EXERCICE 1 (13 points)

Objet : étude de la cinétique d'une réaction en chaîne.

On considère un réacteur dans lequel on fait réagir du CH_4 dans du Cl_2 en excès. Dans ce cas, on peut modéliser les réactions par des cinétiques d'ordre 1 :

$$CH_4 \longrightarrow CH_3Cl \longrightarrow CH_2Cl_2 \longrightarrow CHCl_3 \longrightarrow CCl_4$$

On note $a = [CH_4]_0$ la concentration initiale en CH_4 et k une constante de vitesse exprimée en min^{-1}. Le temps t est exprimé en minutes.

Les valeurs approchées seront arrondies au centième le plus proche.

Les trois parties A, B et C sont indépendantes.

Partie A.

$[CH_4]_t$ étant la concentration en CH_4 à l'instant t, on pose $x(t) = \dfrac{[CH_4]_t}{a}$.
À l'instant $t = 0$, la concentration en CH_4 est égale à a : $x(0) = 1$.
Les lois cinétiques donnent l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dx}{dt} = -4kx \qquad (1)$$

1. a. Donner la solution générale de l'équation différentielle (1).

b. Déterminer la solution de l'équation (1) qui vérifie la condition initiale $x(0) = 1$.
$[CH_3Cl]_t$ étant la concentration en CH_3Cl à l'instant t, on pose $y(t) = \dfrac{[CH_3Cl]_t}{a}$.

À l'instant $t = 0$, la concentration en CH_3Cl est nulle, donc $y(0) = 0$.
Les lois cinétiques donnent l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dy}{dt} = -3ky + 4ke^{-4kt}$$

Cette équation peut s'écrire sous la forme :

$$y' + 3ky = 4ke^{-4kt} \qquad (2)$$

2. Résoudre l'équation différentielle homogène associée :

$$y' + 3ky = 0$$

3. Déterminer une solution particulière de l'équation (2) de la forme

$$t \longmapsto \lambda e^{-4kt}$$

où λ est une constante réelle.

4. a. Déterminer la solution générale de l'équation différentielle (2).

b. Préciser la solution de cette équation (2) qui vérifie la condition initiale $y(0) = 0$.

Partie B.

$[CH_2Cl_2]_t$ et $[CHCl_3]_t$ étant les concentrations en CH_2Cl_2 et $CHCl_3$ à l'instant t, on pose : $z(t) = \dfrac{[CH_2Cl_2]_t}{a}$ et $v(t) = \dfrac{[CHCl_3]_t}{a}$.

À l'instant $t = 0$, ces concentrations sont nulles et donc $z(0) = v(0) = 0$.

Les lois cinétiques donnent les équations différentielles suivantes :

$$\left\{\begin{array}{ll} \dfrac{dz}{dt} = -2kz + 12k\left(e^{-3kt} - e^{-4kt}\right) & (3) \\ \dfrac{dv}{dt} = -kv + 2kz & (4) \end{array}\right.$$

1. Montrer que $v'(0) = 0$.

2. a. Montrer que l'équation (4) s'écrit sous la forme : $\quad z(t) = \dfrac{1}{2k}\left[v'(t) + kv(t)\right].$

2. b. En dérivant cette expression de z, exprimer $z' = \dfrac{dz}{dt}$ en fonction de $v' = \dfrac{dv}{dt}$ et de $v'' = \dfrac{d^2v}{dt^2}$.

b. En reportant les expressions de z et de $\dfrac{dz}{dt}$ dans l'équation (3), montrer que v vérifie l'équation différentielle du second ordre linéaire à coefficients constants (E_1) suivante :

$$v'' + 3kv' + 2k^2v = 24k^2\left(e^{-3kt} - e^{-4kt}\right).$$

3. Résoudre l'équation différentielle homogène (E_0) associée :

$$v'' + 3kv' + 2k^2v = 0$$

4. Déterminer une solution particulière de l'équation (E_1) de la forme

$$t \longmapsto \alpha e^{-3kt} + \beta e^{-4kt}$$

où α et β sont des constantes.

5. Donner la solution générale de l'équation différentielle (E_1).

On suppose maintenant que $k = 0{,}1$.

6. Montrer que la solution v qui vérifie les conditions initiales $v(0) = 0$ et $v'(0) = 0$ est définie par :

$$v(t) = 4e^{-0{,}1t} - 12e^{-0{,}2t} + 12e^{-0{,}3t} - 4e^{-0{,}4t}.$$

Partie C.

On considère la fonction v définie pour tout réel $t \geqslant 0$ par :

$$v(t) = 4e^{-0{,}1t} - 12e^{-0{,}2t} + 12e^{-0{,}3t} - 4e^{-0{,}4t}$$

1. a. Calculer la dérivée v' de v.

b. Vérifier que la dérivée de v peut s'écrire :

$$v'(t) = 0{,}4e^{-0{,}1t}\left(4e^{-0{,}1t} - 1\right)\left(e^{-0{,}1t} - 1\right)^2$$

2. Étudier le signe de $v'(t)$ en fonction de t. En déduire le tableau de variation de la fonction v sur l'intervalle $[0; 75]$.

3. Représenter graphiquement la fonction v pour $t \in [0; 75]$, dans un repère orthogonal d'unités graphiques : $1\,cm$ sur l'axe des abscisses ($1\,cm$ représente donc 10 minutes) et $20\,cm$ sur l'axe des ordonnées.

EXERCICE 2 (7 points)

Partie I : plan d'expériences.

Les valeurs approchées seront arrondies au millième le plus proche.

Pour établir un modèle du rendement en trichlorométhane, on réalise un plan factoriel d'expériences complet portant sur deux facteurs X_1 et X_2 : la température et la durée du passage des gaz dans le réacteur.
Ce plan d'expériences est construit selon l'algorithme de Yates.

On suppose que le rendement y du phénomène est modélisé par une expression de la forme :

$$y = a_0 + a_1X_1 + a_2X_2 + a_{12}X_1X_2 + \varepsilon$$

où a_0, a_1, a_2, a_{12} sont des réels et ε une variable aléatoire qui suit une loi normale de moyenne 0 et d'écart type s , où s est un réel > 0.

On attribue les niveaux suivants aux facteurs :

niveau	-1	1
durée X_1	10 minutes	20 minutes
température X_2	50^oC	100^oC

Les quatre expériences réalisées ont donné les résultats suivants :

expérience	1	2	3	4
durée	10 min	20 min	10 min	20 min
température	50^oC	50^oC	100^oC	100^oC
rendement	0,05	0,10	0,15	0,25

1. Établir la matrice complète des interactions.

2. Calculer les estimations ponctuelles des effets.

3. Donner l'expression du modèle.

4. Interprétation

a) Que représente le coefficient a_0 par rapport à ces expériences ?

b) En interprétant des effets des deux facteurs, quelles sont les conditions optimales pour la fabrication du trichlorométhane ?

Partie II : étude statistique. *Les valeurs approchées seront arrondies au millième le plus proche.*

On suppose que l'estimation ponctuelle de a_1 est 0,038.

On considère que l'effet du facteur X_1 est estimé par une variable aléatoire qui suit une loi normale d'écart type $\sigma_e = 0{,}005$.

Calculer un intervalle de confiance de l'effet du facteur X_1 au seuil de risque $\alpha = 5\%$.