Concours Commun INP (CCINP), France

Session 2022, filière TPC

Modélisation

Durée : 4 heures

Ce que traite le sujet

- Partie I : mise en équation du modèle à cœur rétrécissant
- Partie II : résolution numérique
- Partie III : comparaison des deux modèles

Sujet reproduit sans retouche à partir de la page suivante.

La première page annonce une annexe en fin de sujet, qui ne figure pas dans le fichier publié sur le site du concours : le sujet s'arrête à la page 15 sur 16. Nous ajouterons cette page si le concours la publie.

Résumé des parties, chapitres de cours liés et autres années :
prepahelp.com/annales/ccinp/tpc/2022/modelisation

Prepa Help ne revendique aucun droit sur le sujet, propriété de l'organisateur du concours.

CONCOURS COMMUN INP

ÉPREUVE SPÉCIFIQUE - FILIÈRE TPC

MODÉLISATION

Durée : 4 heures

N.B. : le candidat attachera la plus grande importance à la clarté, à la précision et à la concision de la rédaction. Si un candidat est amené à repérer ce qui peut lui sembler être une erreur d'énoncé, il le signalera sur sa copie et devra poursuivre sa composition en expliquant les raisons des initiatives qu'il a été amené à prendre.

RAPPEL DES CONSIGNES

- *Utiliser uniquement un stylo noir ou bleu foncé non effaçable pour la rédaction de votre composition ; d'autres couleurs, excepté le vert, peuvent être utilisées, mais exclusivement pour les schémas et la mise en évidence des résultats.*
- *Ne pas utiliser de correcteur.*
- *Écrire le mot FIN à la fin de votre composition.*

Les calculatrices sont autorisées.

Le sujet est composé de trois parties et d'une Annexe en fin de sujet.

Étude d'une réaction à solide consommable

Présentation du problème

Les réactions à solide consommable sont courantes dans les procédés de transformation de la matière. On peut citer la réaction du dioxyde d'uranium (UO_2) avec l'acide fluorhydrique (HF) pour produire le tétrafluorure d'uranium (UF_4) selon la stœchiométrie suivante :

$$UO_2\,(s) + 4\,HF\,(g) \rightleftharpoons UF_4\,(s) + 2\,H_2O\,(g)$$

Cette réaction est impliquée dans la conversion du dioxyde d'uranium en hexafluorure d'uranium (UF_6) qui est utilisé dans les deux principaux procédés d'enrichissement de l'uranium (la diffusion gazeuse et l'ultracentrifugation) en raison de son point triple à 64 °C (à 150 kPa).

Un autre exemple est la réaction d'oxydation du sulfure de zinc en présence d'air pour former l'oxyde de zinc, un matériau semi-conducteur qui pourrait remplacer le dioxyde de titane dans les cellules photovoltaïques. La réaction s'écrit :

$$2\,ZnS\,(s) + 3\,O_2\,(g) \rightleftharpoons 2\,ZnO\,(s) + 2\,SO_2\,(g)$$

Dans les deux cas, la réaction met en jeu une phase fluide et une phase solide. Une particularité de ce type de réactions est la formation d'un produit solide poreux qui remplace progressivement le réactif initial. Dans le cas de particules sphériques, on observe un déplacement du front de réaction (l'interface entre le réactif solide non consommé et le produit solide) en fonction du temps, dirigé de l'extérieur de la particule vers son centre (**figure 1**).

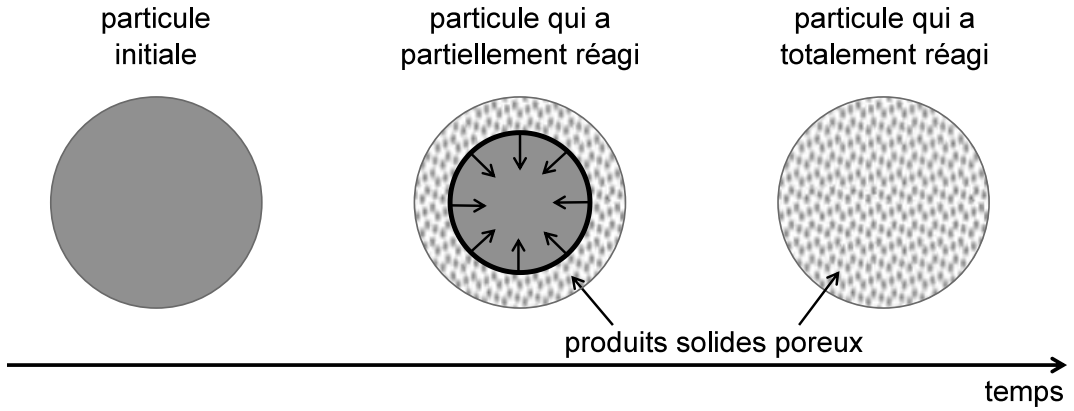


Figure 1 - Représentation schématique de l'évolution du front de réaction en fonction du temps

Les phénomènes physiques et chimiques mis en jeu lors de la réaction sont :

- le transport du fluide réactif à travers la couche limite externe des particules (généralement par convection) ;
- le transport du fluide réactif à travers la couche de produit solide poreux par diffusion dans les pores ;
- la réaction chimique qui est localisée au niveau du front de réaction ;
- le transport du produit fluide (s'il existe) dans les pores, puis à travers la couche limite externe.

