PHS3903 – Projet de simulation

Mini-devoir 5 – Hiver 2025

À remettre le 26 février avant 17h.

Directives

Répondre aux questions suivantes à l'aide du code Python fourni sur Moodle, auquel vous aurez apporté les modifications nécessaires. Justifier vos réponses avec clarté et concision. Vos tableaux et figures doivent être lisibles et présentés selon les règles de l'art.

Remettre un fichier en format Jupyter Notebook (.ipynb) en utilisant le gabarit fourni dans la boîte de dépôt Moodle.

Méthode de Newton pour ajustement des données expérimentales (20 points)

Dans le cadre de ce mini-projet, nous utiliserons la méthode de Newton pour ajuster sur des données expérimentales une équation analytique de la forme :

$$ye = \frac{p_1}{p_2^2 + (xe - p_3)^2} \tag{1}$$

Les données à importer dans votre code se trouvent dans le fichier « mini_projet_3_donnees.txt ».

Entre autre, on vous demande de programmer la méthode de Newton pour déduire la valeur des paramètres p_1, p_2, et p_3. Ce problème d'ajustement de modèle théorique (x, y) sur des données expérimentales (x_e, y_e) peut être ramené à la minimisation de la fonction d'erreur :

$$Q(p_1, p_2, p_3) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\mathrm{length}(xe)} q_i(p_1, p_2, p_3)^2 \tag{2}$$

où on définit :

$$q_i(p_1, p_2, p_3) = ye_i - \frac{p_1}{p_2^2 + (xe - p_3)^2}\,. \tag{3}$$

Cette fonction Q est une somme des carrés des écarts individuels (q_i^2), ce qui permet de quantifier la "distance" entre le modèle et les observations. La minimisation de cette fonction d'erreur consiste à trouver les paramètres (p_1, p_2, p_3) du modèle qui réduisent ces écarts au minimum possible. Cela est typiquement réalisé avec une méthode numérique, ici la méthode de Newton, qui met à jour progressivement les paramètres pour atteindre la solution optimale.

Le vecteur de paramètres $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ minimise la valeur de Q lorsque :

$$\mathbf{F}(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial Q}{\partial p_1} \\ \frac{\partial Q}{\partial p_2} \\ \frac{\partial Q}{\partial p_3} \end{bmatrix} = 0 \tag{4}$$

Il s'agit d'un système de trois équations non linéaires qui doivent être résolues simultanément. En commençant avec une estimation du vecteur d'inconnues $\mathbf{p}_0$, on répète des itérations de Newton jusqu'à ce que les valeurs convergent. L'étape n d'une méthode de Newton de ce type a la forme :

$$\begin{gathered} \mathbf{F}(\mathbf{p_n} + \Delta\mathbf{p_n}) \approx \mathbf{F}(\mathbf{p_n}) + \nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{F}(\mathbf{p_n}) \cdot \Delta\mathbf{p_n} = 0 \\ \Delta\mathbf{p}_n = -\left[\nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{F}(\mathbf{p}_n)\right]^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{p}_n) \\ \mathbf{p}_{n+1} = \mathbf{p}_n + \Delta\mathbf{p}_n \end{gathered} \tag{5}$$

où le gradient d'un vecteur est défini :

$$\nabla\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial p_1} & \frac{\partial F_1}{\partial p_2} & \frac{\partial F_1}{\partial p_3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial p_1} & \frac{\partial F_2}{\partial p_2} & \frac{\partial F_2}{\partial p_3} \\ \frac{\partial F_3}{\partial p_1} & \frac{\partial F_3}{\partial p_2} & \frac{\partial F_3}{\partial p_3} \end{bmatrix} \text{ ou } (\nabla F)_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial p_j} \text{ (notation tensorielle)} \tag{6}$$

Utilisez une condition de convergence qui suggère de mettre fin au programme à l'itération $n+1$ si la condition suivante est satisfaite :

$$\|\Delta\mathbf{p}_{n+1}\| < \mathrm{tol}\,. \tag{7}$$

Indices. Afin de simplifier l'expression des dérivées dans (4) et (6), suivez les étapes suivantes :

