

TD 1

## 1 Un exemple simple

On considère les réactions

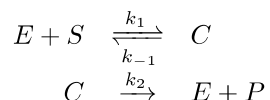


**Partie TD** Devinez les profils des concentrations des espèces (dans le temps). Pour simplifier, vous pouvez supposer que  $B(0) = C(0) = 0$ . En particulier, essayez de donner des propriétés qui ne dépendent ni des valeurs des paramètres, ni des conditions initiales. Est-ce facile de trouver une loi de conservation ? Que dire des limites des concentrations ?

**Partie TP** En vous inspirant du fichier `AB.py`, simulez le système de réactions pour des conditions initiales que vous fixerez vous-même. Est-ce en accord avec vos prédictions ?

## 2 Dégradation enzymatique

On considère la dégradation enzymatique suivante :



**Partie TD**

**Q 1.** En choisissant l'ordre  $S, E, C, P$ , écrire le vecteur des vitesses, et la matrice de stœchiométrie. En déduire le système d'équations différentielles.

**Q 2.** Avec un peu d'intuition, et en utilisant la conservation de la matière, devinez deux lois de conservation.

**Q 3.** Essayez de deviner la limite des quatre espèces quand le temps  $t$  tend vers l'infini.

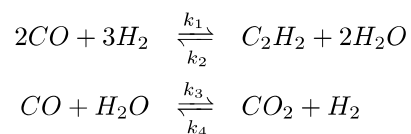
**Partie TP** Simulez la dégradation enzymatique dans le cas suivant :  $C(0) = 0, P(0) = 0, E(0) = 10, S(0) = 50$  et  $k_1 = 10, k_{-1} = 5, k_2 = 8$ .

**Q 4.** D'après le graphe, quelles sont les limites des espèces ? Est-ce en accord avec votre raisonnement précédent ?

**Q 5.** Peut-on voir sur le graphe les lois de conservations (cherchez des symétries dans les courbes) ?

### 3 Un exemple atmosphérique

On considère le système de réactions chimiques suivant :



Comme les noms de molécules sont un peu long à écrire, vous pourrez renommer si nécessaire  $CO$ ,  $H_2$ ,  $C_2H_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO_2$ , en  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $\dots$ ,  $A_5$ .

#### Partie TD

**Q 1.** Par un raisonnement sur la conservation de la matière, retrouver trois lois de conservation.

**Q 2.** Que dire des limites des concentrations ?

#### Partie TP

**Q 3.** Tracez les courbes de concentrations dans le cas suivant

$$CO(0) = 5, H_2(0) = 10, H_2O(0) = 3, C_2H_2(0) = 1, CO_2(0) = 18, k_1 = 5, k_2 = 3, k_3 = 5, k_4 = 8$$

**Q 4.** Est-ce que certaines concentrations ont l'air de tendre vers zéro ?

**Q 5.** Comment les limites des concentrations évoluent si vous multipliez par 2 toutes les valeurs des paramètres ?