Le modèle qui permet de représenter ces phénomènes porte le nom de *modèle à cœur rétrécissant*. Dans une version simple de ce modèle, on suppose que le produit poreux a une densité similaire à celle du réactif, si bien que le volume final de la particule qui a totalement réagi est le même que celui de la particule initiale. Dans le cas général, la consommation des particules est contrôlée par les trois premiers phénomènes cités précédemment. Cependant, dans certains cas limites, il se peut que l'un des trois phénomènes soit beaucoup plus lent que les deux autres et c'est celui-ci qui va imposer la vitesse de consommation des particules. On parle alors de *phénomène limitant*.

Dans la suite, la réaction entre les particules solides (B) et la phase fluide (A) sera écrite de la manière suivante où ν est le nombre stœchiométrique relatif au solide :

$$\text{A(fluide)} + \nu\,\text{B(solide)} \rightleftharpoons \text{produits}$$

Le but de cette épreuve est de mettre en équations le modèle à cœur rétrécissant permettant de prédire la consommation des particules en fonction du temps.

La **première partie** consiste, dans un premier temps, à établir l'équation aux dérivées partielles régissant l'évolution de la concentration du fluide A dans la couche de solide poreux B ; puis, dans un second temps, à obtenir des résultats dans un cadre simplifié du modèle.

La **deuxième partie** est relative à la résolution numérique de l'équation aux dérivées partielles dans le cas général (sans hypothèses simplificatrices).

La **dernière partie** traite de la comparaison des résultats obtenus par les deux méthodes de résolution du problème.

Partie I - Mise en équation du modèle à cœur rétrécissant

L'objectif de cette première partie est d'établir l'équation différentielle qui régit l'évolution de la concentration du fluide A dans la couche de solide poreux B en fonction de l'espace et du temps.
Une première version simplifiée du modèle à cœur rétrécissant sera alors déterminée.

I.1 - Étude de la diffusion du fluide dans la couche de produit poreux

Le transport du fluide dans la couche de produit de la réaction a lieu par diffusion dans les pores de ce matériau poreux. La porosité d'un matériau, notée ε, est définie comme le rapport entre le volume des pores et le volume total de matériau poreux. Le volume de matériau poreux inclut le volume de solide (appelé volume structurel) et le volume des pores. La porosité est donc la fraction volumique de vide dans le matériau.

Une étude au laboratoire a permis de déterminer les masses volumiques structurelle et apparente du produit poreux formé au cours de la réaction :

- la masse volumique structurelle, c'est-à-dire sans la porosité, $\rho_s = 2{,}50 \cdot 10^3\ \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$;
- la masse volumique apparente, tenant compte de la porosité, $\rho_{app} = 1{,}25 \cdot 10^3\ \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$.

Q1. Justifier que $\rho_s > \rho_{app}$.
Donner les valeurs théoriques minimale et maximale de la porosité.
Calculer la porosité ε du produit à partir des valeurs des masses volumiques structurelle et apparente mesurées au laboratoire.

On modélise la particule par un parallélépipède rectangle comme représenté sur le schéma de la **figure 2**. L'épaisseur de la particule est $2e$ et on suppose que la largeur L et la hauteur h sont très grandes devant l'épaisseur.
On note $S = L \times h$ la section latérale et on considère que la particule réagira avec le fluide uniquement par les deux faces latérales de surface S comme représenté sur le schéma de la **figure 2**.

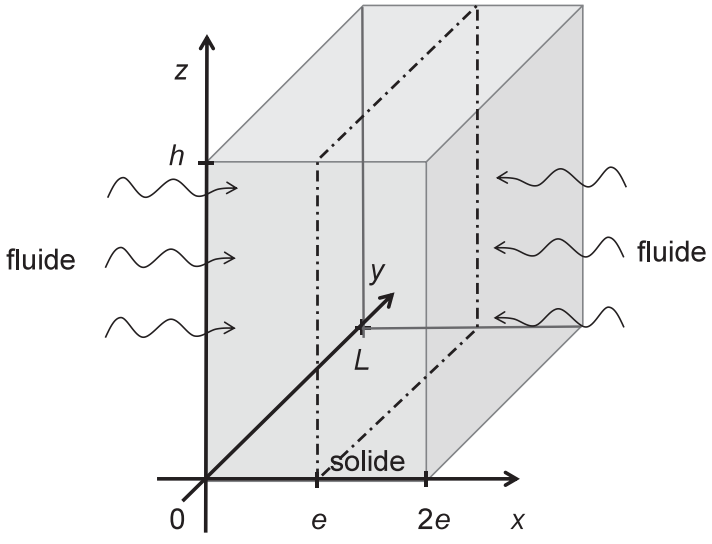


Figure 2 - Schéma de la particule de solide d'épaisseur $2e$

En représentation cartésienne, on note $\vec{j}_N(x,y,z,t)$ le vecteur densité de flux de particules associé aux phénomènes de diffusion que l'on étudie.

Q2. Expliquer pourquoi on peut supposer que $j_N(x,y,z,t) \approx j_N(x,t)$.
Expliquer pourquoi on peut restreindre cette étude à l'intervalle $[0, e]$.

I.2 - Établissement de l'équation de la diffusion de A dans la couche de produit poreux B

Q3. Les phénomènes de diffusion qui nous intéressent sont régis par les équations :

$$\vec{j_N}(x,t) = -D\,\overrightarrow{\text{grad}}\big(n(x,t)\big) \quad \text{(loi de Fick)} \quad \text{et} \quad \frac{\delta N}{\mathrm{d}t} = \iint \vec{j_N} \cdot \mathrm{d}\vec{S} \quad \text{(flux de } \vec{j_N}\text{)}.$$

Rappeler la signification physique de la loi de Fick, ainsi que les noms et unités des grandeurs qui la constituent.

