

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.	<p>Le terme $(\rho \times V \times C_p) \frac{dT}{dt}$ représente la variation d'enthalpie instantanée.</p> <p>Le terme $-U \times A(T - T_p)$ représente la puissance thermique par convection reçu par le système d'où le signe – dans l'expression.</p> <p>Le terme P_{th} représente un terme de source, c'est la puissance dissipée par effet joule.</p>		
	<p>Comme $[\rho] = ML^{-3}, [V] = L^3, [C_p] = [E \cdot \theta^{-1} \cdot M^{-1}] = L^2 T^{-2} \theta^{-1}$ et $\left[\frac{dT}{dt}\right] = \theta T^{-1}$,</p> <p>le terme $\left[(\rho \times V \times C_p) \frac{dT}{dt} \right] = ML^{-3} \times L^3 \times L^2 T^{-2} \theta^{-1} \times \theta T^{-1} = ML^2 T^{-3}$</p>		
	<p>Comme $[A] = L^2, [T - T_p] = \theta, [U] = MT^{-3} \theta^{-1}$, le terme</p> <p>$\left[-U \times A(T - T_p) \right] = L^2 \times \theta \times MT^{-3} \theta^{-1} = ML^2 T^{-3}$</p> <p>$[P_{th}] = [E.T^{-2}] = ML^2 T^{-3}$</p>		
Q2.	<p>En régime permanent $\frac{dT}{dt} = 0$ donc $0 = P_{th} - U \times A \times (T - T_p)$ donc</p> <p>$T_\infty - T_p = \frac{P_{th}}{U \times A}$</p>		
Q3.	<p>On en déduit $U = \frac{P_{th}}{(T_\infty - T_p) \times A}$. On lit sur le graphe $T_\infty - T_p = 40^\circ C = 40K$</p> <p>D'où, $U = \frac{96,6}{40 \times 8,0 \cdot 10^{-3}} = 300 W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$</p>		
Q4.	<p>On reconnaît une équation différentielle du premier ordre avec un second membre constant. Sous la forme normalisée,</p> <p>$(\rho \times V \times C_p) \frac{dT}{dt} = P_{th} - U \times A \times (T - T_p) = -U \times A \times (T - T_\infty)$</p> <p>$\frac{dT}{dt} + \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p} T = \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p} T_\infty$ soit $\frac{dT}{dt} + \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p} T = \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p} T_\infty$</p> <p>Ici on demande un autre découpage :</p> <p>$\frac{dT}{dt} = \frac{P_{th}}{\rho \times V \times C_p} - \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p} \times (T - T_p)$ alors</p> <p>$s = \frac{P_{th}}{\rho \times V \times C_p}$ et $\tau_c = \frac{\rho \times V \times C_p}{U \times A}$</p>		
	<p>Par analyse dimensionnelle, $[\tau_c] = \frac{ML^{-3} \times L^3 \times L^2 T^{-2} \theta^{-1}}{L^2 \times MT^{-3} \theta^{-1}} = T$ est homogène à un temps.</p>		

Q5.	Le bilan est modifié par le fait que le terme de source est nul, $s=0$. La nouvelle équation est donc $\frac{dT}{dt} + \frac{U \times A}{\rho \times V \times C_p} \times (T - T_p) = \frac{dT}{dt} + \frac{T - T_p}{\tau_c} = 0$		
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, $\ln(T - T_p) = - \frac{t}{\tau_c} + cte$. A $t=0$, $T = T_{\max} \Rightarrow cte = \ln(T_{\max} - T_p)$ La solution est $\ln(T - T_p) = - \frac{t}{\tau_c} + \ln(T_{\max} - T_p)$		
Q7.	La pente est $-\frac{1}{\tau_c}$ donc $\tau_c = \frac{1}{133 \times 10^{-2}} = 75,0s$		
	Par la première méthode, $\tau = \frac{\rho \times V \times C_p}{U \times A} = \frac{10^3 \times 10^{-4} \times 1,8 \cdot 10^3}{300 \times 8 \cdot 10^{-3}} = 75s$ 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, $r = - \frac{dC_R}{dt} = k \times C_R$ avec $[k] = [T^{-1}]$		
Q9.	La loi d'Arrhenius donne $k = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$. Par analyse dimensionnelle, $[k_0] = [k] = [T^{-1}]$ et $[E_a] = [RT] = ML^2T^{-2} \cdot N^{-1}$		
Q10.	$\frac{dC_R}{dt} = -kC_R = -k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) C_R$ alors $f(C_R, T) = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) C_R$		
Q11.	En intégrant, à température constante, $C_R(t) = \exp\left(-k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) t\right) C_R^0 = g(t)$		
Q12.	D'où, $X_R = \frac{C_R^0 - C_R}{C_R^0} = 1 - \exp(-kt) = 1 - \exp\left(-k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) t\right)$		
Q13.	Comme $\frac{dC_R}{dt} = -kC_R$ alors $\frac{dX_R}{dt} = -\frac{1}{C_R^0} \frac{dC_R}{dt} = +\frac{k}{C_R^0} C_R = -k(1 - X_R)$		
Q14.	Comme $[\Delta_r H^0(T)] = \frac{ML^2T^{-2}}{N} N^{-1}$, $[r(t, X_R, T)] = \frac{NL^{-3}}{T} T^{-1}$, $[V] = L^3$ $[S(t, X_R, T)] = \frac{ML^2T^{-2}}{N} N^{-1} \times \frac{NL^{-3}}{T} T^{-1} \times L^3 = \frac{ML^2T^{-2}}{N} T^{-1}$ 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 : $mC_p \frac{dT}{dt} = -\Delta_r H^0(T) \times r(t, X_R, T) \times V - A \times U \times (T - T_p)$		

