Informatique tronc commun – TP nº 12
Régression et cinétique chimique

Jeudi 21 mars 2019

1. **Lisez attentivement tout l'énoncé avant de commencer.**
2. Commencez la séance en créant un dossier au nom du TP dans le répertoire dédié à l'informatique de votre compte.
3. Ayez toujours un crayon et un papier sous la main. Quand vous réfléchissez à une question, utilisez les !
4. Vous devez être autonome. Ainsi, avant de poser une question à l'enseignant, merci de commencer par :
   — relire l'énoncé du TP (beaucoup de réponses se trouvent dedans) ;
   — relire les passages du cours[1] relatifs à votre problème ;
   — effectuer une recherche dans l'aide disponible sur votre ordinateur (ou sur internet) concernant votre question.

   Il est alors raisonnable d'appeler votre enseignant pour lui demander des explications ou une confirmation !

Cette séance de TP est consacrée à la mise en œuvre de méthodes d'optimisation numérique, principalement la méthode de Newton.

Instructions de rendu

Attention : suivez précisément ces instructions. Vous enverrez à votre enseignant un fichier d'extension `.py` (script `Python`) nommé

`tp12_durif_kleim.py`,

où les noms de vos enseignants sont à remplacer par ceux des membres du binôme. Le nom de ce fichier ne devra comporter ni espace, ni accent, ni apostrophe, ni majuscule. Dans ce fichier, vous respecterez les consignes suivantes.

— Écrivez d'abord en commentaires (ligne débutant par #), le titre du TP, les noms et prénoms des étudiants du groupe.
— Commencez chaque question par son numéro écrit en commentaires.
— Les questions demandant une réponse écrite seront rédigées en commentaires.
— Les questions demandant une réponse sous forme de fonction ou de script respecteront pointilleusement les noms de variables et de fonctions demandés.

1. Dans le cas fort improbable où vous ne vous en souviendriez pas.

Les figures demandées porteront toutes un nom du types `tp12_durif_kleim_num.png`, où les noms de vos enseignants sont à remplacer par ceux des membres du binôme et où

— `num` vaut `q4` pour la question 4 ;
— `num` vaut `q9` pour la question 9 ;
— `num` vaut `q11` pour la question 11 ;
— `num` vaut `q15` pour la question 15 ;
— `num` vaut `q20` pour la question 20 (facultatif).

1 Introduction

On s'intéresse ici au problème de régression par moindres carrés, que l'on envisagera dans le cas particulier d'un problème de cinétique chimique.

On souhaite modéliser l'évolution de la concentration d'un réactif, en fonction du temps. On a mesuré, expérimentalement, les données contenues dans la table 1.

Temps (s)	0	7	18	27	37	56	102
Concentration (mol.L^{-1})	34,83	32,14	28,47	25,74	23,14	18,54	11,04

FIGURE 1 – Données expérimentales : concentration du réactif en fonction du temps.

Remarque 1.0.1. En préambule de votre script, vous aurez intérêt à créer deux listes, une pour les temps, une pour les concentrations, de la manière suivante.

```
T = [0, 7, 18, 27, 37, 56, 102]
C = [34.83, 32.14, 28.47, 25.74, 23.14, 18.54, 11.04]
```

On se donne donc une suite de sept mesures de temps $(t_i)_{i=0}^{6}$ ainsi que de sept mesures de concentration $(C_i)_{i=0}^{6}$. L'objectif est de trouver une fonction f telle que les points $f(t_i)$ sont proches des C_i. Pour quantifier cela, on considèrera le critère des moindres carrés, ce qui revient à considérer la quantité

$$\mathscr{L}(f) = \frac{1}{7}\sum_{i=0}^{6}(C_i - f(t_i))^2. \qquad \text{(MC)}$$

Il exite une infinité de fonctions qui annulent cette quantité (penser par exemple à l'interpolation de Lagrange) et qui n'ont aucun rapport avec notre problème. Nous allons donc nous restreindre à des ensembles réduits de fonctions : c'est ce que l'on appellera le *modèle*.

