

## Exercices

I Méthode d'Euler et cinétique chimique [●○○]

On étudie la réaction suivante :  $\text{H}_2 + \text{Br}_2 = 2\text{HBr}$ . a On montre expérimentalement qu'elle a pour loi de vitesse :

$$v = k \frac{[\text{H}_2] [\text{Br}_2]^{1/2}}{1 + k' \frac{[\text{HBr}]}{[\text{Br}_2]}} \quad (1)$$

Cette réaction n'admet donc pas d'ordre ( $v$  n'est pas du type  $k[\text{H}_2]^p [\text{Br}_2]^q$ ).

Les concentrations à  $t = 0$  sont notées  $[\text{H}_2]_0 = c_0$  et  $[\text{Br}_2]_0 = c_0$  (identiques), et on prendra  $c_0 = 1$  mol/L. On prendra également  $k = 1$  (unité SI) et  $k' = 1$ , même si ce ne sont pas les valeurs réelles.

**1** - Écrire un tableau d'avancement en concentration. On notera  $x$  l'avancement.

En déduire alors une expression de la vitesse  $v$  en fonction de  $x$  et de  $c_0$  (et de  $k$  et  $k'$ ) uniquement.

**2** - D'autre part, on rappelle que par définition,  $v = \frac{dx}{dt}$ . En déduire une équation différentielle qui porte sur  $x(t)$ .

Cette équation sur  $x(t)$  n'est pas linéaire. Pour la résoudre, nous allons utiliser la méthode d'Euler (cf fiche correspondante vue plus tôt dans l'année).

**3** - En python, écrire une fonction  $v(x)$  qui prend en argument l'avancement  $x$  et qui retourne la valeur de la vitesse  $v$ .

La structure de l'algorithme d'Euler est la suivante.

```
fin = 150      # durée de la simulation
dt = 0.1      # pas de temps, assez court

# Initialisation des listes :
liste_t = [0]
liste_x = [0]
t = 0
x = 0

nb_iterations = ... # nb total d'itérations pour aller de 0 à fin avec un pas dt

for i in range(nb_iterations):
    # on dispose des variables de l'itération précédente : t et x
    # et on calcule leurs nouvelles valeurs :
    x = ...
    t = ...
    # On ajoute ces nouvelles valeurs à chaque liste :
    liste_t.append(...)
    liste_x.append(...)
```

- 4 - Compléter le code ci-dessous pour qu'il résolve l'équation sur  $x(t)$ .
- 5 - Tracer alors  $x$  en fonction du temps.
- 6 - Tracer également l'évolution des concentrations en chacun des constituants de la réaction. On doit, à la fin, obtenir un graphique similaire à celui ci-dessous.