On considère un volume élémentaire de la couche de produit poreux de section S et d'épaisseur dx (**figure 3a**). La **figure 3b** est une vue de profil de la **figure 3a**. La **figure 3c** est également une vue de profil sur laquelle le volume structurel et le volume des pores ont été séparés de manière fictive.

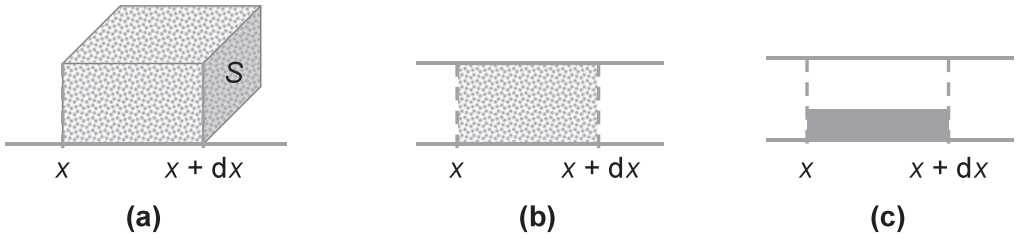


Figure 3 - Volume élémentaire de la couche de produit poreux de section S et d'épaisseur dx
(a) Vue en 3 dimensions **(b)** Vue de profil
(c) Vue de profil avec séparation fictive du volume structurel et du volume des pores

Q4. Reproduire sur votre copie le schéma du volume élémentaire de la **figure 3c**, en y faisant figurer le vecteur $\vec{j_N}$ aux abscisses x et x + dx.

Q5. Réaliser un bilan de matière sur ce volume élémentaire traduisant la conservation du nombre de molécules et en déduire l'équation de la diffusion dans la couche de produit poreux :

$$\varepsilon \frac{\partial n}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

où D_e est un coefficient de diffusion effectif qui tient compte de la porosité du matériau.

On utilise plus généralement l'équation de la diffusion de A dans la couche de produit poreux en considérant la concentration molaire $C(x,t)$ plutôt que $n(x,t)$:

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \,. \qquad \textbf{(1)}$$

Cette équation s'accompagne des deux conditions aux limites suivantes :

– en $x = 0$, $\quad D_e \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x=0} = k_D (C_e - C_s)$ **(2)**

– en $x = x_f$, $\quad D_e \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x=x_f} = k_C C_f$ **(3)**

avec :

- k_D la constante de transfert du fluide dans la couche limite (en $\mathrm{m \cdot s^{-1}}$) ;
- C_e la concentration molaire du fluide dans la phase gazeuse en dehors de la couche limite du fluide (donc $C(x = 0^-) = C_e$) ;
- C_s la concentration molaire en surface de la particule, en $x = 0$ (donc $C(x = 0^+) = C_s$) ;
- C_f la concentration molaire au niveau du front de réaction, en $x = x_f$ (donc $C(x = x_f) = C_f$) ;
- k_C la constante cinétique de la réaction de consommation du solide B par le fluide A (en $\mathrm{m \cdot s^{-1}}$) (**figure 4**).

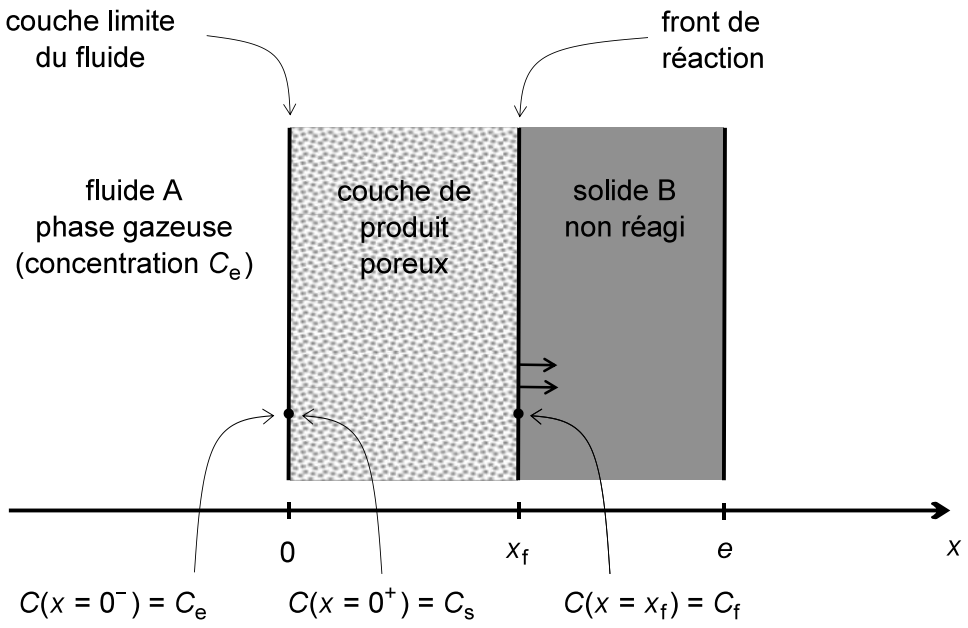


Figure 4 - Schéma de la particule de solide (sur l'intervalle [0, e]) partiellement consommée avec la représentation de la couche limite du fluide et du front de réaction

Q6. À l'aide d'une analyse dimensionnelle, vérifier l'homogénéité de l'équation **(2)**.

