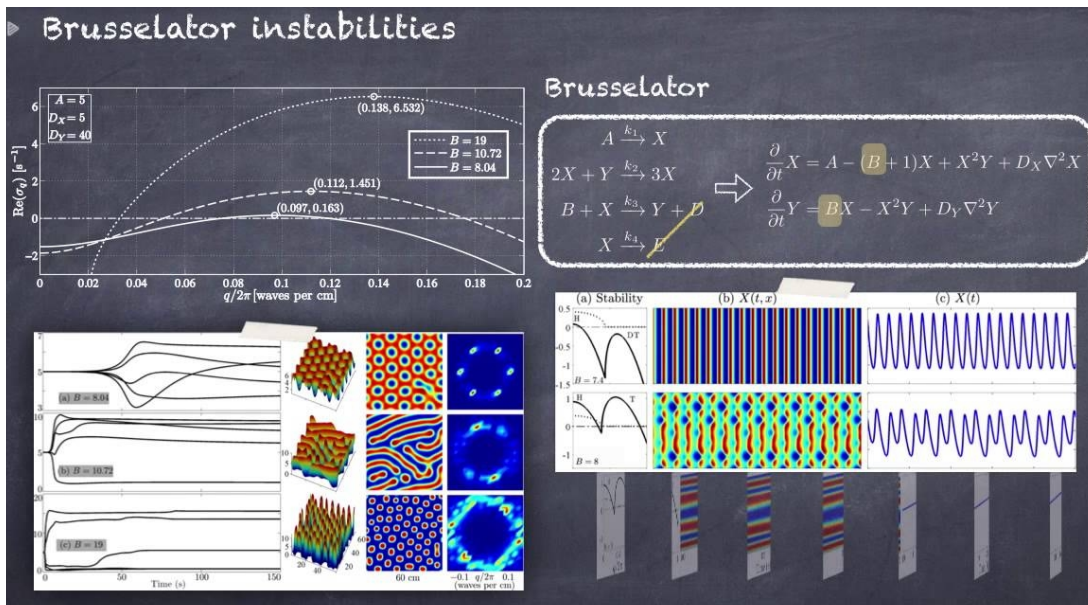


## CINÉTIQUE CHIMIQUE



**Etudiants :**

Chaïma IBRAHIM

Florian MAÏS

Naima YORO

**Enseignant-responsable du projet :**

Bernard GLEYSE

*Cette page est laissée intentionnellement vierge.*

Date de remise du rapport : **17/06/2019**

Référence du projet : **STPI/P6/2019 – 09**

Intitulé du projet : **Cinétique Chimique**

Type de projet : **Biblio, modélisation**

Objectifs du projet :

Durant notre projet, nous avons étudié le modèle du Brusselator, qui est un type de modélisation de réactions non linéaires et oscillantes. Plus précisément, le Brusselator est une « réaction chimique pouvant être modélisé par des équations différentielles ».

D'une part, notre objectif a été d'étudier et d'analyser l'évolution des concentrations de deux substances pendant la réaction, que ce soit en fonction du temps et/ou en fonction de l'espace. Et d'autre part, le but étant d'analyser la stabilité des concentrations. L'ajout du terme de diffusion dans les équations caractéristiques des réactions a été un enjeu majeur de ce projet, nous y avons travaillé dessus pour voir comment se comporte le modèle du Brusselator avec deux concentrations ou plus . Finalement, il nous a été demandé de réaliser ces analyses numériquement et mathématiquement.

Mots-clefs du projet (4 maxi) : **Brusselator ; modélisation mathématique ; schéma numérique ; stabilité**

## TABLE DES MATIERES

1.Introduction.....	6
2.Méthodologie / Organisation du travail.....	7
3.Travail réalisé et résultats.....	8
3.1.Modèle du Brusselator.....	8
3.1.1.Modélisation mathématique.....	8
3.1.2.Point d'équilibre.....	10
3.1.3.Critère de stabilité.....	12
3.2.Interprétation numérique.....	13
3.2.1.Analyse graphique.....	14
3.2.1.1.Comparaison des résultats obtenus avec ceux du rapport de l'an dernier.....	14
3.2.2.Résultats obtenus avec 3 concentrations et une vitesse d'injection.....	15
3.2.3.Analyse des schémas numériques.....	17
3.2.4.Comparaison de l'évolution de la concentration dans le temps avec et sans le terme de diffusion.....	19
4.Conclusions et perspectives.....	20
5.Bibliographie.....	21
6.Annexes.....	25
6.1.Programmes informatiques.....	25
6.1.1.Python.....	25
6.1.2.En C.....	27
6.2.Autres schémas numériques et graphiques.....	32
6.3.Propositions de sujets de projets (en lien ou pas avec le projet réalisé).....	35

## NOTATIONS, ACRONYMES

$\frac{\partial \vec{C}(t,x,y)}{\partial t}$  : dérivée partielle par rapport au temps de la concentration

$\Delta$  : delta, le terme mathématique Laplacien

[A] : Concentration de A

$\dot{x}$  : vitesse de x

$U_{ij}^n$  : concentration de U au temps n, à l'abscisse i et ordonnée j

mu : vitesse d'injection des réactifs

EDO : Equations Différentielles Ordinaires

EDP : Equations Différentielles Partielles

## 1. INTRODUCTION

Tout d'abord, nous allons présenter la cinétique chimique en quelques mots.

En effet, la cinétique chimique consiste en l'étude de l'évolution temporelle d'une réaction, c'est-à-dire d'où son nom, la vitesse de réaction. On peut définir la durée de la réaction soit à l'œil nu car la réaction se réalise vite, ou utiliser d'autres méthodes pour la déterminer, comme la spectrophotométrie, conductimétrie, etc... Ou bien encore dans notre cas, l'étude peut se faire numériquement, avec l'utilisation de programmes informatiques. Comme l'ayant énoncé précédemment, notre étude se basera sur le terme de diffusion de réaction.

Au 19<sup>ème</sup> siècle, en 1855 le physicien Adolf Fick introduit une loi au départ empirique sur la diffusion stipulant que  $j = -D(\partial c/\partial x)$ , en se basant sur l'équation de la chaleur énoncée par J. Fourier quelques années avant. Plus tardivement, cette loi sur la diffusion sera justifier et généraliser pour tout type de système avec les travaux de James Clerk Maxwell et Josef Stefan. (voir [1])

La diffusion désigne « la tendance naturelle d'un système à rendre uniforme le potentiel chimique de chacune des espèces chimiques qu'il comporte. C'est un phénomène de transport irréversible qui tend à homogénéiser la composition du milieu. Ce processus se fait par le mouvement du milieu le plus concentré vers le milieu le moins concentré », lorsque la température et pression sont constantes.

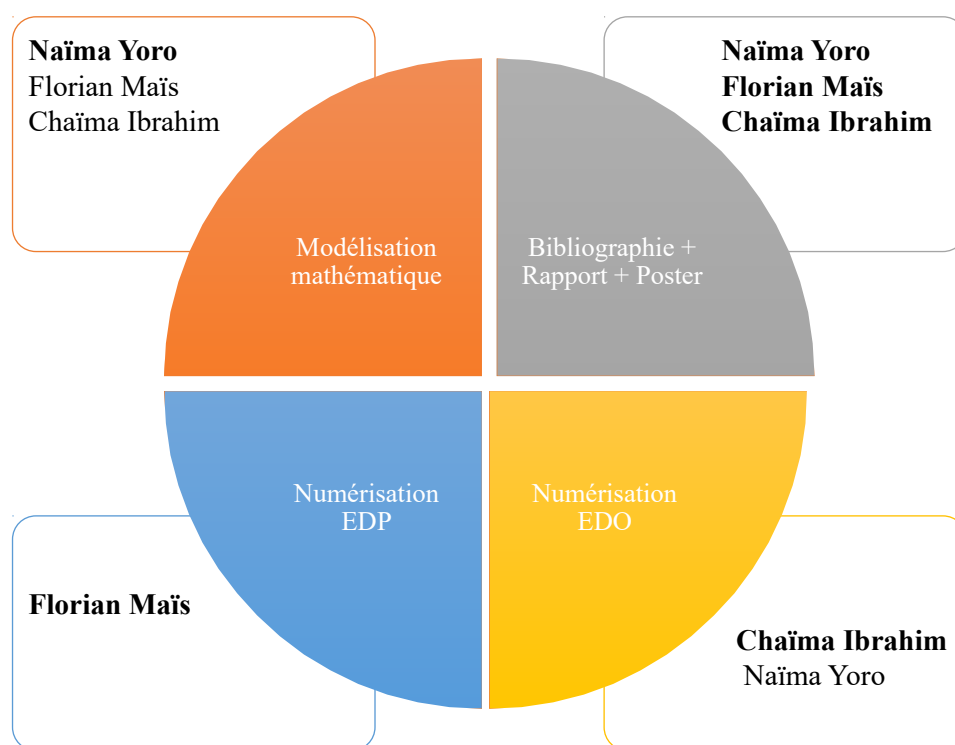
Dans ce projet, nous chercherons à étudier cette diffusion dans un système 2D (x, y, t) (c'est-à-dire deux variables dans l'espace, et une dans le temps).(voir [2] et [4])

En premier lieu, il s'agira de comprendre le fonctionnement mathématique du modèle du Brusselator. Dans un deuxième temps, avec l'ajout du terme de diffusion, nous analyserons numériquement l'évolution du système de réactions chimiques (Brusselator) dans le temps avec des conditions initiales choisies. Ensuite, nous déterminerons et étudierons les points d'équilibre d'un point de vue mathématique et informatique. Enfin, il s'agira de comparer nos résultats avec ceux de l'an dernier et d'étudier la stabilité des graphiques obtenus.

## 2. MÉTHODOLOGIE / ORGANISATION DU TRAVAIL

Tout d'abord, le modèle du Brusselator est en lien avec la chimie, c'est pourquoi nous l'avons choisi. En effet, nous avons en commun une même spécialité qui est CFI. D'autre part, nous ne connaissions aucunement l'existence de ce modèle. Ainsi, nous nous sommes posés de nombreuses questions (Qu'est-ce que c'est ? En quoi sert-il ? Comment fonctionne-t-il ? Etc...).

A l'aide des références bibliographiques, nous avons pu comprendre le sujet et ses objectifs. Malheureusement, au cours de notre projet, un camarade a abandonné L'INSA. Ainsi, n'étant plus que 3, voici comment nous nous sommes départagés le travail :



Pour la partie mathématique, nous avons exploitées les équations différentielles du système de deux concentrations  $U$  et  $V$ , ainsi que leurs expressions sous forme de suite. Ensuite, nous avons déterminé le point d'équilibre, enfin la condition de stabilité.

