Lycée Thiers	Informatique
Année 2014/15	MPSI

Feuille d'Exercices n° 8

Tracé avec `numpy` *et* `matplotlib.pyplot`.
Modélisation, Recherche de racine appliquée à la recherche d'un minimum

Exercice. *Tracé à l'aide de* `matplotlib.pyplot`.

(1) La courbe représentative de tan.
(2) Les courbes représentatives de ln et de $\sin(x)/x$ pour $x \in]0, 10]$.
(3) La courbe paramétrée $x(t) = t.\cos(t), y(t) = t.\sin(t)$ pour $t \in [0, 10]$.
(4) L'ellipse de grand axe $[-2, 2]$ et de petit axe $[-1, 1]$.

Problème. *Modélisation d'une réaction chimique par la méthode des moindres carrés*
Dans une réaction chimique on souhaite modéliser l'évolution de la concentration d'un réactif en fonction du temps.
On a mesuré expérimentalement :

Temps (s)	0	7	18	27	37	56	102
Concentration	34,83	32,14	28,47	25,74	23,14	18,54	11,04

Dans la suite on notera $(T_i)_{0\leqslant i\leqslant 6}$ la suite des temps considérés et $(C_i)_{0\leqslant i\leqslant 6}$ la suite des concentrations mesurées.

Nous souhaitons effectuer une modélisation de la réaction par une réaction chimique à l'ordre 1, c'est à dire, si $C(t)$ désigne la concentration en fonction du temps :

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\lambda \cdot C(t)$$

pour λ une constante réelle.

Elle admet pour solution : $C(t) = C_0 \cdot \exp(-\lambda t)$ où C_0 est une constante réelle.

(1) Justifier que $\lambda > 0$; quelle valeur peut-on prendre pour C_0 ?
Une fois choisie la constante C_0 on souhaite déterminer, s'il existe, le réel $\lambda > 0$ pour laquelle la solution trouvée approchée le mieux le nuage de points $(T_i, C_i)_{0\leqslant i\leqslant 6}$ au sens des moindres carrés, c'est à dire le minimum de l'application :

$$m : \lambda \longmapsto \sum_{i=0}^{6} \left(C_i - C_0 \exp(-\lambda T_i)\right)^2$$

(2) Ecrire le code de cette fonction $m()$ qui avec pour paramètre un nombre λ retourne la valeur de $m(\lambda)$.

(3) Tracer le graphe de la fonction m sur plusieurs intervalles bien choisis ; sur quel intervalle I de $\mathbb{R}^*$ la fonction m semble-t-elle présenter un minimum ?

(4) Ecrire le code de la fonction `dm()` qui pour paramètre un nombre λ retourne le nombre dérivée $m'(\lambda)$. Le calcul donne :

$$m'(\lambda) = 2C_0 \sum_{i=0}^{6} T_i \left(C_i - C_0 \exp(-\lambda T_i)\right) \exp(-\lambda T_i)$$

(5) Tracer le graphe sur I de la fonction dérivée m'.

(6) Proposer une méthode pour déterminer une valeur approchée du minimum λ_{min} de m et l'implémenter. Si besoin, le calcul donne :

$$m''(\lambda) = 2C_0 \sum_{i=0}^{6} T_i^2 \left(2C_0 \exp(-\lambda T_i) - C_i\right) \exp(-\lambda T_i)$$

(7) Quelle est la valeur de m obtenue pour cette valeur λ_{min} de λ ?

(8) Pour cette valeur effectuer le tracé sur un même graphique du nuage de points et de la solution théorique obtenue. Quel est leur écart au sens des moindres carrés ?

(9) L'hypothèse d'une réaction chimique à l'ordre 1 est-elle vraisemblable ?