I.3 - Modèle simplifié : hypothèse du régime stationnaire pour la phase fluide

Pour simplifier la résolution de l'équation aux dérivées partielles, nous supposons que la phase fluide évolue en régime stationnaire. La validité de cette hypothèse sera discutée dans la partie numérique.

Q7. Simplifier l'équation **(1)** de la diffusion de A dans le cas du régime stationnaire.
On note F_A le flux molaire de A, c'est-à-dire le flux du vecteur densité de flux de particules molaire à travers une section S de particule. Montrer que :

$$F_A = -D_e \frac{dC}{dx} S \qquad \textbf{(4)}$$

et justifier que F_A ne dépend pas de x dans la couche de produit poreux.

Q8. On rappelle que $C(x = 0^+) = C_s$ et on note C_x la concentration du fluide A pour une abscisse x comprise dans l'intervalle $[0, x_f]$.
En intégrant l'équation **(4)** après séparation des variables, montrer que :

$$F_A = \frac{D_e S}{x}\left(C_s - C_x\right).$$

L'hypothèse du régime stationnaire pour la phase fluide entraîne l'égalité des flux molaires de A à travers la couche limite externe, dans la couche de produit poreux et consommé par la réaction.
De ce fait, la situation peut être modélisée électriquement, entre la couche limite en $x = 0$ et le front de réaction en $x = x_f$, par un ensemble de 3 résistances placées en série, traversées par le " courant commun " F_A et soumises aux " différences de potentiel " dues aux différences de concentration. Ces 3 résistances (**figure 5**) sont :

- en $x = 0$, la résistance R_{cl} de la couche limite ;
- entre $x = 0$ et $x = x_f$, la résistance R_{sp} du solide poreux ayant réagi ;
- en $x = x_f$, la résistance R_f due à la réaction chimique, située au niveau du front de la réaction.

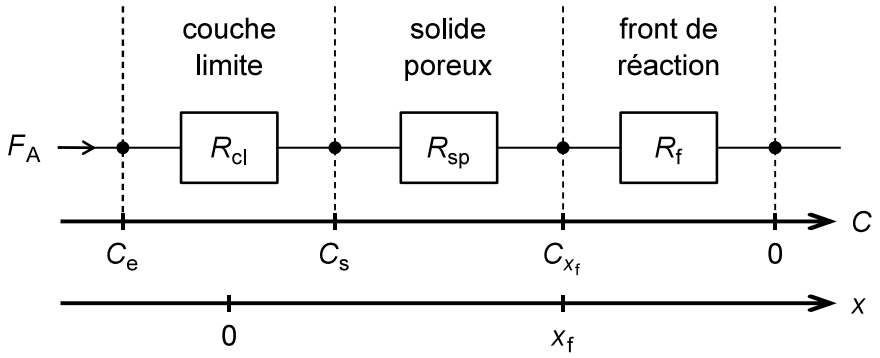


Figure 5 - Schéma du modèle électrique équivalent

Q9. On peut déduire de l'étude précédente la relation **(5)**, qui traduit la circulation d'un courant commun aux 3 résistances évoquées :

$$F_A = \frac{C_e - C_s}{\frac{1}{k_D S}} = \frac{C_s - C_{x_f}}{\frac{x_f}{D_e S}} = \frac{C_{x_f} - 0}{\frac{1}{k_C S}} . \qquad \textbf{(5)}$$

En déduire l'expression de la résistance équivalente de l'ensemble $R_{éq}$, telle que $F_A = \frac{C_e - 0}{R_{éq}}$, en fonction de D_e, k_C, k_D, S et de x_f.

Q10. On note N_B la quantité de matière de B.

Expliquer sans démonstration le sens physique de l'équation $F_A = -\frac{1}{\nu}\frac{dN_B}{dt}$, où ν est le nombre stœchiométrique défini dans la présentation du problème.

Q11. Soit $N_B(x)$ la quantité de matière de B comprise entre les abscisses x et e.
Pour tout x compris entre x_f et e, exprimer $N_B(x)$ en fonction de ρ_B, M_B, S, x et de e, avec ρ_B la masse volumique de B et M_B sa masse molaire.

En déduire, à l'aide de la **Q10**, la relation $F_A = \frac{\rho_B S}{\nu M_B}\frac{dx}{dt}$.

Q12. Les expressions précédentes de F_A permettent d'obtenir l'équation à variables séparées :

$$dt = K\left(\frac{1}{k_D} + \frac{x}{D_e} + \frac{1}{k_C}\right)dx, \quad \text{avec } K = \frac{\rho_B}{\nu C_e M_B} .$$

Montrer que l'intégration de cette équation entre la date $t = 0$ (où le front est en $x = 0$) et la date courante $t = t_f$ (où le front est en x_f) permet d'obtenir la relation :

$$t_f = t_{0e}\frac{x_f}{e} + t_{0i}\left(\frac{x_f}{e}\right)^2 + t_{0c}\frac{x_f}{e}$$

avec :

- $t_{0e} = K\frac{e}{k_D}$, le temps caractéristique de transport dans la couche limite externe ;
- $t_{0i} = K\frac{e^2}{2D_e}$, le temps caractéristique de transport interne par diffusion ;
- $t_{0c} = K\frac{e}{k_C}$, le temps caractéristique de la réaction chimique.

Q13. Sachant que les étapes précédentes sont successives, donner la relation entre la durée de consommation totale des particules, notée t_0, et les trois temps caractéristiques t_{0e}, t_{0i} et t_{0c}.

