Projet

May 4, 2022

1 Rapport de Projet d'Analyse Numérique(Groupe 4)

1.1 Thème: Détermination du pH d'un acide faible et méthodes de continuation

###

Auteur: Sinclair TSANA (Etudiant en BAB2) Enseignant: Mr. Christophe TROESTLER

1.2 Objectifs du projet:

Dans ce projet, il est question d'aborder un problème concret grâce aux techniques numériques vues au cours qui pourrons être adaptées de manière à répondre à la série des 11 questions proposées.

1.3 Résultats attendues:

1. Un bref rapport écrit qui résume les développements mathématiques et les solutions apportées aux problèmes posées
2. Les conclusions des expériences numériques.

Note: Ce notebook constitut une réponse à ces deux points. Nous y présenterons à la fois le `code python` ainsi que les détails de nos développements mathématiques.

1.4 Importation des librairies nécessaires

[1]:
```
import matplotlib.pyplot as plt   # pour les representations graphiques
import math                       # contient les fonctions mathematiques usuels␣
 ↪tels que log, sin, etc...
import random
import array
import numpy as np                # pour les calculs numeriques
from sympy import *               # pour les calculs symboliques
from math import log10
from scipy.optimize import brentq
from scipy.integrate import solve_ivp
from numpy.linalg import inv
```

On s'intéresse à la variation du pH d'une solution aqueuse d'un acide faible AH (formé d'un atome d'hydrogène H et d'une autre partie notée A) en fonction de $log_{10}c$ où $c > 0$ représente la concentration de l'acide. L'analyse de ce problème conduit aux équations suivantes :

$$\begin{cases} [H_3O^+][OH^-] = k_e & (1) H_3O^+ > H_3O^+ \\ = [OH^-] + [A^-] & (2) AH > AH \\ k_a = [A^-][H_3O^+] & (3) AH > AH \\ +[A^-] = c & (4) \end{cases}$$

Question 1 ### 1.a) Détermination du polynôme

On procède par élimination successive de $[OH^-]$, $[A^-]$ et $[AH]$ des équations ci-dessus.

$(1) \Rightarrow [OH^-] = \frac{k_e}{[H_3O^+]}$

Dans (2) on a: $[H_3O^+] = \frac{k_e}{[H_3O^+]} + [A^-] \iff [A^-] = [H_3O^+] - \frac{k_e}{[H_3O^+]}$ $(*)$

Dans (3) on a: $[AH] = \frac{1}{k_a}([H_3O^+]^2 - k_e$

Dans (4) on a: $[A^-] = c - \frac{1}{k_a}([H_3O^+]^2 - k_e)$ $(**)$

$(*)$ et $(**)$ donnent: $[H_3O^+] - \frac{k_e}{[H_3O^+]} = c - \frac{1}{k_a}([H_3O^+]^2 - k_e)$

En multipliant par $k_a[H_3O^+]$, on obtient: $k_a[H_3O^+]^2 - k_a k_e = ck_a[H_3O^+] - [H_3O^+]^3 + k_e[H_3O^+]$

$\iff [H_3O^+]^3 + k_a[H_3O^+] - (ck_a[H_3O^+] + k_e[H_3O^+]) - k_a k_e = 0$

D'ou l'équation $X^3 + k_a X^2 - (k_e + ck_a)X - k_a k_e = 0$ Où X représente la concentration en H_3O^+

1.4.1 Montrons que le polynôme P possède une unique racine positive.

On a: $P(x) = x^3 + k_a x^2 - (k_e + ck_a)x - k_a k_e$

Trouver les racines de P c'est résoudre l'équation $x^3 + k_a x^2 - (k_e + ck_a)x - k_a k_e = 0$

$P(x) = 0 \iff x = (-k_a x^2 + (ck_a + k_e)x + k_a k_e)^{1/3}$

Posons $f(x) = -k_a x^2 + (ck_a + k_e)x + k_a k_e$

- **Etudions les variations de la fonction f**

  On a: $f'(x) = -2k_a x + ck_a + k_e$

  $f'(x)=0 \iff x = x\_1 = \frac{ck_a+k_e}{k_a} > \frac{k_e}{k_a} > 0$, $f''(x) = -2k\_a < 0 pour tout x rel positif.$

Ainsi $\forall x \geq 0$, on a $f'(x) \leq ck_a + k_e$ et $\forall x \in [0, x_1]$, on a $k_a k_e \leq f(x) \leq f(x_1)$

Posons $F(x) = (f(x))^{1/3}$, on a $F'(x) = \frac{1}{3}f'(x)(f(x))^{-2/3} \leq \frac{1}{3}(ck_a + k_e)(f(x))^{-2/3}$

Or, f est à valeurs strictement positives sur $[0, x_1]$ et la fonction $x :\longmapsto x^{-2/3}$ étant décroissante sur $]0, +\infty[$, donc la fonction $g : x \longmapsto (f(x))^{-2/3}$ est bornée su $[0, x_1]$. Pour tout $0 \leq x \leq x_1$, on a $g(0) \geq g(x) \geq g(x_1)$. Donc g est majorée sur $[0, x_1]$ par: $g(0) = (f(0))^{-2/3}$ et on a $f(0) = k_a k_e$.

