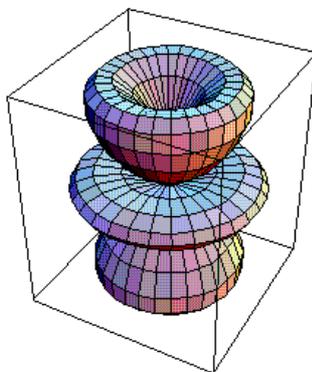


# Club

Centre EAO du DIP  
Case Postale 172  
1211 GENEVE 3  
Tél. (022) 781 15 30



# STELLA

Responsable:  
Bernard Vuilleumier

## Buts du club

Le club Stella souhaite réunir les personnes intéressées par les problèmes de modélisation et de simulation, aussi bien en sciences exactes qu'en sciences expérimentales ou humaines. Les sujets abordés au cours des réunions devraient permettre à chacun de:

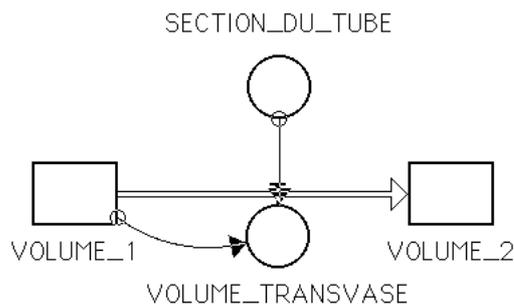
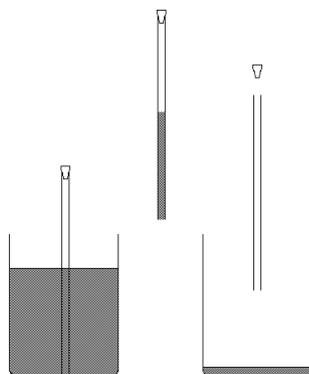
- se familiariser avec les activités de base de la modélisation
- trouver des occasions d'intégrer l'EAO dans sa discipline et son cours
- découvrir ou construire des modèles et effectuer des simulations

## Que s'est-il passé lors de la dernière réunion ?

Lundi 24 septembre 1990, nous avons envisagé des expériences très simples à réaliser (transvasement d'un liquide d'un récipient dans un autre) et nous les avons modélisées. Nous avons vu qu'il est possible d'interpréter les modèles obtenus et de les utiliser pour expliquer les notions de **vitesse de réaction** et d'**équilibre chimique**. Les modèles permettent alors de simuler des réactions du type  $A \rightarrow B$  et  $A \leftrightarrow B$ .

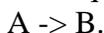
## Une situation concrète et sa symbolisation

On dispose de deux bechers, l'un rempli d'eau, l'autre initialement vide. Il s'agit de transvaser le contenu d'un becher dans l'autre à l'aide d'un tube de verre. On souhaite connaître le volume de liquide dans chaque récipient en fonction du nombre d'opérations effectuées.

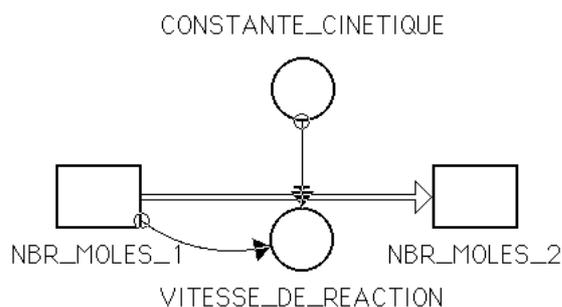


## Interprétation du modèle

Le modèle ci-dessus peut être interprété et utilisé pour simuler une réaction chimique du type:



Les volumes correspondent alors à des nombres de moles, le volume transvasé à une vitesse de réaction et la section du tube à une constante cinétique.



*Que ferons-nous  
la prochaine fois ?*

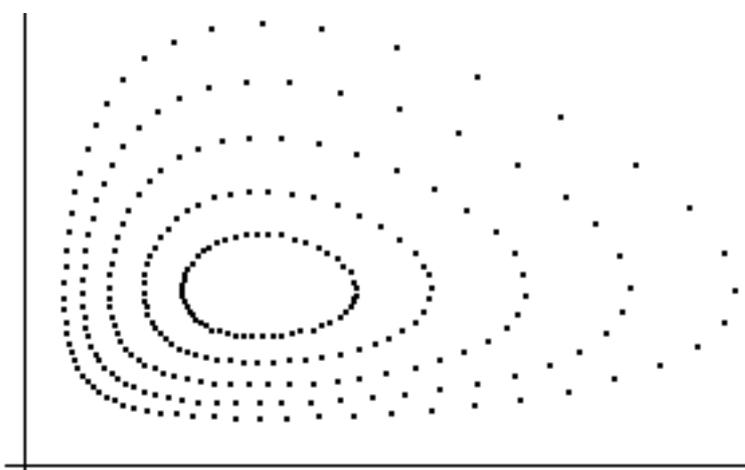
Lundi 29 octobre 1990, nous verrons comment **modéliser différents types de réactions chimiques** à partir de schémas réactionnels. Les modèles obtenus permettront de **simuler des réactions oscillantes** et d'obtenir la concentration des différents réactifs au cours du temps. Nous montrerons que, selon le modèle utilisé, la période des oscillations dépend de la valeur initiale des concentrations (modèle de Lotka-Volterra), ou, au contraire, qu'elle est indépendante des concentrations initiales (Brusselateur, Oregonateur).

*Modèle de  
Lotka-Volterra*

Ce modèle prédit l'existence d'oscillations périodiques pour les concentrations des réactifs. Si l'on reporte la concentration d'un des réactifs en fonction de celle de l'autre, on obtient, dans l'espace des concentrations, des orbites fermées. La taille de ces orbites et la période d'oscillation dépendent des concentrations initiales.

*Espace des concentrations*

Concentration Y

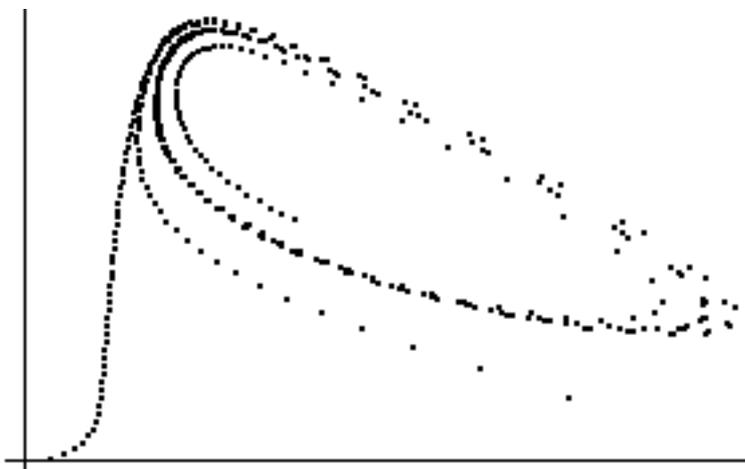


Concentration X

*Brusselateur et  
Oregonateur*

Avec ces deux modèles, nous avons affaire à des cycles limites. Pour différentes valeurs des concentrations initiales, le système tend vers la même trajectoire dans l'espace des concentrations et la période des oscillations ne dépend plus des concentrations initiales.

Concentration Y



Concentration X