

1 Cinétique chimique

On s'intéresse ici aux concentrations de trois produits A, B et C au cours du temps. Les réactions en jeu, $A \rightarrow B$ et $B \rightarrow C$, sont d'ordre 2 : leur vitesse est proportionnelle au carré de la concentration de chaque réactif. Les concentrations vérifient alors les équations différentielles :

$$\frac{d[A]}{dt} = -\alpha[A]^2, \quad \frac{d[B]}{dt} = \alpha[A]^2 - \beta[B]^2 \quad \text{et} \quad \frac{d[C]}{dt} = \beta[B]^2$$

On souhaite résoudre le système par la méthode d'Euler sur un intervalle $[0, T_{\max}]$ qu'on subdivise uniformément en définissant $n + 1$ instants $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n = T_{\max}$. On pose $\Delta t = \frac{T_{\max}}{n}$, $t_k = k\Delta t$. Pour tout $k \in \llbracket 0, n \rrbracket$, on note a_k (resp. b_k et c_k) une approximation de la concentration $[A]$ (resp. $[B]$ et $[C]$) à l'instant t_k .

Question 1. Justifier que les suites $(a_k)_{0 \leq k \leq n}$, $(b_k)_{0 \leq k \leq n}$ et $(c_k)_{0 \leq k \leq n}$ vérifient :

$$\forall k \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket, \quad a_{k+1} = a_k - \alpha a_k^2 \Delta t, \quad b_{k+1} = b_k + (\alpha a_k^2 - \beta b_k^2) \Delta t, \quad c_{k+1} = c_k + \beta b_k^2 \Delta t.$$

Question 2. Écrire une fonction `cinetique` prenant en argument $T_{\max}$, n , α et β et les concentrations initiales a_0 , b_0 et c_0 et qui renvoie un quadruplet de listes contenant respectivement les valeurs des suites $(t_k)_{0 \leq k \leq n}$, $(a_k)_{0 \leq k \leq n}$, $(b_k)_{0 \leq k \leq n}$ et $(c_k)_{0 \leq k \leq n}$.

Question 3. On se place dans le cas où $\alpha = 10 \text{ mol}^{-1} \text{s}^{-1}$, $\beta = 1 \text{ mol}^{-1} \text{s}^{-1}$ et $T_{\max} = 30 \text{ s}$ et où les concentrations initiales vérifient $[A] = 1 \text{ mol.L}^{-1}$ et $[B] = [C] = 0 \text{ mol.L}^{-1}$.

Représenter graphiquement (sur le même graphique) les concentrations $[A]$, $[B]$ et $[C]$ en fonction du temps.

2 Équation de la chaleur

On considère une plaque carrée d'acier de 10 mm de côté, initialement à une température T_{cool} . On dépose au centre de cette plaque un anneau d'acier à une température T_{hot} , de rayon intérieur r_0 et de rayon extérieur r_1 .

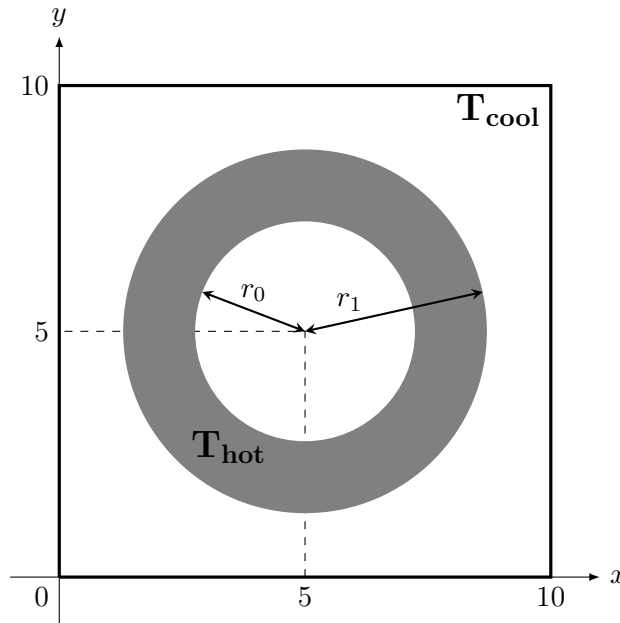


Figure 1: Système plaque/anneau à l'instant initial

La température $U(x, y, t)$ à l'instant t au point de coordonnées (x, y) (cf. figure 1 ci-dessus) vérifie l'équation de la chaleur (équation de diffusion) :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right). \quad (1)$$

où D est le coefficient de diffusion thermique de l'acier.

Pour résoudre numériquement cette équation, on approche $U(x_i, y_j, t_k)$, où $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$ et $t_k = k\Delta t$, par $u_{i,j}^{(k)}$ vérifiant la relation suivante selon la méthode des différences finies :

$$\frac{u_{i,j}^{(k+1)} - u_{i,j}^{(k)}}{\Delta t} = D \left[\frac{u_{i+1,j}^{(k)} - 2u_{i,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k)}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^{(k)} - 2u_{i,j}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)}}{(\Delta y)^2} \right]. \quad (2)$$

On en déduit que :

$$u_{i,j}^{(k+1)} = u_{i,j}^{(k)} + D \left[\frac{u_{i+1,j}^{(k)} - 2u_{i,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k)}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^{(k)} - 2u_{i,j}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)}}{(\Delta y)^2} \right] \Delta t. \quad (3)$$

On résout alors l'équation de la chaleur (de manière approchée) de la façon suivante :

- on construit (à la question 4) une matrice u_0 de manière à ce que $u_0[i, j]$ soit la température au point (x_i, y_j) à l'instant $t = 0$;
- étant donné la matrice u des températures $u_{i,j}^{(k)}$ aux points (x_i, y_j) à un instant k , on détermine (à la question 5) la matrice v des températures $u_{i,j}^{(k+1)}$ des points (x_i, y_j) à l'instant $k + 1$ via la relation de récurrence (3). *Pour simplifier la résolution, on supposera que les points au bord de la plaque métallique sont en permanence fixés à la température T_{cool} .*

Question 4. Compléter le code de la fonction ci-dessous calculant la matrice des températures à $t = 0$.

```
def u_initial(Tcool, Thot, dx, dy, nx, ny, r0, r1):
    u0 = ... * np.ones((..., ...))
    xm, ym = nx*dx//2, ny*dy//2
    for i in range():
        for j in range(ny):
            x, y = ..., ...
            if ... <= (x-xm)**2 + (y-ym)**2 <= ...:
                u0[i, j] = ...
    return u0
```

Vous pourrez vérifier votre code en exécutant le test proposé dans le fichier à compléter.

Question 5. Écrire une fonction `iteration` prenant en argument le coefficient de diffusion D , la matrice u (de type array) des températures à un certain instant k , D , ainsi que les pas de temps et d'espace Δt , Δx et Δy et qui renvoie la matrice des températures à l'instant $k + 1$. *Étant donné la relation de récurrence, on fera particulièrement attention à ne pas modifier la matrice passée en argument.*

Question 6. Exécuter le test en fin de fichier à compléter afin de lancer une animation modélisant la résolution de l'équation de la chaleur pour notre problème.

On pourra modifier à souhait les paramètres du problème, sauf le pas de temps Δt . En effet, afin que la modèle soit stable, on peut montrer qu'il faut choisir Δt tel que :

$$\Delta t \leq \frac{1}{2D} \frac{(\Delta x \Delta y)^2}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}.$$

Question 7. Expliquer comment on obtient l'égalité (2).