Preliminary program

- Thème 0 - Retour sur les bases (TDM 1)
    - Représentations graphiques simples
    - Lire des données

- Thème 1 - Traitement des données (TDM 2 et TDM 3)
    - Mesure répétée d'une grandeur
        - Histogramme
        - Distribution statistique
        - Tirages aléatoires
        - Application à la propagation des erreurs
    - Retour sur l'ajustement des données dans des cas non triviaux
        - Retour sur la régression linéaire
            - Forme analytique
            - Résidus
            - Incertitudes sur les paramètres de la régression
        - Ajustements non linéaires
            - Difficultés
            - Paramètres initiaux
            - Choix des paramètres de représentation
            - Incertitudes sur les paramètres de la régression

- Thème 2 - Résolution de systèmes d'équations différentielles (TDM 4, TDM 5 et TDM 6)
    - Retour sur la méthode d'Euler
    - Systèmes d'équations différentielles couplés
        - Les outils "Python"

TDM1 Retour sur les bases

A Tracés de courbes

Exercice 1 - Exemple d'une molécule diatomique.

L'énergie potentielle qui traduit l'interaction entre les deux atomes est souvent modélisée par une fonction analytique appelée « potentiel de Morse » dont voici l'expression en fonction de la distance interatomique R :

$$V(R) = D_e\left[1 - \exp(-\beta(R - R_{eq}))\right]^2$$

Les paramètres R_{eq} , D_e et β définissent respectivement :

(i) la distance interatomique à l'équilibre,

(ii) la profondeur du puits de potentiel (égal à la différence d'énergie entre la situation à l'équilibre $R = R_{eq}$, et la situation dissociée $R = +\infty$) et

(iii) la « largeur » du puits (voir figure (1.1)).

1. Reproduire la courbe de Morse pour la cas de la molécule Cl_2 (R_{eq} = 0.198 nm, D_e = 243 kJ.mol^{-1}, β = 20.0 nm^{-1}).

2. Tracer sur la figure précédente les courbes représentant le potentiel de Morse des molécules F_2 et I_2 caractérisées par les paramètres suivants :
   - F_2 : (R_{eq} = 0.142 nm, D_e = 150 kJ.mol^{-1}, β = 23.9 nm^{-1})
   - I_2 : (R_{eq} = 0.267 nm, D_e = 148 kJ.mol^{-1}, β = 15.0 nm^{-1})

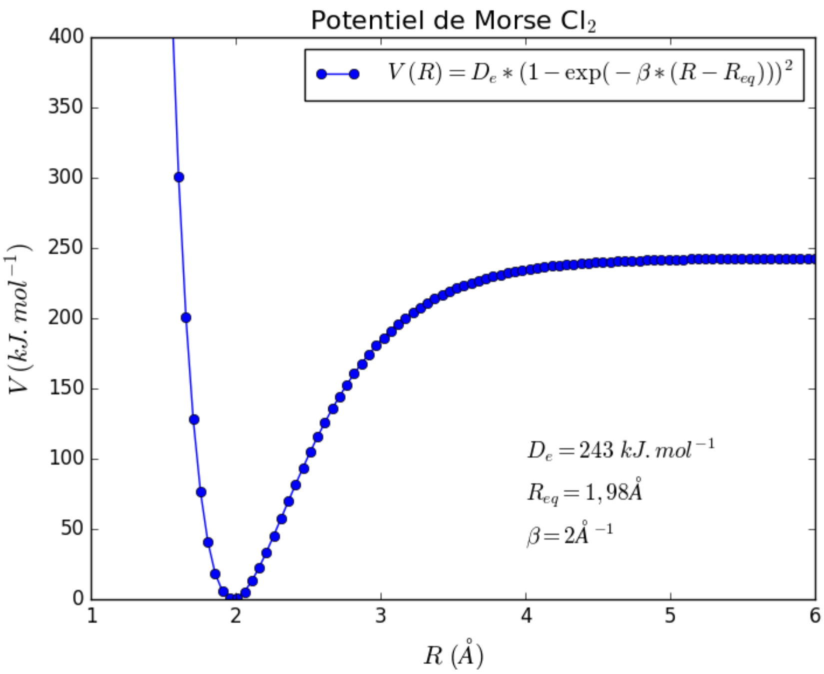


FIGURE 1.1 – *Potentiel de Morse pour la molécule de Cl_2*

Quelques indications :

- le nom des axes est fixé grâce aux fonctions `xlabel()` et `ylabel()`
- le titre est indiqué à l'aide de la fonction `title()`
- les marqueurs de ligne sont donnés par : `'o'` pour les cercles, `'s'` pour les carrés (square), `'v'` pour les triangles pointe vers le bas et `'^'` pour les triangles pointes vers le haut
- on peut fixer le domaine de représentation graphique à l'aide de la fonction `axis([xmin,xmax,ymin,ymax])`.

B Lire des données

Depuis Galilée les sciences physiques se caractérisent par la confrontation entre une compréhension d'un phénomène reposant sur un modèle mathématique et des données issues de l'expérience. Tout scientifique est donc confronté un jour ou l'autre à la récupération de données expérimentales et à leur traitement afin de tester la pertinence d'un modèle théorique.
Dans une première partie, on se propose de fabriquer puis récupérer des données que l'on a stockées dans un fichier. Après extraction de ces données, on effectue un affichage graphique de celles-ci.
La seconde partie consiste à appliquer un traitement mathématique (méthode des moindres carrés) afin d'ex- traire les paramètres d'ajustement correspondant à une modélisation du phénomène physique étudié (ici une simple régression linéaire).

