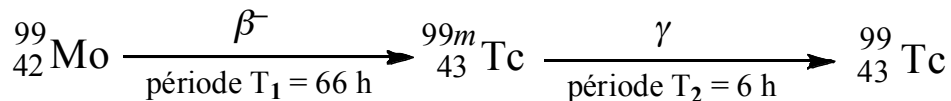


TD INFORMATIQUE : Modélisation et résolutions numériques d'équations différentielles (1)

But : utiliser des méthodes d'approximations numériques de solutions d'équations différentielles. On utilisera notamment la méthode d'Euler « explicite » (méthode au programme) et la fonction *odeint* du sous-module *scipy.integrate*.

I. Étude d'une filiation radioactive

Le molybdène ^{99}Mo est un précurseur du technétium ^{99}Tc utilisé en médecine nucléaire comme radiotraceur pour l'imagerie médicale. La filiation radioactive correspond aux deux étapes de désintégrations suivantes du noyau mère ^{99}Mo :



La première désintégration conduit à un noyau ^{99m}Tc métastable (un neutron se transforme en proton) et à l'émission d'un électron et d'un antineutrino. Le noyau fille ^{99m}Tc se désexcite ensuite en ^{99}Tc plus stable avec émission d'un rayonnement γ .

Pour simplifier, on pourra utiliser les notations suivantes : $^{99}\text{Mo} = A$, $^{99m}\text{Tc} = B$ et $^{99}\text{Tc} = C$.

On modélisera les 2 étapes comme des réactions chimiques d'ordre 1, de constantes cinétiques k_1 et k_2 respectivement. La période de désintégration indiquée correspond à la demi-vie du noyau, soit le temps de demi-réaction. On rappelle que le temps de demi-réaction $t_{1/2}$ pour une réaction chimique d'ordre 1 est lié à la constante cinétique k par la relation : $k \cdot t_{1/2} = \ln 2$.

On considèrera que l'échantillon initial ne contient que du molybdène ^{99}Mo .

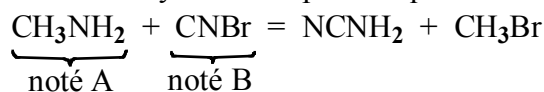
On peut montrer que la modélisation du problème conduit au système suivant d'équations différentielles liant les fractions molaires x_A , x_B et x_C des 3 noyaux ^{99}Mo , ^{99m}Tc et ^{99}Tc :

$$\begin{aligned} dx_A / dt &= -k_1 x_A \\ dx_B / dt &= k_1 x_A - k_2 x_B \\ dx_C / dt &= k_2 x_B \end{aligned}$$

- 1) Intégrer ce système d'équations différentielles en utilisant la méthode numérique d'Euler explicite (au programme) et représenter l'évolution en fonction du temps des fractions molaires des 3 noyaux ^{99}Mo , ^{99m}Tc et ^{99}Tc . Commenter vos choix de la durée T de modélisation et du pas numérique (ou du nombre de points).
- 2) De même, mais en utilisant la fonction *odeint* du sous-module *scipy.integrate* de Python à la place de la méthode d'Euler.
- 3) Écrire une fonction permettant d'obtenir les coordonnées du maximum de la courbe donnant la fraction molaire du noyau ^{99m}Tc .

II. Réacteur fed batch (réacteur semi-ouvert)

Le bromométhane CH_3Br est produit industriellement dans un réacteur semi-ouvert (une entrée et pas de sortie) isotherme. La réaction de synthèse en phase liquide s'écrit :



La vitesse de cette réaction est d'ordre 2 : $r = k \cdot C_A \cdot C_B$ avec $k = 2,2 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. À la date $t_0 = 0$, le réacteur contient une quantité de constituant B, $n_{B,0} = 0,25 \text{ mol}$, qui occupe un volume initial $V_0 = 5,0 \text{ L}$. On alimente ce réacteur avec un débit volumique constant $Q = 0,05 \text{ L} \cdot \text{s}^{-1}$ d'une solution de constituant A de concentration $C_{A,0} = 0,025 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$. L'évolution des quantités de matière des constituants A et B dans le réacteur est régie par le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{dn_A}{dt} = Q.C_{A,0} - \frac{k.n_A.n_B}{V} \\ \frac{dn_B}{dt} = -\frac{k.n_A.n_B}{V} \\ V = V_0 + Q.t \end{cases}$$

Écrire un programme utilisant la méthode d'Euler ou la fonction `odeint` de `scipy.integrate` pour déterminer numériquement et représenter l'évolution temporelle des quantités de matière $n_A(t)$ et $n_B(t)$ entre t_0 et $t_f = 500$ s. L'intervalle de temps $[t_0, t_f]$ sera discrétisé en 1000 sous-intervalles.