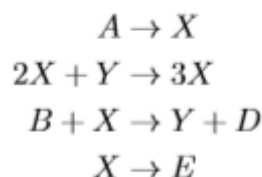
Pour la partie d'analyse numérique et de programmation, cela a été une étape un peu fastidieuse. En effet, bien que le point positif de notre groupe soit la chimie et les mathématiques, il subsiste un point négatif « La programmation ». En effet, aucun membre du groupe n'a de facilités dans ce domaine. Cependant, nous avons doublé de réflexion et de recherches afin d'assimiler rapidement de nouvelles notions comme Python. Ainsi, à l'aide des modifications de programmes de l'an dernier et ceux donnés par M. Gleyse (Les EDP et EDO), nous avons obtenu des graphiques représentant les concentrations en fonction du temps, et/ou une concentration en fonction de l'autre. Nous avons trouvé les concepts chimiques du modèle du Brusselator en nous aidant des graphiques obtenus dans le rapport de l'an dernier.

### 3. TRAVAIL RÉALISÉ ET RÉSULTATS

#### 3.1. Modèle du Brusselator

##### 3.1.1. Modélisation mathématique

Pour commencer, le modèle du Brusselator se base sur un système d'équation de réactions chimiques qui est ([1] et [4]) :



Durant ce projet, nous nous sommes concentrés sur les inconnues X et Y respectivement appelés par la suite U et V dans notre cas. Ce sont les concentrations de ces variables que nous avons étudié en fonction du temps. Pour nous faciliter les calculs et l'écriture des équations suivantes, nous avons pris le cas le plus simple  $k = 1$ . Après avoir établi les équations de vitesse de chaque réaction du système, ci-dessus, qui sont de la forme  $r = k \times [A]^{\lambda_i}$  (avec k une constante déterminée, et  $[A]^{\lambda_i}$  la concentration A et son ordre partiel). Nous avons établi un système d'équations différentielles, dont la formule générale pour un Brusselator est :  $\frac{\partial \vec{C}(t, x, y)}{\partial t} = F(\vec{C}) \cdot D \cdot \Delta \cdot \vec{C}$  avec F(C) la réaction (fonction de concentration), D le terme de diffusion, delta le terme Laplacien, (x, y) les variables de l'espace, et t pour le temps. Ainsi, nous obtenons ce système ci-dessous :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v) + D_1 \Delta u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v) + D_2 \Delta v \end{cases}$$

De ce fait, la loi de Van't Hoff nous a permis d'écrire :

$\begin{aligned} A &\rightarrow X \\ 2X + Y &\rightarrow 3X \\ B + X &\rightarrow Y + D \\ X &\rightarrow E \end{aligned}$	Vitesses de chaque réaction : $V_1 = k_1[A]$ $V_2 = k_2[X]^2[Y]$ $V_3 = k_3[B][X]$ $V_4 = k_4[X]$
--	---

Or comme  $k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = 1$ , on obtient comme vitesses de productions :

$$V_A = -V_1; V_X = V_1 - 2V_2 - V_3 - V_4 + 3V_2; V_B = -V_3; V_Y = -V_2 + V_3; V_E = V_4$$

1. Remplaçons les vitesses de productions par leurs expressions :



Ainsi, nous avons pour la vitesse de  $u$  :  $\dot{u} = \dot{x} = dx/dt = V_x = [A] - 2[X]^2[Y] - [B][X] + 3[X]^2[Y]$ . Cependant, dans le rapport de l'année dernière,  $\dot{x}$  est égale à  $\dot{x} = 1 - (b+1)[X] - [X]^2[Y]$ . Ainsi, par identification, la concentration de  $[A] = 1$  et la concentration de  $[B] = b+1$ .

Même méthode pour la vitesse  $v$  :  $\dot{v} = \dot{y} = dy/dt = -[X]^2[Y] + [B][X]$ . Par identification, avec l'expression de  $\dot{y}$ , où  $\dot{y} = -[X]^2[Y] + b[X]$ , nous trouvons que la concentration de A est  $[A] = 1$  et la concentration de B est  $[B] = b$ .

Ainsi, on a bien que  $f(u,v) = a + u^2v - (b+1)u$  ; et  $g(u,v) = -u^2v + bu$ , avec  $(a,b)$  des constantes.

Et nous savons aussi que le terme de diffusion  $D$  est égal à  $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ , de même pour  $v$ . Ces formules sont obtenues avec la loi de Van't Hoff et les vitesses nettes de production ( $r$ ).

2. Néanmoins, étant donné que nous devons faire une étude de la concentration de  $u$  et  $v$  en fonction du temps et de l'espace, nous avons dû analyser en fonction de trois variables. C'est pourquoi, nous avons une sorte de « maillage » (grille) graphiquement. Pour pouvoir déterminer les valeurs des concentrations, sur cette maille, nous devons faire une approximation grâce aux dérivées secondes. Ainsi nous avons défini la variable  $t_n$  pour le temps avec  $n$  allant de 0 à  $n$ ;  $x_i$  et  $y_j$  respectivement pour les abscisses et les ordonnées dans l'espace. De ce fait, pour pouvoir trouver les formules de  $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$  et  $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ , nous avons utilisé des propriétés vues en M5, comme le développement de Taylor :

$$\text{On sait que : } U(t_n, x_{i+1}, y_j) - U(t_n, x_i, y_j) = \frac{\partial u}{\partial x}(t_n, x_i, y_j)h_1 + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_i, y_j)\frac{h_1^2}{2} \quad \text{et que}$$

$$U(t_n, x_{i-1}, y_j) - U(t_n, x_i, y_j) = \frac{\partial u}{\partial x}(t_n, x_i, y_j)(-h_1) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_i, y_j)\frac{(-h_1)^2}{2}$$

Nous rappelons que la formule de Taylor au point  $(x,y)$  est (voir [43]):

$$f(x+h ; y+k) \simeq f(x ; y) + h \frac{\partial f}{\partial x}(x,y) + k \frac{\partial f}{\partial y}(x,y) + 1/2 \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) h^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) hk + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) k^2 \right) + (h^2+k^2)\epsilon(h,k).$$

Ainsi, pour obtenir,  $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_i, y_j)$  nous avons simplement réduit en additionnant, les deux équations suivantes:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_i, y_j) = \frac{U(t_n, x_{i+1}, y_j) + U(t_n, x_{i-1}, y_j) - 2U(t_n, x_i, y_j)}{h_1^2}$$

et même processus pour la variable  $y$ , ce qui nous fait :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(t_n, x_i, y_j) = \frac{U(t_n, x_i, y_{j+1}) + U(t_n, x_i, y_{j-1}) - 2U(t_n, x_i, y_j)}{h_2^2}$$

On fera de même pour la concentration  $v$  sur les deux variables de l'espace.

Maintenant passons à la dérivée partielle selon le temps.

On sait que  $\frac{\partial u}{\partial t} \simeq \frac{u(x_i, y_j, t_{n+1}) - u(x_i, y_j, t_n)}{h}$ , et à partir de maintenant on notera  $u(x_i, y_j, t_n) \approx U_{i,j}^n$

Donc, avec les formules de la page précédente, on en déduit que :

$$\frac{U_{ij}^{n+1} - U_{ij}^n}{h} \approx a + (U_{i,j}^n)^2 * V_{i,j}^n - (b+1) * U_{i,j}^n + D_1 \left( \frac{(u_{(i+1,j)}^n - u_{(i-1,j)}^n - 2u_{(i,j)}^n)}{(h_1)^2} + \frac{(u_{(i,j+1)}^n - u_{(i,j-1)}^n - 2u_{(i,j)}^n)}{(h_2)^2} \right)$$

$$\frac{v_{ij}^{n+1} - v_{ij}^n}{h} \approx -(u_{i,j}^n)^2 * V_{i,j}^n + (b) * U_{i,j}^n + D_2 \left( \frac{(v_{(i+1,j)}^n - v_{(i-1,j)}^n - 2v_{(i,j)}^n)}{(h_1)^2} + \frac{(v_{(i,j+1)}^n - v_{(i,j-1)}^n - 2v_{(i,j)}^n)}{(h_2)^2} \right)$$

Ainsi, nous obtenons le système d'équation suivant :

$$\begin{cases} u_{ij}^{n+1} \simeq h * \left( a + (U_{ij}^n)^2 * V_{ij}^n - (b+1) * U_{ij}^n + D_1 \left( \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n - 2U_{ij}^n}{h_1^2} + \frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n - 2U_{ij}^n}{h_2^2} \right) \right) + U_{ij}^n \\ v_{ij}^{n+1} \simeq h * \left( -(U_{ij}^n)^2 * V_{ij}^n + b * U_{ij}^n + D_2 \left( \frac{V_{i+1,j}^n - V_{i-1,j}^n - 2V_{ij}^n}{h_1^2} + \frac{V_{i,j+1}^n - V_{i,j-1}^n - 2V_{ij}^n}{h_2^2} \right) \right) + V_{ij}^n \end{cases}$$

A présent, nous avons imposé les conditions initiales, ainsi, nous pouvons en déduire les valeurs des concentrations de U et V en fonction du temps et de l'espace.

### 3.1.2. Point d'équilibre

Effectivement, le point d'équilibre signifie que la vitesse de production reste constante, donc lorsque  $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ .

$$\text{Soit lorsque : } \begin{cases} a + u^2 v - (b+1)u = 0 \\ -u^2 v + bu = 0 \end{cases}$$

$$\text{Et après résolution on obtient : } \begin{cases} u = a \\ v = \frac{b}{a} \end{cases}$$

Avec ceci, on va pouvoir étudier aussi la stabilité des systèmes et des schémas numériques.

Tout d'abord, pour étudier sa stabilité, nous allons créer une matrice jacobienne du système.

