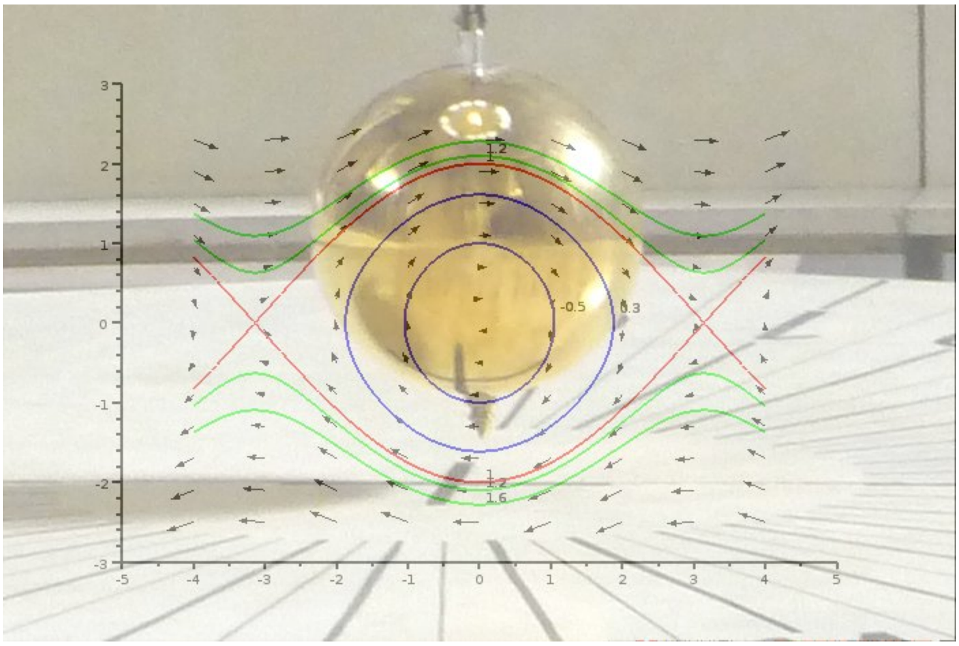
TP n° 23 : Équations différentielles



L'objectif de ce TP est de résoudre numériquement des systèmes d'équations différentielles ainsi que des équations différentielles du deuxième ordre en adaptant la méthode d'Euler que nous avons utilisée pour les équations différentielles du premier ordre.

1 Le glycol

Le glycol ($C_2H_6O_2$, noté ici E) est utilisé dans les mélanges de refroidissement antigel pour l'automobile. Il résulte de l'addition d'eau à de l'oxyde d'éthylène (C_2H_4O, noté ici O) selon la réaction, considérée comme totale, suivante :

$$O + H_2O \xrightarrow{k_1} E \tag{1}$$

Industriellement, le temps de passage dans le réacteur ne permet pas d'atteindre l'état d'équilibre thermodynamique et on constate l'apparition de déthylèneglycol ($C_4H_{10}O_3$, noté ici D), produit par la réaction concurrente, également considérée comme totale, suivante :

$$O + E \xrightarrow{k_2} D \tag{2}$$

Le mélange initial est constitué d'oxyde d'éthylène et d'eau à la concentration molaire de $c_0 = 1.00\,\text{mol.L}^{-1}$ chacun. Pour traduire le fait que l'eau réagit moins vite que l'éthylèneglycol sur l'oxyde d'éthylène, on prendra $k_1 = 1$ et $k_2 = 5$. On suppose que les deux réactions sont d'ordre 1 par rapport à chacun des réactifs.

Notons ξ_1 et ξ_2 les avancements volumiques respectifs des équations (1) et (2). On note $[X]$ la concentration du composé X.

1. Exprimer les concentrations $[O]$, $[E]$ et $[D]$ en fonction de ξ_1 et ξ_2. *Indication : on remarquera que* $[H_2O] = c_0 - \xi_1$.