Q14. Une expérience réalisée sur des particules d'épaisseur e_1 a permis de mesurer les valeurs suivantes : t_{0e} = 60,0 s, t_{0i} = 300 s et t_{0c} = 120 s.
Calculer la durée totale de consommation t_{01}.
En déduire la durée totale de consommation t_{02} pour une épaisseur $e_2 = 2e_1$.

L'analyse des valeurs des trois temps caractéristiques permet de mettre en évidence le poids de chaque phénomène dans la résistance au transfert de matière. Lorsque l'un de ces temps caractéristique est très supérieur aux autres, il impose son régime que l'on appelle alors le régime limitant.

Dans le cas de cette étude, le régime limitant peut donc être :

- le transport externe, si $t_{0e} \gg t_{0i}$ et $t_{0e} \gg t_{0c}$;
- la diffusion interne dans le produit poreux, si $t_{0i} \gg t_{0e}$ et $t_{0i} \gg t_{0c}$;
- la réaction chimique, si $t_{0c} \gg t_{0e}$ et $t_{0c} \gg t_{0i}$.

Q15. En utilisant la **Q12**, déterminer les 2 inégalités à satisfaire (l'une en fonction de D_e, k_D et de e et l'autre en fonction de D_e, k_C et de e) pour que le régime limitant soit le transport interne.

Partie II - Résolution numérique du problème

Une résolution numérique préalable de l'équation de diffusion du fluide A (équation **(1)**) a été faite en régime quelconque. Par comparaison, on souhaite valider la simplification de cette résolution dans le cadre suivant :

- hypothèse 1 : on suppose que le transport interne constitue le régime limitant ;
- hypothèse 2 : on se place en régime stationnaire pour le fluide A.

L'ensemble des paramètres physico-chimiques nécessaires à cette résolution est défini dans le **code Python 1**. Dans la suite, il est inutile de recopier ce préambule. Toutes les variables qui y sont définies sont supposées globales.

```python
import numpy as np

# Paramètres du problème
e = 1.00e-3    # e demi-épaisseur [m]
M = 97.5e-3    # M_B masse molaire du solide [kg/mol]
rho = 4.13e3   # ρ_B masse volumique du solide [kg/m^3]
eps = 0.500    # ε porosité du solide
De = 1.25e-6   # D_e coefficient de diffusion du fluide dans le solide [m^2/s]
kC = 100       # k_C constante cinétique de la réaction [m/s]
kD = 100       # k_D constante de transfert [m/s]
nu = 1         # ν nombre stœchiométrique
R = 8.31       # R constante des gaz parfaits [J/K/mol]

# Conditions opératoires
P = 2.50e5     # pression [Pa]
T = 900 + 273  # température [K]
xO2 = 0.210    # fraction molaire de O2
xN2 = 0.790    # fraction molaire de N2
```

Code Python 1 - Préambule Python

Le **tableau 1** contient une partie des grandeurs mathématiques et des objets Python utilisés dans la suite. Certaines grandeurs, moins importantes ou faisant l'objet d'une question spécifique, ne figurent volontairement pas dans ce tableau.

Symbole mathématique	Objet Python	Signification
$C(x,t)$		concentration du fluide A
	`vec_C`	vecteur des concentrations
	`vec_Cprec`	copie du vecteur `vec_C`
	`vec_Y`	vecteur des indices du front de réaction
x		abscisse
	`vec_x`	vecteur des abscisses
	`mat_x`	
N	`N`	nombre d'intervalles
Δx	`Dx`	pas d'espace
i	`i`	indice spatial
i_{fr}	`ifr`	indice du front de réaction
t		date
	`vec_t`	vecteur des dates
k	`k`	indice temporel
Δt	`Dt`	pas temporel
$ItMax$	`ItMax`	nombre maximum d'itérations

Tableau 1 - Tableau de correspondance entre grandeurs mathématiques et objets Python

Q16. Sachant que le solide réagit uniquement avec le dioxygène, calculer la concentration C_e du fluide (en $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$) dans la phase gazeuse à l'aide des valeurs numériques figurant dans le **code Python 1**.

Q17. Écrire une fonction `Cgaz(x, P, T)` qui prend en arguments la fraction molaire x, la pression totale P et la température T d'un gaz et renvoie sa concentration molaire C (en $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$).

Q18. On admet que le transport interne est le régime limitant si $e \gg \frac{2D_e}{k_D}$ et $e \gg \frac{2D_e}{k_C}$.
Vérifier que le transport interne est bien le régime limitant (et que l'hypothèse 1 est donc bien satisfaite).

Q19. Sachant que $K = 7{,}86\cdot10^3$ (définie à la **Q12**), déduire des expressions de la **Q12** et des données numériques du **code Python 1**, une estimation en secondes de la durée totale $t_0 \approx t_{0i}$ de consommation.

Pour résoudre numériquement l'équation aux dérivées partielles de diffusion, on utilise la méthode des différences finies avec un schéma explicite.

La première étape consiste à discrétiser l'équation **(1)** dans l'espace et dans le temps.

Pour discrétiser l'espace, on choisit de découper l'intervalle [0, e] en 30 parties de même longueur (**figure 6**). On utilise l'indice `i` (compris entre 0 et `N`) pour identifier le i^e point de l'intervalle, tel que $x_i = i\Delta x$.

