Équations communes

$k(T) = A \times \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right)$ (0) $\qquad v = \frac{d\xi}{dt} = k(T)(C_0 - \xi)$ (1) $\qquad d\xi = k(T)(C_0 - \xi)dt$ (2)

Cas ISOTHERME

Si T constant : alors k(T) est constante

But : On peut alors tracer ξ=f(t) par 2 méthodes :

on peut utiliser :

- **L'intégration de (1)** : $(C_0 - \xi) = C_0 \exp(-kt) \Rightarrow \xi = C_0(1 - \exp(-kt))$

Il faut au préalable :

- calculer k grâce à une fonction k(T)

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

- définir une liste d'abscisse de t_abs
- calculer ξ(t) grâce à une fonction ksi_int

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

- **La méthode d'Euler**, alors, il faut :
  - calculant k(T) grâce à la fonction k
  - définir le pas dt
  - définir une fonction $d\xi = k(T)(C_0 - \xi)dt$

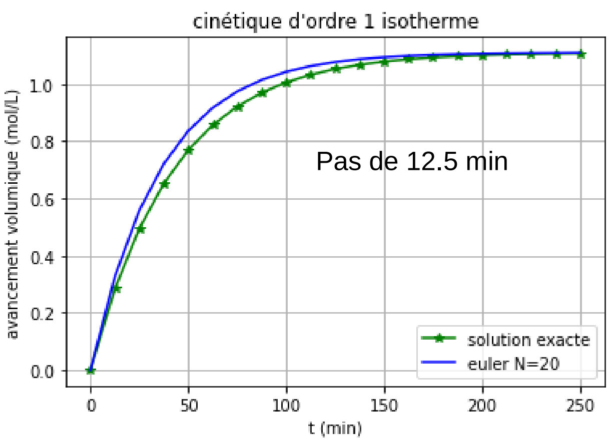
```
# 3- d_ksi
def d_ksi(T,ksi,Dt):
    return k(T)*(C0-ksi)*Dt
```

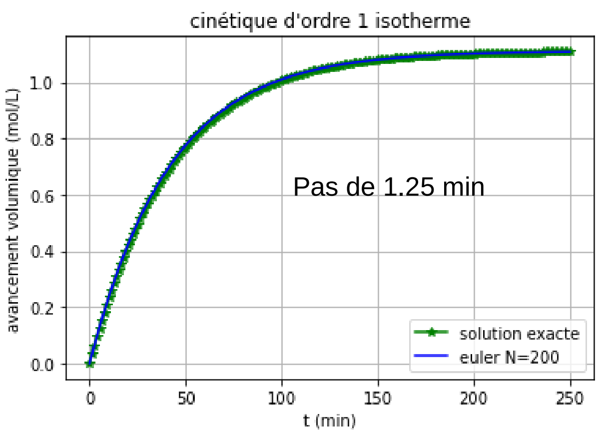
  - faire une boucle pour définir les listes de t et ksi:
    - t =t +dt
    - ksi =ksi +dksi

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

tracé :

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





Pour N=200 elles sont confondues

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

Cas ADIABATIQUE :

la réaction étant exothermique : T ↗ 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 ξ+dξ, on trouve :

$$dT = -\frac{\Delta rH° \times d\xi}{c_{calo} + m_{eau} c_{eau}} \qquad (3)$$

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

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

Il y a plusieurs paramètres qui varient k, T, dξ, ξ et dT

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

- les fonctions :
  - fonction k
  - fonction dksi
  - fonction dT

```
#3- dT
def dT(d_ksi):
    return -DrH*d_ksi*V/(ccalo+n1*Meau*ceau_mass)
```

- une boucle pour définir les listes de t et ksi et T :
  - t =t +Dt
  - ksi =ksi +dksi
  - T=T+dT

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

tracé :

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

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

Solutions