1. Écrivez d'abord une expression générale de la dérivée de premier ordre $\frac{\partial Q}{\partial p_j}$, j=1,2,3 en termes de la fonction $q_i(p_1, p_2, p_3)$ et de ses dérivées partielles par rapport aux paramètres p_1, p_2, p_3 :

$$\frac{\partial Q}{\partial p_j} = \sum_{i=1}^{\text{length}(xe)} q_i(p_1, p_2, p_3) \frac{\partial q_i(p_1, p_2, p_3)}{\partial p_j} \tag{8}$$

2. De façon similaire, écrivez les expressions générales pour la dérivée seconde $\frac{\partial^2 Q}{\partial p_j \partial p_k}$, j et k =1,2,3 en termes de la fonction $q_i(p_1, p_2, p_3)$ et de ses dérivées partielles de premier et second ordre par rapport aux paramètres p_1, p_2, p_3 :

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial p_j \partial p_k} = \frac{\partial}{\partial p_j}\frac{\partial Q}{\partial p_k} = \sum_{i=1}^{\text{length}(x_e)} \left(\frac{\partial q_i(p_1, p_2, p_3)}{\partial p_j}\frac{\partial q_i(p_1, p_2, p_3)}{\partial p_k} + q_i(p_1, p_2, p_3)\frac{\partial^2 q_i(p_1, p_2, p_3)}{\partial p_j \partial p_k} \right) \tag{9}$$

1 – Déterminer les dérivées

1. **(5 points)** Écrivez de façon explicite les trois expressions des dérivées de premier ordre $\frac{\partial q_i}{\partial p_j}$ avec $j = 1, 2, 3$ au moyen de (3).
2. **(5 points)** Écrivez de façon explicite les neuf expressions de dérivée seconde $\frac{\partial^2 q_i}{\partial p_j \partial p_k}$, avec $j, k = 1, 2, 3$. Notez bien que seules six d'entre elles sont différentes.

2 – Implémentation de la méthode de Newton

1. **(3 points)** Utilisez les données expérimentales qui se trouvent dans le fichier *mini_projet_3_donnees.txt* (le fichier est disponible sur Moodle). Utilisez une tolérance tol $= 10^{-6}$. Quelles sont les valeurs convergées des paramètres $p_1^{(conv)}$, $p_2^{(conv)}$, $p_3^{(conv)}$? Donnez un exemple des valeurs initiales $\mathbf{p}_0 = (p_1, p_2, p_3)$ qui mènent à la convergence d'une méthode de Newton.
2. **(2 points)** Quelle est la valeur de la fonction d'erreur $Q(p_1^{(conv)}, p_2^{(conv)}, p_3^{(conv)})$?

3 – Sensibilité de la méthode

1. **(3 points)** Il est bien connu que la convergence de la méthode de Newton est très sensible aux estimations initiales des paramètres $\mathbf{p}_0$. Il est donc intéressant d'étudier la région de convergence de la méthode.
   En particulier, utilisez les valeurs convergées des paramètres $p_1^{(conv)}$, $p_2^{(conv)}$, $p_3^{(conv)}$ trouvés dans la partie c). Répétez la méthode de Newton pour différentes valeurs initiales de la forme $\mathbf{p}_n^{(0)} = (p_1^{(conv)}, p_2^{(conv)}, p_3)$, avec $p_3 = (0 : 0.001 : 2)p_3^{(conv)}$. Ensuite, tracez Q comme une fonction de p_3 sur l'échelle logarithmique.
2. **(2 points)** Trouvez le plus large intervalle de stabilité $p_3^{(min)} \leq p_3 \leq p_3^{(max)}$ de la méthode en fonction de la valeur de p_3. Quelles sont les valeurs de $p_3^{(min)}$ et $p_3^{(max)}$?