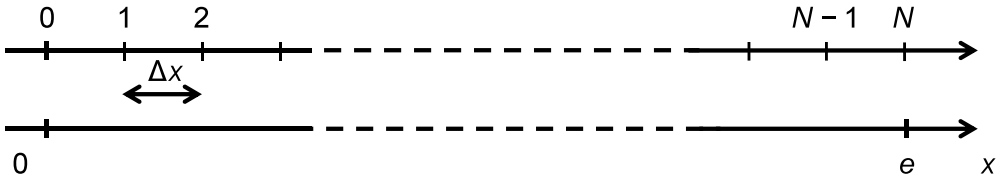


Figure 6 - Discrétisation spatiale dans la direction x

Q20. Préciser la valeur de N.
Donner le code permettant de calculer le pas d'espace Δx (variable Python : `Dx`).
Donner le code permettant de fabriquer le vecteur `vec_x` qui contiendra les abscisses x.

Pour obtenir l'évolution de la concentration en chaque point de l'espace en fonction du temps, on discrétise le temps en intervalles de durée Δt, appelé le pas de temps (variable Python : `Dt`). On utilise l'indice k pour identifier la date particulière t_k, telle que $t_k = k\Delta t$. L'indice k commence à 0 et peut prendre $ItMax$ valeurs (variable Python : `ItMax`). $ItMax$ est fixée par l'utilisateur et représente le nombre maximum d'itérations.

La discrétisation de l'équation aux dérivées partielles est obtenue en écrivant des développements limités. Dans la suite, on note $C_{i,k}$ la concentration au point d'abscisse x_i à la date t_k. Ainsi,

- $C_{i,k+1}$ représente la concentration au point d'abscisse x_i à la date $t_{k+1} = t_k + \Delta t$;
- $C_{i+1,k}$ représente la concentration au point d'abscisse $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ à la date t_k.

Q21. À l'aide d'un développement limité, donner l'expression de $C(x, t + \Delta t)$ à l'ordre 1 en fonction de $C(x,t)$ et de $\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_{x,t}$, la dérivée partielle de $C(x,t)$ par rapport au temps évaluée en x à la date t.

Q22. Donner alors l'expression de $\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_{x_i,t_k}$, la dérivée partielle de $C(x,t)$ par rapport au temps évaluée à l'abscisse x_i à la date t_k, en fonction de $C_{i,k}$, $C_{i,k+1}$ et Δt.

L'utilisation de deux développements limités conduit à l'expression discrétisée (admise) suivante pour l'approximation de la dérivée seconde de C par rapport à x :

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)_{x_i,t_k} \approx \frac{C_{i+1,k} - 2C_{i,k} + C_{i-1,k}}{(\Delta x)^2}. \qquad \textbf{(6)}$$

Q23. Préciser sans justification l'ordre auquel ont été faits les développements limités qui ont permis d'obtenir l'expression approchée donnée par l'équation **(6)**.

Q24. Montrer que l'équation de diffusion **(1)** peut se mettre sous la forme :

$$C_{i,k+1} = C_{i,k} + r\left(C_{i+1,k} - 2C_{i,k} + C_{i-1,k}\right) \qquad \textbf{(7)}$$

et donner l'expression de la variable r en fonction du coefficient de diffusion D_e, de la porosité ε, du pas de temps Δt et du pas d'espace Δx.

Q25. Pour des raisons de convergence numérique, on admet que la quantité $\frac{D_e}{\varepsilon}\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ doit être inférieure à 1 / 2.
En déduire la valeur maximale de Δt permettant la convergence numérique (on dispose des données du **code Python 1** et on admet que $\Delta x = 3{,}33 \cdot 10^{-5}$ m).

Dans la suite, on choisit le pas de temps $\Delta t = 1{,}00 \cdot 10^{-4}$ s.

Q26. Avec ce pas de temps et en supposant une durée totale de consommation $t_0 \approx 3{,}15 \cdot 10^3$ s, donner une estimation du nombre d'itérations nécessaires pour réaliser la simulation.

Au fur et à mesure de l'avancement de la réaction, le front de réaction se déplace de $x = 0$ à $x = e$. Lors de ce déplacement du front de réaction, la particule est constituée :

- pour $0 \leq x < x_f$, d'une partie qui a réagi et dans laquelle diffuse le réactif fluide ;
- pour $x_f \leq x < e$, d'une partie qui n'a pas encore réagi et dans laquelle la concentration en réactif fluide est nulle.

L'indice spatial correspondant à la position du front de réaction sera noté i_{fr} (variable Python : `ifr`).

L'équation **(7)** est valable uniquement pour les indices i compris entre 1 et $i_{fr} - 1$.
Pour les indices $i = 0$ et $i = i_{fr}$, il est nécessaire d'utiliser les conditions aux limites (équations **(2)** et **(3)**) pour calculer les valeurs particulières de $C_{0,k}$ et $C_{i_{fr},k}$. La discrétisation de ces conditions aux limites conduit aux relations de récurrence suivantes :

- en $x = 0$, $\quad C_{0,k} = p_1 C_e + p_2 C_{1,k}$,
- en $x = x_f$, $\quad C_{i_{fr},k} = p_3 C_{i_{fr}-1,k}$.

Q27. Traduire l'équation **(3)** en appliquant la méthode des différences finies.
En déduire l'expression du paramètre p_3 en fonction de Δx, k_C et D_e.

Pour résoudre numériquement l'équation **(1)**, on utilise l'algorithme décrit par le **code Python 2** dont les étapes principales sont les suivantes :

- initialisation des variables ;
- boucle d'intégration :
  - calcul de l'indice i_{fr} correspondant à la position du front de réaction ;
  - calcul des concentrations à chaque pas d'espace à l'aide des relations de récurrence ;
  - stockage des concentrations dans une matrice.