On pose donc  $K = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2uv - b - 1 & u^2 \\ -2uv + b & -u^2 \end{pmatrix}$ . Ainsi, au point d'équilibre on obtient :

$K_{eq} = K(a ; b/a) = \begin{pmatrix} b-1 & a^2 \\ -b & -a^2 \end{pmatrix}$ , et pour enfin déterminer la stabilité, nous devons trouver les valeurs propres de cette matrice. En appliquant, nos connaissances de M4, nous obtenons le déterminant (sous forme polynomiale) suivant :  $\text{Det} (K_{eq} - \lambda Id_2) = \begin{vmatrix} b-1-\lambda & a^2 \\ -b & -a^2-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + \lambda(1+a^2-b) + a^2 = P(\lambda)$

En résolvant  $P(\lambda) = 0$ , on trouve aussi que le delta de cette équation est négatif par l'absurde et nous trouvons aussi deux valeurs de  $\lambda$  qui sont :

$$\lambda = \frac{-(1+a^2-b) \pm i \sqrt{-(1+a^2-b)^2 + 4a^2}}{2}$$

Résolution de ce polynôme caractéristique grâce au critère de Routh-Hurwitz :  $P(\lambda) = \lambda^2 + \lambda(a^2 - b + 1) + a^2 = a_2 \lambda^2 + a_1 \lambda + a_0$

Construction du tableau des coefficients de Routh-Hurwitz et étude du critère : Ici le degré de P vaut 2 ( $n=2$ ) qui est paire ce qui donne le tableau suivant :

$a_2$	$a_0$
$a_1$	$a_{-1}$
$b_{n-2}$	

Calcul du coefficient  $b_{n-2}$  :  $b_{n-2} = \frac{-1}{a_{n-1}} * (a_n \ a_{n-1} \ a_{n-2} \ a_{n-3} \ )$

$$= \frac{-1}{(a^2 - b + 1)} * \begin{pmatrix} a_2 & a_0 \\ a_1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{-1}{(a^2 - b + 1)} * -a_1 * a_0$$

$$= \frac{-1}{(a^2 - b + 1)} * -a^2$$

$$= (-a^2 + b - 1) * -a^2$$

Ce résultat doit être  $\geq 0$  vu que tous les autres coefficients sont positifs pour vérifier le critère de Routh-Hurwitz et ainsi assurer la stabilité du système. Ce qui implique que :  $(b - a^2 - 1) \leq 0$  donc  $b \leq a^2 + 1$ .

Ainsi lorsque  $b > a^2 + 1$  nous nous retrouvons dans le cas d'un cycle limite, le système n'est plus stable. Grâce à ces résultats, nous allons pouvoir illustrer la stabilité des systèmes à travers des schémas numériques.

### 3.1.3. Critère de stabilité

A présent, nous allons chercher un critère de stabilité pour notre système. Comme l'an dernier, pour pouvoir trouver ce fameux critère, que ce soit avec ou sans le terme de diffusion, il nous faut utiliser le développement de Taylor au voisinage du point d'équilibre. Ainsi, par la suite nous allons poser  $f(u; v) = \dot{u}$  et  $g(u; v) = \dot{v}$ . Donc, on obtient par le développement de Taylor :

$$\frac{\partial \vec{C}(t, x, y)}{\partial t} = F(\vec{C}) \cdot D \cdot \Delta \cdot \vec{C}$$

Et ceci revient sous forme de matrices à :

$$\begin{pmatrix} f(u; v) - f(u_{eq}; v_{eq}) \\ g(u; v) - g(u_{eq}; v_{eq}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix}_{eq} * \begin{pmatrix} u - u_{eq} \\ v - v_{eq} \end{pmatrix}$$

Ensuite, pour paraître plus logique, nous allons poser

$$\dot{\vec{c}} = \begin{pmatrix} f(u; v) - f(u_{eq}; v_{eq}) \\ g(u; v) - g(u_{eq}; v_{eq}) \end{pmatrix} \text{ pour signifier qu'il s'agit des concentrations,}$$

$$K(u_{eq}; v_{eq}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix}_{eq} \text{ et enfin } \vec{c} = \begin{pmatrix} u - u_{eq} \\ v - v_{eq} \end{pmatrix}$$

De plus nous savons grâce à la M4 et M9 que K est diagonalisable, et donc on peut dire que  $K = PDP^{-1}$  avec D la matrice diagonale, et P la matrice de passage.

$$\text{Ainsi : } \dot{\vec{c}} = PDP^{-1} * \vec{c} \Leftrightarrow P^{-1} \dot{\vec{c}} = DP^{-1} * \vec{c}$$

$$\text{On pose ici } \vec{W} = P^{-1} * \vec{c} \text{ avec } W = \begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix} \text{ et on en déduit } \begin{pmatrix} \dot{w} \\ \dot{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 w \\ \lambda_2 z \end{pmatrix}$$

Et cela nous amène au système suivant :

$$\begin{pmatrix} \dot{w} - \lambda_1 w = 0 \\ \dot{z} - \lambda_2 z = 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} w(t) = w_0 e^{\lambda_1 t} \\ z(t) = z_0 e^{\lambda_2 t} \end{pmatrix}$$

Ceci est un extrait inspiré de celui de l'année dernière. ([31])

Or, on sait que les concentrations de u et v tendent vers 0 lorsque le temps tend vers  $\infty$ , car u (respectivement v) tend vers  $u_{eq}$  ( $v_{eq}$ ). Donc, cela signifie que W tend aussi vers le vecteur nul. Et, pour que les deux composantes w(t) et z(t) soient nulles, il faut que  $e^{\text{Re}(\lambda_1)t}$  et  $e^{\text{Re}(\lambda_2)t}$  tendent vers 0 en  $+\infty$ . Cela prouve que le critère de stabilité est dû à la négativité des parties réelles des valeurs propres de la matrice jacobienne trouvée avant. Donc, pour obtenir un point d'équilibre il faut  $-(1 + a^2 - b) \leq 0$  soit  $b - 1 - a^2 \leq 0$ .

Finalement, nous obtenons comme système d'équations différentielles en fonction de 2 variables:

$$\dot{u} = a + u^2v - (b+1)u$$

$$\dot{v} = -u^2v + bu$$

### 3.2. Interprétation numérique

Comme l'ayant dit en début de rapport, nous avons adapté nos systèmes d'équations différentielles, nos points d'équilibre etc... sous forme de programme en langage Python ou C. Ainsi, comme nous n'avons pas étudié le Python dans notre cursus scolaire, nous nous sommes aidés d'un programme que M.Gleyse nous a donné. Même, si nous avons vu au semestre précédent, la résolution des systèmes d'équations linéaires en projet maths en Pascal, nous avons sollicité l'aide de notre professeur. Il a fallu vérifier que les équations soient correctes, faire attention aux variables, les valeurs attribuées à ces dernières. Si on met un pas de temps énorme, le temps de calcul pouvait être très long. Contrairement à ce qui est enseigné en M8, le python ici devait être traité sur le logiciel Spyder. On peut y éditer du texte, compiler et exécuter ce même texte dans une console IPython incluse dans ce même logiciel. De plus, on pouvait aussi écrire les programmes sur Geany, les deux étaient possibles. Spyder a été pour nous une nouvelle application à utiliser.

Ainsi, le programme donné par M.Gleyse que nous avons modifié par la suite se décomposait en deux parties : une partie sur l'EDO du brusselator ou une fonction brussel2 qui permettent toutes les deux de calculer les concentrations des composants U et V en fonction de leur position dans l'espace, et dans le temps. Il a fallu sauvegarder ces valeurs dans un fichier qui s'exécute sous forme de graphique. Et, la deuxième partie est constituée du script permettant d'exécuter le programme.

En plus de ceci, nous avons dû rajouter un tableau de valeurs en essayant d'afficher trois colonnes avec la concentration de U et de V, et le temps associé. Après plusieurs essais de ce programme, en ayant modifié les valeurs des pas de temps, d'espace, ou les concentrations initiales de U et de V, nous obtenons plus ou moins le même résultat, mais avec ou sans stabilité. En effet, nous avons obtenu des cycles limites ou des courbes qui tendent vers ce fameux point d'équilibre. Le cycle limite s'explique par l'instabilité, c'est-à-dire lorsque  $\mu \leq \frac{9-\sqrt{17}}{4} = 1,2192$ .

En utilisant, les programmes du rapport de l'année dernière qui sont basés sur la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4. Cela, nous a permis d'obtenir une bonne approximation de notre système d'équations différentielles, comme ci-dessous :

$$y_{n+1} = y_n + (h/6)(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3) \text{ où}$$

$$k_0 = f(t_n, y_n)$$

$$k_1 = f(t_n + h/2, y_n + h/2 * k_0)$$

$$k_2 = f(t_n + h/2, y_n + h/2 * k_1)$$

$$k_3 = f(t_n + h, y_n + h)$$

Nous avons apporté quelques modifications au niveau du système d'équations différentielles, notamment la valeur du coefficient « a » qui ne vaut pas forcément 1 dans notre étude.

Ainsi, les modifications des programmes ont laissé place à la partie analyse et interprétation graphique. En effet, nous avons pu tracer les courbes des concentrations de U, V et W, en fonction de U ou du temps. Tout cela avec des conditions initiales des valeurs de  $u_0$ ,  $v_0$ ,  $w_0$  et  $\mu$ .

### 3.2.1. Analyse graphique

#### 3.2.1.1. Comparaison des résultats obtenus avec ceux du rapport de l'an dernier

Pour nous assurer de la cohérence de nos résultats à l'aide du programme EDO, nous les avons souvent comparés avec ceux du rapport de l'an dernier. C'est le cas, par exemple des tracés de courbes de la concentration de V en fonction de U. En effet, avec les mêmes valeurs de  $U_0$  et  $V_0$ , nous obtenons les mêmes courbes que celles de l'an passé [31]:

