

# Exercices pour Maple. TD5

G. Marcou, P. Jost

12 novembre 2009

## Résumé

La résolution d'équations différentielles et aux dérivées partielles. Les paquets `PDEtools` et `ODEtools` sont particulièrement utiles.

## Exercice 1

La thiamine (vitamine B1) se décompose sous l'effet d'ions sulfites en un processus multi-étapes. Le thiazolo est substitué pour former un acide sulfonique et une thiazole libre. Cette réaction suit le plus souvent suivre une cinétique apparente d'ordre 1 pour les ions sulfites et le substrat.

Ecrire l'équation de la réaction et le système d'équations différentielles associée.

Résoudre dans le cas général cette équation. Que signifie le symbole  $c_1$  ?

Vérifiez l'exactitude du résultat. Aidez-vous des commandes `eval`, `testeq` et `odetest`.

## Exercice 2

La réaction précédente suit en réalité une cinétique d'ordre 2 pour les sulfites. Ceci qui peut être mis en évidence quand la réaction précédente est effectuée à faible concentration de sulfite.

A quoi servent les commandes `declare` et `alias` ? Réécrivez les équations précédentes en utilisant une notation allégée dans l'hypothèse où la cinétique est du second ordre pour les ions sulfites.

### Exercice 3

Certains dérivés du 1'-methyl thiaminium, dont le groupe partant est très acide, montrent une cinétique apparente de décomposition d'ordre 0 vis-à-vis de l'ion sulfite. C'est le cas d'un dérivé dont le groupe thiazolo est remplacé par un N-(3-cyanopyridine).

Dans ce cas, un produit intermédiaire résultant de l'addition du sulfite en position 4 du groupement cyanopyridine est formé. Celui-ci établit un équilibre dont la constante est très grande. La décomposition du thiaminium en cyanopyridine et en acide sulfonique est pour sa part toujours une réaction irréversible dont la cinétique est d'ordre 2 pour le sulfite.

Ecrire les équations correspondant à la situation décrite. Résoudre ces équations dans le cas général. En déduire la dépendance en sulfite de la constante de vitesse apparente de la décomposition.

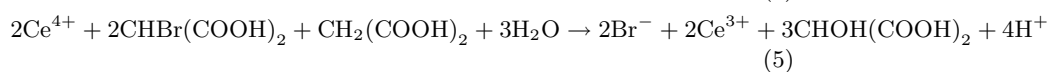
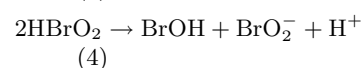
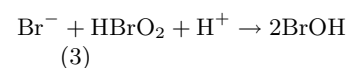
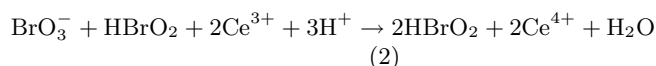
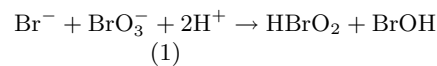
### Exercice 4

Soit une espèce  $A$  diffusant dans un gèle dont la constante de diffusion est  $D$ . A l'instant initial, la concentration de  $A$  est égale à 1 dans l'intervalle  $] -\infty, 0]$  et 0 ailleurs. Ecrire l'équation de diffusion et la résoudre.

### Exercice 5

La réduction d'ions bromates en ions bromures en présence d'un acide organique (acide malonique) s'oxydant en dioxyde de carbone, en présence d'un catalyseur, est appelée réaction de Belousov-Zhabotinsky. Elle est auto-oscillante.

Il a été postulé le mécanisme simplifié suivant :



Ecrire et résoudre les équations cinétiques correspondantes. Pour simplifier on peut ignorer certaines espèces dans ces équations : les protons et les cations cérium (III), l'eau et l'acide malonique. Enfin, le  $\text{CHBr}(\text{COOH})_2$  peut être considéré constant.

## Exercice 6

Trouvez les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène et tracer surface d'iso-probabilité correspondantes à quelques orbitales.