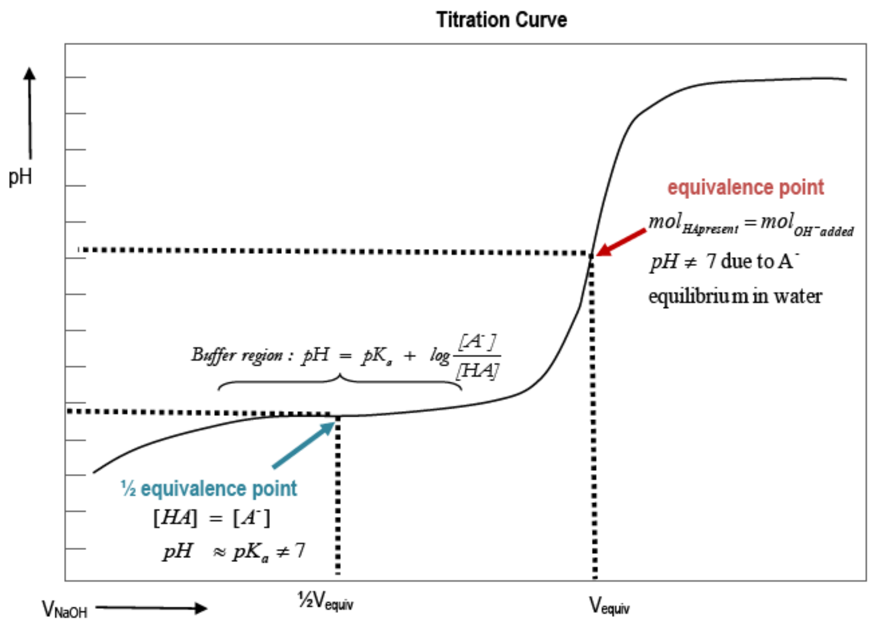
B2 – Mathématiques :

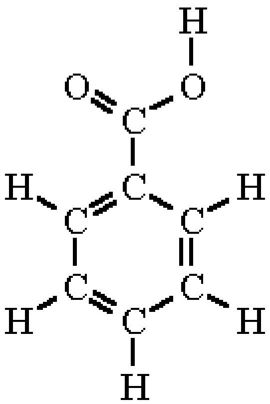
La dérivation

Amine ILMANE

109titration

Derivatives and Preservatives





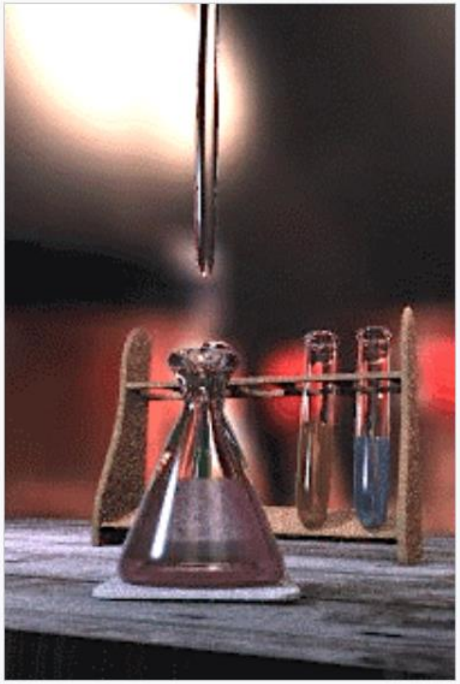
Projet 109 : titration

Titrage

La **titrimétrie** ou **titrage** est une technique de dosage utilisée en chimie analytique afin de déterminer la concentration d'une espèce chimique en solution (ou titre d'une solution).

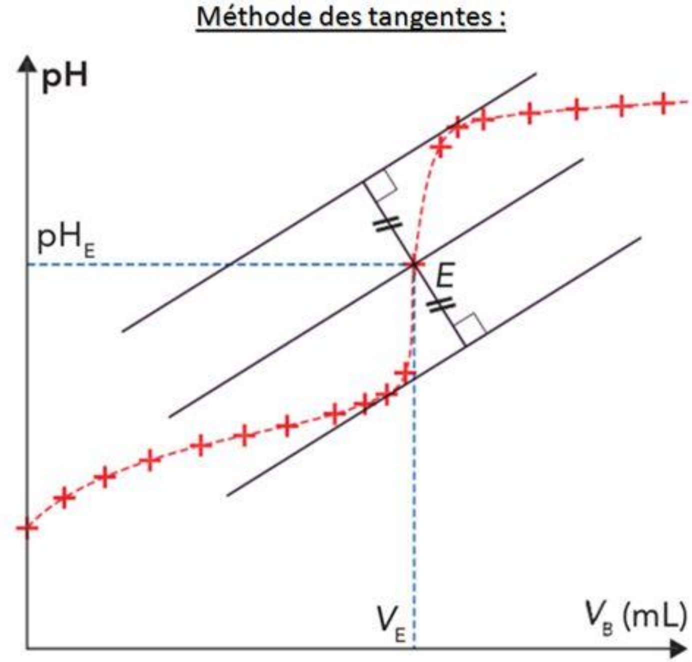
La méthode de titrage la plus utilisée est le titrage volumétrique. Elle consiste à utiliser une solution de concentration volumique connue (appelée titrant) afin de neutraliser une espèce contenue dans la solution inconnue (appelée analyte ou espèce titrée). Selon la quantité mesurée du réactif titrant, il existe deux autres types de titrage[1] :

