

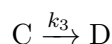
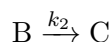
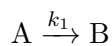
Capacité numérique :

Etude des approximations dans un mécanisme réactionnel

On considère la réaction suivante :



On suppose le mécanisme suivant :



L'état initial sera le suivant : $[A]_0 = 0,1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$. On choisira $k_1 = 1 \text{ min}^{-1}$. On fera varier les valeurs de k_1 , k_2 et k_3 entre 1 et 100 pour mettre en évidence les différentes approximations du cours (AEQS, ECD).

Tracer les courbes $[i] = f(t)$ et $v_i = f(t)$ pour i décrivant A, B, C ou D.

On résoudra le système sur un intervalle de 5 min en utilisant la méthode d'Euler. La méthode d'Euler permet de résoudre numériquement un système d'équations différentielles, dont les fonctions inconnues sont notées f_i . Il faut connaître l'expression des dérivées de ces fonctions en fonction des fonctions f_i . Notons $[a ; b]$ l'intervalle de résolution. Les valeurs initiales $f_i(a)$ doivent être connues.

Méthode: Méthode d'Euler

- 1) Déterminer le point initial, c'est à dire les valeurs $f_i(a)$.
- 2) Choisir un nombre d'itération N , qui caractérisera la précision de la résolution (et également le temps de calcul). On peut alors définir le pas :

$$dx = \frac{b - a}{N}$$

- 3) Pour $i < N$:
 - a) Calculer $f'_i(a + idx)$ à partir des valeurs des fonctions $f_i(a + (i - 1)dx)$.
 - b) Déterminer alors les valeurs $f_i(a + idx)$ selon :

$$f_i(a + idx) = f_i(a + (i - 1)dx) + dx \times f'_i(a + (i - 1)dx)$$

- c) Recommencer ensuite pour $i+1$.

Remarque

On pourra modifier le mécanisme pour faire apparaître un équilibre et évaluer l'approximation du quasi-équilibre.