Ce qui nous donne $F'(x) \leq K$ où $K = \frac{1}{3}(ck_a + k_e)(k_a k_e)^{-2/3}$.

Ainsi, d'après le **Théorème des Accroissements Finis**, on a :

$\forall x, y \in [0, x_1] \quad |F(x) - F(y)| \leq K|x - y|$

$K \leq 1 \iff \frac{1}{3}.(ck_a + k_e)(k_a k_e)^{-2/3} \leq 1 \iff ck_a + k_e \leq 3(k_a k_e)^{2/3} \iff c \leq \frac{3}{k_a}.((k_a k_e)^{2/3} - k_e)$

Posons $c_1 = \frac{3}{k_a}.((k_a k_e)^{2/3} - k_e)$

Donc la fonction F est K-Lipschitzienne sur $[0, x_1]$ et en particulier elle est contractant sur $[0, x_1]$ lorsque $c \in [0, c_1]$

Il en découle que F admet un unique point fixe. Autrement dit l'équation $F(x) = x$, qui est équivalente à $P(x) = 0$, admet une unique solution sur $[0, x_1]$

[2]:
```
# Quelques valeurs particulières
k_a = 1.8*10**(-5)      # Constante d'acidité  propre à l'acide
k_e = 1.0116*10**(-14) # La constante ionique de l'eau
c1 = (3/k_a)*((k_a*k_e)**(2/3)-k_e) # tels que posée ci-dessus
x1_c1 = c1 + k_e/k_a    # valeur de x1 pour c<=c1
c1, x1_c1
```

[2]: (5.1857032777617826e-08, 5.241903277761783e-08)

1.4.2 1.b) Algorithme de Horner pour évaluer P

On considère le polynôme $P(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + ... + a_1 x^1 + a_0$

La méthode de Horner consiste a écrire P(x) sous la forme $P_1(x).x + a_0$ et de repéter cette opération sur P_1 et ainsi de suite jusqu'a obtenir le polynôme constant $P_n(x) = a_n$. Son implémentation en python est la suivante:

[3]:
```
def horner(A,x): # A est le vecteur contenant les coefficients (a_i)_{i=0...n}
    n = len(A)-1
    p = A[n]
    i = n
    for i in range(n-1,0,-1):
        p = p*x + A[i]
    return p
```

1.4.3 1.c) Test de l'Algorithme de Horner et méthode des invariants

[4]:
```
c = random.uniform(0,1) # On génère un nbre aléatoire entre 0 et 1 pour tester␣
 ↪notre fonction
A = [-k_a*k_e,-(k_e+c*k_a), k_a,1]
```

[5]:
```
horner(A,0)== -k_a*k_e # on teste l'image de 0
horner(A,1)== sum(A)   # on teste l'image de 1
```

[5]: True

1.4.4 Méthode des invariants

Un invariant de boucle est une propriété Q qui vérifie: - Est vraie avant l'entrée dans la boucle. - Est toujours vraie après chaque itération de la boucle. - Vaut la propriété P desiree a la fin de l'exécution de la boucle.

Cas de l'Algorithme de Horner Notons $A_n = \{a_0, a_1, ..., a_n\}$ et $P_i = horner(A_i, x)$ > **Invariant de boucle:** A chaque itération i, on a: $P_i = A_n x^{n-i} + A_{n-i-1}x^{n-1} + ... + A_{i+1}x + A_i = \sum_{j=0}^{n-i} A_{n-j}x^{n-i-j}$

Preuve:

- **Avant la boucle**, $i = n$ > On a $P_i = \sum_{j=0}^{n-n} A_{n-j}x^{n-i-j} = A_n$
- Montrons que à chaque prochaine itération $inew$, on a $horner(A_{inew}, x) \Rightarrow horner(A_{iold}, x)$ où \$ iold \$ est l'itération précédente

  $P_{iold} = (A_n x^{n-iold} + A_{n-1}x^{n-iold-1} + ... + A_{iold})x + A_{iold-1} = A_n x^{n-iold+1} + A_{n-1}x^{n-iold} + ... + A_{iold}x + A_{iold-1} = A_n x^{n-inew} + A_{n-1}x^{n-inew-1} + ... + A_{inew+1}x + A_{inew} = \sum_{j=0}^{n-inew} A_{n-j}x^{n-inew-j} = P_{inew}$

  Autrement dit, à chaque itération i, on a $P_i = horner(A_i, x) \Rightarrow P_{i-1} = horner(A_{i-1}, x)$

- Après la boucle, $i = 0$ et on a bien $P_0(X) = a_n x^n + a_{n-1}x^{i-1} + ... + a_1 x + a_0$

Les étapes de l'algorithme de Horner sont les suivantes:

$\ \ \begin{array}{ll} P_{n}(X) = a_nX \\ P_{n-1}(X) = P_{n}X + a_{n-1} = a_{n}x + a_{n-1} \\ \vdots \\ P_{1} \end{array}$ *multiplications*$

n décroit jusqu'a 0 et à la fin on a bien le résultat désiré $P(X) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + ... + a_1 x + a_0$

1.4.5 1.d) Valeurs de $c > 0$ en fonction de k_e et k_a pour que $[H_3O^+] \leqslant 1$