2. Établir le système d'équations différentielles en ξ_1 et ξ_2.
3. En utilisant la méthode d'Euler, résoudre numériquement ce système d'équations différentielles sur $[0, 10]$ avec une subdivision de taille 1000 et tracer l'évolution des concentrations molaires des quatre composés intervenant dans les réactions (1) et (2).
4. Comparer vos courbes avec celles de la figure 4 du sujet Centrale Physique-Chimie MP 2013 disponible ici :

   `https://www.concours-centrale-supelec.fr/CentraleSupelec/2013/MP/sujets/2011-047.pdf`

5. Quelle conclusion peut-on en tirer quant à la synthèse industrielle du glycol ?

2 Équations différentielles d'ordre 2

Dans cette section, on s'intéresse à des équations différentielles scalaires qui peuvent se mettre sous la forme du problème de Cauchy :

$$\begin{cases} y''(t) = F(t, y(t), y'(t)) \\ y(t_0) = y_0 \\ y'(t_0) = y_1 \end{cases} \tag{3}$$

6. Écrire une fonction `euler(F, t0, y0, y1, T, h)` qui applique la méthode d'Euler au problème de Cauchy (3) sur $[t_0, t_0 + T]$ avec un pas h (on suppose que T est un multiple de h). Cette fonction doit renvoyer un triplet `(t, y, yp)` de listes ou tableaux NUMPY de mêmes tailles contenant respectivement l'intervalle de temps discrétisé, les valeurs approchées de la solution correspondant à ces instants et les valeurs approchées de la dérivée de la solution à ces instants.

2.1 Oscillateur harmonique

On considère l'oscillateur harmonique (simplifié) correspondant au problème de Cauchy :

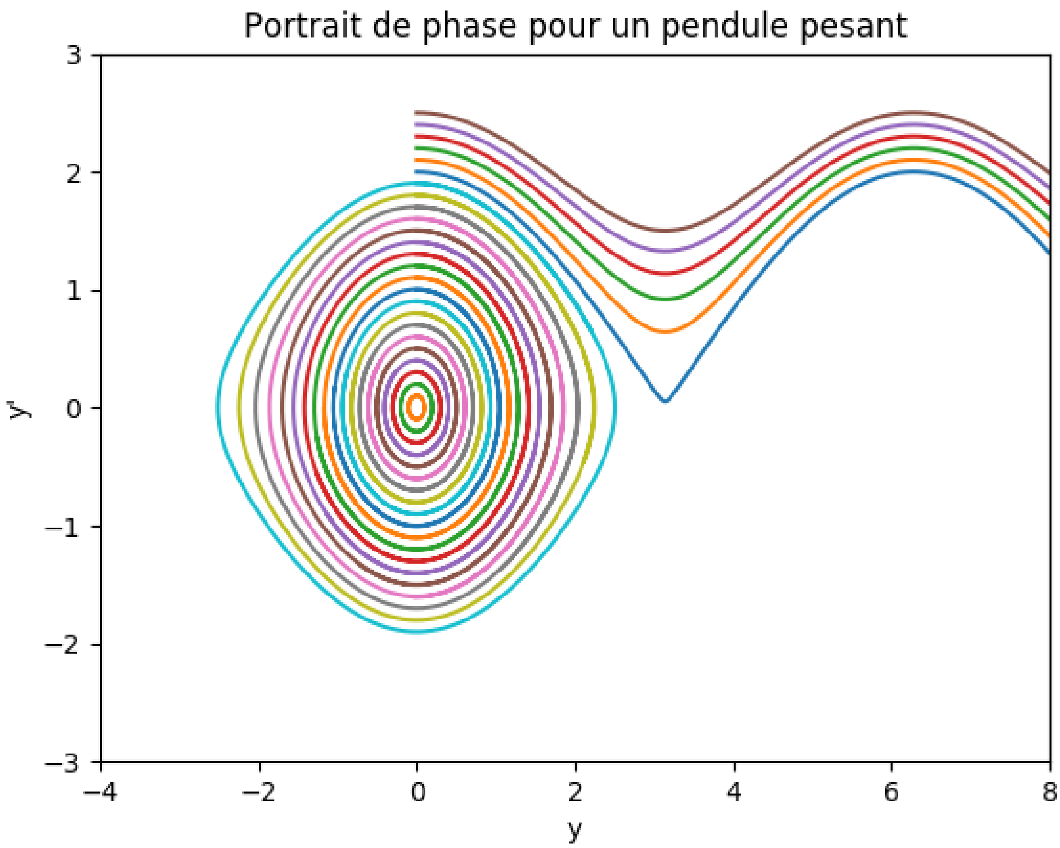
$$\begin{cases} y'' + y = 0 \\ y(0) = 1 \\ y'(0) = 0 \end{cases} \tag{4}$$

