Méthodes numériques

Résolution d'une équation : méthode par dichotomie

Objectif : résoudre une équation du type $f(x) = 0$.

Certaines équations ne sont pas soluble à la main, et il faut alors recourir à une résolution numérique. Il existe plusieurs méthodes, dont les deux suivantes :

– La méthode de Newton (vue en SII).

– La méthode par dichotomie (que l'on voit ici).

a/ Description de la méthode

Soit l'équation $f(x) = 0$, avec f une fonction continue qui s'annule une fois sur l'intervalle $[a,b]$. La méthode dichotomique permet de trouver une solution approchée de cette équation.

Prenons l'exemple de la fonction $f(x) = x^2 - 2$. On cherche à résoudre $f(x) = 0$ sur l'intervalle $[0,2]$. On sait que la solution est $x = \sqrt{2} \approx 1{,}414213562...$, et on va essayer de retrouver ceci avec l'algorithme de dichotomie.

Préliminaire : tester si deux réels sont de signes opposés

Soit y et z deux réels non nuls.

- y et z sont de même signe (tous deux positifs ou tous deux négatifs) si et seulement si $y \times z > 0$.
- y et z sont de signes opposés (l'un positif, l'autre négatif) si et seulement si $y \times z < 0$.

Exemple : la fonction f étant continue et ne s'annulant qu'une seule fois entre a et b, on a nécessairement $f(a)$ et $f(b)$ de signes opposés.
Ceci se traduit par $\boxed{f(a) \times f(b) < 0.}$

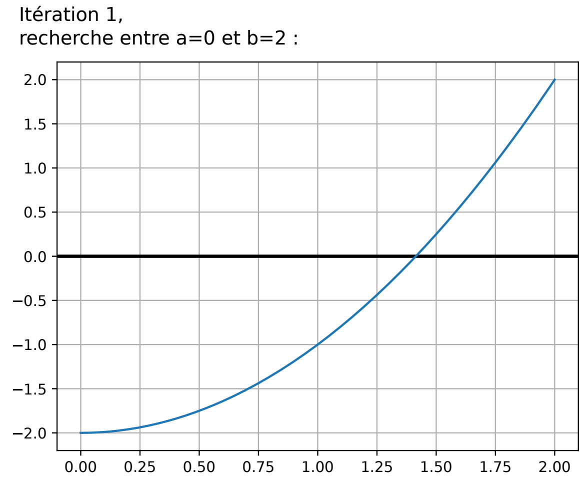
Idée générale de l'algorithme de dichotomie

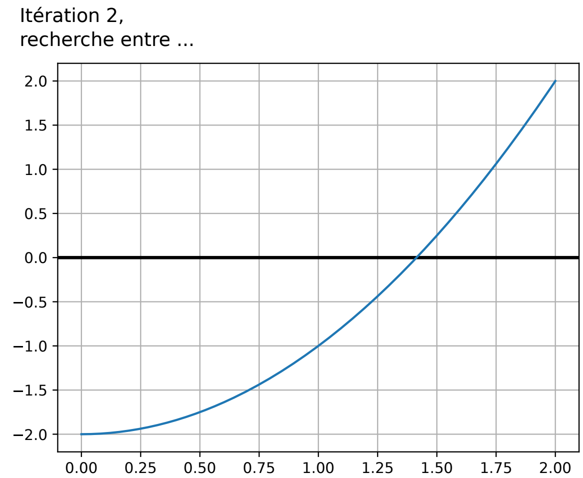
Le principe est de considérer $m = \frac{a+b}{2}$ le milieu de l'intervalle $[a,b]$, et de déterminer si le zéro recherché est entre a et m ou entre m et b.

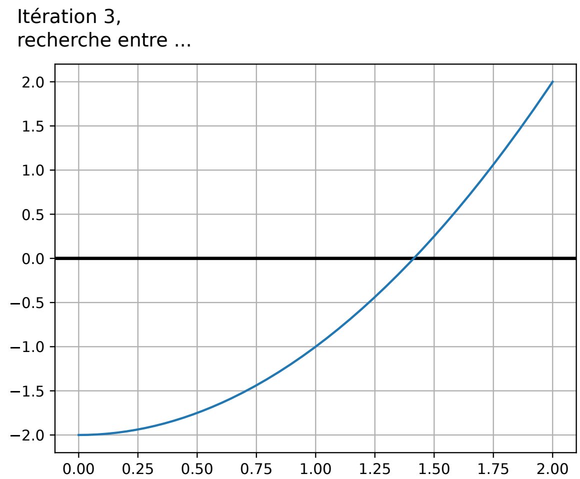
On poursuit alors la recherche soit dans l'intervalle $[a,m]$, soit dans l'intervalle $[m,b]$, avec la même méthode.

On s'arrête quand on a assez réduit l'intervalle de recherche.

Exemple des trois premières itérations sur les trois schémas à compléter ci-dessous :







Détail de l'algorithme

On se donne des valeurs pour a, b, ε.