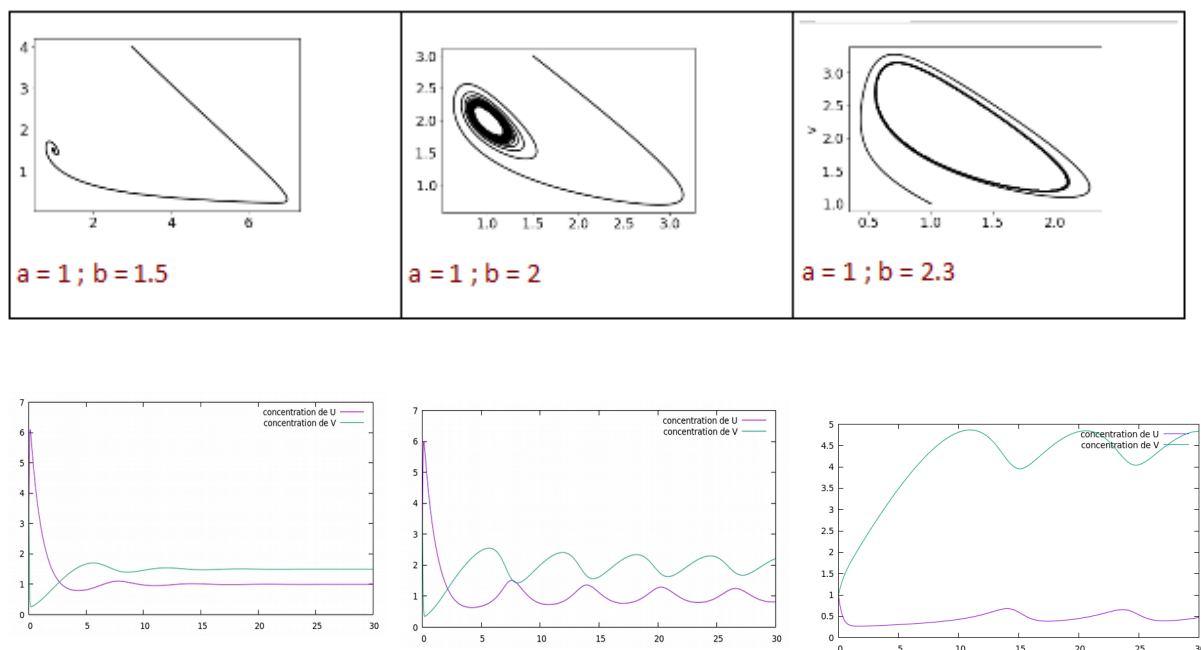


Illustration 1: Concentrations de V et U en fonction du temps et portraits de phase de  $V(U)$

Le premier graphique possède un point d'équilibre stable de coordonnées  $(1;1.5)$ . Le deuxième graphique possède un point d'équilibre instable de coordonnées  $(1;2)$ , c'est un cycle limite oscillant, plus précisément, une bifurcation de Hopf. Car, nous avons  $(b=2) \leq a^2+1 = 2$  qui correspond justement au cas critique. Enfin, le troisième graphique du système de coordonnées  $(1;2.3)$  ne possède pas non plus de point d'équilibre stable. Effectivement, on a  $(b = 2.3) > a^2 + 1 = 2$ , ce qui nous donne aussi un cycle limite et oscillant autour du point d'équilibre stable mais ayant une plus grande amplitude comparé à l'autre. De plus comme le montre l'évolution des concentrations en fonction du temps, en présence de cycle limite nous avons une évolution périodique. A contrario nous avons une convergence vers le point d'équilibre.

### 3.2.2. Résultats obtenus avec 3 concentrations et une vitesse d'injection

#### Autre hypothèse : Variation de la concentration [B]

- Modélisation mathématique:

Après avoir obtenues les graphiques des concentrations de U et V, nous avons introduits une troisième concentration W ayant une vitesse d'injection  $\mu$  dans son expression. En effet, nous avons fait varier la concentration de [B] dans le système. Ainsi, nous l'avons injecté avec une vitesse d'injection  $\mu$ . Pour déterminer, le système d'équations différentielles avec cette hypothèse, nous avons appliqué la loi de Vant Hoff (vue précédemment avec  $[B]=b+1$  constante). Cette fois ci, nous considérerons [B] non constante.

Nous obtenons donc, le système d'équations différentielles suivant en fonction de 3 variables:

$$\dot{u} = \dot{x} = d \frac{[x]}{dt} = a + u^2 v - (w + 1)u \quad \text{avec } (a : \text{cste})$$

$$\dot{v} = \dot{y} = d \frac{[y]}{dt} = -u^2 v + wu$$

$$\dot{w} = \dot{b} = d \frac{[B]}{dt} = -wu + \mu u \quad \text{avec } (\mu : \text{vitesse d'injection})$$

#### Point d'équilibre:

Pour trouver le point d'équilibre qui est  $(1, \mu, \mu)$ , nous nous sommes aidé du rapport de l'année dernière. Le point d'équilibre  $(1, \mu, \mu)$  est stable si seulement  $\mu \leq 1,2192$  ( cela a été trouvé grâce à la méthode Routh-Hurwitz).

- Modélisation graphique:

Dans un premier temps, à l'aide du programme en C, nous avons pu tracer la concentration de V en fonction de U. Puis la concentration de W en fonction de U. Enfin la concentration de U, V et W en fonction du temps. Tous cela pour différentes valeurs de  $u_0, v_0, w_0$  et  $\mu$ .

Pour  $\mu = 1.52$

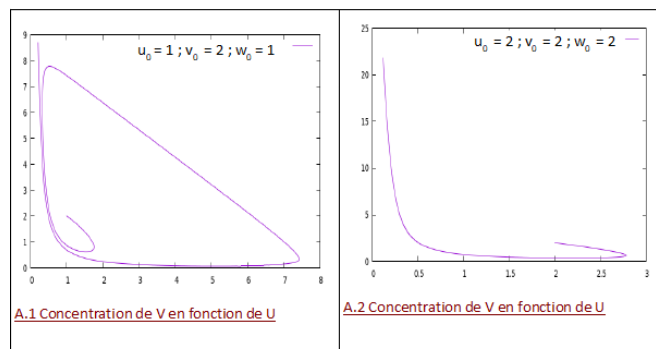


Illustration 2: Autres portraits de phase de  $V(U)$

On est face à deux points d'équilibres instables. En effet, puisque la valeur de ( $\mu=1.52$ ) est supérieure à la valeur limite  $\mu = 1.2192$ . De plus, on constate que la concentration de V diverge, puisque nous avons une asymptote verticale quand la concentration de U diminue.

Pour  $\mu = 0.9$

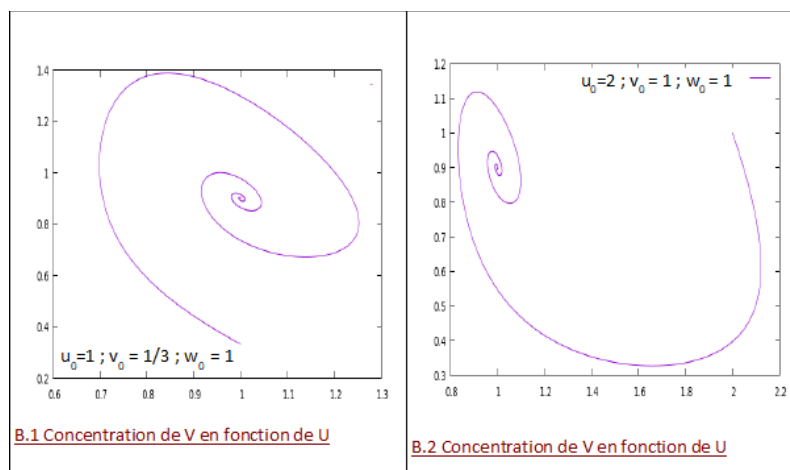


Illustration 3: Autres portraits de phase de  $V(U)$

Nous avons ici des points d'équilibres stables. En effet, puisque la valeur de  $\mu (= 0.9)$  est inférieure à la valeur limite  $\mu=1.2192$ . On constate que la concentration de V converge vers le point d'équilibre. De plus, on retrouve que les coordonnées du point d'équilibre sont bien de la forme  $(1, \mu, \mu)$  déterminées dans le rapport de l'an dernier.

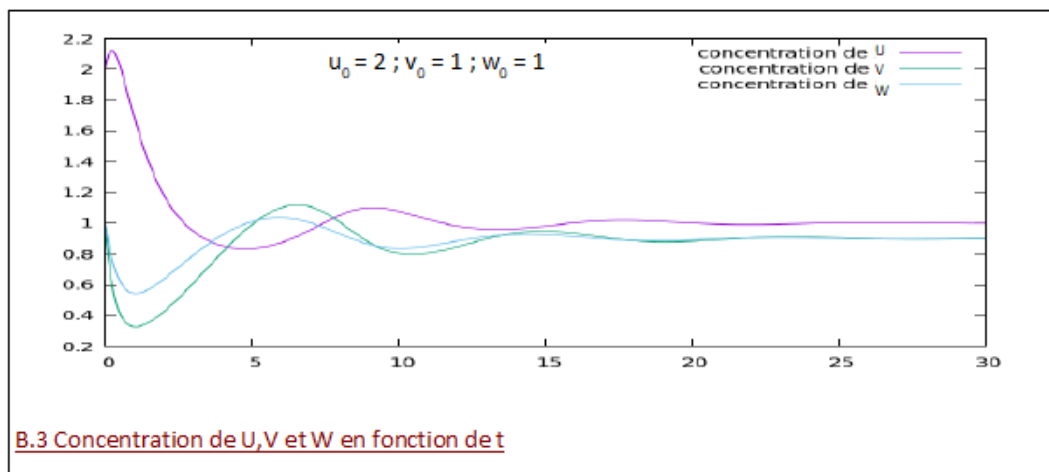


Illustration 4: Evolution des trois concentrations dans le temps



Pour  $\mu = 1.3$

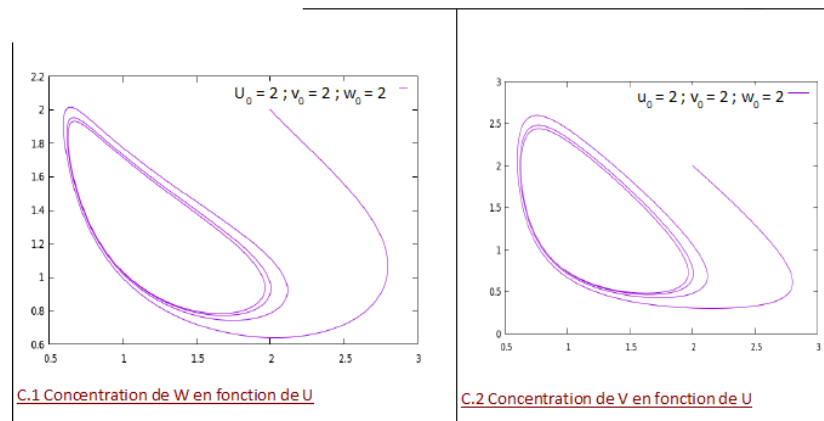


Illustration 5: Cas d'un cycle limite

On est face à deux points d'équilibres instables. En effet, puisque la valeur de ( $\mu = 1.3$ ) est légèrement supérieure à la valeur limite  $\mu = 1.2192$ . Aussi, nous constatons que les concentrations de V et W oscillent autour du point d'équilibre. L'oscillation autour du point d'équilibre est plus prononcée sur le graphique de W(U) que V(U).