Certaines portions du **code Python 2** sont volontairement absentes et sont signalées par « ___ ».

```
1   # INITIALISATIONS
2   ItMax = 32000000
3   mat_C = np.zeros((N + 1, 1 + ItMax // 100000))  # Voir question Q32
4   vec_t = np.zeros((1 + ItMax // 100000))         # Voir question Q32
5   ___
6
7   # DÉFINITIONS
8   def Cgaz(x, P, T):                              # Voir question Q17
9       ___
10
11  def calcul_ifr():                               # Voir questions Q30 et Q31
12      ___
13
14  def calcul_concentrations():                    # Voir question Q29
15      ___
16
17  def stockage(k):                                # Voir question Q33
18      j = k // 100000
19      mat_C[:, j] = vec_C
20      vec_t[j] = k * Dt
21
22  # BOUCLE PRINCIPALE
23  for k in range(_____):                          # Voir question Q28
24      # initialisations locales
25      ___
26
27      # calcul de l'indice du front de réaction
28      ifr = calcul_ifr()
29
30      # calcul des concentrations à la date k
31      calcul_concentrations(ifr)
32
33      # stockage partiel des données
34      if k % 100000 == 0:                         # Voir question Q33
35          stockage(k)
```

Code Python 2 - Structure du code

Q28. Sachant que l'on connait le nombre maximal d'itérations, compléter la ligne 23 du **code Python 2**.

Q29. Le **code Python 3** permet de calculer les concentrations en tout point de l'espace à la date t_{k+1}, à partir des concentrations en tout point de l'espace à la date t_k. Les concentrations sont stockées dans le vecteur `vec_C` préalablement défini, tout comme les constantes `r`, `p1`, `p2`, `p3` et `ifr`.
Expliquer ce code.

```
1   vec_C[0] = p1 * Ce + p2 * vec_C[1]
2   for i in range(1, ifr):
3       vec_C[i] = r * vec_Cprec[i - 1] + (1 - 2 * r) * vec_Cprec[i] + r * vec_Cprec[i + 1]
4   vec_C[ifr] = p3 * vec_C[ifr - 1]
5   vec_Cprec = vec_C
```

Code Python 3 - Calcul de la concentration du fluide A

L'indice du front de réaction, i_{fr}, correspond à la partie entière du rapport entre l'épaisseur de la couche de produit poreux, notée Y, et le pas d'espace Δx. Pour l'obtenir, il faut calculer Y à chaque itération. Pour cela, on utilise l'expression discrétisée du bilan de matière en régime transitoire sur le réactif solide, qui s'écrit :

$$\frac{Y_{k+1} - Y_k}{\Delta t} = -D_e V_{mol,B} \frac{C_{i_{fr},k+1} - C_{i_{fr}-1,k+1}}{\Delta x} \quad \textbf{(8)}$$

avec Y_k l'épaisseur de la couche de produit poreux à la date t_k (c'est aussi la position du front de réaction) et $V_{mol,B}$ le volume molaire de B (variable Python : `VmolB`).

Q30. Toutes les variables nécessaires étant définies, donner le code correspondant au calcul de Y_{k+1}, valeur de Y à la date t_{k+1}.

Q31. Toutes les variables nécessaires étant définies, donner le code permettant de calculer la valeur de l'indice du front de réaction i_{fr} à partir de la valeur de Y_k et de Δx (cette valeur est renvoyée par la fonction `calcul_ifr()` du **code Python 2**).

Le nombre d'itérations étant très grand, on ne souhaite pas enregistrer les valeurs des concentrations à toutes les dates, mais seulement toutes les 100 000 itérations. Pour ces itérations, on enregistre :

- la valeur des concentrations dans la matrice `mat_C` ;
- la date dans le vecteur `vec_t`.

Q32. Justifier les dimensions de la matrice `mat_C` et du vecteur `vec_t` qui sont définis dans les initialisations du **code Python 2**.
Donner les dimensions du vecteur `vec_Y`.

Q33. Expliquer la ligne 34 du **code Python 2** et donner les 2 premières valeurs de k pour lesquelles la fonction `stockage(k)` est appelée.

Partie III - Comparaison entre les deux modèles

Les données issues de la simulation faite sans approximation ont été stockées dans la variable `Dsimu`. Il s'agit d'une liste de tuples contenant les triplets de la position, de la date et de la concentration :

`Dsimu = [(x0, t0, C0), (x1, t1, C1), ...]`.

On souhaite trier ces données en fonction de la date, qui est la 2e composante de chaque tuple. Pour cela, on va modifier le code de tri suivant :

```
1  def tri(T):
2      "Tri en place le tableau T"
3      for i in range(1, len(T)):
4          x = T[i]
5          j = i
6          while j > 0 and T[j - 1] > x:  # Voir question Q35
7              T[j] = T[j - 1]
8              j = j - 1
9          T[j] = x
```

Code Python 4 - Code de tri

Q34. Préciser sans justification si le **code Python 4** est un tri par insertion, un tri fusion ou un tri rapide.
Expliquer pourquoi il ne s'agit pas d'un tri récursif.

Q35. Proposer une modification de la ligne 6 du **code Python 4** pour trier les données stockées dans la variable `Dsimu` sur la 2e composante (la date).

Afin de comparer les modèles, les taux de conversion du solide B ($X_B = x_f / e$), obtenus par les deux méthodes déjà évoquées, ont été tracés en fonction du temps (**figure 7**) :

- en trait pointillé : résolution numérique sans approximation ;
- en trait plein : résolution numérique avec les approximations de la partie **II**.

