

# Résolution d'équations

C. Charignon

## Table des matières

<b>I</b>	<b>Cours</b>	<b>2</b>
1	Dichotomie	2
2	Interlude : Formule de Taylor-Young forte centrée	2
3	Calcul approché de dérivée	2
3.1	Taux d'accroissement . . . . .	2
3.2	Dérivée symétrique . . . . .	3
4	Méthode de Newton	3
4.1	Principe de la méthode . . . . .	3
4.2	Convergence . . . . .	3
4.2.1	Dessins . . . . .	3
4.2.2	Notation : l'itératrice . . . . .	4
4.2.3	Limite éventuelle . . . . .	4
4.2.4	Un cas de convergence . . . . .	5
4.3	Vitesse de convergence . . . . .	5
4.4	Test d'arrêt . . . . .	6
<b>II</b>	<b>Exercices</b>	<b>7</b>
1	Méthode de Newton	1
2	Application	1

# Première partie

## Cours

Le but de ce chapitre est de résoudre de manière approchée une équation à une inconnue réelle. Une telle équation peut toujours être mise sous la forme « $f(x) = 0$ » d'inconnue  $x$ . Ainsi, dans ce chapitre, nous fixerons une fonction réelle  $f$ , définie sur une partie  $I$  de  $\mathbb{R}$ , et nous essaierons de résoudre l'équation  $f(x) = 0$ , d'inconnue  $x \in D_f$ .

### 1 Dichotomie

On programme sans difficulté l'algorithme de la dichotomie vu en maths. Les conditions à satisfaire pour être sûr que cette méthode fonctionne sont celles de théorème des valeurs intermédiaires, à savoir :

- $f$  est continue ;
- $I$  est un intervalle ;
- et il existe  $(a, b) \in I^2$  tel que  $f(a) \leq 0$  et  $f(b) \geq 0$ .

L'avantage de cette méthode est que les hypothèses ci-dessus sont relativement facilement satisfaites.

Calculons la complexité de notre fonction. Pour tout  $n \in \mathbb{N}$ , après  $n$  itérations, l'intervalle `[deb, fin]` est de longueur  $\frac{b-a}{2^n}$ . Ainsi la précision  $\epsilon$  est atteinte, et donc le programme s'arrête, dès que  $\frac{b-a}{2^n} \leq \epsilon$ , autrement dit lorsque  $n \geq \log_2 \left( \frac{b-a}{\epsilon} \right)$ . La complexité de l'algorithme est donc en  $O \left( \log \left( \frac{b-a}{\epsilon} \right) \right)$ , soit  $O(\log(\epsilon))$  si on considère  $b-a$  comme une constante.

Pour une précision de  $10^{-n}$ , le nombre d'étapes est de l'ordre de  $\log_2(-\log_2(10^{-n}))$ , qui vaut  $\frac{n}{\ln(2)}$ . En grossière approximation, ceci vaut  $3n$ .

### 2 Interlude : Formule de Taylor-Young forte centrée

On rappelle ici la formule de mathématiques qui sera la plus importante de tout le semestre en informatique. En effet, c'est la formule qui permet d'approcher une fonction par des fonctions plus simples (polynomiales). Elle sera à la base de toutes les méthodes d'approximation que nous utiliserons.

Voici donc la formule de Taylor-Young, sous la forme que nous utiliserons dans les prochains chapitres :

**Théorème 2.1.** Soit  $I \in \mathcal{P}(\mathbb{R})$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , et  $f \in \mathcal{C}^{n+1}(I, \mathbb{R})$ . Soit enfin  $a \in I$ . Alors :

$$f(a+h) \underset{h \rightarrow 0}{=} \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(a)}{k!} h^k + O(h^{n+1}).$$

On note les deux différences par rapport à la version traditionnellement enseignée en maths :

- Le reste est un  $O(h^{n+1})$  au lieu de  $o(h^n)$ , ce qui est plus précis. Cette version forte découle immédiatement de l'inégalité de Taylor-Lagrange.

*Remarque :* La formule de Taylor-Young faible présente cependant l'avantage de ne demander à  $f$  que d'être de classe  $\mathcal{C}^n$  et non  $\mathcal{C}^{n+1}$ .