D'après la question (1-a), on a :

$[A^-] = [H_3O^+] - \frac{k_e}{[H_3O^+]} \qquad (*)$

et $[A^-] = c - \frac{1}{k_a}([H_3O^+]^2 - k_e) \qquad (**)$

$[H_3O+] \leqslant 1 \iff \frac{1}{[H_3O+]} \geq 1 \iff \frac{k_e}{[H_3O+]} \geq k_e \iff -\frac{k_e}{[H_3O+]} \leqslant -k_e \iff [H_3O^+] - \frac{k_e}{[H_3O+]} \leqslant -k_e + [H_3O^+] \leqslant 1 - k_e$

Ainsi,on a $\quad [H_3O^+] \leqslant 1 \iff [H_3O^+] - \frac{k_e}{[H_3O+]} \leqslant -k_e + [H_3O^+] \leqslant 1 - k_e$

$(*)$ devient $\quad [A^-] \leqslant 1 - k_e$

Dans $(**)$, on obtient: $\quad c - \frac{1}{k_a}([H_3O^+]^2 - k_e) \leqslant 1 - k_e$

$$\iff c \leqslant 1 - k_e + \frac{1}{k_a}[H_3O^+]^2 - \frac{k_e}{k_a}$$

En majorant $[H_3O^+]$ par 1, on obtient $c \leqslant 1 - k_e + \frac{1}{k_a} - \frac{k_e}{k_a} = \frac{(1-k_e)(1+k_a)}{k_a}$

On a finalement: $c \in]0, \frac{(1-k_e)(1+k_a)}{k_a}]$

1.4.6 e) Représentation du polynôme p sur [0;0.005] pour c $\in \{1., 0.1, 0.01, 10^{-12}\}$

[6]:
```
C = np.array([1.,0.1, 0.01, 10**(-12)])
coefs = [] # vecteur contenant les coefficients du polynôme pour les différentes␣
 ↪valeurs de C
for i in C:
    res = np.array([-k_a*k_e, -(k_e+i*k_a), k_a, 1])
    coefs.append(res)
    coefs
```

[7]:
```
coefs
```

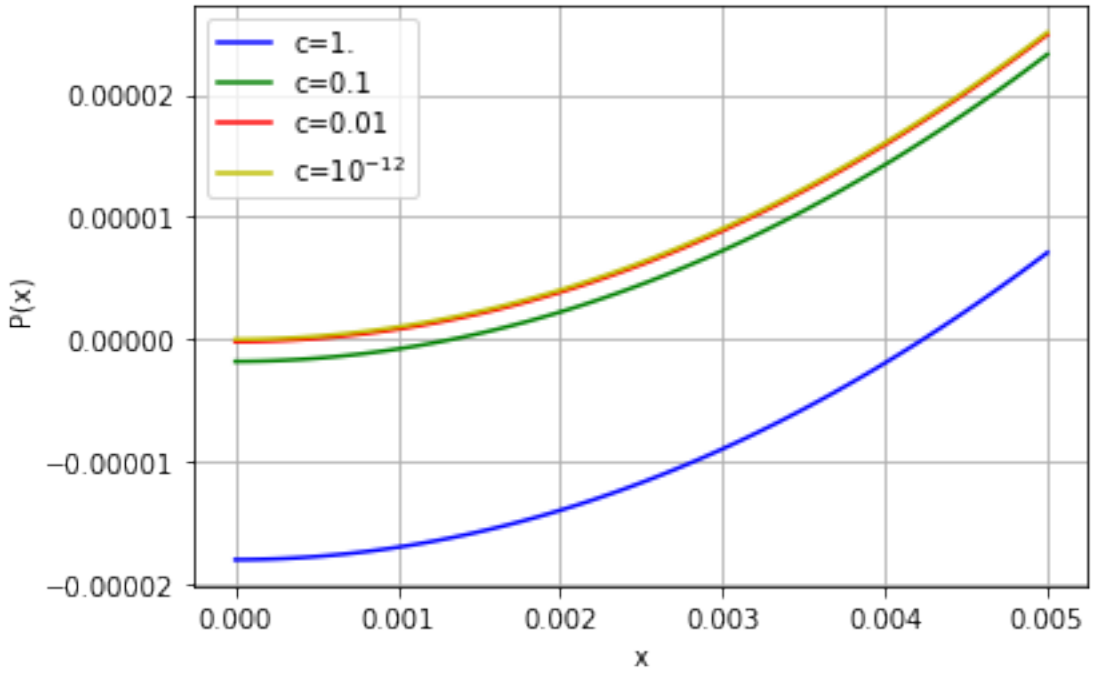
[7]:
```
[array([-1.82088e-19, -1.80000e-05,  1.80000e-05,  1.00000e+00]),
 array([-1.82088000e-19, -1.80000001e-06,  1.80000000e-05,  1.00000000e+00]),
 array([-1.8208800e-19, -1.8000001e-07,  1.8000000e-05,  1.0000000e+00]),
 array([-1.82088e-19, -1.01340e-14,  1.80000e-05,  1.00000e+00])]
```

