Master 1ère année **Année 2006-2007**
Thierry.Dauxois@ens-lyon.fr

Examen du cours "des Systèmes Dynamiques au Chaos"

Jeudi 26 avril 2007

Notes de cours manuscrites autorisées sauf pour la question de cours.

1 Question de cours

1) A la lumière de la théorie des systèmes dynamiques, commenter l'assertion suivante :

L'état présent du système de la Nature est évidemment une suite de ce qu'il était au moment précédent, et si nous concevons une intelligence qui, pour un instant donné, embrasse tous les rapports des êtres de cet Univers, elle pourra déterminer pour un temps quelconque pris dans le passé ou dans l'avenir la position respective, les mouvements et, plus généralement, les affections de tous ces êtres.
Laplace, Essai philosophique sur les probabilités (1778).

On discutera de la notion de sensibilité aux conditions initiales, en l'illustrant par la trajectoire dans l'espace des phases de deux points initialement proches. Quelle implication cela a-t-il en termes de prédiction ? Un système déterministe (décrit par des lois mathématiques) peut-il dans le même temps être imprédictible ?

2) Expliquez en quelques mots ce qu'est un attracteur. En existe-t-il dans le cas de systèmes non dissipatifs ? Qu'appelle-t-on attracteur étrange ?

3) Rappeler les formes génériques (ou le diagramme de bifurcation) des bifurcations fourche et nœud-col supercritiques.

2 Problème : Exemples d'oscillations chimiques

2.1 Le Bruxellateur irréversible

I. Prigogine (Prix Nobel 1977) et R. Lefever ont proposé en 1968 un modèle à deux variables X et Y qui présente des oscillations périodiques asymptotiquement stables. En raison d'une étape autocatalytique, cet ensemble a d'abord reçu le nom de "modèle trimoléculaire". Ultérieurement, on lui a substitué celui de Bruxellateur, car Bruxelles était la ville où il a été conçu.

Considérons le modèle constitué par le schéma réactionnel suivant

$$
\begin{aligned}
A &\rightarrow X &(1)\\
B + X &\rightarrow Y + D &(2)\\
2X + Y &\rightarrow 3X &(3)\\
X &\rightarrow E &(4)
\end{aligned}
$$

Les lettres du début de l'alphabet A, B, D, E désignent conformément à une convention usuelle, des espèces dont les concentrations sont fixes au cours du temps. Cela traduit que la réaction a lieu dans un réacteur ouvert. Les lettres de la fin de l'alphabet, X et Y, représentent quant à elles, les espèces chimiques "libres", c'est-à-dire variables dans le temps. Comme il n'y a aucune ambiguïté possible et que les notations s'en trouvent allégées, la même lettre servira à désigner à la fois l'espèce chimique elle-même et sa concentration.

- 2.1(a) Écrire les deux équations cinétiques du modèle déterminant la dépendance en fonction du temps des concentrations X et Y. On rappelle que pour une réaction chimique élémentaire
$$\alpha A + \beta B \quad \rightarrow \quad \gamma C, \tag{5}$$
la vitesse d'apparition de l'espèce chimique C est $\dot{C} = \gamma k\, A^\alpha B^\beta$, alors que la vitesse de disparition de A est $\dot{A} = -\alpha k\, A^\alpha B^\beta$ (à ne pas confondre avec la vitesse de la réaction $v = \dot{C}/\gamma = -\dot{A}/\alpha = -\dot{B}/\beta$). On notera k_i la constante de la réaction chimique (i).
- 2.1(b) Quelle est l'importance des concentrations D et E ?
- 2.1(c) En faisant les changements de variables appropriés, montrer que l'on peut réécrire les deux équations de la question 2.1(a) sous la forme
$$\dot{x} \;=\; \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau} = a - bx + x^2y - x \tag{6}$$
$$\dot{y} \;=\; \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\tau} = bx - x^2y \tag{7}$$
où τ, x, y, a et b sont cinq variables sans dimensions que l'on déterminera
- 2.1(d) Déterminer le ou les états stationnaires.
- 2.1(e) Déterminer leur(s) stabilité. On récapitulera le résultat en indiquant dans le plan (a, b) les différents domaines, ainsi que le type et la stabilité des différents états stationnaires. On notera $b_c(a)$ le seuil de stabilité.
- 2.1(f) Quelle est l'étape chimique responsable de l'instabilité ? Commenter.
- 2.1(g) Considérons une situation chimique où le paramètre a est constant. Déterminer le type de la bifurcation apparaissant lorsque b varie.

2.2 Modèle de Schlögl

La bifurcation du Bruxellateur que nous venons d'étudier peut être considérée comme une transition du comportement dynamique. Cette transition peut être caractérisée par un exposant critique et il est donc tentant de chercher à établir un parallèle, voire une analogie, entre les transitions de phase à l'équilibre. C'est dans cet ordre d'idée que nous allons examiné maintenant un autre modèle de réaction chimique imaginé par Schlögl en 1971.
$$A + 2X \quad \rightleftarrows \quad 3X \tag{8}$$
$$B + X \quad \rightleftarrows \quad C, \tag{9}$$
dont les constantes seront notées k_8 et k_9 pour les deux réactions allant vers la droite, et k_{-8} et k_{-9} pour les deux réactions allant vers la gauche.

- 2.2(a) Déterminer l'équation définissant la variation de concentration de X au cours du temps et montrer qu'en introduisant les variables que l'on définira, on aboutit à
$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau} = \dot{x} = -x^3 + qx^2 - x + qp. \tag{10}$$
On explicitera les paramètres q et p.
- 2.2(b) Déterminer les états stationnaires. Il n'est pas nécessaire de mener une étude analytique poussée et en tout état de cause inutile de connaître l'expression des solutions d'une équation du troisième degré. On privilégiera le recours à une méthode graphique dès que cela est possible.
- 2.2(c) Déterminer la stabilité des différents états stationnaires.
- 2.2(d) Pourquoi parle-t-on de bistabilité ? Quel phénomène classique retrouve-t-on ?
- 2.2(e) Quelle analogie avec un problème classique de transition de phase proposeriez vous ?
- 2.2(e) Quel est l'analogue du point $(q = \sqrt{3}, p = 1/9)$ dans ce cadre ?
- 2.2(g) Caractériser une situation particulière dans laquelle, on obtiendra une dynamique très lente que l'on appelle ralentissement critique.