- On a préféré l'écriture «  $f(a+h)$  lorsque  $h \rightarrow 0$  » plutôt que «  $f(x)$  lorsque  $x \rightarrow a$  ». En effet, il est toujours plus simple de considérer des limites en 0. On passe de l'une à l'autre par un simple changement de variable («  $h = x - a$  »).

### 3 Calcul approché de dérivée

Voici une première utilisation des formules de Taylor, qui nous sera utile dans la suite.

#### 3.1 Taux d'accroissement

Soit  $f$  une fonction de classe  $\mathcal{C}^2$  et  $a \in D_f$ . Soit  $h \in \mathbb{R}^{+*}$  tel que  $a+h \in D_f$ . On propose d'approcher  $f'(a)$  par  $\frac{f(a+h) - f(a)}{h}$ .

La formule de Taylor-Young forte à l'ordre 1 donne immédiatement que :

$$\frac{f(a+h) - f(a)}{h} = f'(a) + O_{h \rightarrow 0}(h).$$

Ainsi, cette formule permet d'approcher  $f'(a)$  avec une précision de l'ordre de  $O(h)$ .

### 3.2 Dérivée symétrique

On reprend les hypothèses précédentes, en supposant de plus  $f$  de classe  $C^3$  et  $a-h \in D_f$ . On propose cette deuxième formule pour approcher  $f'(a)$  (faire un dessin!) :  $\frac{f(a+h)f(a-h)}{2h}$ .

Cette fois la formule de Taylor-Young forte à l'ordre 2 donne :

$$\frac{f(a+h)f(a-h)}{2h} = f'(a) + O_{h \rightarrow 0}(h^2).$$

Ainsi, cette formule permet d'approcher  $f'(a)$  avec une précision de l'ordre de  $O(h^2)$  : elle est bien plus précise que la précédente.

## 4 Méthode de Newton

Soit  $I$  un intervalle et  $f : I \rightarrow \mathbb{R}$  qu'on suppose dérivable. On suppose que  $f$  admet un zéro dans  $I$  qu'on note  $\alpha$ .

### 4.1 Principe de la méthode

Pour commencer, on choisit un flottant  $u_0$  qu'on espère proche de  $\alpha$ . L'idée est alors de remplacer  $f$  par son DL1 en  $u_0$  :  $f(x) \underset{x \rightarrow u_0}{=} f(u_0) + (x - u_0)f'(u_0) + O((x - u_0)^2)$ . (Pour une fois, je n'utilise pas la version « pour  $h \rightarrow 0$  »).

Ensuite, au lieu de résoudre l'équation  $f(x) = 0$ , on résout « le DL1 de  $f=0$  », c'est-à-dire  $f(u_0) + (x - u_0)f'(u_0) = 0$ .

Cette dernière équation admet une solution ssi  $f'(u_0) \neq 0$ , et dans ce cas, cette solution est  $u_0 - \frac{f(u_0)}{f'(u_0)}$ .

Nous sommes donc en droit de croire que  $u_0 - \frac{f(u_0)}{f'(u_0)}$  est proche de  $\alpha$ . On note  $u_1$  ce nombre.

On recommence ensuite à partir de  $u_1$  pour obtenir  $u_2$  etc. Au final, pour tout  $n$  tel que  $u_n$  est défini, que  $u_n \in D_f$ , et que  $f'(u_n) \neq 0$ , on pose :

$$u_{n+1} = u_n - \frac{f(u_n)}{f'(u_n)}.$$

Et on espère que la suite  $u$  converge vers  $\alpha$ ...

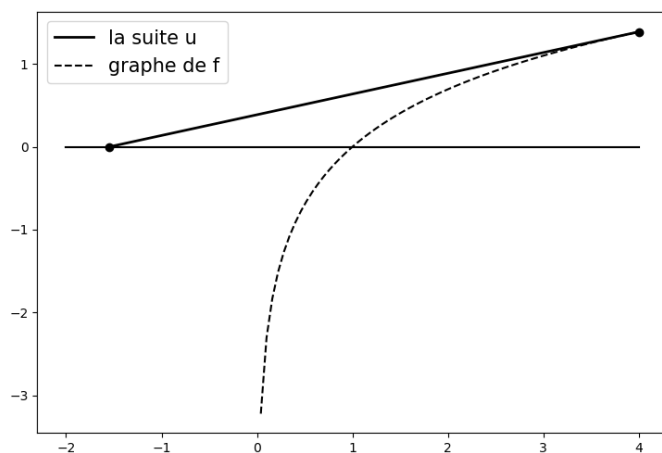
**Interprétation graphique :** Le graphe du DL1 de  $f$  en  $u_0$  n'est autre que la tangente à  $\mathcal{C}_f$  au point d'abscisse  $u_0$ . Et donc  $u_1$  est l'abscisse du point d'intersection de cette tangente avec l'axe des abscisses.

