expérimentations

On implémente directement les équations mutuellement récursives suivantes issues de l'équation d'Airy en dimension 1 : $f'' - xf = 0$

$$\begin{cases} g = g_0 + \int^x xf \\ f = f_0 + \int^x g \end{cases}$$

Le principe d'évaluation paresseuse d'OCAML permet de construire la solution selon le schéma suivant : d'après la 2ème équation, calculer le premier coefficient de f (la partie constante) revient à sommer les parties constantes de f_0 et de $\int^x g$. Or on sait que la série entière qui représente une intégrale n'a pas de partie constante, et ce, peu importe ce qu'on intègre. Le premier coefficient de g (qui est le deuxième coefficient de f) est calculé de la même façon : pas besoin de calculer l'argument de l'intégrale. Ensuite la récursion mutuelle fait effet et le 3ème coefficient de f (le 2ème de g) est le résultat de l'intégration de la partie constante de xf , calculée à la première étape.

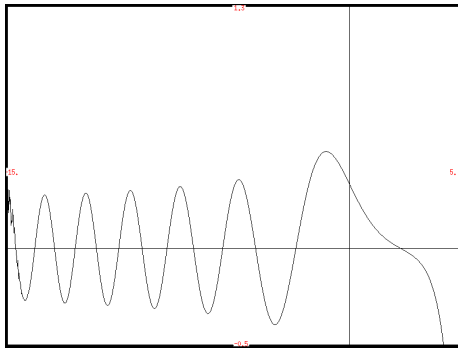


Figure 1: notre solution (ordre 150)

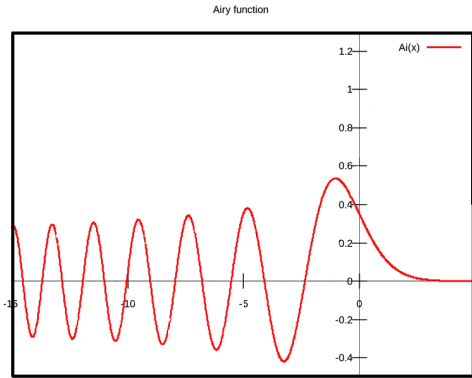
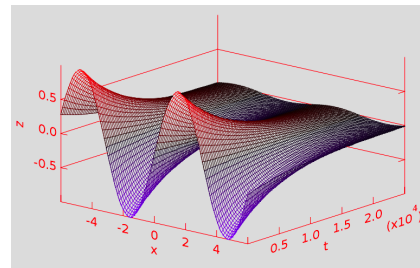


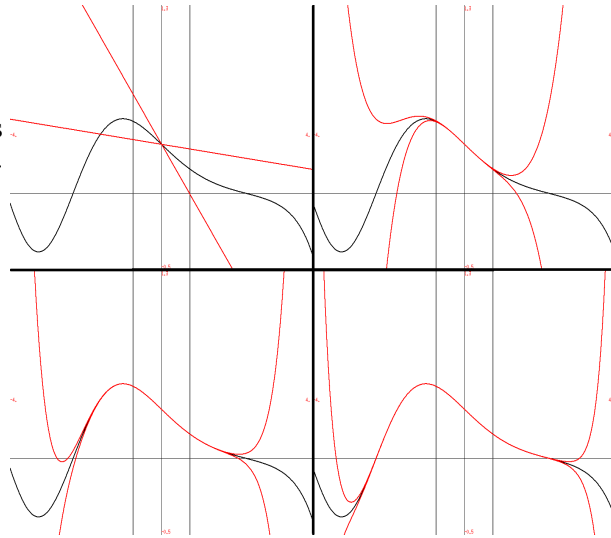
Figure 2: solution théorique

En intégrant l'équation de la chaleur : $\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ (dimension 2) par rapport au temps et en appliquant un sinus à $t = 0$ comme condition initiale, on obtient la solution ci-contre où on observe la température s'homogénéiser dans l'espace en fonction du temps. On appelle causalité la condition nécessaire pour pouvoir



résoudre une équation avec notre méthode. On déterminera que cette condition pour la dimension 1 est un cas particulier de celle pour la dimension multiple et qu'il faudra la renforcer pour pouvoir calculer également les erreurs d'approximations.