[8]:
```
x = np.linspace(0,0.005, 100)
px1 = [];px2 = [];px3 = [];px4 = []; # initialisation des vecteurs  qui␣
 ↪recevront les valeurs des polynômes
for i in range(len(x)):
    px1.append(horner(coefs[0],x[i]))
    px2.append(horner(coefs[1],x[i]))
    px3.append(horner(coefs[2],x[i]))
    px4.append(horner(coefs[3],x[i]))

px = [px1,px2,px3,px4]
colors = ['b','g','r','y']
labs = ["c=1.","c=0.1", "c=0.01", "c=$10^{-12}$"]

for i in range(0,4):
    plt.plot(x,px[i],color=colors[i],label=labs[i])

plt.xlabel('x')
plt.ylabel('P(x)')
plt.grid()
plt.legend()
plt.show()
```



1.4.7 1.f) Courbe du PH en fonction de $-log_{10}c$

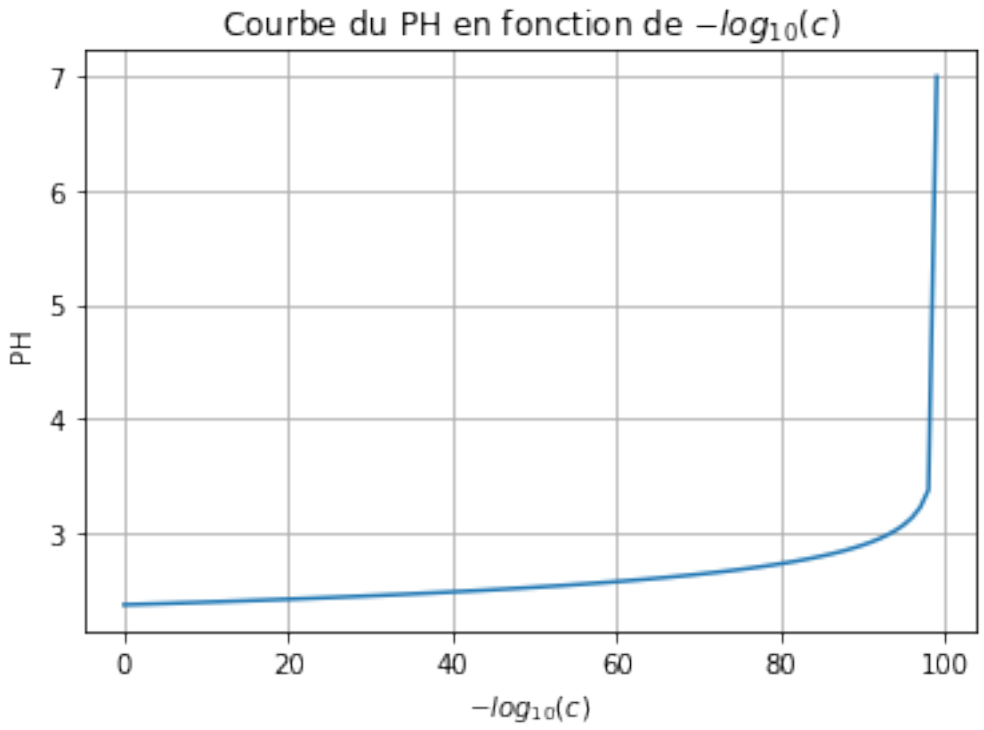
A partir de la suite $x_{n+1} = x_n + h\frac{f'(x_n)}{f(x_n)}$, on écris une routine qui, avec un pas constant h, détermine le point de la prochaine itération.

[9]:
```
def nextPoint(x0,fx0,fprim_x0,h=10**(-10)): # fonctionne dans notre cas à partir␣
 ↪de h = 10**(-3)
    xnext = x0+h*fprim_x0/fx0
    return xnext
```

[10]:
```
C = np.linspace(0,1, 100)
coef3 = [] # vecteur contenant le 3e coéfficient du polynôme pour les␣
 ↪différentes valeurs de C
for i in C:
    coef3.append((k_e+i*k_a))
    coef3

racines = []
n=len(coef3)-1
xnext = 1+1.0e-15 # on initialise par une valeur non nulle très proche de zero
for i in range(n,-1,-1):
    f = lambda x: x**3+k_a*x**2-coef3[i]*x-k_a*k_e
    fp = lambda x: 3*(x**2)-2*k_a*x-coef3[i]
    xnext = nextPoint(xnext,f(xnext),fp(xnext))
    res = brentq(f, 0, xnext)
    racines.append(res)
```

[11]:
```
x = [-log10(r) for r in racines]
plt.plot(x)
plt.title("Courbe du PH en fonction de $-log_{10}(c)$")
plt.xlabel("$-log_{10}(c)$")
plt.ylabel("PH")
plt.grid()
plt.show()
```



Explications:

On remarque que PH est une fonction croissante de $-log_{10}(c)$. Ce qui signifie que lorsque $-log_{10}(c)$ augmente(ie. c diminue), le PH augmente aussi.

Ce qui **n'est pas logique d'un point de vue chimique** puisque pour un acide, le PH décroit en fonction de sa concentration. En effet, plus la concentration en ions oxonium est faible, plus le pH augmente et plus la solution est basique. Inversement, plus la concentration en ions oxonium est importante, plus le pH diminue et plus la solution est acide.

