

Physique Numérique – TP2

Recherche de Zéros d'une Fonction

Victor Lanvin

1 Introduction

Dans ce TP, on s'intéresse à la recherche de zéros de fonctions en utilisant l'algorithme de Newton. En particulier, on étudie les positions d'équilibre d'un modèle mécanique des transitions de phase du premier (en question 7) et du second ordre (en question 8).

Le code utilisé durant tout ce TP et pour la question finale est fourni en annexe de ce rapport.

2 Question 6

6.a Comme suggéré par l'énoncé, on implémente pour cette question l'algorithme de Newton en utilisant un module fournissant une variable `convergence`, et une boucle `do...endo`.

La boucle permet d'arrêter automatiquement l'algorithme après un nombre d'itérations fixé, ce qui évite au programme de ne pas terminer si l'algorithme diverge. La variable `convergence` est de type `logical`, ce qui permet de réaliser le test booléen de sortie de boucle.

6.b Pour cette question, j'ai choisi d'implémenter le calcul approché de la dérivée dans une fonction à part, ce qui permet de l'appeler facilement dans n'importe quelle sous-routine. Il faut choisir un δ_x suffisamment faible (sinon l'approximation de la dérivée est incorrecte), mais un δ_x trop faible peut provoquer des problèmes d'arrondi. Par exemple, $\delta_x = 1e - 8$ provoquait une erreur de division par 0, et l'algorithme divergeait. Ici, on prend $\delta_x = 1e - 4$.

Pour $x_0 = 0.1$, l'algorithme converge vers la valeur 0, qui est bien un zéro de la fonction sinus. La convergence est réalisée en 3 étapes (pour $\epsilon = 1e - 6$), et ce indépendamment de la méthode de calcul de la dérivée.

6.c Pour $x_0 = 1.55$, l'algorithme converge vers la valeur -47.1238899 , et ce pour les deux méthodes de calcul de la dérivée. On note que $-47.1238899 = -15 * \pi$, cette valeur est donc bien un zéro de la fonction sinus.

On peut alors se demander pourquoi l'algorithme converge vers un zéro aussi éloigné de la valeur initiale. En réalité, la valeur initiale $x_0 = 1.55$ est très proche de $\pi/2$. Ainsi, la tangente en ce point est très proche de l'horizontale (dy est très faible). En conséquence, la variation d'abscisse $\frac{y}{dy} = \frac{\sin(x_0)}{\cos x_0}$ est très élevée et donc la valeur de x_1 est très éloignée de x_0 .

On peut aussi noter que la convergence de l'algorithme s'effectue en 5 étapes si on calcule la dérivée de manière exacte, et en 6 étapes si on calcule la dérivée de manière approchée. En effet, la dérivée étant moins précise dans le deuxième cas, l'algorithme converge nécessairement plus lentement. Ce comportement s'accroît lorsqu'on approche x_0 de $\pi/2$.

6.d Les résultats de cette question sont représentés en figure 1. Sachant que la fonction exponentielle est strictement croissante et tend vers 0 en $-\infty$, il n'existe pas de solution réelle à $e^x = 0$. Cependant, pour un $\epsilon > 0$ fixé, il est possible de trouver une valeur telle que $e^x < \epsilon$. Ainsi, l'algorithme termine dès lors qu'il obtient une telle valeur.

Analytiquement, on obtient que $x = \ln(\epsilon)$, ce qui explique la courbe d'aspect linéaire en échelle semi-logarithmique en figure 1. L'aspect *en escalier* s'explique par le fait que la suite $(x_n)_n$ puisse s'écrire sous la forme $x_{n+1} = x_n - 1$.

