Devoir d'informatique 5 – Corrigé

D.Malka – MPSI 2016-2017 – Lycée Saint-Exupéry

05.05.2017

Exercice 1 – Volume molaire du gaz de Van der Waals

On souhaite comparer deux modèles de gaz, décrit par les équations d'état suivantes :
— modèle du gaz parfait : $PV = RT$
— modèle du gaz de Van der Waals : $(P + \frac{a}{V_m^2})(V_m - b) = RT$

où $R = 8,314\,J.K^{-1}.mol^{-1}$, P la pression, n la quantité de matière en mol, V_m le volume, T, la température. $a = 0.137\,J.m^3.mol^{-1}$ et $b = 3.87.10^{-5}\,m^3.mol^{-1}$ sont des coefficients empiriques.

1. Le volume molaire vérifie l'équation d'état pour $n = 1$ du gaz de Van der Waals :

$$(P + \frac{a}{V_m^2})(V_m - b) = RT$$

Qu'on peut réécrire sous la forme :

$$f(V) = 0 \quad \text{avec} \quad f(V_m) = (P + \frac{a}{V_m^2})(V_m - b) - RT$$

2. On détermine le volume molaire en déterminant le zéro de $f(V)$ pour $P = 200\,bar$ et $T = 400\,K$ par la méthode dichotomique. Graphiquement, on a encadré ce zéro c'est-à-dire V_m par $0,15\,L$ et $0,2\,L$: c'est l'intervalle de recherche initial. On arrête la recherche lorsque l'encadrement à une largeur inférieure à $e = 10^{-7}$. Graphiquement, l'isotherme montre que le zéro est simple et donc que la recherche dichotomique est applicable.

```python
#Parametres
R=8.314
a=0.137
b=3.87e-5
T=400
P=200e5

#Fonction de recherche
def rech_zero(f,a,b,e):
    g=a
    d=b
    while d-g>e:
        m=(d+g)/2
        if f(m)*f(d)>0:
            d=m
        elif f(m)*f(d)<0:
            g=m
        else:
            return m
    return m

#Fonction dont on recherche le zero
def f(V_m):
    return (P+a/V_m**2)*(V_m-b)-R*T

#Appel de la fonction de recherche dichotomique
Vm=rech_zero(f_vdw,0.00015,0.0002,1e-7)
```

3. Combien d'itérations faut-il pour obtenir la précision souhaitée ?

   A la fin du programme, après n itérations, l'intervalle de recherche à une largeur inférieur à e :

$$d_n - g_n \leq e$$

   Or à chaque itération, l'intervalle de recherche est divisée par deux :

$$d_{n+1} - g_{n+1} = \frac{d_n - g_n}{2}$$

   Initialement :

$$d_0 - g_0 = b - a$$

   Par récurrence :

$$d_n - g_n = \frac{b-a}{2^n}$$

   D'où :

$$\frac{b-a}{2^n} < e$$

   Soit :

$$n > \log_2\left(\frac{b-a}{e}\right)$$

   ou encore, comme n est entier et que l'algorithme s'arrête lorsque $d_n - g_n < e$

$$n = E\left(\log_2\left(\frac{b-a}{e}\right)\right) + 1$$

   A.N. pour $a = 0,0002$, $b = 0.00015$ et $e = 10^{-7}$, $n = 9$.

4. D'après le réseau d'isothermes du gaz de Van der Waals, pour $T = 400\,K$ (4ème isotherme en partant du bas) et $P = 200\,bar$:

$$0,15\,L < V_m < 0.2\,L$$

5. On appelle la fonction bissection pour $P = 200\,bar$, $T = 400\,K$ et $e = 10^{-7}$. Elle renvoie la valeur 0.00017451171875000002. Que dire ?

   Cette valeur n'a pas de sens. Le résultat n'est précis qu'à $10^{-7}\,m^3$ (sans tenir compte des erreurs numériques). Du moins c'est une borne supérieure de l'erreur dont nous sommes sûr. Donc, on écrira :

$$V_m = 0.0001745\,m^3 = 0,1745\,L$$

   Les chiffres suivants ne sont pas significatifs. Le résultat est cohérent avec l'estimation graphique de $V_m \approx 0,175\,L$.

Exercice 2 – Propagation d'une épidémie

1. Voir le cours de maths : le théorème de Cauchy-Lipschitz s'applique.
2. A est solution du problème de Cauchy si $I_0 = A$, la fonction nulle est solution du système de Cauchy si $I_0 = 0$. Donc par unicité de la solution d'un problème de Cauchy, $0 < I_0 < A \Rightarrow 0 < I(t) < A$.
3. Montrons que si $0 < I_0 < A$ alors $I(t)$ est croissante sur $\mathbb{R}^+$.

   On a montré que $0 < I_0 < A \Rightarrow \forall\, t \quad 0 < I(t) < A$.
   Donc $\forall\, t \in [0, T] \quad , I'(t) > 0 \Leftrightarrow \forall\, t \quad I(t)$ croissante sur $[0, T]$. Par prolongement, il existe $I(t)$ croissante sur $\mathbb{R}^+$ et solution de l'équation différentielle.
4. Schéma numérique.

4.1 Schéma d'Euler explicite.

$$I(t_{i+1}) - I(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} kI(t)(A - I(t)dt$$

avec l'approximation, $\forall t \in [t_i, t_{i+1}]$, $I(t) \approx I(t_i)$:

$$I(t_{i+1}) - I(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} kI(t_i)(A - I(t_i)dt$$

$$\boxed{I(t_{i+1}) = I(t_i) + kI(t_i)(A - I(t_i)h}$$

4.2 On calcule alors la solution numérique par la fonction fig.1.

```python
#Parametres
A=1000
k=0.1
I0=1

def resolution(a,b,h):
    n=int((b-a)/h+1)
    t=linspace(a,b,n)
    I=zeros(n)
    I[0]=I0
    for i in range(n-1):
        I[i+1]=I[i]+k*I[i]*(A-I[i])*h
    return t,I
```

Figure 1 – Calcul de la solution numérique

4.3 On a montré que $I(t)$ était croissante sur $\mathbb{R}^+$. La solution obtenue pour un pas $h = 0,02$ est à rejeter, le pas est trop grand aussi la solution est instable numériquement. Parmi les deux solutions restantes, on peut raisonnablement penser que la plus précise est celle de pas $h = 2.10^{-5}$.

Le nombre de personne infectées croît initialement exponentiellement, atteint sa croissance maximale pour $I(t) = \dfrac{A}{2}$ puis croît de moins en moins vite jusqu'à contamination de l'ensemble de la population au bout d'environ $0,15$ unités de temps.