1.4.8 1.g) Preuve des propriétés constatées graphiquement

- **Continuité**:

Nous avons montré à la question (a) que pour tout réel $c \in]0, c_1]$, la fonction $p(c, .)$ est Contractante sur $[0, x_1]$. Ainsi d'apres le théorème du point fixe sur $\mathbb{R}$, il existe une application $\gamma :]0, c_1] \longmapsto [0, x_1]$ telle que pour tout $c \in]0, c_1]$, $\gamma(c)$ soit l'unique point fixe de $p(c, .)$.

De plus, comme la fonction $c \longmapsto p(c, x)$ est continue pour tout $x \in [0, 1]$, on en déduit que la fonction γ est également continue .

- **Monotonie**:
- **Dérivabilité**:

1.4.9 Preuve que pH $\longrightarrow -log_{10}\sqrt{k_e} \approx 7$ lorsque $c \longrightarrow 0$

Lorsque $c \longrightarrow 0$, notre équation de départ devient $X^3 + k_a X^2 - k_e X + k_a k_e = 0$.

Posons $Q(X) = X^3 + k_a X^2 - k_e X + k_a k_e$, on remarque que $Q(-k_a) = 0$

Grace à cette racine, on obtient la forme factorisée suivante : $Q(X) = (X + k_a)(X^2 - k_e)$

Donc $Q(X) = 0 \iff X + k_a = 0$ ou $X^2 - k_e = 0 \iff X = -k_a$ ou $X = \pm\sqrt{k_e}$

Mais $X > 0$, on a donc $X = \sqrt{(}k_e)$

Ainsi,lorsque $c \longrightarrow 0$, on a $[H_3O^+] \longrightarrow \sqrt{(}k_e)$.

Et comme $pH = -log_{10}[H_3O^+]$

On en déduit que $pH \longrightarrow -log_{10}\sqrt{k_e}$ lorsque $c \longrightarrow 0$

1.5 Question 2: Adapdation de la méthode du point fixe

- **Montrons que la suite $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est de Cauchy:**

Soit $x_0 \in B$, comme B est stable par $\varphi(c,.)$ par défintiion de $\varphi(c,.)$, on peut poser $x_n = \varphi(c, x_{n-1})$ pour tout $n \in \mathbb{N}^*$

On a alors:

$\|x_{n+1} - x_n\| = \|\varphi(c, x_n) - \varphi(c, x_{n-1})\| \leqslant L \|x_n - x_{n-1}\|$

On obtient par récurrence sur n que

$\|\varphi(c, x_{n+1}) - \varphi(c, x_n)\| \leqslant L^n \|x_1 - x_0\|$

Ainsi, pour tout $n \in \mathbb{N}$ et $k \in \mathbb{N}^*$, on a :

$\|x_{n+k} - x_n)\| \leqslant \sum_{i=0}^{k-1} \|x_{n+i+1} - x_{n+i}\|$.

$\leqslant \sum_{i=0}^{k-1} L^{n+i} \|x_1 - x_0\|$

$\leqslant \|x_1 - x_0\| \sum_{i=0}^{k-1} L^{n+i}$

$\leqslant L^n \frac{1-L^k}{1-L} \|x_1 - x_0\|$

$\leqslant \frac{L^n}{1-L} \|x_1 - x_0\| \longrightarrow 0$ quand n $\longrightarrow +\infty$ car $0 < L < 1$

Ainsi la suite $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est de Cauchy.

- **Convergence:**

Comme $\mathbb{R}^n$ est complet, alors il existe $x^* \in \mathbb{R}$ tel que $x_n \longrightarrow x^*$.

De plus comme B est fermé, cette limite $x^* \in B$ et $\forall n \in \mathbb{N}$, on a $x_{n+1} = \varphi(c, x_n)$

Par ailleurs, en utilisant la continuité de $\varphi(c,.)$ et en passant à la limite, on a $x^* = lim_{n\longrightarrow+\infty} x_{n+1} = lim_{n\longrightarrow+\infty}\varphi(c, x_n) = \varphi(c, lim_{n\longrightarrow+\infty} x_n) = \varphi(c, x^*)$

- **Unicité:**

Soit $L \in]0,1[$ tel que:

$\forall c \in I, \forall x_1, x_2 \in B \, \|\varphi(c,x_1) - \varphi(c,x_2)\| \leqslant L \, \|x_1 - x_2\|$

Supposons que x et y sont deux points fixes de $\varphi(c,.)$, alors on a:

$\|x-y| = \|\varphi(c,x) - \varphi(c,y)| \leqslant L \, \|x-y|$ ce qui implique $\|x-y| \, (1-L) \leqslant 0$

Mais on a $1 - L > 0$ car $L \in]0,1[$

Donc $\|x-y| = 0$ et donc x=y. D'ou l'unicité de x^*

On peut ainsi définir la fonction $\gamma : I \longrightarrow B$

$c \longmapsto$ l'unique x^* tel que $x^* = \varphi(c, x^*)$

1.6 Question 3: Montrons que la fonction φ vérifie les hypothèses du théorème du point fixe

On sait que pour tout $c \in I$, la fonction $\varphi(c,.)$ est continue sur B

De plus, l'hypothèse (a) nous dit que $\partial_x \varphi(c,x)$ existe en tout point $c \in I$ et $x \in B$

