PROBLÈME

Étude d'une réaction exothermique : stabilité thermique en réacteur fermé

Partie I – Modélisation du réacteur fermé parfaitement agité avec double enveloppe

I.1 – Etalonnage thermique du réacteur

Q1.	Le terme $\left(\rho \times V \times C_p\right)\frac{dT}{dt}$ représente la variation d'enthalpie instantanée. Le terme $-U \times A\left(T - T_p\right)$ représente la puissance thermique par convection reçu par le système d'où le signe – dans l'expression. Le terme P_{Th} représente un terme de source, c'est la puissance dissipée par effet joule.		
	Comme $\left[\rho\right] = ML^{-3}, \left[V\right] = L^3, \left[C_p\right] = \left[E \cdot \theta^{-1} \cdot M^{-1}\right] = L^2T^{-2}\theta^{-1}$ et $\left[\frac{dT}{dt}\right] = \theta T^{-1}$, le terme $\boxed{\left[\left(\rho \times V \times C_p\right)\frac{dT}{dt}\right] = ML^{-3} \times L^3 \times L^2T^{-2}\theta^{-1} \times \theta T^{-1} = ML^2T^{-3}}$		
	Comme $\left[A\right] = L^2, \left[T - T_p\right] = \theta; \left[U\right] = MT^{-3}\theta^{-1}$, le terme $\boxed{\left[-U \times A\left(T - T_p\right)\right] = L^2 \times \theta \times MT^{-3}\theta^{-1} = ML^2T^{-3}}$ $\left[P_{th}\right] = \left[E.T^{-2}\right] = ML^2T^{-3}$		
Q2.	En régime permanent $\frac{dT}{dt} = 0$ donc $0 = P_{th} - U \times A \times \left(T - T_p\right)$ donc $\boxed{T_\infty - T_p = \frac{P_{th}}{U \times A}}$		
Q3.	On en déduit $\boxed{U = \frac{P_{th}}{\left(T_\infty - T_p\right) \times A}}$. On lit sur le graphe $\boxed{T_\infty - T_p = 40^\circ C = 40K}$ D'où, $\boxed{U = \frac{96,6}{40 \times 8,0.10^{-3}} = 300W.m^{-2}.K^{-1}}$		
Q4.	On reconnait une équation différentielle du premier ordre avec un second membre constant. Sous la forme normalisée, $\left(\rho \times V \times C_p\right)\frac{dT}{dt} = P_{th} - U \times A \times \left(T - T_p\right) = -U \times A \times \left(T - T_\infty\right)$ $\frac{dT}{dt} + \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p}T = \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p}T_\infty$ soit $\boxed{\frac{dT}{dt} + \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p}T = \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p}T_\infty}$ Ici on demande un autre découpage : $\boxed{\frac{dT}{dt} = \frac{P_{th}}{\rho \times V \times C_p} - \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p} \times \left(T - T_p\right)}$ alors $\boxed{s = \frac{P_{th}}{\rho \times V \times C_p}}$ et $\boxed{\tau_c = \frac{\rho \times V \times C_p}{U \times A}}$		
	Par analyse dimensionnelle, $\boxed{\left[\tau_c\right] = \frac{ML^{-3} \times L^3 \times L^2T^{-2}\theta^{-1}}{L^2 \times MT^{-3}\theta^{-1}} = T}$ est homogène à un temps.		

Q5.	Le bilan est modifié par le fait que le terme de source est nul, s=0. La nouvelle équation est donc $\boxed{\frac{dT}{dt}+\frac{U\times A}{\rho\times V\times C_p}\times(T-T_p)=\frac{dT}{dt}+\frac{T-T_p}{\tau_c}=0}$		
Q6.	On sépare les variables $\frac{dT}{T-T_p}=-\frac{dt}{\tau_c}\Rightarrow\int\frac{dT}{T-T_p}=-\int\frac{dt}{\tau_c}+cte$ Donc, $\ln(T-T_p)=-\frac{t}{\tau}+cte$. A t=0, $T=T_{\max}\Rightarrow cte=\ln(T_{\max}-T_p)$ La solution est $\boxed{\ln(T-T_p)=-\frac{t}{\tau_c}+\ln(T_{\max}-T_p)}$		
Q7.	La pente est $-\frac{1}{\tau_c}$ donc $\boxed{\tau_C=\frac{1}{133\times10^{-2}}=75{,}0s}$		
	Par la première méthode, $\boxed{\tau=\frac{\rho\times V\times C_p}{U\times A}=\frac{10^3\times10^{-4}\times1{,}8.10^3}{300\times8.10^{-3}}=75s}$ On retrouve la même valeur. Il est à remarquer que les chiffres significatifs varient de 2 à 5 dans les données de l'énoncé !		

I.2 – Etude d'une réaction exothermique en réacteur fermé à double enveloppe

Q8.	Si la cinétique est d'ordre 1, $\boxed{r=-\frac{dC_R}{dt}=k\times C_R}$ avec $[k]=[T^{-1}]$		
Q9.	La loi d'Arrhenius donne $\boxed{k=k_0\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}$. Par analyse dimensionnelle, $\boxed{[k_0]=[k]=[T^{-1}]}$ et $\boxed{[E_a]=[RT]=ML^2T^{-2}.N^{-1}}$		
Q10.	$\frac{dC_R}{dt}=-kC_R=-k_0\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)C_R$ alors $\boxed{f(C_R,T)=k_0\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)C_R}$		
Q11.	En intégrant, à température constante, $\boxed{C_R(t)=\exp\left(-k_0\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)t\right)C_R^0=g(t)}$		
Q12.	D'où, $\boxed{X_R=\frac{C_R^0-C_R}{C_R^0}=1-\exp(-kt)=1-\exp\left(-k_0\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)t\right)}$		
Q13.	Comme $\frac{dC_R}{dt}=-kC_R$ alors $\boxed{\frac{dX_R}{dt}=-\frac{1}{C_R^0}\frac{dC_R}{dt}=+\frac{k}{C_R^0}C_R=-k(1-X_R)}$		
Q14.	Comme $[\Delta_r H^0(T)]=\underbrace{ML^2T^{-2}}_{energie}N^{-1},[r(t,X_R,T)]=\underbrace{NL^{-3}}_{concentration}T^{-1},[V]=L^3$ $\boxed{[S(t,X_R,T)]=\underbrace{ML^2T^{-2}}_{energie}N^{-1}\times\underbrace{NL^{-3}}_{concentration}T^{-1}\times L^3=\underbrace{ML^2T^{-2}}_{energie}T^{-1}}$ est une puissance		
Q15.	Considérons comme système le fluide à l'intérieur du réacteur. A pression constante, $\frac{dH}{dt}=P_{thermique}=P_{réaction}+P_{perte}$ Si on néglige la contribution des réactifs, des produits et des accessoires situés à l'intérieur du réacteur au travers de leurs capacités thermiques devant celle du solvant, il vient : $mC_p\frac{dT}{dt}=-\Delta_r H^0(T)\times r(t,X_R,T)\times V-A\times U\times(T-T_p)$		

	$$\boxed{\frac{dT}{dt}=-\frac{\Delta_r H^0(T)\times r(t,X_R,T)\times V}{mC_p}-\frac{A\times U}{mC_p}\times(T-T_p)}$$ Comme $\frac{dX_R}{dt}=-\frac{1}{C_R^0}\frac{dC_R}{dt}=\frac{1}{C_R^0}r$ et $\rho=\frac{m}{V}$ $$\boxed{\frac{dT}{dt}=-\frac{\Delta_r H^0(T)\times C_R^0}{\rho C_p}\frac{dX_R}{dt}-\frac{A\times U}{\rho\times V\times C_p}\times(T-T_p)}$$ Par identification, $\boxed{\tau_c=\frac{\rho\times V\times C_p}{U\times A}}$ et $\boxed{J=-\frac{\Delta_r H^0(T)\times C_R^0}{\rho C_p}}$		
Q16.	Comme $\left[\Delta_r H^0(T)\right]=\underbrace{ML^2T^{-2}}_{energie}N^{-1},\left[C_R\right]=\underbrace{NL^{-3}}_{concentration},\left[\rho\right]=ML^{-3},\left[C_p\right]=\underbrace{ML^2T^{-2}}_{energie}M^{-1}\theta^{-1}$ $$\boxed{\left[J\right]=\left[\frac{\Delta_r H^0(T)\times C_R^0}{\rho C_p}\right]=\frac{\underbrace{ML^2T^{-2}}_{energie}N^{-1}\underbrace{NL^{-3}}_{concentration}}{ML^{-3}\underbrace{ML^2T^{-2}}_{energie}M^{-1}\theta^{-1}}=\theta}$$		
Q17.	Application numérique : $\boxed{\left[J\right]=\frac{360\times10^3\times500}{1800}=100,0K}$		

I.3 – Stabilité thermique du réacteur

Q18.	Si la transformation est adiabatique, le terme de perte est nul. L'équation se simplifie en $\boxed{\frac{dT}{dt}=-\frac{\Delta_r H^0(T)\times C_R^0}{\rho C_p}\frac{dX_R}{dt}=J\frac{dX_R}{dt}}$		
	En intégrant, $\boxed{dT=JdX_R\Rightarrow\int dT=J\int dX_R+cte}$ Quand $X_R=0$, $T=T_0$. on en déduit $\boxed{T=T_0+JX_R}$		
Q20.	A la fin de la réaction $X_R=1$, $\boxed{T_f=T_0+J=320+100=420,0K}$ J représente donc l'élévation de la température dans un réacteur adiabatique.		

Partie II − Traitement numérique des données expérimentales

II.1 – Détermination des paramètres d'un modèle par régression linéaire

Q21.	Comme $y_i=\beta_1\times x_i+\beta_0$, $\boxed{\frac{\partial y_i}{\partial\beta_1}=x_i}$ et $\boxed{\frac{\partial y_i}{\partial\beta_0}=1}$ donc $\boxed{J=\begin{bmatrix}1 & x_1\\ 1 & x_2\\ ... & ...\\ 1 & x_{n-1}\\ 1 & x_n\end{bmatrix}}$		

Q22.	`l=len(X)`
	`J=np.ones((2,1))`
	`J[1,:]=X[:]`
	Ou
	`for i in range(len(X) :`
	`    J[0,i]=1`
	`    J[1,i]=X[i]`		

Q23	La matrice P est une matrice carré de dimension (2×2)		
Q24	P=**np.zeros**((2,2))		

```
for i in range(len(X)) :
      P[0,0]= P[0,0]+J[0,i]**2
      P[1,1]= P[1,1]+J[1,i]**2
      P[0,1]= P[0,1]+J[0,i]*J[0,i]
      P[1,0]= P[1,0]+J[0,i]*J[0,i]
```

Ou

```
P=np.zeros((2,2))
for i in range(len(X)) :
      P[0,0]= P[0,0]+1
      P[1,1]= P[1,1]+1
      P[0,1]= P[0,1]+X[i]
      P[1,0]= P[1,0]+X[i]
```

Ou

```
P=np.zeros((2,2))
for i in range(len(X)) :
      P[0,0]+= 1
      P[1,1]+= 1
      P[0,1]+= X[i]
      P[1,0]+= X[i]
```

Ou

```
P=np.zeros((2,2))
for i in range(len(X)) :
      P[0,0]= P[0,0]+1
      P[1,1]= P[0,0]
      P[0,1]= P[0,1]+X[i]
      P[1,0]= P[0,1]
```

Q24. La matrice Q est une matrice de dimension (2×1)

```
P=np.zeros((2,2))
for i in range(len(X)) :
      Q[0]= Q[0]+J[0,i]*Y[i]
      Q[1]= Q[1]+J[1,i]*Y[i]
```

Q25.

```
def inv_mat(M):
    #calcul du déterminant
    det = M[0][0] * M[1][1] - M[0][1] * M[1][0]
    #calcul des coefficients de la matrice inverse
    N = np.zeros((2,2))
    N[0][0] = 1.0 / det * M[1][1]
    N[1][1] = 1.0 / det * M[0][0]
    N[0][1] = -1.0 / det * M[1][0]
    N[1][0] = -1.0 / det * M[0][1]
    return N
```

Q26.

```
#Calcul de la matrice inverse
N = inv_mat(P)
#Calcul de B par la forme matricielle de l’équation 8
B = np.zeros(2)
B[0] = N[0][0] * Q[0] + N[0][1] * Q[1]
B[1] = N[1][0] * Q[0] + N[1][1] * Q[1]
```

II.2 – Prédiction du comportement thermique du réacteur

Q27.	Le système d'équation est : $\begin{cases}\dfrac{dX_R}{dt}=f_1(t,X_R,T)\\ \dfrac{dT}{dt}=f_2(t,X_R,T)\end{cases}$ avec $f_1(t,X_R,T)=k_0\exp\left(-\dfrac{E_a}{RT}\right)(1-X_R)$ et $f_2(t,X_R,T)=J\dfrac{dX_R}{dt}-\dfrac{T-T_p}{\tau_c}=J\times k_0\exp\left(-\dfrac{E_a}{RT}\right)(1-X_R)-\dfrac{T-T_p}{\tau_c}$ On développement de Taylor au 1er ordre donne : $\boxed{X_R(t+\Delta t)=X_R(t)+\Delta t\times\dfrac{dX_R}{dt}(t+\Delta t)+o(\Delta t)}$		
Q28	Au premier ordre, $\boxed{\dfrac{dX_R}{dt}(t+\Delta t)=\dfrac{X_R(t+\Delta t)-X_R(t)}{\Delta t}}$		
Q29	De même, $\boxed{T(t+\Delta t)=T(t)+\Delta t\times\dfrac{dT}{dt}(t+\Delta t)+o(\Delta t)}$		
Q30.	On en déduit $\boxed{\dfrac{dT}{dt}(t+\Delta t)=\dfrac{T(t+\Delta t)-T(t)}{\Delta t}}$		
Q31.	A l'aide de la question 28, il vient $\boxed{\left.\dfrac{dX_R}{dt}\right\rvert_{t_{i+1}}=\dfrac{X_{R,i+1}-X_{R,i}}{\Delta t}}$		
Q32.	On en déduit $\boxed{X_{R,i+1}=X_{R,i}+\Delta t\left.\dfrac{dX_R}{dt}\right\rvert_{t_{i+1}}=X_{R,i}+\Delta t\times f_1(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})}$		
Q33.	A l'aide de la question 30, il vient $\boxed{\left.\dfrac{dT}{dt}\right\rvert_{t_{i+1}}=\dfrac{T_{i+1}-T_i}{\Delta t}}$		
Q34.	On en déduit $\boxed{T_{i+1}=T_i+\Delta t\left.\dfrac{dT}{dt}\right\rvert_{t_{i+1}}=T_i+\Delta t\times f_2(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})}$		
Q35.	En regroupant l'équation du même coté : $\boxed{g_1(X_{R,i+1},T_{i+1})=X_{R,i+1}-X_{R,i}-\Delta t\times f_1(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})=0}$ $\boxed{g_2(X_{R,i+1},T_{i+1})=T_{i+1}-T_i-\Delta t\times f_2(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})=0}$		
Q36.	$\boxed{\dfrac{\partial g_1}{\partial X_{R,i+1}}(X_{R,i+1},T_{i+1})=1-\Delta t\times\dfrac{\partial f_1}{\partial X_{R,i+1}}(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})=1+\Delta t\times k_0\times\exp\left(-\dfrac{E_a}{RT_{i+1}}\right)}$		
	$\boxed{\begin{aligned}&\dfrac{\partial g_1}{\partial T_{i+1}}(X_{R,i+1},T_{i+1})=-\Delta t\times\dfrac{\partial f_1}{\partial T_{i+1}}(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})\\&=-\dfrac{E_a}{R(T_{i+1})^2}\Delta t\times k_0\times\exp\left(-\dfrac{E_a}{RT_{i+1}}\right)(1-X_{R,i+1})\end{aligned}}$		
	$\boxed{\dfrac{\partial g_2}{\partial X_{R,i+1}}(X_{R,i+1},T_{i+1})=-\Delta t\times\dfrac{\partial f_2}{\partial X_{R,i+1}}(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})=\Delta t\times J\times k_0\times\exp\left(-\dfrac{E_a}{RT_{i+1}}\right)}$		
	$\boxed{\begin{aligned}&\dfrac{\partial g_2}{\partial T_{i+1}}(X_{R,i+1},T_{i+1})=1-\Delta t\times\dfrac{\partial f_2}{\partial X_{R,i+1}}(t_{i+1},X_{R,i+1},T_{i+1})\\&=1-\Delta t\left(J\dfrac{E_a}{R(T_{i+1})^2}\times k_0\times\exp\left(-\dfrac{E_a}{RT_{i+1}}\right)(1-X_{R,i+1})-\dfrac{1}{\tau_c}\right)\end{aligned}}$		
Q37.	`def mat_df(x):` `    Dt = 0.01`		

```
    ko = 5.0
    Ea = 20000.0
    J = 100.0
    Tauc = 75
    R = 8.314
    k = ko * exp(-Ea / R / x[1])
    Df = np.zeros((2,2))
    Df[0][0]= 1.0 + Dt * k
    Df[0][1]= - Dt * Ea / R / x[1] / x[1] * k * (1 - x[0])
    Df[1][0]= Dt * J * k
    Df[1][1]= 1 - Dt * (J * k * Ea / R / x[1] / x[1] * (1 - x[0]) - 1 / tauc)
    return Df
```

Q38.

```
#Création et calcul de la matrice Jacobienne à l'aide de la fonction mat_df
    Df = np.zeros((2,2))
    Df = mat_df(x_old)
#Inversion de la matrice Jacobienne à l'aide de la fonction inv_mat
    Df_inv = np.zeros((2,2))
    Df_inv = inv_mat(Df)
#Création de la matrice g
    g = np.zeros(2)
    k = A * exp(-Ea / R / x_old[1])
    g[0] = x_old[0] - X_euleri[i] - Dt * k * (1 - x_old[0])
    g[1] = x_old[1] - T_euleri[i] - Dt * ( J * k * (1 - x_old[0]) - (x_old[1] -
320.0) /tau )
#Calcul de x_new à l'aide de l'équation (14)
     x_new[0]= x_old[0] + Df_inv[0][0] * g[0] + Df[0][1] * g[1]
    x_new[1]= x_old[1] + Df_inv[1][0] * g[0] + Df[1][1] * g[1]
```

Q39.

```
test = 1
x_old[0]= 0.5
x_old[1]= Tp + J / 2.0
#Début de la boucle
while test >= 1e-5:
        #Code de la question précédente (question38)
        ...
        #Calcul de la valeur test
         test = abs(x_new[1] - x_old[1])
         #x_new recopié dans x_old pour l'itération suivante
         x_old[0] = x_new[0]
         x_old[1] = x_new[1]
```

Q40.

```
t0 = 0.0
tf = 1000.0
Dt = 0.01
m = int ((tf-t0)/Dt) #attention : m est un entier
```

Q41.

```
#Initialisation des vecteurs
t_euleri = np.zeros(m+1)
X_euleri = np.zeros(m+1)
T_euleri = np.zeros(m+1)
t_euleri[0] = t0
X_euleri[0] = 0.0
T_euleri[0] = 320.0
for i in range (0,m):
#Calcul de t à l'itération i
t_euleri[i+1]= t_euleri[i] + Dt
#Initialisation des variables x_old et x_new
```

	x_old = np.zeros(2) x_new = np.zeros(2) x_old[0]= 0.5 x_old[1]= Tp + J / 2.0 #Calcul de x_new à l’itération i #Code de la question 39 ... #Stockage des valeurs dans les vecteurs X_euleri[i+1]= x_old[0] T_euleri[i+1]= x_old[1]		
Q42.	fig = plt.figure(1) plt.plot(t_euleri,T_euleri) plt.title('Evolution de la temperature en fonction du temps') plt.xlabel('temps (s)') plt.ylabel('T (K)') fig = plt.figure(2) plt.plot(t_euleri,X_euleri) plt.title('Evolution de Xr en fonction du temps') plt.xlabel('temps (s)') plt.ylabel('Xr (-)')		

FIN