SESSION 2021 **PC5MO**

CONCOURS COMMUN INP

ÉPREUVE MUTUALISÉE AVEC E3A-POLYTECH

ÉPREUVE SPÉCIFIQUE - FILIÈRE PC

MODÉLISATION DE SYSTÈMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

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 indépendantes.

Modélisation de la fuite de matière d'un réservoir rempli de dioxyde de carbone gazeux

Présentation générale

Ce sujet repose sur l'étude théorique et numérique d'une fuite de matière au sein d'une cuve contenant du dioxyde de carbone (CO_2) gazeux. Il est constitué de **trois parties indépendantes**.

- La première partie est dédiée à l'établissement du modèle thermodynamique du phénomène de fuite de matière contenue dans une cuve à travers un orifice.
- La seconde partie est consacrée à l'étude numérique du problème ; la relation entre la capacité thermique molaire $C_{P,m}$ du CO_2 gaz parfait et la température T est admise.
- La troisième partie est consacrée à l'étude de deux modèles pour décrire la relation entre $C_{P,m}$ et T dont les coefficients sont déduits de mesures expérimentales.

Traitement numérique et calcul scientifique réalisés à partir d'un programme écrit en langage Python

- Les programmes demandés au candidat seront réalisés dans le langage Python.
- On veillera à apporter les commentaires facilitant la compréhension du programme et à utiliser des noms de variables explicites.
- **Il est demandé de répondre précisément aux questions posées (par exemple, on écrira une fonction uniquement lorsque cela est explicitement demandé).**
- ***Une annexe décrivant quelques éléments de langage Python utiles pour ce sujet est fournie en page 13.***

Précisions concernant les notations utilisées

Symbole	Nom	Unité
$C_{P,m}$	Capacité thermique **molaire** à pression constante	$J{\cdot}K^{-1}{\cdot}mol^{-1}$
c_P	Capacité thermique **massique** à pression constante	$J{\cdot}K^{-1}{\cdot}kg^{-1}$
D_m	Débit **massique**	$kg{\cdot}s^{-1}$
h	Enthalpie **massique**	$J{\cdot}kg^{-1}$
M	Masse **molaire**	$kg{\cdot}mol^{-1}$
m	Masse	kg
P	Pression	Pa
$\dot{Q} = \delta Q/\mathrm{d}t$	Puissance thermique	W
R	Constante des gaz parfaits	$J{\cdot}K^{-1}{\cdot}mol^{-1}$
T	Température	K
T_c	Température critique	K
U	Énergie interne	J
u	Énergie interne **massique**	$J{\cdot}kg^{-1}$
V	Volume	m^3
$\dot{W} = \delta W/\mathrm{d}t$	Puissance utile	W
ω	Vitesse des courants de matière	$m{\cdot}s^{-1}$
Ω	Section de fuite	m^2

Partie I - Modélisation de la fuite d'un réservoir : mise en équation

Généralités sur les bilans de matière et d'énergie en système ouvert

On s'intéresse au système ouvert décrit par la **figure 1**. Ce système possède une entrée de matière (notée A), une sortie (notée B). Il reçoit du milieu extérieur une puissance thermique $\dot{Q}_e$ et une puissance de force $\dot{W}_e$. Il fournit au milieu extérieur une puissance thermique $\dot{Q}_s$ et une puissance de force $\dot{W}_s$. Les grandeurs $\dot{Q}_e$, $\dot{Q}_s$, $\dot{W}_e$, $\dot{W}_s$ sont définies comme des quantités algébriques. En revanche, les débits massiques $D_{m,\mathrm{A}}$ et $D_{m,\mathrm{B}}$ sont définis comme des quantités positives.

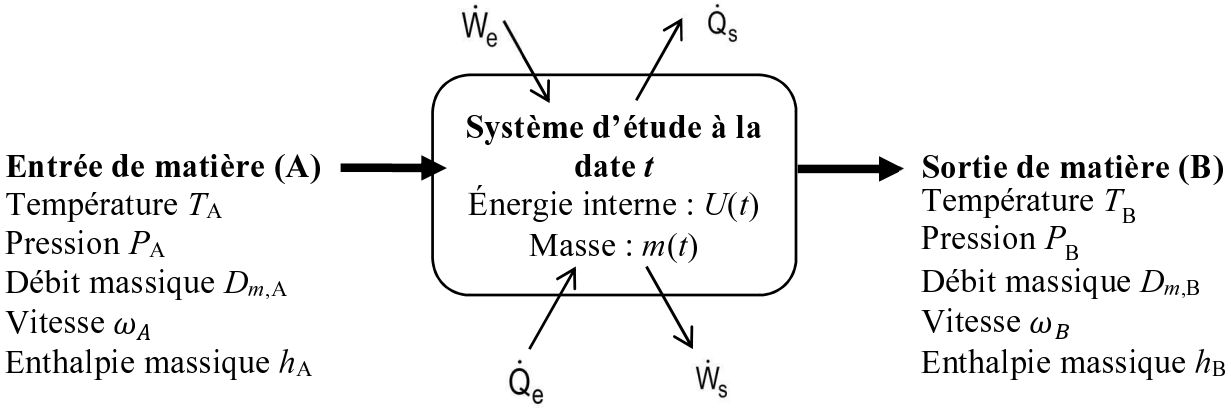


Figure 1 - Représentation schématique d'un système ouvert

Q1. Donner l'unité des grandeurs $\dot{W}$, $\dot{Q}$ et D_m mentionnées sur la **figure 1**.

Q2. Le système considéré est supposé évoluer en régime stationnaire. Quelle est la relation entre les débits des courants de matière entrant $D_{m,\mathrm{A}}$ et sortant $D_{m,\mathrm{B}}$? Justifier.

Q3. Appliquer le premier principe de la thermodynamique au système ouvert stationnaire de la **figure 1**. Montrer qu'il peut se mettre sous la forme :

$$\left(\begin{array}{c}\text{Débit d'énergie}\\ \text{entrant}\end{array}\right) = \left(\begin{array}{c}\text{Débit d'énergie}\\ \text{sortant}\end{array}\right). \qquad (1)$$

On explicitera les termes *débits d'énergie* (homogènes à une puissance) en fonction des grandeurs introduites par la **figure 1**.

Q4. Le système étudié de la **figure 1** est supposé évoluer en régime transitoire. On note $m(t)$, la fonction représentant l'évolution de sa masse m en fonction du temps t. À partir d'un bilan de matière, déduire la relation existant entre $\dfrac{\mathrm{d}m(t)}{\mathrm{d}t}$, $D_{m,\mathrm{A}}$ et $D_{m,\mathrm{B}}$. Proposer une interprétation qualitative du bilan.

On admet dans la suite l'écriture du premier principe en système ouvert, étendue aux systèmes immobiles en régime transitoire :

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = \left(\begin{array}{c}\text{Débit d'énergie}\\ \text{entrant}\end{array}\right) - \left(\begin{array}{c}\text{Débit d'énergie}\\ \text{sortant}\end{array}\right) \qquad (2)$$

où $\mathrm{d}U/\mathrm{d}t$ désigne la dérivée de l'énergie interne du système étudié par rapport au temps t.

Q5. Proposer une interprétation qualitative du bilan d'énergie traduit par l'équation (2).

Écriture d'un modèle décrivant la fuite d'un réservoir adiabatique contenant du CO_2

On s'intéresse à présent à un réservoir contenant un gaz supposé parfait. Ce réservoir indéformable (donc de volume V fixe) est le siège d'une fuite vers le milieu environnant à la température T_{ext} = 293 K et à la pression P_{ext} = 1,01 bar supposées fixes dans tout le sujet. Il n'est pas agité mécaniquement. Toutefois, les propriétés du gaz dans le réservoir sont supposées uniformes à chaque instant. Ce réservoir est décrit par la **figure 2**.

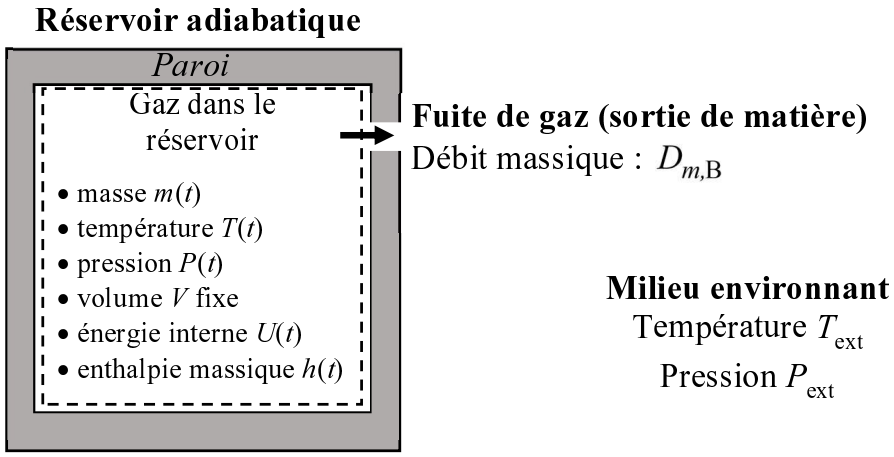


Figure 2 - Réservoir adiabatique renfermant du gaz et soumis à une fuite de gaz vers le milieu environnant

Q6. *Le modèle gaz parfait*

a) Dans quelle situation limite un gaz réel s'identifie-t-il exactement à un gaz parfait ?

b) Donner la valeur du rapport $C_{P,m}/R$ pour un gaz parfait monoatomique. Faire de même pour un gaz parfait diatomique.

c) Pour le CO_2 gaz parfait, le rapport $C_{P,m}/R$ dépend de la température selon une loi notée par la suite $f(T)$. L'étude de la loi $f(T)$ sera l'objet de la partie suivante.

Donner un argument physique expliquant pourquoi, pour le CO_2, $C_{P,m}/R$ est une fonction de la température contrairement au cas des gaz parfaits mono- et di-atomiques.

d) Donner la relation unissant les variations d'énergie interne molaire $\mathrm{d}U_m$ et de température $\mathrm{d}T$ à la fonction $f(T)$. En déduire l'expression de $\mathrm{d}u/\mathrm{d}T$ où u désigne l'énergie interne massique d'un gaz parfait pur.

Q7. On suppose que les propriétés intensives du gaz dans le réservoir (entre autres, sa température T, sa pression P et son enthalpie massique h) sont uniformes. On considèrera que les propriétés intensives du gaz sortant sont les mêmes que celles du gaz dans le réservoir. On s'intéresse au système {volume contenant le gaz à T et P dans le réservoir, paroi non comprise} représenté par des pointillés sur la **figure 2**. Montrer que l'application du bilan de matière et du premier principe au système en pointillés décrit par la **figure 2** amène :

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}m(t)}{\mathrm{d}t} &= -D_{m,B} \\ \dfrac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t} &= -D_{m,B}\cdot h(t) \end{cases} . \qquad (3)$$

On supposera négligeable l'énergie cinétique massique de la matière quittant le système.

Q8. En introduisant la relation entre l'énergie interne massique u (en J·kg^{-1}) et l'énergie interne U (en J) du système étudié, montrer que l'équation (3) amène :

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \frac{R \cdot T}{M \cdot m} \cdot \frac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t} \tag{4}$$

où R et M désignent respectivement la constante des gaz parfaits et la masse molaire du gaz.
En déduire que :

$$[f(T) - 1]\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \frac{T}{m} \cdot \frac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t}. \tag{5}$$

On cherche à présent à estimer le débit $D_{m,\mathrm{B}}$ de gaz quittant le réservoir. Pour ce faire, on s'intéresse à la zone de l'espace dans laquelle se produit la fuite.

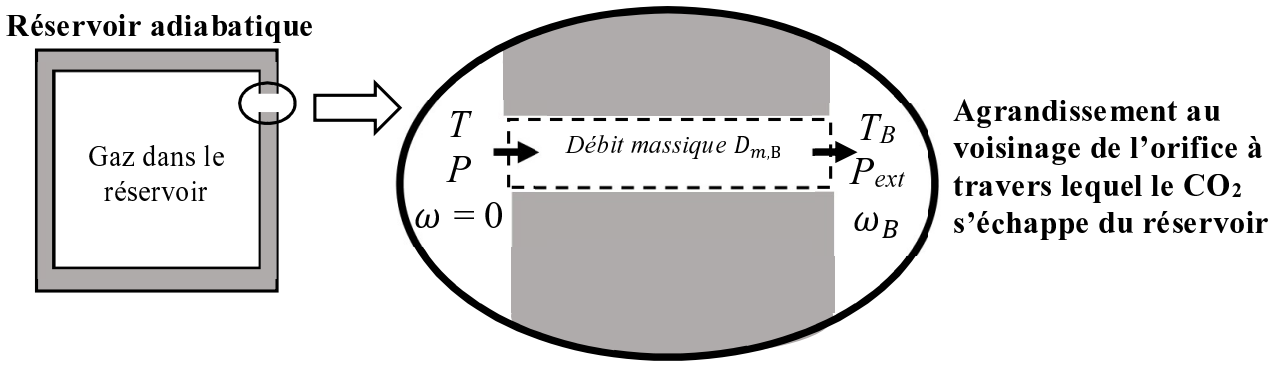


Figure 3 - Fuite de CO_2 gazeux à travers l'orifice dans la paroi du réservoir

On considère le système {orifice dans la paroi du réservoir} ; on supposera que :
- l'écoulement de gaz à travers l'orifice est **adiabatique** et **stationnaire** ;
- la vitesse du gaz en entrée du système est nulle ; elle est notée ω_B en sortie ;
- la température et la pression du gaz en entrée sont notées T et P (ce sont celles du gaz à l'intérieur du réservoir) ; en sortie, elles sont notées T_B et $P_B = P_{\mathrm{ext}} = 1{,}01$ bar.

Q9. Montrer que le débit massique $D_{m,\mathrm{B}}$ de fluide à travers la section de l'orifice est donné par :

$$D_{m,\mathrm{B}} = \frac{\Omega \cdot \omega_B \cdot M \cdot P_{\mathrm{ext}}}{R \cdot T_B} \tag{6}$$

où la surface Ω désigne la section de passage du fluide à travers l'orifice.

Q10. *Expression de ω_B en fonction de T_B*
En appliquant l'expression du premier principe en système ouvert stationnaire, donnée par l'équation (1), au système {orifice dans la paroi du réservoir} délimité par des pointillés sur la **figure 3**, montrer que la vitesse de sortie du CO_2 a pour expression :

$$\omega_B = \sqrt{2\frac{R}{M}\int_{T_B}^{T} f(T)\mathrm{d}T}. \tag{7}$$

Q11. Méthode de calcul de T_B

a) En négligeant les frottements au sein du système considéré, on peut supposer l'écoulement **réversible**. Montrer, par application du second principe, que cette hypothèse amène à supposer l'écoulement *isentropique massique* (ou molaire) (i.e., à entropie massique - ou molaire - constante).

b) Montrer que la variation d'entropie massique d'un gaz parfait pur s'écrit :

$$\mathrm{d}s = \frac{R}{M}\left[\frac{C_{P,m}}{R}\frac{\mathrm{d}T}{T} - \frac{\mathrm{d}P}{P}\right]. \tag{8}$$

En déduire que T_B est solution de l'équation :

$$\int_T^{T_B} \frac{f(T)}{T}\mathrm{d}T + \ln\left(\frac{P}{P_{\text{ext}}}\right) = 0 \quad \text{avec } P = \frac{m\cdot R\cdot T}{M\cdot V}. \tag{9}$$

Finalement, en réunissant les équations (3), (5), (6), (7) et (9), le modèle ainsi constitué est représenté par le système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \dfrac{T}{m[f(T)-1]}\cdot\dfrac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t} \\ \dfrac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t} = -\dfrac{\Omega P_{\text{ext}}\sqrt{2\int_{T_B}^{T} f(T)\mathrm{d}T}}{\sqrt{\frac{R}{M}}\,T_B} \end{cases} \tag{10}$$

avec T_B solution de :

$$\int_T^{T_B} \frac{f(T)}{T}\mathrm{d}T + \ln\left(\frac{m\cdot R\cdot T}{M\cdot V\cdot P_{\text{ext}}}\right) = 0. \tag{11}$$

Partie II - Modélisation de la fuite d'un réservoir : traitement numérique

Dans cette partie, on fera référence au modèle défini par les équations (10) et (11).

Données numériques utiles pour cette partie :

$$R = 8{,}3144\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$
$$M = 44\cdot 10^{-3}\ \text{kg/mol}$$
$$T_{\text{ext}} = 293\ \text{K}$$
$$P_{\text{ext}} = 1{,}01\ \text{bar}$$
$$V = 1\ \text{m}^3$$
$$\Omega = 1\ \text{cm}^2$$

Modèle pour $C_{P,m}/R$ *:* $f(T) = A_1 + \dfrac{A_2}{T + A_3}$ avec $\begin{cases} T \text{ en K} \\ A_1 = 8{,}303 \\ A_2 = -\,2\,810 \\ A_3 = 485{,}6 \end{cases}$

Conditions initiales : $\begin{cases} T(0) = 473{,}15\ \text{K} \\ m(0) = 11{,}0\ \text{kg} \end{cases}$

Q12. Intégration numérique

a) Donner le code de la fonction `integ1(T1,T2)` réalisant le **calcul analytique** de l'intégrale $\int_{T_1}^{T_2} f(T)\mathrm{d}T$ (`T1` et `T2` sont des arguments d'entrée de la fonction `integ1` qui désignent les bornes de l'intégrale).

b) Donner le code de la fonction `integ2(T1,T2)` réalisant le **calcul numérique** de l'intégrale $\int_{T_1}^{T_2} \frac{f(T)}{T}\mathrm{d}T$ (`T1` et `T2` sont des arguments d'entrée de la fonction `integ2` qui désignent les bornes de l'intégrale).

La méthode des rectangles sera adoptée pour estimer l'intégrale ; l'intervalle des températures sera divisé en 100 sous-intervalles).

Ces deux fonctions pourront être appelées autant de fois que nécessaire par la suite.

Q13. La fonction `chercheTB(T,m)` fournie ci-dessous renvoie, pour des valeurs connues des variables T et m, la valeur correspondante de T_B obtenue par résolution de l'équation (11) selon la méthode de Newton :

```
import numpy as np
A1 = 8.303; A2 = -2810.; A3 = 485.6
T0 = 473.15; m0 = 11.0
Pext = 1.01e5; Mw = 44e-3; Volume = 1.0; Text = 293.
R = 8.3144
def chercheTB(T,m):
      TB = 300.
      [instruction1]
      while residu > 1e-10:
           eq = [instruction2]
           deq = [instruction3]
           TBold = TB
           TB = TB - eq/deq
           residu = [instruction4]
      return TB
```

Pour compléter la portion de code ci-dessus, indiquer par quelles instructions il convient de remplacer les séquences **[instruction1]** à **[instruction4]**. Justifier.

La fonction `chercheTB(T,m)` pourra être appelée autant de fois que nécessaire par la suite.

Pour résoudre une équation différentielle mise sous la forme $y'(t) = f(t,y(t))$, on peut utiliser le schéma d'Euler dont on rappelle l'expression :

$$y(t + \Delta t) = y(t) + f(t,y(t)) \times \Delta t. \tag{12}$$

Dans le cas d'un système d'équations différentielles d'ordre 1, de la forme $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t,\mathbf{y}(t))$, on peut généraliser le schéma d'Euler de la manière suivante :

$$\mathbf{y}(t + \Delta t) = \mathbf{y}(t) + \mathbf{f}(t,\mathbf{y}(t)) \times \Delta t \tag{13}$$

où $\mathbf{y}(t)$ désigne le vecteur des fonctions inconnues évaluées à la date courante t.

Q14. Donner l'algorithme général du calcul numérique des fonctions temporelles T, m et P entre $t = 0$ et $t = 10$ s, par résolution du système différentiel (10) reposant sur l'utilisation du schéma d'Euler généralisé (on choisira comme pas de temps : $\Delta t = 0{,}10$ s).
Cet algorithme sera fourni sous la forme d'un logigramme. On veillera à mentionner les procédures d'initialisation des processus itératifs ainsi que leurs critères d'arrêt. Quand cela sera nécessaire, on fera appel à la fonction `chercheTB(T,m)` sans détailler sa structure.

Q15. Écrire le code mettant en œuvre l'algorithme proposé à la question précédente. On pourra faire appel à toutes les fonctions programmées précédemment.

Q16. Intuitivement, quand la fuite s'arrêtera-t-elle en pratique ?

Partie III - Développement de corrélations pour la capacité thermique à pression constante molaire du dioxyde de carbone

On dispose d'un faible nombre de mesures expérimentales du rapport $C_{P,m}/R$ du CO_2 gazeux sur un large domaine de températures T sous pression atmosphérique (où $C_{P,m}$ désigne la capacité thermique molaire à pression constante et R, la constante des gaz parfaits).
Ces mesures (au nombre de 6) sont consignées dans un fichier `cP.txt` (voir **tableau 1**). La première colonne donne la température en K, la seconde fournit les mesures expérimentales de la quantité $C_{P,m}/R$.

```
100.0       3.513
500.0       5.367
1000.0      6.532
2000.0      7.257
3000.0      7.475
4000.0      7.586
```

Tableau 1 - Contenu du fichier `cP.txt`

Dans cette partie, on cherche à développer une corrélation de la propriété $C_{P,m}/R$ en fonction de la température. Le modèle est noté $f(T)$ par la suite :

$$(C_{P,m}/R)_{\text{modèle}} = f(T). \tag{14}$$

Les coefficients intervenant dans la corrélation seront déterminés de manière à reproduire efficacement les données expérimentales $(T, (C_{P,m}/R)_{\text{exp}})$ dont on dispose. Pour y parvenir, deux stratégies sont envisagées et testées :

- un premier modèle de la forme :

$$f_{\text{modèle 1}}(T) = A_1 + \frac{A_2}{T + A_3} \tag{15}$$

  où A_1, A_2 et A_3 sont des constantes ;
- un second modèle de forme polynomiale :

$$f_{\text{modèle 2}}(T) = \sum_{i=0}^{n} B_i \cdot T_r^i \qquad \text{avec } T_r = T/T_c \tag{16}$$

  où $T_c = 304{,}21$ K désigne la température critique du CO_2, n, le degré du polynôme. Les B_i sont les coefficients réels du polynôme.

8

Q17. Les valeurs des capacités thermiques reportées dans le **tableau 1** ont été mesurées par calorimétrie. Il existe de nombreuses techniques de mesures calorimétriques. Décrire succinctement le principe d'une technique expérimentale de mesure de la capacité thermique d'un liquide ou d'un gaz par calorimétrie que vous connaissez ; en particulier, fournir un schéma pour illustrer le principe de la mesure et préciser comment la valeur de la capacité thermique est déduite de la mesure.

Q18. Montrer par une analyse dimensionnelle que le rapport $C_{P,m}/R$ est sans dimension.

Q19. *Programme de lecture des données*
Indiquer la syntaxe à utiliser pour charger le fichier `cP.txt` qui contient les données expérimentales et stocker celles-ci dans deux tableaux de réels `temp` (pour les températures) et `CpR_exp` (pour les valeurs expérimentales du rapport $C_{P,m}/R$).
De plus, déterminer automatiquement le nombre de points expérimentaux N_{exp} présents dans le fichier chargé.

III.1 - Développement du premier modèle

On cherche à déterminer les coefficients A_1, A_2 et A_3 du modèle n°1 donné par l'équation (15).
Ces coefficients sont inconnus dans cette partie. Pour ce faire, on va utiliser une technique de minimisation. L'idée générale est la suivante :

- on forme une fonction dite *objectif*, notée f_{obj} rendant compte des écarts entre les prédictions du modèle et les valeurs expérimentales ;
- on va chercher à minimiser cette fonction en jouant sur les valeurs des coefficients A_1, A_2 et A_3.

La fonction objectif choisie a pour expression :

$$f_{\text{obj}}(A_1,A_2,A_3) = \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} \delta_i^2 \qquad \text{avec : } \delta_i = f_{\text{modèle 1}}(T_{\text{point exp. n°}i}) - (C_{P,m}/R)_{\text{point exp. n°}i}\,. \tag{17}$$

Q20. Dans l'expression de la fonction objectif, pour quelle raison les écarts ont-ils été élevés au carré ?

On range les coefficients recherchés dans le vecteur $\mathbf{a} = (A_1,A_2,A_3)$.

Q21. Écrire la syntaxe de la fonction `delta(vecA,temp,CpR_exp)` qui prend comme argument d'entrée un jeu quelconque de coefficients **a** (`vecA` désigne le tableau contenant les éléments du vecteur **a**), les tableaux `temp` et `CpR_exp` et renvoie en sortie le vecteur $\boldsymbol{\delta}$ contenant les éléments δ_i définis par l'équation (17).

Q22. Écrire la syntaxe de la fonction `fobj(vecA,temp,CpR_exp)` permettant l'estimation de la fonction-objectif pour un jeu quelconque de coefficients **a** (`vecA` désigne le tableau contenant les éléments du vecteur **a**). On pourra utiliser la fonction `delta` définie à la question précédente.