Ainsi, les résultats du graphiques nous permettent de bien vérifier cette inégalité : lorsque  $\mu < 1,2192$ , nous avons un point d'équilibre stable et le point d'équilibre a pour coordonnées :  $(1; \mu; \mu)$ . Par exemple, dans le graphique **B.2** ci-dessous pour  $\mu = 0,9$ , nous avons un point d'équilibre de coordonnées  $(1; 0,9; 0,9)$ .

En revanche, deux cas se présentent lorsque nous avons  $\mu > 1,2192$ . Nous obtenons un cycle limite. En effet, soit nous sommes en présence d'une divergence (cas  $\mu = 1,52$ ) ou bien d'une oscillation autour du point d'équilibre (cas  $\mu = 1,3$ ).

Tous ces graphiques obtenus précédemment illustrent à la bifurcation de Hopf qui est un phénomène dans lequel un point fixe d'un système dynamique perd sa stabilité.

### 3.2.3. Analyse des schémas numériques

A présent, après avoir étudié le critère de stabilité pour l'EDO et EDP, nous allons pouvoir observer les schémas numériques de l'évolution des concentrations de U et V en fonction des trois variables x, y, et t.

Prenons le cas où  $a = 4,5$  et  $b = 7,5$  :

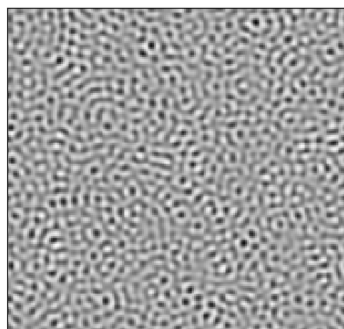


Illustration 6: Concentration de  $V = 1,93$  au point  $(x,y)$

Ainsi, on peut remarquer un début de motif sur cette première image, avec des différences de noir/blanc. Cette différence est due à la concentration du composant ici  $V$ . Lorsqu'on se situe dans des zones noires, la concentration est plus grande que dans la zone blanche. Ensuite, après un temps déterminé, nous avons pu parvenir à un schéma numérique stable, c'est-à-dire qu'à partir du temps  $t$  en question, le schéma n'évolue plus. Ainsi, après une attente de 3 minutes, nous obtenons ceci :

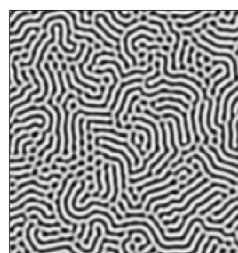


Illustration 7: Concentration de  $V = 1,48$

Et en suivant un trajet noir ou blanc, la concentration reste constante tout le long de ce dernier. Ces deux schémas ci-dessus sont le résultat de l'implémentation du terme de diffusion.

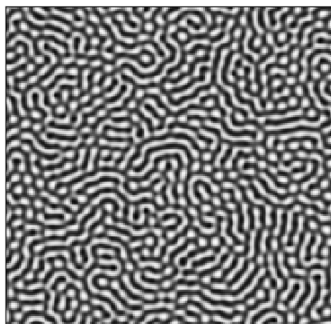


Illustration 8: Concentration de  $U$  de 6,51

Enfin, nous obtenons le résultat pour la concentration de  $U$ , qui bien évidemment, est différente de celle de  $V$ . Cet écart est dû à la différence des concentrations initiales de  $u$  et de  $v$ .

A présent, pour pouvoir comparer avec le système EDO, c'est-à-dire sans le terme de diffusion, en 2D, nous allons relater un exemple avec les paramètres suivants. Le but est de constater ce qu'il se passe, lorsque qu'on fait tendre les termes de diffusion vers 0, ici  $D_u$  et  $D_v$  valent 0.01. Comme la valeur est très petite, nous nous rapprochons du cas de l'EDO.

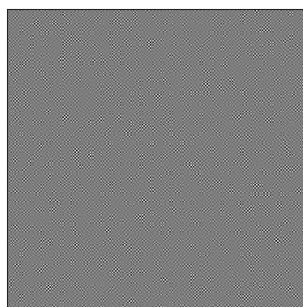


Illustration 9: Concentration de V de 1,5

Pour cet exemple, nous avons pris  $a=4.5$  et  $b=6.75$ . En effet, le terme de diffusion est quasiment inexistant, nous pouvons observer que la concentration de V, dans ce cas, est constante partout dans l'espace et dans le temps.

### 3.2.4. Comparaison de l'évolution de la concentration dans le temps avec et sans le terme de diffusion

Pour  $a = 3, b = 9$  &  $t = 20s$

Concentration de U(t) et V(t)	Concentration de U avec $D_y = 0,01$ & $[ V(20s) ] = 1,76$
-------------------------------	---

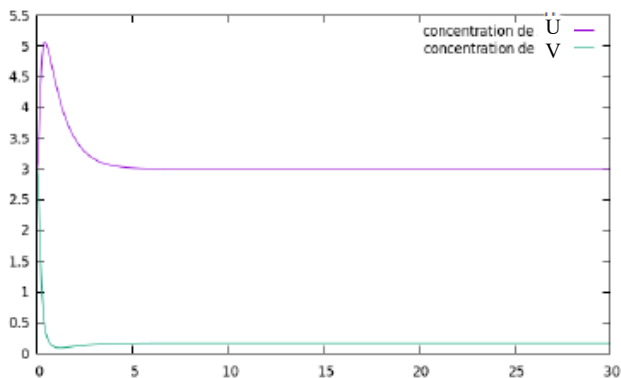


Illustration 10: Influence terme de diffusion

Sans le terme de diffusion, la concentration de V vaut 0,2 à  $t = 20s$ . Avec le terme de diffusion, la concentration de V vaut 1,76 après un temps  $t = 20s$ .

Ainsi, la concentration de V se diffuse plus vite dans le système avec le terme de diffusion. Par conséquent, le terme de diffusion influe considérablement sur la concentration de V dans le système.

#### 4. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

En conclusion de ce projet, nous avons pu étudier le modèle du Brusselator à travers l'exploitation des systèmes d'équations différentielles établis dans le rapport de l'année dernière. Ce qui nous a aussi permis, de découvrir quelques méthodes d'analyses numériques telles que la méthode Routh-Hurwitz ou encore Runge Kutta 4.

Nous avons aussi pu constater que le terme de diffusion occupe un grand rôle dans l'évolution de la concentration d'une espèce dans le temps aussi faible qu'il soit. Nous avons analysé comment et dans quelles conditions, le système est en équilibre. En effet, grâce à la loi de Van't Hoff et la méthode de Routh-Hurwitz, nous avons déterminé un cas d'équilibre stable, au dépend des conditions initiales ( $a$ ,  $b$  et  $\mu$ ). Grâce aux graphiques, nous avons pu observer comment se comporte le cycle d'un système choisi (stable ou instable).

Grâce à cet E.C. projet, nous avons pu combiner les connaissances vues en chimie et en mathématiques, ce qui nous a permis de les appliquer dans une situation concrète. Pendant ce projet, nous avons pris conscience, à quel point le travail en groupe a nécessité une bonne entente mais aussi une bonne organisation pour mener à bien le projet.

Nous avons pu établir certaines perspectives possibles pour la suite de ce projet : Il serait intéressant :

- d'analyser/ déterminer le point d'équilibre du système avec le terme de diffusion, pour cette fois-ci.
- d'étudier la limite du terme de diffusion dans le Brusselator. Par exemple, le(s) cause(s) (c'est à dire les paramètres de diffusion cinétiques) qui pourrait(ent) diminuer ou augmenter le terme de diffusion dans une réaction.
- d'approfondir l'étude des conditions de diffusion. Prendre un autre exemple de réaction chimique (faire une étude qualitative similaire).
- d'expliquer à quoi est dû le terme de diffusion? Cela pourrait être dû à des paramètres chimiques à prendre en compte.

## 5. BIBLIOGRAPHIE

### Deuxième séance de projet (27/02/19):

- [0] [file:///C:/Users/Florian/Downloads/Rapport\\_P6\\_2018\\_12%20\(8\).pdf](file:///C:/Users/Florian/Downloads/Rapport_P6_2018_12%20(8).pdf)
- [1] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Brusselator> consulté le 24 février 2019
- [2] <https://dumas.perso.math.cnrs.fr/LM206-2008-projet1.pdf> consulté le 24 février 2019
- [3] [https://www.imsc.res.in/xmlui/bitstream/handle/123456789/125/rajeev\\_mscthesi.pdf?sequence=1](https://www.imsc.res.in/xmlui/bitstream/handle/123456789/125/rajeev_mscthesi.pdf?sequence=1) consulté le 24 février 2019
- [4] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Diffusion\\_de\\_la\\_mati%C3%A8re](https://fr.wikipedia.org/wiki/Diffusion_de_la_mati%C3%A8re) consulté le 23 février 2019
- [5] [http://ressources.unisciel.fr/sillages/physique/cours\\_physique\\_1a\\_2a/res/Diffusion\\_des\\_particules.pdf](http://ressources.unisciel.fr/sillages/physique/cours_physique_1a_2a/res/Diffusion_des_particules.pdf) consulté le 24 février 2019
- [6] <http://www.math.univ-toulouse.fr/~cbesse/teaching/M2/M2Mapi3/Projet.pdf> consulté le 23 février 2019
- [7] <http://math.univ-lyon1.fr/~caldero/Cochoy-TIPE.pdf> consulté le 24 février 2019
- [8] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Lois\\_de\\_Fick](https://fr.wikipedia.org/wiki/Lois_de_Fick) consulté le 24 février 2019
- [9] [http://ressources.unisciel.fr/sillages/physique/cours\\_physique\\_1a\\_2a/res/Diffusion\\_des\\_particules.pdf](http://ressources.unisciel.fr/sillages/physique/cours_physique_1a_2a/res/Diffusion_des_particules.pdf) consulté le 23 février 2019
- [10] [https://femto-physique.fr/physique\\_statistique/diffusion-moleculaire.ph](https://femto-physique.fr/physique_statistique/diffusion-moleculaire.ph) consulté le 24 février 2019
- [11] <https://www-dimat.unipv.it/boffi/teaching/download/Brusselator.pdf> consulté le 24 février 2019
- [12] [https://books.google.fr/books?id=pj3BAgAAQBAJ&pg=PA107&lpg=PA107&dq=ETATS+STATIONNAIRE+brusselator&source=bl&ots=h8ClfjaujZ&sig=ACfU3U1frT8KKuf7SjnSdqgM8ftl\\_hjJ4w&hl=fr&sa=X&ved=2ahUKEwi8sIX13NfgAhWPAGMBHbXgDakQ6AEwAnoECAgQAQ#v=onepage&q=ETATS%20STATIONNAIRE%20brusselator&f=false](https://books.google.fr/books?id=pj3BAgAAQBAJ&pg=PA107&lpg=PA107&dq=ETATS+STATIONNAIRE+brusselator&source=bl&ots=h8ClfjaujZ&sig=ACfU3U1frT8KKuf7SjnSdqgM8ftl_hjJ4w&hl=fr&sa=X&ved=2ahUKEwi8sIX13NfgAhWPAGMBHbXgDakQ6AEwAnoECAgQAQ#v=onepage&q=ETATS%20STATIONNAIRE%20brusselator&f=false) consulté le 24 février 2019