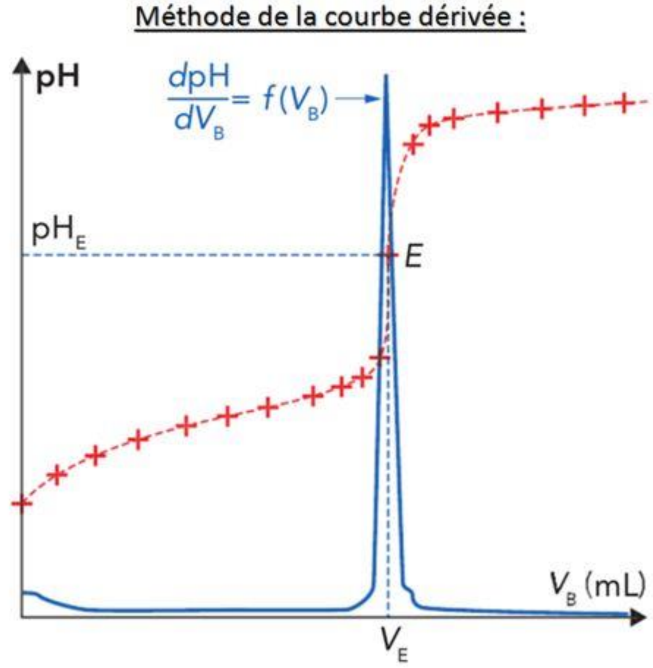
- le titrage gravimétrique : ce titrage diffère du titrage volumétrique en ce que la quantité de solution ajoutée pour compléter la réaction est mesurée en masse plutôt qu'en volume ;
- le titrage coulométrique : Comparé aux deux autres techniques, lors de ce titrage, le réactif titrant est généré par voie électrolytique plutôt que d'être ajouté comme solution standard[2].



Montage d'un titrage.

Projet 109 : titration





1.2.2. Titrage d'un acide faible par une base forte

L'équation de la réaction support du titrage est :

$$AH_{(aq)} + HO^{-}_{(aq)} \longrightarrow A^{-}_{(aq)} + H_2O_{(\ell)}$$

Projet 109 : titration

Terminal

```
~/B-MAT-200> ./109titration -h
USAGE
    ./109titration file

DESCRIPTION
    file     a csv file containing "vol;ph" lines
```

Terminal

```
~/B-MAT-200> cat values.csv
1;2
2;3
3;4
5;4.4
6;4.6
7;6
7.5;6.8
8;8
9;10
12;11.3
14;11.46
16;11.6
20;11.8
```

Projet 109 : titration

Terminal

```
~/B-MAT-200> ./109titration values.csv
Derivative:
2.0 ml -> 1.00
3.0 ml -> 0.73
5.0 ml -> 0.20
6.0 ml -> 0.80
7.0 ml -> 1.53
7.5 ml -> 2.00
8.0 ml -> 2.27
9.0 ml -> 1.61
12.0 ml -> 0.22
14.0 ml -> 0.07
16.0 ml -> 0.06

Equivalence point at 8.0 ml

Second derivative:
3.0 ml -> -0.27
5.0 ml -> 0.31
6.0 ml -> 0.67
7.0 ml -> 0.87
7.5 ml -> 0.73
8.0 ml -> 0.14
9.0 ml -> -0.61
12.0 ml -> -0.23
14.0 ml -> -0.04

Second derivative estimated:
7.5 ml -> 0.73
7.6 ml -> 0.61
7.7 ml -> 0.49
7.8 ml -> 0.38
7.9 ml -> 0.26
8.0 ml -> 0.14
8.1 ml -> 0.06
8.2 ml -> -0.01
8.3 ml -> -0.09
8.4 ml -> -0.16
8.5 ml -> -0.24
8.6 ml -> -0.31
8.7 ml -> -0.39
8.8 ml -> -0.46
8.9 ml -> -0.53
9.0 ml -> -0.61

Equivalence point at 8.2 ml
```

1. the derivative values for each given volume

Maximum de la dérivée

2. the closest point from the equivalent point amongst those given points

3. the second derivative values for each given volume,

4. an approximation of the second derivative values every 0.1 ml around the above closest point fromthe equivalent point,

$$y = a_1 x + b_1$$

Comment déterminer **a** et **b** en utilisant 2 points ?

$$y = a_2 x + b_2$$

Changement de signe

5. the proper equivalent point, estimated from the second derivative

Projet 109 : titration

i	x = volume	pH(v)	f’	f’’

- Penser à utiliser **les matrices ou tableaux.**
- plusieurs façons de calculer f’ .
- Le point le plus proche du point d’équivalence (max de f’).
- Créer un vecteur (tableau 1D) ou sera stockée la dérivée seconde (avec un pas de 0,1ml).
- Le point d’équivalence estimé avec la seconde dérivée : extremum de la dérivée.
- On peut trouver les zéros d’une fonction en détectant les changements de signe.
- Attention il peut y avoir plusieurs points d’équivalence.