### 4.2 Convergence

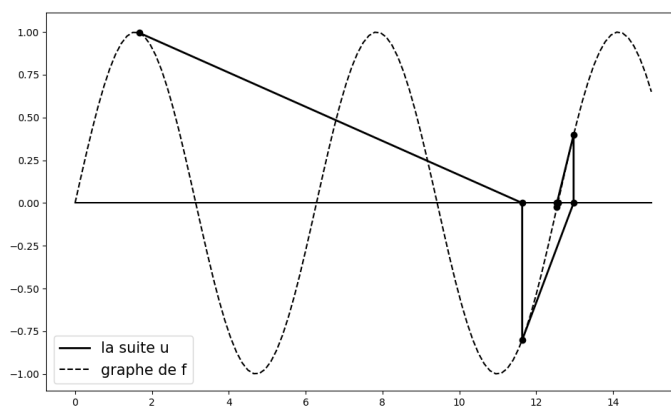
#### 4.2.1 Dessins

Le gros défaut de la méthode de Newton est qu'elle ne fonctionne pas à tous les coups (faire des dessins pour illustrer chacun des phénomènes suivant) :

- si  $u_n \notin D_f$  ou  $f'(u_n) = 0$ , alors  $u_{n+1}$  n'est pas définie. Dans l'exemple ci-dessous on a voulu résoudre l'équation  $\ln x = 0$ . On voit que  $u_1 < 0$ , donc  $u_2$  n'existe pas.



- plus généralement, si  $f'(u_n)$  est proche de 0, alors  $u_{n+1}$  est loin de  $u_n$ , le résultat est alors imprévisible. Dans l'exemple ci-dessous on essaie de trouver  $\pi$  en résolvant  $\sin(x) = 0$ , mais on risque de tomber sur un autre multiple de  $\pi$ .



- la suite  $u$  peut diverger ;
- si  $u$  converge, il n'est pas toujours facile de savoir vers quelle limite.

#### 4.2.2 Notation : l'itératrice

Dans la suite, notons  $g : x \mapsto x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ . C'est donc l'itératrice de  $u$ , c'est-à-dire la fonction telle que pour tout  $n \in \mathbb{N}$  tel que  $u_n$  est bien défini et  $u_n \in D_g$ ,  $u_{n+1} = g(u_n)$ .

#### 4.2.3 Limite éventuelle

En supposant que  $f$  est de classe  $\mathcal{C}^1$ , alors  $g$  est continue. Vous avez alors vu en math que si  $u$  converge, et si sa limite est dans  $D_g$ , alors cette limite est un point fixe de  $g$ . Calculons donc les points fixes de  $g$  : pour tout  $x \in D_g$ ,

$$\begin{aligned} g(x) = x &\Leftrightarrow x - \frac{f(x)}{f'(x)} = x \\ &\Leftrightarrow f(x) = 0 \end{aligned}$$

Bonne nouvelle :  $u$  converge donc vers une solution de  $(E)$  !

**Proposition 4.1.** On suppose que  $u_n$  est bien définie pour tout  $n \in \mathbb{N}$ , et que  $u$  converge vers une limite  $l$ . On suppose enfin que  $l \in D_g$  et que  $f$  est de classe  $\mathcal{C}^1$ .

Alors  $f(l) = 0$ .

*Remarque :* Si l'équation a plusieurs solutions, il n'est pas évident de savoir vers laquelle nous allons.