7. Tracer les équations horaires ($y(t)$ et $y'(t)$ en fonction de t) ainsi que le portrait de phase (y' en fonction de y) pour $T = 42$ et $h = 0.1$. Commenter.
8. Effectuer un nouveau tracé pour $h = 0.0001$. Commenter.

2.2 Pendule pesant

Le pendule pesant correspond à l'équation différentielle (simplifiée) $y'' + \sin y = 0$.

9. Tracer les équations horaires ainsi que le portrait de phase pour le problème de Cauchy de conditions initiales $y(0) = 0$, $y'(0) = 1$, avec $T = 42$ et $h = 0.1$. Commenter
10. Effectuer un nouveau tracé avec les conditions initiales $y(0) = 0$, $y'(0) = 0.1$ et $h = 0.001$. Commenter.
11. Effectuer un nouveau tracé avec les conditions initiales $y(0) = 2.5$, $y'(0) = 0$ et $h = 0.001$. Commenter.
12. Tracer sur un même graphe, pour $h = 0.001$, le portrait de phase avec comme conditions initiales $y(0) = 0$ et $y'(0)$ qui décrit $[0, 2.5]$ par pas de 0.1. On pourra jouer sur les paramètres de MATPLOTLIB pour essayer de reproduire la figure ci-dessous. Commenter.