Projet 109 : titration

i	x = volume	pH(v)	f’	f’’

To approximate the derivative, the centered rate is defined in the course as the mean of the forward and backward rates. Since abscissas are not equidistant here, coefficients must be cleverly put in front of the rates when computing the mean.
Beware, the coefficients must have a sum of 1!

Définitions (rappels)

Domaine de définition

Le domaine de définition D_f est l'ensemble pour lequel la fonction peut s'appliquer (ensemble de départ). **Il est un des points essentiels** dans la définition d'une fonction. En informatique il correspond aux entrées.

Pour une fonction numérique les domaines de définition sont :

- l'ensemble $\mathbb{R}$;
- un intervalle **[a , b] , [a , b [** ou **] a , b [** de $\mathbb{R}$;
- Union d'intervalles **[a , b] U [c , d] U …** de $\mathbb{R}$;
- l'ensemble $\mathbb{R}$ privé d'un point **[-∞, a [U] a , +∞]** ;

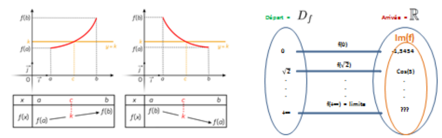
Exemples :

- **1 / x : x ∈** D_f **=]-∞ , 0 [U] 0, +∞[**
- **1 / (x² – 1) : x ∈** D_f **=]-∞ , -1 [U] -1 , +1 [U] +1 , +∞[**
- **√x : x ∈** D_f **= [0 , +∞[**

Image d'une fonction

L'**Image d'une fonction**, **Im(f),** est l'ensemble des valeurs que prendra la fonction **f.** Elle peut être l'ensemble des réels ou une partie.

- On peut le voir comme **Im(f) = f(** D_f **)** ;
- On ne calcule la valeur de **f** pour tous les **x** (impossible) on utilise pour cela la **notion de continuité** ;
- **La continuité d'une fonction** permet de calculer l'image d'un intervalle entier d'un coup ;
- Les points pour lesquels la fonction n'est pas définie sont appelés **singularités** ;
- Calculer l'ensemble image revient souvent à **calculer des limites** (singularités) ;



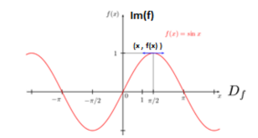
Produit cartésien et graphe d'une fonction

Le **produit cartésien** de deux ensemble **A** et **B**, noté par **A** x **B**, désigne l'ensemble des couple (**a**, **b**).

Et le produit cartésien de **p** ensembles, noté $E_1 \times \ldots \times E_p$, désigne **l'ensemble des p-uplet** $(e_1, \ldots, e_p)$.

Le graphe d'une fonction est l'ensemble des couples **(x , f(x))** formés à partir du produit cartésien de D_f **x Im(f)**

$$G(f) = \{(x, f(x)) \quad | \quad x \text{ appartient à } D_f\}$$



La limite : infiniment grand

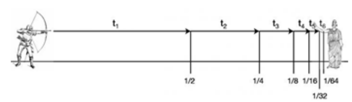
La notion de l'infiniment grand peut se comprendre aisément en déroulant cette algorithme :

```
 a = positive number
do while( a > PreviousVal )
    PreviousVal = a
    a = 10 * a
    print a
end do
```

- Tant qu'il y a de mémoire l'algorithme nous donnera un nombre de plus en grand.
- Plus la mémoire est grande, très grande, très très grande, … les nombres affichées sont grand, très grand, très très grand, …

et ça ne s'arrête jamais … Bienvenue chez l'infiniment grand

La limite : infiniment petit



L'idée de Zénon était **de diviser** l'espace en **une infinité** de tout **petit morceaux.**

La notion de l'infiniment petit peut se comprendre aisément en réutilisant l'algorithme précédent :

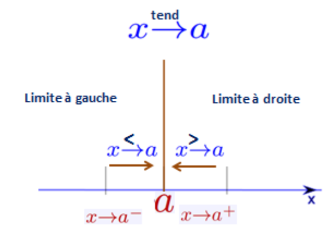
À Chaque fois que l'on calcule un très grand nombre on calculera son inverse !

Conclusion :

- plus le nombre est grand plus son inverse est petit ;
- l'inverse d'un nombre infiniment grand est l'infiniment petit.

La limite à gauche et à droite

tendre vers = aller vers



Propriétés des limites : la somme

- Soit **f** et **g** deux fonctions définie sur un domaine D_f de $\mathbb{R}$.
- Soit l_1 et l_2 les limites resp. de **f** et **g** .