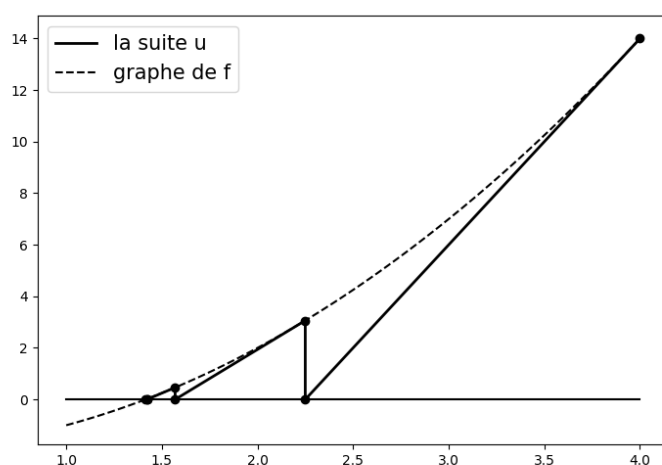
#### 4.2.4 Un cas de convergence

À présent, voici une situation où nous sommes sûrs que  $u$  converge :

**Théorème 4.2.** On suppose qu'il existe un intervalle  $V$  contenant  $\alpha$  et  $u_0$  tel que :

- $f$  strictement croissante et convexe sur  $V$
- $u_0 \geq \alpha$

Alors  $u$  est bien définie sur  $\mathbb{N}$ , et  $\forall n \in \mathbb{N}$ , on a  $\alpha \leq u_{n+1} \leq u_n$ , et  $u$  converge vers  $\alpha$ .



Pour la démonstration, traiter l'exercice 2.

*Remarques :*

- Par définition, une fonction est convexe lorsque sa dérivée est croissante. Si  $f$  est convexe, alors son graphe est toujours « au-dessus » de ces tangentes (pour la preuve, faire un simple tableau de variations de  $x \mapsto f(x) - (f(a) + f'(a)(x - a))$ ). C'est de ceci qu'on déduit que  $\alpha \leq u_{n+1} \leq u_n$ .
- Dans le cas où  $f$  est deux fois dérivable, dire qu'elle est convexe sur  $V$  revient à dire que  $f''$  est positive sur  $V$ .

*Remarques :*

- On peut énoncer un théorème analogue lorsque  $f$  est décroissante ou concave.
- Pour peu que  $f$  soit de classe  $\mathcal{C}^2$  et que  $f''(\alpha) > 0$ , il existe  $\eta \in \mathbb{R}^{+*}$  tel que  $f'' > 0$  sur  $[\alpha - \eta, \alpha + \eta]$  et donc le théorème s'applique avec  $V = [\alpha - \eta, \alpha + \eta]$ . Il reste le problème de choisir  $u_0 \in [0, \alpha + \eta]$ ... C'est pourquoi on a dit qu'il faut choisir  $u_0$  « proche » de  $\alpha$ .

De même si  $f''(\alpha) < 0$ ,  $f$  est concave au voisinage de  $\alpha$ .

Au final, le seul cas vraiment problématique est si par malchance  $f''(\alpha) = 0$ ...

### 4.3 Vitesse de convergence

On continue d'utiliser  $g : x \mapsto x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ , la fonction telle que  $\forall n \in \mathbb{N}$ ,  $u_{n+1} = g(u_n)$ .

On suppose ici que  $f$  est de classe  $\mathcal{C}^2$ , donc  $g$  est de classe  $\mathcal{C}^1$ . Sa dérivée est  $g' : x \mapsto 1 - \frac{f'(x)^2 - f(x)f''(x)}{f'(x)^2}$  donc :

$$g' : x \mapsto \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2}.$$

On remarque sans peine que :

- $g(\alpha) = \alpha$ . (On avait déjà dit que les points fixes de  $g$  sont les solutions de  $\alpha$ .)
- $g'(\alpha) = 0$ . C'est ce dernier point qui justifie que la convergence va être très rapide.<sup>1</sup>

En appliquant la formule de Taylor-Young à l'ordre 1, il vient :

$$g(\alpha + h) \underset{h \rightarrow 0}{=} \alpha + O(h^2)$$

ou encore :

$$g(x) \underset{x \rightarrow \alpha}{=} \alpha + O((x - \alpha)^2).$$

Supposons que la suite  $u$  converge vers  $\alpha$ , alors nous pouvons composer (remplacer  $x$  par  $u_n$ ) :

$$g(u_n) \underset{n \rightarrow \infty}{=} \alpha + O((u_n - \alpha)^2)$$

ce qui se réécrit :

$$u_{n+1} - \alpha = O((u_n - \alpha)^2)$$

ou encore, en revenant à la définition des  $O$  :

$$\exists K \in \mathbb{R}^+ \text{ tq } \forall n \in \mathbb{N}, \quad |u_{n+1} - \alpha| \leq K |u_n - \alpha|^2$$

Ainsi, à chaque étape, la précision du résultat est grosso-modo (à la constante  $K$  près) mise au carré ! Autrement dit, le nombre de décimales justes est doublé.