Un extremum local de la fonction objectif vérifie :

$$\frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial A_j} = 0 \qquad \text{pour } 1 \leq j \leq 3. \tag{18}$$

C'est donc, en particulier, le cas d'un minimum. À présent, on a besoin d'exprimer et d'estimer les dérivées $\dfrac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial A_j}$ (pour $1 \leq j \leq 3$).

Q23. Donner les expressions analytiques des dérivées $\frac{\partial f_{\text{modèle 1}}}{\partial A_1}$, $\frac{\partial f_{\text{modèle 1}}}{\partial A_2}$ et $\frac{\partial f_{\text{modèle 1}}}{\partial A_3}$.

Q24. Montrer que les expressions analytiques des dérivées $\frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial A_j}$ peuvent se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial A_j} = 2 \sum_{i=1}^{N_{\text{exp}}} \delta_i \times \frac{\partial f_{\text{modèle 1}}}{\partial A_j} \qquad \text{pour } 1 \leq j \leq 3. \tag{19}$$

et fournir explicitement leurs expressions.

On note $\mathbf{f}'$, le gradient de f_{obj}, i.e., le vecteur des 3 dérivées partielles $\frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial A_j}$ (pour $1 \leq j \leq 3$).

Q25. Écrire la syntaxe d'une fonction `deriv_fobj(vecA,temp,CpR_exp)` permettant l'estimation de $\mathbf{f}'$. Cette fonction pourra faire appel aux fonctions programmées précédemment.

Pour résoudre l'équation (18), une méthode de type Newton est envisagée. Les valeurs de $\mathbf{a}$ minimisant la fonction-objectif sont obtenues à partir du schéma itératif suivant :

$$\mathbf{a}^{\text{itération } (k+1)} = \mathbf{a}^{\text{itération } (k)} - \mathbf{H}^{-1}\,\mathbf{f}' \tag{20}$$

où $\mathbf{H}$ et $\mathbf{f}'$ sont respectivement la matrice hessienne et le gradient de f_{obj} estimés à l'itération (k). La matrice hessienne $\mathbf{H}$ de la fonction f_{obj} désigne la matrice (symétrique) de ses dérivées partielles secondes dont l'expression est définie ci-après :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_1^2} & \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_1 \partial A_2} & \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_1 \partial A_3} \\ \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_2 \partial A_1} & \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_2^2} & \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_2 \partial A_3} \\ \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_3 \partial A_1} & \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_3 \partial A_2} & \frac{\partial^2 f_{\text{obj}}}{\partial A_3^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1'}{\partial A_1} & \frac{\partial f_2'}{\partial A_1} & \frac{\partial f_3'}{\partial A_1} \\ \frac{\partial f_1'}{\partial A_2} & \frac{\partial f_2'}{\partial A_2} & \frac{\partial f_3'}{\partial A_2} \\ \frac{\partial f_1'}{\partial A_3} & \frac{\partial f_2'}{\partial A_3} & \frac{\partial f_3'}{\partial A_3} \end{pmatrix}. \tag{21}$$

On choisit d'estimer numériquement les éléments de la matrice hessienne à partir de l'approximation suivante :

$$H_{ij} = \frac{\partial f_j'}{\partial A_i} \approx \frac{f_j'(\mathbf{a}_{\text{après}}) - f_j'(\mathbf{a})}{\epsilon} \quad \text{pour } 1 \leq i,j \leq 3 \tag{22}$$

où $\mathbf{a}_{\text{après}}$ est égal à $\mathbf{a}$ excepté pour la $i^{\text{ème}}$ composante qui est augmentée de la quantité ϵ.
Par exemple, si $i = 2$, on a : $\mathbf{a}_{\text{après}} = (A_1\ ;\ A_2 + \epsilon\ ;\ A_3)$.

Q26. Écrire la syntaxe d'une fonction `hessienne_fobj(vecA,temp,CpR_exp)` permettant l'estimation de la matrice hessienne de la fonction-objectif en un point $\mathbf{a}$ quelconque. Cette fonction pourra faire appel aux fonctions programmées précédemment. On prendra $\epsilon = 10^{-5}$.

Q27. On choisit comme point de départ de la procédure itérative : $\mathbf{a}^{(0)} = (5\ ;\ -1\,000\ ;\ 500)$.
Écrire un code permettant de mettre en œuvre le calcul du $\mathbf{a}$ optimal (noté $\mathbf{a}^*$) à partir d'une méthode de type Newton. On proposera en particulier un critère d'arrêt pertinent des itérations (ce choix sera justifié).

Q28. Pour s'assurer que l'extremum obtenu est un minimum, il convient de vérifier que la matrice $\mathbf{H}$ évaluée en $\mathbf{a}^*$ est semi-définie positive (i.e., que ses valeurs propres sont positives ou nulles). Pour ce faire, écrire une fonction prenant comme argument d'entrée $\mathbf{H}(\mathbf{a}^*)$ et renvoyant en sortie 0 si la plus petite des valeurs propres de $\mathbf{H}(\mathbf{a}^*)$ est positive ou nulle et 1 si ce n'est pas le cas. Le calcul des valeurs propres sera effectué à l'aide d'une fonction-intrinsèque adaptée (voir annexe).

III.2 - Développement du second modèle : le modèle polynomial

Pour décrire les mesures expérimentales, on choisit d'utiliser un **polynôme d'interpolation** dont l'expression générale est donnée par l'équation (16). Cela signifie que le degré n du polynôme et ses coefficients seront déterminés de manière à ce que la courbe représentative de la fonction $f_{\text{modèle 2}}$ passe exactement par les 6 points expérimentaux.

Q29. Déduire le degré n du polynôme du nombre de données expérimentales. Justifier brièvement.

Q30. Écrire le système d'équations que doivent vérifier les coefficients B_i du polynôme de manière à reproduire exactement les données expérimentales.

Q31. Montrer que ce système est linéaire en le mettant sous la forme :

$$\mathbf{y}_{\text{exp}} = \mathbf{M}\,\mathbf{b} \tag{23}$$

où $\mathbf{y}_{\text{exp}}$ est le vecteur contenant les mesures expérimentales de $(C_{P,m}/R)_{\text{exp}}$, $\mathbf{b}$ le vecteur contenant les coefficients B_i du polynôme et $\mathbf{M}$ une matrice carrée dont les coefficients ne dépendent que des valeurs expérimentales de $T_r = T/T_c$.
Donner explicitement l'expression de la matrice $\mathbf{M}$.

Q32. Mathématiquement, quelle opération algébrique faut-il effectuer pour accéder aux valeurs des coefficients B_i ?

Dans la **figure 4**, on a superposé dans le plan $(C_{P,m},T)$ les points expérimentaux ainsi que les courbes associées aux deux modèles proposés. Les coefficients de ces modèles ont été déterminés suivant les procédures présentées précédemment.

Q33. Donner la syntaxe du code permettant de générer cette figure (*la courbe du modèle 1 sera représentée par un trait pointillé tandis que celle du modèle 2 sera représentée par un trait continu*). On rappelle que les coordonnées des points expérimentaux sont contenues dans les tableaux `temp` et `CpR_exp` ; les 3 coefficients du modèle 1 sont stockés dans `vecA` ; les 6 coefficients du modèle 2 sont supposés être stockés dans un vecteur `vecB`.

Q34. Commentez le graphe de la **figure 4**. Finalement, parmi les deux modèles proposés, lequel retiendriez-vous et pourquoi ?
Vous pourrez prendre en considération l'influence des incertitudes expérimentales sur les valeurs des paramètres des deux modèles considérés précédemment.

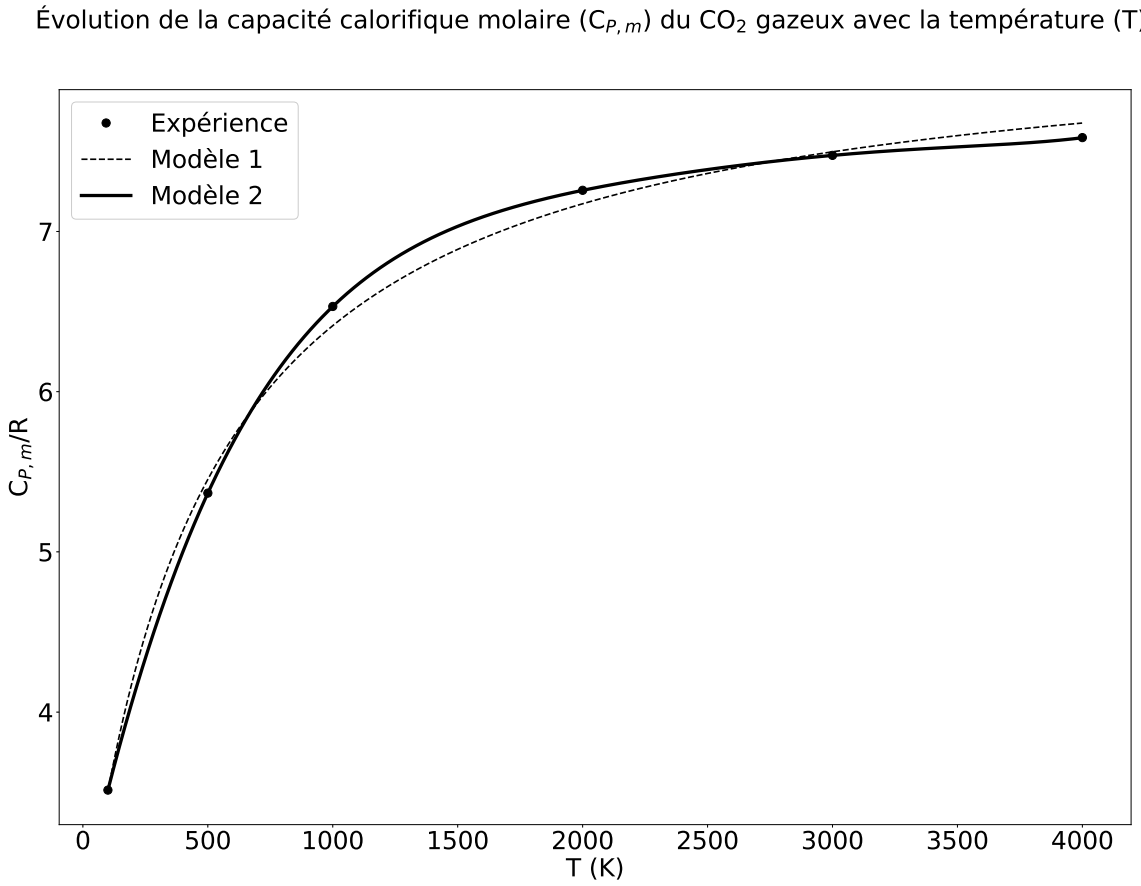


Figure 4 - Confrontation des points expérimentaux et des valeurs prédites par les deux modèles proposés dans le plan $C_{P,m}/R$ versus T

ANNEXE
Quelques commandes utiles en langage Python

A - Bibliothèque NUMPY de Python (gestion des tableaux, matrices, vecteurs et fichiers)

Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque `numpy` a préalablement été importée à l'aide de la commande : `import numpy as np`. On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

np.array(liste)

Description : fonction permettant de créer une matrice (de type tableau) à partir d'une liste.
Argument d'entrée : une liste définissant un tableau à 1 dimension (vecteur) ou 2 dimensions (matrice).
Argument de sortie : un tableau (matrice).

Exemples :

Commande	Résultat
`np.array([4,3,2])`	`[4 3 2]`

`np.array([[5],[7],[1]])`	`[[5]`
	`[7]`
	`[1]]`

`np.array([[3,4,10],[1,8,7]])`	`[[3 4 10]` `[1 8 7]]`

A[i,j]

Description : fonction qui retourne l'élément $(i+1, j+1)$ de la matrice A. Pour accéder à l'intégralité de la ligne $i+1$ de la matrice A, on écrit $A[i, :]$. De même, pour obtenir toute la colonne $j+1$ de la matrice A, on utilise la syntaxe $A[: , j]$.
Argument d'entrée : une liste contenant les coordonnées de l'élément dans le tableau A.
Arguments de sortie : l'élément $(i+1, j+1)$ de la matrice A.
RAPPEL : en langage Python, les lignes d'un tableau A de taille $n \times m$ sont numérotées de 0 à $n-1$ et les colonnes sont numérotées de 0 à $m-1$.

Exemples :

Commande	Résultat
`A=np.array([[3,4,10],[1,8,7]])` `A[0,2]`	`10`
`A[1,:]`	`[1 8 7]`
`A[:,2]`	`[10 7]`

np.zeros((n,m))

Description : fonction créant une matrice (tableau) de taille $n \times m$ dont tous les éléments sont nuls.
Argument d'entrée : un tuple de deux entiers correspondant aux dimensions de la matrice à créer.
Argument de sortie : un tableau (matrice) d'éléments nuls.

Exemple :

Commande	Résultat

`np.zeros((3,4))`	`[[0 0 0 0]`
	`[0 0 0 0]`
	`[0 0 0 0]]`

np.dot(mat1,mat2)

Description : fonction calculant le produit de deux matrices `mat1` et `mat2`.
Argument d'entrée : matrices `mat1` et `mat2`.
Argument de sortie : la matrice produit de `mat1` et `mat2`.

np.linalg.inv(mat)

Description : fonction calculant la matrice inverse de la matrice `mat`.
Argument d'entrée : matrice `mat`.
Argument de sortie : la matrice inverse de `mat`.

np.linalg.eig(mat)

Description : fonction calculant les valeurs propres de la matrice `mat`.
Argument d'entrée : matrice `mat`.
Argument de sortie : c'est un tuple dont le premier élément correspond aux valeurs propres tandis que le second élément contient les vecteurs propres.
Pour accéder aux valeurs propres de `mat`, on écrira :

```
np.linalg.eig(mat)[0]
```

np.linspace(Min,Max,nbElements)

Description : fonction créant un vecteur (tableau) de `nbElements` nombres espacés régulièrement entre `Min` et `Max`. Le premier élément est égal à `Min`, le dernier est égal à `Max` et les éléments sont espacés de `(Max-Min)/(nbElements-1)`.
Argument d'entrée : un tuple de 3 entiers.
Argument de sortie : un tableau (vecteur).
Exemple :

Commande	Résultat
`np.linspace(3,25,5)`	`[3 8.5 14 19.5 25]`

np.loadtxt('nom_fichier',delimiter='string',usecols=[n])

Description : fonction permettant de lire les données sous forme de matrice dans un fichier texte et de les stocker sous forme de vecteurs.
Argument d'entrée : le nom du fichier qui contient les données à charger, le type de caractère utilisé dans ce fichier pour séparer les données (par exemple, une espace ou une virgule) et le numéro de la colonne à charger (RAPPEL : la première colonne est affectée du numéro 0).
Argument de sortie : un tableau.
Exemple :

```
data=np.loadtxt('fichier.txt',delimiter=' ',usecols=[0])
```

Dans cet exemple, `data` est un vecteur qui correspond à la première colonne de la matrice contenue dans le fichier `fichier.txt`.

B - Résolution d'une équation non linéaire à une inconnue

La bibliothèque adaptée est chargée par l'instruction : `from scipy import optimize`.
L'équation à résoudre est mise sous la forme : $f(x) = 0$, où x désigne l'inconnue. La fonction f doit d'abord être définie à l'aide de l'instruction `def`.
Exemple : si l'équation à résoudre s'écrit $\log x = 3$, la fonction f a pour expression : $f(x) = \log x - 3$.
Codage :

```
def f(x):
    return log10(x) - 3.
```

.

La fonction `root` peut alors être utilisée pour résoudre l'équation. La variable x doit être initialisée à une valeur aussi proche que possible de la solution.

```
# Valeur initiale de x :
Xinit = 1.

# jac = None signifie que la dérivée de f (dont se sert
#     la fonction root pour effectuer la résolution)
#     n'est pas fournie par l'utilisateur mais estimée
#     numériquement par Python.
Xsol = root(f,Xinit,jac=None)
```

La solution de l'équation est rangée dans le premier élément du vecteur `Xsol.x`, c'est-à-dire :

```
Xsol.x[0]
```

C - Bibliothèque MATPLOTLIB.PYPLOT de Python (gestion des graphes)

Cette bibliothèque permet de tracer des graphiques. Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque `matplotlib.pyplot` a préalablement été importée à l'aide de la commande :

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

plt.plot(x,y,'SC')

Description : fonction permettant de tracer un graphique de n points dont les abscisses sont contenues dans le vecteur x et les ordonnées dans le vecteur y. Cette fonction doit être suivie de la fonction `plt.show()` pour que le graphique soit affiché.

Argument d'entrée : un vecteur d'abscisses x (tableau de n éléments) et un vecteur d'ordonnées y (tableau de n éléments).

La chaîne de caractères `'SC'` précise le style et la couleur de la courbe tracée. Des valeurs possibles pour ces deux critères sont :

Valeurs possibles pour S (style) :

Description	Ligne continue	Ligne traitillée	Marqueur rond	Marqueur plus
Symbole S	-	- -	o	+

Valeurs possibles pour C (couleur) :

Description	bleu	rouge	vert	noir
Symbole C	b	r	g	k

Argument de sortie : un graphique.

Exemple :

```
x= np.linspace(3,25,5)
y=sin(x)
plt.plot(x,y,'-b') # tracé d'une ligne bleue continue
plt.title('titre_graphique') # titre du graphe
plt.xlabel('x') # titre de l'axe des abscisses
plt.ylabel('y') # titre de l'axe des ordonnées
plt.show()
```

FIN

PC

CONCOURS COMMUN INP

RAPPORT DE L'ÉPREUVE ÉCRITE DE MODÉLISATION

1/ REMARQUES GÉNÉRALES

1.1- PRÉSENTATION DU SUJET

Le sujet « *Modélisation de la fuite de matière d'un réservoir rempli de dioxyde de carbone gazeux* » traite d'un problème de thermodynamique reposant sur la description d'un système ouvert en régime transitoire. Il repose sur trois parties indépendantes de poids comparables :

- La première partie concerne la mise en équation du problème étudié. Débutant par des considérations générales sur les systèmes ouverts (en régimes permanent et transitoire), elle traite ensuite plus spécifiquement le cas d'un réservoir adiabatique contenant un gaz parfait (du CO_2) soumis à une fuite, c'est-à-dire possédant une sortie de matière.
- La seconde partie propose de mettre en œuvre une résolution numérique du système d'équations différentielles établi dans la première partie à partir de la méthode d'Euler. Ce système ne présentant pas de solution analytique simple, l'étude est restée purement numérique.
- La troisième partie propose de paramétrer deux modèles décrivant l'évolution de la capacité calorifique molaire à pression constante du CO_2 en fonction de la température. Les paramètres du premier modèle sont déterminés à partir d'une méthode de minimisation d'une fonction (dite « objectif ») obtenue par sommation des écarts élevés au carré entre les valeurs prévues par le modèle et les valeurs expérimentales. Le second modèle étudié est un polynôme d'interpolation. La détermination de ses paramètres revient à inverser une matrice dite de Vandermonde.

Un aide-mémoire sur numpy est fourni en annexe.
Les correcteurs ont considéré, dans l'ensemble, le problème bien équilibré entre physique, mathématiques, algorithmique et mise en œuvre informatique et raisonnable en longueur. En revanche, le sujet a été considéré d'une difficulté supérieure à la difficulté traditionnelle des sujets de l'épreuve de modélisation des années passées.

1.2- SUR LA PRESTATION DES CANDIDATS

- De manière globale, la première partie ayant trait à l'établissement du système différentiel régissant le problème de la fuite a été traitée avec grande difficulté par les candidats. Des erreurs grossières récurrentes ont été observées dans de nombreuses copies, mettant en évidence une mauvaise compréhension de certains concepts essentiels de la discipline. L'écriture des bilans thermodynamiques des 1^{er} et 2^{e} principes demandant une maîtrise fine des concepts et de la précision, une tendance à « bricoler » (avec peu de succès) les démonstrations pour aboutir aux équations fournies par l'énoncé a été observée.
  En particulier :
  - L'application du premier principe de la thermodynamique en système ouvert (« premier principe industriel ») est systématiquement malmenée. Ce point figure pourtant explicitement au programme du cours de Physique de PC et devrait faire partie des piliers du cours de Physique, étant donné l'importance de l'établissement des bilans (de matière, d'énergie, de quantité de mouvement etc.) en Sciences Physiques,

  - La notion de gaz parfait ne semble pas comprise par de nombreux candidats qui peinent à mettre la définir et à mettre en évidence les liens entre gaz parfait et gaz réel.
  - Les notions de capacités calorifiques (molaires) à pression constante $C_{p,m}$ ou à volume constant $C_{v,m}$ sont régulièrement confondues.
- Les parties 2 et 3 traitant pour l'essentiel de questions mathématiques et numériques ont été traitées par moins de candidats (entre 1 sur 2 et 2 sur 3 suivant les questions). En revanche, elles ont été un peu mieux appréhendées et reflètent notamment une meilleure connaissance des méthodes numériques de base et de la programmation que les années précédentes. En particulier, le nombre d'erreurs de syntaxe de base (comme par exemple l'utilisation de listes ou encore la définition d'une fonction) semble avoir fortement baissé par rapport aux années antérieures.
- La troisième partie a été abordée de manière très fragmentaire.

Les correcteurs ont observé la faible présence de bonnes copies par rapport aux années passées. Certains problèmes récurrents persistent : les résultats sont insuffisamment justifiés et les démonstrations manquent de rigueur (les hypothèses sont rarement données, les lois physiques utilisées sont approximatives). Il y a également très peu de commentaires permettant de comprendre la rédaction des codes informatiques. Certaines copies sont difficiles à lire par manque de soin.

2/ REMARQUES SPÉCIFIQUES

Partie 1

Q1 : Bien traitée

Q2 : Bien traitée mais mal justifiée une fois sur deux.

Q3 : Souvent mal traitée. Le premier principe se résume à l'écriture de première année en système fermé $\Delta U = Q + W$. Presque tous les candidats ont annulé la grandeur ΔU, en oubliant complètement que seules les grandeurs associées aux système ouvert s'annulent en régime stationnaire. Il n'a pas été rare n'ont plus de lire que le régime stationnaire impliquait de W et Q sont nuls. Le premier principe industriel est rarement cité et mal utilisé quand il est présent. La relation entre énergie interne et enthalpie n'est pas connue.

Q4 : Bien traitée mais mal justifiée une fois sur deux.

Q5 : Il faut en général se contenter d'une paraphrase de la question du fait d'une question 3 ratée.

Q6a : Correct en général. L'argumentaire majoritairement cité est 'pas d'interactions' , certains parlent de 'basse pression'. Beaucoup de discussion hors sujet sur la température.

Q6b : Résultats classiques non connus de la très grande majorité des élèves. On lit dans pratiquement toutes les copies les résultats pour C_{vm} et non pour C_{pm}.

Q6c : Question globalement mal traitée. Les étudiants ont très rarement rattaché la dépendance en température aux notion de degrés de liberté.

Q6d : Beaucoup de confusions entre H et U, entre C_p et C_v. Pour la grande majorité des étudiants $dU_m = C_{pm}\, dT$.

Q7 : La première équation est établie sans problème à partir de Q4. Pour l'énergie, cela s'apparente très fréquemment à un tour de magie pour démontrer une formule donnée par l'énoncé à partir d'un résultat faux aux questions 3 et 5.

Q8 : La démonstration de la 1re relation demandée est souvent mal traitée ; il existe beaucoup de confusions et de tentatives d'aboutir au résultat demandé à partir d'escroqueries intellectuelles. L'enthalpie massique h devient alors régulièrement une grandeur d'ajustement qui prend toutes les formes possibles pour essayer de coller au résultat demandé : h= u ; h= RT/M, h= PV etc. La dérivée d'un produit ou la prise en compte de la variation temporelle de la masse m sont la plupart du temps très mal gérées. En revanche, la démonstration de la seconde relation demandée est souvent mieux traitée.

Q9 : L'intégrale est peu présente dans l'expression générale du débit massique. Lorsqu'elle l'est, les hypothèses d'uniformité permettant de sortir les grandeurs de l'intégrale ne sont généralement pas données.

Q10 : La question Q3 étant généralement fausse, cette question est souvent non aboutie. Une grande confusion entre h et Δh a été observée chez de nombreux candidats qui cherchent à retrouver l'équation proposée par l'énoncé.

Q11a : Question de cours souvent abordée de façon non rigoureuse. Pour l'écriture du second principe mélange de forme intégrée et différentielle, non-respect des notations des différentielles totales ou non pour les différents termes.
Q11b : Les étudiants ayant utilisé l'identité thermodynamique ont abouti aux expressions demandées.