$\lim_{x\to a} f(x)$	$\lim_{x\to a} g(x)$	$\lim_{x\to a}(f(x)+g(x))$
l_1	l_2	$l_1 + l_2$
l_1	∞	∞
$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$
$-\infty$	$-\infty$	$-\infty$
$+\infty$	$-\infty$	**Forme indéterminée**

Propriétés des limites : le rapport

- Soit **f** et **g** deux fonctions définie sur un domaine D_f de $\mathbb{R}$.
- Soit l_1 et l_2 les limites resp. de **f** et **g** .

$\lim_{x\to a} f(x)$	$\lim_{x\to a} g(x)$	$\lim_{x\to a}\frac{f(x)}{g(x)}$
l_1	$l_2 (\neq 0)$	$\frac{l_1}{l_2}$
l_1	∞	0
l_1	0	∞
0	∞	0
∞	0	∞
∞	∞	**Forme indéterminée**
0	0	**Forme indéterminée**

Propriétés des limites : le produit

- Soit **f** et **g** deux fonctions définie sur un domaine D_f de $\mathbb{R}$.
- Soit l_1 et l_2 les limites resp. de **f** et **g** .

$\lim_{x\to a} f(x)$	$\lim_{x\to a} g(x)$	$\lim_{x\to a} f(x)g(x)$
l_1	l_2	$l_1 l_2$
l_1	∞	∞
∞	∞	∞
0	0	0
0	∞	**Forme indéterminée**

Analyse : une discipline des mathématiques

L'**analyse** est une branche des **mathématique**s chargée ‘’de la formulation rigoureuse du **calcul infinitésimal** ’’.

Nous disposons maintenant des **outils de calcul infinitésimal** suivants :

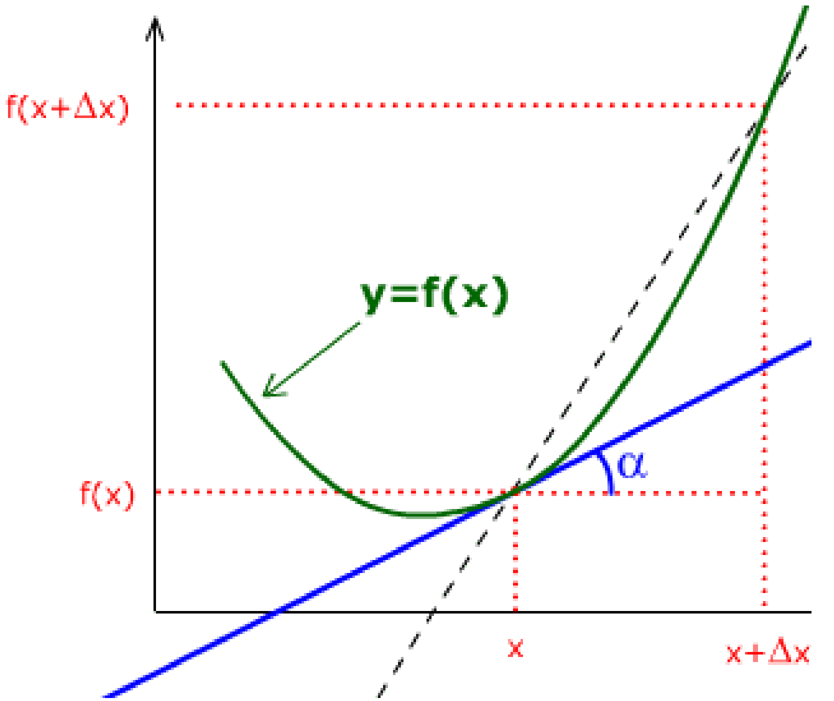
- domaine de définition ;
- l'infiniment grand est noté ∞ (asymptote, divergence) ;
- l'infiniment petit est noté $\boldsymbol{\xi}$ (la loupe) ;
- La convergence (diviser quelque chose en un infinité de petit morceaux) ;
- la limite ;
- la continuité ;
- **la dérivation**
- Et bientôt, et l'intégration …

Le taux d'accroissement

Ce que l'on voudrait faire à présent, c'est étudier comment les valeurs de la fonction change lorsqu' la valeur de l'entrée change.

Je vous propose de le faire de façon méthodique :

1. On commence par une valeur $x_1 = x$
2. On l'augmente d'une quantité Δx. On obtient ainsi une deuxième valeur $x_2 = x + \Delta x$.
3. Puis, on regarde comment les valeurs de la fonction varie $y_1 = f(x_1)$ et $y_2 = f(x_2)$.