1.1 Modèle cinétique d'ordre 1.

Dans ce modèle, on considère que la concentration vérifie l'équation différentielle

$$C'(t) = -kC(t) \text{ avec } k > 0, \text{ qui admet pour solution } C : t \mapsto C(0)\mathrm{e}^{-kt}.$$

Pour simplifier, on suppose que $C(0) = C_0 = 34,83$ mol.L^{-1}. On considère donc le modèle

$$\mathscr{M}_1 = \left\{ f_k^1 : t \mapsto C_0 e^{-kt} \;\middle|\; k > 0 \right\}.$$

On cherche donc une fonction dans $\mathscr{M}_1$ minimisant (MC), ce qui revient à chercher un paramètre $k > 0$ minimisant

$$L^1(k) = \frac{1}{7}\sum_{i=0}^{6}\left(C_i - C_0\mathrm{e}^{-kt_i}\right)^2.$$

1.2 Modèle cinétique d'ordre 2.

Dans ce modèle, on considère que la concentration vérifie l'équation différentielle

$$C'(t) = -kC^2(t) \text{ avec } k > 0, \text{ qui admet pour solution } C : t \mapsto \frac{C(0)}{C(0)kt+1}.$$

Pour simplifier, on suppose que $C(0) = C_0 = 34,83$ mol.L^{-1}. On considère donc le modèle

$$\mathscr{M}_2 = \left\{ f_k^2 : t \mapsto \frac{C_0}{C_0kt+1} \mid k > 0 \right\}.$$

On cherche donc une fonction dans $\mathscr{M}_2$ minimisant (MC), ce qui revient à chercher un paramètre $k > 0$ minimisant

$$L^2(k) = \frac{1}{7}\sum_{i=0}^{6}\left(C_i - \frac{C_0}{C_0kt_i+1}\right)^2.$$

2 Rendu graphique.

Q1 Écrire une fonction `trace_fonction(xmin,xmax,f,nom_de_fichier)` qui trace la courbe de la fonction `f` de `xmin` à `xmax`, puis sauvegarde le résultat dans le fichier `nom_de_fichier`.

Par exemple, les commandes successives

```
xmin = 0
xmax = 20
def f(x) :
    return 0.02* x*(x-5)
trace_fonction(xmin,xmax,f,'fig_ex_fonction.png')
```

devront produire (et sauvegarder) un graphique semblable (vous n'essaierez pas dans un premier temps de reproduire les titres, légendes etc.) à `fig_ex_fonction.png`, que vous trouverez sur le site de la classe.

Q2 Écrire une fonction `trace_ajustement(X,Y,f,nom)` qui trace un nuage de points dont les abscisses sont données dans le vecteur `X` et les ordonnées dans le vecteur `Y`, qui superpose la courbe de la fonction `f` pour des arguments allant de `min(X)` à `max(X)` et qui sauvegarde l'image produite dans le fichier `nom`.

Par exemple, les commandes successives

```
import numpy as np
T = [0, 7, 18, 27, 37, 56, 102]
C = [34.83, 32.14, 28.47, 25.74, 23.14, 18.54, 11.04]
def g(x) :
    return 34 - 0.2*x
trace_ajustement(T,C,g,'fig_ex_ajustement.png')
```

devront produire (et sauvegarder) un graphique semblable (vous n'essaierez pas dans un premier temps de reproduire les titres, légendes etc.) à `fig_ex_ajustement.png`, que vous trouverez sur le site de la classe.

3 Régression pour le modèle d'ordre 1.

Q3 Écrire une fonction `L1(k)` prenant en argument un flottant positif `k` et renvoyant la valeur de $L^1(\mathtt{k})$.

Q4 Représenter L^1 sur un intervalle convenablement choisi. Semble-t-il y avoir un minimum à cette fonction ? Quelle est la régularité de L^1 sur $\mathbb{R}_+^*$?

Vous enverrez la figure tracée à votre enseignant.

Q5 Déterminer une fonction dL^1 sur laquelle appliquer une méthode de Newton permet d'obtenir le lieu du minimum de L^1. Écrire une fonction `dL1(k)` prenant en argument un flottant positif `k` et renvoyant la valeur de $dL^1(\mathtt{k})$.

Q6 Écrire une fonction `ddL1(k)` prenant en argument un flottant positif `k` et renvoyant la valeur de $(dL^1)'(\mathtt{k})$.