Ces deux hypothèses montrent que pour tout $c \in I$ la fonction $\varphi(c,.)$ **est de classe C^1 sur B**

Sous ces hypothèses, le **Théorème des Accroissement Finis** nous assure que pour tout $x_1, x_2 \in B$:

$\|\varphi(c,x_1) - \varphi(c,x_2)\| \leqslant \|x_1 - x_2\| \sup_{x \in intB} \|\partial_x \varphi(c,x)\|$

$\leqslant \|x_1 - x_2\| \sup_{c \in I}(\sup_{x \in intB} \|\partial_x \varphi(c,x)\|)$

\$ $< \|x\_1 - x\_2\|$ \$Car $\sup_{c \in I}(\sup_{x \in intB} \|\partial_x \varphi(c,x)\|) < 1$

d'après l'hypothèse (b)

1.7 Question 4: Preuve du Théorème des fonctions implicites

Etape 1: Montrons que la fonction φ est différentiable dans un voisinage approprié de (c_0, x_0).

- **Montrons que la fonction $\gamma = \varphi(c,.)$ est Lipschitzienne**

Comme $\frac{\partial f}{\partial x}(c,.)$ est continue en c_0, alors $\frac{\partial \varphi}{\partial x}(c,.)$ l'est aussi.

Soit $q \in]0,1[$, on a ,par définition de la continuité de $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ au point c_0,qu'il existe $r > 0$ et $R > 0$ tel que:

$$\forall x \in B, \|c - c_0\| \leqslant r, \|x - c_0\| \leqslant R \implies \left\| \frac{\partial \varphi}{\partial x}(c,x) - \frac{\partial \varphi}{\partial x}(c_0,c_0) \right\| \leqslant q \qquad (i)$$

Par définition de la continuité de γ au point c_0,on a que:

Pour tout \$$\epsilon > 0$, \$$ilexiste\delta > 0$ tel que: $\|c - c_0\| \leqslant \delta \implies \|\gamma(c) - \gamma(c_0)\| = \|\varphi(c,c_0) - \varphi(c_0,c_0)\| \leqslant \epsilon$

En particulier pour $\epsilon = R(1-q)$, on a :$\|c - c_0\| \leqslant \delta \implies \|\gamma(c) - \gamma(c_0)\| = \|\varphi(c,c_0) - \varphi(c_0,c_0)\| \leqslant R(1-q)$

Posons $r_0 = min(r, \delta)$,on a:

$\|c - c_0\| \leqslant r_0, \|x - c_0\| \leqslant R \implies \|\gamma(x) - \gamma(c_0)\| \leqslant \|\varphi(c,x) - \varphi(c,c_0)\| + \|\varphi(c,c_0) - \varphi(c_0,c_0)\|$

$$\implies \quad \|\gamma(c) - \gamma(c_0)\| \quad \leqslant \quad q\,\|x - c_0\| \; + \; R(1 - q) \qquad \text{d'après } (i) \text{ et le TAF}$$

$$\implies \|\gamma(c) - \gamma(c_0)\| \leqslant qR + R(1-q) = R$$

Ainsi, $\|\gamma(c) - \gamma(c_0)\|_\infty = \sup\{\|\varphi(c,x) - \varphi(c_0,c_0)\|, \|x - c_0\| \leqslant r_0\}$

Et pour tout $x_1, x_2 \in B(c_0, R)$, on a:

$$\begin{aligned}\|\gamma(x_1) - \gamma(x_2)\|_\infty &= \sup\{\|\varphi(c,x_1) - \varphi(c,x_2)\|, \|x - c_0\| \leqslant r_0\} \\ &\leqslant q \sup\{\|x_1 - x_2\|, \|x - c_0\| \leqslant r_0\} \text{ d'après (i) et le TAF} \\ &\leqslant q\,\|x_1 - x_2\|_\infty\end{aligned}$$

Donc la fonction γ est Lipschitzienne.

La fonction γ est continue et dérivable pour tout $c \in B(c_0, R)$.Ce qui nous permet de dire que la fonction φ est **différentiable** pour tout $(c,x) \in B(c_0,r)$x$B(c_0,R)$

Etape 2: montrons que φ est lipschitzienne.

On a $\varphi(c,x) = x - (\partial_x f(c_0,c_0))^{-1}(\frac{\partial f}{\partial x}(c,x))$

Ainsi, pour tout $(c,x) \in B(c_0,r)$ x $B(c_0,R)$,$\frac{\partial \varphi}{\partial x}(c,x)$ existe et on a:

$\frac{\partial \varphi}{\partial x}(c,x) = I_2 - (\partial_x f(c_0,c_0))^{-1}(\frac{\partial f}{\partial x}(c,x))$ où $I_2 : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ est l'application identité.