*Remarque :* La constante  $K$  venait de l'inégalité de Taylor-Lagrange, elle valait  $\frac{1}{2} \|g''\|_\infty$ .

#### 4.4 Test d'arrêt

Pour savoir quand arrêter le programme, nous avons besoin d'estimer  $|u_n - \alpha|$ , alors que nous ne connaissons pas  $\alpha$ .

Soit  $n \in \mathbb{N}$ . On applique le théorème des accroissements finis à  $g$  sur l'intervalle  $(\alpha, u_n)$  : il existe  $c_n \in (\alpha, u_n)$  tel que  $g(u_n) - g(\alpha) = g'(c_n)(u_n - \alpha)$ , autrement dit :

$$u_{n+1} - \alpha = g'(c_n)(u_n - \alpha).$$

Ce qu'on peut réécrire ainsi :

$$u_{n+1} - u_n = (g'(c_n) - 1)(u_n - \alpha).$$

On se place toujours dans le cas où  $u$  converge vers  $\alpha$ . Le fait que  $c$  soit encadrée entre  $\alpha$  et  $u$  prouve alors, via le théorème des gendarmes, que  $\lim_{n \rightarrow \infty} c_n = \alpha$ , d'où en composant  $\lim_{n \rightarrow \infty} g'(c_n) = g'(\alpha) = 0$ .

En particulier, à partir d'un certain rang,  $g'(c_n) - 1 \neq 0$  et on peut diviser. Prenons également la valeur absolue puisque c'est ce qui nous intéresse :

$$|u_n - \alpha| = \frac{1}{|g'(c_n) - 1|} \times |u_{n+1} - u_n|.$$

On a bien une formule permettant d'exprimer  $u_n - \alpha$ . Mais le  $g'(c_n)$  n'est guère pratique en l'état.

Cependant, on peut utiliser le fait que  $g'(c_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$  : à partir d'un certain rang, on a  $|g'(c_n)| \leq \frac{1}{2}$  (par exemple), et alors :

$$|u_n - \alpha| \leq 2 |u_{n+1} - u_n|$$

**Théorème 4.3.** *On suppose que  $u$  converge vers  $\alpha$ . Alors il existe  $n_0 \in \mathbb{N}$  tel que  $\forall n \geq n_0$ ,*

$$|u_n - \alpha| \leq 2 |u_{n+1} - u_n|$$

Ainsi, pour savoir si une certaine précision  $\epsilon$  est atteinte, il suffit de tester si  $|u_{n+1} - u_n| \leq \frac{\epsilon}{2}$ .

**N.B.** Le problème est que ceci n'est valable qu'à partir d'un certain rang. On pourrait imaginer une situation pathologique où  $|u_{n+1} - u_n| \leq \frac{\epsilon}{2}$  serait vrai alors que  $n < n_0$  et donc on n'aurait aucune assurance que  $|u_n - \alpha| < \epsilon$ ...

Par exemple, si  $g'$  est bornée par  $\frac{1}{2}$  sur un intervalle où nous sommes sûrs que  $u$  va rester, alors la formule est vraie pour  $n_0 = 0$  et nous pouvons appliquer notre critère de convergence le cœur léger. Rappelons à cette occasion que

1. De manière générale, si  $g$  est l'itératrice d'une suite récurrente  $u$ , si  $\alpha$  est un point fixe, alors plus  $g'(\alpha)$  est proche de 0, et plus  $u$  peut converger vite vers  $\alpha$ . Si  $|g'(\alpha)| > 1$ , alors le point fixe  $\alpha$  est « répulsif » est  $u$  ne peut pas converger vers  $\alpha$ , sauf à tomber pile dessus.

$g' : x \mapsto \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2}$ . Pour peu que  $f$  soit  $\mathcal{C}^2$ ,  $g'$  est continue et nulle en  $\alpha$ , ce qui nous assure l'existence d'un voisinage  $V$  de  $\alpha$  où  $|g'|$  est majorée par  $\frac{1}{2}$ .

