

THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE PARIS 6

Spécialité

INFORMATIQUE

présentée par

Mourad CHARIKHI

pour obtenir le titre de

DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ de PARIS 6

**Contrôle dynamique de calculs
numériques
d'intégrales multiples**

Soutenue publiquement le 14 janvier 2005 devant la commission d'examen:

M.	R. Alt, Professeur, UPMC	Examineur
M.	J.-C. Bajard, Professeur, Université de Montpellier 2	Rapporteur
M.	J.-M. Chesneaux, Professeur, UPMC	Directeur de Thèse
Mme.	F. Jézéquel, Maître de conférences, Paris 2	Co-directeur de Thèse
M.	P. Langlois, Professeur, Université de Perpignan	Rapporteur
M.	D. Michelucci, Professeur, Université de Bourgogne	Examineur
Mme.	N. Revol, INRIA	Invitée

Résumé

La fiabilité du calcul des intégrales définies monodimensionnelles avait fait l'objet de plusieurs études au sein du laboratoire LIP6. Pour différentes méthodes de quadrature numérique, une stratégie de calcul avait été proposée afin d'obtenir le résultat pour lequel l'erreur globale, combinant erreur mathématique et erreur d'arrondi, est minimale.

Les intégrales multiples peuvent être évaluées en utilisant le principe des intégrales itérées qui consiste à calculer plusieurs intégrales monodimensionnelles par une méthode de quadrature. La première approche traitée dans cette thèse est la validation numérique de ce type de calcul. Nous avons alors démontré que, pour chaque dimension du domaine d'intégration, le pas optimal peut être déterminé de manière dynamique.

Cette thèse a également porté sur la validation numérique des intégrales évaluées sur un domaine infini. La stratégie de calcul proposée consiste alors à calculer une suite convergente dont l'itéré de précision optimale est déterminé dynamiquement.

La deuxième approche étudiée a porté sur les méthodes de cubature qui permettent l'approximation d'une intégrale multiple par une formule adaptée au domaine d'intégration considéré. Une stratégie, fondée sur l'utilisation d'une formule de cubature sur plusieurs sous-domaines, a été proposée afin d'obtenir un résultat de précision optimale. Le contrôle dynamique du calcul d'intégrales multiples par méthodes de cubature a été effectué sur des domaines de type hypercube.

Pour chaque approche étudiée, nous avons montré comment déterminer quels chiffres significatifs du résultat sont en commun avec la vraie valeur de l'intégrale.

Nous avons développé un logiciel nommé ACIM (Atelier de Calcul d'Intégrales Multiples) qui permet un calcul convivial et fiable des intégrales multiples en utilisant, soit le principe des intégrales itérées, soit les méthodes de cubature au choix de l'utilisateur.

Table des matières

1	Estimation probabiliste d'erreurs d'arrondi	13
1.1	Introduction	13
1.2	L'arithmétique à virgule flottante (AVF)	14
1.2.1	Rappel sur l'arithmétique à virgule flottante	14
1.2.2	La norme IEEE 754	14
1.2.3	Contrôle d'erreurs d'arrondi	16
1.3	L'arithmétique stochastique	17
1.3.1	Les nombres et les opérations stochastiques	18
1.3.2	Contrôle des opérations stochastiques	19
1.4	Estimation pratique des erreurs d'arrondi	20
1.4.1	La méthode CESTAC	20
1.4.2	L'arithmétique stochastique discrète (ASD)	22
1.4.3	Le logiciel CADNA	23
1.5	Conclusion	24
2	Contrôle dynamique du calcul d'intégrales multiples par méthodes de quadrature	25
2.1	Introduction	25
2.2	Contrôle dynamique des méthodes de quadrature	26
2.2.1	Rappel sur les formules de quadrature	26
2.2.2	Contrôle dynamique de suites convergentes	28
2.2.3	Applications aux méthodes des trapèzes et de Simpson	29
2.2.4	Contrôle dynamique de la méthode de Romberg	32
2.2.5	Contrôle dynamique de la méthode de Gauss-Legendre	33
2.2.6	Synthèse des principaux résultats	40
2.3	Contrôle dynamique d'intégrales sur un domaine infini	40
2.3.1	Une stratégie pour le calcul d'intégrales sur un domaine infini	41
2.4	Contrôle dynamique des intégrales multiples	45

2.4.1	Sur un domaine de dimension 2	45
2.4.2	Sur un domaine de dimension 3	48
2.4.3	Sur un domaine de dimension N	49
2.5	Expérimentations numériques	50
2.5.1	Calcul d'intégrales monodimensionnelles	51
2.5.2	Calcul d'intégrales bidimensionnelles	52
2.5.3	Calcul d'intégrales tridimensionnelles	53
2.5.4	Calcul d'une intégrale multiple issue de l'étude des étoiles à neutron	58
2.6	Conclusion	60
3	Contrôle dynamique de méthodes de cubature	63
3.1	Introduction	63
3.2	Méthode de cubature de Simpson bidimensionnelle	64
3.2.1	Principe de la méthode	64
3.2.2	Une stratégie de calcul	65
3.3	Construction des formules de cubature	69
3.3.1	Introduction	69
3.3.2	Méthodes de quadrature répétées	70
3.3.3	Méthodes de cubature obtenues par la résolution d'un système d'équations	71
3.4	Méthodes de cubature sur l'hypercube $[0,1]^N$	73
3.4.1	Propriétés des méthodes de cubature sur l'hypercube $[0,1]^N$. . .	73
3.4.2	Une stratégie de calcul	76
3.5	Expérimentations numériques	79
3.5.1	Intégrales bidimensionnelles sur un domaine rectangulaire	79
3.5.2	Intégrales tridimensionnelles sur un domaine cubique	81
3.6	Conclusion	82
4	Le logiciel et la bibliothèque ACIM	89
4.1	Introduction	89
4.2	La bibliothèque ACIM	89
4.2.1	Utilisation de la bibliothèque ACIM	90
4.2.2	Calcul d'intégrales par méthodes de quadrature	91
4.2.3	Calcul d'intégrales par méthodes de cubature	97
4.3	Le logiciel ACIM	98
4.4	Expérimentations numériques	101
4.4.1	Calcul d'intégrales monodimensionnelles	101

TABLE DES MATIÈRES

4.4.2	Calcul d'intégrales bidimensionnelles	103
4.4.3	Calcul d'intégrales tridimensionnelles	108
4.5	Comparaison avec <i>Cubpack++</i>	108
4.6	Conclusion	109
5	Conclusion et Perspectives	115
5.1	Conclusion	115
5.2	Perspectives	117