

TP Scilab (issu de l'examen 2014)

On considère le système de réactions chimiques suivant :

- (i) $2A \rightarrow A + B$ avec une constante de réaction k_1
- (ii) $A + B \rightarrow 2A$ avec une constante de réaction r
- (iii) $B \rightarrow C$ avec une constante de réaction k_2

où A , B et C sont trois espèces chimiques différentes (plus précisément, B représente l'espèce A "activée" préalablement en sa dissociation en l'espèce C)

1. On suppose que les trois espèces ont pour concentrations initiales respectives $A_0 \geq 0$, $B_0 \geq 0$ et $C_0 = 0$; en notant $A(t)$ et $B(t)$ les concentrations respectives à l'instant t de A et B , déterminer un système de deux équations différentielles régissant $A(t)$ et $B(t)$. On rappelle la relation cinétique générale pour une réaction du type $\alpha M + \beta N \rightarrow P + Q$ de constante k : $P'(t) = kM(t)^\alpha \cdot N(t)^\beta$. Par exemple, pour la seule première équation du présent système, on peut écrire : $A'(t) = -kA^2(t)$.
2. Résoudre numériquement avec Scilab le système d'équations différentielles précédent,
 - tout d'abord avec l'instruction `ode` de Scilab,
 - ensuite avec la méthode d'Euler expliciteet comparer les résultats obtenus graphiquement.
On pourra prendre les valeurs suivantes : $(A_0, B_0) = (1, 0)$, $(k_1, r, k_2) = (0.2, 0.1, 0.001)$ et rechercher les solutions approchées sur l'intervalle de temps $[0, 300]$.
3. Déterminer les points d'équilibre du système précédent et étudier leur stabilité (théoriquement ou numériquement).