Méthodes numériques

# 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 soluble 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 (vue ici).

## a/ Description de la méthode

**Hypothèses**

Soit l'équation $f(x) = 0$, avec $f$ une fonction continue qui change de signe 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 $x = \sqrt{2} \approx 1{,}414213562...$, 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. $\Rightarrow$ Ceci se traduit par $\boxed{f(a) \times f(b) < 0.}$

**Idée générale de l'algorithme de dichotomie**

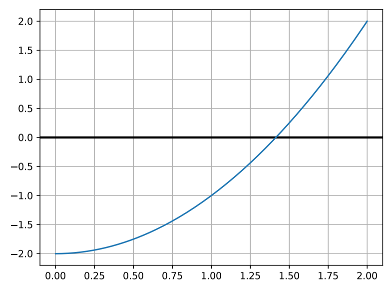
Le principe est de considérer $m = \frac{a+b}{2}$ le milieu de l'intervalle $[a,b]$, et de déterminer si le zéro recherché est entre $a$ et $m$ ou entre $m$ et $b$.

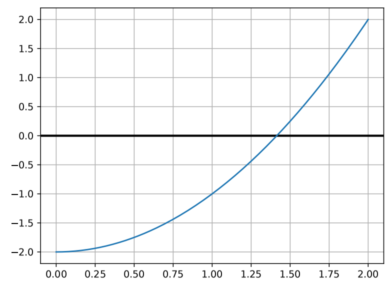
On poursuit alors la recherche soit dans l'intervalle $[a,m]$, soit dans l'intervalle $[m,b]$, avec la même méthode.

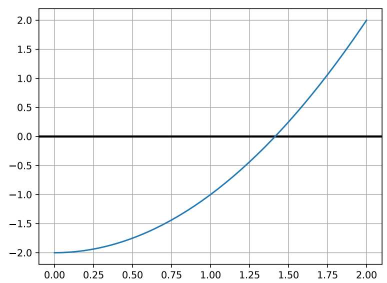
On s'arrête quand on a assez réduit l'intervalle de recherche.



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




**Détail de l'algorithme**

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

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

> On pose $m = \dfrac{a+b}{2}$.
>
> - 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 $\varepsilon$ 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 $\varepsilon$ :** 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 :

$$CH_3SiCl_{3(g)} = SiC_{(s)} + 3\,HCl_{(g)}\,.$$

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 $K^\circ = Q_r(\xi_{éq})$. Ceci se traduit par :

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

C'est l'équation encadrée qu'il faut résoudre pour obtenir la valeur de $\alpha_{éq}$. On prend comme dans le DM : $p = 1\,\text{bar}$ et $K^\circ = 10$. On pose $x = \alpha_{éq}$ 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 $\xi$ ne peut pas dépasser $\xi_{max} = n_0$, 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 $x$, $K^\circ$, $p$ et $p^\circ$).

**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 0.9
```

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 $\alpha_{éq}$. Comparer avec votre résultat précédent.