

Analyse numérique avec Python™ : Mécanisme réactionnel

Lire le document « Python – résolution système d'équations différentielles avec odeint »

Télécharger et étudier les documents Google Colab sur les mécanismes réactionnels de base :

- Fiche résolution système d'équations différentielles avec odeint.ipynb ;
- Cours S2PC.3 Réactions successives.ipynb ;
- Cours S2PC.3 Réactions opposées.ipynb ;
- Cours S2PC.3 Contrôle cinétique & thermodynamique.ipynb

Analyse numérique 1.1 Réactions successives

Prenons le mécanisme réactionnel ci-dessous :



1°) Définir les expressions des différentes vitesses de formation ou de consommation, en déduire l'écriture du système d'équations différentielles sous la forme recherchée pour utiliser la méthode de résolution numérique.

2°) Résoudre numériquement ce système pour les conditions initiales suivantes :

avec des concentrations initiales $[A](t_0) = [B](t_0) = 1 \text{ mol.L}^{-1}$; $[C](t_0) = [D](t_0) = 0 \text{ mol.L}^{-1}$;

avec des constantes de vitesse $k_1 = k_2 = 1 \text{ L.mol}^{-1}.\text{s}^{-1}$

3°) Tracer l'évolution des concentrations des réactifs et produits au cours du temps sur un intervalle de 10 s.

4°) Faire varier les valeurs des constantes de vitesse et discuter des courbes obtenues et du rôle de C.

Analyse numérique 1.2 Contrôle cinétique et contrôle thermodynamique

On considère les réactions suivantes, supposées d'ordre 1 dans le sens direct et le sens inverse.



1°) Établir le système d'équations différentielles régissant l'évolution des concentrations en A, B et C.

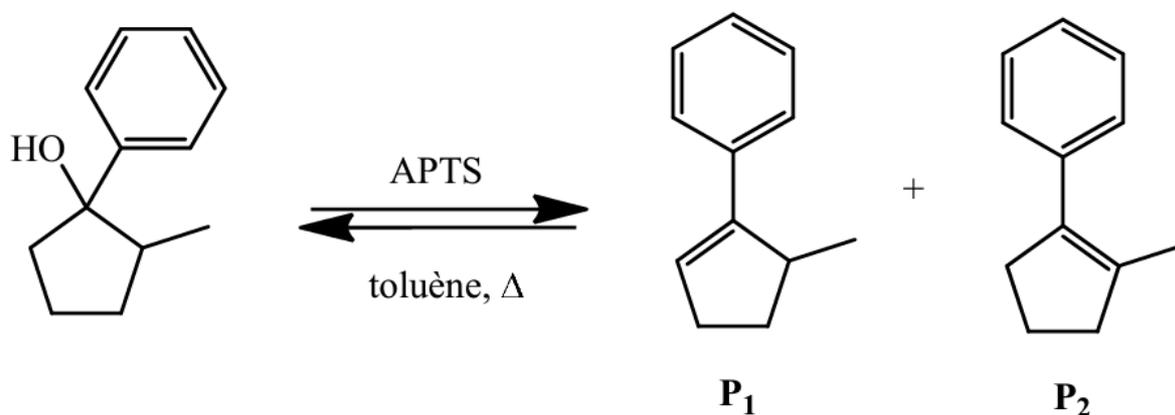
2°) Résoudre numériquement ce système d'équations différentielles.

3°) Tracer l'évolution des concentrations en A, B et C en fonction du temps sur 10 min, puis sur 50 min pour les conditions suivantes : $[A](t_0) = 1 \text{ mol.L}^{-1}$; $[B](t_0) = [C](t_0) = 0 \text{ mol.L}^{-1}$; avec des constantes de vitesse : $k_1 = 1 \text{ min}^{-1}$; $k_{-1} = 0,2 \text{ min}^{-1}$; $k_2 = 0,4 \text{ min}^{-1}$ et $k_{-2} = 0,04 \text{ min}^{-1}$

- 4°) Pour chaque réaction, relier la constante d'équilibre aux constantes de vitesse des réactions directe et inverse et la calculer.
- 5°) Dans les premiers instants de la réaction, quel produit est majoritaire ? Quelle est la nature du contrôle de la réaction ?
- 6°) Aux temps plus longs, quel produit est majoritaire ? Quelle est alors la nature du contrôle de la réaction ?

Application :

La réaction de déshydratation du 2-méthyl-1-phénylcyclopentanol en catalyse acide peut conduire aux deux alcènes P_1 et P_2 .



On présente ci-dessous les résultats obtenus par une étude expérimentale de la réaction. Les proportions des deux produits dans le mélange ont été déterminées par chromatographie en phase gazeuse à différents instants de la transformation.

T (min)	15	35	50	65	80	100	120
%(P₁)	55	37	29	24	14	10	9
%(P₂)	45	63	71	76	86	90	91

Par ailleurs, des calculs de modélisation moléculaire ont permis de calculer la constante d'équilibre associée à la réaction $P_1 \rightleftharpoons P_2$, à la température d'ébullition du toluène : $K^\circ = 7$

- 7°) Interpréter les résultats expérimentaux en termes de contrôle de la réaction.