

CN 1

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.

Mise en équation

$$k(T) = A \times \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) \quad (0)$$

$$v = \frac{d\xi}{dt} = k(T)(C_0 - \xi) \quad (1)$$

$$d\xi = k(T)(C_0 - \xi)dt \quad (2)$$

- **Cas ISOTHERME**
- **Cas ADIABATIQUE**

Cas ISOTHERME

- Si T constant : alors $k(T)$ est constante
- But : On peut alors tracer $\xi=f(t)$ par 2 méthodes :
- L'intégration de (1) :
 - $\xi = C_0(1 - \exp(-kt))$
 - calculer $k(T)$ grâce à une fonction

```
27 # 3- fonction k
28 def k(T) :
29     return A*np.exp(-Ea/(R*T)) # attention bien mettre les () et les *
```

- définir une liste d'abscisse de t_abs

$t_abs=np.linspace(t_0,t_f,N+1)$
- calculer $\xi(t)$ grâce à une fonction ksi_int

```
42 #3- ksi par intégration de l'équa diff
43 t_abs=np.linspace(t0,tf2,N+1)
44 def ksi_int(T,t) :
45     return C0*(1-np.exp(- k(T)*t))
46
```

- **La méthode d'Euler**, alors, il faut :

- calculant $k(T)$ grâce à la fonction k
- définir le pas dt
- définir une fonction $d\xi = k(T)(C_0 - \xi)dt$

```
31      # 3- d_ksi
32      def d_ksi(T,ksi,Dt):
33          return k(T)*(C0-ksi)*Dt
34
```

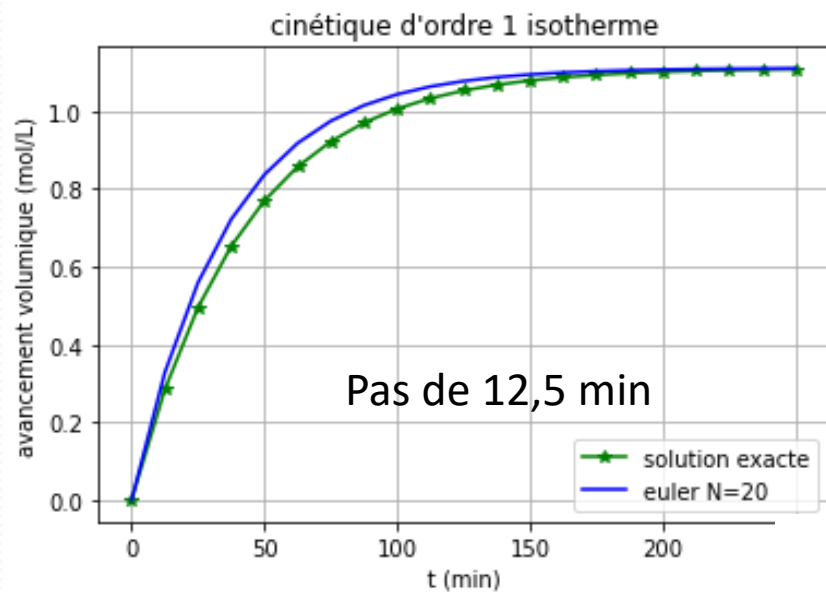
- faire une boucle pour définir les listes de t et ξ :
 - $t = t + dt$
 - $\xi = \xi + d\xi$

```
35      #3-euler : avec une boucle
36      t_euler=[t0]
37      ksi_euler=[ksi0]
38      for i in range(N) :
39          t_euler.append(t_euler[i]+Dt)
40          ksi_euler.append(ksi_euler[i]+d_ksi(T0,ksi_euler[i],Dt))
```

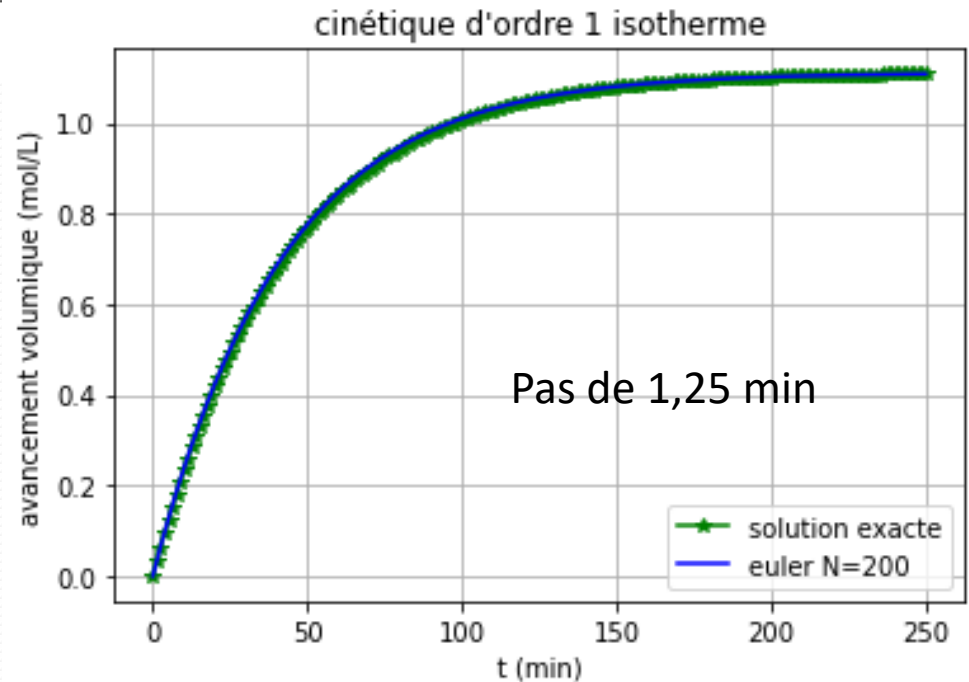
- Tracé des courbes

```
47 # 4- tracé des courbes
48 plt.plot(t_abs,ksi_int(T0,t_abs),'-*g',label="solution exacte")
49 plt.plot(t_euler,ksi_euler,'-b',label='euler N={:.0f}'.format(N))
50 plt.grid() #parce que ça fait joli
51 plt.legend()
52 plt.title("cinétique d'ordre 1 isotherme")
53 plt.xlabel('t (min)')
54 plt.ylabel('avancement volumique (mol/L)')
```

