

TD N°4 : Intégration numérique

Ahmed Ammar (ahmed.ammar@fst.utm.tn)

Institut Préparatoire aux Études Scientifiques et Techniques, Université de Carthage.

Jan 19, 2020

Contents

Exercice 1: Vitesse d'une fusée

On lance une fusée verticalement du sol et l'on mesure pendant les premières 80 secondes l'accélération γ :

| t[s] | 0 | 10 | 20 | 30 | 40 | 50 | 60 | 70 | 80 |
|-------------------------------|----|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| γ [m s ⁻²] | 30 | 31.63 | 33.44 | 35.47 | 37.75 | 40.33 | 43.29 | 46.70 | 50.67 |

Calculer la vitesse V de la fusée à l'instant $t = 80$ s, par la méthode des trapèzes.

Exercice 2: Valeur approchée de π

Étant donnée l'égalité:

$$\pi = 4 \left(\int_0^\infty e^{-x^2} dx \right)^2 = 4 \left(\int_0^{10} e^{-x^2} dx + \epsilon \right)^2 \quad (1)$$

avec $0 < \epsilon < 10^{-44}$, utiliser la méthode des trapèzes composite à 10 intervalles pour estimer la valeur de π .

Exercice 3: Intégration adaptative

Supposons que nous voulons utiliser la méthode des trapèzes ou du point milieu pour calculer une intégrale $\int_a^b f(x)dx$ avec une erreur inférieure à une tolérance prescrite ϵ . Quelle est la taille appropriée de n ?

Pour répondre à cette question, nous pouvons entrer une procédure itérative où nous comparons les résultats produits par n et $2n$ intervalles, et si la différence est inférieure à ϵ , la valeur correspondant à $2n$ est retournée. Sinon, nous avons n et répétons la procédure.

Indication. Il peut être une bonne idée d'organiser votre code afin que la fonction `integration_adaptive` peut être utilisé facilement dans les programmes futurs que vous écrivez.

a) Écrire une fonction `integration_adaptive(f, a, b, eps, method="midpoint")` qui implémente l'idée ci-dessus (`eps` correspond à la tolérance ϵ , et la méthode peut être `midpoint` ou `trapeze`).

b) Testez la méthode sur $g(x) = \int_0^2 \sqrt{x} dx$ pour $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-10}$ et notez l'erreur exacte.

c) Faites un tracé de n en fonction de $\epsilon \in [10^{-1}, 10^{-10}]$ pour $\int_0^2 \sqrt{x} dx$. Utilisez l'échelle logarithmique pour ϵ .

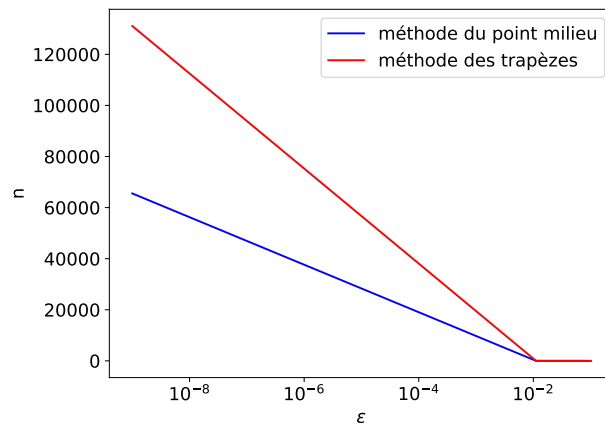


Figure 1: Affichage de n en fonction de ϵ lorsque $\int_0^2 \sqrt{x} dx$ est calculé par la méthode du point milieu (bleu) et la méthode des trapèzes (rouge).

Remarques. Le type de méthode exploré dans cet exercice est appelé *adaptatif*, car il essaie d'adapter la valeur de n pour répondre à un critère d'erreur donné. La vraie erreur peut très rarement être calculée (car nous ne connaissons pas la réponse exacte au problème de calcul), il faut donc trouver d'autres indicateurs de l'erreur, comme celui ici où les changements de la valeur intégrale, comme le nombre d'intervalles est doublé, est pris pour refléter l'erreur.