[13] [http://uel.unisciel.fr/chimie/strucmic/strucmic\\_ch02/co/apprendre\\_ch02\\_3\\_04.html](http://uel.unisciel.fr/chimie/strucmic/strucmic_ch02/co/apprendre_ch02_3_04.html) consulté le 24 février 2019

[14] <http://calcul.math.cnrs.fr/Documents/Ecoles/2008/m2/cours-ODE-raides.pdf> consulté le 24 février 2019

[15] <http://www.cpge.eu/documents/presentations/diffusion-particules.pdf> consulté le 23 février 2019

[16] [http://cpgedupuydelome.fr/IMG/ouvrard/pdf\\_exercices/diapoT7-1-201709180926.pdf](http://cpgedupuydelome.fr/IMG/ouvrard/pdf_exercices/diapoT7-1-201709180926.pdf) consulté le 24 février 2019

[17] <http://www.techscience.com/doi/10.3970/cmcs.2014.101.113.pdf> consulté le 24 février 2019

[18] [https://www.researchgate.net/publication/279028194\\_A\\_Meshless\\_Method\\_for\\_Solving\\_the\\_2D\\_Brusselator\\_Reaction-Diffusion\\_System](https://www.researchgate.net/publication/279028194_A_Meshless_Method_for_Solving_the_2D_Brusselator_Reaction-Diffusion_System) consulté le 24 février 2019

### **Troisième séance (06/03/19):**

[19] <http://infoterre.brgm.fr/rapports/RR-40879-FR.pdf> consulté le 2 mars 2019

[20] <https://www.irisa.fr/sage/jocelyne/cours/HPC/equadif-1101.pdf> consulté le 2 mars 2019

[21] [https://webusers.imj-prg.fr/~christian.blanchet/enseignement/2008-9/ch7\\_extrema.pdf](https://webusers.imj-prg.fr/~christian.blanchet/enseignement/2008-9/ch7_extrema.pdf) consulté le 2 mars 2019

[22] <https://www.youtube.com/watch?v=zxaRwuoZh1I> consulté le 2 mars 2019

[23] [https://www.franckjeannot.com/wp-content/uploads/118\\_Reaction\\_diffusion\\_system.pdf](https://www.franckjeannot.com/wp-content/uploads/118_Reaction_diffusion_system.pdf) consulté le 3 mars 2019

[24] [https://www.math.univ-toulouse.fr/~jgillibe/enseignement/MHT204\\_chap4.pdf](https://www.math.univ-toulouse.fr/~jgillibe/enseignement/MHT204_chap4.pdf) consulté le 2 mars 2019

[25] <http://lmah.univ-lehavre.fr/~ambrosio/CoursL3Phy/Chap3.pdf> consulté le 3 mars 2019

### **Quatrième séance (15/03/19)**

[26] <https://www.youtube.com/watch?v=zxaRwuoZh1I> consulté le 11 mars 2019

[27] <https://lewebpedagogique.com/h4mathsts1/files/2012/09/Suite-rec-2.pdf> consulté le 11 mars 2019

[28] [https://www.math.psu.edu/pesin/papers\\_www/brusselator.pdf](https://www.math.psu.edu/pesin/papers_www/brusselator.pdf) consulté le 11 mars 2019

[29] <http://basilisk.fr/src/examples/brusselator.c> consulté le 12 mars 2019

[30] [http://fsincere.free.fr/isn/python/cours\\_python.php/](http://fsincere.free.fr/isn/python/cours_python.php/) consulté le 11 mars 2019

[31] [Rapport de Projet de l'année https://moodle.insa-rouen.fr/pluginfile.php/86345/mod\\_folder/content/0/Rapport\\_P6\\_2018\\_12.pdf?forcedownload=1](https://moodle.insa-rouen.fr/pluginfile.php/86345/mod_folder/content/0/Rapport_P6_2018_12.pdf?forcedownload=1)

[32] [https://www.franckjeannot.com/wp-content/uploads/118\\_Reaction\\_diffusion\\_system.pdf](https://www.franckjeannot.com/wp-content/uploads/118_Reaction_diffusion_system.pdf) consulté le 11 mars 2019

[33] [https://www.math.univ-toulouse.fr/~jgillibe/enseignement/MHT204\\_chap4.pdf](https://www.math.univ-toulouse.fr/~jgillibe/enseignement/MHT204_chap4.pdf) consulté le 11 mars 2019

[34] <http://lmah.univ-lehavre.fr/~ambrosio/CoursL3Phy/Chap3.pdf> consulté le 13 mars 2019

### **Cinquième séance (22/03/19)**

[35] [Livre de Gérard Swinnen, Apprendre à programmer avec Python \(EYROLLES\)](#) consulté le 18 mars 2019

[36] [https://nbviewer.jupyter.org/github/barbagroup/CFDPython/blob/master/lessons/09\\_Step\\_7.ipynb](https://nbviewer.jupyter.org/github/barbagroup/CFDPython/blob/master/lessons/09_Step_7.ipynb) consulté le 19 mars 2019

[37] [http://gilles.dubois10.free.fr/algebre\\_lineaire/cholesky.html](http://gilles.dubois10.free.fr/algebre_lineaire/cholesky.html) consulté le 19 mars 2019

### **Séance 07/06/2019**

Recherche explication sur les bifurcations de HOPF

[38] [http://nonlineaire.univ-lille1.fr/SNL/media/pnl\\_archive/ftp/compte-rendus2001/Articles-pdf/Larger.pdf](http://nonlineaire.univ-lille1.fr/SNL/media/pnl_archive/ftp/compte-rendus2001/Articles-pdf/Larger.pdf)

[39]

[http://hmf.enseiht.fr/travaux/CD9598/travaux/optmfn/IH/COURS/BIFURCATIONS/mato/nod\\_e7.html](http://hmf.enseiht.fr/travaux/CD9598/travaux/optmfn/IH/COURS/BIFURCATIONS/mato/nod_e7.html)

[40] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Bifurcation\\_de\\_Hopf](https://fr.wikipedia.org/wiki/Bifurcation_de_Hopf)

[41] <http://www.lps.ens.fr/~vincent/ch2e.pdf>

[42] <http://spiralconnect.univ-lyon1.fr/spiral-files/download?mode=inline&data=3324085>

consultés le 4 juin 2019

[43] <https://www.math.u-psud.fr/~pansu/websm/fonctions.pdf> consulté le 1 juin.

## Index des illustrations

Illustration 1: Concentrations de V et U en fonction du temps et portraits de phase de V(U)	14
Illustration 2: Autres portraits de phase de V(U).....	15
Illustration 3: Autres portraits de phase de V(U).....	16
Illustration 4: Evolution des trois concentrations dans le temps.....	16
Illustration 5: Cas d'un cycle limite.....	17
Illustration 6: Concentration de V = 1,93 au point (x,y).....	18
Illustration 7: Concentration de V = 1,48.....	18
Illustration 8: Concentration de U de 6,51.....	18
Illustration 9: Concentration de V de 1,5.....	19
Illustration 10: Influence terme de diffusion.....	19



## 6. ANNEXES

### 6.1. Programmes informatiques

#### 6.1.1. Python

Programmes pour les schémas numériques :

```
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib import cm
from random import random
def brusselator(a,b,Du,Dv,T,k,L,l,h,u0,v0):
    Nt=int(T/k)
    Nx=int(L/h)
    Ny=int(l/h)
    u=[[u0+random() for j in range(Ny)]\
    for i in range(Nx)]
    v=[[v0+random() for j in range(Ny)]\
    for i in range(Nx)]

    imag=plt.imshow(u,\
    interpolation='nearest',\
    cmap=cm.binary)

    plt.xticks([])
    plt.yticks([])

    for t in range(Nt):
        for x in range(Nx):
            for y in range(Ny):
                xp=(x+1) %Nx
                xm=x-1
                yp=(y+1) %Ny
                ym=y-1

                Lu=(u[xp][y]-4*u[x][y]\
                +u[xm][y]+u[x][yp]+\
                u[x][ym])/h**2
                Lv=(v[xp][y]-4*v[x][y]\
                +v[xm][y]+v[x][yp]+\
                v[x][ym])/h**2

                u[x][y]+=k*(a-\
                (b+1)*u[x][y]+\
                u[x][y]**2*v[x][y]+Du*Lu)

                v[x][y]+=k*(b*u[x][y]-\
                u[x][y]**2*v[x][y]+Dv*Lv)
                #print('u[',x,',',y, ' ] =', u[x][y], 'v[',x,',',y, ' ] =',v[x][y], 't =', t)

            imag.set_data(v)
            imag.autoscale()
            plt.draw()
            plt.pause(1e-6)
            #print('test2')
    return u,v

a=4.5 ; b=7.5 ; Du=0.05 ; Dv=0.5 ; T=500 ; k=0.005 ; L=200 ; l=200 ; h=1 ; u0=a ; v0=b/a
u,v=brusselator(a,b,Du,Dv,T,k,L,l,h,u0,v0)
plt.figure(1)
plt.axis('off')
plt.imshow(v,cmap=cm.binary)
plt.show()
```

L'extrait de programme suivant montre la modification des valeurs des variables :

```

a=4.5 ; b=6.75 ; Du=0.05 ; Dv=0.5 ; T=500 ; k=0.005 ; L=200 ; l=200 ; h=1 ; u0=a ; v0=b/a
u,v=brusselator(a,b,Du,Dv,T,k,L,l,h,u0,v0)
plt.figure(2)
plt.axis('off')
plt.imshow(v,cmap=cm.binary)
plt.show()