Partie 2

Q12a : Alors qu'une expression analytique est attendue, beaucoup d'étudiants estiment l'intégrale à partir de la méthode des rectangles. Peu pensent à importer les bibliothèques numpy ou maths rarement importé, beaucoup n'affectent pas A1, A2, A3 , la fonction f(T) n'est pas toujours explicitée.
Q12b : La méthode des rectangles est globalement connue.
Q13 : Question souvent mal traitée et souvent non abordée. Les étudiants n'ont pas su adapter la méthode de Newton. Beaucoup ont recopié 4 fois la même ligne, l'expression de eq a souvent été répartie entre les instructions 1 et 2 .
Q14 : Question souvent non abordée. Comme l'an dernier les étudiants ont eu du mal à faire la distinction entre algorithme (ou logigramme) et code. Souvent, la condition d'arrêt et le calcul de la pression P sont oubliés.
Q15 : La méthode d'Euler est mieux maitrisée que celle de Newton. Pour les copies abordant cette question, la réponse est souvent presque correcte.
Les erreurs portent essentiellement sur le code de la dérivée de m, une mauvaise incrémentation temporelle ou un oubli du calcul de P.
Q16 : La réponse est juste sur la plupart des copies.

Partie 3

Q17 : Question très mal traitée. Les réponses sont très souvent très qualitatives ou alors avec une formule très approximative ne faisant pas apparaitre la capacité du calorimètre.
Q18 : Bien traitée car car il suffisait de lire les données fournies en première page de l'énoncé. En revanche, il ne fallait pas être regardant sur la rédaction de cette analyse dimensionnelle.
Q19 : Globalement bien traitée. La syntaxe proposée en annexe est très souvent utilisée. Beaucoup oublient d'affecter la variable Nexp.
Q20 : Très rares sont les candidats qui invoquent le problème de compensation des erreurs. La plupart mentionne précision ou variance.
Q21 : Généralement bien traitée.
Q22 : Idem.
Q23 : Idem.
Q24 : Globalement bien traitée mais le calcul de la dérivée n'est pas aisé pour tous. On observe souvent des calculs fort longs pour arriver à un résultat qui s'établit en quelques lignes de calcul.
Q25 : Globalement bien traitée.
Q26 : Question difficile, peu traitée dans l'ensemble. Les algorithmes présents sont plus ou moins compliqués. Beaucoup d'étudiants ne sont pas à l'aise avec les boucles imbriquées.
Q27 : Question très rarement abordée. Les rares candidats ayant traité cette question ont une bonne connaissance du schéma de Newton mais ne sont pas toujours à l'aise pour le critère d'arrêt.
Q28 : Question bien traitée pour ceux qui l'ont abordée.
Q29 : Très souvent faux , le plus souvent n = 6 est proposé.
Q30-31: Le système d'équations n'est pas toujours correctement établi. Certains perdent du temps en écrivant les valeurs numériques des différents coefficients dans le système (plutôt que d'utiliser des notations générales).
Q32 : Globalement bien traitée même si le terme '*inversion*' n'est pas toujours présent.
Q33 : Beaucoup de candidat fournissent une moitié des éléments du code (sans doute en raison d'un manque de temps).
Q34 : Il faut beaucoup trop souvent se contenter de phrases du type « le modèle 2 est meilleur car courbe passe par les données ». Très peu d'élèves évoquent des incertitudes sur les données.

19

3/ CONCLUSION

- Le problème a été jugé difficile par la plupart des candidats ;
- Beaucoup de candidat ont traité sérieusement les questions de codage informatique ;
- Pour environ $^2/_3$ des candidats, les méthodes numériques semblent à peu près connues ;
- En revanche, beaucoup semblent ignorer les résultats de base du cours de physique : fonctions U et H, définitions des capacités thermiques, valeurs particulières des capacités thermiques d'un gaz parfait, premier principe industriel en système ouvert, calorimétrie etc.

CONCOURS COMMUN INP

ÉPREUVE MUTUALISÉE AVEC E3A-POLYTECH

ÉPREUVE SPÉCIFIQUE - FILIÈRE PC

MODÉLISATION DE SYSTÈMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

Mercredi 6 mai : 8 h - 12 h

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 deux parties (pages 1 à 13)

et d'une annexe (pages 14 à 15).

Calcul de la contribution de la rotation interne du groupe méthyle à l'entropie de la molécule d'éthane

Présentation du problème

Le calcul des propriétés chimiques de systèmes moléculaires est aujourd'hui facilité par le développement de logiciels basés sur les lois fondamentales de la mécanique quantique. Ce type de logiciels permet par exemple de trouver la géométrie pour laquelle l'énergie d'une molécule est minimale, de calculer son énergie et ses fréquences de vibration.

Même si la plupart des étapes de calcul des données thermodynamiques des molécules sont automatisées, il est parfois nécessaire de réaliser des corrections manuellement pour obtenir des valeurs en accord avec l'expérience.

C'est le cas lorsque l'on souhaite calculer précisément la valeur de l'entropie d'une molécule qui possède des groupes méthyles. Une des molécules se trouvant dans ce cas est la molécule d'éthane (C_2H_6) dont la structure est donnée à la **figure 1**.

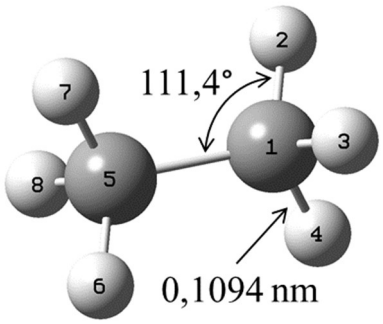


Figure 1 - Structure de la molécule d'éthane

La rotation du groupe méthyle autour de la liaison entre les deux atomes de carbone peut être représentée par différents modèles simples. Le choix du modèle est dicté par la hauteur de la barrière d'énergie potentielle à franchir lors de la rotation du groupe méthyle autour de la liaison entre les deux atomes de carbone. Parmi ces modèles, on trouve celui de la rotation libre, le modèle de l'oscillateur harmonique et le modèle de la rotation empêchée.

La première **partie** de l'épreuve concerne l'étude des conformations de l'éthane. Une attention particulière est portée aux informations que l'on peut tirer de l'évolution de l'énergie potentielle associée à la rotation du groupe méthyle. La **partie** suivante est relative au calcul de la contribution de la rotation interne du groupe méthyle à l'entropie de la molécule d'éthane en considérant différents modèles pour représenter la rotation.

Partie I - Étude des conformations de la molécule d'éthane

Q1. Rappeler à quel type d'isomérie s'apparentent des espèces dont la structure diffère par la rotation autour des liaisons simples. Rappeler le nom que l'on donne à ce type d'isomères.

L'ensemble des conformations de la molécule d'éthane est obtenu par rotation des deux groupes méthyles autour de la liaison simple entre les deux atomes de carbone.

Q2. Donner les projections de Cram et de Newman correspondant aux deux conformations remarquables dites décalée et éclipsée (en précisant bien de laquelle il s'agit).

Dans un modèle simple, en considérant l'un des deux groupes méthyles immobile, l'évolution de l'énergie potentielle associée à la rotation du second groupe méthyle autour de la liaison C–C de la molécule d'éthane en fonction de l'angle de rotation θ (aussi appelé angle de torsion) est sinusoïdale comme le montre le graphe de la **figure 2**.

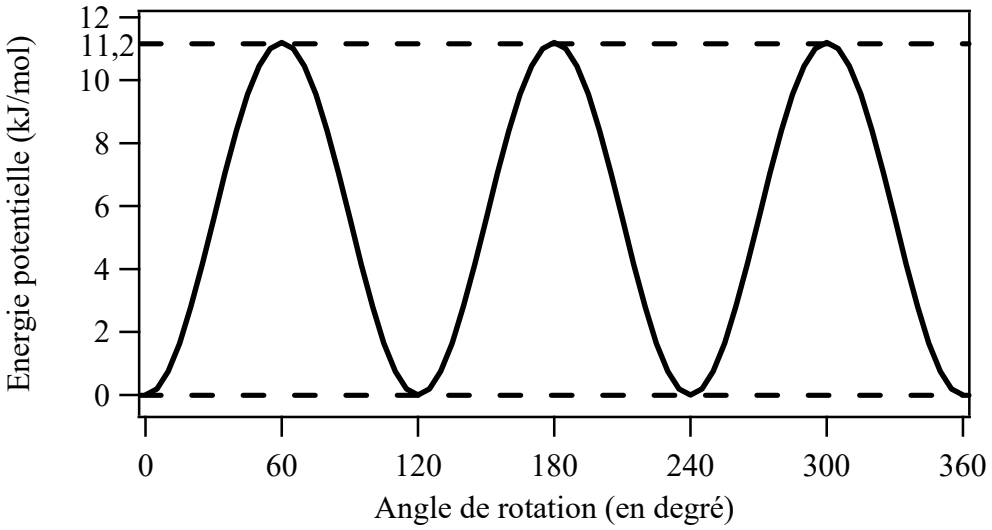


Figure 2 - Évolution de l'énergie potentielle associée à la rotation d'un groupe méthyle de la molécule d'éthane en fonction de l'angle de rotation

Q3. Indiquer à quelles conformations correspondent les minima et maxima observés sur la courbe. Expliquer brièvement l'origine de la variation de l'énergie potentielle de la molécule d'éthane en fonction de l'angle de rotation θ.

Le passage d'une conformation stable à l'autre nécessite le franchissement d'une barrière d'énergie potentielle qui sera notée $V_{\max}$. En raison de la symétrie du groupe méthyle, on constate que cette barrière d'énergie potentielle est franchie plusieurs fois de manière périodique lors d'un tour complet.

Q4. À partir du graphe de la **figure 2**, relever la valeur de la barrière d'énergie potentielle. Indiquer la périodicité du phénomène. Donner l'expression de la fonction $V(\theta, V_{\max})$ permettant de représenter l'évolution de l'énergie potentielle en fonction de l'angle de rotation θ.

Partie II - Contribution de la rotation interne du groupe méthyle à l'entropie de la molécule d'éthane

Comme indiqué dans l'introduction, la rotation interne du groupe méthyle par rapport à l'autre apporte une contribution à l'entropie de la molécule d'éthane. Le calcul de cette contribution dépend du type de rotation considérée. On distingue deux cas :

- la rotation est libre. C'est le cas si l'énergie potentielle $V_{\max}$ (en joule par molécule) est inférieure au produit $k_B \times T$ où k_B est la constante de Boltzmann et T la température ;
- la rotation est empêchée. C'est le cas si $V_{\max}$ est supérieure au produit $k_B \times T$.

Q5. Conclure quant à la liberté de la rotation à très basse température, 100 K, puis à très haute température : 2 000 K. On donne $k_B = 1{,}380\ 648\ 52 \cdot 10^{-23}$ J K^{-1} et la constante d'Avogadro $N_A = 6{,}022 \cdot 10^{23}$ mol^{-1}.

II.1 - Calcul de la contribution à l'entropie pour une rotation libre

Dans le cas d'une rotation libre, le calcul de la contribution de la rotation interne à l'entropie S_{ri} peut être effectué dans le cadre d'un modèle simple. Le résultat dépend d'un petit nombre de paramètres :

$$S_{ri} = R\left[\frac{1}{2} + \ln\left(\frac{\sqrt{8\pi^3 \times I_{int} \times k_B \times T}}{\sigma_{int} \times h}\right)\right], \quad (1)$$

avec R la constante des gaz parfaits, h la constante de Planck, σ_{int} le nombre de symétries internes du groupe méthyle égal à 3 et I_{int} le moment d'inertie réduit du groupe méthyle en rotation par rapport à l'autre groupe méthyle. Rappelons que l'expression du moment d'inertie réduit est :

$$I_{int} = \frac{I_A \times I_B}{I_A + I_B}, \quad (2)$$

avec I_A et I_B les moments d'inertie des deux groupes méthyles (on a $I_A = I_B$ dans le cas de l'éthane). Le moment d'inertie du groupe méthyle en rotation autour de l'axe matérialisé par la liaison entre les deux atomes de carbone de la molécule d'éthane est :

$$I = \sum_i (m_i \times r_i^2), \quad (3)$$

avec m_i la masse de l'atome i et r_i la distance entre l'atome i et sa projection orthogonale sur l'axe de rotation du groupe méthyle considéré.

Q6. Expliquer pourquoi la contribution de l'atome de carbone au moment d'inertie du groupe méthyle en rotation autour de la liaison matérialisée par les deux atomes de carbone de la molécule d'éthane est nulle.

Q7. Calculer le moment d'inertie (dans les unités du Système International) pour un groupe méthyle à partir des données suivantes :

- masse d'un atome d'hydrogène : $1{,}673\ 7 \cdot 10^{-27}$ kg
- longueur des liaisons C–H : 0,109 4 nm
- valeur des angles C–C–H : 111,4°

Q8. En déduire la valeur du moment d'inertie réduit dans les unités du Système International.

Q9. Calculer la contribution à l'entropie dans le cas de la rotation libre à 298,15 K dans les unités du Système International avec le nombre de chiffres significatifs adéquats.
On donne $R = 8{,}314$ J mol^{-1} K^{-1} et $h = 6{,}626\ 070\ 04 \cdot 10^{-34}$ J s.

II.2 - Calcul de la contribution à l'entropie pour un oscillateur harmonique

Dans le cas où la rotation est empêchée, on peut utiliser en première approximation le modèle de l'oscillateur harmonique pour obtenir la contribution de la rotation du groupe méthyle à l'entropie de la molécule d'éthane. Le graphe de la **figure 3** donne l'évolution de l'énergie potentielle associée à la rotation du groupe méthyle autour de la liaison C–C dans la molécule d'éthane et l'énergie potentielle de l'oscillateur harmonique. Cette dernière peut se mettre sous la forme suivante :

$$V(\theta) = \frac{1}{2} K\theta^2, \qquad (4)$$

avec K une constante et θ l'angle de rotation du groupe méthyle autour de la liaison C–C dans la molécule d'éthane.

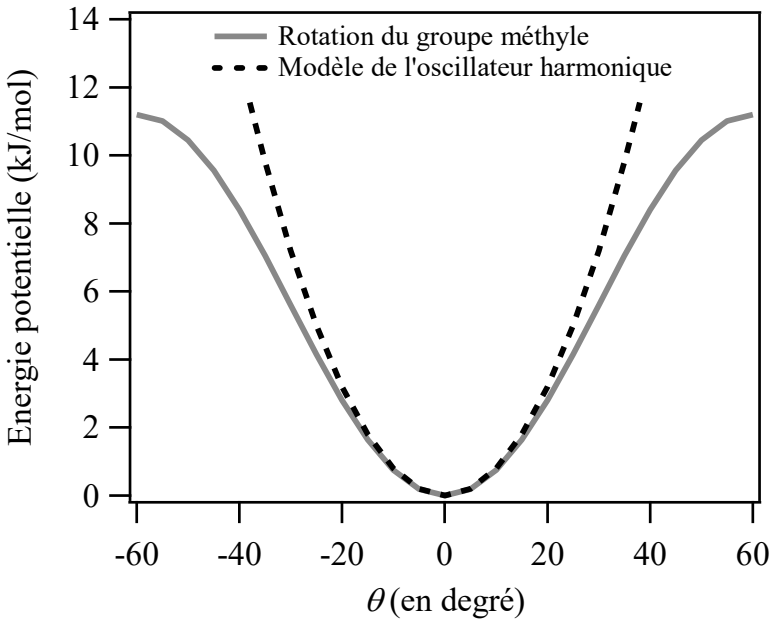


Figure 3 - Approximation de la rotation interne du groupe méthyle par le modèle de l'oscillateur harmonique

Traitement quantique de l'oscillateur harmonique

La détermination de la contribution de la rotation du groupe méthyle à l'entropie de la molécule d'éthane peut être réalisée à partir du traitement quantique de l'oscillateur harmonique. Cette méthode nécessite la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas de l'oscillateur harmonique unidimensionnel. La fonction d'onde à laquelle on s'intéresse est celle du proton de l'élément hydrogène.

L'équation de Schrödinger stationnaire en coordonnées cylindriques peut se mettre sous la forme suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\theta)\Psi = E\Psi, \tag{5}$$

avec m la masse d'un atome d'hydrogène, $\hbar$ la constante de Planck réduite ($\hbar = h/2\pi$), Ψ la fonction d'onde associée à un état propre, E la valeur propre associée et $V(\theta)$ l'énergie potentielle à laquelle est soumise l'atome d'hydrogène lorsque le groupe méthyle tourne autour de la liaison C–C dans la molécule d'éthane (E et $V(\theta)$ sont exprimées en joule, θ est l'angle de de rotation). $\Delta\Psi$ est le Laplacien de la fonction d'onde Ψ dont l'expression en coordonnées cylindriques est :

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}. \tag{6}$$

Q10. Simplifier l'expression du Laplacien de la fonction d'onde dans le cas de la rotation d'un atome d'hydrogène autour de l'axe matérialisé par la liaison entre les deux atomes de carbone confondu avec l'axe (Oz) dans un repère (O,r,θ,z). On supposera que le groupe méthyle est indéformable lors de sa rotation autour de l'axe (Oz). Donner alors l'expression de l'équation de Schrödinger stationnaire en cordonnées cylindriques, que l'on mettra sous la forme :

$$G\,\Psi = [E - V(\theta)]\Psi,$$

avec G un opérateur dont l'expression est à déterminer et $V(\theta)$ l'énergie potentielle donnée par l'équation (4).

Pour simplifier la résolution de l'équation simplifiée tirée de l'équation (6), on souhaite la réécrire sous la forme adimensionnelle suivante :

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi^2} = -2\left[\varepsilon - \frac{1}{2}\xi^2\right]\Psi, \tag{7}$$

avec ε un paramètre discuté plus loin, $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,r\theta$ et $\omega = \sqrt{\frac{K}{mr^2}}$ où ω est la pulsation propre de l'oscillateur.

Q11. Établir l'expression du paramètre ε qui intervient dans la forme adimensionnelle de l'équation de Schrödinger (équation (7)) et déterminer sa dimension.

Q12. Donner la dimension de ξ. Dans la suite, ξ sera appelée abscisse réduite et sera notée x.

Résolution numérique par la méthode de Numerov

On peut résoudre numériquement l'équation (7) pour trouver les valeur de Ψ pour le niveau d'énergie ε par la méthode de Numerov. Il s'agit d'une méthode permettant de réaliser l'intégration d'équations différentielles ordinaires du deuxième ordre de la forme :

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -g(x)y(x) + s(x). \tag{8}$$

Q13. Donner les expressions des fonctions $g(x)$, $y(x)$ et $s(x)$ en procédant par identification à partir des équations (7) et (8).

Pour discrétiser l'équation différentielle (8), on effectue des développements limités. L'intervalle des abscisses x est divisé en un nombre fini de points régulièrement espacés de Δx, le pas d'espace. On utilisera l'indice i pour repérer la position des différents points sur l'abscisse discrétisée.

Q14. Donner les étapes permettant d'obtenir l'expression discrétisée suivante (équation (9)) en précisant à quel ordre ont été effectués les développements limités :

$$y_{i+1} + y_{i-1} = 2y_i \ + y_i'' \times (\Delta x)^2 + y_i'''' \times \frac{(\Delta x)^4}{12}, \qquad (9)$$

avec x_i l'abscisse au point i, $y_{i+1} = y(x_i + \Delta x)$ et $y_{i-1} = y(x_i - \Delta x)$ pour Δx petit, $y''(x) = \frac{d^2y}{dx^2}$ et $y''''(x) = \frac{d^4y}{dx^4}$.

Pour simplifier l'équation (9), on pose $\lambda_i \ = y_i''$.

Q15. Montrer, en précisant les étapes intermédiaires, que l'on peut exprimer y_i'''' de la façon suivante :

$$y_i'''' = \frac{\lambda_{i+1}+\lambda_{i-1}-2\lambda_i}{(\Delta x)^2}. \qquad (10)$$

L'équation (9) peut se mettre sous la forme factorisée suivante (équation (11)) où a et b sont des scalaires et g_i une fonction de y_i et $\lambda_i$dont l'expression est obtenue à partir de l'équation (8) :

$$y_{i+1}\left(1 + a \times g_{i+1}\frac{(\Delta x)^2}{12}\right) = 2y_i \ \left(1 - b \times g_i\frac{(\Delta x)^2}{12}\right) - y_{i-1}\left(1 + a \times g_{i-1}\frac{(\Delta x)^2}{12}\right). \qquad (11)$$

Q16. À l'aide de l'équation (8), donner l'expression de g_i en fonction de λ_i et y_i. Déterminer les valeurs des scalaires a et b.

D'un point de vue pratique, on introduit une fonction intermédiaire f telle que : $f_i = 1 + g_i\frac{(\Delta x)^2}{12}$.

Q17. Démontrer alors la formule de récurrence suivante :

$$y_{i+1} = \frac{\left(12-10f_i\ \right)y_i \ - f_{i-1}y_{i-1}}{f_{i+1}}. \qquad (12)$$

L'intégration de l'équation (8) à l'aide de la formule de récurrence (12) établie à la question précédente nécessite de connaître les valeurs des premiers termes de la suite : y_0 et y_1. Les valeurs de ces deux paramètres seront discutées plus loin. Pour résoudre numériquement l'équation (7) par la méthode de Numerov, on prendra $g_i = 2\left[\varepsilon - \frac{1}{2}{x_i}^2\right]$ avec ε le paramètre de l'équation (7) dont l'expression est établie à la **Q11**.

Algorithme général de résolution du problème

Note : les codes numériques demandés au candidat **devront être réalisés dans le langage Python**. On supposera la bibliothèque « numpy » chargée. Une **annexe** présentant les fonctions usuelles de Python est disponible pages 14 et 15. Les commentaires suffisants à la compréhension du programme devront être apportés et des noms de variables explicites devront être utilisés lorsque ceux-ci ne sont pas imposés.

Pour résoudre numériquement ce problème et obtenir simultanément les valeurs de la fonction d'onde $\Psi_n(x)$ et l'énergie réduite ε_n correspondant à l'état quantique n, (n est un entier positif ou nul), on souhaite développer une méthode par dichotomie pour approcher la valeur de l'énergie réduite ε_n.

Il existe des fonctions d'onde $\Psi(x)$ satisfaisant à l'équation (7) pour toute valeur de ε. Cependant toutes ne vérifient pas les conditions aux limites. Les conditions aux limites ne sont satisfaites que pour un ensemble discret de valeurs de ε.

Les solutions discrètes sont repérées par un indice n qui représente le nombre de zéros de la fonction (défini comme le nombre de points d'intersection entre la fonction d'onde et l'axe des abscisses). Il est donc nécessaire de trouver une condition permettant de s'assurer que la fonction d'onde puisse satisfaire les conditions aux limites et donc que l'énergie obtenue corresponde bien à un état quantique. Cette condition peut porter par exemple sur le nombre de nœuds de la fonction d'onde $\Psi_n(x)$.

Q18. À partir de l'allure des fonctions d'onde $\Psi_n(x)$ associées aux premiers niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique quantique unidimensionnel de la **figure 4,** déterminer la condition portant sur le nombre de nœuds de la fonction d'onde $\Psi_n(x)$ qui doit être satisfaite pour une énergie réduite ε_n (on supposera par la suite que cette condition est valable pour tout niveau d'énergie).

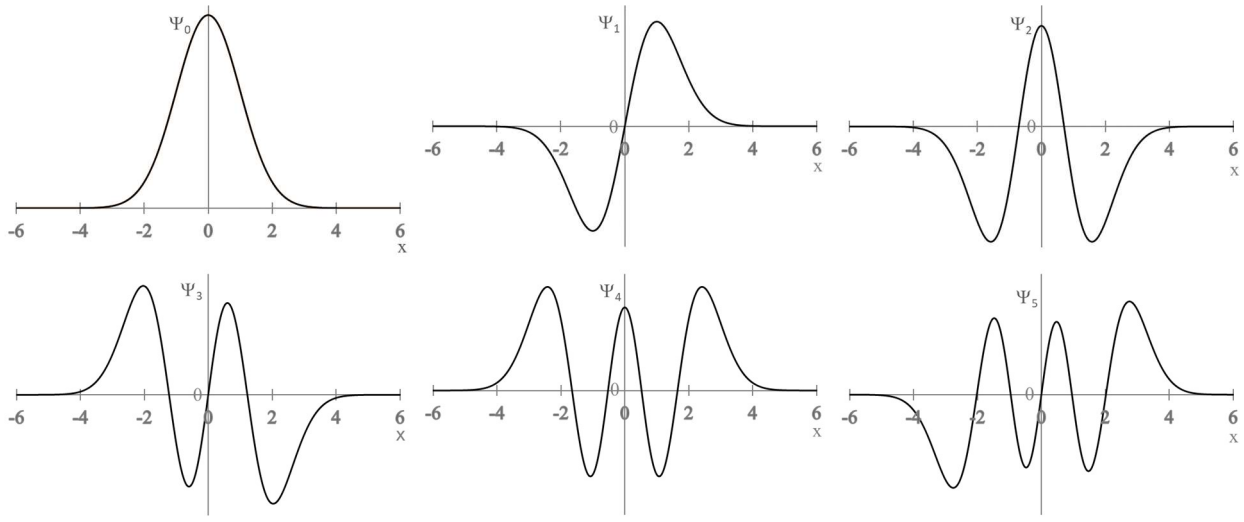


Figure 4 - Allure des fonctions d'onde $\Psi_n(x)$ associées aux premiers niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique quantique unidimensionnel

Q19. À l'aide de l'allure des courbes de la **figure 4**, on supposera qu'il est possible de restreindre l'intervalle d'intégration aux seules valeurs positives. Donner la relation unique entre $\Psi_n(x)$ et $\Psi_n(-x)$. On supposera par la suite que cette hypothèse est valable pour tout niveau d'énergie.