Au point c_0, on a: $\frac{\partial \varphi}{\partial x}(c_0,c_0) = I_2 - (\partial_x f(c_0,c_0))^{-1}(\frac{\partial f}{\partial x}(c_0,c_0)) = 0$

Donc $\frac{\partial \varphi}{\partial x}(c_0,c_0) = 0$ et (i) devient:

$\forall x \in B\, \|c - c_0\| \leqslant r, \|x - c_0\| \leqslant R \implies \left\|\frac{\partial \varphi}{\partial x}(c,x)\right\| \leqslant q$

Ainsi d'après le Théorème des Accroissements Finis, on a:

$\forall x_1, x_2 \in B, \|c - c_0\| \leqslant r, \$\|x - c\_0\| \leqslant R \implies \|\varphi(c, x\_1) - \varphi(c, x\_2)\| \leqslant q\,\|x\_1 - x\_2\|\,\$$

Donc la fonction φ est Lipschitzienne.

On conclut que la fonction $\varphi(c,x)$ vérifie (3)

1.8 Question 5:Preuve d'existence d'un prolongement maximal par le Lemme de Zorn

Soit γ_0 uner appliication telle que $\forall c \in I_0, f(c, \gamma(c_0)) = 0$.

Soit $\gamma : I \longmapsto \mathbb{R}^N$ un prolongement de γ_0, on a:

(a) $I \supseteq I_0$
(b) $\forall c \in I_0, \gamma(c) = \gamma_0(c)$

Soit E l'ensemble des fonctions qui prolongent γ.

Munissons cet ensemble de la relation "$\subseteq$" de sorte que pour $f, g \in E, f \subseteq g$ sinigfie qu'il existe un intervalle dans lequel $f = g$

Alors $(E, \subseteq)$ ensemble inductif i.e pout tout $i \neq j$ il existe γ_i et γ_j dans E tels que $\gamma_i \subseteq \gamma_j$

Le lemme de Zorn nous assure que l'ensemble E ainsi définit admet un élément maximal.

1.9 Question 6:

Supposons qu'il existe deux extensions $\gamma_1 : I_1 \longmapsto \mathbb{R}^N$ et $\gamma_2 : I_2 \longmapsto \mathbb{R}^N$ de γ_0; avec $I_1, I_2 \subset [0,1]$

Supposons que $\gamma_1 \subseteq \gamma_2$

On a pour tout $(c,x) \in \Omega f(c,\gamma_1(c)) = 0$ et $f(c,\gamma_2(c)) = 0$

Par la règle de dérivation en chaine, on obtient:

$\frac{\partial f}{\partial c}(c,\gamma_1(c)) + \frac{\partial f}{\partial x}(c,\gamma_1(c)).\partial_c\gamma_1(c) = 0$

et $\frac{\partial f}{\partial c}(c,\gamma_2(c)) + \frac{\partial f}{\partial x}(c,\gamma_2(c)).\partial_c\gamma_2(c) = 0$

Equivaut à:

$\partial_c\gamma_1(c) = -(\frac{\partial f}{\partial x}(c,\gamma_1(c)))^{-1}(\frac{\partial f}{\partial c}(c,\gamma_1(c)))$

et $\partial_c\gamma_2(c) = -(\frac{\partial f}{\partial x}(c,\gamma_2(c)))^{-1}(\frac{\partial f}{\partial c}(c,\gamma_2(c)))$

(Preuve non terminée)

1.10 Question 7:

Sous les hypothèses du Théorème des Fonctions Implicites,

En effet la fonction $c \in I \longmapsto f(c,\gamma(c))$ étant différentiable comme composée de fonctions différentiables, la règle de dérivation par chaine(chain rule) assure qu'en tout point de Ω:

$\frac{\partial f}{\partial c}(c,\gamma(c)) + \frac{\partial f}{\partial x}(c,\gamma(c)).\partial_c\gamma(c) = 0 \iff \partial_c\gamma(c) = (\frac{\partial f}{\partial x}(c,\gamma(c)))^{-1}.\frac{\partial f}{\partial c}(c,c)$

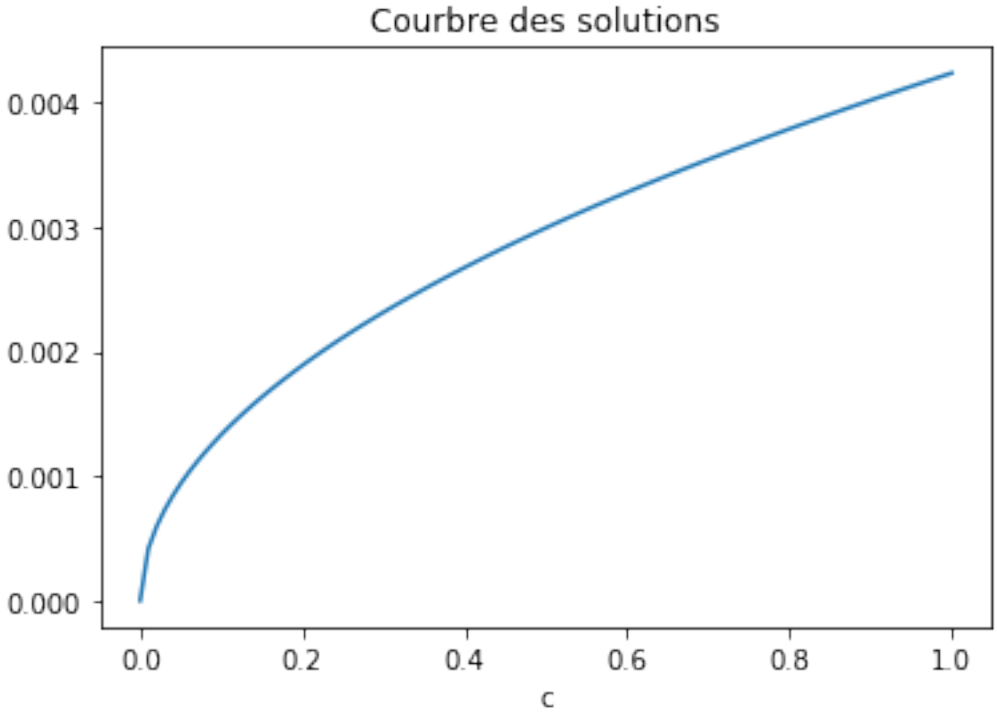
1.11 Question 8: Routine pour la Résolution de l'EDO

