



## 1/ CONSIGNES GÉNÉRALES :

### a) Présentation du sujet

Le sujet portait sur l'étude de la stabilité thermique d'un réacteur au sein duquel était mise en œuvre une réaction chimique exothermique.

La première partie était relative à la modélisation du réacteur. Il s'agissait d'un réacteur parfaitement agité avec double enveloppe. Dans cette partie, le premier travail consistait à caractériser le comportement thermique du réacteur avec la détermination de paramètres physiques intervenant dans le bilan enthalpique. Le second travail demandé permettait d'établir le système d'équations différentielles ordinaires couplées dans le cas où une réaction exothermique a lieu dans le réacteur. Ce système permettait de caractériser l'évolution du taux de conversion du réactif et de la température de la phase réactionnelle en fonction du temps. Enfin, la troisième sous-partie, plus courte que les précédentes, était consacrée à l'étude de la stabilité thermique du réacteur.

La deuxième partie, consacrée au traitement numérique des données expérimentales, était divisée en deux tâches bien distinctes. La première tâche portait sur la détermination des paramètres d'un modèle par régression linéaire avec une méthode utilisant une écriture sous forme matricielle. Cette méthode nécessitait la construction de matrices et de vecteurs ainsi que l'inversion d'une matrice de dimension  $2 \times 2$ . La deuxième tâche portait sur l'intégration numérique du système d'équations différentielles ordinaires couplées établies dans la première partie. La méthode proposée était la méthode d'Euler implicite. Cette méthode nécessitait l'écriture de développements limités rétrogrades (évaluation de la dérivée en  $t + \Delta t$  au lieu de  $t$  pour la méthode d'Euler explicite). Cette méthode conduisant à des expressions discrétisées dont les inconnues étaient le taux de conversion et la température à l'itération  $i+1$ . L'intégration numérique nécessitait donc à chaque pas la résolution numérique du système d'équations pour trouver les valeurs du taux de conversion et de la température à l'itération  $i+1$ . La méthode proposée était la méthode de Newton-Raphson, une extension de la méthode de Newton, permettant de résoudre le système par l'intermédiaire d'une matrice Jacobienne. Il s'agit d'une méthode itérative associée à un critère de convergence.

Le sujet était de difficulté moyenne et faisait appel à des notions transversales et complémentaires de chimie, de physique, de mathématique et d'informatique. Les parties étaient rédigées de manière indépendante pour ne pas bloquer les candidats qui auraient pu être en difficulté sur l'une ou l'autre des parties.

Le niveau de difficulté des questions était varié, ce qui a permis de classer les candidats. La longueur du sujet était adéquate étant donné le nombre de candidats ayant pu aborder le sujet dans son intégralité.

Une annexe présentait les principales fonctions de Python utiles à la résolution de ce sujet, ce qui permettait d'aider les candidats ne se souvenant plus de la syntaxe exacte des fonctions à utiliser.

### b) Sur la prestation des candidats

Le seul langage informatique autorisé était PYTHON et cette consigne a été parfaitement suivie.

La première partie a été dans l'ensemble souvent traitée dans son intégralité. Ce n'est pas le cas de la partie informatique. L'écriture des développements limités a souvent été réalisée, mais les questions liées à l'écriture de codes beaucoup moins. Ceci est dommage pour une épreuve de modélisation dont la finalité n'est pas seulement l'établissement d'un modèle, mais aussi sa traduction en langage informatique en vue de son utilisation.

Le soin apporté à la rédaction des copies était dans l'ensemble correct, même si parfois les codes fournis dans les copies sont difficiles à lire (mal écrit, pas de couleur, pas de commentaires). Les indentations sont dans la majorité des cas respectées.

Les consignes ne sont pas toujours respectées (emploi de fonction alors que cela n'est pas demandé et que ce n'est pas utile).

Les dernières questions ont souvent été abordées dans l'esprit d'obtenir un maximum de points et n'ont pas été très bien traitées.

Les annexes ont été peu utilisées.

On peut classer les candidats en trois groupes :

- ceux qui ne sont ni à l'aise en physique/chimie, ni en informatique.
- ceux qui se débrouillent en informatique mais qui ne maîtrisent pas la physique/chimie.
- ceux qui ont les bases dans les deux domaines.

## 2/ REMARQUES SPÉCIFIQUES :

Q1) Des confusions entre température, énergie et puissance ont été relevées dans certaines copies. Le sens physique des différents termes est mal compris. La rédaction des analyses dimensionnelles n'a pas toujours été très rigoureuse et justifiée de manière explicite (sachant que le résultat final était connu).

