

CCP Modélisation de systèmes physiques ou chimiques PC 2016 — Corrigé

Ce corrigé est proposé par Virgile Andreani (ENS Ulm) ; il a été relu par Olivier Frantz (Professeur agrégé en école d'ingénieur) et Stéphane Ravier (Professeur en CPGE).

Le thème de ce sujet est l'étude du transfert d'un polluant dans une colonne d'absorption. Il est le prétexte, après une partie théorique, à l'implémentation de divers algorithmes d'optimisation non linéaire (l'algorithme de Nelder-Mead en une dimension), d'intégration d'un système d'équations différentielles ordinaires (l'algorithme d'Euler explicite) et enfin d'intégration numérique (la méthode des trapèzes).

- La première partie, très détaillée, ne demande pas de code et consiste en l'établissement des bilans de matière dans un dispositif similaire à la colonne. Elle ne présente pas de difficulté conceptuelle particulière, et est constituée de deux moitiés très semblables qui diffèrent seulement par la présence ou l'absence du réactif dans le liquide.
- La seconde partie, longue de vingt-trois questions, entreprend la modélisation informatique du transfert. L'objectif général est la calibration de deux paramètres à l'aide de valeurs expérimentales. Divers outils sont requis dont un optimiseur non linéaire et un intégrateur d'équations différentielles. Le pseudo-code du premier (l'algorithme de Nelder-Mead) est fourni, et le sujet guide l'écriture du deuxième (l'algorithme d'Euler explicite). Deux questions demandent une certaine familiarité avec deux algorithmes vus en cours, le tri par sélection (rappelé par l'énoncé) et la méthode des trapèzes pour l'intégration numérique.

De manière générale, le sujet est très peu clair ; l'organisation des questions, le fait que les données numériques sont disséminées dans tout le texte, ainsi que la redéfinition de symboles en cours de partie rendent sa lecture difficile. Ni la partie théorique, ni la partie informatique ne présentent un intérêt extraordinaire et l'originalité de l'algorithme de Nelder-Mead n'est même pas exploitée puisque la tâche se limite à en recopier le pseudo-code. Il est concevable qu'une analyse détaillée des propriétés de l'algorithme (comme sa convergence, problème très complexe et pas encore résolu en dimension supérieure à 1) dépasse le cadre de ce sujet de modélisation. En revanche, alors qu'un sujet de concours devrait encourager la production d'un code exemplaire, les contraintes artificielles que celui-là impose (interdiction de définir des fonctions sauf lorsque c'est explicitement demandé, manque de généralité de celles qu'il demande de définir, choix algorithmiques parfois peu inspirés et enfin constantes numériques insérées « en dur » dans le programme au lieu d'utiliser des variables, que l'on aurait pu imaginer être définies de manière globale), sont plutôt une bonne série d'exemples à ne pas suivre.

INDICATIONS

Partie II

- 1.7 Pour le changement de variable, se ramener à une simple équation de décroissance exponentielle.
- 2.5 Attention ici aussi au signe.

Partie III

- 3.2 On pourra éventuellement utiliser les capacités de vectorisation de `numpy` pour éviter d'avoir à écrire une boucle.
- 3.3.b Faire en sorte que la fonction `f` soit appliquée un nombre minimum de fois, l'exécution de celle-ci pouvant être longue.
- 3.4 Ici aussi, il est possible d'utiliser `numpy` pour simplifier le programme.
- 3.8.f Faire très attention aux instants auxquels on doit enregistrer la valeur de C_A .
- 3.15 L'intégration par la méthode des trapèzes consiste à additionner les aires des trapèzes droits délimités par l'axe des abscisses, les deux droites verticales qui correspondent à deux abscisses consécutives dans `t_exp`, et celle qui passe par les points d'intersection de la courbe et de ces deux droites verticales.

II. MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES

1.1 Pour obtenir une concentration à partir d'une pression et de la constante de Henry, il faut diviser la première par la seconde :

$$C_A^* = \frac{P_A^*}{H}$$

Numériquement,

$$C_A^* = 38,5 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$$

1.2 On obtient la dimension de l'expression considérée en remplaçant chacun de ses facteurs par leur dimension respective :

$$[k_L \times a \times (C_A^* - C_A) \times V_{\text{liq}}] = \frac{\text{L}}{\text{T}} \frac{\text{L}^2}{\text{L}^3} \frac{\text{N}}{\text{L}^3} \text{L}^3 = \frac{\text{N}}{\text{T}}$$

On trouve une quantité de matière divisée par un temps, soit un débit molaire.

