

Capacités numériques 1 : Python

On étudie la réaction l'hydrolyse de l'anhydride acétique, d'équation : $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} = 2 \text{CH}_3\text{COOH}$
 Pour cela on introduit $n_0=1$ mol de $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$ et $n_1 = 50$ mol d'eau (que l'on considérera comme en excès) à $T_0 = 298$ K.

Le volume du système est considéré égal à 900 mL et constant, calcul réalisé en négligeant toute variation de volume lors du mélange et lors de la variation de température.

Cette réaction présente un ordre 1 par rapport à $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$.

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 : $E_a = 50.5 \text{ kJ.mol}^{-1}$;
- paramètre pré-exponentiel : $A = 1.68 \cdot 10^7 \text{ min}^{-1}$.

Pour cela :

1) Préparation théorique :

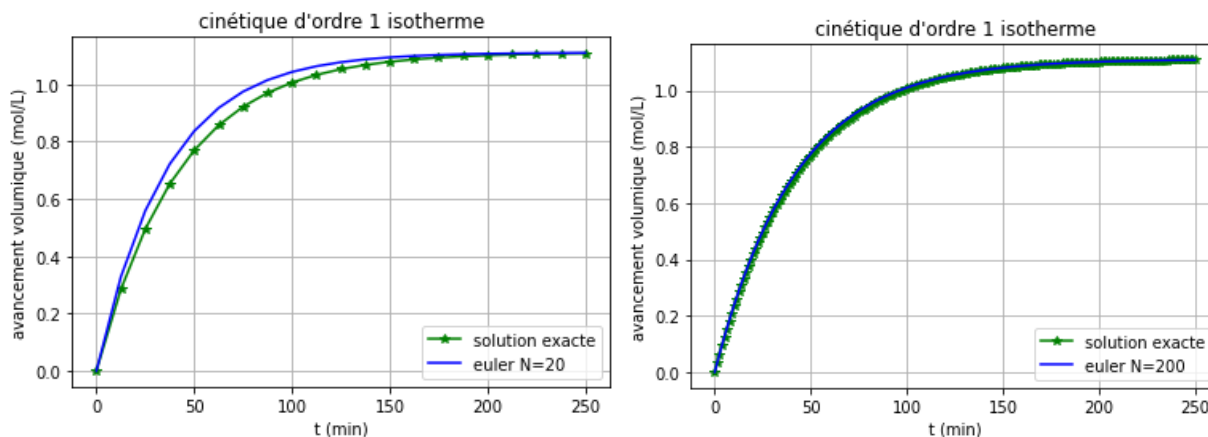
- donner l'expression de k en fonction de T : $k(T)=\dots$
- donner l'équation différentielle reliant l'avancement volumique ξ en fonction de t , $\frac{d\xi}{dt} = \dots$
- intégrer cette équation différentielle pour exprimer ξ en fonction de t : $\xi(t)=\dots$

2) programme python

Le fichier **CN1-parti-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 !!!

- Écrire la fonction k , ayant T (température : float) en argument, et qui renvoie la valeur numérique de $k(T)$.
- Écrire la fonction d_ksi , ayant T (température : float), ksi (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 .
- Écrire le code basé sur la méthode d'Euler permettant de générer les 2 listes t_euler et ksi_euler , et qui contiennent respectivement les valeurs du temps, de la température, et de l'avancement. Ces listes seront de longueur $N+1=21$ (c'est-à-dire pour un pas $dt=12.5$ min) pour commencer.
 Pour trouver ce code, il faut bien avoir compris que durant dt , l'avancement a évolué de $d\xi$.
- tracer la fonction intégrée sur le même graphe, pour cela :
 Écrire la fonction $ksi_int(t,T)$ ayant t (temps : float) et T (température : float) en argument, et qui renvoie la valeur numérique de ξ .
- Tracer sur le même graphe les 2 courbes $ksi_int=f(t)$ et $ksi_euler=f(t)$, puis examiner l'effet du pas en passant par $N=100$ (pas=2.5 min) puis $N=200$ (pas=1.25 min).

Solutions :



Pour $N=200$ elles sont confondues

Plus le pas est petit, plus la méthode d'Euler est efficace

PROBLÈME 2 : Évolution de l'avancement volumique d'un système au cours du temps siège d'une transformation chimique exothermique en réacteur fermé adiabatique et évolution de la température au cours du temps

Capacité numérique PC 1 : tracer, 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 de réaction sont données.

Problématique : L'enceinte étant adiabatique et la réaction exothermique, la température du milieu va augmenter à chaque instant, donc k et la vitesse de réaction aussi. La réaction étant plus rapide, on étudiera les évolutions entre $t_0 = 0 \text{ min}$ et $t_{f2} = 200 \text{ min}$.

