

# Intégrale multiple

F. Kany. ISEN-Brest & La Croix-Rouge

## Position du problème

Si l'on veut calculer certaines propriétés de l'atome de magnésium (12 électrons), on est amené à intégrer des fonctions par rapport aux 3 coordonnées de chaque électron. On doit donc réaliser des intégrales à  $3 \times 12 = 36$  dimensions. Si l'on utilise 64 points pour calculer numériquement chaque intégrale, il faudra réaliser  $64^{36} \simeq 10^{65}$  évaluations de la fonction à intégrer. Même avec un ordinateur rapide ( $10^6$  opérations.s<sup>-1</sup>), il faudrait  $10^{59}$  s pour faire cette intégrale (c'est-à-dire beaucoup plus que l'âge de l'Univers  $\simeq 10^{17}$  s).

Une méthode plus rapide (et plus précise !) consiste à tirer au sort  $N$  valeurs de la fonction  $f$  à intégrer pour calculer sa valeur moyenne  $\langle f \rangle$  et à calculer :  $I = \int_{x_{1min}}^{x_{1max}} \int_{x_{2min}}^{x_{2max}} \dots f(x_1, x_2, \dots) \cdot \bar{x}_1 \cdot \bar{x}_2 \dots$  sous la forme approchée :  $I_{approx} = (x_{1max} - x_{1min}) \cdot (x_{2max} - x_{2min}) \cdot \dots \cdot \langle f \rangle$ .

Appliquer cette méthode pour calculer l'intégrale à 10 dimensions suivante :

$$I = \int_{x_1=0}^1 \int_{x_2=0}^1 \dots \int_{x_{10}=0}^1 (x_1 + x_2 + \dots + x_{10})^2 \cdot \bar{x}_1 \cdot \bar{x}_2 \cdot \dots \cdot \bar{x}_{10}$$

Pour cela :

1. tirer au sort les valeurs de  $x_1$  à  $x_{10}$  (dans l'intervalle d'intégration),
2. calculer  $f(x_1, x_2, \dots, x_{10})$  et en déduire  $I_{approx}$ ,
3. réitérer  $N$  fois ( $N = 2, 4, 8, \dots, 8192$ ) les étapes 1 et 2  
calculer  $\langle I_{approx_N} \rangle$  : la moyenne des  $N$  évaluations de  $I_{approx}$ .
4. tracer  $\langle I_{approx_N} \rangle = f(N)$  et montrer que la précision du calcul est proportionnelle à  $\frac{1}{\sqrt{N}}$  en traçant  $|I - \langle I_{approx_N} \rangle| = f(\frac{1}{\sqrt{N}})$ .