Exercice 4: Intégration de x élevé à x

Considérons l'intégrale

$$I = \int_0^2 x^x dx.$$

L'intégrande x^x n'a pas de primitive qui peut être exprimé en termes de fonctions standard (visitez <http://wolframalpha.com> et tapez `integral x^x dx from 0 to 2` pour vous convaincre que notre affirmation est juste. Notez que Wolfram alpha vous donne une réponse, mais cette réponse est une approximation, elle n'est pas *exacte*. C'est parce que Wolfram alpha utilise également des méthodes numériques pour arriver à la réponse, comme vous le ferez dans cet exercice). Par conséquent, nous sommes obligés de calculer l'intégrale par des méthodes numériques. Calculez un résultat composé de quatre chiffres.

Indication. Utilisez des idées de l'exercice 3.

Exercice 5: Orbitales atomiques

Pour décrire la trajectoire d'un électron autour d'un noyau, une description probabiliste est adoptée : l'électron n'est plus caractérisé par ses coordonnées spatiales mais par sa *probabilité de présence* en un point de l'espace.

Pour simplifier le problème, on considérera que cette probabilité de présence ne dépend que de la variable r , distance entre l'électron et le centre du noyau. Pour une orbitale 1s, la probabilité de trouver l'électron entre les rayons r_1 et r_2 s'écrit :

$$P_{s1} = \int_{r_1}^{r_2} \underbrace{4 \times \frac{r^2}{a_0^3} \times e^{-2 \times \frac{r}{a_0}}}_{\text{densité radiale}} dr$$

avec $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$, appelé le rayon de Bohr.

La densité radiale, représentée dans la figure 2, est maximale pour $r = a_0$. Ce rayon qui maximise la densité radiale est appelé le *rayon orbitalaire*.



À noter

Dans ce problème, les distances seront conservées en Angström.

- Définir une fonction `densite_radiale()`, définie entre 0 et ∞ qui prend comme paramètre variable un rayon r et comme paramètre par défaut $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ et renvoie la valeur $4 \times \frac{r^2}{a_0^3} \times e^{-2 \times \frac{r}{a_0}}$.
- Tracer la densité radiale pour $r \in [0, 2.6] \text{ \AA}$, afin d'obtenir le même graphique sur la figure 2.
- On souhaite déterminer la probabilité de présence de l'électron entre 0 et a_0 . Évaluer cette probabilité à l'aide de 100 rectangles. On pourra vérifier que la réponse obtenue est proche de 0.32.
- Déterminer le nombre entier n , tel que l'électron ait une probabilité supérieure ou égale à 90% de se trouver entre 0 et $n * a_0$.

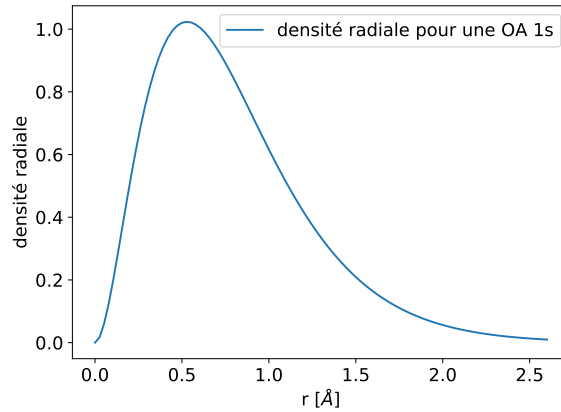


Figure 2: Densité radiale pour une orbitale atomique 1s.

e) On souhaite désormais évaluer la probabilité de trouver l'électron proche du rayon de Bohr, c'est-à-dire entre $0.9 * a_0$ et $1.1 * a_0$. Évaluer cette probabilité à l'aide de 100 rectangles.

f) D'après la valeur obtenue à la question précédente, que penser de la description des trajectoires des électrons par orbite autour du noyau ?



À noter

On répondra en commentaire dans le programme.