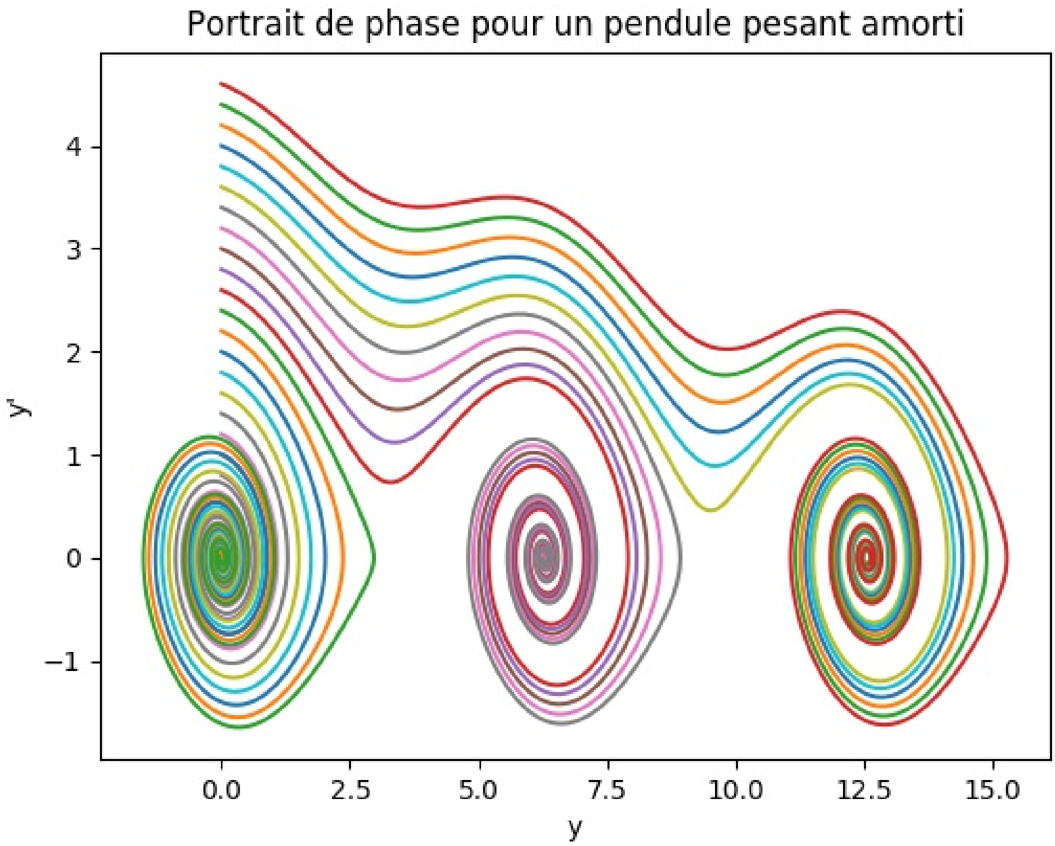


2.3 Pendule pesant amorti

Le pendule pesant amorti correspond à l'équation différentielle (simplifiée)

$$y'' + 0.2y' + \sin y = 0$$

13. Tracer sur un même graphe, pour $h = 0.001$, le portrait de phase avec comme conditions initiales $y(0) = 0$ et $y'(0)$ qui décrit $[0, 4.7]$ par pas de 0.2. On pourra jouer sur les paramètres de MATPLOTLIB pour essayer de reproduire la figure ci-dessous. Commenter.



3 Attracteur étrange de LORENZ

On considère le système différentiel suivant :

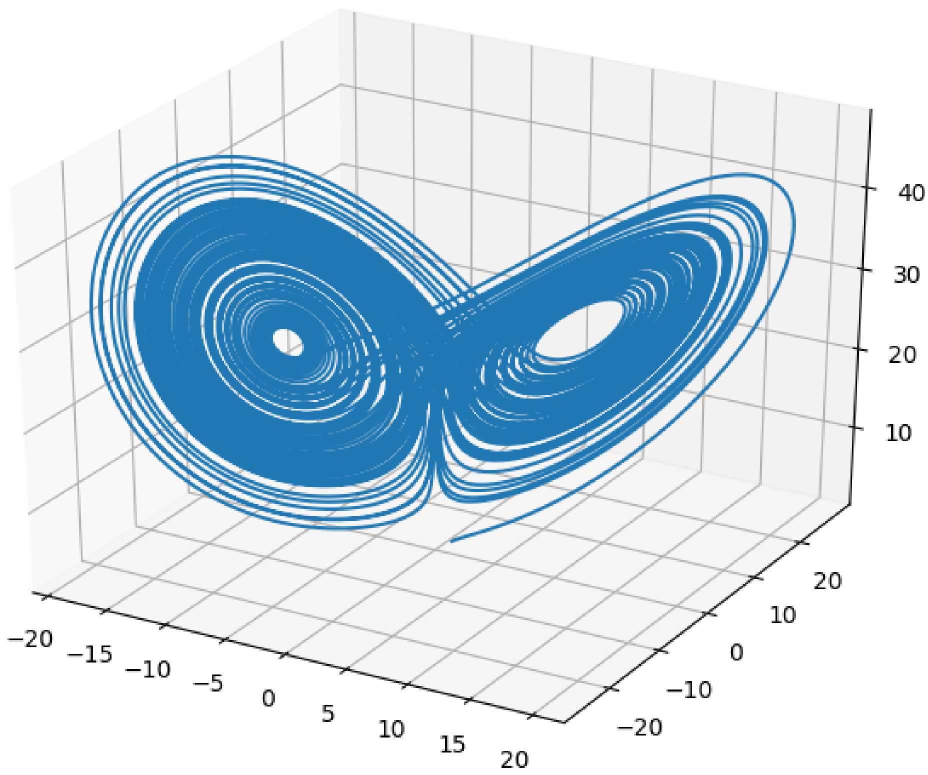
$$\begin{cases} x' = 10(y - x) \\ y' = 28x - y - xz \\ z' = xy - \frac{8}{3}z \end{cases} \tag{5}$$

14. Écrire une fonction `lorenz(x0, y0, z0, T, h)` qui utilise la méthode d'Euler pour résoudre numériquement le système différentiel (5) avec les conditions initiales $x(0) = x_0$, $y(0) = y_0$ et $z(0) = z_0$, sur l'intervalle $[0, T]$ avec un pas h. La fonction doit renvoyer le triplet `(x, y, z)` de listes ou tableaux NUMPY de mêmes tailles correspondant aux valeurs approchées des trois fonctions sur l'intervalle discrétisé.