## Deuxième partie

# Exercices

# Exercices : Résolution approchée d'équations et formule de Taylor Young

## 1 Méthode de Newton

### Exercice 1. \*! Convergence ou pas ?

La méthode de Newton fonctionnera-t-elle dans les situations suivantes ? On expliquera en une ou deux phrases et un dessin. Tester effectivement grâce au programme écrit en cours.

1. Calculer  $\sqrt{3}$  en résolvant l'équation  $x^2 = 3$ .
2. Calculer  $\pi$  en résolvant l'équation  $\sin(x) = 0$ .
3. Calculer  $\pi$  en résolvant l'équation  $\frac{1}{2} \sin(x) = 0$ .

### Exercice 2. \*\* Convergence de la méthode de Newton

Cet exercice propose l'étude détaillée de la méthode de Newton. Une partie plus ou moins résumée en sera faite en cours, selon le temps disponible.

Soit  $I$  un intervalle est  $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ . On se place dans la situation idéale suivante :

- $f$  est de classe  $\mathcal{C}^2$  ;
- $f$  s'annule sur  $I$  ;
- $f'$  est strictement positive ;
- $f'' \geq 0$  (on dit que  $f$  est «convexe») ;
- on choisit enfin  $u_0 \in I$  tel que  $f(u_0) \geq 0$ .

On notera  $g : x \mapsto x - \frac{g(x)}{g'(x)}$ . Et on notera  $u$  la suite de la méthode de Newton.

1. Vérifier que l'équation  $f(x) = 0$  d'inconnue  $x \in I$  admet une unique solution. On notera dans la suite  $\alpha$  cette solution.
2. Soit  $n \in \mathbb{N}$ . On suppose que  $u_n$  est bien défini et appartient à  $[\alpha, u_0]$ . Le but est de prouver qu'il en va de même de  $u_{n+1}$ .
  - (a) Montrer que  $u_{n+1}$  est bien défini.
  - (b) Vérifier que le graphe de  $f$  est au dessus de sa tangente en  $u_n$ , autrement dit que :  $\forall x \in I, f(x) \geq f(u_n) + (x - u_n)f'(u_n)$ .
  - (c) En déduire que  $\alpha \leq u_{n+1} \leq u_n$
3. Déduire de ce qui précède que  $u$  est bien définie puis qu'elle converge.
4. Notons  $l = \lim_{n \rightarrow \infty} u_n$ . Démontrer que  $l = \alpha$ .

*Ainsi nous avons prouvé que la méthode de Newton converge. À présent, on s'intéresse à sa vitesse de convergence.*

5. En utilisant la formule de Taylor-Young, montrer que  $g(\alpha + h) = \alpha + O(h^2)$ .
6. En déduire que  $u_{n+1} - \alpha = O((u_n - \alpha)^2)$ . Interprétation ?

### Exercice 3. \*\*\* Arranger les notes aux DS

Écrire une fonction qui calcule les coefficients  $a$  et  $b$  pour que la fonction  $f : x \mapsto ax^b$  appliquée aux notes du dernier DS ramène la moyenne à 10 et la meilleure note à 19.

## 2 Application

### Exercice 4. \*\* Golf

On étudie un tir de golf. On note  $\vec{v}_0$  la vitesse initiale de la balle, et  $\alpha$  l'angle avec l'horizontale. On néglige les frottements. On utilise un repère orthonormé direct  $(O, \vec{e}_x, \vec{e}_y)$  tel que  $O$  est le point de départ de la balle,  $\vec{e}_y = -\frac{1}{g}\vec{g}$ .

1. Écrire les équation du mouvement.
2. Vérifier qu'un point  $(x_F, y_F)$  est atteint par la balle si et seulement si :

$$y_F = \tan(\alpha)x_F - \frac{gx_F^2}{\cos(\alpha)^2 v_0^2}.$$



3. Écrire une fonction qui prend en entrée  $x_F$ ,  $y_F$ , et  $v_0$  et qui renvoie l'angle  $\alpha$  à prendre pour que la balle atteigne le point  $(x_F, y_F)$  si sa vitesse initiale est  $v_0$ .

### Exercice 5. \*\* Chimie

On considère la réaction de dissociation de l'eau d'équation-bilan :  $2H_2O_{(g)} \rightarrow 2H_{2(g)} + O_{2(g)}$ .