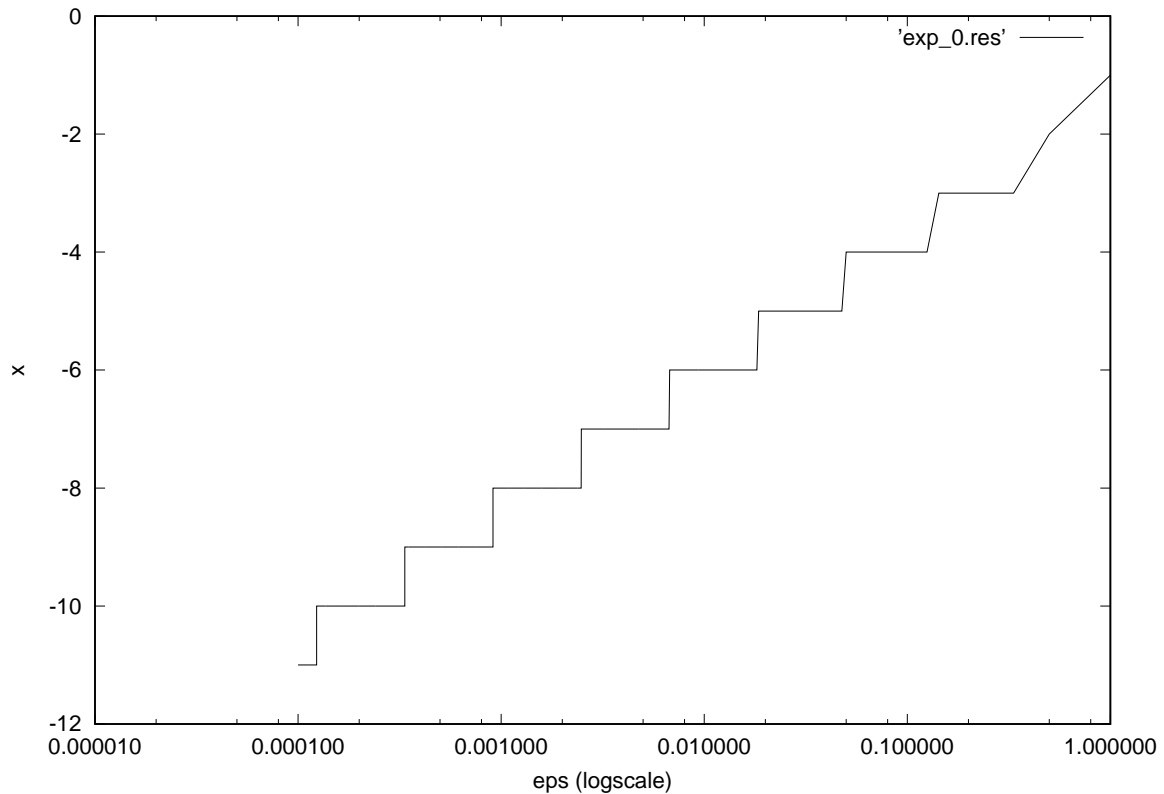


Figure 1: Solutions de $\exp(x) = 0$ en fonction de ϵ

6.e Pour un nombre limite d'itérations $i_{max} = 1000$, on trouve que l'algorithme ne converge que pour des valeurs initiales de x comprises dans l'intervalle $[0.1186; 2.5329]$ (à 10^{-4} près).

En dehors de cet intervalle, les tangentes à la courbe d'équation $1/2 - \tanh(x - 1)$ sont trop horizontales (la dérivée est proche de zéro). Ainsi, les intersections des tangentes avec l'axe des abscisses (i.e. les valeurs de $dx = x_{n+1} - x_n$) sont très élevées et l'algorithme est long à converger.

3 Question 7

Les valeurs numériques nous donnent :

$$x = \frac{PV}{RT} = \frac{P\theta_0 l S}{RT} \approx 0.801 * 10^{-6} \text{ mol}$$

$$\gamma = \frac{2 * x * R}{m * l^2} \approx 2.223 * 10^{-1} \text{ S.I.}$$

$$T_c = \frac{\theta_0^2 m l g}{x R} \approx 440 \text{ K}$$

La courbe représentant θ_{eq} en fonction de la température T est présentée en figure 2. On a tracé cette courbe pour $T < T_c/2$, et pour des valeurs initiales $\theta_0 = \pm 0.9$. Cette courbe est bien en accord avec les résultats obtenus analytiquement à la question 4; en particulier, l'angle d'équilibre θ_{eq} tend bien vers 0 lorsque T tend vers T_c .

4 Question 8

Pour cette partie, on simule le fait que la bille se déplace de manière continue lorsque le champ varie en ré-injectant la solution obtenue par l'algorithme en tant que valeur initiale pour l'itération suivante. Ceci permet non seulement à l'algorithme de converger plus rapidement, mais permet aussi d'observer l'hystérèse.

Les courbes pour cette question sont présentées en figure 3 et figure 4. On remarque que l'hystérèse devient plus étroite lorsque la température augmente, jusqu'à disparaître en $T = T_c$.