[13]:
```
f = lambda c,x: x**3+k_a*x**2-(c*k_a+k_e)*x-k_a*k_e  # Polynome P(c,x)
dfdc = lambda c,x: -k_a*x                            # dérivée partielle de P␣
 ↪par rapport à c
dfdx = lambda c,x: 3*x**2+2*k_a*x-(c*k_a+k_e)        # dérivée partielle de P␣
 ↪par rapport à x
```

[14]:
```
def Routine(x0 = 10**(-8)):
    def gama(c,x):      #définition de la fonction
        if dfdx(c,x)==0:    # Traitement du cas ou dfdx n'est pas inversible
            try:
                c = c - float(c)/dfdx(x)
            except ZeroDivisionError:
                print("Erreur! - dérivée nulle pour c = ", c)
        return -dfdc(c,x)/dfdx(c,x)
    points = np.linspace(0,1,100) # points d'évaluation
    sol = solve_ivp(fun=gama,t_span=[0, 1], y0=[x0],t_eval=points)
    return sol.y
```

[15]:
```
Routine();
```

[16]:
```
c = np.linspace(0,1,100) # points d'évaluation
gama = Routine().T        # transposée
plt.plot(c, gama)
plt.xlabel('c')
plt.title('Courbre des solutions')
plt.show()
```



1.12 Question 9: Influence des paramètres `rtol` et `atol` de `scipy.integrate:solve_ivp`

[18]:
```
f = lambda c,x: x**3+k_a*x**2-(c*k_a+k_e)*x-k_a*k_e
c = np.linspace(0,1,100)
x=f(c,gama)
x1 = f(1,gama)
norm_f = np.linalg.norm(x,ord=2)
norm_f_c1 = np.linalg.norm(x1,ord=2)
norm_f, norm_f_c1
```

[18]:
```
(1.9735368185305545e-06, 2.1857547068173576e-07)
```

1.13 Question 10:

[57]:
```
# Fonction pour determiner la matrice Jacobienne de h
def J(h, x, dx=1e-8):
    n = len(x)
    func = h((x))
    jac = np.zeros((n, n))
    for j in range(n):  # compteur sur les colonnes
        Dxj = (abs(x[j])*dx if x[j] != 0 else dx)
        x_plus = [(xi if k != j else xi + Dxj) for k, xi in enumerate(x)]
        jac[:, j] = (h(x_plus) - func)/Dxj
    return jac
```

[ ]:
```
def newton(h,x0, tol, max_iter):
    for n in range(0,max_iter):
        hx0 = h(x0)
        if abs(hx0) < tol:
            print("solution trouvée après {} itérations.".format(n))
            return x0
        Jhxn = # A revoir
        if Jhxn == 0:
            print("Jacobienne Singulière. Pas de solution")
            return None
        xn = xn - hxn/Jhxn
    print("Aucune solution trouvée après {} itérations".format(max_iter))
    return None
```

1.14 Question 11:

[ ]:
```
# non terminee
def Newton(h,(x0), tol, max_iter):
    Jh = # matrice Jacobienne
    Jhx0 = Jh(x0)
    xtild = Routine(x0)   # approximation à l'ordre 0
    for n in range(0,max_iter):
        x = xtild + hx0/Jh(xtild)
        Jhxn = Jh(x)# A revoir
        hx = h(x)
        norm_h = np.linalg.norm(hx, ord=2)
        if abs(norm_h) > tol:
            continue
    return x
```

1.14.1 Conclusion:

Il convient de rappeller que ce travail est proposé en vue d'une évaluation par mes encadreurs. Il est donc possible qu'il y ai quelques coquilles. Merci pour votre comprehension.

1.14.2 Reférences:

1. Cours Introduction to Numerical Analysis and Statistical Modeling BAB2 Umons par Christophe Troestler

2. Python Programming and Numerical Methods - A Guide for Engineers and Scientists by Qingkai Kong, Timmy Siauw, Alexandre Bayen (Authors)
3. Earl A. Coddington, Norman Levinson - Theory of ordinary differential equations-R.E. Krieger (1984)
4. Wikipedia Numerical differentiation et Numerical methods for ordinary differential equations

[ ]: