

## ■ Modélisation de problèmes physiques et chimiques et leur résolution avec Python,

à l'ENSIC Nancy, du 9 au 11 mai 2016

Le stage réunissait douze participants et était organisé par deux enseignants-chercheurs de l'ENSIC : Jean-Marc COMMENGE et Romain PRIVAT.

Nous avons toujours travaillé sur ordinateur pendant les cinq demi-journées de stage. Chaque exercice proposé était précédé d'une présentation orale du problème concret qu'il fallait résoudre avec l'outil informatique. Nous avons abordé différentes problématiques issues des domaines de la chimie et de la physique à travers les exercices suivants :

- tracé de l'évolution temporelle des quantités de matières dans un réacteur fed batch (réacteur semi-ouvert avec entrée de réactif, mais sans sortie) ;
- calcul de pertes de charge dans une conduite cylindrique ;
- caractérisation d'un micromélange par réaction iodure-iodate : recherche de racines de polynômes pour l'étude de l'influence du pH sur la dismutation des ions triiodure ;
- résolution des profils de température dans un échangeur de chaleur coaxial, étude numérique de l'influence de la longueur d'un réfrigérant et du débit d'entrée du fluide froid sur la température de sortie du fluide chaud ;
- détermination numérique d'un diagramme isobare pour un système binaire en équilibre liquide-liquide et/ou liquide-vapeur (butanone-eau) à partir des propriétés des corps purs et du modèle NRTL pour les coefficients d'activité des constituants en phase liquide ;
- résolution numérique d'un système d'équations algèbro-différentielles pour l'étude d'un réacteur catalytique microstructuré : détermination des profils simulés de concentrations des réactifs et produits de la réaction dans la phase gazeuse et à la surface du catalyseur solide, comparaison avec des mesures expérimentales d'un réacteur pilote.

Le traitement numérique de ces problématiques utilisaient largement les bibliothèques matplotlib, numpy et scipy de python. En s'appuyant sur ces outils (fonction odeint, root...), il nous fallait mettre en œuvre une programmation parfois assez sophistiquée.

Parmi les participants, il y avait des chimistes, des physiciens et des mathématiciens, pour lesquels le stage était tout à fait adapté. Pour profiter pleinement du stage, il était préférable d'être à l'aise avec la programmation en python, mais les quelques participants qui débutaient en python ont été bien encadrés et ont pu progresser sur les différents exercices. Quel que soit notre niveau en programmation ou en sciences physiques et chimiques, Jean-Marc COMMENGE et Romain PRIVAT se sont montrés à l'écoute de nos difficultés et ont su prendre le temps d'y répondre. Nous les remercions donc vivement pour leur disponibilité et leurs compétences.

Nous avons tous été marqués par l'accueil très chaleureux de l'ENSIC. De nombreux temps d'échange entre organisateurs et participants ont été permis à l'occasion des pauses café, des repas et d'un dîner offert par l'ENSIC. Cette école dégage une identité forte et montre une réelle envie de communiquer vers nos élèves sur la nature de la formation pluridisciplinaire (chimie, physique, informatique...) dispensée dans l'école.

*Myriam Verdure et Laurent Heinrich*