Le graphe de la **figure 5** illustre sur un exemple (pour n = 2) ce que l'on obtient lorsqu'on résout numériquement l'équation de Schrödinger pour une énergie réduite ε qui ne correspond pas à une valeur propre. On observe que la fonction d'onde diverge au lieu de tendre vers 0 quand on s'éloigne de l'origine.

Q20. Préciser l'observation supplémentaire qui peut être réalisée sur le nombre de nœuds de la fonction d'onde $\Psi_2(x)$ dans le cas où ε est supérieure à la valeur propre ε_2. Dans la suite, on supposera que cette observation est valable pour tout n.

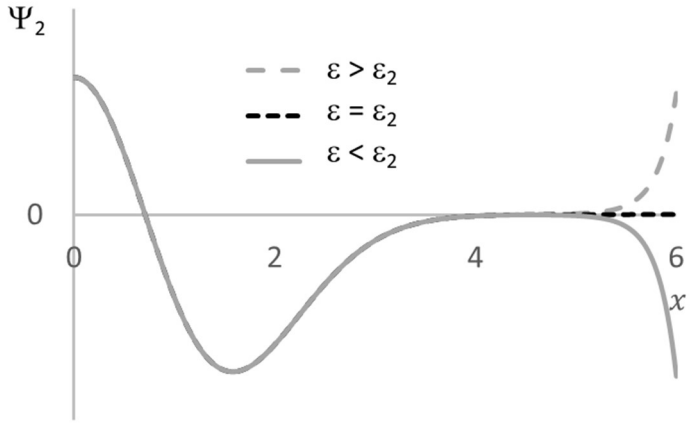


Figure 5 - Allures de la fonction d'onde $\Psi_2(x)$ sur l'intervalle positif pour la valeur propre ε_2, pour une énergie réduite ε supérieure à ε_2 et pour une énergie réduite ε inférieure à ε_2. Les trois courbes se superposent jusque vers x = 5

L'algorithme général de résolution du problème par une méthode dichotomique est donc le suivant :

- choix d'une valeur de n ;
- choix de deux valeurs limites de ε ($\varepsilon_{\min}$ et $\varepsilon_{\max}$) qui contiennent ε_n.

Puis débute la boucle conditionnelle (condition portant sur un critère de convergence) :

- résolution de l'équation : intégration de $\Psi_n(x)$ en partant de x = 0 par valeurs croissantes à l'aide de la formule de récurrence (équation (12)) pour $\varepsilon = (\varepsilon_{\min} + \varepsilon_{\max})/2$;
- on compare le nombre de nœuds avec le nombre quantique n :
  - si le nombre de nœuds est supérieur à n, alors $\varepsilon > \varepsilon_n$ et dans ce cas on itère en affectant à $\varepsilon_{\max}$ la valeur de ε ;
  - sinon on itère en affectant à $\varepsilon_{\min}$ la valeur de ε ;
- on calcule la différence entre $\varepsilon_{\max}$ et $\varepsilon_{\min}$. Si celle-ci est inférieure au critère de convergence choisi suffisamment petit, on arrête les itérations.

Codage de l'algorithme

Pour réaliser l'intégration numérique de l'équation (7), il faut tout d'abord définir Δx le pas d'intégration. L'abscisse réduite est comprise entre les valeurs **xmin** = 0 et **xmax** = 6. On souhaite diviser le segment en 100 intervalles de même longueur. On appelle **imax** le nombre de valeurs des abscisses comprises entre **xmin** et **xmax**.

Q21. Donner la valeur numérique de **imax**. Donner ensuite le code permettant de calculer le pas de position Δx (noté **dx**) en fonction de **xmin**, **xmax** et **imax**.

Q22. Donner le code permettant de calculer les valeurs du vecteur **xmesh** qui contient les valeurs des abscisses réduites et du vecteur **vpot** qui contient les valeurs du potentiel $V_i = V(x_i) = 0{,}5\ x_i^2$ pour chaque pas d'intégration.

L'intégration numérique de l'équation de Schrödinger nécessite le choix des valeurs des termes y_0 et y_1. Celui-ci dépend de la parité de la fonction d'onde $\Psi_n(x)$:

- si n est impair, alors $y_0 = 0$ et y_1 peut prendre n'importe quelle valeur finie (on prendra pour le code y_1 = 1) ;
- si n est pair, alors y_0 peut prendre n'importe quelle valeur finie (on prendra pour le code y_0 = 1) et y_1 est obtenu par la formule de Numerov (équation (12)) : $y_1 = \frac{(12-10f_0)y_0}{2f_1}$.

Q23. Démontrer l'expression $y_1 = \frac{(12-10f_0)y_0}{2f_1}$ dans le cas où n est pair.

On suppose dans la suite que le nombre quantique n a déjà été défini par l'utilisateur. On note **nodes** la variable correspondant au nombre quantique n qui est aussi le nombre de nœuds de la fonction d'onde et **y** le vecteur contenant les valeurs de la fonction d'onde. On suppose également que les valeurs ε_{min} et ε_{max} ont été définies (elle seront notées **emin** et **emax**). On prendra $\varepsilon_{\text{min}} = 0$ et pour ε_{max} la valeur maximale du vecteur **vpot**.

Q24. Écrire le code de la fonction **calcul_f(e)** qui permet de calculer et de retourner les valeurs de la fonction f de l'algorithme de Numerov pour chaque valeur de x. La variable **e** correspond à l'énergie réduite ε.

On souhaite maintenant développer une fonction **calcul_y_noeuds(nodes,f)** qui renvoie **y** le vecteur contenant les valeurs de la fonction d'onde et **ncross** le nombre de nœuds. Sa structure est fournie dans le code suivant (page 11), il est incomplet et les portions à compléter sont demandées dans les questions suivantes.

PC

CONCOURS COMMUN INP

RAPPORT DE L'ÉPREUVE ÉCRITE DE MODÉLISATION

1/ REMARQUES GÉNÉRALES

1.1 – PRÉSENTATION DU SUJET

Le sujet traitait de la contribution à l'entropie de la molécule d'éthane de la rotation du groupe méthyle autour de la liaison matérialisée par les deux atomes de carbone de la molécule.
Le sujet débutait avec quelques questions concernant la stéréochimie, une analyse énergétique des conformations (à partir d'un graphique décrivant l'évolution de l'énergie potentielle de la molécule en fonction de l'angle de rotation du groupe méthyle), un peu de mécanique du solide (calcul de moment d'inertie) et de la physique quantique (simplification de l'équation de Schrödinger à partir de l'analyse des invariances).
La partie suivante était relative à la résolution numérique du problème par la méthode de Numerov. Elle nécessitait l'écriture de développements limités pour établir la formule de récurrence nécessaire à l'intégration numérique de l'équation de Schrödinger. Une analyse graphique des fonctions d'ondes associées aux premiers niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique unidimensionnel permettait de justifier la méthode de recherche des valeurs propres par dichotomie. La partie codage en langage PYTHON qui suivait était classique avec cette année un programme à compléter, un algorithme à développer et des portions de codes à donner.
La dernière partie concernait une analyse physique sur l'entropie de la molécule à partir de données numériques. Il était notamment attendu de faire le lien entre l'augmentation de l'entropie en fonction de la température et la notion de désordre. Il était également demandé d'émettre des recommandations quant à l'utilisation des trois modèles proposés selon le domaine de température.
Le sujet n'était pas très long. Les concepts abordés et les questions posées dans le sujet étaient conformes au programme de PCSI et de PC. La plupart des résultats à démontrer étaient donnés pour permettre aux candidats de poursuivre sans être pénalisés.

1.2 – PROBLÈMES CONSTATÉS PAR LES CORRECTEURS

Soin apporté à la rédaction :
- certaines copies comportaient énormément de ratures et étaient à la limite de la lisibilité. Les ratures isolées avec un commentaire invitant le correcteur ou la correctrice à ne pas lire sont moins problématiques que les ratures mêlées au texte ou se trouvant au milieu d'une démonstration. Une meilleure utilisation des brouillons est à recommander.
- certaines copies étaient très agréables à lire, notamment lorsque les résultats étaient mis en valeur (soit encadrés, soit soulignés, avec une couleur différente du texte).
- l'orthographe et la grammaire laissent parfois à désirer. L'erreur la plus fréquente est la confusion entre le participe passé et l'infinitif.

Numérotation des questions : énormément de mauvaises numérotations des questions ont été observées cette année. Cela n'a pas été pénalisé malgré les difficultés que cela peut engendrer au moment de la correction. Il est fortement recommandé de respecter la numérotation des questions.

Rédaction des réponses :
- de manière générale les réponses ne sont pas assez étoffées, voire imprécise, et les arguments ne sont pas toujours présents ou clairement explicités. Certaines réponses apparaissent parfois comme une succession de mots clefs sans véritable lien et laissent libre cours à l'interprétation du lecteur. Plus problématique, le vocabulaire utilisé est très souvent inapproprié et très peu rigoureux. Il est recommandé de prendre le temps nécessaire et d'utiliser le vocabulaire adéquat pour rédiger correctement les réponses et exprimer clairement sa pensée.
- un manque de rigueur mathématique a également été observé avec des confusions au niveau de concepts de base (par exemple fonction / expression), le non-respect des notations (par exemple la notation de Landau dans l'expression d'un développement limité), des résultats numériques avec un nombre de chiffres significatifs totalement aberrant et des unités trop souvent manquantes ou fausses.

Écriture du code :
- très peu de copies proposent des commentaires permettant de comprendre les portions de codes développés par les candidats.
- la notion d'algorithme ne semble pas être claire pour une majorité des candidats. De nombreuses copies ont fourni un code à la place.
- dans de nombreuses copies les portions de code ont été incluses dans des fonctions alors que ce n'était pas demandé et que ce n'était pas utile. Les correcteurs et les correctrices ne comprennent pas l'intérêt et la raison de cette pratique à proscrire.
- dans certaines copies des libertés ont été prises pour modifier des parties du code qui était imposées. Cela n'est pas acceptable car cela va à l'encontre des compétences attendues lors de cette épreuve avec, certes, la capacité à rédiger du code, mais aussi la compréhension d'un code existant, ce qui demande une certaine adaptabilité.
- l'utilisation de fonctions intrinsèques de la bibliothèque Numpy avec des syntaxes fantaisistes a été observée dans de nombreuses copies (par exemple pour la création de vecteurs). L'utilisation de ces fonctions n'est pas proscrite ; cependant on est en droit d'exiger que la syntaxe soit correcte. Dans une telle épreuve, il est préférable d'utiliser, en lieu et place de fonctions intrinsèques, des codes certes moins compacts mais dont les syntaxes sont plus intuitives.
- dans certaines copies, des mélanges entre les opérations spécifiques aux listes et aux vecteurs ont été observés.

2/ REMARQUES SPÉCIFIQUES

Q1 De nombreuses confusions entre les différents types d'isoméries ont été relevées dans les copies.
Q2 Cette question a été bien traitée dans l'ensemble même si parfois il y a confusion entre les conformations décalée et éclipsée. Les dessins des représentations ne sont pas toujours de bonne qualité.
Q3 Cette question a également été bien traitée dans l'ensemble ; la notion de gêne stérique apparaît dans de nombreuses copies.
Q4 Le relevé de la valeur de la barrière d'énergie potentielle et de la périodicité n'a pas posé de problème en général. Par contre seuls environ 2 % des candidats ont fourni l'expression correcte de la fonction permettant de représenter l'évolution de l'énergie potentielle en fonction de l'angle de torsion.
Q5 Cette question a été bien traitée de manière générale. Une très faible fraction de candidats s'est trompée au moment de l'interprétation. Le nombre de chiffres significatifs est souvent exagéré.
Q6 Question bien traitée de manière générale.
Q7 Un nombre non négligeable de candidats ont utilisé le cosinus de l'angle opposé au lieu du sinus. Certains se trompent dans les unités ou les oublient ou indiquent seulement SI. Le nombre de chiffres significatifs est la plupart du temps raisonnable. On trouve trop rarement un schéma décrivant les angles d'intérêt.
Q8 Les problèmes rencontrés concernent les unités (voir question précédente).
Q9 Les problèmes rencontrés concernent les unités (voir question précédente). Le nombre de chiffres significatifs est dans la majorité des cas correct.

Q10 Cette question a été bien traitée dans l'ensemble. Quelques candidats ont mal analysé les invariances et se sont retrouvés avec des équations plus compliquées qu'il ne fallait. Peu ont fait le lien avec les indications de l'énoncé (« oscillateur harmonique unidimensionnel »).
Q11 Question plus ou moins bien traitée. Parfois l'expression de epsilon est correcte mais l'analyse dimensionnelle est fausse.
Q12 Certains pensent bien à faire remarquer la cohérence entre les dimensions de ε et de ξ pour confirmer le résultat.
Q13 Cette question a posé problème à bon nombre de candidats qui n'ont pas vu que la fonction s(x) devait être égale à 0. Dans bon nombre de copies on trouve un mélange de x et de ξ.
Q14 L'ordre 4 ou 5 est la plupart du temps correct. L'écriture des DL n'est pas rigoureuse (il manque souvent le o() ou le O() et la discrétisation tombe souvent du ciel.
Q15 En plus des remarques précédentes, bon nombre de candidats se sont lancés dans des dérivations hasardeuses au lieu de poser des DL à l'ordre 2 ou 3 pour la variable lambda.
Q16 Question souvent mal traitée. Certains candidats ont confirmé le résultat (valeurs de a et b) grâce à la question qui suivait.
Q17 Question bien traitée lorsque les valeurs de a et b obtenues à la question précédente étaient correctes.
Q18 Question bien traitée en général.
Q19 Question bien traitée en général. Dans certaines copies, seul le cas pair a été traité.
Q20 Question assez bien traitée en général même si parfois les réponses manquaient de rigueur (un nombre de nœuds était donné mais on ne savait pas vraiment sur quel intervalle le raisonnement était réalisé).
Q21 Cette question a posé problème (confusion sur le fait que imax et imin étaient inclus ou pas, confusion entre le pas dx et imax) et la valeur de la variable imax était souvent fausse.
Q22 Les problèmes les plus fréquents sont des problèmes d'indices dans les boucles. Beaucoup n'ont pas compris ce que représentait xmesh. Le code permettant de créer la variable xmesh est souvent faux, voire absent. Le code permettant de créer la variable Vpot a posé moins de problème.
Q23 Cette question a posé problème. Bon nombre de candidats ont considéré que le produit de y_{-1} et f_{-1} était égal à 0.
Q24 Les problèmes les plus fréquents sont des problèmes d'indices dans les boucles. Beaucoup ont pris la liberté d'ajouter des arguments d'entrée alors qu'il était imposé que seul e soit argument d'entrée de la fonction calcul_f(e).
Q25 Question relativement bien traitée. Une erreur récurrente est de proposer comme test y = 0 alors que ce cas est hautement improbable. Dans certaines copies, on se contente d'expliquer qu'il faut incrémenter un compteur à chaque fois qu'un nœud est détecté.
Q26 Question relativement bien traitée même si parfois des écarts au cadre imposé ont été observés. L'initialisation de la variable y est rarement abordée de manière correcte. La forme du test de parité était imposée ce qui a également posé problème à certains candidats qui aurait voulu procéder autrement. Une erreur est revenue assez souvent au niveau des indices de la boucle de calcul des valeurs f_i qui devait commencer à l'indice 2 puisque f_0 et f_1 avait déjà été calculées précédemment.
Q27 Cette question a été très mal traitée. La notion d'algorithme ne semble pas bien connue des candidats qui ont donné à la place des portions de code.
Q28 Cette question a été peu traitée. L'erreur qui revient souvent est l'oubli quasi systématique du facteur 2 lors de la comparaison de nodes (défini sur tout l'intervalle) et de ncross qui était défini sur l'intervalle positif. Une autre erreur qui revient souvent est l'appel des fonctions calcul_f(e) et calcul_y_noeuds(nodes,f) en dehors de la boucle conditionnelle.
Q29 Cette question n'a pas posé de problème.
Q30 L'augmentation de l'entropie avec la température a été observée par une grande majorité. Bon nombre de candidats oublient de relier les observations à la notion de désordre.
Q31 L'erreur qui revient souvent est de faire des recommandations sans préciser dans quels domaines de températures elles sont valables.
Q32 Les justifications ne sont pas toujours claires et correctement exprimées, même si l'idée est souvent là. Certains se contentent de paraphraser ce qu'ils ont déjà exprimé à la question 30. La notion de système piégé dans un puit d'énergie potentielle dans le cas de l'oscillateur harmonique n'apparaît que rarement. Une confusion entre rotation et oscillation a été observée dans certaines copies.

3/ CONCLUSION

Les corrections de copies révèlent en premier lieu de sérieuses lacunes dans les différentes matières transversales abordées lors de cette épreuve. Une trop grande majorité de candidats ne maîtrise pas les outils mathématiques de base (trigonométrie, développements limités) et numériques (discrétisation, zéro numérique), voire des outils élémentaires (fonctions sinusoïdales). Ces difficultés se retrouvent également dans la partie informatique avec une logique de programmation qui laisse souvent à désirer, une syntaxe souvent erronée et des confusions entre des notions de base telles qu'algorithme et code. Il faut encourager les élèves de CPGE à plus s'impliquer en programmation, en particulier à adopter une plus grande rigueur dans la compréhension et l'utilisation des concepts de base en programmation. Il faut comprendre que ces acquis aujourd'hui indispensables, qui seront renforcés plus tard dans les Écoles d'Ingénieurs, seront valorisés dans leur future carrière d'ingénieur.

En second lieu, un manque de rigueur scientifique et rédactionnelle a été observé dans de nombreuses copies. Ce manque de rigueur concerne le vocabulaire et les concepts scientifiques de base qui sont utilisés de manière inappropriée rendant les réponses peu claires, voire incompréhensibles. Il concerne également la partie mathématique avec des confusions concernant des concepts élémentaires, le non-respect des notations, le nombre de chiffres significatifs des valeurs numériques et leurs unités. Il faut encourager les élèves de CPGE à plus de rigueur dans ces domaines de manière à pouvoir aborder la poursuite de leurs études et leur future carrière d'ingénieur dans les conditions les plus favorables qui soient.

CONCOURS COMMUN INP

ÉPREUVE SPÉCIFIQUE - FILIÈRE PC

MODÉLISATION DE SYSTÈMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

Jeudi 2 mai : 8 h - 12 h

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.

Les calculatrices sont autorisées

Le sujet est composé de trois parties partiellement indépendantes.

Modélisation du mouvement d'une plateforme en mer

On s'intéresse à la résolution d'équations du mouvement dans une approche classique de la mécanique afin d'étudier le mouvement d'une plateforme en mer. Le modèle envisagé est un système à un degré de liberté considéré comme oscillateur harmonique : une masse est reliée à un ressort, avec ou sans amortissement, et peut être soumise à une excitation externe.

La résolution est tout d'abord abordée de façon analytique puis de façon numérique, avant enfin de comparer les résultats obtenus.

Les résolutions analytiques et numériques sont largement indépendantes.

Dans la suite de l'énoncé, toutes les grandeurs vectorielles sont indiquées en gras.

Un aide-mémoire sur `nu py` *est donné en Annexe.*

On considère le mouvement d'une plateforme en mer soumise à un courant marin. Sa partie supérieure de masse $m = 110$ tonnes est considérée comme rigide et le mouvement principal de la plateforme a lieu suivant x (**figure 1(a)**).

Afin d'étudier le mouvement de cette plateforme, on la représente par une masse m, liée à un ressort de constante de raideur k et à un amortisseur de constante d'amortissement γ, pouvant subir une excitation externe de force $\mathbf{F_{exc}}$, et se déplaçant sur un support (**figure 1(b)**). Le ressort représente la rigidité de l'ensemble du support de la plateforme. L'amortisseur permet de prendre en compte l'effet de l'eau environnante et la force d'excitation externe celui des vagues qui frappent périodiquement la plateforme. La masse est supposée se déplacer selon une seule direction parallèle à l'axe Ox en fonction du temps t.

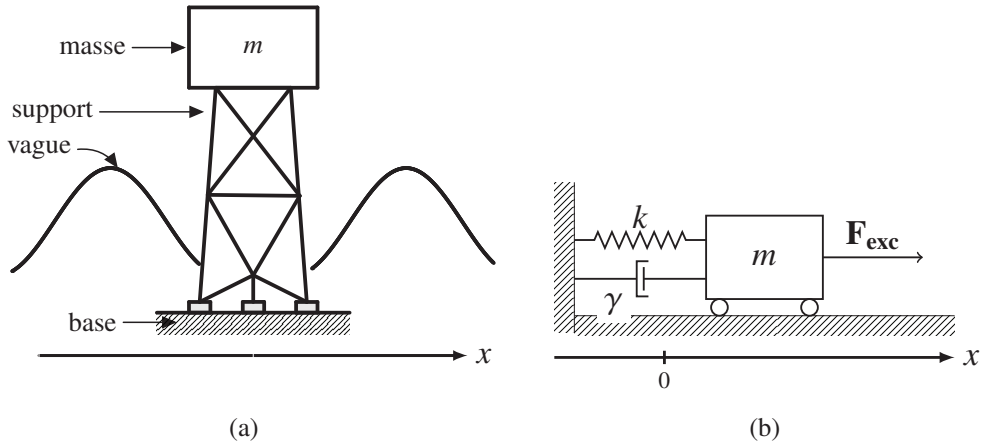


Figure 1 – (a) Plateforme en mer soumise aux vagues marines, (b) système masse (m), ressort (k), amortisseur (γ) et excitation externe ($\mathbf{F_{exc}}$)

Les projections sur l'axe Ox de la position, de la vitesse et de l'accélération de la masse en fonction du temps sont notées respectivement $x(t)$, $\dot{x}(t)$ et $\ddot{x}(t)$. La force totale $\mathbf{F_{tot}}$ agissant sur la masse correspond à la réaction normale $\mathbf{R_N}$ de la base horizontale, à la force de frottement $\mathbf{F_d}$, à la force de rappel $\mathbf{F_k}$ du ressort, au poids $\mathbf{P}$ de la masse et à la force $\mathbf{F_{exc}}$ d'excitation externe. La position d'équilibre de la masse sera choisie à $x = 0$. En l'absence d'action de l'amortisseur, la masse se déplace sur la base horizontale sans frottements.

Partie I - Résolution analytique et détermination des paramètres pour la modélisation

Q1. En effectuant une projection sur l'axe Ox, montrer que $\mathbf{P}$ et $\mathbf{R_N}$ n'interviennent pas dans le bilan des forces.

I.1 - Ressort sans amortissement et sans excitation

Q2. Démontrer que l'équation du mouvement de la masse correspond à l'équation différentielle du second ordre suivante :

$$m\ddot{x} + kx = 0. \tag{1}$$

Q3. La solution de cette équation prend la forme générale suivante

$$x(t) = A_0 \sin(\omega_0 t) + B_0 \cos(\omega_0 t) \tag{2}$$

avec A_0 et B_0 deux coefficients réels. Exprimer ω_0 en fonction des grandeurs caractéristiques du système et donner sa signification physique. De plus, en remarquant qu'à $t = 0$: $x(t) = x_0$ et $\dot{x}(t) = \dot{x}_0$, déterminer les expressions de A_0 et de B_0 en fonction de x_0, $\dot{x}_0$ et de ω_0.

Q4. On cherche à reformuler l'équation précédente sous une forme plus compacte du type :

$$x(t) = R_0 \cos(\omega_0 t - \phi_0). \tag{3}$$

Donner les expressions de R_0 et de ϕ_0 en fonction de x_0, $\dot{x}_0$ et de ω_0.

Q5. Représenter qualitativement $x(t)$ en fonction de t et indiquer sur le tracé R_0, x_0 et $2\pi/\omega_0$.

Q6. En utilisant les expressions des énergies cinétique $K(t)$ et potentielle $U(t)$ du système, montrer que l'énergie totale $E(t)$ du système est alors :

$$E(t) = \frac{kR_0^2}{2}. \tag{4}$$

Justifier le résultat obtenu.

Q7. Représenter qualitativement $E(t)$, $K(t)$ et $U(t)$ en fonction de t.

I.2 - Ressort avec amortissement et sans excitation

Q8. La force de frottement que l'amortisseur exerce sur la masse est considérée comme linéaire, c'est-à-dire proportionnelle au vecteur vitesse $\mathbf{v}$ de celle-ci : $\mathbf{F_d} = -\gamma\,\mathbf{v}$, avec γ constante d'amortissement (> 0). En considérant une projection sur l'axe Ox, démontrer que la position de la masse en fonction du temps suit l'équation du mouvement ci-après

$$\ddot{x} + 2\zeta\omega_0\dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \tag{5}$$

avec ω_0 défini en question **Q3** et ζ à exprimer en fonction de γ, k et m.