	$\frac{dT}{dt} = - \frac{\Delta_r H^0(T) \times r(t, X_R, T) \times V}{m C_p} - \frac{A \times U}{m C_p} \times (T - T_p)$ <p>Comme $\frac{dX_R}{dt} = - \frac{1}{C_R^0} \frac{dC_R}{dt} = \frac{1}{C_R^0} r$ et $\rho = \frac{m}{V}$</p> $\frac{dT}{dt} = - \frac{\Delta_r H^0(T) \times C_R^0}{\rho C_p} \frac{dX_R}{dt} - \frac{A \times U}{\rho \times V \times C_p} \times (T - T_p)$ <p>Par identification, $\tau_c = \frac{\rho \times V \times C_p}{U \times A}$ et $J = - \frac{\Delta_r H^0(T) \times C_R^0}{\rho C_p}$</p>		
Q16.	<p>Comme</p> $[\Delta_r H^0(T)] = \frac{ML^2 T^{-2}}{\text{energie}} N^{-1}, [C_R] = \frac{NL^{-3}}{\text{concentration}}, [\rho] = ML^{-3}, [C_p] = \frac{ML^2 T^{-2}}{\text{energie}} M^{-1} \theta^{-1}$ $[J] = \left[\frac{\Delta_r H^0(T) \times C_R^0}{\rho C_p} \right] = \frac{\frac{ML^2 T^{-2}}{\text{energie}} N^{-1} \frac{NL^{-3}}{\text{concentration}}}{\frac{ML^{-3}}{\text{energie}} \frac{ML^2 T^{-2}}{\text{energie}} M^{-1} \theta^{-1}} = \theta$		
Q17.	<p>Application numérique :</p> $[J] = \frac{360 \times 10^3 \times 500}{1800} = 100,0K$		

I.3 – Stabilité thermique du réacteur

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

Partie II – Traitement numérique des données expérimentales

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

Q21.	<p>Comme $y_i = \beta_1 \times x_i + \beta_0$, $\frac{\partial y_i}{\partial \beta_1} = x_i$ et $\frac{\partial y_i}{\partial \beta_0} = 1$ donc</p> $J = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_{n-1} \\ 1 & x_n \end{bmatrix}$		
Q22.	<pre>l=len(X) J=np.ones((2,1)) J[1,:]=X[:] Ou for i in range(len(X) :</pre> <pre> J[0,i]=1 J[1,i]=X[i]</pre>		
Q23	<p>La matrice P est une matrice carré de dimension (2 × 2)</p>		
Q24	<pre>P=np.zeros((2,2))</pre>		

	<pre> 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] </pre> <p>Ou</p> <pre> 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] </pre> <p>Ou</p> <pre> 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] </pre> <p>Ou</p> <pre> 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] </pre>		
Q24.	La matrice Q est une matrice de dimension (2 ×1)		
	<pre> 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] </pre>		
Q25.	<pre> 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 </pre>		
Q26.	<pre> #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] </pre>		

II.2 – Prédiction du comportement thermique du réacteur

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

	<pre> 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 </pre>		
Q38.	<pre> #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] </pre>		
Q39.	<pre> 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] </pre>		
Q40.	<pre> t0 = 0.0 tf = 1000.0 Dt = 0.01 m = int ((tf-t0)/Dt) #attention : m est un entier </pre>		
Q41.	<pre> #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 </pre>		

	<pre> 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] </pre>		
Q42.	<pre> 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 (-)') </pre>		

FIN