Activité 1 – Réactions autocatalytiques

En chimie, on utilise le modèle de Verhulst (proposé par Pierre-François Verhulst en 1845 en réponse au modèle de Malthus pour décrire l'évolution des populations) pour des réactions autocatalytiques, dans lesquelles l'augmentation des individus touchés est proportionnelle à la fois au nombre d'individus déjà touchés et au nombre d'individus qui peuvent encore être touchés, ce qui se traduit par l'équation $\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \alpha y(K - y)$

où y représente la population touchée en fonction du temps t ; α et K sont deux paramètres strictement positifs.

On étudie la réaction des ions permanganate MnO_4^- avec l'acide oxalique (éthanedioïque) $C_2H_2O_4$ autocatalysée par les ions Mn^{2+}.
La concentration totale de manganèse dans la solution (sous la forme d'ions MnO_4^- et d'ions Mn^{2+}) est de 2 mmol.L^{-1}.
A l'instant t = 0, on a $[Mn^{2+}]$ = 0,001 mmol.L^{-1}.
La concentration y (en mmol.L^{-1}) d'ions Mn^{2+} évolue en fonction du temps t en seconde selon le modèle de Verhulst avec α = 0,02 L.mmol^{-1}.s^{-1}.

1. Représenter l'évolution de la population y en fonction du temps t (courbe autocatalytique ou logistique) sur une période de 6 minutes :
   a. en écrivant un programme utilisant la méthode d'Euler
   b. en utilisant la fonction odeint de la bibliothèque scipy.integrate
2. Représenter la vitesse volumique de réaction $\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}$ en fonction du temps t.

Exemple de résolution d'un système différentiel

En 1963, le météorologue Edward Lorenz propose de modéliser des phénomènes météorologiques par le système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \sigma\big(y(t) - x(t)\big) \\ \dfrac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t} = \rho x(t) - y(t) - x(t)z(t) \\ \dfrac{\mathrm{d}z(t)}{\mathrm{d}t} = x(t)y(t) - \beta z(t) \end{cases}$$

La courbe obtenue pour σ = 10, ρ = 28 et β = $\frac{8}{3}$ est appelé l'attracteur de Lorenz. Pour résoudre ce système en Python à l'aide de la fonction odeint, on l'écrit sous la forme $Y' = f(Y, t)$, avec Y = (x, y, z) = [Y[0], Y[1], Y[2]] et on procède comme suit :

```
def f(y,t):
    sigma,rho,beta=10,28,8/3
    return [sigma*(y[1]-y[0]),rho*y[0]-y[1]-y[0]*y[2],y[0]*y[1]-beta*y[2]]
# Résolution du système différentiel
T=np.linspace(0,50,10000)
D=odeint(f,[1,0,0],T)          # tester avec différentes conditions initiales

# Représentation graphique, avec ajout d'un axe 3D
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')

# Grâce aux trois lignes précédentes, plot accepte 3 coordonnées.
plt.plot(D[:,0],D[:,1],D[:,2])
```

Activité 2 - Modèle proie-prédateur

Les équations de Lotka-Volterra sont couramment utilisées pour décrire la dynamique de systèmes biologiques dans lesquels un prédateur et sa proie interagissent. Elles ont été proposées indépendamment par Alfred James Lotka en 1925 et Vito Volterra en 1926.
Ce système d'équations est classiquement utilisé comme modèle pour la dynamique du lynx et du lièvre des neiges, pour laquelle de nombreuses données de terrain ont été collectées sur les populations des deux espèces par la Compagnie de la baie d'Hudson au XIX^{e} siècle.

Soit x l'effectif des proies en fonction du temps t,
y l'effectif des prédateurs en fonction du temps,
et les paramètres α, β, γ, δ réels strictement positifs avec
α le taux de reproduction des proies,
βy le taux de mortalité des proies,
γ le taux de mortalité des prédateurs,
δx le taux de reproduction des prédateurs

Les équations de Lotka-Volterra s'écrivent :

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = x(t)\big(\alpha - \beta y(t)\big) \\ \dfrac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t} = -y(t)\big(\gamma - \delta x(t)\big) \end{cases}$$

1. Ecrire une fonction proiepredateur(x0, y0, a, b, c, d, $tmax$, n) utilisant la méthode d'Euler et traçant les courbes de x et de y en fonction du temps t (a, b, c, d remplacent α, β, γ, δ en Python).
On la testera avec les valeurs des paramètres
α = 1, β = 0,03, γ = 0,4, δ = 0,01, t_{max} = 50 ans
et des nombres initiaux de lièvres et de lynx de l'ordre de 20 (en milliers).

2. Représenter maintenant la courbe paramétrée ($x(t)$, $y(t)$) sur un cycle pour différentes valeurs de (x_0, y_0).

3. Reprendre les questions précédentes en utilisant la fonction odeint.

Activité 3 – Oscillateur harmonique amorti (ED d'ordre 2)

On considère l'équation : $\ddot{s}(t) + \frac{2}{\tau}\dot{s}(t) + \omega_0^2 s(t) = 0$ avec les conditions initiales $s(0) = 5$ et $\dot{s}(0) = 0$ et les paramètres $\omega_0 = 3\pi\ \mathrm{s}^{-1}$ et $\tau = 0{,}5$ s.

1. Méthode d'Euler (appliquée deux fois)

<u>Principe</u> : On considère une subdivision $(t_i)_{0\leq i\leq n}$ d'un intervalle [0, t_{max}] et $h = \frac{t_{max}}{n}$. On cherche une solution sous la forme $(s_i)_{0\leq i\leq n}$ où $s_i = s(t_i)$.
La méthode d'Euler consiste à approcher $\dot{s}(t_i)$ par $\frac{s_{i+1}-s_i}{h}$. On peut estimer de même $\ddot{s}(t_i)$. L'équation différentielle donne alors une relation entre s_i, s_{i+1} et s_{i+2}.

En utilisant cette méthode, écrire une fonction oscillateur($tmax$, n) qui trace la courbe intégrale de cette équation différentielle.

2. Utilisation de odeint (méthode d'Euler appliquée à un système)

En posant $v = \dot{s}$, écrire l'équation précédente sous la forme d'un système de deux équations différentielles du premier ordre, puis résoudre ce système en utilisant la fonction odeint. Tracer la courbe représentative de s.