Cet équilibre est étudié, sous la pression  $p$  maintenue à 1 bar et à la température de  $T = 400$  K, maintenues constantes, en partant de  $H_2O$  pur ; à cette température, la constante d'équilibre  $K^0$  peut être calculée à partir de données thermodynamiques :  $K^0(400K) = 3.0 \times 10^{-59}$ .

1. Exprimer  $K^0$  à partir des activités des trois constituants puis à partir de leurs pressions partielles et de la pression standard, et enfin à partir des nombre de moles des constituants et nombre total de moles de gaz.
2. Dresser un tableau d'avancement, en rajoutant une colonne pour la quantité totale de gaz.
3. Le taux de dissociation de l'eau noté  $\alpha$  est le rapport de la quantité de  $H_2O$  dissociée à l'équilibre sur la quantité de  $H_2O$  initiale. Établir la relation entre  $K^0$  et le taux de dissociation de l'eau.
4. Montrer que  $\alpha$  vérifie  $\alpha^3 \frac{p}{p^0} = 2K^0(1-\alpha)^2 \left(1 + \frac{\alpha}{2}\right)$ .
5. Emmêtré une hypothèse simplificatrice vous permettant de résoudre l'équation ci-dessus et donner la valeur de  $\alpha$  alors obtenue.

Dans la suite, on suppose que  $p = p^0$  et on note  $f : \alpha \mapsto 2K^0(1-\alpha)^2 \left(1 + \frac{\alpha}{2}\right) - \alpha^3$ .

6. Écrire une fonction **trace** qui ne prend aucun argument et qui trace le graphe de  $f$  en dessinant 100 points. Choisissez, en justifiant, l'intervalle sur lequel tracer  $f$  (plusieurs réponses possible, du moment que la justification est cohérente).
  - (a) Votre hypothèse simplificatrice est-elle en accord avec le graphe ?
  - (b) Au vu du graphe, quelle méthode de résolution approchée vous paraît adaptée pour trouver une valeur approchée de  $\alpha$  à l'équilibre ? Justifier.
  - (c) Préciser les valeurs des paramètres à envoyer au programme de résolution.
  - (d) Dessiner les premières étapes de la résolution sur le graphe.
7. Choisir une valeur  $u_0$  pour initialiser la suite et justifier précisément en utilisant les propriétés de  $f$  visibles sur le graphe que la méthode de Newton va fonctionner.
8. Écrire la ou les ligne(s) de code permettant d'utiliser votre fonction pour déterminer une valeur approchée de  $\alpha$ .
9. En partant de  $H_2O$  pur, à la température de 3000 K et sous la pression de 1 mbar, une étude similaire à celle effectuée précédemment fournit un coefficient de dissociation de l'eau  $\alpha'' \simeq 0,3$ . Conclure quant à la stabilité de la molécule d'eau dans ces nouvelles conditions.
10. Certains scientifiques pensent que la simple molécule d'eau se forme, au sein des nébuleuses, dans des zones peu exposées au rayonnement ultra-violet, à une température de l'ordre de 3000 K.  
L'étude précédente est-elle en accord avec cette hypothèse ?

### Quelques indications

2. 1.
  - (a)
  - (b) Tableau de variation.
3. Calculer  $g(\alpha)$  et  $g'(\alpha)$ .
4. Utiliser  $h = u_n - \alpha$ .

## Quelques solutions

1. La fonction  $f : x \mapsto x^2 - 3$  est strictement croissante sur  $\mathbb{R}^+$  et sa dérivée seconde y est strictement positive. Nous sommes donc dans le cas vu en cours où la méthode de Newton converge sans soucis à condition de prendre  $u_0 > \sqrt{3}$ .  
Il suffit de taper par exemple `newton( lambda x:x*x-3, 2, 10**-10)`.
2. La commande à taper serait ici `newton( np.sin, 3, 10**-10)`.  
Cependant, nous ne sommes pas dans une situation où il est sûr que la méthode de Newton converge... Cela va dépendre du choix de  $u_0$ . En testant, on voit que la méthode semble effectivement converger vers  $\pi$  lorsque  $u_0 = 2,5$ , par contre elle converge vers 0 lorsque  $u_0 = 4,5$ .

