Projet n°2 : Modèles de réactions chimiques

1 Introduction

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

$$A + B \to C + D$$

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.

L'objectif de ce projet est d'étudier de manière qualitative deux systèmes de réactions chimiques.

2 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 :

$$\begin{cases} A + A \to A + B & \text{(activation)} \\ A + B \to A + A & \text{(désactivation)} \\ B \to C + D & \text{(décomposition)} \end{cases} \tag{1}$$

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 équations différentielles ordinaires que vérifie a :

$$\frac{da(t)}{dt} = -k_1 a^2(t) + k_2 a(t)b(t)$$

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

2. On note respectivement a_0 et b_0 les concentrations initiales de A et B et on suppose que $a_0 > 0$ et $b_0 > 0$. On peut démontrer les propriétés qualitatives suivantes sur les solutions a et b du système d'EDO précédemment obtenu :

(i) Pour tout $t \geq 0$, $a(t) > 0$ et $b(t) > 0$.

(ii) $\displaystyle\lim_{t \to +\infty} \frac{1}{t} \int_0^t \frac{b(s)}{a(s)} ds = 0.$

(iii) $a(t) = O(\frac{1}{t})$ quand $t \to +\infty$.

Démontrer la propriété (i) et que (ii) implique (iii).

3. Ecrire un programme Scilab utilsant la méthode d'Euler et 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. En prenant $(k_1, k_2, k_3) = (0.2, 0.1, 0.1)$, choisir des valeurs de T, a_0 et b_0 appropriées afin de mettre en évidence numériquement et graphiquement les propriétés qualitatives (i), (ii) et (iii).

3 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 :

$$\left\{ \begin{array}{c} A \to X \\ 2X + Y \to 3X \\ B + X \to Y + C \\ X \to D \end{array} \right. \tag{2}$$

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, repectivement égale à 1 et $b > 0$.

2. Ecrire un programme Scilab utilsant la méthode de Runge Kutta d'ordre 4 et 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 numérique de la période des oscillations.