DM2py - Recherche d'un zéro

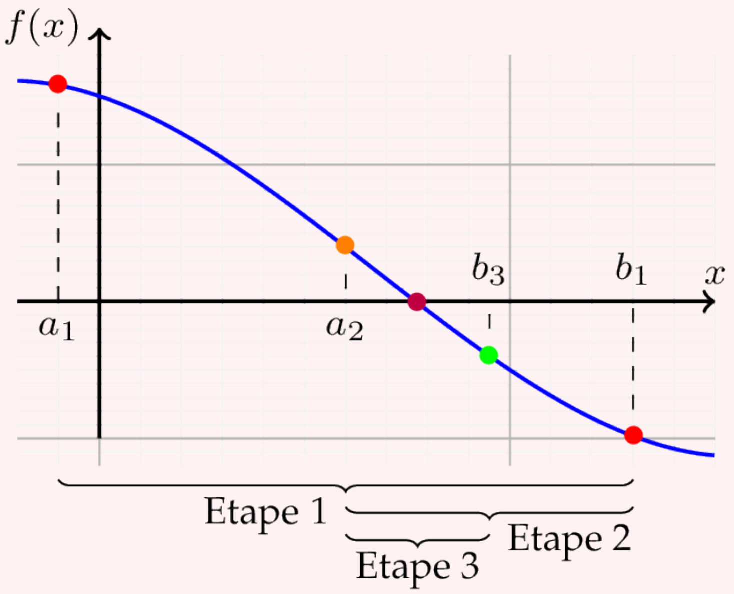
Faire au moins le niveau ⋆.
Le niveau ⋆⋆ est important et permet d'approfondir.

I La méthode de dichotomie ⋆

Soit la réaction : $NH_3 + H_2O = NH_4{}^+ + HO$ de constante $K = 10^{-4,8}$. On introduit initialement $[NH_3]_0 = 0,1$ mol.L^{-1}. On souhaite déterminer l'avancement final x_{eq}.

Algorithme : Dichotomie

Soit deux valeurs a et b et la fonction $f(x) = 0$ continue sur l'intervalle $[a, b]$. L'encadrement par a et b est tel que $f(a)$ et $f(b)$ sont de signes opposés. Pour trouver la solution, on divise l'intervalle en deux parties égales avec comme milieu $m = (a + b)/2$. Si $f(a) \times m$ sont de même signe, la solution se trouve alors dans l'encadrement $[m, b]$ sinon elle se trouve dans l'encadrement $[a, m]$. On réitère alors la recherche dans le nouvel encadrement jusqu'à ce que $a - b$ soit inférieur à la précision voulu.



1. Écrire une fonction `polynome` qui prends comme argument une variable `x` et qui retourne le polynôme $ax^2 + bx + c$ de la condition d'équilibre du problème de chimie après avoir défini a, b et c dans des variables locales de la fonction.
2. Écrire une fonction `delta` qui prends comme argument une constante `K`, une concentration initiale `C0` et qui retourne le discriminant du polynôme précédent.
3. Écrire une fonction `racine` qui prends comme argument une constante `K`, une concentration initiale `C0` et qui retourne la seule racine acceptable correspondant à l'avancement à l'équilibre du problème de chimie.
4. Implémenter la fonction `dichotomie` qui prends comme argument une fonction `f`, un intervalle compris entre `a` et `b` et qui retourne la valeur de l'abscisse x telle que $f(x) = 0$ à `epsilon` près par la méthode de dichotomie.
5. Appeler `test1()` pour tester vos fonctions. Comment évolue le résultat en fonction de `espilon` ?

II La méthode de Newton ⋆⋆

L'énergie potentielle effective d'un satellite en orbite autour de la Terre est donnée par la fonction : $E_{peff}(r) = \frac{1}{2}\frac{m\mathcal{C}^2}{r^2} - \frac{\mathcal{G}mM}{r}$ où $m = 1000$ kg est la masse du satellite, $\mathcal{C} = 400.10^9$ SI une constante, $\mathcal{G} = 6,67.10^{-11}$ SI la constante de gravitation universelle et $M = 6.10^{24}$ kg la masse de la Terre. On souhaite déterminer la valeur r_0 (rayon de l'orbite circulaire) du minimum de cette fonction.

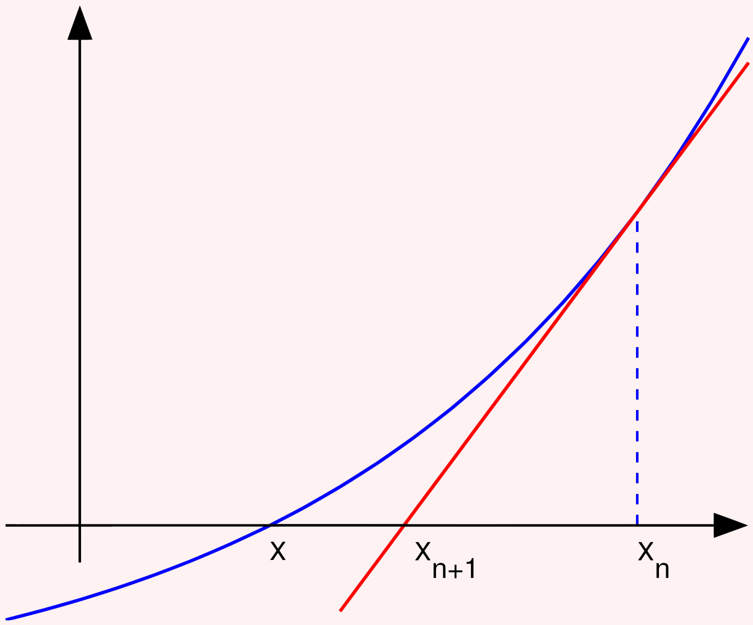
Algorithme : Newton- Raphson

L'algorithme de Newton est une méthode consistant à faire converger une suite x_n vers la solution de l'équation $f(x) = 0$ dont on note C_f la courbe représentative. Cette méthode se décompose en plusieurs étapes.

— Initialisation de x_0 à une valeur quelconque.

— Calcul de x_1 à partir de la tangente à C_f en x_0. Cette dernière coupe l'axe des abscisses en x_1.

— Calcul de x_{i+1} en fonction de x_i tant que la distance $x_{i+1} - x_i$ est supérieure à la tolérance.



Formule de récurrence :

Par définition, x_{i+1} est l'abscisses du point d'intersection de la tangente C_f en x_i avec l'axe des abscisses. L'équation de la tangente est donc : $y = f'(x_i)(x - x_i) + f(x_i)$. Cette tangente coupe l'axe des abscisses si $y = 0$. On a ainsi : $f'(x_i)(x - x_i) + f(x_i) = 0$ soit :

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

6. Implémenter la fonction `newton` qui prends comme argument une fonction `f`, sa dérivée `df`, une position initiale `x0`, une tolérance `epsilon`, un nombre d'itérations `Nmax=100` et qui retourne la valeur de l'abscisse x telle que $f(x) = 0$ à `epsilon` près par la méthode de Newton. Si le nombre d'itérations dépasse `Nmax` la fonction retourne `None`.

7. Appeler `test2()` pour tester votre fonction. Comment évolue le résultat en fonction de `espilon` ?

Bon courage et bon travail ! ☺