Q9. Dans le cas où $\zeta < 1$, $x(t)$ prend la forme suivante :

$$x(t) = e^{-\zeta\omega_0 t}\left(A_\mathrm{d}\cos(\omega_\mathrm{d}t) + B_\mathrm{d}\sin(\omega_\mathrm{d}t)\right). \tag{6}$$

Déterminer les deux coefficients réels A_d et B_d en fonction de x_0, $\dot{x}_0$, ζ, ω_0 et $\omega_\mathrm{d} = \omega_0 \cdot \sqrt{1-\zeta^2}$. On utilisera pour cela les mêmes conditions initiales que celles utilisées en question **Q3**.

Q10. Montrer alors que l'on peut obtenir une forme du type

$$x(t) = R_\mathrm{d} e^{-\zeta\omega_0 t}\cos(\omega_\mathrm{d}t - \phi_\mathrm{d}) \tag{7}$$

avec R_d et ϕ_d à préciser.

Q11. Représenter qualitativement $x(t)$ en fonction de t et indiquer sur le tracé $R_\mathrm{d}e^{-\zeta\omega_0 t}$, x_0 et $2\pi/\omega_\mathrm{d}$.

Q12. Donner l'expression de $E(t)$ et commenter les cas où $\zeta = 0$ et $\zeta = 1$.

Q13. Montrer de façon simple que E est une fonction décroissante de t. quoi cela est-il dû ?

Q14. On envisage deux temps successifs t_1 et t_2 pour lesquels les déplacements sont x_1 et x_2, tels que $t_2 > t_1$ et $t_2 - t_1 = \tau_\mathrm{d}$, avec τ_d : période des oscillations amorties. En utilisant l'équation (7) et en considérant que $\zeta \ll 1$, montrer que :

$$\ln(x_1/x_2) \approx 2\pi\zeta. \tag{8}$$

Q15. Le relevé du déplacement horizontal de la plateforme en fonction du temps est représenté en **figure 2**.
En utilisant les deux points qui sont indiqués sur la figure, déterminer k, ζ et γ.
Comment ce tracé serait modifié en fonction de la valeur de ζ ?

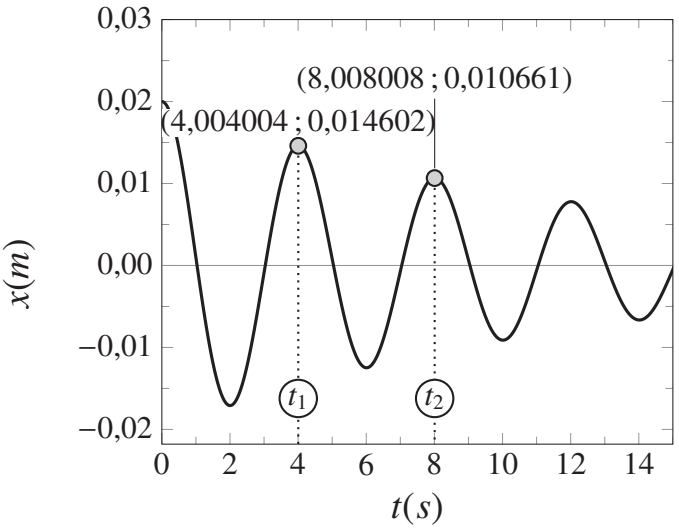


Figure 2 – Relevé du déplacement horizontal x (en m) de la plateforme de masse $m = 110$ tonnes en fonction du temps t (en s). Les deux temps t_1 et t_2 mentionnés en question **Q14** sont indiqués

I.3 - Ressort avec amortissement et avec excitation

On envisage enfin le cas où le système est soumis à la fois aux effets d'amortissement et d'excitation.

On se limite ici à la réponse à une excitation harmonique sinusoïdale de fréquence ω produite par une force extérieure au système

$$\mathbf{F_{exc}}(t) = F_0 \cos(\omega t)\mathbf{e_x} \tag{9}$$

avec $\mathbf{e_x}$ vecteur unitaire sur l'axe Ox et on se place dans le cas traité précédemment pour l'étude de l'amortisseur, c'est-à-dire $\zeta < 1$ (**I.2**).

On admet de plus dans ce qui suit que la réponse du système dans le cas où amortisseur et excitation sont pris en compte peut s'écrire comme somme de la solution donnée par l'équation (6) et de la contribution due à l'excitation :

$$x_{\text{exc}}(t) = X \cos(\omega t - \phi). \tag{10}$$

Q16. Montrer que l'équation différentielle caractérisant le système devient alors :

$$\ddot{x} + 2\zeta\omega_0\dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{F_0}{m}\cos(\omega t). \tag{11}$$

Q17. En utilisant l'équation (10) et en privilégiant une représentation complexe, vérifier que :

$$\begin{cases} X = \dfrac{F_0}{m} \cdot \dfrac{1}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\zeta\omega_0\omega)^2}} \\ \tan\phi = \dfrac{2\zeta\omega_0\omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \end{cases} . \tag{12}$$

Q18. Exprimer la grandeur $M = \dfrac{X}{F_0/k}$ en fonction de $r = \omega/\omega_0$ et expliciter le sens physique de M.

Q19. Trouver la condition sur r puis sur ω pour laquelle M est maximale.

Q20. Si l'on considère une période moyenne des vagues en mer de 8 s, que peut-on conclure sur le mouvement de la plateforme ?

Partie II - Modélisation : codage

On souhaite maintenant obtenir $x(t)$ et $E(t)$ de façon numérique et comparer les résultats obtenus à ceux fournis par les solutions analytiques précédentes pour $x(t)$. On rappelle que $x(t)$ et $E(t)$ représentent respectivement la position de la masse et l'énergie mécanique totale en fonction du temps.

Pour cela, le temps est discrétisé en N points $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \ldots, (N-1)\Delta t$ avec un pas de temps constant Δt. Les $N-1$ pas sont effectués pendant la simulation de durée totale $t_{\max}$. On note respectivement x_n, v_n, a_n, E_n et F_n les valeurs de $x(t)$, $\dot{x}(t)$, $\ddot{x}(t)$, $E(t)$ et $F_{exc}(t)$ à $t = n\Delta t$.

chaque pas, les équations du mouvement reliant x_{n+1} et v_{n+1} à x_n et v_n sont utilisées afin d'obtenir les valeurs de x, v et E. Les conditions initiales x_0 et v_0 sont connues et permettent de démarrer le processus d'intégration numérique. Deux algorithmes distincts (Euler et Leapfrog) vont être utilisés dans la suite.

Pour l'écriture du code, on se place dans le cas le plus général, c'est-à-dire avec amortissement et excitation harmonique externe. Les variables et tableaux suivants sont notamment choisis :

`N`	nombre de points sur l'axe des temps utilisés pendant toute la simulation
`t[]`	tableau des temps (s), de dimension N
`x[]`	tableau des positions (m), de dimension N
`v[]`	tableau des vitesses (m.s^{-1}), de dimension N
`E[]`	tableau des énergies totales (J), de dimension N
`F[]`	tableau des forces d'excitation (N), de dimension N
`dt`	pas de temps (s)
`tmax`	temps total de la simulation (s)
`k`	constante de raideur du ressort ($N.m^{-1}$)
`m`	masse du système (kg)
`om0`	ω_0 (s^{-1})
`zeta`	ζ (sans unité)

Tableau 1 – Principaux tableaux et principales variables utilisés pour la résolution numérique

On rappelle qu'un aide-mémoire sur `numpy` est fourni en **Annexe**, page 10.

Q21. Écrire les lignes de code permettant de définir l'entier N. On suppose $t_{\max}$ et Δt connus et fixés par l'utilisateur en début de code.

Q22. Écrire alors l'instruction permettant de définir le tableau `t` qui contient toutes les valeurs de t telles que : $0 \leq t \leq t_{\max}$. On rappelle que le temps est discrétisé en N points $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \ldots, (N-1)\Delta t$ avec un pas de temps constant Δt et que $N-1$ pas sont effectués.

Q23. En effectuant des développements de Taylor de x et v tronqués à l'ordre 1, on obtient l'algorithme d'Euler, où x et v sont évalués au même temps t selon le schéma donné **figure 3**, page 7 :

$$\begin{cases} x_{n+1} \approx x_n + v_n \cdot \Delta t \\ v_{n+1} \approx v_n + a_n \cdot \Delta t \end{cases} . \tag{13}$$

Donner les expressions de x_{n+1} et v_{n+1} en fonction de x_n, v_n et F_n.

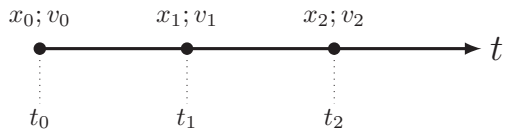


Figure 3 – Discrétisation en temps utilisée dans le cas de l'algorithme d'Euler. Les conditions initiales correspondent à $(x_0; v_0)$

Q24. Écrire la boucle en `i` permettant d'obtenir toutes les valeurs de `x[i+1]`, `v[i+1]` et `E[i+1]` où `i` correspond à un point sur l'axe des temps. On précisera les variables éventuellement introduites en supposant qu'elles ont été définies dans le code.

Q25. Dans l'algorithme de Leapfrog, les x sont évalués aux temps entiers, c'est-à-dire à $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \ldots, (N-1)\Delta t$, alors que les v sont évalués à $t = -\Delta t/2, \Delta t/2, 3\Delta t/2, \ldots, (N-1)\Delta t - \Delta t/2$ selon le schéma donné **figure 4**. Ainsi, pour cet algorithme, `x[i]` représente de façon approchée la position à l'instant $i\Delta t$, et `v[i]` représente de façon approchée la vitesse à l'instant $(i-1/2)\Delta t$.

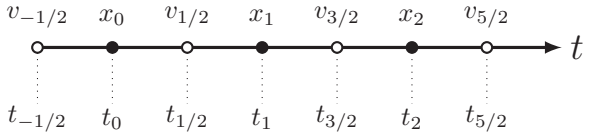


Figure 4 – Discrétisation en temps utilisée dans le cas de l'algorithme de Leapfrog. Les conditions initiales correspondent à $(x_0; v_{-1/2})$

Pour le système considéré, montrer alors que x_{n+1} et $v_{n+1/2}$ prennent les formes suivantes :

$$\begin{cases} x_{n+1} \approx x_n + v_{n+1/2} \cdot \Delta t \\ v_{n+1/2} \approx -\dfrac{\omega_0^2 \Delta t}{1+\zeta\omega_0\Delta t} x_n + \dfrac{1-\zeta\omega_0\Delta t}{1+\zeta\omega_0\Delta t} v_{n-1/2} + \dfrac{F_n}{m(1+\zeta\omega_0\Delta t)}\Delta t. \end{cases} \tag{14}$$

Q26. Quel problème pose l'évaluation de `E[i+1]` ?
Dans la suite, on préfèrera ainsi évaluer `E[i]`.

Q27. Comment obtenir `E[i]` à partir de `x[i]` et `v[i]` ?

Q28. En introduisant deux variables `fac1` et `fac2` correspondant respectivement à $1 - \zeta\omega_0\Delta t$ et $\dfrac{1}{1+\zeta\omega_0\Delta t}$, écrire la boucle en `i` permettant d'obtenir toutes les valeurs de `x[i+1]` et `v[i+1]`.

Q29. Compléter la boucle de la question **Q28** avec le calcul du terme d'énergie totale.

Q30. Écrire une fonction `integration(F)` qui prend en argument le tableau `F[]` des forces d'excitation et renvoie les tableaux `x[]`, `v[]` et `E[]` complétés.
On introduira pour cela une variable `algo` supposée définie en global, permettant d'appliquer l'algorithme d'Euler si `algo==0` ou de Leapfrog si `algo==1`.
On considèrera également le cas $t = 0$.

Q31. Écrire une fonction `force(f,t,w)` qui prend en argument F_0, t, et ω de l'équation (9) et retourne la valeur de $\mathbf{F_{exc}}$ pour un temps `t` donné.

Q32. Écrire une fonction `force_exc()` qui complète et retourne le tableau `F[]` des forces d'excitation en fonction du booléen `exc` défini globalement valant `True` si une excitation est appliquée au système, `False` sinon.
Dans le cas où `exc==True`, on appellera la fonction `force` définie précédemment en question **Q31**. Dans le cas où `exc==False`, on prendra alors : `F[i]=0`, $\forall i$.

Q33. Donner alors les lignes de code permettant de réaliser la simulation numérique à partir des fonctions précédentes.

Q34. On souhaite désormais estimer la qualité des résultats numériques par rapport aux données analytiques de référence. Écrire une fonction `ema(d,dref)` qui calcule l'erreur maximale absolue entre un jeu de données numériques `dn` et analytiques `da`. On supposera que les tableaux `dn` et `da` sont de même dimension n.

Q35. Pour le problème particulier qui nous intéresse, si l'on souhaite appliquer cette fonction aux tableaux contenant les données numériques et analytiques pour E, quel est l'indice maximal de ces tableaux à considérer ?
Réécrire alors la fonction `ema` pour qu'elle soit applicable aux deux algorithmes considérés.

Partie III - Modélisation : analyse des résultats d'un cas simple

Toutes les données numériques suivantes ont été obtenues avec : $t_{max} = 10$ s, $m = 110$ tonnes, $x_0 = 0{,}02$ m et $v_0 = 0$ m.s^{-1} et la valeur de k obtenue en question **Q15**, dans le cas d'un système sans amortissement et sans excitation externe. Le **tableau 2** en page 9 présente les erreurs maximales absolues (EMA) calculées avec la fonction `ema` des énergies obtenues numériquement par rapport à celles obtenues analytiquement, pour les deux algorithmes envisagés et divers pas de temps.

Q36. Justifier l'ordre de grandeur des Δt considérés du **tableau 2** pour la discrétisation en temps utilisée.

Q37. En utilisant les données numériques du **tableau 2** donner l'ordre approximatif de l'erreur globale sur E des deux algorithmes considérés. Justifier votre réponse.

Q38. Dans le cas simple de l'algorithme d'Euler, comment augmente E lorsqu'on passe de t_n à t_{n+1} ?
Relier alors ce résultat aux données du **tableau 2**.

Δt (s)	EMA	
	Euler	Leapfrog
0,050	128,0203160	0,0837314
0,010	15,1373529	0,0033484
0,005	7,1159053	0,0008371
0,001	1,3556230	0,0000335

Tableau 2 – EMA obtenues pour E (en J) par rapport à la valeur analytique, pour différents pas de temps Δt, dans le cas où il n'y a pas d'amortissement et d'excitation externe

Une propriété importante que devrait vérifier un algorithme d'intégration est la réversibilité dans le temps : en partant des positions et vitesses d'un temps $t + \Delta t$ et en appliquant un pas de temps $-\Delta t$, un algorithme réversible en temps devrait redonner les positions et vitesses du temps t.
En pratique, en partant d'un couple $(x_n; v_n)$, on applique donc tout d'abord un pas Δt pour déterminer $(x_{n+1}; v_{n+1})$, puis on applique un pas $-\Delta t$ afin d'obtenir $(\bar{x_n}; \bar{v_n})$. Si $(\bar{x_n}; \bar{v_n}) = (x_n; v_n)$, alors l'algorithme est dit réversible en temps.

Q39. Pourquoi s'agit-il d'une propriété importante à vérifier pour le problème considéré ?

Q40. Donner l'expression de $\bar{x_n}$ en fonction de x_n pour les deux algorithmes considérés. Peut-on déjà conclure sur la réversibilité en temps de chacun de ces algorithmes ?

Q41. Donner alors l'expression de $\bar{v_n}$ en fonction de v_n lorsque nécessaire et conclure sur la réversibilité en temps.

Q42. On s'intéresse enfin à une simulation de plus grande durée ($t_{max} = 60$ s). La **figure 5** donne l'évolution de l'erreur absolue sur x entre données numériques et analytiques ($|e_x|$) pour les deux algorithmes choisis. Que peut-on mettre en évidence sur cette figure ?

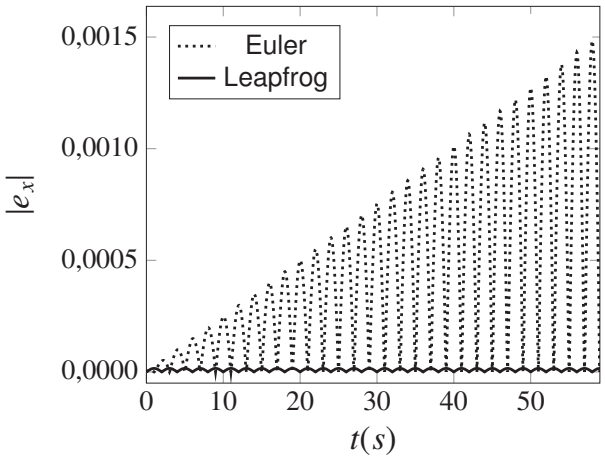


Figure 5 – Erreurs absolues calculées sur la position de la masse à $\Delta t = 0{,}001$ s, pour les deux algorithmes considérés

Q43. Conclure sur les avantages et les inconvénients de chacun de ces algorithmes et sur leur adéquation pour le traitement numérique de ce problème dans le cas où on envisage une simulation de plusieurs heures.

ANNEXE

Aide-mémoire sur nu py

Les bibliothèques sont importées de la façon suivante :

```
from math import *
import numpy as np
```

La création d'un tableau numpy `tab` à une dimension possédant *n* éléments, tous initialisés à 0, est réalisée à l'aide de l'instruction :

```
>>> tab=np.zeros(n)
```

Celle d'un tableau numpy `tab` à une dimension possédant *n* éléments, uniformément répartis entre deux valeurs `debut` et `fin`, se fait avec :

```
>>> debut=0; fin=10; n=5
>>> tab=np.linspace(debut,fin,n)
>>> print tab
array([  0.   2.5  5.   7.5  10. ])
```

L'accès à un élément du tableau `tab` (en lecture ou en écriture) se fait par `tab[i]`, la numérotation des indices se faisant à partir de 0 :

```
>>> tab=np.zeros(4)
[ 0.  0.  0.  0. ]
>>> tab[1]=2; tab[2]=6; print tab
[ 0.  2.  6.  0. ]
```

La sélection de l'ensemble des `j` premiers éléments du tableau `tab` est possible avec :

```
>>> print tab[:3]
[ 0.  2.  6. ]
```

Le maximum des éléments d'un tableau `tab` s'obtient avec :

```
>>> np.max(tab)
```

FIN

PC

CONCOURS COMMUN INP

RAPPORT DE L'ÉPREUVE ÉCRITE DE MODÉLISATION

1/ REMARQUES GÉNÉRALES

1.1- PRÉSENTATION DU SUJET

Le sujet portait sur la modélisation du mouvement d'une plateforme en mer, que l'on assimilait à un oscillateur harmonique unidimensionnel soumis à une force excitatrice. Il comprenait trois parties partiellement indépendantes.

La première partie, relative à la résolution analytique du problème, était proche du cours de 1re année et permettait d'extraire les paramètres physiques nécessaires à la construction du modèle. Elle se décomposait en trois sous-parties qui introduisaient progressivement les influences des forces exercées sur la masse de la plateforme par le support de la plateforme, par l'eau environnante et par les vagues frappant périodiquement la masse. Ces trois cas correspondaient respectivement aux cas de l'oscillateur non amorti et sans excitation externe, au cas amorti sans excitation et enfin à celui du système amorti en régime forcé. La seconde partie portait sur la résolution numérique des équations du modèle, à l'aide de deux algorithmes distincts : Euler et Leapfrog, ce dernier utilisant un décalage d'un demi-pas entre position et vitesse. Cette partie visait au codage de ces algorithmes mais également à leurs mises en équation. La troisième et dernière partie proposait une comparaison des résultats numériques avec ceux d'une solution analytique et une comparaison entre deux algorithmes étudiés dans un cas simple, sans amortissement, ni excitation.

Le sujet faisait appel à des notions transversales en chimie, en physique, en mathématiques et en informatique. Les trois parties étaient rédigées de façon à éviter de bloquer un candidat sur une partie donnée.

La longueur du sujet semble avoir été adéquate, l'essentiel du sujet ayant été traité ou au moins abordé par la majorité des candidats. Les questions avaient un niveau de difficulté varié, ce qui a permis de classer les candidats notamment sur les deuxième et troisième parties qui ont clairement posé le plus de difficultés.

Un aide-mémoire sur numpy était fourni en annexe.

1.2- SUR LA PRESTATION DES CANDIDATS

La première partie a été abordée dans sa quasi-totalité par l'ensemble des candidats mais a été plus ou moins bien traitée, les questions plus calculatoires mettant en difficulté beaucoup de candidats. En particulier, la mise sous forme compacte des solutions apparaît comme non maîtrisée par bon nombre d'entre eux, soulignant un manque certain d'utilisation d'outils mathématiques simples comme des fonctions trigonométriques. La représentation complexe pour la solution générale ne semble pas non plus maîtrisée par de nombreux candidats. Parmi les représentations graphiques demandées, certains candidats ont fourni des représentations complètement fantaisistes, ce qui témoigne d'un manque de recul

et de compréhension, à la fois sur les fonctions mathématiques de base ainsi que sur la physique du problème, même pour des systèmes classiques tels que l'oscillateur harmonique.
Globalement, on constate un manque de rigueur dans les réponses, avec une certaine tendance à essayer de retrouver les expressions demandées dans l'énoncé par tous les moyens possibles. Un nombre trop important de candidats n'a en particulier pas traité convenablement certaines questions « de cours », ce qui semble indiquer une baisse de niveau de compréhension physique et mathématique des candidats sur des aspects élémentaires. En outre, un certain nombre de copies ont pu mettre en évidence un apprentissage « par cœur » du cours, sans réel raisonnement théorique construit.

La seconde partie, qui portait sur l'algorithmique et le codage n'a été abordée que de façon partielle, voire même complètement ignorée par certains candidats. Les questions délicates (Q25-Q27) ont souvent été ignorées. Celles portant sur des aspects algorithmiques indépendants de la compréhension physique ont par contre souvent été traitées (Q21-22, Q28, Q30-Q34). Une partie des candidats n'ont pas fait le lien avec la partie physique précédente et n'ont pas eu l'idée de reprendre les expressions établies en première partie. On peut noter une faible maîtrise des types (entier, flottant…), ainsi qu'une tendance assez générale à ne pas suivre les consignes données dans l'énoncé : création de fonctions au lieu de boucles, utilisation de listes au lieu de tableaux, alors qu'une annexe détaillée sur ces derniers était fournie… La syntaxe Python est parfois très approximative, certains candidats abusant des « raccourcis » de notation propres à Python de façon incorrecte, conduisant ainsi à de nombreuses erreurs.
Quelques commentaires généraux :

- les *range* sont souvent mal utilisés : arguments de type flottant, problème de borne supérieure,
- grosse confusion entre fonction et boucle pour une majorité de candidats,
- la construction de boucles pose problème à un grand nombre de candidats : certaines boucles tournent sans incrémenter quoi que ce soit, les bornes ne sont pas correctes, la syntaxe n'est pas toujours respectée,
- grosse confusion entre *print* et *return* pour pas mal de candidats,
- pour certains candidats, *print* semble être une solution universelle permettant de tout faire (retour de fonction, affectation d'un résultat ou d'une variable à un élément de tableau ou d'une liste…),
- les listes ou array sont très rarement initialisés,
- une liste et un array n'ont pas la même syntaxe,
- les commandes du module math n'agissent pas sur tous les éléments d'une liste.

La dernière partie a été, de loin, la moins bien traitée, avec beaucoup de hors sujet. De nombreux candidats n'ont pas fait le lien avec la partie précédente et se sont ici contentés de grappiller des points sans réelle réflexion. Des notions élémentaires telles que les choix du pas de temps de simulation par rapport au temps caractéristique du système semblent souvent complètement inconnues. Le vocabulaire choisi pour analyser les résultats est également assez approximatif. Très peu de candidats ont su dépasser la simple lecture graphique des erreurs absolues comparées des deux algorithmes considérés.

Enfin, sur la forme, il est demandé aux candidats de respecter les consignes données sur les couleurs et types de stylos autorisés pour la rédaction de leurs copies. En effet, ces dernières étant désormais scannées pour la correction, certaines couleurs sont apparues très faiblement, rendant certaines parties des copies difficilement lisibles. Pour la même raison, il est également demandé d'éviter de surligner les résultats. Enfin, aérer la copie, encadrer ou souligner les résultats et faire des phrases plutôt que d'enchainer des équations sans aucun commentaire est toujours apprécié. Certaines copies étaient très brouillonnes : l'utilisation d'une règle pour barrer proprement un résultat faux serait également apprécié.

2/ REMARQUES SPÉCIFIQUES

Q1, Q2, Q8, Q16 : généralement bien traitées, mis à part des erreurs de signes ou de normalisation. Certaines copies manquaient de rigueur, en omettant de mentionner système, référentiel, base, bilan des forces… le fait que les forces d'excitation et d'amortissement soient nulles dans les parties concernées n'est parfois pas mentionné.

Q3+Q9 : généralement bien traitées. Beaucoup de candidats ont perdu du temps à redémontrer la forme des solutions. Les erreurs portaient ici principalement sur le calcul de la dérivée.