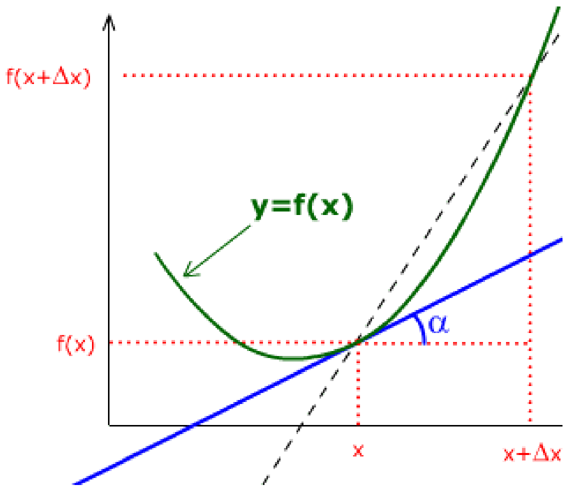


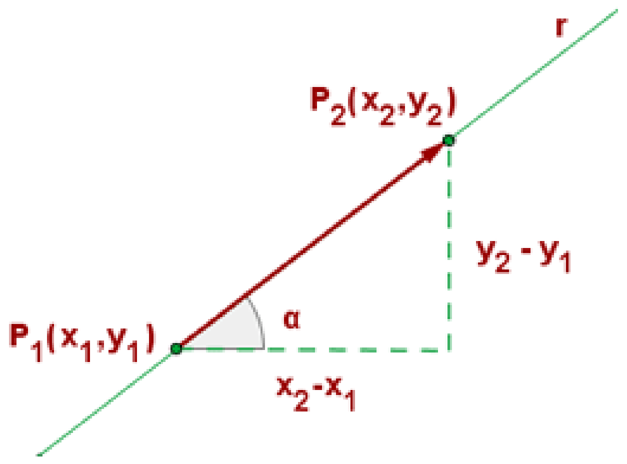
Le taux d'accroissement

Ce que l'on peut faire maintenant c'est comparer la différence $x_2 - x_1$ à $f(x_2) - f(x_1)$:

Taux d'accroissement $= \frac{Y_2 - Y_1}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = tg(\alpha)$

- Permet de définir la dérive numérique : $f'_{i+1} = \frac{Y_{i+1} - Y_i}{x_{i+1} - x_i}$





Extremum d’une fonction

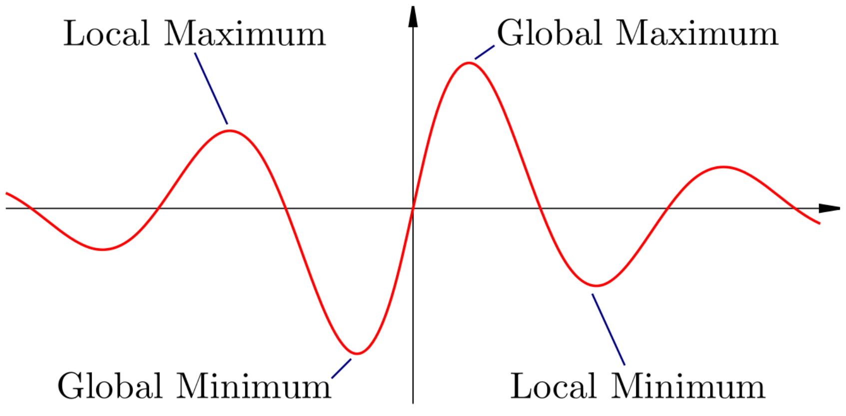
Dans un ensemble ordonné on peut introduire la notion d’extremum (maximum ou minimum) :

- **Maximum :** le plus grand élément de l’ensemble
- **Minimum :** le plus petit élément de l’ensemble

On peut faire de même pour une fonction numérique car l’ensemble des réels est ordonné. On définit :

- **Extremum Global :** le max ou le min de toutes les valeurs de f lorsque x varie sur tout l’ensemble de définition de f. Il n’existe pas si l’ensemble image à une borne infini.

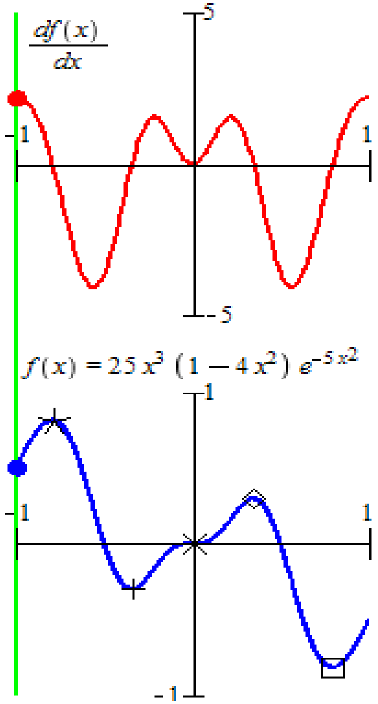
- **Extremum local :** et la max ou le min de f lorsque x ne varie que dans une partie de l’ensemble de définition



Extremum d’une fonction

La recherche des extrema constitue une discipline que l’on appelle **optimisation.**

L’outils principale utilisé dans la recherche d’extremas et la dérivation. Car **les points ou la dérivée s’annule correspondent à un extrema de la fonction.**



Dérivées successives

On appelle la dérivée seconde, **$f''(x)$**, la limite du taux d'accroissement de la dérivée première :

$$f''(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f'(x + \Delta x) - f'(x)}{\Delta x}$$

On définit la dérivée **n^{ième}** , **$f^{(n)}(x)$**, comme la limite de la dérivée **(n - 1)**

$$f^{(n)}(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f^{(n-1)}(x + \Delta x) - f^{(n-1)}(x)}{\Delta x}$$

Les dérivées d'ordre supérieur à 1 ont beaucoup d'applications : équations différentielles, approximation de fonction, optimisation,…

Dérivées successives

Que nous dit la dérivée seconde ?

