



SA - EXERCICE 22

AJUSTEMENT DU SPECTRE DU SECOND INTERMEDIAIRE X

[1. Programmation](#)

[2. Détermination du spectre X](#)

1. Programmation

Le problème consiste à calculer le spectre résultant d'une certaine combinaison (α) du spectre de III_2 , connu, et d'un spectre X, inconnu (éq. 46) :

$$\varepsilon_{\lambda}^{Int} = \alpha \varepsilon_{\lambda}^{III_2} + (1 - \alpha) \varepsilon_{\lambda}^X$$

afin de le comparer au spectre mesuré expérimentalement, dans quatre expériences différentes.

La variable indépendante, $ind[i]$, correspondra à la longueur d'onde λ (de 350 à 500 nm, avec un incrément de 2 nm, soit $m = 76$ points). Les valeurs du spectre inconnu, ε_{λ}^X , seront représentées par les paramètres $p[0]$ à $p[75]$. Et les valeurs de α correspondant à chaque expérience par $p[76]$ à $p[79]$.

Le fichier expérimental sera constitué d'une première colonne contenant les longueurs d'onde, suivie des quatre colonnes correspondant aux quatre expériences, et une sixième colonne contiendra le spectre du III_2 , connu. La programmation, extrêmement simple, repose sur cette utilisation astucieuse du fichier expérimental.

Précisons d'abord un point : les variables globales $ind[]$ et $ca[][]$ ont des sœurs jumelles $index[]$ et $ex[][]$ respectivement, destinées à recevoir les valeurs lues dans le fichier expérimental, en accord avec les variables cochées *obs* dans l'onglet *Variables*. Ainsi, la première colonne du fichier expérimental sera affectée à $index[]$, puis, par exemple, si la $n^{ième}$ variable cochée *obs* est le numéro m , les valeurs de la $(n+1)^{ième}$ colonne seront affectées à $ex[m][]$, qui sera la valeur expérimentale censée correspondre à la valeur calculée $ca[m][]$.

Les variables $index$ et ex sont dimensionnées exactement comme leurs sœurs jumelles ind et ca , c'est-à-dire : $index[NPT]$, $ex[NVAR][NPT]$, NPT et $NVAR$ étant les nombres maxima de points et

de variables, respectivement. L'idée sous-jacente est que toute variable d'un modèle peut être une variable observée expérimentalement.

Dans le cas présent, pourvu que les variables 0 à 4, compris, soient cochées *obs* au moment de la lecture, le spectre du III_2 sera affecté à `ex[4][]`, qui pourra donc être utilisée comme n'importe quelle variable globale (ligne 5) :

```
//-----  
---  
1 void fappel  
2 {  
3     for (int k = 0; k < 4; k++) // boucle sur le nombre d'expériences  
4         for (int i = 0; i < npt; ++i) // boucle sur le nombre de  
longueurs d'onde  
5             ca[k][i] = p[76+k]*ex[4][i] + (1 - p[76+k])*p[i];  
6  
7     if (flag[0]) // recopie des spectres de III-2 et X dans ca  
8         for (int i = 0; i < npt; ++i) {  
9             ca[4][i] = ex[4][i];  
10            ca[5][i] = p[i];  
11        }  
12    }  
//-----  
---
```

Le programme pourrait ne comporter que les trois lignes 3 à 5. Mais il est pratique de disposer, une fois l'optimisation effectuée, du spectre inconnu X sous la même forme que les spectres expérimentaux, c'est à dire en regard d'une colonne de longueurs d'onde. Pour cela, on le recopie dans la variable `ca[5][]`, ligne 10. On en profite pour recopier également le spectre du III_2 dans `ca[4][]`, ligne 9, simplement pour avoir une table homogène. Cette recopie pourrait être effectuée systématiquement, toutefois elle n'est pas nécessaire pendant l'optimisation. C'est pourquoi elle a été rendue optionnelle : elle ne sera effectuée que si la variable `flag[0]` est vraie, c'est à dire si le commutateur 0 (en haut de la fenêtre *Infos*) est coché. Noter, dans la fonction `Identification`, la ligne qui rend ce commutateur utilisable, tout en donnant la légende qui sera affichée dans son info-bulle :

```
//-----  
---  
void Identification(Modele& modele)  
{  
    ...  
    flag_text[0] = "Recopie spectres dans ca";  
}
```

```
}
```

```
//-----  
---
```

`flag_text[i]` ($i = 0 \dots 9$) est un tableau de chaînes de caractères, vides par défaut, de sorte que le programme ignore la variable booléenne `flag[i]` correspondante, associée au commutateur i . L'affectation d'une **chaîne non vide** à `flag_text[i]` rend le commutateur i actif : son info-bulle affiche la chaîne et vous pouvez le cocher (`flag[i] = true`) ou le décocher (`flag[i] = false`) de manière interactive.

[Télécharger specMnIV.cpp](#)

[Télécharger specMnIV.sac](#)

[Télécharger specIV-](#)

[III.exp](#)

2. Détermination du spectre X

A. Etant donné l'utilisation non habituelle de Sa dans cet exemple, il importe de contrôler rigoureusement l'enchaînement des opérations :

- Faites lire le fichier `specMnIV.sac`. Il contient des valeurs de $p[0]$ à $p[75]$ (ϵ^X) toutes égales à 10^3 , des valeurs de α égales à 0.5, sauf celle correspondant au spectre **a** de la [figure VI.16](#), fixée à 0.9 et que l'on maintiendra non-ajustable. Ces valeurs peuvent être utilisées comme valeurs de départ de l'optimisation.

- Assurez-vous que les variables 0 à 4 comprise sont cochées **obs avant de faire lire le fichier expérimental** `specIV-III.exp`. Vérifiez que ses colonnes ont été correctement affectées dans l'onglet *Données Exp*. Assurez-vous également que le commutateur 0 n'est pas coché.

- Une fois le fichier expérimental lu, dé-cochez la case *obs* de la variable 4 (spectre du III_2) afin de ne pas l'inclure dans le calcul de l'erreur.

- Lancez l'optimisation.

- Celle-ci effectuée, revenez en mode *Simulation*, cochez le *commutateur 0*, et relancez le calcul.

Les spectres du III_2 et de X sont alors disponibles, vous pouvez les tracer comme les spectres ajustés et obtenir directement avec Sa une figure identique à la [figure VI.16](#). Vous disposez également d'un fichier `specMnIV.sad` contenant toutes ces données de façon directement exploitables.

En cas de problème, vous pouvez utiliser le fichier suivant, contenant le résultat de l'optimisation :

[Télécharger *specMn/Vopt.sac*](#)

B. Vous pouvez vérifier que si on laisse ajuster toutes les valeurs de α , l'optimisation ne converge pas vers une solution unique. On ne peut donc pas dire que le spectre de X soit entièrement déterminé. Toutefois, le choix de 0.9 pour α_a , correspondant à un spectre expérimental très proche de celui du III_2 , semble raisonnable et permet d'affirmer qu'au moins la forme du spectre de X est bien estimée.