Exercice n°2 - *Récupération et affichage des données*

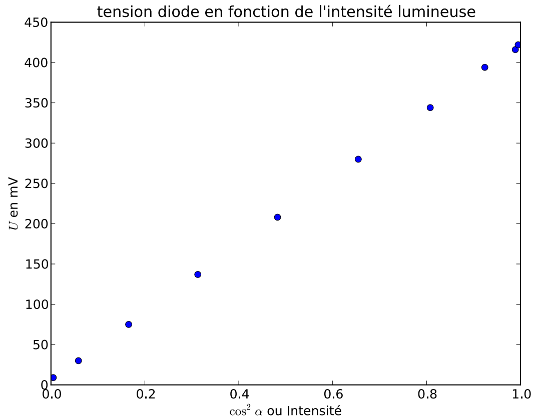
Créer le fichier données `dataMalus.csv` qui contient les données d'une expérience visant à vérifier la loi de Malus. Cette expérience consiste à vérifier qu'une lumière polarisée rectilignement traversant un analyseur faisant un angle α avec la polarisation initiale produit une intensité lumineuse proportionnelle au cosinus de l'angle α. Dans l'expérience une photodiode fournit en sortie de l'analyseur, une tension U proportionnelle à l'intensité lumineuse. Les données sont représentées dans le fichier sous la forme de deux colonnes correspondant aux angles α et aux tensions U correspondantes. Une ligne d'en-tête permet d'identifier à quelle grandeur physique se rapporte chaque colonne ainsi que les unités utilisées.

alpha (en degré)	U (en mV)
0	422.2
10	416.5
20	394.2
30	344.8
40	280.1
50	208.8
60	137.0
70	75.5
80	30.1
90	9

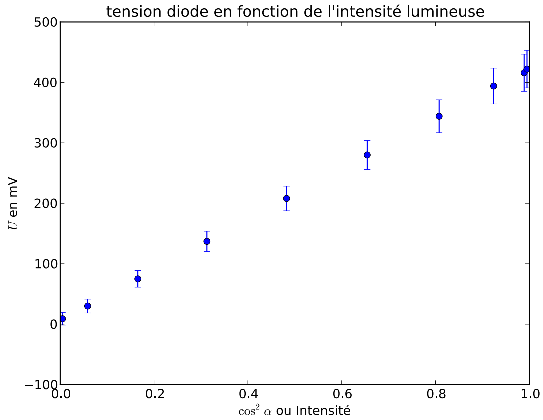
TABLE 2.1 – *Données expérimentales correspondant à la vérification de la loi de Malus*

Pré-traitement des données

1. Écrire un programme utilisant la fonction `read_csv()` de la bibliothèque `pandas` qui récupère les données du fichier `dataMalus.csv` et les stocke dans des tableaux (`array`) qu'on pourra noter `U` et `alpha` .
2. Tracer avec la fonction plot, le graphe $U = f\left(\cos^2 \alpha\right)$ (cf. figure 2.1a). On prendra soin de convertir les degrés en radians.
3. Rajouter un décalage systématique α_0 sur les angles. Combien faut-il prendre pour que les données semblent « bien alignées » ? Comment appelle-t-on ce type d'erreurs ?
4. Reprendre le tracé des données en rajoutant des barres d'erreurs (5% sur la mesure plus une erreur de 10 mV due au calibre) à l'aide de la fonction de `matplotlib` : `errorbar`, dont voici la syntaxe `errorbar(x, y, yer , fmt='o')` (cf. figure 2.1b)



(a) *Tracé simple*



(b) *Tracé avec barres d'erreurs*

FIGURE 2.1 – *Tracé des données expérimentales du fichier* `dataMalus.dat`

Exercice n°3 - Sale temps sur Seattle (exercice de Xavier Guarrido, Université Paris-Saclay)

- Télécharger le fichier `seattle2014.csv` qui contient pour chaque jour de l'année 2014 (colonne 1), la hauteur des précipitations exprimé en dixième de millimètres (colonne 2) ainsi que les températures maximale (colonne 3) et minimale (colonne 4), exprimées en dixième de degrés Celsius, à Seattle.
- Charger l'ensemble des données dans un tableau `numpy` en prenant bien garde au caractère délimitant chaque champ puis, après avoir converti la hauteur des précipitations en centimètres et les températures en degré Celsius, calculer les valeurs suivantes sur chacune des données du fichier (hauteur des précipitations, T_{min} et T_{max}) :
  1. moyenne, médiane et écart type
  2. valeurs minimale et maximale
  3. les quantiles à 25% et 75%
- Afficher les valeurs ci-dessus pour la période estivale
- Calculer la hauteur totale d'eau tombée à Seattle en 2014
- Dénombrer le nombre total de jours dans l'année pendant lesquels il a plu à Seattle et déterminer combien de ces jours étaient pairs
- Représenter la distribution de la hauteur des précipitations à l'aide de la méthode `hist` de `matplotlib.pyplot`