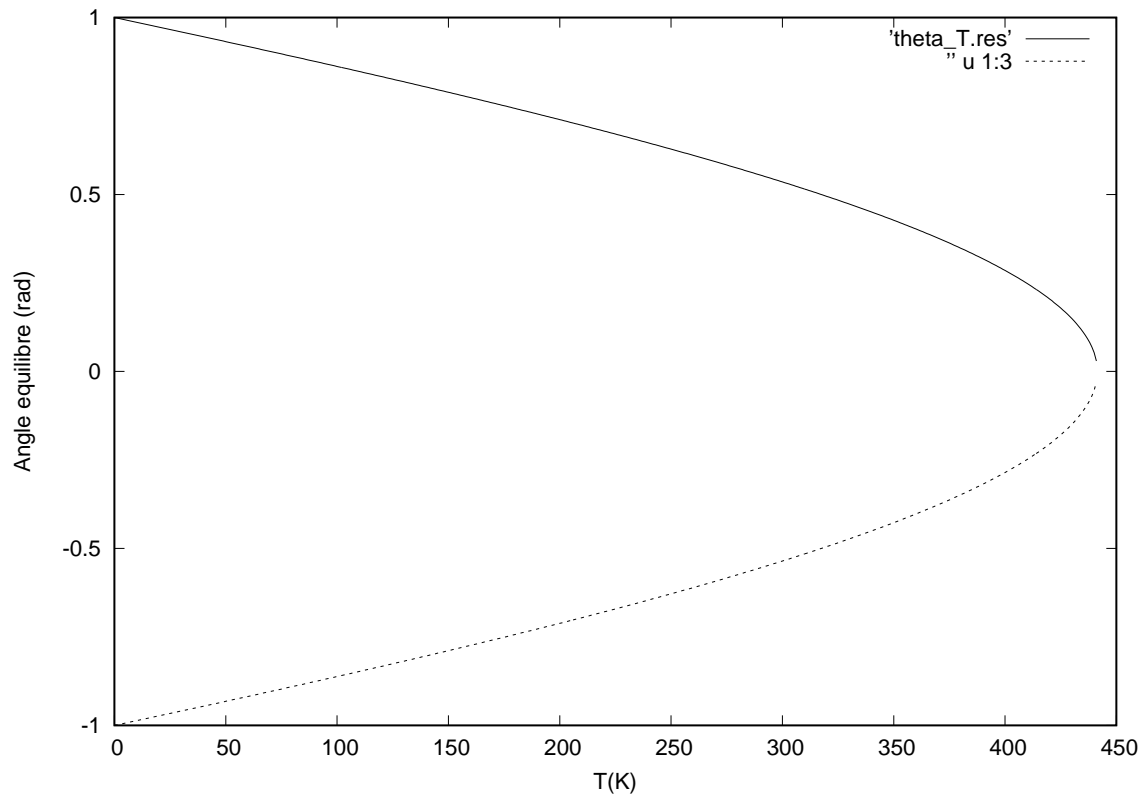


Figure 2: Courbe de $\theta_{eq}(T)$

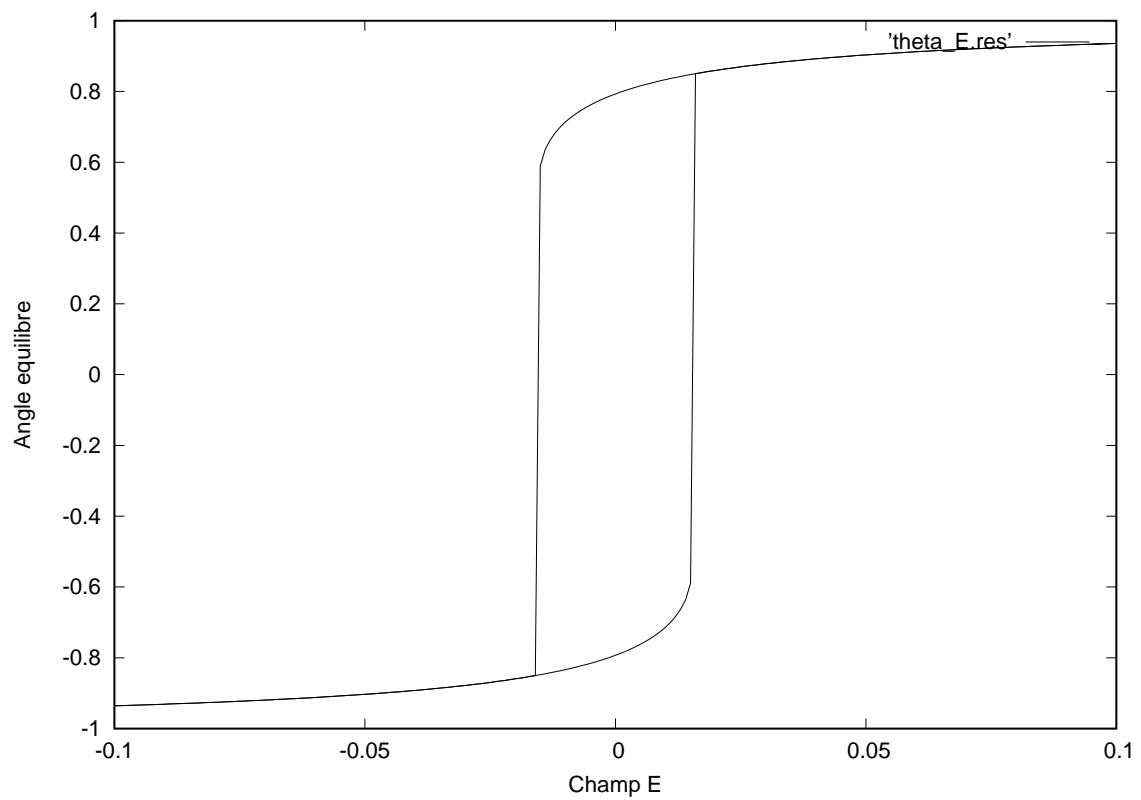


