

Résolution d'une équation : méthode par dichotomie

Objectif : résoudre une équation du type $f(x) = 0$.

Sur Capytale : notebook numéro 5fd8-1379950.

Certaines équations ne sont pas solubles à la main, et il faut alors recourir à une résolution numérique. Il existe plusieurs méthodes, dont les deux suivantes :

- La méthode de Newton (vue en SII).
- La méthode par dichotomie (que l'on voit ici).

a/ Description de la méthode

Soit l'équation $f(x) = 0$, avec f une fonction continue qui s'annule une fois sur l'intervalle $[a,b]$. La méthode dichotomique permet de trouver une solution approchée de cette équation.

Prenons l'exemple de la fonction $f(x) = x^2 - 2$. On cherche à résoudre $f(x) = 0$ sur l'intervalle $[0,2]$. On sait que la solution est $x = \sqrt{2} \approx 1,414213562\dots$, et on va essayer de retrouver ceci avec l'algorithme de dichotomie.

Préliminaire : tester si deux réels sont de signes opposés

Soit y et z deux réels non nuls. Propriétés :

- ▶ y et z sont de même signe (tous deux positifs ou tous deux négatifs) si et seulement si $y \times z > 0$.
- ▶ y et z sont de signes opposés (l'un positif, l'autre négatif) si et seulement si $y \times z < 0$.

Exemple : la fonction f étant continue et ne s'annulant qu'une seule fois entre a et b , on a nécessairement $f(a)$ et $f(b)$ de signes opposés.

Ceci se traduit par $f(a) \times f(b) < 0$.

Idée générale de l'algorithme de dichotomie

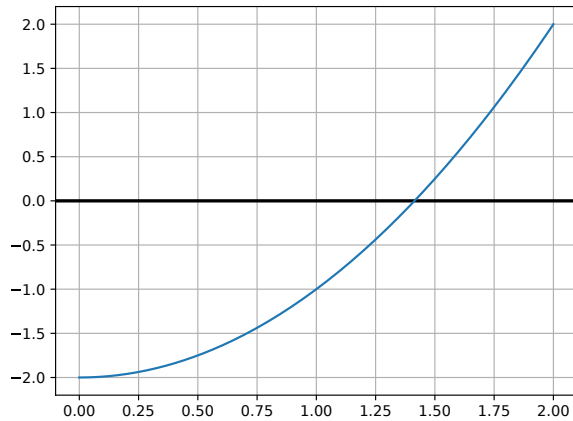
Le principe est de considérer $m = \frac{a+b}{2}$ le milieu de l'intervalle $[a,b]$, et de déterminer si le zéro recherché est entre a et m ou entre m et b .

On poursuit alors la recherche soit dans l'intervalle $[a,m]$, soit dans l'intervalle $[m,b]$, avec la même méthode.

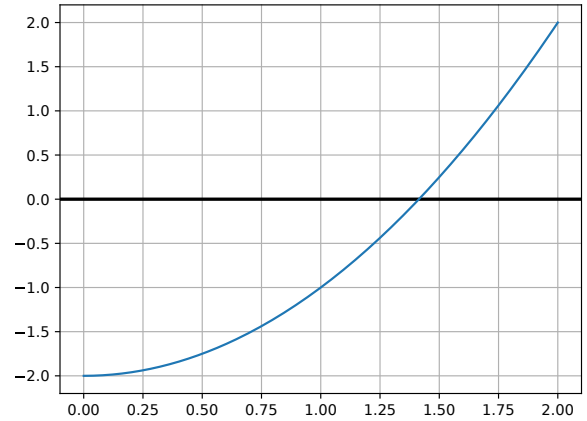
On s'arrête quand on a assez réduit l'intervalle de recherche.

Exemple des trois premières itérations sur les trois schémas à compléter ci-dessous :

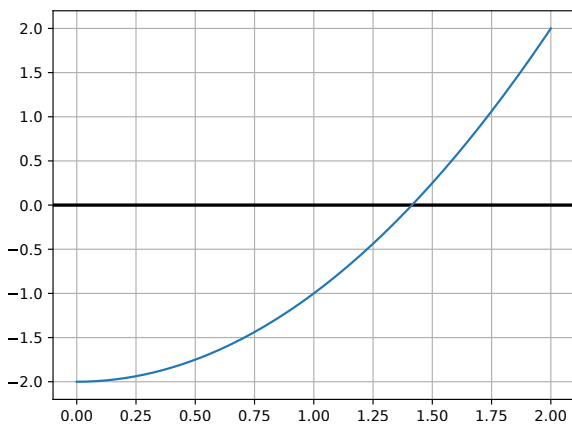
Itération 1,
recherche entre $a=0$ et $b=2$:



Itération 2,
recherche entre ...



Itération 3,
recherche entre ...



Détail de l'algorithme

On se donne des valeurs pour a et b , ainsi qu'une valeur pour la précision ε .