- interprétation :



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



Cas ADIABATIQUE :

- la réaction étant exothermique : $T \nearrow$ au cours du temps
- Si T n'est pas constant alors $k(T)$ dépend de t et on ne peut pas intégrer (1)
- Et en faisant un bilan entre t et $t+dt$, cad entre ξ et $\xi+d\xi$, on trouve :

- $$dT = - \frac{\Delta rH^\circ \times d\xi}{C_{calo} + m_{eau}c_{eau}} \quad (3)$$

- $$k = A \times \exp\left(-\frac{Ea}{R \times T}\right) \quad (0)$$

- $$d\xi = k(C_0 - \xi)Dt \quad (2)$$

- Il y a plusieurs paramètres qui varient k , T , $d\xi$, ξ et dT

- On applique la méthode d'Euler pour cela on définit :

- les fonctions :

Cf. partI

- fonction k
- fonction dksi
- fonction dT

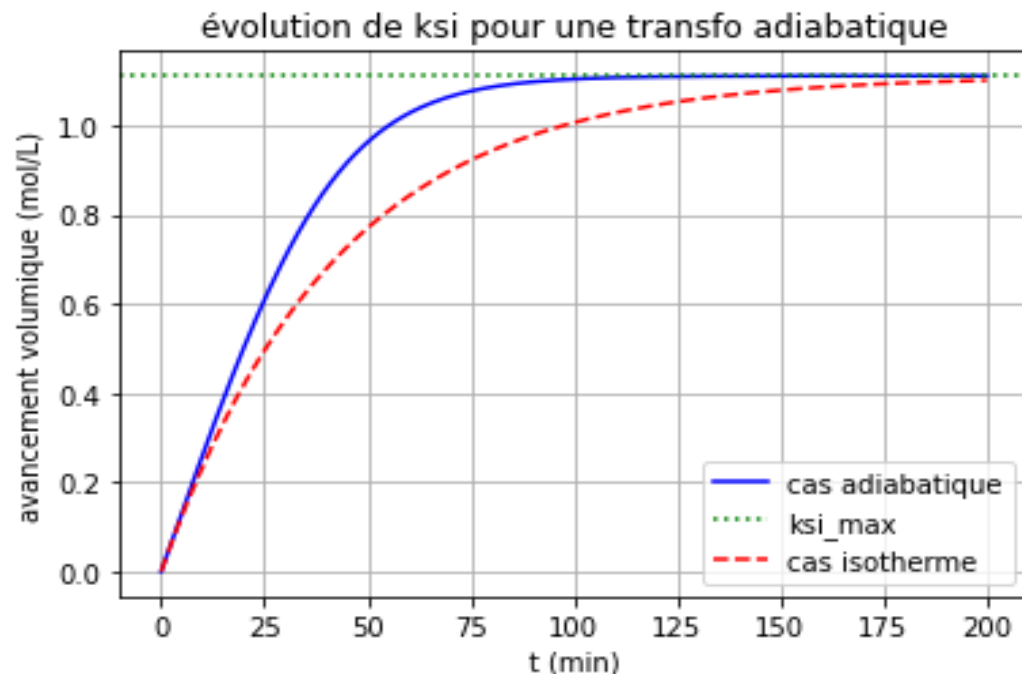
- une boucle pour définir les listes de t et ksi et T :

- $t = t + Dt$
- $ksi = ksi + dksi$
- $T = T + dT$

```
45 #3-euler : avec une boucle
46 t_euler=[t0]
47 T_euler=[T0]
48 ksi_euler=[ksi0]
49 for i in range(N):
50     t_euler.append(t_euler[i]+Dt)
51     T_euler.append(T_euler[i]+dT(d_ksi(T_euler[i],ksi_euler[i],Dt)))
52     ksi_euler.append(ksi_euler[i]+d_ksi(T_euler[i],ksi_euler[i],Dt))
```

• Tracé des courbes

```
70 plt.plot(t_euler,ksi_euler,'-b',label='cas adiabatique')
71 plt.axhline(y=C0,color='g',linestyle=':',label='ksi_max')
72 plt.plot(t_abs,ksi_int_isotherme(t_abs,T0),'--r',label='cas isotherme')
73 plt.grid() #parce que ça fait joli
74 plt.title("évolution de ksi pour une transfo adiabatique")
75 plt.legend()
76 plt.xlabel('t (min)')
77 plt.ylabel('avancement volumique (mol/L)')
78 plt.show()
```



• Tracé des courbes

```
60 # 4- tracé des courbes
61 plt.plot(t_euler,T_euler,'-g',label='T adiabatique')
62 plt.axhline(y=Tadiab,color='r',linestyle='--',label='T_max')
63 plt.grid() #parce que ça fait joli
64 plt.title("évolution de T pour une transfo adiabatique")
65 plt.legend()
66 plt.xlabel('t (min)')
67 plt.ylabel('T (K)')
68 plt.show()
```





That's all Folks!