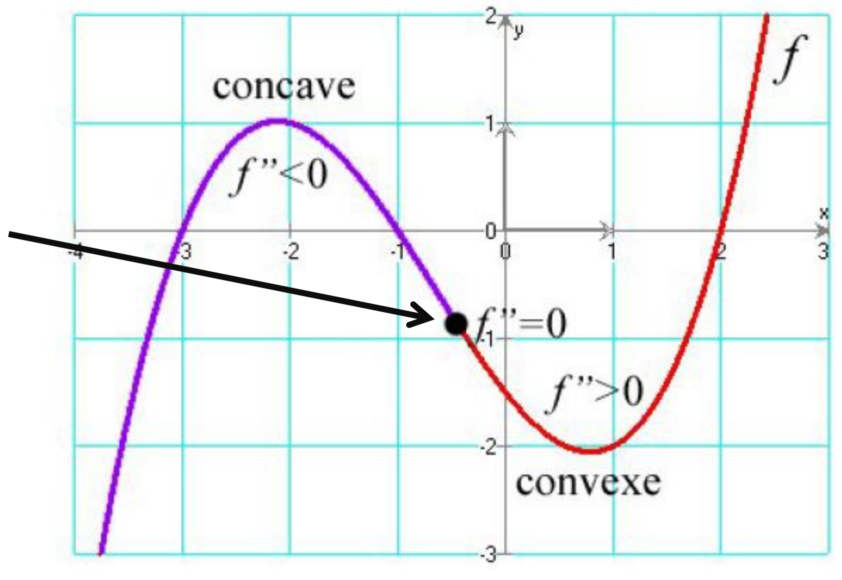
Puisque f'' est la dérivée de f' :

Si $f'' > 0$ sur un intervalle, alors f' est **croissante** sur cet intervalle.

Si $f'' < 0$ sur un intervalle, alors f' est **décroissante** sur cet intervalle.

Lorsque f' est croissante, la courbe f se redresse : elle est **convexe**.
Lorsque f' est décroissante, la courbe f s'infléchit vers le bas : elle est **concave**.

Changement de signe



La dérivation numérique

$$\textit{Taux avant :} \quad T_1(c) = \frac{f(c+h)-f(c)}{h}$$

Erreur d'ordre o(h)

$$\textit{Taux arrière :} \quad T_2(c) = \frac{f(c)-f(c-h)}{h}$$

$$\textit{Taux centré :} \quad T_3(c) = \frac{f(c+h/2)-f(c-h/2)}{h}$$

Erreur d'ordre o(h^2) donc plus précise

Une autre formule pour la dérivée seconde existe cherchez la sur internet

$f(x) = x^2$ $f'(x) = 2x$ $f''(x) = 2$

i	x	$Y = f(x) = x^2$	$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$	$y'_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$	$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}$	$f'(x) = 2x$	$f''_i = \frac{y'_{i+1} - y'_i}{x_{i+1} - x_i}$
1	0	0	1	-	-	0	2
2	1	1	3	1	2	2	2
3	2	4	5	3	4	4	2
4	3	9	7	5	6	6	-
5	4	16	-	7	-	8	-

Il est impossible de calculer la dérivée au points extrêmes d'une intervalle **[a , b]**. Pour cela le domaine de définition de la dérivée est toujours un intervalle ouvert **]a , b[**

La dérivation numérique

- Afin d'améliorer la précision au delà de **o(h²),** on définit une nouvelle dérivée qui est la moyenne pondérée entre le taux avant et le taux arrière (précision **o(h³)**):

$$\frac{a_1 T_{avant} + a_2 T_{arrière}}{a_1 + a_2}$$

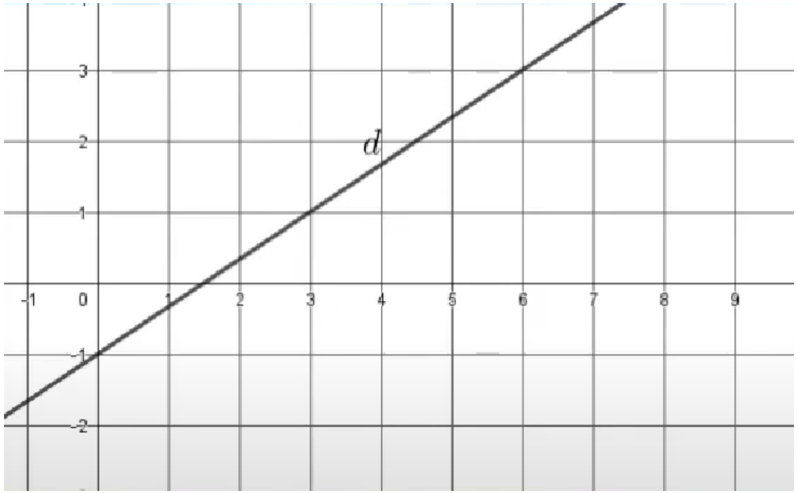
N.B.
Cette moyenne ne peut être calculée pour tout les point à cause de l'incrémentation de des taux avant et arrière (voir diapo précédente)