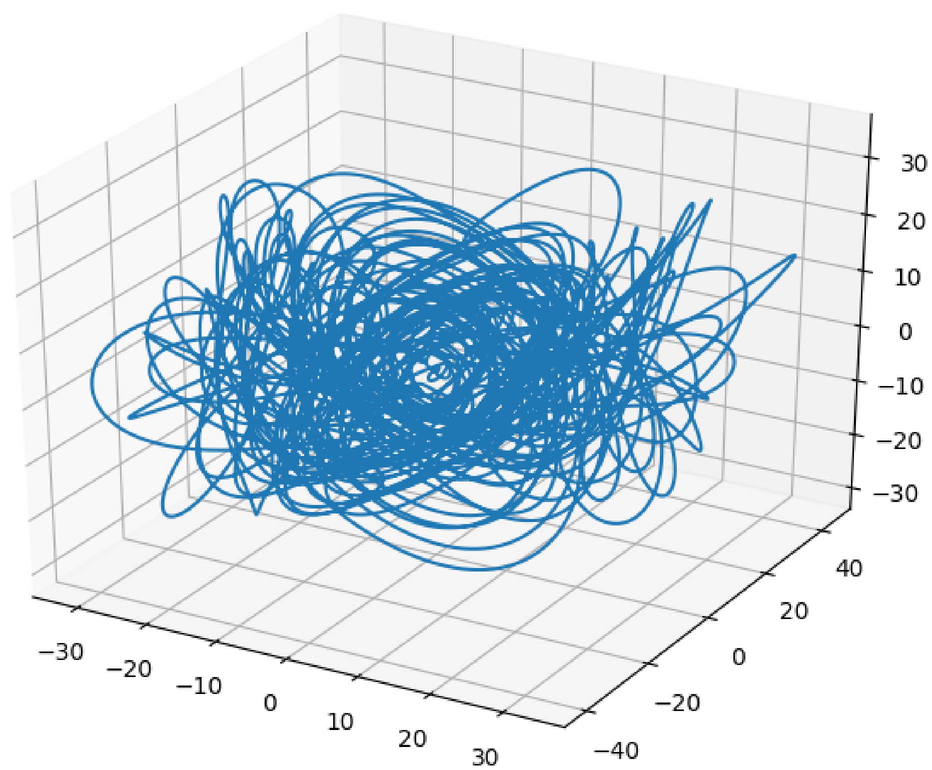
On peut utiliser MATPLOTLIB pour représenter la trajectoire d'une solution en trois dimensions de la manière suivante :

PYTHON
```
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

x, y, z = lorenz(1, 1, 1, 100, 0.001)
fig = plt.figure()
ax = Axes3D(fig)
ax.plot(x, y, z)
plt.show()
```



15. Tracer la trajectoire de la solution obtenue pour $T = 100$, $h = 0.001$ et de conditions initiales $(1, 1, 1)$ comme indiqué ci-dessus. Tracer ensuite la solution de conditions initiales $(1.0001, 1, 1)$. Voyez-vous une différence ?
16. Tracer la trajectoire de la différence des deux solutions obtenues à la question précédente. Vous devriez obtenir le graphe ci-dessous. Commenter.



17. Tracer la trajectoire de la solution obtenue pour $T = 100$, de conditions initiales $(1, 1, 1)$ et de pas $h = 0.0001$. Comparer avec la solution précédente, obtenue pour les mêmes conditions initiales mais un pas de $h = 0.001$. Voyez-vous une différence ?
18. Tracer la trajectoire de la différence des deux solutions obtenues à la question précédente et commenter. Incroyable, non ? *On prendra bien garde au fait que l'échelle de temps n'est pas la même pour ces deux solutions.*

C'est le *chaos* !

https://images.math.cnrs.fr/Sculptures-du-chaos.html