Figure 3: Courbe de $\theta_{eq}(E)$ pour $T = T_c/3$

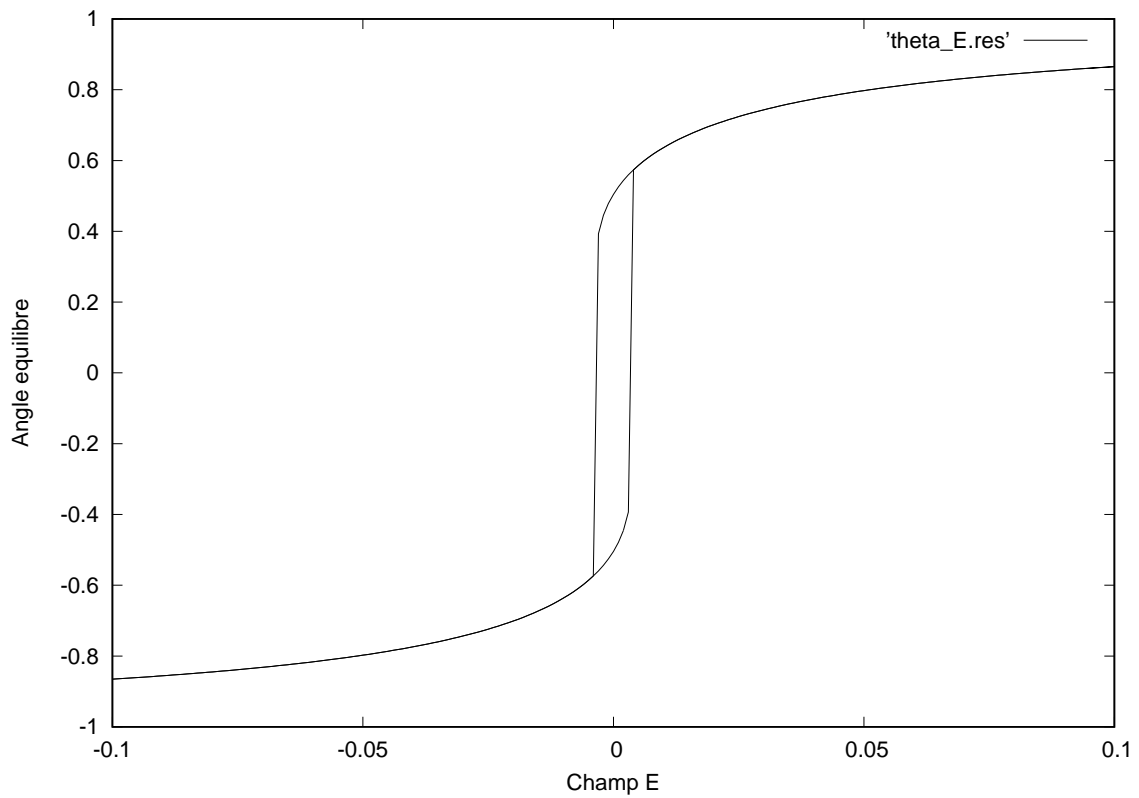


Figure 4: Courbe de $\theta_{eq}(E)$ pour $T = T_c/1.1$