UNIVERSITÉ BLAISE PASCAL
UFR SCIENCES EXACTES ET NATURELLES — Décembre 2011

Licence Sciences et Technologies – Mention Chimie – L3
Algorithmique et Programmation – Examen de Travaux Pratiques

Durée : 1 heure.
Remarques : il est recommandé de respecter les notations imposées dans le texte. Toutes les fonctions devront comporter des paramètres. Aucun document écrit n'est autorisé.

Réaction Oscillante : Le mécanisme de Lotka-Volterra est le modèle le plus simple pour décrire une cinétique de réaction oscillante :

$$\begin{aligned} A + X &\xrightarrow{k_1} 2\,X \\ X + Y &\xrightarrow{k_2} 2\,Y \\ Y &\xrightarrow{k_3} \text{produits} \end{aligned}$$

où k_1, k_2 et k_3 sont les constantes de vitesse des réactions. La concentration en A est considérée comme constante égale à a (réservoir infini). En notant x et y les concentrations respectives en X et Y, on obtient les variations de concentration de X et Y en fonction du temps :

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1\,a\,x - k_2\,x\,y \\ \frac{dy}{dt} &= k_2\,x\,y - k_3\,y \end{aligned}$$

On veut tracer l'évolution de $x(t)$ et $y(t)$. Pour cela, on considèrera un pas de temps dt. Les concentrations au temps $t + dt$ peuvent donc être déduites de celles au temps t grâce aux deux équations ci-dessus : en effet, on a $x(t + dt) = x(t) + dx$ (idem pour y). Cette méthode n'est valable que lorsque dt est très petit.

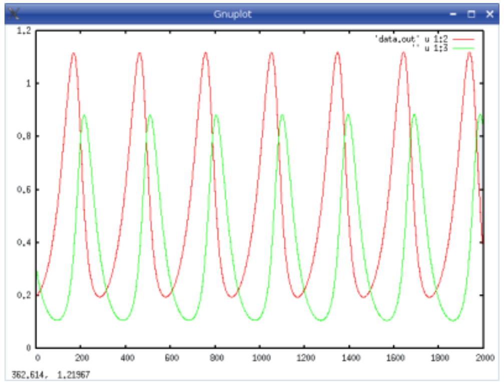
Question 1 : Créer trois constantes `K1`, `K2` et `K3` ayant comme valeurs respectives $1,91 \times 10^{-2}$, $5,20 \times 10^{-2}$ et $2,75 \times 10^{-2}$.

Question 2 : Écrire une fonction `saisie` qui demande à l'utilisateur d'entrer les concentrations initiales en A, X et Y, ainsi que le temps total de la simulation et le pas de temps.

Question 3 : Écrire une fonction `calcX` qui renvoie la concentration $x(t + dt)$ en fonction des concentrations à t et du pas de temps dt.

Question 4 : Écrire une fonction `calcY` qui renvoie la concentration $y(t+dt)$ en fonction des concentrations à t et du pas de temps dt.

Question 5 : Le programme principal demande à l'utilisateur les différents paramètres. Les valeurs des concentrations sont ensuite calculées à chaque valeur de temps. On écrit ensuite le temps et les concentrations correspondantes dans un fichier `data.out`. Cependant, on n'écrira dans ce fichier *qu'un point sur* 100.



Vous pouvez vérifier votre programme en traçant les courbes obtenues. Le graphique ci-dessus a été obtenu avec $a_0 = 1,0$, $x_0 = 0,2$ et $y_0 = 0,3$, sur un temps total de $2000,0$ avec un intervalle de temps $dt = 0,01$. Pour le tracer, lancez `gnuplot` puis exécutez la commande suivante :

```
plot 'data.out' u 1:2 w l, '' u 1:3 w l
```