Tant que $|a-b| > \varepsilon$, on réalise la boucle suivante :

> On pose $m = \dfrac{a+b}{2}$.
>
> - Si $f(a) \times f(m) < 0$, c'est que le zéro de f est entre a et m : il faut chercher entre a et m.
>
>   Le nouvel intervalle est donc entre $a = a$ et $b = m$.
>
> - Dans le cas contraire, c'est que le zéro de f est entre m et b : il faut chercher entre m et b.
>
>   Le nouvel intervalle est donc entre $a = m$ et $b = b$.

Puis on recommence.
Lorsqu'on sort de la boucle, le zéro est donné par la valeur de m, à ε près.

1 - Compléter le code ci-dessous pour obtenir l'algorithme complet.

Puis le saisir sur l'ordinateur et tester : quelle valeur obtenez-vous pour la solution de $f(x) = 0$? Est-ce bien cohérent ?

```
def f(x):
    return x**2-2

epsilon = 1e-6
a = 0
b = 2

while abs(b-a) > epsilon:
    m = (a+b)/2
    if                        # si f(a) et f(b) n'ont pas le même signe
        a=                    # alors c'est que le 0 de f se trouve entre a et m
        b=
    else:
        a=                    # sinon, c'est que le 0 de f est entre m et b
        b=

print(m)
```

Retour sur la signification de ε : prenons par exemple $\varepsilon = 10^{-6}$. L'algorithme s'arrête donc lorsque $b - a < 10^{-6}$. Comme on sait par construction que le 0 de f est toujours dans $[a,b]$, ceci signifie que $m = (a+b)/2$ est proche de ce 0 à moins de 10^{-6} près.

Remarque : il existe d'autres critères de terminaison, par exemple arrêter lorsque l'algorithme trouve un x tel que $|f(x)| < \varepsilon$.

2 - Modifier l'algorithme pour qu'il affiche le nombre d'itérations qui ont été nécessaires.

b/ Un exemple concret

Dans le DM du chapitre 2 de chimie, on s'intéresse à la réaction chimique suivante :

$$\mathrm{CH_3SiCl_3}_{(g)} = \mathrm{SiC_{(s)}} + 3\,\mathrm{HCl_{(g)}}\,.$$

Dans la question 3 du DM, on cherche à déterminer la valeur de l'avancement à l'équilibre de cette réaction. On introduit une quantité de matière n_0 du réactif, et on pose $\alpha = \xi/n_0$. La question 3 doit mener à écrire qu'à l'équilibre, on a $K^\circ = Q_\mathrm{r}(\xi_\text{éq})$. Ceci se traduit par :

$$K^\circ = \frac{\left(\dfrac{3\alpha_\text{éq}}{1+2\alpha_\text{éq}}p\right)^3}{\dfrac{1-\alpha_\text{éq}}{1+2\alpha_\text{éq}}p \times p^{\circ 2}}, \quad \text{soit} \quad \boxed{K^\circ = \frac{27\alpha_\text{éq}^3}{(1+2\alpha_\text{éq})^2(1-\alpha_\text{éq})}\,\frac{p^2}{p^{\circ 2}}.}$$

C'est l'équation encadrée qu'il faut résoudre pour obtenir la valeur de $\alpha_\text{éq}$. On prend comme dans le DM : $p = 1\,\text{bar}$ et $K^\circ = 10$. On pose $x = \alpha_\text{éq}$ pour avoir les mêmes notations que précédemment.

On rappelle que $x > 0$ (car $x = \alpha = \xi/n_0 > 0$) et $x \leq 1$ (car l'avancement ξ ne peut pas dépasser $\xi_\text{max} = n_0$, donc $x = \alpha = \xi/n_0 \leq 1$).

3 - Reformuler l'équation encadrée à résoudre en une équation $f(x) = 0$ (donner l'expression de f en fonction de x, $K°$, p et $p°$).

4 - La première étape est toujours de s'assurer visuellement que la fonction f a un unique zéro dans l'intervalle de recherche. Ceci permet d'ailleurs de choisir cet intervalle de recherche.

Écrire les lignes nécessaires pour tracer la fonction f entre 0 et 0,99 (elle n'est pas définie en $x = 1$. Il faudra créer un tableau de valeurs de x à l'aide de :

```
x = np.linspace(0,0.99,200)  # crée un tableau de valeurs de x, compris entre 0 et 0.9
```

Puis utiliser `plt.plot(x,f(x))`. N'oubliez pas d'importer les modules suivants :

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

5 - Utiliser votre algorithme de dichotomie pour trouver la solution. Vérifier si ceci correspond bien à la valeur de 0,80 donnée dans le DM.

c/ Fonction bisect

Enfin, la fonction `bisect` de la bibliothèque `scipy.optimize` permet de trouver directement le zéro d'une fonction. Elle utilise une méthode de type dichotomie. On l'utilise ainsi :

```
import scipy.optimize as sp
x = sp.bisect(f,a,b)
print(x)
```

`a` et `b` sont les limites de l'intervalle de recherche, et `f` la fonction pour laquelle on résout $f(x) = 0$.

6 - Utiliser cette fonction pour trouver la valeur de $\alpha_{\text{éq}}$. Comparer avec votre résultat précédent.