

Capacité numérique – Résolution d'équations différentielles

Programme : Mettre en œuvre la méthode d'Euler explicite afin de résoudre une équation différentielle d'ordre 1 ou un système d'équations différentielles

I. Rappeler succinctement le principe de la méthode d'Euler pour résoudre une équation différentielle du 1^{er} ordre écrite sous la forme $f'(t) = F(f(t), t)$
 $f'(t)$ désigne la fonction dérivée (par rapport à la variable t) de f .

Dans la suite on utilisera la fonction `odeint`

■ La fonction `odeint` doit être chargée à partir du module `scipy.integrate` :

Chargement du module : `from scipy.integrate import odeint`

■ Cette méthode de résolution numérique ne concerne que des équations différentielles du 1^{er} ordre que l'on peut mettre sous la forme : $f'(t) = F(f(t), t)$.

f est la fonction de la variable t que l'on cherche à déterminer, $f'(t)$ désigne la fonction dérivée (par rapport à la variable t) de f .

La valeur de f à l'instant t_0 doit être connue (**condition initiale**)

■ Principe de la résolution :

On se donne un vecteur $t = (t_0, t_1, \dots, t_n)$ qui donne l'échantillon de temps sur lequel on veut résoudre le problème. Partant de $f_0 = f(t_0)$ qui est imposé, on calcule de proche en proche des approximations $f_1, f_2, \dots, f_n$ de $f(t_1), f(t_2), \dots, f(t_n)$ en utilisant les valeurs de la dérivée de f , c'est-à-dire la fonction F .

■ Utilisation de `odeint`

① Créer un tableau `numpy` des valeurs de la variable dont dépend la fonction f cherchée, solution de l'équation différentielle. Ainsi, par exemple, pour l'équation différentielle décrite ci-dessus, la variable est le temps t ; on crée le tableau `numpy` $T = \text{np.linspace}(\text{min}, \text{max}, \text{nombre de valeurs})$

② Définir la fonction F

③ Introduire la fonction `odeint` sachant qu'elle renvoie un tableau `numpy`, les paramètres d'entrée de la fonction `odeint` sont la fonction F , la condition initiale et le tableau `numpy` des valeurs de la variable selon la syntaxe

`Odeint(F, [f0], T)`

↓
Conditions initiales

Le tableau `numpy` renvoyé contient les valeurs de la fonction f pour les différentes valeurs de la variable contenues dans l'intervalle choisi.

II. Premier exemple d'application : Isomérisation de la menthone

La (-)-menthone s'isomérisé en (+)-isomenthone, sous l'effet d'une catalyse acide. L'isomérisation de la (-)-menthone en (+)-isomenthone peut être modélisée par la réaction représentée figure 1.

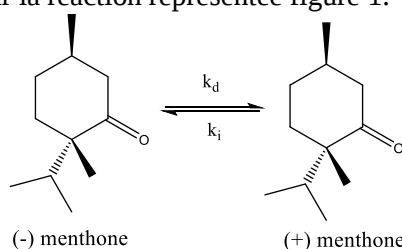


figure 1 : Réaction d'isomérisation de la (-)-menthone en (+)-menthone

La (-)-menthone et la (+)-isomenthone étant toutes deux chirales, un suivi cinétique de la transformation est réalisé par polarimétrie. Dans une enceinte maintenue à 65 °C, sont introduits :

- 15 mL de (-)-menthone ;
- 15 mL d'éthanol ;
- 100 mg d'Amberlyst solide.(catalyseur acide)

Le pouvoir rotatoire de la solution est mesuré à intervalles de temps réguliers par prélèvement et introduction d'un échantillon de solution dans une cuve de polarimétrie de longueur intérieure égale à $\ell = 10$ cm.

Données :

▪ **Pouvoirs rotatoires spécifiques à 25 °C dans l'éthanol**

	$[\alpha]_D^{25}$ ($^{\circ} \cdot \text{dm}^{-1} \cdot \text{mL} \cdot \text{g}^{-1}$)	T_{eb} sous 1 bar ($^{\circ}\text{C}$)	Densité à 298 K
(-)-menthone	-29,6	207	0,895
(+)-isomenthone	+91,7	205	

▪ **Pouvoir rotatoire de la solution initialement préparée : $\alpha_0 = -10,3^{\circ}$**

▪ **Valeurs des constantes de vitesse à 65°C**

$$k_d = 12.3 \cdot 10^{-3} \text{ min}^{-1}$$

$$k_i = 23.0 \cdot 10^{-3} \text{ min}^{-1}$$

On désigne par $x(t)$ l'avancement volumique de la réaction d'isomérisation à l'instant t .

II1. Etablir l'équation différentielle vérifiée par $x(t)$.

II2. Résoudre cette équation différentielle analytiquement.