Q4+Q10 : pas mal d'erreurs dans les formules de trigonométrie de base. Des difficultés pour la détermination de R_0, moins pour celle de ϕ_0. Il y a aussi les cas assez nombreux où R_0 est exprimé avec un arctan(cos…), sans simplification.

Q5 : dans certaines copies il n'y a aucune distinction entre x_0 et R_0. Certains candidats font ici osciller la plateforme autour de x_0 (au lieu de 0).

Q6 : de façon surprenante, beaucoup de candidats ont été en difficulté sur cette question, avec une non connaissance de l'énergie potentielle de rappel élastique ou de l'énergie cinétique, faisant parfois intervenir l'énergie potentielle de pesanteur. Certains candidats choisissent une valeur particulière sans jamais mentionner qu'ils considèrent l'énergie comme constante. La conservation de l'énergie est cependant très souvent citée pour les candidats n'ayant pas obtenu l'expression demandée correctement. Forte tendance ici à vouloir démontrer la relation donnée en écrivant parfois n'importe quoi.

Q7 : les courbes sont très souvent représentées, mais sont parfois très surprenantes : déphasage entre U(t) et K(t), énergies cinétique et potentielle négatives ou encore $\boldsymbol{E(t) \neq U(t) + K(t)}$. Certains candidats ont choisi de faire un graphe distinct pour chacune des trois fonctions, ce qui n'est pas l'idéal dans ce cas.

Q11 : les enveloppes mettant en évidence la décroissance exponentielle sont parfois absentes, mais en général question correctement traitée.

Q12 : beaucoup de candidats ont rencontré des difficultés sur cette question : erreurs dans les dérivées, pas d'élévation au carré pour certains, utilisation de l'expression de Q9 pour d'autres ou encore énergie considérée comme constante.
Pour la plupart des candidats, le cas $\xi = 0$ est traité, mais $\xi = 1$ pose plus de problèmes. Peu de mention des trois régimes physiques.

Q13 : les frottements sont mentionnés. La dérivée de l'énergie est rarement réalisée correctement, tout comme la mention ou encore l'utilisation du théorème énergétique.

Q14 : beaucoup d'approximations sur cette question : le rapport des cosinus disparaît souvent sans justification, ou en précisant qu'il est petit devant 1. ω_d est parfois assimilé à ω_0 sans justification. Le résultat est souvent obtenu en collant avec l'énoncé mais sans démonstration claire.

Q15 : les applications numériques ont posé problème : unités fausses, erreurs de calcul… La discussion demandée est rarement effectuée et toujours superficielle.

Q17 : beaucoup de difficulté pour le passage aux complexes. Question non traitée par pas mal de candidats. Beaucoup confondent cependant module et argument et parties réelle et imaginaire au moment de finaliser le calcul.

Q18 : question souvent abordée mais non aboutie. L'interprétation physique est souvent absente et beaucoup confondent M avec le facteur de qualité ou avec une pulsation.

Q19 : la grande majorité des candidats a cherché la valeur qui annulait le dénominateur. Pour ceux ayant envisagé la dérivée première, les calculs sont bien souvent laborieux et faux. Extrêmement peu de candidats ont envisagé la dérivée seconde pour vérifier qu'il s'agissait bien d'un maximum.

Q20 : question peu abordée, avec des réponses souvent sans lien avec les questions précédentes.

Q21 : N est peu souvent forcé à être un entier. L'ajout du 1 est très souvent oublié.

Q22 : beaucoup ont choisi d'utiliser une boucle, avec plus ou moins de succès (erreurs de bornes, d'indices…). Pour ceux qui ont utilisé *linspace* (fournie dans l'annexe), il y a parfois confusion entre Δt, tmax et N, ou encore erreur dans la taille du tableau.

Q23 : certains candidats n'ont pas fait le lien avec la première partie et n'ont donc pas utilisé l'équation du mouvement précédente. L'expression de x_{n+1} a parfois été difficile, en souhaitant remplacer v_n.

Q24 : certains n'ont pas compris que E[i+1] se calculait à partir de x[i+1] et v[i+1]. F[] est parfois considéré comme constant. De façon générale ici, des erreurs d'indice, de syntaxe, en particulier dans le *for* et le *range* avec des arguments de *range* non entiers, ou encore une utilisation de l'accélération sans définition préalable.

Q25 : question peu abordée. Quelques candidats s'en sont très bien sortis mais il y a une forte tendance à vouloir démontrer les relations données en écrivant parfois n'importe quoi.

Q26-Q27 : la plupart des candidats ont compris qu'il fallait évaluer vitesse et position au même temps mais n'ont pas donné une expression correcte pour l'énergie. Pour une bonne partie des candidats ayant correctement traité Q26, l'expression de Q24 est reprise pour répondre à Q27 en contradiction totale avec ce qu'ils viennent d'écrire.

Q28-Q29 : beaucoup d'erreurs d'indices ou de fin de boucle. La nécessité du calcul de v avant x est souvent oubliée. L'utilisation de la syntaxe x,v=… est ici plus dangereuse qu'ailleurs : on ne peut pas utiliser les listes avec des indices non entiers.

Q30-Q32 : généralement bien traitées, sauf pour certains candidats qui ne maîtrisent pas les structures de type if/else, qui oublient l'initialisation ou encore qui confondent variables globales et locales.

Q33 : question souvent mal comprise. Certains candidats ont essayé ici de faire des tracés de fonctions. Quand la question est comprise, il n'y a souvent ni déclarations ni déterminations des variables utilisées ou encore une mauvaise utilisation du retour des fonctions dans des listes adaptées.

Q34 : question généralement bien traitée, sauf pour certains candidats qui calculent une moyenne des erreurs, qui oublient l'initialisation ou qui ne définissent pas la variable n avant de l'utiliser.

Q35 : question souvent mal traitée, dû aux problèmes d'indices.

Q36 : les réponses ont été souvent fausses ou très imprécises : « Δt doit être petit », parfois devant t_{max}, souvent devant rien du tout, peu souvent devant la période du système. Un grand nombre de points est aussi très souvent mentionné comme preuve de la qualité d'une simulation.

Q37-Q38 : questions non comprises. Les valeurs du tableau ont servi à calculer beaucoup de choses mais rien de ce qui était nécessaire. La notion « d'ordre » ne semble pas comprise : confusion généralisée entre l'ordre du code en Δt ou Δt^2 avec l'ordre de grandeur de l'erreur. Aucun ou peu de candidat n'a eu l'idée d'étudier le rapport $\frac{E_{n+1}}{E_n}$.

Q39 : la conservation de l'énergie ou encore la réversibilité de l'équation différentielle sont très peu souvent mentionnées. La périodicité est souvent citée comme justification ou encore celle « d'oscillations ». La question est souvent paraphrasée pour répondre… à la question.

Q40-Q41 : questions souvent non abordées. Beaucoup d'erreurs d'indices, conduisant à des conclusions complètement fausses. Un algorithme présenté comme irréversible en Q40 est souvent étudié en Q41 contre toute logique.

Q42 : souvent traitée mais commentaires très limités du type : « l'erreur augmente avec Euler, pas avec Leapfrog ». Beaucoup de confusion entre erreur, erreur absolue, erreur relative…

Q43 : la réponse à cette question est à chaque fois ou presque une copie de la précédente. Un tableau avantages/inconvénients allant au-delà de l'évolution de l'erreur aurait pu être utilisé.

2/ CONCLUSION

Les corrections de copies révèlent de sérieuses lacunes pour beaucoup de candidats sur l'utilisation d'outils mathématiques élémentaires ou sur la compréhension de notions physiques simples. Ceci affecte bien entendu la construction des programmes qui en découlent, dans lesquels une bonne compréhension des méthodes numériques employées, du traitement numérique ainsi que de la logique de programmation à appliquer est indispensable.
Il est de plus très dommage de constater que beaucoup de candidats butent sur des problèmes de base de programmation, comme les notions de boucles ou encore l'initialisation de variables ou de tableaux. Il faut encourager les élèves de CPGE à plus s'impliquer en programmation, en particulier à adopter une plus grande rigueur dans la compréhension et l'utilisation des concepts de base en programmation.

CONCOURS COMMUNS POLYTECHNIQUES

ÉPREUVE SPÉCIFIQUE - FILIÈRE PC

MODÉLISATION DE SYSTÈMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

Jeudi 3 mai : 8 h - 12 h

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.

Les calculatrices sont autorisées

Le sujet est composé de deux parties (pages 1 à 14)
et d'une annexe (pages 15 à 18).

PROBLÈME

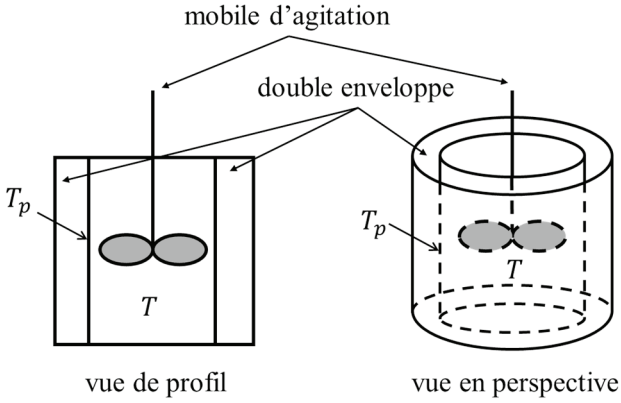
Étude d'une réaction exothermique : stabilité thermique en réacteur fermé

Présentation du problème

De nombreux procédés industriels font intervenir des réacteurs fermés pour la synthèse de molécules à haute valeur ajoutée. Pour optimiser le rendement de la synthèse, il est nécessaire de bien comprendre l'influence des paramètres physiques (comme la température de la réaction,…) sur la marche du réacteur. La maîtrise des échanges thermiques est cruciale dans le cas des réactions exothermiques car la chaleur dégagée par la réaction provoque une augmentation de la température du mélange réactionnel. Selon les conditions opératoires, cette augmentation de température peut entraîner un emballement thermique du réacteur et conduire à des dégâts irréversibles.

L'accident de Seveso le 10 juillet 1976 illustre les problèmes liés à l'emballement thermique des réacteurs. Il s'agissait d'un procédé de production de 2,4,5-trichloro-phénol à partir de 1,2,4,5-tétrachloro-benzène et de soude dans un solvant (l'éthylène glycol) à une température voisine de 150 °C et à pression atmosphérique en réacteur fermé. La mauvaise maîtrise de la température de la réaction a entraîné le déroulement de réactions secondaires conduisant d'une part à une augmentation de la température et de la pression et d'autre part à la formation de produits secondaires toxiques : les dioxines. La rupture de la soupape de sécurité due à l'augmentation de la pression a conduit au rejet de dioxines dans l'atmosphère.

L'étude de l'influence des paramètres physiques sur la marche d'un réacteur se fait la plupart du temps à l'échelle du laboratoire dans des dispositifs de dimensions beaucoup plus petites que celles des réacteurs utilisés dans les procédés industriels. La particularité du réacteur utilisé pour la présente étude est qu'il possède une géométrie cylindrique et qu'il est équipé d'une double enveloppe externe dans laquelle circule un fluide permettant de refroidir la paroi du réacteur et d'empêcher un emballement thermique (**figure 1**). L'emballement thermique survient lorsque la chaleur dégagée par la réaction excède la capacité du réacteur à évacuer l'énergie.



T et T_p représentent respectivement la température dans le réacteur et la température à la paroi (côté refroidissement).

Figure 1 – Schéma simplifié d'un réacteur fermé parfaitement agité avec une double enveloppe pour son refroidissement

Pour caractériser le comportement thermique du réacteur, on commence la plupart du temps par une étude en l'absence de réaction. Cette étude permet dans un premier temps de caractériser la capacité du réacteur à évacuer l'énergie avec la détermination du coefficient de transfert thermique à la paroi. Dans un deuxième temps, on met en œuvre dans ce réacteur une réaction exothermique $R \rightarrow produits$. Ces études permettent de déterminer les valeurs de paramètres clefs intervenant dans les équations décrivant le comportement du réacteur (modèle théorique). L'utilisation de ce modèle théorique permet de prédire la stabilité thermique du réacteur. L'établissement du modèle théorique repose sur l'écriture de bilans de matière et de chaleur. Une fois que l'influence des conditions physiques sur la marche du réacteur est déterminée, on peut en déduire les conditions de stabilité du réacteur industriel.

Ce sujet est constitué de deux parties. La première partie porte sur la modélisation du réacteur fermé parfaitement agité avec double enveloppe. Elle permet l'établissement du système d'équations différentielles régissant les variations de la conversion du réactif et de la température en fonction du temps, ainsi que la détermination de la valeur de paramètres physico-chimiques intervenant dans ces équations. La deuxième partie porte sur le traitement numérique des données expérimentales avec la détermination des paramètres d'un modèle par régression linéaire, puis la prédiction du comportement thermique du réacteur par résolution d'un système d'équations différentielles par la méthode d'Euler implicite.

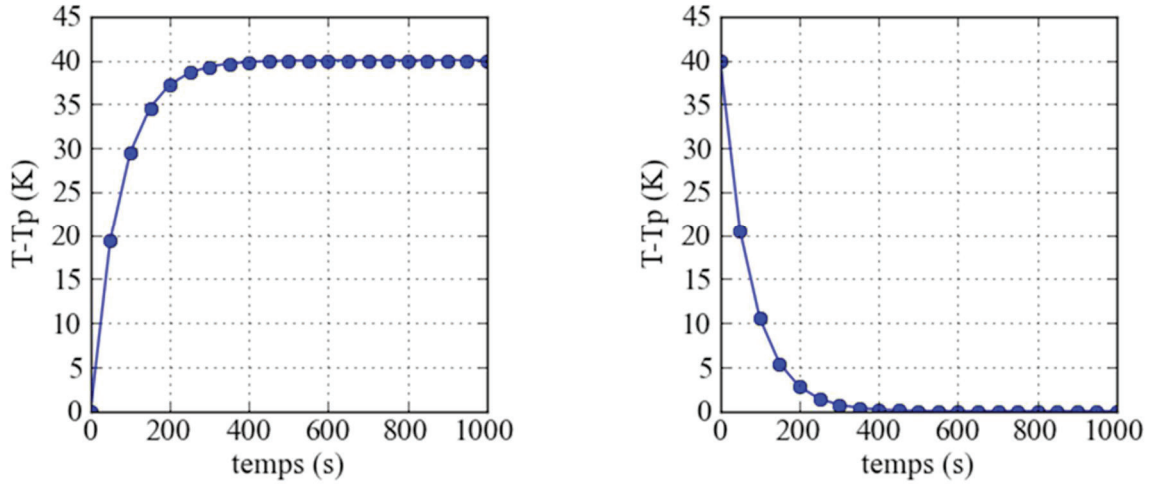
Partie I – Modélisation du réacteur fermé parfaitement agité avec double enveloppe

I.1 – Etalonnage thermique du réacteur

Dans cette partie, on souhaite caractériser les transferts de chaleur entre un liquide contenu à l'intérieur du réacteur et la paroi en l'absence de toute réaction chimique. On supposera que la capacité thermique massique et la masse volumique de ce liquide sont constantes quelle que soit la température. Pour caractériser ces transferts de chaleur, on réalise deux expériences successives avec la température de la paroi, T_p, maintenue constante dans les deux cas.

- La première expérience consiste à chauffer le liquide (initialement à une température identique à celle de la paroi) avec un dispositif annexe (une résistance chauffante) dissipant une puissance thermique P_{th} de 96,0 W. On constate que la température de la phase liquide augmente, puis atteint une valeur asymptotique en régime permanent (**figure 2a**).

- Après avoir atteint le régime permanent lors de la phase de chauffe, on réalise une seconde expérience en coupant le chauffage. La température du liquide décroit jusqu'à ce qu'elle tende vers la température de la paroi (**figure 2b**).



a) pendant la phase de chauffe b) pendant la phase de refroidissement

Figure 2 – Évolution de la température du liquide dans le réacteur

On exploite d'abord la courbe obtenue lors de la phase de chauffe (**figure 2a**) pour déterminer le coefficient de transfert de chaleur à la paroi, noté U (unité : $W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$). Ce coefficient rend compte des échanges de chaleur entre la phase réactionnelle et le fluide caloporteur dans la double enveloppe à travers la paroi du réacteur. Dans le cas présent, la température T_p étant la température de paroi du côté du fluide caloporteur, il s'agit d'un coefficient de transfert thermique global qui tient compte du transfert convectif côté réaction et du transfert par conduction dans la paroi qui sépare les deux fluides.

Pour obtenir la valeur de U, on commence par établir l'équation différentielle qui régit l'évolution de la température T en fonction du temps en réalisant un bilan d'énergie.

Le bilan d'énergie, conséquence directe du premier principe de la thermodynamique, appliqué au système constitué par la phase réactionnelle lors de la phase de chauffe, conduit à l'équation différentielle suivante (équation (1))

$$(\rho \times V \times Cp)\frac{dT}{dt} = P_{th} - U \times A \times (T - T_p), \quad (1)$$

où T est la température du fluide à l'intérieur du réacteur, ρ, V et C_p sont respectivement la masse volumique, le volume et la capacité thermique massique du fluide, P_{th} est la puissance thermique cédée par la résistance chauffante au milieu réactionnel, T_p est la température à la paroi, maintenue constante ($T_p = 320{,}0$ K) et A la surface latérale du réacteur sur laquelle le fluide à l'intérieur du réacteur est en contact avec la double enveloppe.

Q1. Interpréter concrètement chacun des trois termes du bilan d'énergie en précisant leur signification physique et vérifier qu'ils sont homogènes à des puissances.

Q2. Donner l'expression de $T - T_p$ en régime permanent. Il est rappelé que la température de la paroi, T_p, est maintenue constante tout au long des essais. Il est précisé que la température de la phase liquide à l'instant initial est égale à T_p.

Q3. D'après les résultats obtenus lors de la première expérience (**figure 2a**), donner la valeur de la différence de température $T - T_p$ lorsqu'on atteint le régime permanent. Calculer la valeur du coefficient de transfert de chaleur à la paroi dans les unités SI. On donne $T_p = 320{,}0$ K, $\rho = 1\,000{,}0$ kg·m^{-3}, $V = 0{,}1 \times 10^{-3}$ m^3 et $C_p = 1\,800{,}0$ J·kg^{-1}·K^{-1}, $P_{th} = 96{,}0$ W et $A = 8{,}0 \times 10^{-3}$ m^2.

Q4. On souhaite faire apparaître un temps caractéristique d'échange thermique τ_c du système. Montrer que le bilan d'énergie peut se mettre sous la forme suivante (équation (2)) :

$$\frac{dT}{dt} = s + \frac{T_p - T}{\tau_c}. \quad (2)$$

Donner les expressions de s et τ_c. Vérifier que τ_c est homogène à un temps.

On souhaite maintenant exploiter les résultats obtenus lors de la phase de refroidissement (**figure 2b**) pour confirmer la valeur du temps caractéristique d'échange thermique déterminé précédemment.

Q5. Le bilan d'énergie établi à la question **Q4** est-il modifié ? Si oui, donner la nouvelle expression de $\frac{dT}{dt}$.

Q6. Donner l'expression de $T - T_p$ en fonction du temps t par résolution de l'équation différentielle. On notera T_{max} la température initiale lors de la phase de refroidissement.

Q7. Le tracé de $ln(T - T_p)$ (avec $T - T_p$ en K) en fonction du temps t (**figure 3**) donne une droite d'équation $y = -1{,}33 \times 10^{-2} \times x + 3{,}68$ (avec x en secondes). En déduire la valeur du temps caractéristique d'échange thermique τ_c. Calculer la valeur du coefficient de transfert de chaleur à la paroi et vérifier que cette valeur correspond à celle obtenue avec la première expérience.

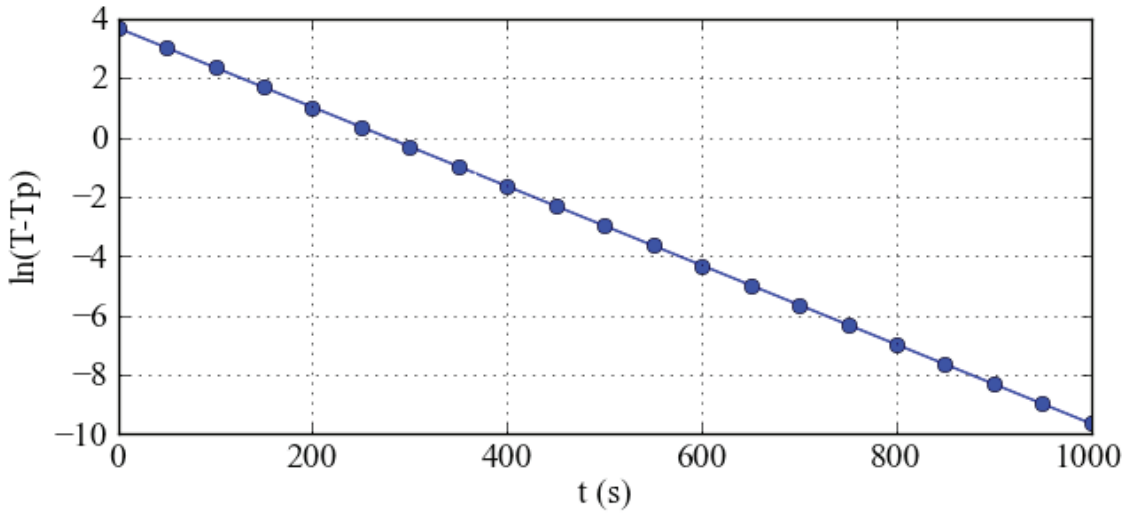


Figure 3 – Tracé de $ln(T - T_p)$ en fonction de t à l'aide des points enregistrés lors de la phase de refroidissement (**figure 2b**)

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

Dans cette sous-partie, on considère que l'on met en œuvre une réaction chimique exothermique $R \rightarrow produits$ (R est dissous dans un solvant) dans le même réacteur que celui dont on a étudié les échanges thermiques dans la sous-partie précédente. Il s'agit ici de caractériser le comportement thermique du réacteur en présence d'une réaction exothermique.

Le comportement du réacteur fermé parfaitement agité avec double enveloppe peut être représenté par un système constitué de deux équations différentielles ordinaires. La première équation différentielle ordinaire représente l'évolution temporelle de la conversion du réactif R ; la deuxième permet de caractériser l'évolution de la température de la réaction en fonction du temps.

Le réactif R étant dissout dans un solvant, on considère que le volume du mélange réactionnel V reste constant au cours du temps. On considère également que la réaction est homogène et qu'elle a lieu dans tout le volume du mélange réactionnel.

On commence par déterminer l'équation différentielle qui régit l'évolution de la conversion du réactif R en fonction du temps.

Q8. On considère que la réaction est d'ordre 1 par rapport au réactif R. Donner l'expression de la vitesse de la réaction (exprimée par unité de volume de mélange réactionnel) que l'on notera r (on notera C_R la concentration molaire du réactif R et k la constante cinétique). Préciser la dimension et l'unité de r dans le Système International.

Q9. Rappeler la loi d'Arrhenius donnant les variations de la constante de réaction en fonction de la température. On notera k_0 le facteur pré-exponentiel et E_a l'énergie d'activation. Préciser les dimensions et les unités SI de k, k_0 et E_a.

Q10. Écrire le bilan de matière sous la forme $\frac{dC_R}{dt} = f(C_R, T)$. Préciser l'expression de $f(C_R, T)$. Il est rappelé que le volume de la phase réactionnelle reste constant au cours du temps.

Q11. Dans le cas où le réacteur fonctionnerait en marche isotherme, résoudre l'équation différentielle et donner l'expression de la concentration de R en fonction du temps sous la forme $C_R = g(t)$. On notera C_R^0 la concentration initiale en R.

Q12. Pour simplifier les bilans, on introduit le taux de conversion de R, noté X_R, défini par la relation suivante : $X_R = (C_R^0 - C_R)/C_R^0$. Exprimer l'évolution de taux de conversion X_R en fonction du temps pour le cas de la marche isotherme.

Q13. Donner l'expression de l'équation différentielle qui régit l'évolution du taux de conversion X_R en fonction du temps dans le cas général (marche quelconque, c'est-à-dire non isotherme), sans chercher à la résoudre.

L'évolution de la température en fonction du temps est régie par une seconde équation différentielle obtenue en réalisant un bilan d'énergie sur le réacteur, conséquence directe du premier principe de la thermodynamique.

La réaction chimique qui se déroule dans le réacteur produit par unité de temps une variation de l'enthalpie du système réactionnel donnée par $S(t, X, T)$ (équation (3)) qui correspond à la chaleur dégagée par la réaction. Ce paramètre est appelé « terme source » dans la suite.

$$S(t, X_R, T) = -\Delta_r H^0(T) \times r(t, X_R, T) \times V, \qquad (3)$$

où V est le volume du mélange réactionnel, r est la vitesse de la réaction et $\Delta_r H^0(T)$ est l'enthalpie molaire standard de la réaction. Dans la suite, on suppose que $\Delta_r H^0(T)$ ne dépend pas de la température. On prendra $\Delta_r H^0(T) = \Delta_r H^0(T_p)$ que l'on notera $\Delta_r H^0$ pour simplifier.