1.3 C_A suit une croissance monotone jusqu'à sa valeur d'équilibre C_A^* et reste donc inférieure à celle-ci à tout instant. Par conséquent, le terme $k_L \times a \times (C_A^* - C_A) \times V_{\text{liq}}$ est **toujours positif**.

1.4 En prenant comme système de contrôle l'ensemble de la phase gazeuse à un instant t , la loi de conservation de la matière appliquée au polluant permet d'égaliser la dérivée temporelle de la quantité de matière du polluant, $\frac{dn_A}{dt}$, à la somme des termes d'entrée et de sortie, avec des signes respectivement positif et négatif.

L'entrée de polluant s'effectue par voie gazeuse avec un débit molaire F_A , comme indiqué figure 2. Sa sortie du volume de contrôle se fait vers le liquide, avec le débit molaire F_A^* . Par conséquent,

$$\frac{dn_A}{dt} = F_A - F_A^*$$

L'énoncé précise que la phase gazeuse est considérée comme étant en régime stationnaire, ce qui annule la dérivée. Par conséquent,

$$F_A = F_A^* = k_L a (C_A^* - C_A) V_{\text{liq}}$$

1.5 La phase liquide ne perd pas de matière mais elle en acquiert par son interaction avec la phase gazeuse, on peut donc écrire

$$\frac{dV_{\text{liq}} C_A}{dt} = F_A^*$$

soit

$$\frac{dV_{\text{liq}} C_A}{dt} = k_L a (C_A^* - C_A) V_{\text{liq}}$$

1.6 L'équation devient

$$\frac{dC_A}{dt} = k_L a (C_A^* - C_A)$$

1.7 La concentration C_A^* étant définie par la pression partielle de polluant P_A^* qui reste constante, elle ne change pas non plus au cours du temps. On peut effectuer le changement de variable $D = C_A^* - C_A$, qui donne

$$\frac{dD}{dt} = -k_L a D \quad \text{avec} \quad D(0) = C_A^*$$

d'où

$$D(t) = C_A^* e^{-k_L a t}$$

finalement

$$C_A(t) = C_A^* (1 - e^{-k_L a t})$$

1.8 On a trouvé à la question précédente que

$$C_A(t) = \frac{P_A^*}{H} (1 - e^{-k_L a t})$$

On peut vérifier que C_A est bien monotone croissante, initialement nulle et se stabilise à sa valeur d'équilibre C_A^* .

1.9 En réutilisant l'équation de la question 1.4, on obtient pour F_A

$$F_A = k_L a \frac{P_A^* V_{\text{liq}}}{H} e^{-k_L a t}$$

dont la dimension est

$$[F_A] = \frac{\frac{L}{T} \frac{L^2}{L^3} P L^3}{\frac{P L^3}{N}} = \frac{N}{T}$$

1.10 Comme on pouvait s'en douter, F_A tend vers 0 pour des temps longs et conjointement, C_A se stabilise à C_A^* .

2.1 L'ajout de B ne change ni le terme d'entrée F_A , ni le terme de sortie F_A^* , ni le fait que la phase gazeuse reste en régime stationnaire. Le bilan sur celle-ci n'est donc **pas modifié**.

2.2 Calculons la dimension de r_{app} :

$$[r_{\text{app}}] = \frac{L^2 N}{L^3 L^3} \sqrt{\frac{L^2 L^3 N}{T N T L^3}} = \frac{N}{T L^3}$$

C'est une concentration divisée par un temps, qui se note en $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

2.3 On a cette fois-ci un terme de perte qui représente le taux de polluant consommé par la réaction, soit $r_{\text{app}} V_{\text{liq}}$. Son signe est négatif puisqu'il s'agit d'une perte. L'équation de la question 1.5 est donc modifiée en

$$\frac{dV_{\text{liq}} C_A}{dt} = F_A^* - r_{\text{app}} V_{\text{liq}}$$

2.4 L'équation devient

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_A^*}{V_{\text{liq}}} - r_{\text{app}}$$

2.5 Le bilan de matière de l'élément B ne comporte qu'un terme de sortie (puisque il réagit avec A) et pas d'entrée, il est donc nécessairement en régime transitoire :

$$\frac{dV_{\text{liq}} C_B}{dt} = -r_{\text{app}} V_{\text{liq}}$$