```

Et celui qui suit montre à nouveau une modification mais ici il s'agit du passage de la concentration de v à u :

```

        imag.set_data(u)
        imag.autoscale()
        plt.draw()
        plt.pause(1e-6)
        #print('test2')
    return u,v

a=4.5 ; b=7.5 ; Du=2 ; Dv=16 ; T=500 ; k=0.005 ; L=200 ; l=200 ; h=1 ; u0=a ; v0=b/a
u,v=brusselator(a,b,Du,Dv,T,k,L,l,h,u0,v0)
plt.figure(1)
plt.axis('off')
plt.imshow(u,cmap=cm.binary)
plt.show()

```

#### Programme pour graphique 2D :

```

import matplotlib.pyplot as plt

from matplotlib import rc

rc('xtick',labelsize=18)

rc('ytick',labelsize=18)

def brusselatorEDO(T,h,u0,v0,a,b):

    N=int(T/h)

    f=lambda u,v:a+u**2*v-(b+1)*u

    g=lambda u,v:-u**2*v+b*u

    u=[u0]

    v=[v0]

    for i in range(N):

        m1=f(u[i],v[i])

        m2=f(u[i]+h/2*m1,v[i])

        m3=f(u[i]+h/2*m2,v[i])

        m4=f(u[i]+h*m3,v[i])

        u.append(u[i]+h/6*(m1+2*m2+2*m3+m4))

```

```

k1=g(u[i],v[i])
    k2=g(u[i],v[i]+h/2*k1)
    k3=g(u[i],v[i]+h/2*k2)
    k4=g(u[i],v[i]+h*k3)
    v.append(v[i]+h/6*(k1+2*k2+2*k3+k4))

```

```

plt.plot(u,v,'k',linewidth=2)
plt.xlabel('u',fontsize=18)
plt.ylabel('v',fontsize=18)
plt.show()
return u,v

```

```
brusselatorEDO(500,0.01,3.0,4.0,1.0,1.5)
```

```
brusselatorEDO(500,0.01,1.5,3.0,1.0,2.0)
```

```
brusselatorEDO(500,0.01,1.0,1.0,1.0,2.3)
```

### 6.1.2. *En C*

```
#include<stdlib.h>
```

```
#include<stdio.h>
```

```
#include<math.h>
```

```
#include<malloc.h>
```

```
double** MonAlloc(int N, int m) //attribue une taille à la matrice
```

```
{
```

```
int i;
```

```
double *vect, **mat;
```

```
vect=(double*)malloc((N*m)*sizeof(double)); //malloc déjà définit
```

```
mat=(double**)malloc(N*sizeof(double*)); //attribue une taille à un vecteur
```

```
for(i=0;i<N;i++)
```

```

{mat[i]=vect;
vect=vect+m;
}
return(mat);
}

```

```
double* fonction(double t ,double* y) // On prend a=1 et b=3
```

```

{
double* F;

F=(double*)malloc(2*sizeof(double));
F[0]=1 - (y[2]+1)*y[0] + y[0]*y[0]*y[1] ;
F[1]=y[2]*y[0] - y[0]*y[0]*y[1]; //a=1 //binitial=1
F[2]= -y[2]*y[0] +1.52;
return(F);
}

```

```
//-----
```

```
// Runge Kutta
```

```
//-----
```

```
double** RungeKutta(double to,double T,int N,int m, double* a) //définit la fonction
```

```
{ //RungeKutta
```

```
int i,k;
```

```
double h,ti, *yinter,**y,*yi,*K0,*K1,*K2,*K3;
```

```
yinter=(double*)malloc(m*sizeof(double));
```

```
yi=(double*)malloc(m*sizeof(double));
```

```

K0=(double*)malloc(m*sizeof(double));
K1=(double*)malloc(m*sizeof(double));
K2=(double*)malloc(m*sizeof(double));
K3=(double*)malloc(m*sizeof(double));

y=MonAlloc(N,m);

h=(T-to)/N;
for(k=0;k<m;k++) yi[k]=a[k];

for(i=0;i<N;i++)
{
ti=i*h;

K0=fonction(ti,yi);

for(k=0;k<m;k++) yinter[k]=yi[k]+(h/(2.0))*K0[k];
K1=fonction(ti+(h/(2.0)),yinter);

for(k=0;k<m;k++) yinter[k]=yi[k]+(h/(2.0))*K1[k];
K2=fonction(ti+(h/(2.0)),yinter);

for(k=0;k<m;k++) yinter[k]=yi[k] + h*K2[k];
K3=fonction(ti+(h/(2.0)),yinter);

for(k=0;k<m;k++)
{
yi[k]=yi[k] + (h/(6.0))*(K0[k] + 2*K1[k] + 2*K2[k] + K3[k]);

```

```

        y[i][k]=yi[k];
    }
}

return(y);
}

//-----
// programme principal
//-----

int main()
{
int N, m,i;
double to,t,T,*a,**Y;
FILE* unit;

to=0; T=30;
N=10000;
m=3;

a=(double*)malloc(m*sizeof(double));
Y=MonAlloc(N,m);

a[0]=1; a[1]=1; a[2]=1;
Y=RungeKutta(to,T,N,m,a); //appelle la fonction RungeKutta y en fct de x
    unit=fopen("P6_RK1_Y_X","w+");
    fprintf(unit,"%f \t %f \n",a[0],a[1]);
    for(i=1;i<N;i++) fprintf(unit,"%f \t %f \n",Y[i][0],Y[i][1]);
Y=RungeKutta(to,T,N,m,a); //appelle la fonction RungeKutta b en fct de x