Q14. Donner la dimension du terme source $S(t, X_R, T)$.

Q15. Montrer qu'un bilan enthalpique appliqué à un système que l'on précisera avec soin permet d'aboutir à la relation suivante (équation (4))

$$\frac{dT}{dt} = J\frac{dX_R}{dt} - \frac{T - T_p}{\tau_c}, \qquad (4)$$

où l'on exprimera J et τ_c en fonction de $\Delta_r H$, C_R^0, ρ, C_p, V, U et A. On admettra qu'il est légitime de négliger la contribution des réactifs, des produits et des accessoires situés à l'intérieur du réacteur au travers de leur capacités thermiques devant celle du solvant.

Q16. Donner l'expression du paramètre J ainsi que sa dimension.

Q17. Calculer la valeur du paramètre J en unité SI. On donne $\Delta_r H^0 = -360{,}0$ kJ·mol^{-1}, $\rho = 1\,000{,}0$ kg·m^{-3}, $C_p = 1\,800{,}0$ J·kg^{-1}·K^{-1} et $C_R^0 = 500{,}0$ mol·m^{-3}.

I.3 – Stabilité thermique du réacteur

Une première condition de stabilité, valable pour le cas d'une marche adiabatique, est que la température finale T_f de la réaction soit inférieure à une température maximale T_{max}, telle que $T_{max} = 1{,}25 \times T_p$.

Q18. Exprimer l'équation différentielle (équation (4)) dans le cas d'un fonctionnement adiabatique.

Q19. Déterminer alors l'expression de la température T en fonction du taux de conversion X_R, du paramètre J et de T_0 la température initiale du mélange réactionnel.

Q20. Donner l'expression de la température T_f atteinte en fin de réaction dans le cas d'une marche adiabatique sachant que $T_0 = T_p = 320{,}0$ K. Conclure quant à la stabilité du réacteur dans le cas de cette étude. Donner la signification physique du paramètre J.

Partie II – Traitement numérique des données expérimentales

Les algorithmes demandés au candidat **devront être réalisés dans le langage Python**. On supposera les bibliothèques « numpy » et « matplotlib.pyplot » chargées. Une **annexe** présentant les fonctions usuelles de Python est disponible pages 15 à 18. Les commentaires suffisants à la compréhension du programme devront être apportés et des noms de variables explicites devront être utilisés lorsque ceux-ci ne sont pas imposés.

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

Pour calculer la valeur du temps caractéristique d'échange thermique du réacteur à la question **Q7**, un modèle de régression linéaire simple a été estimé à partir des points expérimentaux enregistrés lors de la phase de refroidissement.

Le modèle de régression linéaire simple (fonction affine) est un modèle de régression d'une variable expliquée ($\ln(T - T_p)$ dans notre cas) sur une variable explicative (le temps t dans notre cas) dans lequel on fait l'hypothèse que la fonction qui relie la variable explicative à la variable expliquée est linéaire dans ses paramètres.

Soit n le nombre de points expérimentaux. Le modèle linéaire simple s'écrit de la manière suivante pour un point i ($1 \leq i \leq n$)

$$y_i = \widehat{\beta_1} \times x_i + \widehat{\beta_0}, \tag{5}$$

où $\widehat{\beta_0}$ et $\widehat{\beta_1}$ sont les paramètres du modèle, y_i est la variable expliquée et x_i est la variable explicative.

On propose de déterminer les paramètres du modèle par deux méthodes directes.

La méthode consiste à écrire le modèle (équation (5)) sous la forme matricielle $Y = L \times \hat{B}$. $\hat{B}$ est un vecteur colonne contenant les paramètres du modèle $\widehat{\beta_0}$ et $\widehat{\beta_1}$, Y est un vecteur colonne contenant les n valeurs y_i et L une matrice à n lignes et 2 colonnes, telle que $L(i,1) = \dfrac{\partial y_i}{\partial \widehat{\beta_0}}$ et $L(i,2) = \dfrac{\partial y_i}{\partial \widehat{\beta_1}}$. Rappelons que $\hat{B} = (L^t \times L)^{-1} \times L^t Y$ où L^t est la matrice transposée de L.

Q21. Donner les expressions de $\dfrac{\partial y_i}{\partial \widehat{\beta_0}}$ et $\dfrac{\partial y_i}{\partial \widehat{\beta_1}}$. En déduire la valeur des coefficients de la matrice L.

Q22. On suppose que les vecteurs colonnes Y et X, qui contiennent les valeurs y_i et x_i ($1 \leq i \leq n$), sont déjà créés. Donner le code permettant de créer la matrice L.

Q23. Donner le code permettant de déterminer les coefficients de la matrice $P = L^t \times L$. Préciser les dimensions de la matrice P.

Q24. Donner le code permettant de déterminer les coefficients de la matrice $Q = L^t \times Y$. Préciser les dimensions de la matrice Q.

Q25. Donner le code permettant de créer une fonction `inv_mat(M)` qui renvoie la matrice inverse de la matrice M de dimension (2×2) donnée comme argument d'entrée.

Q26. On note N la matrice inverse de M. Donner le code permettant de déterminer les coefficients $\widehat{\beta_0}$ et $\widehat{\beta_1}$ de la matrice $\hat{B}$.

II.2 – Prédiction du comportement thermique du réacteur

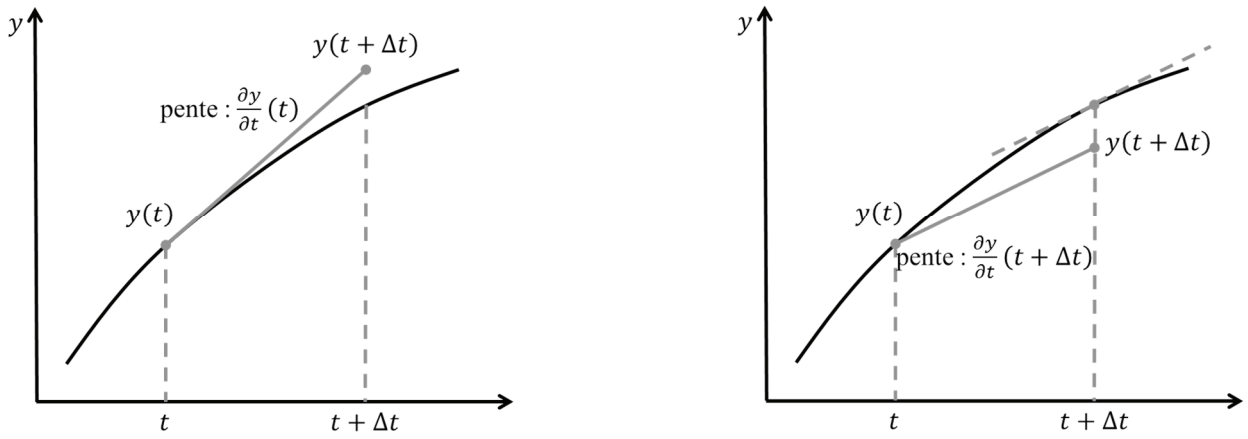
Dans cette sous-partie, on souhaite utiliser le modèle constitué du système d'équations différentielles établies dans la **Partie I** qui décrit l'évolution du taux de conversion du réactif X_R et de la température de réaction T en fonction du temps pour prédire le comportement thermique du réacteur en présence d'une réaction exothermique.

Pour simplifier les notations, on met le système d'équations différentielles sous la forme suivante (équation (6)) :

$$\begin{cases} \dfrac{dX_R}{dt} = f_1(t, X_R, T), \\ \dfrac{dT}{dt} = f_2(t, X_R, T). \end{cases} \tag{6}$$

La méthode de résolution proposée pour résoudre le système d'équations différentielles est la méthode d'Euler implicite à pas fixe. Cette méthode est préférée car elle donne de meilleurs résultats que la méthode explicite pour les systèmes dits raides (un système raide est un système qui est caractérisé par une évolution rapide des phénomènes en fonction du temps, ce qui est le cas ici pour la température de réaction).

Soit une variable y qui dépend du temps t. Comme la méthode d'Euler explicite, la méthode d'Euler implicite consiste à évaluer la valeur de $y(t + \Delta t)$ à partir de celle de $y(t)$ et de la dérivée $\dfrac{\partial y}{\partial t}$ (**figure 4**, page suivante). La différence entre les deux méthodes réside dans le choix de l'abscisse à laquelle est évaluée la dérivée $\dfrac{\partial y}{\partial t}$. Dans le cas de la méthode explicite, elle est évaluée en t : $\dfrac{\partial y}{\partial t}(t)$ comme le montre le schéma de la **figure 4a**, page suivante. Pour la méthode implicite, elle est évaluée en $t + \Delta t$: $\dfrac{\partial y}{\partial t}(t + \Delta t)$ (**figure 4b**, page suivante).



a) cas de la méthode explicite b) cas de la méthode implicite

Figure 4 – Approximation de $y(t+\Delta t)$ par la méthode d'Euler

Dans le cas d'un schéma implicite (**figure 4b**), l'expression de $y(t+\Delta t)$ en fonction de $y(t)$ et de la dérivée $\frac{\partial y}{\partial t}(t+\Delta t)$ évaluée en $t+\Delta t$ est obtenue en réalisant un développement limité dit rétrograde : $y(t) = y(t+\Delta t) - \Delta t \times \frac{\partial y}{\partial t}(t+\Delta t) + o(\Delta t)$.

Q27. À l'aide d'un développement limité rétrograde de la fonction $X_R(t)$, donner l'expression de $X_R(t+\Delta t)$ à l'ordre 1 en fonction de $X_R(t)$ et de sa dérivée partielle par rapport à t, $\frac{dX_R}{dt}(t+\Delta t)$ évaluée en $t+\Delta t$.

Q28. En déduire une valeur approchée de $\frac{dX_R}{dt}(t+\Delta t)$ à l'ordre 0 en fonction de $X_R(t)$, $X_R(t+\Delta t)$ et Δt.

Q29. À l'aide d'un développement limité rétrograde de la fonction $T(t)$, donner l'expression de $T(t+\Delta t)$ à l'ordre 1 en fonction de $T(t)$ et de sa dérivée partielle par rapport à t, $\frac{dT}{dt}(t+\Delta t)$.

Q30. En déduire une valeur approchée de $\frac{dT}{dt}(t+\Delta t)$ à l'ordre 0 en fonction de $T(t)$, $T(t+\Delta t)$ et Δt.

On procède à la discrétisation des équations. On note X_{Ri} la conversion évaluée au temps t_i, X_{Ri+1} la conversion évaluée au temps t_{i+1} et $\left.\frac{dX_R}{dt}\right|_{t_{i+1}}$ la dérivée de X_R évaluée à l'instant t_{i+1}. De même, on note T_i la température évaluée au temps t_i, T_{i+1} la température évaluée au temps t_{i+1} et $\left.\frac{dT}{dt}\right|_{t_{i+1}}$ la dérivée de T évaluée à l'instant t_{i+1}.

Q31. Donner l'expression de $\left.\frac{dX_R}{dt}\right|_{t_{i+1}}$ en fonction de X_{Ri}, X_{Ri+1} et Δt.

Q32. Donner l'expression approchée de X_{Ri+1} en fonction de X_{Ri}, Δt et de la fonction $f_1(t_{i+1}, X_{Ri+1}, T_{i+1})$, évaluée en t_{i+1}.

Q33. Donner l'expression de $\left.\frac{dT}{dt}\right|_{t_{i+1}}$ en fonction de T_i, T_{i+1} et Δt.

Q34. Donner l'expression approchée de T_{i+1} en fonction de T_i, Δt et de la fonction $f_2(t_{i+1}, X_{Ri+1}, T_{i+1})$, évaluée en t_{i+1}.

On constate que les expressions obtenues aux questions **Q32** et **Q34** constituent un système non linéaire dont les inconnues sont X_{Ri+1} et T_{i+1}. On propose d'utiliser la méthode de Newton-Raphson pour trouver les valeurs de X_{Ri+1} et T_{i+1} à chaque itération de la méthode d'Euler.

La méthode de Newton-Raphson pour la résolution d'un système de n équations non linéaires à n inconnues $x = (x_1, \dots, x_n)$, mis sous la forme de l'équation (7) suivante,

$$g(x) = \begin{bmatrix} g_1(x_1, \dots, x_n) \\ \dots \\ g_n(x_1, \dots, x_n) \end{bmatrix} = 0, \tag{7}$$

est une extension de la méthode de Newton permettant de trouver la racine d'une fonction d'une variable.

On peut démontrer la formule de récurrence suivante (équation (8)) :

$$x^{j+1} = x^j - \left(Dg\left(x^j\right)\right)^{-1} g\left(x^j\right), \tag{8}$$

où x^{j+1} est la valeur du vecteur x à l'itération $j+1$, x^j est la valeur du vecteur x à l'itération j, $g\left(x^j\right)$ est la valeur de $g(x)$ à l'itération j et $Dg\left(x^j\right)$ est la matrice Jacobienne évaluée en x^j (équation (9)) :

$$Dg\left(x^j\right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \dots & & \dots \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{x=x^j}. \tag{9}$$

La formule de récurrence s'accompagne du choix d'une valeur initiale, notée x^0, et d'un critère d'arrêt, par exemple $\left\|x^{j+1} - x^j\right\| \leq \varepsilon$.

Q35. Transformer les expressions obtenues aux questions **Q32** et **Q34** pour les mettre sous la forme $g_1(X_{Ri+1}, T_{i+1}) = 0$ et $g_2(X_{Ri+1}, T_{i+1}) = 0$.

Q36. Donner les expressions de $\frac{\partial g_1}{\partial X_{Ri+1}}$, $\frac{\partial g_1}{\partial T_{i+1}}$, $\frac{\partial g_2}{\partial X_{Ri+1}}$ et $\frac{\partial g_2}{\partial T_{i+1}}$ permettant de construire la matrice Jacobienne $Dg(X_{Ri+1}, T_{i+1})$.

Q37. Écrire une fonction **`mat_Dg(x)`** qui a pour argument d'entrée un vecteur x contenant les valeurs de X_{Ri+1} et T_{i+1} à l'itération j et qui retourne la matrice Jacobienne $Dg(x^j)$. On supposera que les paramètres suivants ont été au préalable déclarés comme variables globales : $\Delta t = 0{,}01$ s, $k_0 = 5{,}0$ s^{-1}, $E_a = 20\,000{,}0$ J.mol^{-1}, $J = 100{,}0$ K, $\tau_c = 75$ s et $R = 8{,}314$ J.K^{-1}.mol^{-1}.

Q38. Écrire le code permettant de calculer les valeurs du vecteur x à l'itération $j + 1$ à l'aide de l'équation (8) lors d'une boucle de l'algorithme de Newton-Raphson. On notera **`x_old`** la valeur de x a l'itération j et **`x_new`** la valeur de x à l'itération $j + 1$. De même, on notera **`X_euleri`** et **`T_euleri`** les vecteurs contenant les valeurs de X_{Ri} et T_i à l'itération i de la méthode d'Euler implicite. Pour l'inversion de matrice, on utilisera la fonction **`inv_mat(M)`** écrite à la question **Q25**.

Q39. Pour obtenir la valeur de **`x_new`** par la méthode de Newton-Raphson, on souhaite créer une boucle itérative avec condition. La condition d'arrêt porte sur la valeur absolue de la différence des températures T_{i+1}^{j} et T_{i+1}^{j+1} que l'on souhaite inférieure à 10^{-5} K. Pour les valeurs initiales de X_{ri+1}^{0} et T_{i+1}^{0} on prendra respectivement 0,5 et $T_p + J/2$. Écrire le code correspondant. Il est inutile de recopier l'intégralité du code écrit à la question précédente ; on indiquera néanmoins sa place dans le code de cette question.

Maintenant que le code permettant de trouver les valeurs de X_{Ri+1} et T_{i+1} par la méthode de Newton-Raphson lors d'une itération de la méthode d'Euler implicite a été établi, on souhaite calculer les valeurs pour l'ensemble des itérations de la méthode d'Euler implicite. On rappelle que $X_R(t = 0) = 0$ et $T(t = 0) = T_p = 320{,}0$ K. En plus de noter **`X_euleri`** et **`T_euleri`** les vecteurs contenant les valeurs de X_{Ri} et T_i pour chaque itération i de la méthode d'Euler implicite, on notera **`t_euleri`** le vecteur contenant les valeurs de t_i à chaque itération. L'intégration sera réalisée sur l'intervalle $[t_0, t_f]$ avec $t_0 = 0$ s et $t_f = 1\,000$ s. Le pas de temps Δt est de 0,01 s.

Q40. Donner le code permettant de calculer le nombre m d'intervalles Δt compris dans l'intervalle $[t_0, t_f]$ (m est un entier).

Q41. Écrire le code permettant de calculer les valeurs des éléments des vecteurs **`X_euleri`**, **`T_euleri`** et **`t_euleri`** à chaque itération de la méthode d'Euler implicite.

Q42. Donner le code permettant de tracer les graphes de la **figure 5** montrant l'évolution de la conversion et de la température en fonction du temps que l'on obtiendrait en réalisant la résolution numérique du système d'équations différentielles (simulation réalisée avec $k_0 = 5{,}0\ \text{s}^{-1}$, $E_a = 20\,000{,}0\ \text{J·mol}^{-1}$, $J = 100{,}0\ \text{K}$, $\tau_c = 75\ \text{s}$).

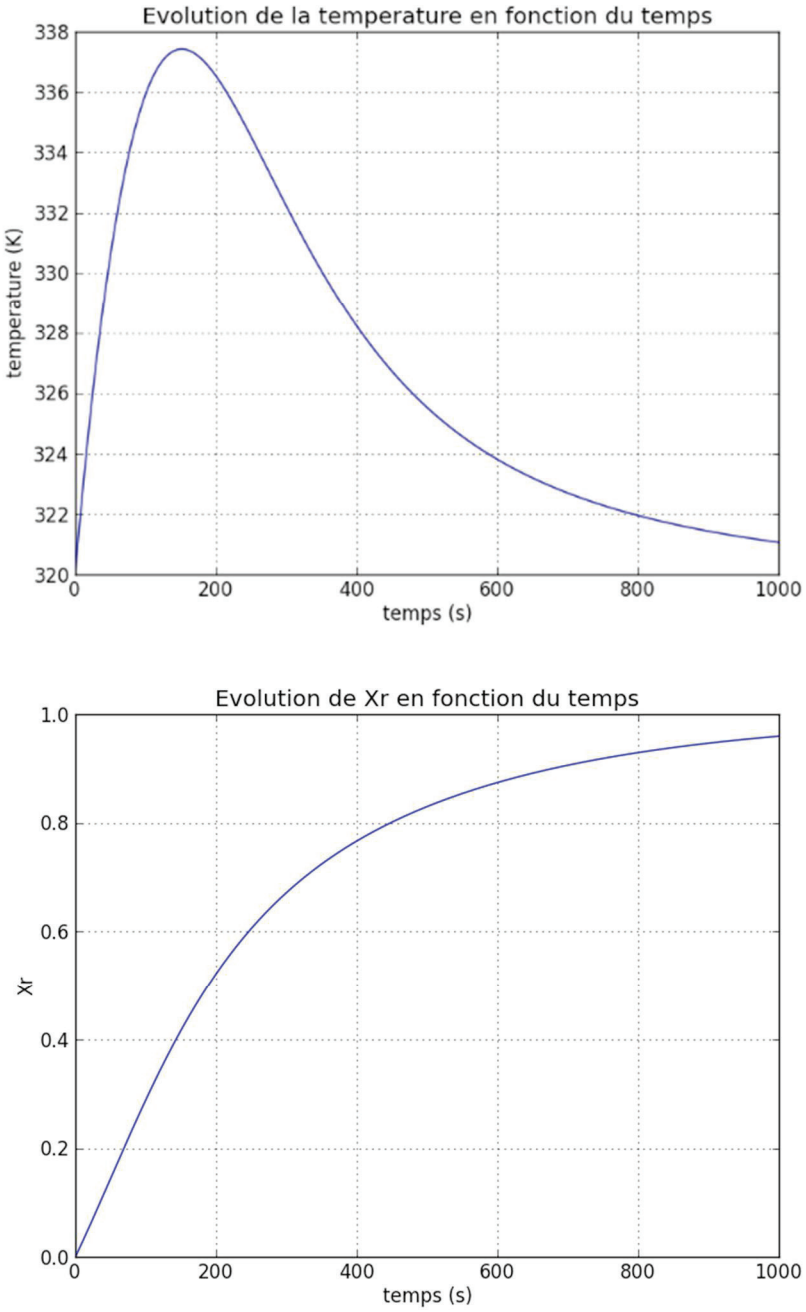


Figure 5 – Température et conversion calculées à partir du modèle constitué du système d'équations différentielles déterminées dans la **Partie I**

FIN

Annexe : Fonctions de Python

1. Bibliothèque numpy de Python

Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque numpy a préalablement été importée à l'aide de la commande : **import numpy as np**

On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

np.array(liste)

Description : fonction permettant de créer une matrice (de type tableau) à partir d'une liste.
Argument d'entrée : une liste définissant un tableau à 1 dimension (vecteur) ou 2 dimensions (matrice).
Argument de sortie : un tableau (matrice).

Exemples :

```
np.array([4,3,2])
⇨ [4 3 2]

np.array([[5],[7],[1]])
⇨ [[5]
   [7]
   [1]]

np.array([[3,4,10],[1,8,7]])
⇨ [[3 4 10]
   [1 8 7]]
```

$A[i,j]$.

Description : fonction qui retourne l'élément $(i+1, j+1)$ de la matrice A. Pour accéder à l'intégralité de la ligne i+1 de la matrice A, on écrit $A[i,:]$. De même, pour obtenir toute la colonne j+1 de la matrice A, on utilise la syntaxe $A[:,j]$.
Arguments d'entrée : une liste contenant les coordonnées de l'élément dans le tableau A.
Argument de sortie : l'élément $(\mathrm{i}+1, \mathrm{j}+1)$ de la matrice A.
ATTENTION : en langage Python, les lignes d'un tableau A de dimension $n \times m$ sont numérotées de 0 à $n-1$ et les colonnes sont numérotées de 0 à $m-1$

Exemple :

```
A=np.array([[3,4,10],[1,8,7]])

A[0,2]
⇨ 10

A[1,:]
⇨ [1 8 7]

A[:,2]
⇨ [10 7]
```

np.zeros((n,m))

Description : fonction créant une matrice (tableau) de dimensions $n \times m$ dont tous les éléments sont nuls.
Arguments d'entrée : un tuple de deux entiers correspondant aux dimensions de la matrice à créer.
Argument de sortie : un tableau (matrice) d'éléments nuls.

Exemple : np.zeros((3,4))

⇨ [[0 0 0 0]
[0 0 0 0]
[0 0 0 0]]

np.linspace(Min,Max,nbElements)

Description : fonction créant un vecteur (tableau) de $nbElements$ nombres espacés régulièrement entre Min et Max. Le 1er élément est égal à Min, le dernier est égal à Max et les éléments sont espacés de $(Max - Min)/(nbElements - 1)$:
Arguments d'entrée : un tuple de 3 entiers.
Argument de sortie : un tableau (vecteur).

Exemple : np.linspace(3,25,5)

⇨ [3 8.5 14 19.5 25]

np.loadtxt('nom_fichier',delimiter='string',usecols=[n])

Description : fonction permettant de lire les données sous forme de matrice dans un fichier texte et de les stocker sous forme de vecteurs.
Arguments d'entrée : le nom du fichier qui contient les données à charger, le type de caractère utilisé dans ce fichier pour séparer les données (par exemple un espace ou une virgule) et le numéro de la colonne à charger (ATTENTION, la première colonne porte le numéro 0).
Argument de sortie : un tableau.

Exemple : data=np.loadtxt('fichier.txt',delimiter=' ',usecols=[0])
#dans cet exemple data est un vecteur qui correspond à la première #colonne de la matrice contenue dans le fichier 'fichier.txt'.

2. Bibliothèque matplotlib.pyplot de Python

Cette bibliothèque permet de tracer des graphiques. Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque matplotlib.pyplot a préalablement été importée à l'aide de la commande :
import matplotlib.pyplot as plt

On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

plt.plot(x,y)

Description : fonction permettant de tracer un graphique de n points dont les abscisses sont contenues dans le vecteur x et les ordonnées dans le vecteur y. Cette fonction doit être suivie de la fonction **plt.show()** pour que le graphique soit affiché.
Arguments d'entrée : un vecteur d'abscisses x (tableau de dimension n) et un vecteur d'ordonnées y (tableau de dimension n).
Argument de sortie : un graphique.

