

Feuille d'Exercices n° 15

Modélisation, Recherche de racine appliquée à la recherche d'un minimum

Modélisation d'une réaction chimique par la méthode des moindres carrés

Dans une réaction chimique on souhaite modéliser l'évolution de la concentration d'un réactif en fonction du temps.

On a mesuré expérimentalement :

Temps (s)	0	7	18	27	37	56	102
Concentration	34,83	32,14	28,47	25,74	23,14	18,54	11,04

Dans la suite on notera $(T_i)_{0 \leq i \leq 6}$ la suite des temps considérés et $(C_i)_{0 \leq i \leq 6}$ la suite des concentrations mesurées.

Nous souhaitons effectuer une modélisation de la réaction par une réaction chimique à l'ordre 1, c'est à dire, si $C(t)$ désigne la concentration en fonction du temps :

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\lambda \cdot C(t)$$

pour λ une constante réelle.

Elle admet pour solution : $C(t) = C_0 \cdot \exp(-\lambda t)$ où C_0 est une constante réelle.

- (1) Justifier que $\lambda > 0$; quelle valeur peut-on prendre pour C_0 ?

Une fois choisie la constante C_0 on souhaite déterminer, s'il existe, le réel $\lambda > 0$ pour laquelle la solution trouvée approchée le mieux le nuage de points $(T_i, C_i)_{0 \leq i \leq 6}$ au sens des moindres carrés, c'est à dire le minimum de l'application :

$$m : \lambda \longmapsto \sum_{i=0}^6 (C_i - C_0 \exp(-\lambda T_i))^2$$

- (2) Ecrire le code de cette fonction $m()$ qui avec pour paramètre un nombre λ retourne la valeur de $m(\lambda)$.
- (3) Tracer le graphe de la fonction m sur plusieurs intervalles bien choisis ; sur quel intervalle I de $\mathbb{R}^*$ la fonction m semble-t-elle présenter un minimum ?
- (4) Ecrire le code de la fonction $\text{dm}()$ qui pour paramètre un nombre λ retourne le nombre dérivée $m'(\lambda)$. Le calcul donne :

$$m'(\lambda) = 2C_0 \sum_{i=0}^6 T_i (C_i - C_0 \exp(-\lambda T_i)) \exp(-\lambda T_i)$$

- (5) Tracer le graphe sur I de la fonction dérivée m' .

- (6) Proposer une méthode pour déterminer une valeur approchée du minimum λ_{min} de m et l'implémenter. Si besoin, le calcul donne :

$$m''(\lambda) = 2C_0 \sum_{i=0}^6 T_i^2 (2C_0 \exp(-\lambda T_i) - C_i) \exp(-\lambda T_i)$$

- (7) Quelle est la valeur de m obtenue pour cette valeur λ_{min} de λ ?
(8) Pour cette valeur effectuer le tracé sur un même graphique du nuage de points et de la solution théorique obtenue. Quel est leur écart au sens des moindres carrés ?
(9) L'hypothèse d'une réaction chimique à l'ordre 1 est-elle vraisemblable ?