

TD Capacité numérique du 16/10/24

Evolution de la température en fonction du temps pour une transformation adiabatique

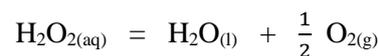
Ceci est un document réponse, il peut être complété dans les cadres prévus.

Il est accompagné d'un Jupiter Notebook « Notebook_CN_Réacteur adiabatique.ipynb » que vous trouverez sur le site de la classe à la rubrique Physique-Chimie/TD.

Capacité numérique : simuler, à l'aide d'un langage de programmation, l'évolution temporelle de la température pour un système siège d'une transformation adiabatique modélisée par une seule réaction chimique dont les caractéristiques cinétiques et l'enthalpie standard sont données.

On considère un calorimètre contenant une masse d'eau $m_{\text{eau}} = 1 \text{ kg}$ et une quantité de matière de peroxyde d'hydrogène $n_0 = 1 \text{ mol}$.

Après introduction d'une solution de chlorure ferreux, on observe la transformation modélisée par la réaction d'équation



On considérera que l'ajout de la solution de chlorure ferreux (de faible volume) ne modifie pas la capacité thermique du système.

La réaction considérée est d'ordre 1 par rapport au peroxyde d'hydrogène.

La réaction est supposée suffisamment lente pour que la température soit définie à chaque instant.

Données thermodynamiques : On se place dans l'approximation d'Ellingham.

Enthalpie standard de réaction	$\Delta_r H^\circ = -94,6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
Capacité thermique massique de l'eau	$c_{\text{eau}} = 4,18 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$
Capacité thermique du calorimètre	$C_{\text{cal}} = 100 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$
Constante des gaz parfaits	$R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$

Capacité thermique molaire d'un gaz parfait diatomique $c_{p,\text{molaire}} = \frac{7}{2}R$

Données cinétiques :

Énergie d'activation	$E_a = 72,4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
Facteur de fréquence	$A = 1,3 \times 10^{11} \text{ min}^{-1}$

Dans tout le sujet on se place dans l'approximation d'Ellingham.

I. Température de réaction adiabatique ou température de flamme

Q1. Capacité thermique totale

Exprimer la capacité thermique totale C du système. Les capacités thermiques des solutions aqueuses sont assimilées à celle de l'eau. Montrer que la capacité thermique du dioxygène formé reste négligeable. C sera supposée constante au cours du temps.

Q2. Calcul de la température finale adiabatique (ou température de flamme)

Effectuer un bilan enthalpique entre l'état initial et l'état final pour exprimer la température finale atteinte T_f dans le cas d'une évolution adiabatique à pression constante en fonction de la température initiale T_i , de la capacité thermique totale C , de l'enthalpie de réaction $\Delta_r H^\circ$ et de l'avancement maximal ξ_{\max} .

II. Evolution temporelle de la température

On considère une évolution infinitésimale durant dt .

1. Etude cinétique

Q3. Exprimer la constante de vitesse $k(T)$ en fonction des données et de la température T .

Q4. Pour une cinétique d'ordre 1, écrire la relation entre $\frac{d\xi}{dt}$, k , n_0 et l'avancement ξ . Ce sera la relation (1).

2. Etude thermochimique

Q5. Ecrire un bilan enthalpique pour une évolution infinitésimale adiabatique à pression constante. En déduire l'expression de $\frac{dT}{d\xi}$ en fonction de $\Delta_r H^\circ$ et C . Ce sera la relation (2).

3. Résolution

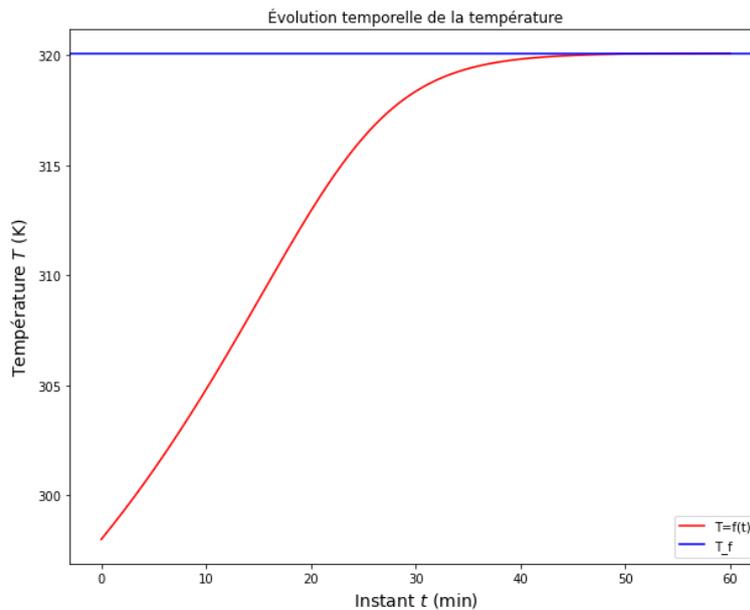
Pour résoudre ce système, on peut utiliser la méthode d'Euler pour une intégration numérique. Le principe sera le suivant :

- partir des conditions initiales et considérer l'évolution d'une durée dt et en déduire le nouvel instant
- calculer par la relation (1) la variation d'avancement $d\xi$ correspondant en considérant la température initiale et en déduire l'avancement
- calculer par la relation (2) la variation de température dT correspondant à la variation d'avancement calculée et en déduire la température correspondante.
- on obtient ainsi un nouveau triplet (t, ξ, T)
- recommencer la procédure à partir de ce nouvel état

On peut ainsi suivre l'évolution de la température en fonction du temps, et vérifier que cette température tend bien vers la température dite adiabatique (ou température de flamme).

Q6. Compléter le Jupiter Notebook « Notebook_CN_Réacteur adiabatique.ipynb » que vous trouverez sur le site de la classe à la rubrique Physique-Chimie/TD.

On obtient la courbe tracée ci-dessous. Commentez.



III. Prise en compte des pertes thermiques :

Une partie de l'énergie libérée par la réaction est perdue à travers les parois du réacteur.

La puissance perdue à travers les parois du réacteur s'écrit

$$P_{perdu} = K(T - T_{ext})$$

où K est une constante liée à l'isolation thermique du réacteur, T est la température intérieure et T_{ext} est la température de l'air extérieur supposée constante.

Pour tenir compte de ces pertes, le bilan thermique deviendra :

$$dH = \delta Q_p = -K(T - T_{ext})dt$$

Q7. Ecrire la nouvelle expression de dT en fonction de dξ et dt qui va remplacer la relation (2).

Q8. Ecrire dans le Jupiter Notebook le nouveau code permettant de tracer l'évolution temporelle de la température.

Commenter le graphe obtenu :