II3. Tracer à l'aide d'un script Python les variations de l'avancement volumique x en fonction du temps puis du pouvoir rotatoire α en fonction du temps pour une durée de 100 minutes

II4. Sur le même script Python, utiliser la fonction `odeint` pour résoudre numériquement l'équation différentielle établie à la question 1. comparer graphiquement les résultats obtenus par les deux modes de résolution de l'équation différentielle.

III. Application à la résolution d'un système d'équations différentielles

La fonction odeint peut être utilisée pour résoudre un système d'équations en vectorisant .

Exemple 2 : résolution du système d'équations
$$\begin{cases} \frac{dC1}{dt} = -k * C1 \\ \frac{dC2}{dt} = k * C1 - k2 * C2 + 4 * t \end{cases}$$
 avec les conditions initiales $C1(t=0) = 0.01 \text{ molL}^{-1}$ et $C2(t=0) = 0$

```
T=np.linspace ( 0, 500 , 1000)
```

```
def F(C,t):
```

```
    C1, C2 = C[0] , C[1]
```

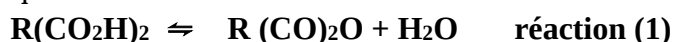
```
    Return (-k*C1 , k*C1-k2*C2+ 4*t)
```

```
sol = odeint ( F, [0.01,0],T)
```

$C1=sol[:,0]$ tableau contenant les valeurs de C1 pour les différentes valeurs de la variable t

$C2=sol[:,1]$ tableau contenant les valeurs de C2 pour les différentes valeurs de la variable t

On s'intéresse à la réaction de déshydratation d'un diacide organique HOOC-R-COOH ou $\text{R}(\text{CO}_2\text{H}_2)$ en anhydride $\text{R}(\text{CO})_2\text{O}$ en présence d'un agent desséchant tel que P_2O_5 . La transformation chimique est modélisée par la réaction d'équation bilan :



Données expérimentales :

- La masse totale du système sera prise égale à 500 kg .
- Masse molaire du diacide : $M = 180 \text{ gmol}^{-1}$
- Une étude expérimentale a montré que cette réaction est d'ordre 1 et que pour des températures comprises entre 200°C et 350°C , la constante de vitesse k (exprimée en min^{-1}) varie en fonction de la température selon la loi empirique :

$$\ln k = - \frac{25164}{T} + 41$$

- La masse totale du système (m) sera prise égale à 500 kg .
- La capacité calorifique massique du milieu (C_{th}) sera prise constante et égale à $2,09 \text{ kJkg}^{-1}\text{K}^{-1}$

A- Transformation réalisée en réacteur fermé isotherme

III1. Déterminer l'expression du temps de séjour nécessaire pour obtenir à 250°C un taux de conversion X égal à 90% . Même question pour une température de 327°C

III2. On fixe dans cette question le temps de séjour à $t =$, tracer les variations du taux de conversion obtenu en fonction de la température .

B- Transformation en réacteur adiabatique

On suppose dans cette partie que le milieu évolue de manière isobare et sans échange de chaleur avec l'extérieur .

On donne pour la réaction (1) son enthalpie standard de réaction , considérée comme indépendante de la température : $\Delta_r H^\circ = 75,24 \text{ kJmol}^{-1}$.

Initialement la température du milieu est fixée à 327°C

III3. Prévoir qualitativement comment évolue la température du milieu au cours du temps .

III4. Etablir à un instant t la relation entre la température et le taux de conversion X .

III5. Montrer que la température vérifie une équation différentielle du type $\frac{dT}{dt} = A \frac{dX}{dt}$.

III6 . A l'aide de la fonction odeint , résoudre le système d'équations différentielles vérifiées par la température et le taux de conversion .

Le temps de séjour sera limité à 60 minutes .

III7. Tracer les graphes donnant les variations en fonction du temps de séjour t de la température et du taux de conversion .

Conclure sur la possibilité d'utiliser ce procédé industriellement si on souhaite un taux de conversion supérieur à 40 % .

C. Transformation avec apport de chaleur .

On apporte au milieu réactionnel une puissance thermique $P_{th} = 4,18 \text{ MJmin}^{-1}$.

III8. En s'inspirant de la partie précédente , établir la nouvelle équation différentielle vérifiée par la température .

III9. A l'aide de la fonction odeint , résoudre le nouveau système d'équations différentielles vérifiées par la température et le taux de conversion .

Le temps de séjour reste limité à 60 minutes .

III10. Tracer les graphes donnant les variations ,en fonction du temps de séjour t , de la température et du taux de conversion avec apport de chaleur.

Tracer également le graphe donnant les variations de la température en fonction du taux de conversion .
Commenter ces graphes et analyser le rôle de la puissance thermique fournie au système .