- Un bon choix des coefficients a_1 et a_2 qui prend en compte le fait que le pas, ''step'', sur le volume n'est pas régulier est

$$a_1 = h_2 \quad \text{et} \quad a_2 = h_1$$

avec h_1 et h_2 les longueurs des intervalles (i.e. le pas entre les points **x**), resp. de la dérivée avant et la dérivée arrière

Equation de la droite



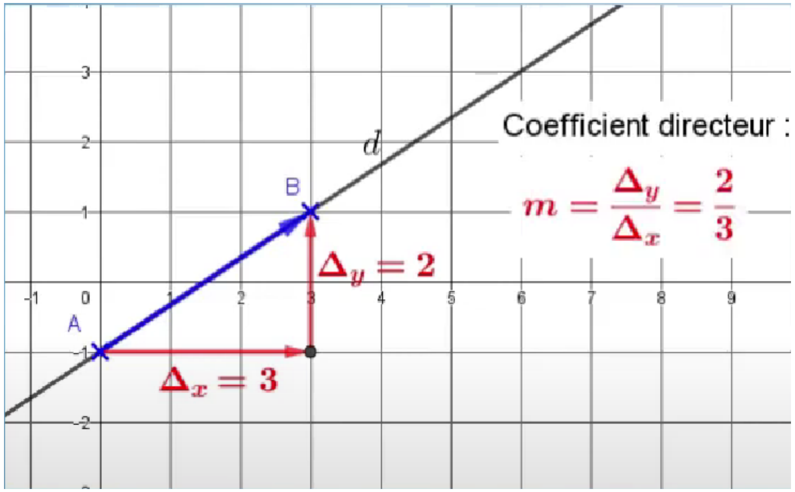
$$y = m \times x + p$$

Coefficient directeur

$$m = \frac{y_B - y_A}{x_B - x_A} = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

Ordonnée à l'origine

Equation de la droite



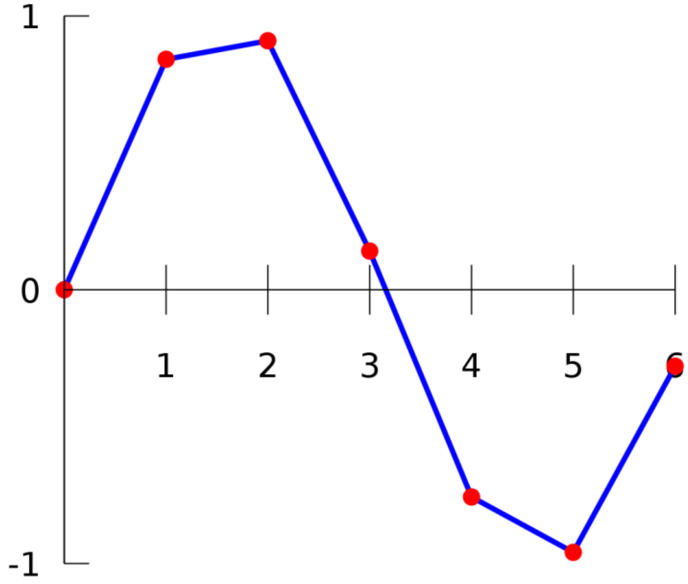
$$y = \frac{2}{3} \times x - 1$$

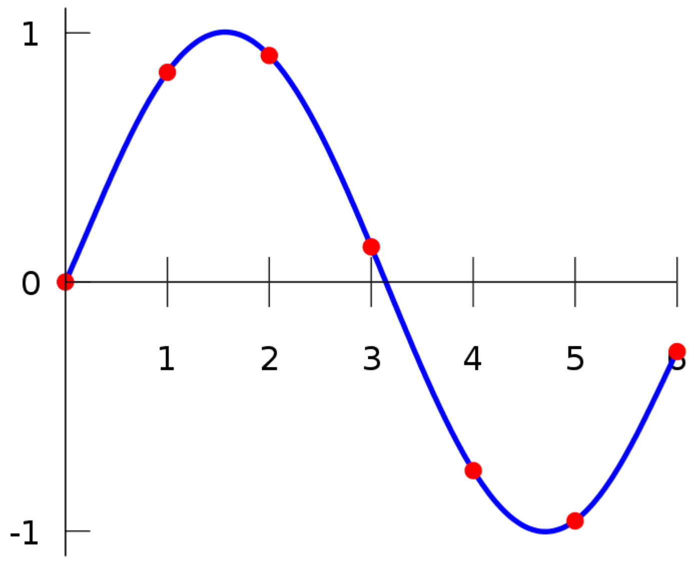
Coefficient directeur

Ordonnée à l'origine

$$m = \frac{y_B - y_A}{x_B - x_A} = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