On a donc un système à 3 variables T , t et ξ liées par 2 équations différentielles.

On considère la même réaction que précédemment dans les mêmes conditions initiales, la solution est contenue dans un calorimètre de capacité thermique C_{calo} , dans des conditions monobares adiabatiques.

But : tracer l'évolution de l'avancement molaire ξ et l'évolution de T en fonction du temps entre $t_0 = 0 \text{ min}$ et $t_{f2} = 200 \text{ min}$.

Données :

- énergie d'activation de la réaction : $E_a = 50.5 \text{ kJ.mol}^{-1}$;
- paramètre pré-exponentiel : $A = 1.68 \cdot 10^7 \text{ min}^{-1}$.
- capacité thermique massique de l'eau liquide : $c_{\text{eau}} = 4.18 \text{ J.K}^{-1}.\text{g}^{-1}$;
- capacité thermique du calorimètre $C_{\text{calo}} = 85.3 \text{ J/K}$
- $\Delta_r H^\circ = -56.0 \text{ kJ.mol}^{-1}$ à 298 K
- $M_{\text{H}_2\text{O}} = 18 \text{ g/mol}$

Pour cela :

1) Préparation théorique :

a) donner l'équation différentielle reliant l'avancement volumique ξ en fonction de t : $\frac{d\xi}{dt} = \dots$

Remarque : cette équation est la même que celle de la question b) du problème 1 MAIS **on ne peut plus l'intégrer** car $k(T(t))$ dépend de t et on ne connaît pas la dépendance...

b) La transformation étant monobare adiabatique, on est dans des conditions de calcul de température de flamme, montrer qu'en bonne approximation $dT = - \frac{\Delta_r H^\circ \times d\xi}{C_{\text{calo}} + m_{\text{eau}} c_{\text{eau}}}$

2) programme python Le fichier **CN1-partII-NOM.py** est disponible sur cdp.

Aidez vous du programme précédent (fonctions : k , d_ksi , ksi_int , $euler$) et des données fournies dans **CN1-partII-NOM.py**, pour le compléter avec :

a) Ecrire une fonction dT ayant d_ksi ($d\xi$: float) en argument, et qui renvoie la valeur numérique de dT

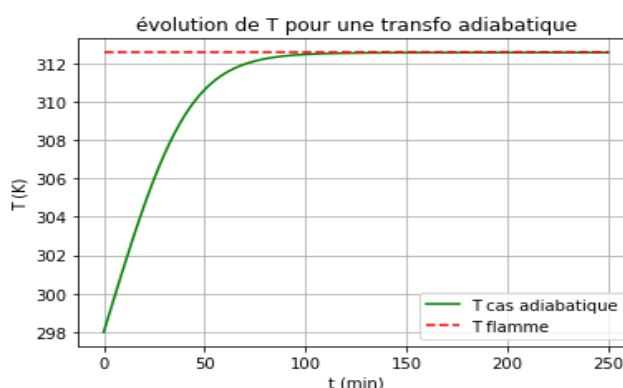
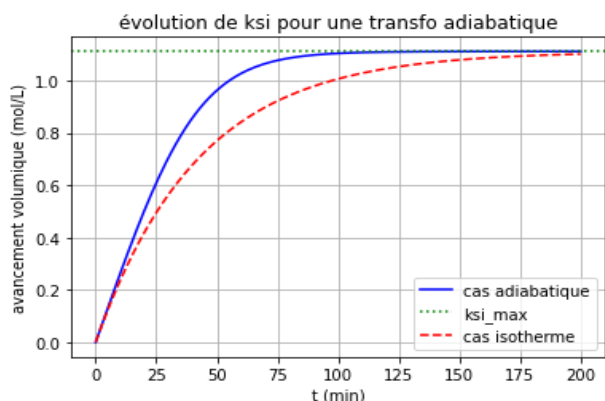
b) Ecrire le code basé sur la méthode d'Euler permettant de générer les trois listes t_euler , T_euler et ksi_euler , et qui contiennent respectivement les valeurs du temps, de la température, et de l'avancement. Ces listes seront de longueur $N+1=101$.

Pour trouver ce code, il faut bien avoir compris que durant dt , l'avancement a évolué de $d\xi$, et la température a évolué de dT .

c) tracer les courbes superposées de $ksi=f(t)$ dans le cas isotherme et adiabatique

d) tracer la courbe $T=f(t)$

Solutions



Si vous êtes arrivés à ce résultat :

😊😊😊😊😊 Félicitations, vous avez réussi votre première compétence numérique de 2^{nde} année 😊😊😊😊😊

Sinon trouver vos erreurs ! votre programme DOIT compiler !!!

Et n'hésitez pas à me questionner !