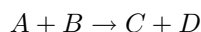

Projet n°1 : Modèles de réactions chimiques

N.B. On s'attachera à présenter les résultats de manière conviviale et compréhensible pour un non initié à Scilab. On soignera en particulier les interfaces d'entrée et de sortie ainsi que les figures.

Rappel : les équations de réactions chimiques s'écrivent en général sous la forme :



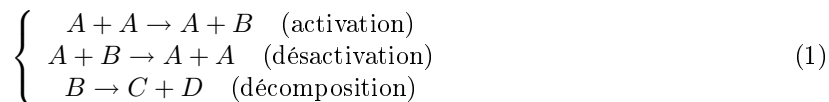
signifiant que les espèces A et B réagissent pour donner naissance aux espèces C et D . En nommant $a(t)$, $b(t)$, $c(t)$ et $d(t)$, les concentrations des espèces A à D à l'instant t , la loi d'action de masse de l'espèce A peut s'écrire

$$\frac{da(t)}{dt} = -ka(t)b(t)$$

où k est une constante positive appelée constante de la réaction.

1 Modèle de décomposition de l'Hydrazine (N_2H_4)

L'hydrazine est un composé organique azoté de formule brute $A = N_2H_4$ pouvant être utilisé dans un moteur-fusée comme source d'énergie. On s'intéresse à sa décomposition spontanée à travers un passage par une molécule activée $B = (N_2H_4)^*$. Ce phénomène correspond donc aux réactions suivantes :



1. En notant k_1 , k_2 et k_3 les constantes respectives des trois réactions chimiques, et $a(t)$ et $b(t)$ les concentrations de A et B à l'instant $t \geq 0$, on obtient une première équation différentielle ordinaire (EDO) que vérifie a :

$$\frac{da(t)}{dt} = -k_1a^2(t) + k_2a(t)b(t)$$

Ecrire de la même façon l'EDO que vérifie b .

2. Ecrire un programme Scilab utilisant l'instruction `ode` permettant de calculer de manière approchée $a(t)$ et $b(t)$ sur un intervalle $[0, T]$ donné pour un jeu de paramètres $(k_1, k_2, k_3, a(0), b(0))$ quelconque.

3. En prenant $(k_1, k_2, k_3) = (0.2, 0.1, 0.1)$, vérifier avec plusieurs valeurs de $a(0)$ et $b(0)$, que $a(t)$ est toujours de l'ordre de $\frac{1}{t}$ quand t tend vers $+\infty$.

2 Modèle du Brusselator

Le modèle du Brusselator est un exemple de réaction chimique autocatalytique et oscillante. Une des premières mentions de tels système est due à Belousov qui observa des changements de couleur périodiques dans certains mélanges chimiques.

On s'intéresse ici au système de réactions suivantes :



Dans ce système, les espèces étudiées sont les espèces autocatalysées X et Y tandis que les espèces A et B sont supposées être en large excès et donc avoir une concentration constante.

1. Ecrire le système d'EDO satisfait par les concentrations respectives $x(t)$ et $y(t)$ de X et Y en supposant :

- Les réactions de (2) ont des constantes de réactions égales respectivement à 1, $a > 0$, 1 et 1
- La concentration de A et B est constante, respectivement égale à 1 et $b > 0$.

2. Ecrire un programme Scilab permettant de calculer de manière approchée $x(t)$ et $y(t)$ sur un intervalle $[0, T]$ donné et pour un jeu de paramètres $(a, b, x(0), y(0))$ quelconque.

3. On suppose que $a = b = 1$. Montrer graphiquement que, quels que soient les valeurs $x(0)$ et $y(0)$, $x(t)$ et $y(t)$ convergent à l'infini vers une valeur limite constante que l'on déterminera.

4. On suppose que $a = 1$ et $b = 3$. Montrer graphiquement que, quels que soient les valeurs $x(0)$ et $y(0)$, $x(t)$ et $y(t)$ possèdent à l'infini un comportement oscillant. Donner une approximation graphique de la période des oscillations.