2. 1.  $f$  est strictement croissante donc injective, d'où l'unicité.
2. (a) Comme  $u_n \in [\alpha, u_0]$ , on voit en particulier que  $u_n \in I$ . De plus, par hypothèse,  $f'$  ne s'annule pas. Donc  $g(u_n)$  est bien défini.
- (b) Notons  $h : x \mapsto f(x) - f(u_n) - (x - u_n)f'(u_n)$ . La fonction  $h$  est dérivable est  $h' : x \mapsto f'(x) - f'(u_n)$ .  
Par hypothèse,  $f'' \geq 0$  donc  $f'$  est croissante. Ainsi,  $f'$  est négative sur  $I \cap ]-\infty, u_n]$  et positive sur  $I \cap [u_n, \infty[$ .  
Comme de plus  $h(u_n) = 0$ , un tableau de variation permet de conclure.
- (c)  $u_{n+1}$  est l'abscisse où la tangente à  $\mathcal{C}_f$  en  $u_n$  coupe l'axe des abscisses. En formule, cela s'écrit  $f(u_n) + (u_{n+1} - u_n)f'(u_n) = 0$ . Avec la question précédente cela donne  $f(u_{n+1}) \geq 0$ . Puis comme  $f$  est strictement croissante et  $f(\alpha) = 0$ , on déduit que  $\alpha \leq u_{n+1}$ .  
Pour le fait que  $u_{n+1} \leq u_n$ , c'est juste le fait que  $f'(u_n) > 0$ . Précisément,

$$u_{n+1} - u_n = g(u_n) - u_n = \frac{f(u_n)}{f'(u_n)} > 0$$

3. Par récurrence grâce à la question précédente, nous savons que :

- $u$  est bien définie sur  $\mathbb{N}$ ;
- $u$  est décroissante;
- $u$  est majorée par  $\alpha$ .

On conclut que  $u$  converge (et sa limite est  $\geq \alpha$ ).

4. On sait que  $l \in [\alpha, u_0]$ . En particulier,  $l \in D_g$ . En outre,  $g$  est continue. Donc  $\lim_{n \rightarrow \infty} g(u_n) = g(l)$ . Mais par ailleurs  $g(u_n) = u_{n+1} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} l$ . Par unicité d'une limite,  $l = g(l)$ . Un calcul simple montre alors que  $l = \alpha$ .
5. C'est la formule de Taylor à l'ordre 1, sachant que  $g(\alpha) = \alpha$  et que  $g'(\alpha) = 0$ .

4

5. 1. En fonction des activités :  $K^0 = \frac{a_{H_2}^2 a_{O_2}}{a_{H_2O}^2}$ .

En fonction de la pression partielle, on obtient ainsi  $K^0 = \frac{p_{H_2}^2 p_{O_2}}{p_{H_2O}^2 p^0}$ .

Pour tout constituant  $x$  gazeux,  $a_x = \frac{p_x}{p^0}$ ,  $p_x$  étant la pression partielle de  $x$ , donc  $p_x = p \times \frac{N_x}{N_{tot}}$ , où  $N_{tot}$  est la quantité totale de gaz.

Ainsi :

$$K^0 = \frac{p n_{H_2}^2 n_{O_2}}{p^0 n_{H_2O}^2 N_{tot}}$$

2. **Tableau d'avancement :**

$H_2O$	$H_2$	$O_2$	$N_{tot}$
$n_0$	0	0	$n_0$
$n_0 - 2x$	$2x$	$x$	$n_0 + x$

L'équation précédente devient alors :

$$K^0 = \frac{p}{p^0} \frac{4x^3}{(n_0 + x)(n_0 - 2x)^2}.$$

3. Vu la définition, avec la notation  $x$  précédente,  $\alpha = \frac{2x}{n_0}$  et l'équation devient

$$K^0 = \frac{p}{p^0} \frac{\alpha^3}{2(1 + \frac{\alpha}{2})(1 - \alpha)^2}.$$

D'où l'équation proposée.

4. Comme 0 est très petit, on peut supposer  $\alpha \ll 1$ . Alors  $20(1 - \alpha)^2 (1 - \frac{\alpha}{2}) \simeq 20$ , puis  $\alpha \simeq \sqrt[3]{20}$ .  
*Remarque :* Il s'agit de vrais équivalents, au sens mathématique, valables lorsque  $\alpha \rightarrow 0$ .