Q2) Certains candidats ont procédé à l'intégration de l'équation différentielle pour obtenir l'expression de la température en régime permanent alors que ce n'était pas nécessaire et un temps précieux a été perdu.

Q5) Pour la phase de refroidissement, la seule différence était l'absence de terme source ( $P_{th} = 0$ ) puisqu'on ne chauffe plus le fluide. Dans certaines copies, on a lu que le refroidissement était traduit par un changement de signe de la température ou du terme  $P_{th}$ .

Q6) Un manque de rigueur a été observé dans l'intégration de l'équation différentielle, ce qui conduit à des erreurs notamment au niveau de la détermination de la condition initiale (confusion entre  $T$  et  $T - T_p$ ).

Q8) Il y a parfois confusion entre l'expression de la vitesse de la réaction ( $r = k \times C_R$ ) et la mesure de la vitesse dans le réacteur fermé ( $\frac{dC_R}{dt} = -r$ ). Dans certaines copies, on a trouvé  $r = -k \times C_R$ .

Q9) Beaucoup d'erreurs ont été observées au niveau des dimensions et des unités. L'unité de l'énergie d'activation est trop souvent le joule alors qu'on attendait J/mol.

Q10) Très peu de copies donnent le bilan en terme de débit molaire ( $\frac{dn_R}{dt} = -k \times C_R \times V$ ) en justifiant ensuite la simplification possible grâce au volume constant.

Q11) La notion « isotherme » est connue. Par contre, très peu pensent à donner la conséquence sur la constante cinétique qui est par conséquent constante.

Q14) La réponse donnée est souvent une puissance.

Q15) Le système est rarement défini. L'écriture du bilan est rarement justifiée.

Q16) L'expression de  $J$  a souvent été déduite à partir de sa dimension (au signe près), elle-même obtenue par analyse dimensionnelle de l'équation donnée dans l'énoncé.

Q17) Le signe de  $J$  est souvent faux, en particulier lorsque l'expression du paramètre a été obtenue de manière intuitive.

Q18) Il y a confusion entre adiabatique et isotherme. Pour certains, le système adiabatique se traduit par  $T - T_p = 0$ . Pour d'autres, il se traduit par  $\frac{dT}{dt} = 0$ .

Q20) Quand  $T_f$  est calculée correctement, l'analyse de la stabilité du réacteur est en général spontanée et correcte.

Q21 – Q26) Les questions ont plutôt été bien traitées. On a noté toutefois des utilisations pas assez rigoureuses de la fonction intrinsèque sum avec des indices sans spécifications des bornes.

Attention à l'utilisation de fonctions de la bibliothèque numpy : la syntaxe est rarement correcte. Parfois, il vaut mieux passer un peu plus de temps à écrire un bout de code supplémentaire que d'utiliser une fonction intrinsèque dont on ne maîtrise pas la syntaxe. Le sujet avait d'ailleurs été imaginé dans ce sens.

Attention également à l'écriture des noms de variables qui sont parfois non réalistes. Par exemple  $\hat{B}$  ne convient pas pour l'écriture d'une variable dans un code. Il faut utiliser un nom du style B\_chapeau.

Dans certaines copies, on trouve bien la formule de l'inverse d'une matrice 2x2, mais pas le code correspondant (Q25). La nullité du déterminant est rarement testée.

Q27 – Q34) Les questions ont été bien traitées dans l'ensemble. Il y a encore des copies où l'écriture des développements limités n'est pas rigoureuse. Il manque par exemple le  $o(\Delta t)$  ou alors le signe = est utilisé à la place du signe  $\approx$ .

Q35) Certains candidats n'ont pas bien compris la question et ont voulu démontrer que les fonctions  $g_1$  et  $g_2$  étaient nulles.

Q36) Les expressions des dérivées ont rarement été déterminées. Lorsqu'elles l'ont été, beaucoup d'erreurs, notamment de signes, ont été observées.

Q37) Voir ci-dessus.

Q38) La question a été peu abordée.

Q39) La boucle while est rarement correctement traitée, même si l'instruction while figure souvent dans le code fourni.

Q40) La question a été comprise mais la syntaxe est souvent fautive. Il y a une confusion entre entier (2 par exemple) et réel (2.0). Ainsi, la double division ne fonctionnait pas car elle renvoyait un réel.

Q41) La question a été peu abordée. Lorsqu'elle l'a été, l'écriture du code n'est pas assez rigoureuse (comme pour Q37 et Q39).

Q42) Les réponses sont généralement trop compliquées par rapport à ce qui était demandé.