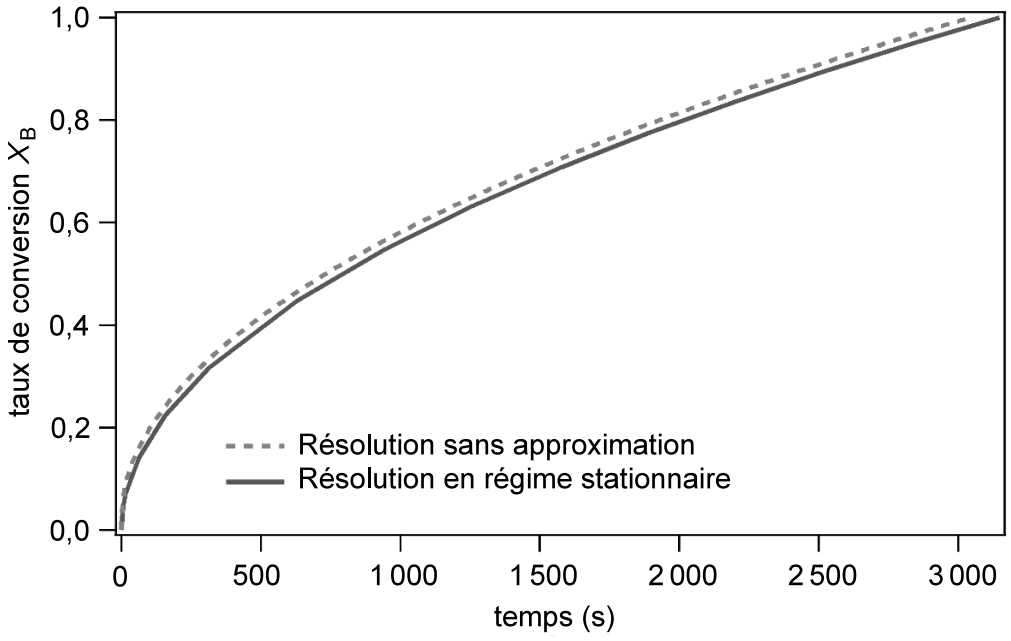


Figure 7 - Comparaison des taux de conversion obtenus par les deux modèles

La résolution sans approximation de l'équation aux dérivées partielles prédit une consommation totale du solide B après 30 417 663 itérations.

Q36. À partir de la donnée du nombre réel d'itérations, déterminer la durée totale de consommation. Comparer cette valeur à celle obtenue en faisant l'hypothèse du régime stationnaire pour le fluide, $t_0 = 3{,}15 \cdot 10^3$ s.
Conclure sur l'accord entre les deux modèles.

Q37. En considérant que l'hypothèse du régime stationnaire pour le gaz est acceptable et que le phénomène limitant est la diffusion du réactif fluide dans la couche de produit poreux, dessiner sur un même graphe l'allure des profils de concentration (les courbes $C(x)$) du réactif fluide entre $x = 0$ et $x = e$ pour trois configurations différentes :

- une particule qui n'a pas réagi ;
- une particule qui a totalement réagi ;
- une particule qui a partiellement réagi.

On fera figurer les valeurs des concentrations et les abscisses caractéristiques sur le graphe.

ANNEXE

Bibliothèque numpy de Python

Import de la bibliothèque `numpy` :

```
>>> import numpy as np
```

Création d'un tableau `numpy` à 2 lignes et 3 colonnes, appelé `M` :

```
>>> M = np.array([[1.5, 2, 3], [4, 5, 6]])
>>> print(M)
[[1.5 2. 3. ]
 [4.  5. 6. ]]
```

Accès à un élément de `M` :

```
>>> M = np.array([[1.5, 2, 3], [4, 5, 6]])
>>> print(M[0, 0])
1.5
>>> M[1, 2] = -7
>>> print(M)
[[ 1.5  2.   3. ]
 [ 4.   5.  -7. ]]
```

Sélection d'une ligne ou d'une colonne de `M` :

```
>>> M = np.array([[1.5, 2, 3], [4, 5, 6]])
>>> print(M[:, 1])  # sélection de la colonne 1
[2. 5.]
>>> print(M[1, :])  # sélection de la ligne 1
[4. 5. 6.]
```

Création d'un vecteur nul ou d'une matrice nulle :

```
>>> vec = np.zeros(5)
>>> print(vec)
[0. 0. 0. 0. 0.]
>>> mat = np.zeros((3, 2))
>>> print(mat)
[[0. 0.]
 [0. 0.]
 [0. 0.]]
```

FIN

IMPRIMERIE NATIONALE – 22 1189 – D'après documents fournis

Travailler les chapitres de ce sujet

Prepa Help suit le programme de TPC chapitre par chapitre : cours détaillé, méthodes, pièges, exercices et problèmes corrigés pas à pas, tirés des concours. L'essai gratuit donne accès aux chapitres offerts de ta filière, sans carte bancaire.

Chapitres liés à ce sujet

- Grandeurs, unités, analyse dimensionnelle et ordres de grandeur
- Bases de Python : expressions, types, instructions, fonctions

Ouvrir l'essai gratuit

Scanne le code ou clique sur le bouton.

prepahelp.com/#essai

Une question sur le concours ou sur ta filière : **écrire sur WhatsApp**

Les autres années et épreuves : prepahelp.com/annales/ccinp/tpc