Q7 Écrire une fonction `newton(f, fp, x0, eps)` implémentant la méthode de Newton pour la fonction `f`, ou `fp` est supposée être la dérivée de `f`, à partir du point `x0` et s'arrêtant dès que deux points consécutifs sont distants d'au plus `eps`.

Q8 Appliquer la méthode de Newton pour trouver le lieu du minimum de L^1, noté k_1. Converge-t-elle pour toutes les valeurs initiales ?

Dans le script, vous écrirez une fonction `val_k1()`, sans argument, effectuant ce calcul et renvoyant la valeur trouvée. On pourra affecter à la variable `k1` cette valeur pour la suite du script.

Q9 Représenter les mesures expérimentales superposées à la fonction $f^1_{k_1}$.

Vous enverrez la figure tracée à votre enseignant.

4 Régression pour le modèle d'ordre 2.

Q10 Écrire une fonction `L2(k)` prenant en argument un flottant positif `k` et renvoyant la valeur de $L^2(\mathtt{k})$.

Q11 Représenter L^2 sur un intervalle convenablement choisi. Semble-t-il y avoir un minimum à cette fonction ? Quelle est la régularité de L^2 sur $\mathbb{R}_+^*$?

Vous enverrez la figure tracée à votre enseignant.

Q12 Déterminer une fonction dL^2 sur laquelle appliquer la méthode de la sécante (ou de Newton) permet d'obtenir le lieu du minimum de L^2. Écrire une fonction `dL2(k)` prenant en argument un flottant positif `k` et renvoyant la valeur de $dL^2(\mathtt{k})$.

Q13 Écrire une fonction `secante(f, x0, x1, eps)` implémentant la méthode de la sécante pour la fonction `f`, à partir du point `x0` et `x1` et s'arrêtant dès que deux points consécutifs sont distants d'au plus `eps`.

Q14 Appliquer la méthode de la sécante pour trouver le lieu du minimum de L^2, noté k_2.

Dans le script, vous écrirez une fonction `val_k2()`, sans argument, effectuant ce calcul et renvoyant la valeur trouvée. On pourra affecter à la variable `k2` cette valeur pour la suite du script.

Q15 Représenter les mesures expérimentales superposées à la fonction $f^2_{k_2}$.

Vous enverrez la figure tracée à votre enseignant.

Q16 Facultatif : appliquer la méthode de Newton pour trouver le lieu du minimum de L^2, noté k_2. Converge-t-elle pour toutes les valeurs initiales ?

Dans le script, vous écrirez une fonction `val_k2_bis()`, sans argument, effectuant ce calcul et renvoyant la valeur trouvée.

5 Comparaison qualitative des deux modèles.

Q17 Commenter les résultats des deux parties précédentes, ainsi que l'utilisation des méthodes de Newton et de la sécante.

6 Facultatif : régression linéaire.

Dans le modèle d'ordre 1, on peut remarquer que l'on a $-\log\left(\frac{C(t)}{C(0)}\right) = kt$. On a donc ici une relation linéaire entre le temps et une transformation des concentrations. On peut donc effectuer une *régression linéaire par moindres carrés*, qui consiste à minimiser le critère

$$L^1_{\text{lin}}(k) = \frac{1}{7}\sum_{i=0}^{6}\left(kt_i + \log\left(\frac{C_i}{C(0)}\right)\right)^2.$$

On effectue en réalité une régression linéaire par moindres carrés sur les points de coordonnées

$$\left(t_i, \log\left(\frac{C_i}{C(0)}\right)\right).$$

Q18 Montrer qu'il existe un unique paramètre k'_1 minimisant L^1_{lin}, puis le déterminer explicitement (en fonction des données du problème).

Q19 Écrirer une fonction `val_kp1()`, sans argument, et renvoyant la valeur de k'_1. On pourra affecter ensuite à la variable `kp1` cette valeur pour la suite du script.

Q20 Représenter les mesures expérimentales superposées à la fonction $f^1_{k'_1}$.

Vous enverrez la figure tracée à votre enseignant.

Q21 Comparer cette méthode avec celle utilisée dans la partie 3. Quels sont les avantages de chacune ?