Évolution de la température pour un système siège d'une transformation adiabatique

Soit la réaction suivante :

$$(CH_3CO)_2O_{(aq)} + H_2O_{(l)} = 2\ CH_3COOH_{(aq)}$$

Le réacteur est considéré parfaitement calorifugé.

Les quantités de matière initiales sont 1 mol d'anhydride et 10 mol d'eau En large excès d'eau, la réaction admet un ordre 1.

Le volume V du système est considéré égal à 275 mL et constant.

Les grandeurs thermodynamiques sont :
- $\Delta_r H^o(298K) = -56$ kJ/mol.
- capacités calorifiques massique de l'eau : $c_e = 4,18$ J/K/g
- masse volumique de l'eau : $\rho_e = 1$ kg/L.

Les paramètres cinétiques sont : $A = 1,68.10^7$ s^{-1} et $E_a = 50,5$ kJ/mol.

Etude cinétique

1. Exprimer la vitesse v en fonction de l'avancement ξ et du volume V.
2. Ecrire la loi de vitesse v de la réaction en fonction de la constante de vitesse k et des concentrations utiles.
3. Exprimer la différentielle de l'avancement $d\xi$ en fonction, entre autre, de la constante de vitesse et des concentrations utiles.
4. Exprimer la cosntante de vitesse k en fonction de la température.

Etude thermodynamique

5. Exprimer la variation de température dT en fonction de l'avancement $d\xi$

Résolution

On utilise ici la méthode d'Euler afin d'estimer l'évolution de l'avancement ξ et de la température T lorsque le temps varie de dt.

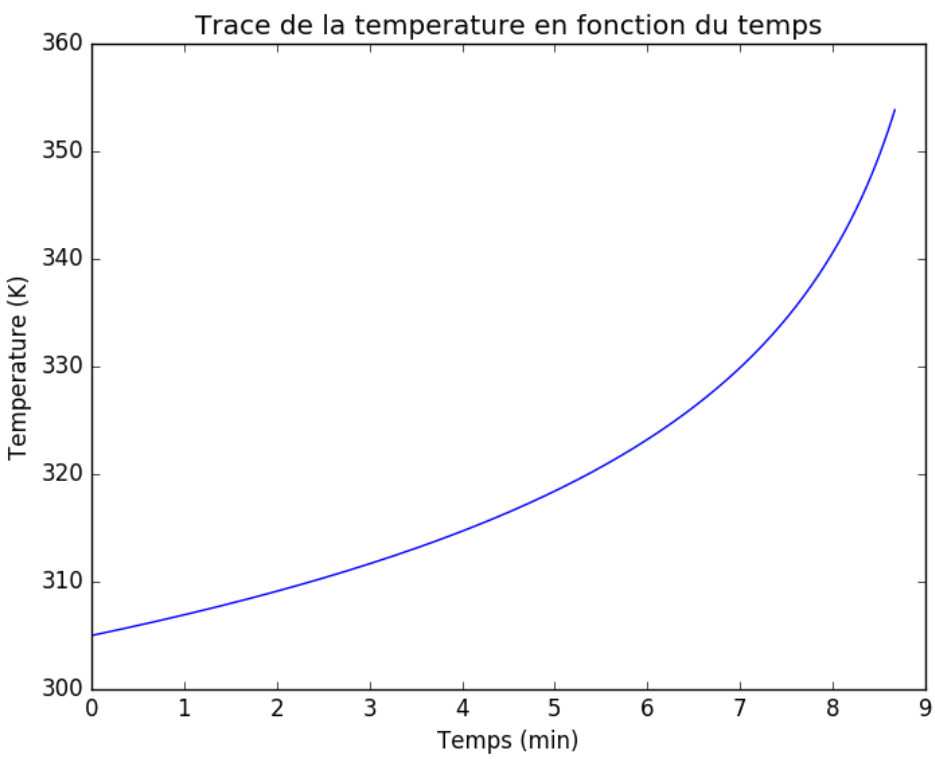
6. Expliquer brièvement le principe de la méthode d'Euler.
7. Quelles sont les grandeurs qui varient au cours du temps ? Exprimer leurs variations, depuis l'instant initial $t = 0$, en fonction de dt.

On propose le début code python suivant pour appliquer la méthode d'Euler :

```
T = 305
t = 0
ksi = 0
c = 1/V
Cp = 1150
DeltarH = -56000
dt = 0.01
V = 0.275

def k(T) :
        return 1.68e7*exp(-6078.78/T)

ListeT = [T]
Listet = [t]

while ksi < 0.999 :
```

8. Compléter le code pour déterminer la variation de température T au cours du temps t.

   Voici la variation de la température au cours du temps :



9. L'évolution est-elle cohérente par rapport à la réaction étudiée ?