Le calcul des fonctions d'erreurs fonctionne selon le même schéma que le calcul des valeurs présenté plus haut : si l'équation est causale, alors les éléments (valeurs ou erreurs) dépendent tous d'éléments d'ordre inférieur et se calculent grâce au schéma récursif. L'unique différence pour les erreurs réside dans le fait qu'un certain nombre fini de fonctions d'erreurs peuvent dépendre d'elles-mêmes. On effectue alors un point fixe sur ces fonctions et on peut ensuite calculer toutes les suivantes qui en dépendaient. La figure ci-contre présente les résultats d'erreurs certifiées (en rouge) pour l'équation d'Airy poussées à différents ordres (1, 5, 10 et 15) sur un intervalle de largeur 1,5 (droites verticales en gris) autour de 0.



4 Conclusion

Parmi les travaux similaires, on peut citer l'outil COSY [7, 4] qui produit des intervalles certifiés en mono-dimension, [6, 5] qui présente des aspects *correct par construction*, [3] et [1] qui utilisent la paresse ou encore [2] qui porte sur l'intégration différentielle certifiée. Sans oublier le travail sur lequel ce travail se base [8, Part 2] et dont est inspirée la structure de données.

Une implémentation de séries réunissant erreurs certifiées, schéma paresseux et calcul à la demande n'avait encore jamais été réalisée, même en dimension 1. Le calcul à la demande permettant ici d'obtenir un ordre arbitraire permet également, par conséquent, d'obtenir une précision arbitraire. Ce travail se distingue également de l'existant dans le domaine par le fait qu'il permet d'obtenir des approximations sur des intervalles beaucoup plus grands (ordre de grandeur de 100) que les méthodes d'intégration classiques (type Runge-Kutta). Le calcul des erreurs dans le cas de multiples dimensions demeure néanmoins un des objectifs à la fois principaux et des plus complexes. A plus court terme, il nous faut implémenter la gestion des incertitudes sur les constantes de l'équation afin de pouvoir chaîner les approximations sur des intervalles consécutifs.

References

- [1] A. Pearlmutter, B., Siskind, J.: Lazy multivariate higher-order forward-mode AD. *POPL 2007* (Jan 2007)
- [2] dit Sandretto, J.A., Chapoutot, A.: Validated explicit and implicit Runge–Kutta methods. *Reliable Computing* **22**(1), 79–103 (Jul 2016)
- [3] Karczmarczuk, J.: Functional differentiation of computer programs. *Higher-Order and Symbolic Computation* **14**(1), 35–57 (2001). <https://doi.org/10.1023/A:1011501232197>
- [4] Makino, K., Berz, M.: Rigorous integration of flows and ODEs using Tylor models. In: *Symbolic Numeric Computation, SNC '09, Kyoto, Japan - August 03 - 05, 2009*. pp. 79–84 (2009). <https://doi.org/10.1145/1577190.1577206>
- [5] Martin-Dorel, É., Hanrot, G., Mayero, M., Théry, L.: Formally verified certificate checkers for hardest-to-round computation. *J. Autom. Reasoning* **54**(1), 1–29 (2015). <https://doi.org/10.1007/s10817-014-9312-2>
- [6] Martin-Dorel, É., Rideau, L., Théry, L., Mayero, M., Pasca, I.: Certified, efficient and sharp univariate Taylor models in COQ. In: *15th International Symposium on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing, SYNASC 2013, Timisoara, Romania, September 23-26, 2013*. pp. 193–200 (2013). <https://doi.org/10.1109/SYNASC.2013.33>
- [7] Revol, N., Makino, K., Berz, M.: Taylor models and floating-point arithmetic: proof that arithmetic operations are validated in COSY. *J. Log. Algebr. Program.* **64**(1), 135–154 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.jlap.2004.07.008>
- [8] Thirioux, X.: *Verifying Embedded Systems*. Habilitation thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France (sept 2016)
- [9] Thirioux, X., Maffart, A.: Taylor series revisited. In: Hierons, R.M., Mosbah, M. (eds.) *Theoretical Aspects of Computing - ICTAC 2019 - 16th International Colloquium, Hammamet, Tunisia, October 31 - November 4, 2019, Proceedings. Lecture Notes in Computer Science*, vol. 11884, pp. 335–352. Springer (2019). https://doi.org/10.1007/978-3-030-32505-3_19, https://doi.org/10.1007/978-3-030-32505-3_19