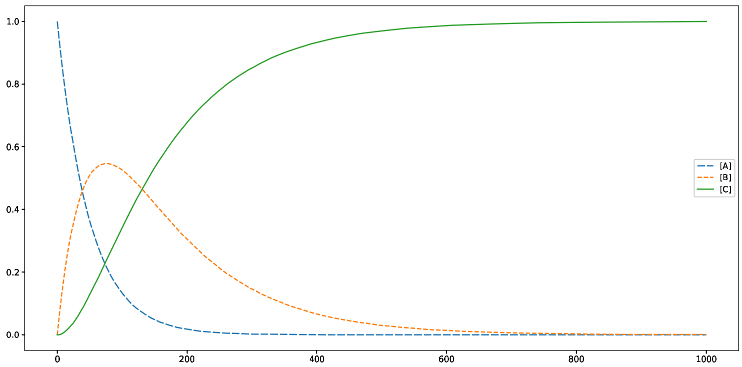
Cinétique chimique : correction

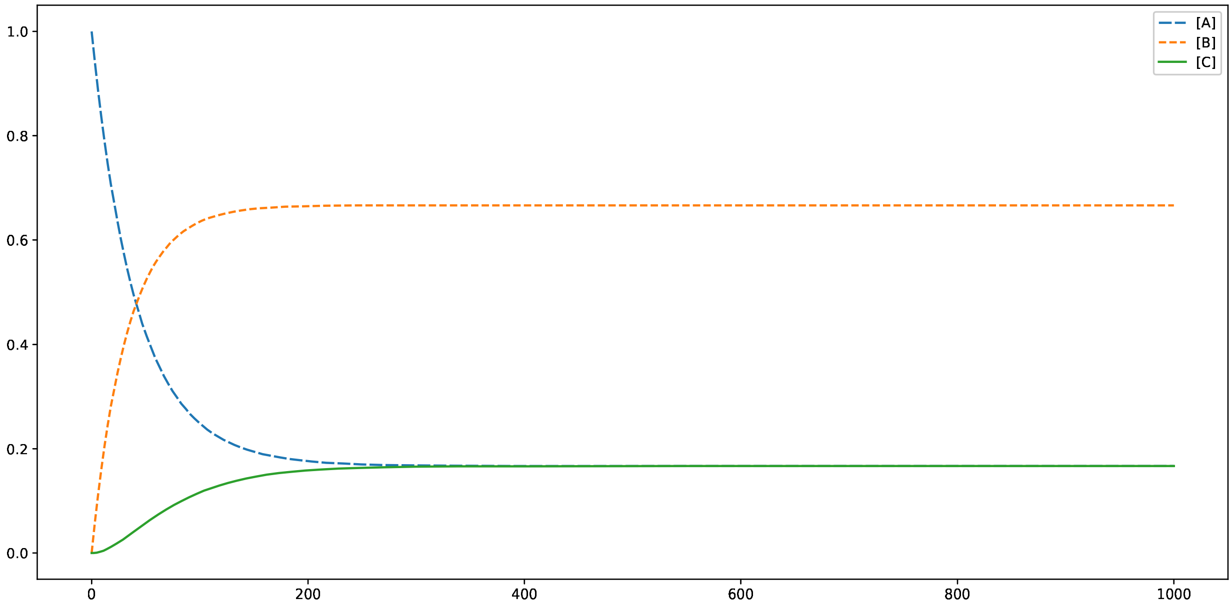
```python
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def euler(T,delta,k1,k2,km1,km2):
    a=0.01
    b=c=0
    t=0
    A=[a]
    B=[b]
    C=[c]
    L=[t]
    while t<T:
        a,b,c=a+delta*(km1*b-k1*a),b+delta*(k1*a+km2*c-km1*b-k2*b),\
                c+delta*(k2*b-km2*c)
        A.append(a)
        B.append(b)
        C.append(c)
        t+=delta
        L.append(t)
    return A,B,C,L

sols=euler(1000,1,2e-2,8e-3,0,0)
plt.plot(sols[-1],sols[0],'-.')
plt.plot(sols[-1],sols[1],'--')
plt.plot(sols[-1],sols[2])
plt.legend(['[A]','[B]','[C]'])
```



Le fait que les constantes k_{-1} et k_{-2} soient nulles signifie que les réactions $A \to B$ et $B \to C$ sont totales. En conséquence, comme le montre le graphique, en fin de réaction, seule l'espèce C est encore présente.

```python
plt.figure()
sols=euler(1000,1,2e-2,5e-3,5e-3,2e-2)
plt.plot(sols[-1],sols[0],'-.')
```

```python
plt.plot(sols[-1],sols[1],'--')
plt.plot(sols[-1],sols[2])
plt.legend(['[A]','[B]','[C]'])
```



À la limite $t \to +\infty$, les concentrations des réactifs peuvent être considérées comme constantes d'où

$$\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}[B]}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{d}t} = 0$$

Les limites des concentrations des réactifs sont donc solutions du système

$$\left\{\begin{array}{rcl} k_{-1}[B] - k_1[A] & = & 0 \\ k_1[A] + k_{-2}[C] - k_{-1}[B] - k_2[B] & = & 0 \\ k_2[B] - k_{-2}[C] & = & 0 \end{array}\right. \Leftrightarrow \left\{\begin{array}{rcl} k_{-1}[B] - k_1[A] & = & 0 \\ k_2[B] - k_{-2}[C] & = & 0 \end{array}\right.$$

la seconde équation étant somme des deux autres.
Pour résoudre ce système, on écrit l'équation de conservation des espèces chimiques, ici $[A]+[B]+[C] = [A]_0$.
On obtient finalement

$$\left\{\begin{array}{rcl} [A] & = & \dfrac{k_{-1}[B]}{k_1} = \dfrac{k_{-1}[A]_0}{1 + k_{-1} + \frac{k_1 k_2}{k_{-2}}} \\ [B] & = & \dfrac{[A]_0}{1 + \frac{k_{-1}}{k_1} + \frac{k_2}{k_{-2}}} \\ [C] & = & \dfrac{k_2[B]}{k_{-2}} = \dfrac{k_2[A]_0}{1 + k_2 + \frac{k_{-1}k_{-2}}{k_1}} \end{array}\right.$$