

Capacités numériques 1 : Python

On étudie la réaction de dismutation du peroxyde d'hydrogène $\text{H}_2\text{O}_2(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \frac{1}{2} \text{O}_2(\text{g})$, catalysée par Fe^{2+} . Pour cela on introduit $n_0=1$ mol de H_2O_2 placée dans $m_{\text{eau}}=1$ kg d'eau à $T_0=298$ K. Cette réaction présente un ordre 1 par rapport à H_2O_2 .

PROBLÈME 1 : Évolution de l'avancement volumique au cours du temps d'un système siège d'une transformation chimique en réacteur fermé isotherme (révisions des techniques de PCSI)

Dans un 1^{er} temps la réaction est faite à l'air libre, dans des conditions monobares isothermes.

But : tracer l'évolution de l'avancement molaire ξ en fonction du temps entre $t_0 = 0$ min et $t_f = 250$ min.

Données :

- énergie d'activation de la réaction : $E_a = 72,4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$;
- paramètre pré-exponentiel : $A = 1,3 \cdot 10^{11} \text{ min}^{-1}$.

Pour cela :

1) Préparation théorique :

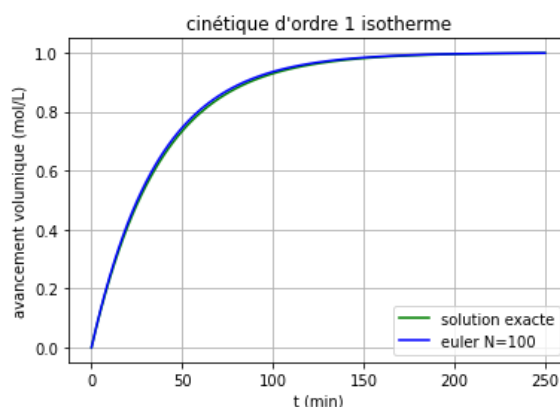
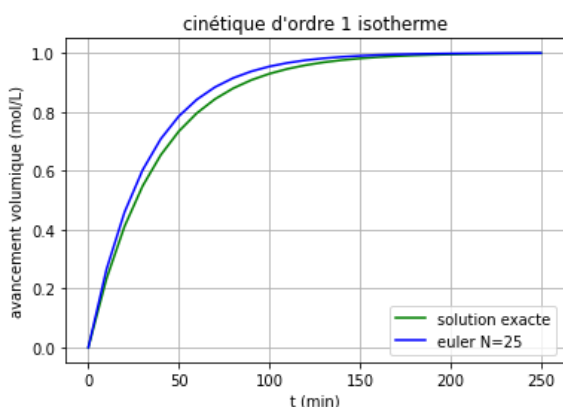
- a) donner l'expression de k en fonction de T : $k(T)=\dots$
- b) donner l'équation différentielle reliant l'avancement volumique ξ en fonction de t , $\frac{d\xi}{dt} = \dots$
- c) intégrer cette équation différentielle pour exprimer ξ en fonction de t : $\xi(t)=$

2) programme python

Le fichier **CN1-part1-NOM.py** est disponible sur cdp onglet capacités numériques. Ce fichier contient l'appel des bibliothèques, les données numériques et la structure du programme. Il faut compléter les trous !!!

- a) Écrire la fonction k , ayant T (température : float) en argument, et qui renvoie la valeur numérique de $k(T)$.
- b) Écrire la fonction d_ksi , ayant T (température : float), ξ (avancement : float), et dt (intervalle de temps entre deux estimations successives de température : float) en arguments, et qui renvoie la valeur numérique de $d\xi$, variation de l'avancement volumique pendant dt .
- c) Écrire le code basé sur la méthode d'Euler permettant de générer les 2 listes t_euler et ξ_euler , et qui contiennent respectivement les valeurs du temps, de la température, et de l'avancement. Ces listes seront de longueur $N+1=26$ (c'est-à-dire pour un pas $dt=10$ min) pour commencer. Pour trouver ce code, il faut bien avoir compris que durant dt , l'avancement a évolué de $d\xi$.
- d) tracer la fonction intégrée sur le même graphe, pour cela : Écrire la fonction $\xi_int(t,T)$ ayant t (temps : float) et T (température : float) en argument, et qui renvoie la valeur numérique de ξ .
- e) Tracer sur le même graphe les 2 courbes $\xi_int=f(t)$ et $\xi_euler=f(t)$, puis examiner l'effet du pas en passant par $N=100$ (pas=2.5 min) puis $N=250$ (pas=1 min).

Solutions :



Pour $N=100$ on devine les 2 courbes, pour $N=200$ elles sont parfaitement confondues