Tant que $|a - b| > \varepsilon$, on réalise la boucle suivante :

On pose $m = \frac{a + b}{2}$.

- Si $f(a) \times f(m) < 0$, c'est que le zéro de f est entre a et m : il faut chercher entre a et m .

Le nouvel intervalle est donc entre $a = a$ et $b = m$.

- Dans le cas contraire, c'est que le zéro de f est entre m et b : il faut chercher entre m et b .

Le nouvel intervalle est donc entre $a = m$ et $b = b$.

Puis on recommence.

Lorsqu'on sort de la boucle, le zéro est donné par la valeur de m , à ε près.

1 - Compléter le code ci-dessous pour obtenir l'algorithme complet.

Puis le compléter sur Capytale (5fd8-1379950) et tester : quelle valeur obtenez-vous pour la solution de $f(x) = 0$? Est-ce bien cohérent ?

```
def f(x):
    return x**2-2

epsilon = 1e-6
a = 0
b = 2

while abs(b-a) > epsilon:
    m = (a+b)/2
    if                                     # si f(a) et f(m) n'ont pas le même signe
        a=                                 # alors c'est que le 0 de f se trouve entre a et m
        b=
    else:
        a=                                 # sinon, c'est que le 0 de f est entre m et b
        b=

print(m)
```

Retour sur la signification de ε : prenons par exemple $\varepsilon = 10^{-6}$. L'algorithme s'arrête donc lorsque $b - a < 10^{-6}$. Comme on sait par construction que le 0 de f est toujours dans $[a, b]$, ceci signifie que $m = (a + b)/2$ est proche de ce 0 à moins de 10^{-6} près.

Remarque : il existe d'autres critères de terminaison, par exemple arrêter lorsque l'algorithme trouve un x tel que $|f(x)| < \varepsilon$.

2 - Modifier l'algorithme pour qu'il affiche le nombre d'itérations qui ont été nécessaires.

b/ Un exemple concret

Dans le DM du chapitre 2 de chimie, on s'intéresse à la réaction chimique suivante :



Dans la question 3 du DM, on cherche à déterminer la valeur de l'avancement à l'équilibre de cette réaction. On introduit une quantité de matière n_0 du réactif, et on pose $\alpha = \xi/n_0$. La question 3 doit mener à écrire qu'à l'équilibre, on a $K^\circ = Q_r(\xi_{\text{éq}})$. Ceci se traduit par :

$$K^\circ = \frac{\left(\frac{3\alpha_{\text{éq}}}{1 + 2\alpha_{\text{éq}}}\right)^3}{\frac{1 - \alpha_{\text{éq}}}{1 + 2\alpha_{\text{éq}}} p \times p^{\circ 2}}, \quad \text{soit} \quad \boxed{K^\circ = \frac{27\alpha_{\text{éq}}^3}{(1 + 2\alpha_{\text{éq}})^2(1 - \alpha_{\text{éq}})} \frac{p^2}{p^{\circ 2}}}.$$

C'est l'équation encadrée qu'il faut résoudre pour obtenir la valeur de $\alpha_{\text{éq}}$. On prend comme dans le DM : $p = 1$ bar et $K^\circ = 10$. On pose $x = \alpha_{\text{éq}}$ pour avoir les mêmes notations que précédemment.

On rappelle que $x > 0$ (car $x = \alpha = \xi/n_0 > 0$) et $x \leq 1$ (car l'avancement ξ ne peut pas dépasser $\xi_{\text{max}} = n_0$, donc $x = \alpha = \xi/n_0 \leq 1$).

3 - Reformuler l'équation encadrée à résoudre en une équation $f(x) = 0$ (donner l'expression de f en fonction de x , K° , p et p°).

4 - La première étape est toujours de s'assurer visuellement que la fonction f a un unique zéro dans l'intervalle de recherche. Ceci permet d'ailleurs de choisir cet intervalle de recherche.

Écrire les lignes nécessaires pour tracer la fonction f entre 0 et 0,99 (elle n'est pas définie en $x = 1$). Il faudra créer un tableau de valeurs de x à l'aide de :

```
x = np.linspace(0,0.99,200) # crée un tableau de valeurs de x, compris entre 0 et 0.99
```

Puis utiliser `plt.plot(x,f(x))`.

5 - Utiliser votre algorithme de dichotomie pour trouver la solution. Vérifier si ceci correspond bien à la valeur de 0,80 donnée dans le DM.

c/ Fonction bisect

Enfin, la fonction `bisect` de la bibliothèque `scipy.optimize` permet de trouver directement le zéro d'une fonction. Elle utilise une méthode de type dichotomie. On l'utilise ainsi :

```
import scipy.optimize as sp
x = sp.bisect(f,a,b)
print(x)
```

`a` et `b` sont les limites de l'intervalle de recherche, et `f` la fonction pour laquelle on résout $f(x) = 0$.

6 - Utiliser cette fonction pour trouver la valeur de $\alpha_{\text{éq}}$. Comparer avec votre résultat précédent.