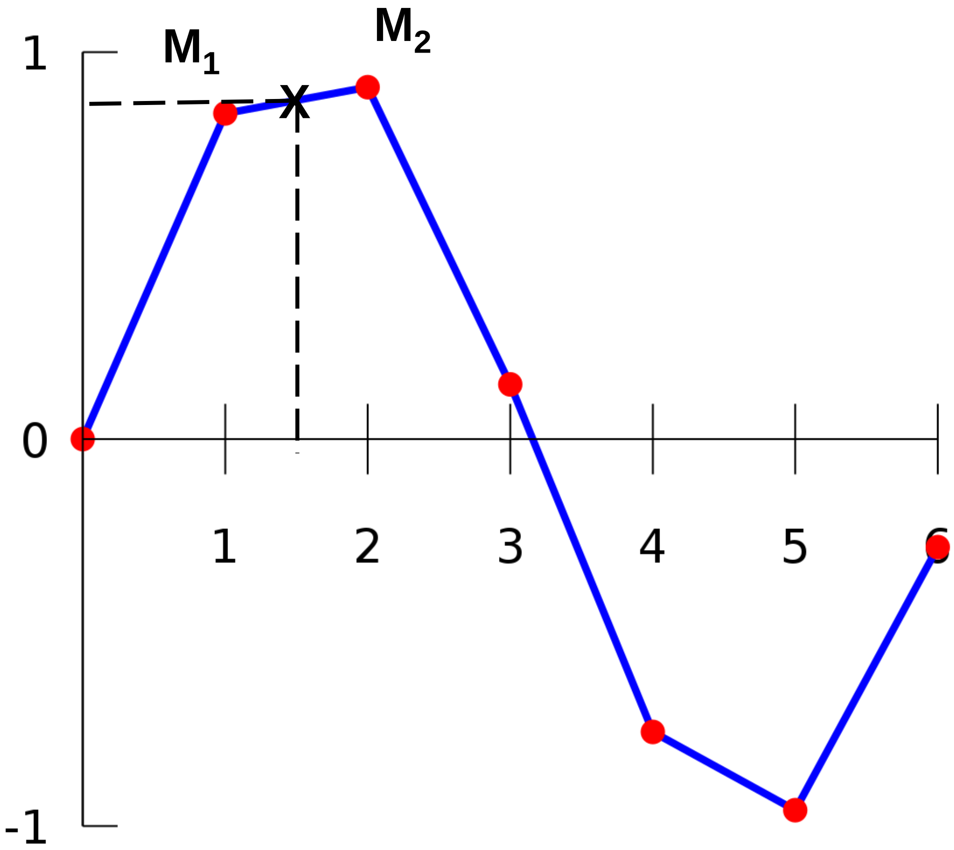
Interpolation linéaire





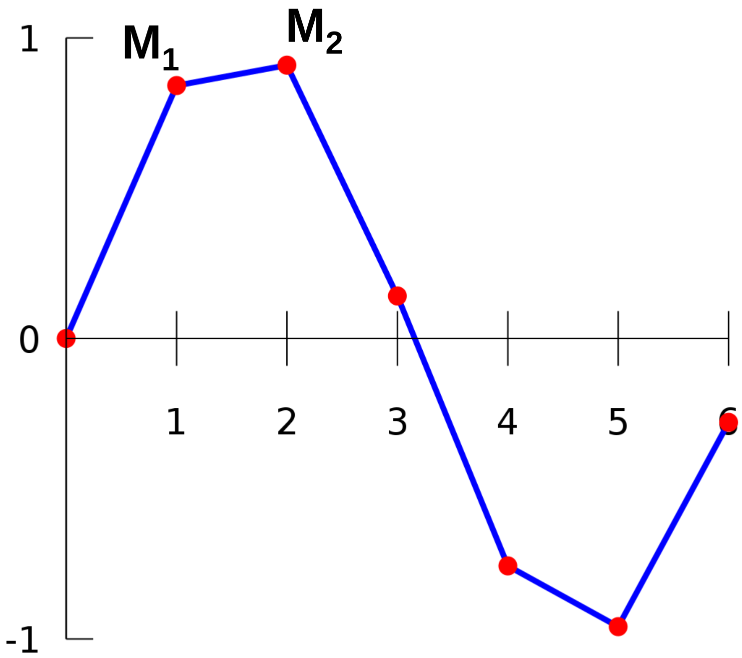
- Les points de contrôle (en rouge) sont reliés par des droites
- L’équation est déterminée par la méthode présentée précédemment

Interpolation linéaire



$$y_i = y_1 + (y_2 - y_1) \cdot \frac{(x_i - x_1)}{(x_2 - x_1)}$$

Exercice



Déterminer les valeurs de y pour les points
X = 0,5 et X = 4,5

$$y_i = y_1 + (y_2 - y_1) \cdot \frac{(x_i - x_1)}{(x_2 - x_1)}$$