```

```

unit=fopen("P6_RK1_B_X","w+");
    fprintf(unit,"%f \t %f \n",a[0],a[1]);
for(i=1;i<N;i++) fprintf(unit,"%f \t %f \n",Y[i][0],Y[i][2]);

    unit=fopen("P6_RK1_B","w+"); //concentrationB
    fprintf(unit,"%f \t %f \n",0.0,a[1]);
for(i=1;i<N;i++) fprintf(unit,"%f \t %f \n",i*0.003,Y[i][2]);

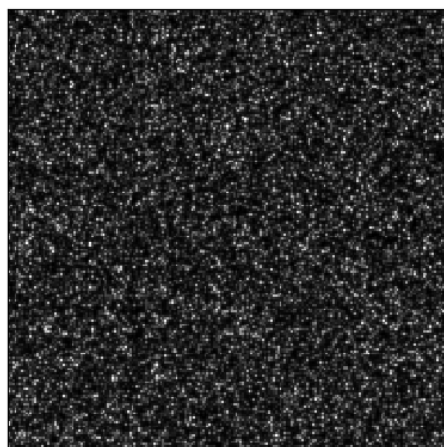
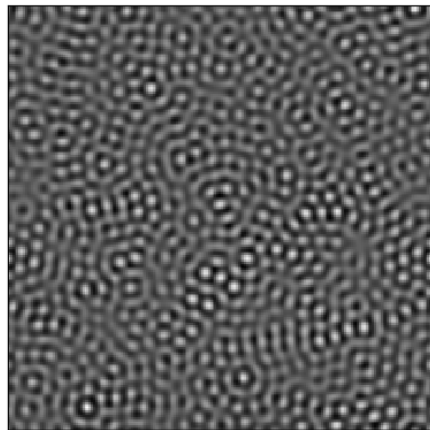
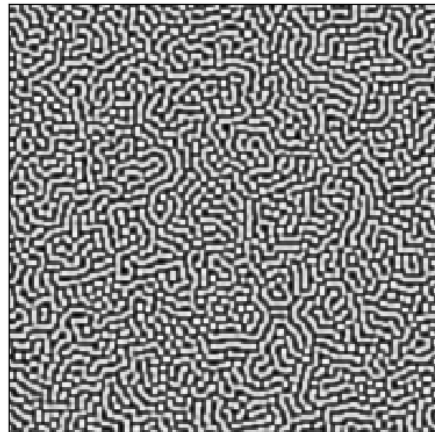
    unit=fopen("P6_RK1_X","w+"); //concentrationX
    fprintf(unit,"%f \t %f \n",0.0,a[0]);
for(i=1;i<N;i++) fprintf(unit,"%f \t %f \n",i*0.003,Y[i][0]);

    unit=fopen("P6_RK1_Y","w+"); //concentrationY
    fprintf(unit,"%f \t %f \n",0.0,a[1]);
for(i=1;i<N;i++) fprintf(unit,"%f \t %f \n",i*0.003,Y[i][1]);
fclose(unit);

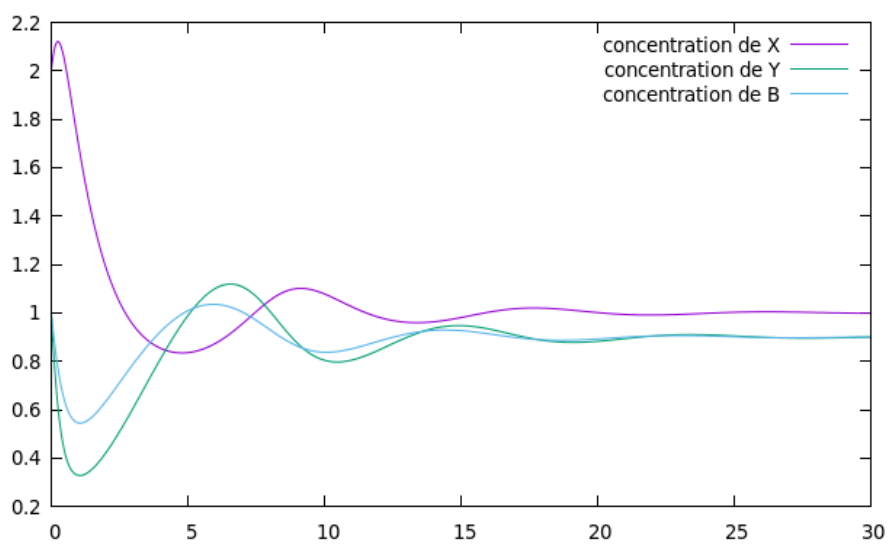
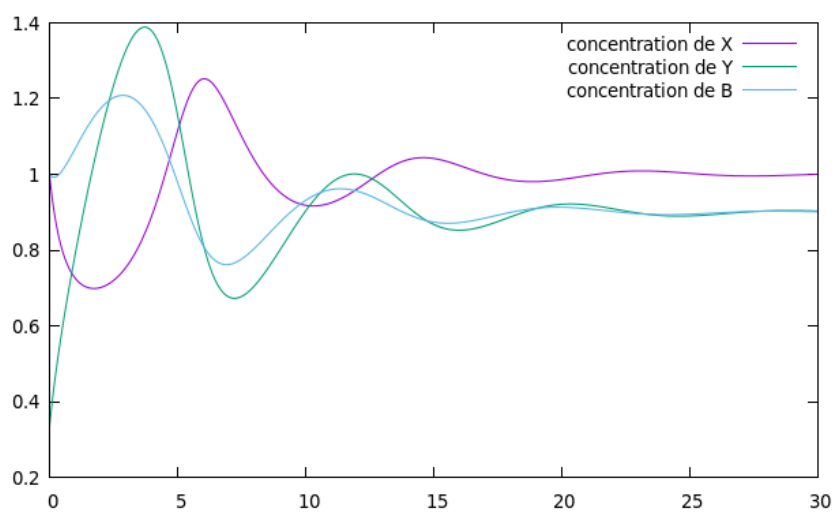
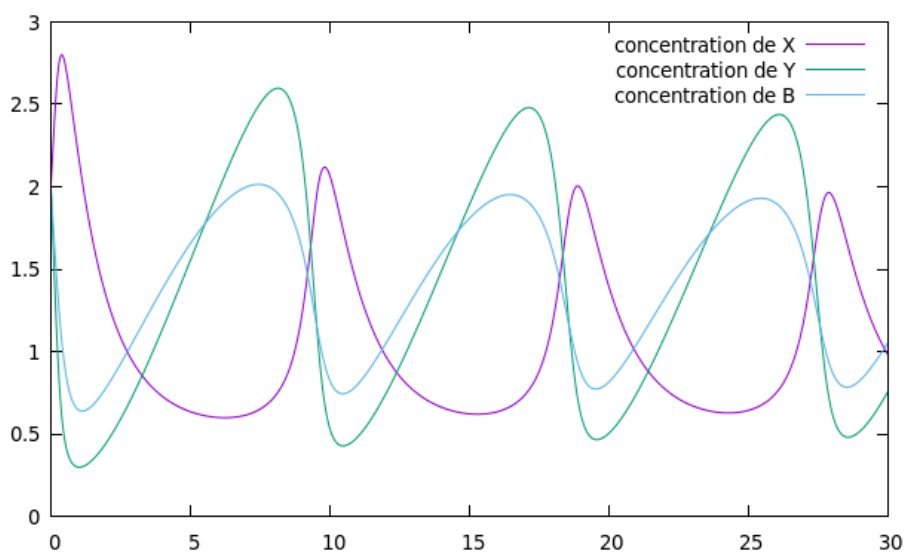
a[0]=1.5; a[1]=3;
Y=RungeKutta(to,T,N,m,a); //appelle la fonction RungeKutta y en fct de x
    unit=fopen("P6_RK2_Y_X","w+");
for(i=0;i<N;i++) fprintf(unit,"%f \t %f \n",Y[i][0],Y[i][1]);
fclose(unit);
a[0]=3; a[1]=4;
Y=RungeKutta(to,T,N,m,a); //appelle la fonction RungeKutta b en fct de
    unit=fopen("P6_RK3_B_X","w+");
for(i=0;i<N;i++) fprintf(unit,"%f \t %f \n",Y[i][0],Y[i][2]);
fclose(unit);
return(0);}

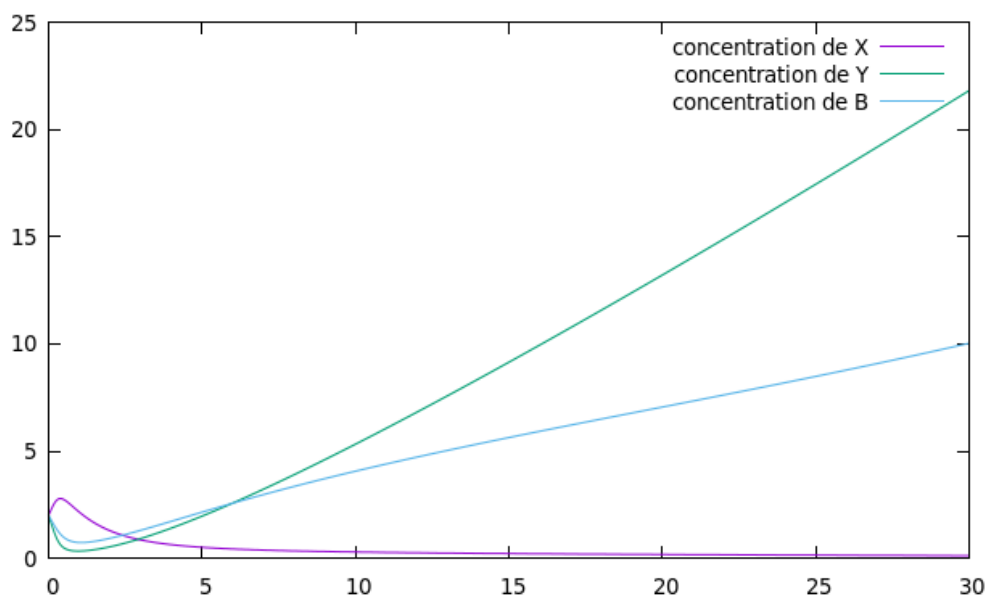
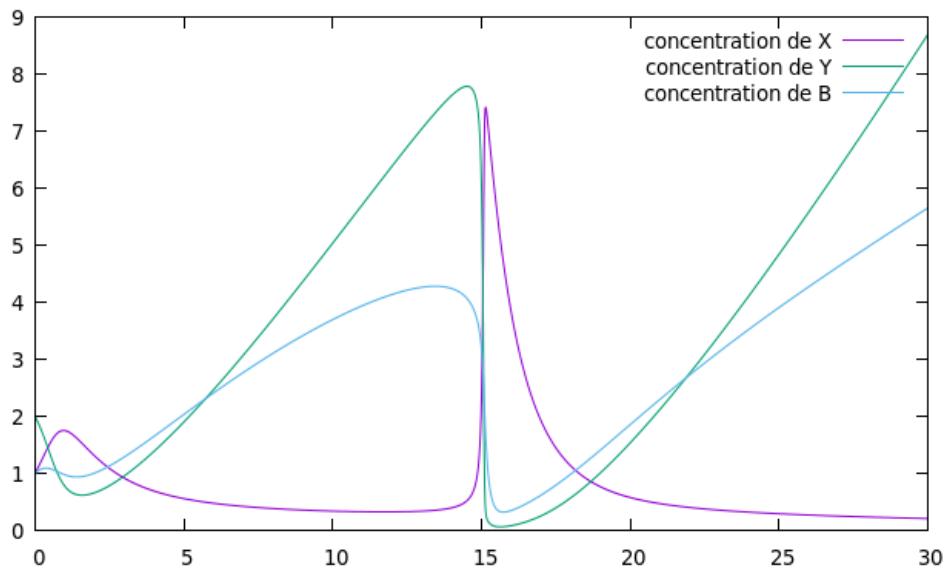
```

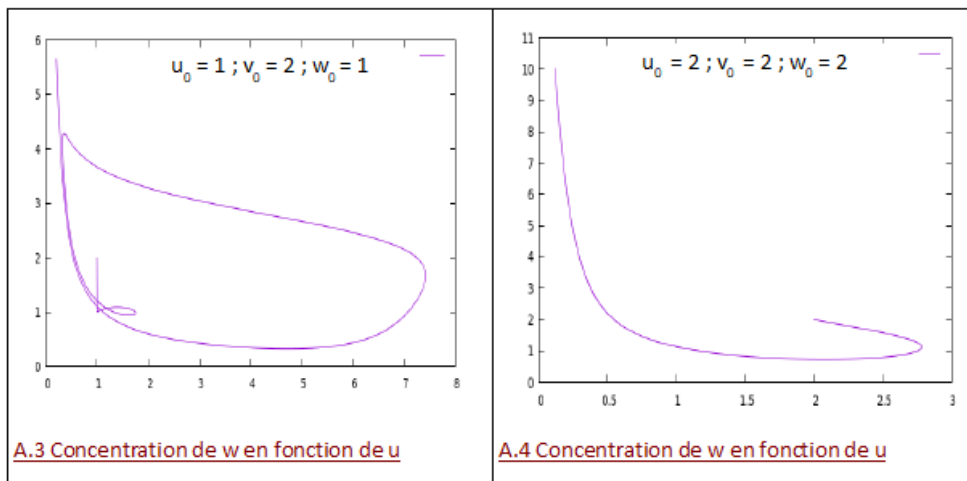
## 6.2. Autres schémas numériques et graphiques





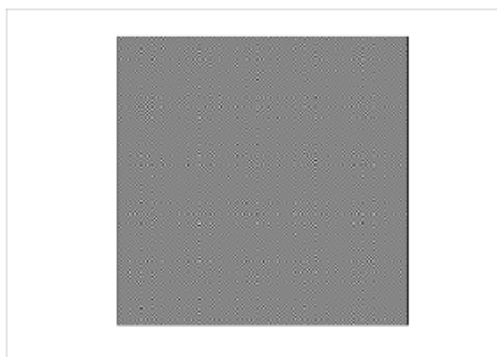
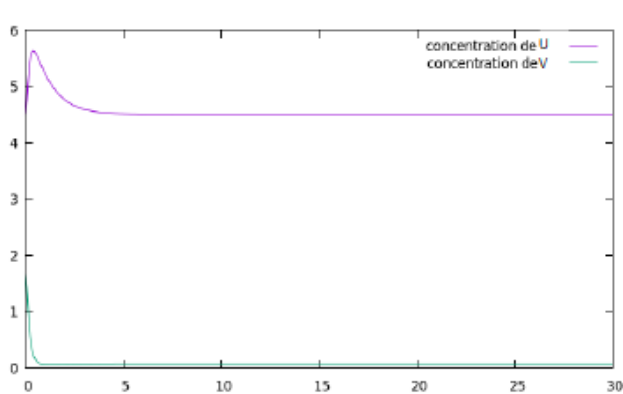
$\mu = 0,9$  $\mu = 1,3$ 

$\mu = 1,52$ 



Pour  $a = 4,5$ ,  $b = 7,5$  &  $t = 30s$

Concentration de U(t) et V(t)	Concentration de U avec $D_v = 0,5$ & [V(30s)] = 1,3
-------------------------------	---



### 6.3. Propositions de sujets de projets (en lien ou pas avec le projet réalisé)

Cinétique chimique avec les expériences associées grâce aux résultats obtenus des deux rapports

Étude du mélange : maizena et eau qui est un exemple de dureté et ou de viscosité d'un mélange en fonction de la fréquence du déplacement.