Exemple :

```
x= np.linspace(3,25,5)
y=sin(x)
plt.plot(x,y)
plt.title('titre_graphique')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```

plt.title('titre')

Description : fonction permettant d'afficher le titre d'un graphique.
Argument d'entrée : une chaîne de caractères.

plt.xlabel('nom')

Description : fonction permettant d'afficher le contenu de nom en abscisse d'un graphique.
Argument d'entrée : une chaîne de caractères.

plt.ylabel('nom')

Description : fonction permettant d'afficher le contenu de nom en ordonnée d'un graphique.
Argument d'entrée : une chaîne de caractères.

plt.show()

Description : fonction réalisant l'affichage d'un graphe préalablement créé par la commande **plt.plot(x,y)**. Elle doit être appelée après la fonction plt.plot et après les fonctions plt.xlabel et plt.ylabel.

3. Fonction intrinsèque de Python

sum(x)

Description : fonction permettant de faire la somme des éléments d'un vecteur ou tableau.
Arguments d'entrée : un vecteur ou un tableau de réel, entier ou complexe.
Argument de sortie : un scalaire y qui est la somme des éléments de x.

Exemple : y= sum(x)
//y retourne la somme des éléments de x.

CONCOURS COMMUNS POLYTECHNIQUES

RAPPORT SUR L'ÉPREUVE ÉCRITE 2018 DE MODÉLISATION DE SYSTÈMES PHYSIQUE OU CHIMIQUE DE LA FILIÈRE PC

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 2x2. 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 à 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 maitrisent 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 traduisait 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 maitrise 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 fausse. 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.

CONCOURS COMMUNS
POLYTECHNIQUES

EPREUVE SPECIFIQUE - FILIERE PC

MODELISATION DE SYSTEMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

Jeudi 4 mai : 8 h - 12 h

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.

Les calculatrices sont autorisées

Le sujet est composé de deux parties, largement indépendantes.

Autour de l'équation de Poisson

Ce problème s'intéresse à la résolution numérique de quelques problèmes d'électrostatique. Il se compose de deux parties.

I. *tude de l'équation de Poisson et de différentes méthodes de résolution numérique.*

II. *Deux études de cas : fil infini chargé et mouvement d'un électron entre les plaques d'un condensateur.*

Les différentes parties sont largement indépendantes.

Un aide-mémoire `numpy/matplotlib/pyplot` *est présent à la fin du sujet.*

Partie I - quation de Poisson

I.1 - tablissement de l'équation

Q1. Rappeler l'équation de Maxwell-Gauss ainsi que la relation entre le champ $\vec{E}$ et le potentiel électrostatique V. En déduire l'équation de Poisson :

$$\Delta V + \frac{\rho}{\varepsilon_0} = 0 \, .$$

Préciser les noms et les unités usuelles de ρ et ε_0.

Q2. Citer plusieurs situations physiques en dehors de l'électrostatique pour lesquelles il existe une équation analogue.

I.2 - quation adimensionnée pour un problème plan

On veut résoudre l'équation de Poisson dans une portion de plan $\mathcal{P}$ carrée de côté L. On pose :

$$X = x/L, Y = y/L \, .$$

Q3. Montrer qu'on peut écrire l'équation sous la forme suivante :

$$\frac{\partial^2 V(X,Y)}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V(X,Y)}{\partial Y^2} + \rho'(X,Y) = 0$$

où $\rho'(X,Y)$ sera exprimé en fonction de ρ, L et ε_0.

I.3 - Discrétisation

Afin de résoudre numériquement l'équation de Poisson, on va utiliser un maillage de $\mathcal{P}$, de pas $h = 1/N$, et on va transformer les dérivées partielles par des différences entre les valeurs de V aux différents points du maillage (on parle aussi des *nœuds* du maillage). La **figure 1** (page suivante) représente le maillage de $\mathcal{P}$ pour $N = 5$.

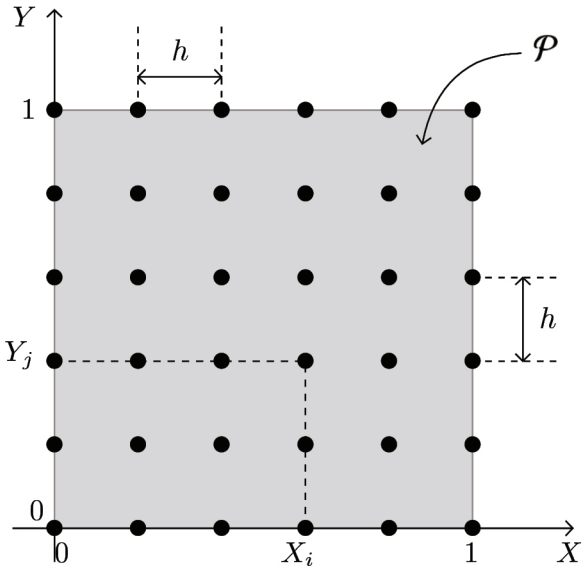


Figure 1 – Maillage de $\mathcal{P}$ pour $N = 5$

Q4. En faisant un développement limité à l'ordre 2 autour du point de coordonnées (X_i, Y_j), montrer qu'on peut exprimer la valeur de $\dfrac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \dfrac{\partial^2 V}{\partial Y^2}$ en ce point sous la forme suivante :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} = \frac{V(X_i + h, Y_j) + V(X_i - h, Y_j) + V(X_i, Y_j + h) + V(X_i, Y_j - h) - 4V(X_i, Y_j)}{h^2} + O(h)\,.$$

Q5. Comme $X_i = ih$ et $Y_j = jh$, on note désormais $V(i, j)$ le potentiel $V(X_i, Y_j)$ en un point (X_i, Y_j) du maillage. Montrer alors qu'on peut écrire l'équation de Poisson sous la forme suivante :

$$V(i + 1, j) + V(i - 1, j) + V(i, j + 1) + V(i, j - 1) - 4V(i, j) + \rho''(i, j) = 0 \qquad (1)$$

$\rho''(i, j)$ étant une fonction à définir en fonction de ρ, L, ε_0 et h.

I.4 - Résolution

La fonction $\rho''(i, j)$ étant connue, on montre en mathématiques que la solution de l'équation de Poisson est unique si on fixe les conditions aux limites sur la frontière $\mathcal{F}$ du domaine $\mathcal{P}$. Ces conditions sont essentiellement de deux types :

— on impose le potentiel en tout point de $\mathcal{F}$ (conditions de Dirichlet),
— on impose une condition sur les dérivées partielles de V en tout point de $\mathcal{F}$ (conditions de Neumann).

Dans ce problème, on ne va considérer que des conditions de Dirichlet.

La frontière $\mathcal{F}$ contient naturellement les points du bord de $\mathcal{P}$ (donc appartenant aux quatre côtés du carré), mais elle peut aussi contenir certains points à l'intérieur de $\mathcal{P}$ où le potentiel est fixé en raison de la présence d'électrodes.

L'ensemble des points de coordonnées (i, j) est donc composé de deux sous-ensembles :

— ceux dont le potentiel est connu, appartenant à la frontière $\mathcal{F}$,
— ceux dont le potentiel est inconnu, appartenant à $\mathcal{P}$ mais pas à $\mathcal{F}$ (donc dans $\mathcal{P}\backslash\mathcal{F}$).

Méthode de Jacobi

partir de l'équation (1), on peut exprimer :

$$V(i,j) = \frac{1}{4}(V(i+1,j) + V(i-1,j) + V(i,j+1) + V(i,j-1) + \rho''(i,j)) \ . \tag{2}$$

La résolution s'effectue alors en deux étapes.

— Initialisation

a) On fixe le potentiel des points de $\mathcal{F}$ à la valeur imposée physiquement (bords et électrodes).

b) On donne aux points de potentiel inconnu, donc appartenant à $\mathcal{P}\backslash\mathcal{F}$, une valeur arbitraire $V_0(i,j)$, en général nulle.

— Itérations

On calcule une nouvelle valeur $V_1(i,j)$ des potentiels en appliquant l'équation (2) pour tous les points de $\mathcal{P}\backslash\mathcal{F}$, tandis que $V_1(i,j) = V_0(i,j)$ pour les points de $\mathcal{F}$.

Le processus est répété jusqu'à obtenir des valeurs du potentiel quasiment stables. En notant k le nombre d'itérations, on a donc pour le point de coordonnées (i,j) n'appartenant pas à la frontière :

$$V_{k+1}(i,j) = \frac{1}{4}(V_k(i+1,j) + V_k(i-1,j) + V_k(i,j+1) + V_k(i,j-1) + \rho''(i,j)) \ . \tag{3}$$

La convergence de la méthode est vérifiée à l'aide du critère de convergence e_k, défini par :

$$e_k = \sqrt{\frac{1}{N^2}\sum_{i,j}(V_{k+1}(i,j) - V_k(i,j))^2} \ . \tag{4}$$

Le calcul sera stoppé au bout de k itérations, quand e_k deviendra inférieur à un seuil de convergence ε fixé arbitrairement.

Implémentation informatique

On va utiliser la bibliothèque `numpy` permettant une utilisation simple des tableaux de flottants à deux dimensions ; un aide-mémoire est disponible en fin de sujet.

Le chargement des bibliothèques classiques est assuré par les lignes suivantes :

```
# importation des bibliothèques
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import math
```

On supposera que les tableaux `numpy` suivants, utilisés comme arguments dans les fonctions à définir dans les questions qui suivent, ont pour signification :

— `V[i,j]`, $(i,j) \in [\![0 \dots N]\!]^2$: tableau courant du potentiel en un point de $\mathcal{P}$,

— `rhos[i,j]`, $(i,j) \in [\![0 \dots N]\!]^2$: tableau contenant la densité de charge ρ'' en un point de $\mathcal{P}$,

— `frontiere[i,j]`, $(i,j) \in [\![0 \dots N]\!]^2$: tableau de booléens indiquant si le point de coordonnées (i,j) appartient ou non à $\mathcal{F}$. En particulier, tous les points du bord du domaine seront tels que `frontiere[i,j]==True`.

Q6. Écrire la fonction `nouveau_potentiel(V, rhos, frontiere, i, j)` retournant la nouvelle valeur du potentiel au point $(i, j) \in [\![0 \dots N]\!]^2$ selon l'équation (3).

Q7. Montrer que pour modifier toutes les valeurs contenues dans `V[i,j]` pendant une itération, il est nécessaire de disposer d'une copie de ce tableau.

On rappelle que l'attribut `shape` *permet de récupérer les dimensions d'un tableau* `numpy`.

Q8. Écrire la fonction `itere_J(V, rhos, frontiere)` modifiant la totalité du tableau `V[i,j]` lors d'une seule itération et retournant l'erreur calculée conformément à l'équation (4).

Q9. Écrire la fonction `poisson(f_iter, V, rhos, frontiere, eps)` ayant pour premier argument une fonction du même type que celle définie à la question précédente, pour dernier argument `eps` le seuil arbitraire de convergence ε et dont le rôle est de modifier le tableau des potentiels `V[i,j]` jusqu'à convergence.

I.5 - Améliorations

Méthode de Gauss-Seidel

C'est une modification de la méthode de Jacobi, pour laquelle on montre que la convergence est légèrement plus rapide. Supposons que l'on balaye le tableau des potentiels selon les indices i et j croissants : dans ces conditions, les points situés à gauche et en dessous du point courant ont déjà été calculés. On va utiliser ces nouvelles valeurs, probablement plus proches de la solution, dans la formule permettant le calcul de $V_{k+1}(i, j)$. Ceci donne l'algorithme de Gauss-Seidel :

$$V_{k+1}(i,j) = \frac{1}{4}(V_k(i+1,j) + V_{k+1}(i-1,j) + V_k(i,j+1) + V_{k+1}(i,j-1) + \rho''(i,j)) \,. \tag{5}$$

Q10. Montrer qu'il n'est plus nécessaire de copier le tableau `V[i,j]` pour la mise à jour lors d'une itération en utilisant l'équation (5). Faut-il modifier la fonction `nouveau_potentiel` pour passer de la méthode de Jacobi à celle de Gauss-Seidel ?

Q11. Écrire la fonction `itere_GS(V, rhos, frontiere)` modifiant la totalité du tableau `V[i,j]` lors d'une seule itération et retournant l'erreur calculée conformément à l'équation (4).

Méthode de Gauss-Seidel adaptative

Les méthodes de Jacobi et de Gauss-Seidel n'utilisent pas la valeur de $V_k(i, j)$ pour calculer $V_{k+1}(i, j)$. La méthode de sur-relaxation (***S**uccessive ver **R**elaxation method*) consiste à calculer la nouvelle valeur d'un nœud comme une combinaison linéaire de la valeur courante et de celle donnée par le schéma de Gauss-Seidel. En introduisant le paramètre de relaxation ω, on a alors :

$$V_{k+1}(i,j) = (1-\omega)V_k(i,j) + \frac{\omega}{4}(V_k(i+1,j) + V_{k+1}(i-1,j) + V_k(i,j+1) + V_{k+1}(i,j-1) + \rho''(i,j)) \,. \tag{6}$$

L'étude mathématique de cette relation permet de montrer les résultats suivants :

- la méthode converge uniquement si $0 < \omega < 2$ et elle converge plus rapidement que la méthode de Gauss-Seidel si $1 < \omega < 2$,
- il existe une valeur optimale de ω qui permet la convergence avec un nombre d'itérations en $O(N)$ pour une valeur de ε fixée.

Pour la résolution de l'équation de Poisson envisagée dans ce problème (conditions de Dirichlet sur un maillage carré), on montre que la valeur optimale ω_{opt} est :

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \pi/N} \,. \tag{7}$$

Q12. Écrire la fonction `nouveau_potentiel_SOR(V, rhos, frontiere, i, j, omega)` retournant la nouvelle valeur du potentiel au point (i, j) selon l'équation (6).

Q13. Écrire la fonction `itere_SOR(V, rhos, frontiere)` optimale modifiant la totalité du tableau `V[i,j]` lors d'une seule itération et retournant l'erreur calculée conformément à l'équation (4).

La résolution du problème peut alors se faire par un appel de la forme

`poisson(itere_SOR, V, rhos, frontiere, eps)`,

les tableaux carrés `V, rhos, frontiere` étant de dimensions convenables pour représenter un maillage comportant $(N + 1)^2$ nœuds.

Q14. Quelle est la complexité temporelle de l'appel précédent quand $\omega = \omega_{\text{opt}}$?
La **figure 2** représente, pour $\varepsilon = 10^{-4}$, la durée d'exécution T (en secondes) en fonction de N.
Cette courbe est-elle en accord avec la complexité temporelle attendue ?
Quelle serait la durée d'exécution pour $N = 1\,000$? Commenter.

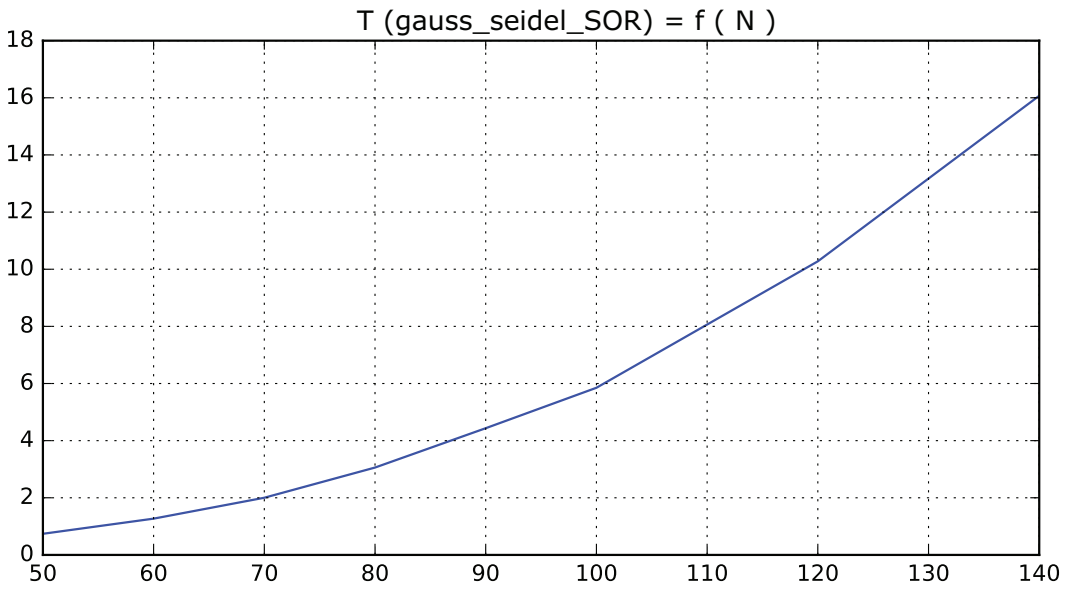


Figure 2 – Durée d'exécution (en secondes) de `poisson(itere_SOR, V, rhos, frontiere, eps)` en fonction de N

I.6 - Détermination du champ électrique

Connaissant le potentiel `V[i,j]`, il est souvent nécessaire de calculer numériquement les composantes E_x et E_y du champ électrique au niveau des nœuds du maillage, qui sont alors conservées dans deux tableaux `Ex` et `Ey` dimensionnés correctement (ce sont donc des tableaux carrés de $(N+1)^2$ éléments).

Q15. Expliquer rapidement comment il serait possible de définir la fonction `calc_ExEy(Ex, Ey, V, h)`, permettant, à partir du tableau `V` et du pas du maillage `h`, le remplissage des deux tableaux `Ex` et `Ey` passés en arguments.
Remarque : on ne demande pas d'écrire le code de la fonction, juste de décrire précisément les étapes de calcul, ainsi que les différents cas à considérer.

Partie II - Deux études de cas

II.1 - Fil cylindrique chargé uniformément

tude théorique

On considère dans le vide un fil cylindrique infini d'axe z et de rayon R, portant une charge volumique constante ρ.

Q16. En se plaçant en coordonnées cylindriques d'axe z, montrer par des considérations de symétrie et d'invariance que le champ $\vec{E} = E(r)\,\vec{u}_r$. En déduire la forme des surfaces équipotentielles.

Q17. En appliquant le théorème de Gauss, calculer le champ $\vec{E}$ dans tout l'espace. Tracer rapidement l'allure de $E(r)$ en fonction de r.

Q18. On donne : $\varepsilon_0 = 8{,}85 \times 10^{-12}$ F.m^{-1}, $\rho = 1{,}00 \times 10^{-5}$ C.m^{-3}, $R = 5{,}00$ cm. Calculer la valeur maximale de la norme du champ électrique, ainsi que la valeur pour $r = 2R$.

tude numérique

Pour pouvoir utiliser la méthode de Gauss-Seidel adaptative, on place le fil infini au centre d'une enceinte de longueur infinie et de section carrée ($L \times L$), portée au potentiel nul (**figure 3**).

Dans la suite, on prendra $L = 4R = 20{,}0$ cm.

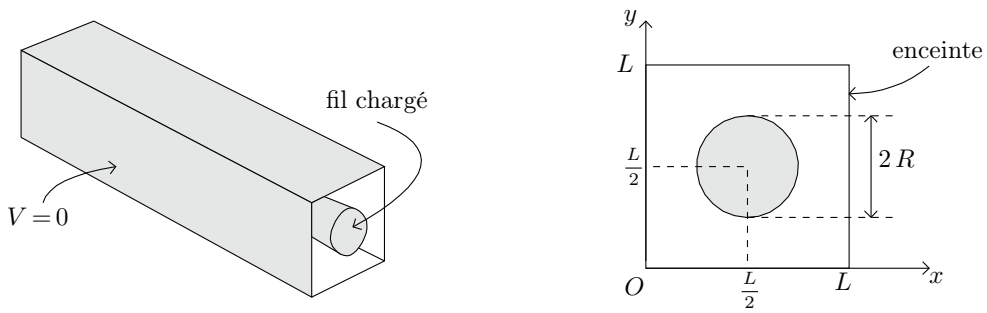


Figure 3 – Fil infini dans une enceinte de section carrée, portée au potentiel nul

Le programme permettant la résolution de ce problème commence ainsi :

```
# initialisations
eps0 = 8.85e-12                 # epsilon_0
L = 20.0e-2                     # 20 cm
N = 100 ; h = L/N               # définition du maillage
rho = 1.00e-5                   # densité vol. de charge rho

# les tableaux globaux numpy pour le cylindre chargé
rhos_cyl = np.zeros((N+1,N+1))  # tableau des valeurs de rho''
V_cyl = np.zeros((N+1,N+1))     # le potentiel
Ex_cyl = np.zeros((N+1,N+1))    # la composante Ex
Ey_cyl = np.zeros((N+1,N+1))    # la composante Ey

# le tableau définissant la frontière est initialement
# rempli entièrement par la valeur False
frontiere_cyl = np.zeros((N+1,N+1), bool)
```

Q19. Écrire la fonction `dans_cylindre(x,y,xc,yc,R)` retournant un résultat booléen indiquant si le point de coordonnées (x, y) est à l'intérieur ou sur le bord du cercle de centre (x_c, y_c) et de rayon R.

Q20. Écrire la fonction `initialise_rhos_cylindre(tab_rhos)`, initialisant le tableau `rhos_cyl` contenant les valeurs $\rho''(i, j)$ pour les nœuds du maillage.

Q21. Écrire la fonction `initialise_frontiere_cylindre(tab_f)`, mettant à `True` les points appartenant à la frontière, donc de potentiel fixé.

La résolution numérique avec la méthode de Gauss-Seidel adaptative, utilisant les valeurs numériques précédentes et un seuil de convergence $\varepsilon = 10^{-5}$, mène à la **figure 4**, où on a tracé un réseau de courbes équipotentielles, le potentiel V et la composante E_x du champ le long de l'axe de symétrie défini par $y = L/2$. En outre, la valeur calculée de `Ex_cyl[50, 50]` est égale à `-0.0023321214257521206`.

Q22. Commenter le plus complètement possible ces résultats ; on veillera, en particulier, à les comparer au modèle théorique (allure des courbes, valeurs numériques ...).

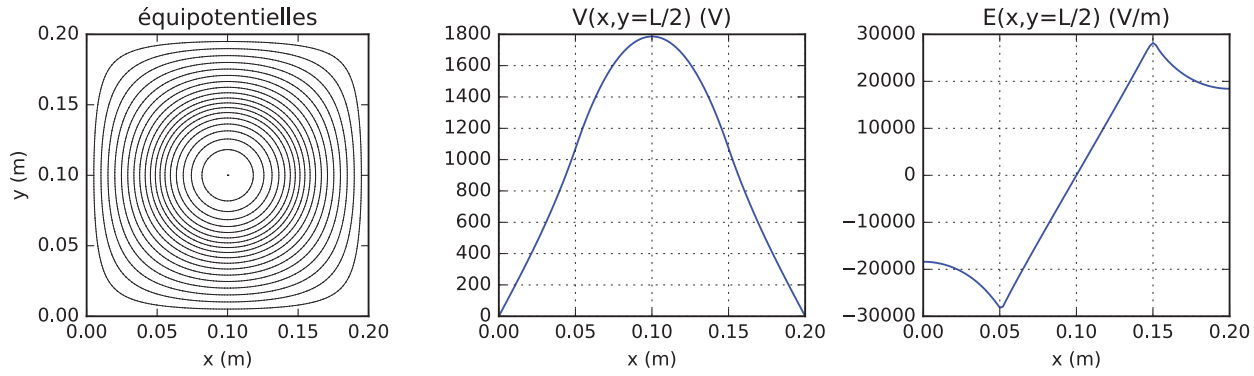


Figure 4 – Équipotentielles, $V(x, y)$ et $\vec{E}(x, y) \cdot \vec{u}_x$ en fonction de x pour $y = L/2$

Une autre résolution est effectuée, avec une répartition de charges dans le cylindre différente de la précédente, utilisant la même valeur de la densité volumique $\rho = 10^{-5}$ C.m^{-3}. Elle mène aux courbes de la **figure 5** (page suivante).

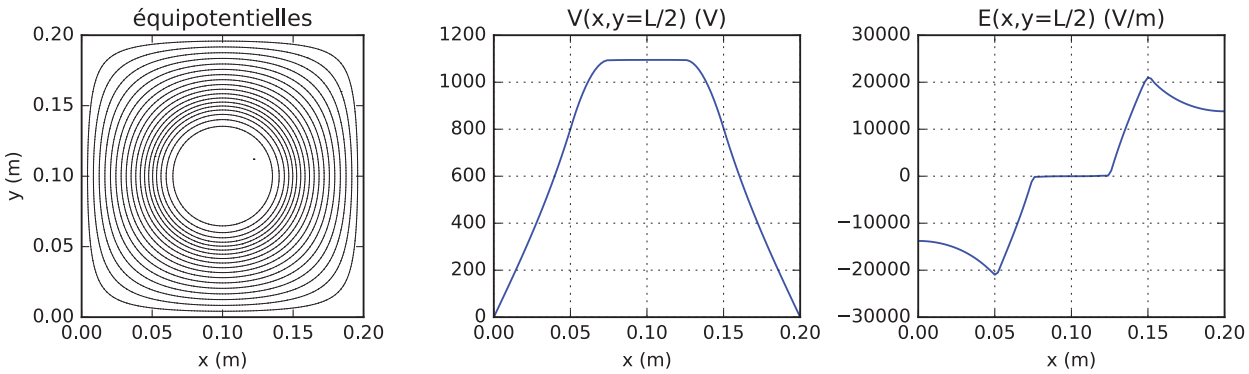


Figure 5 – Équipotentielles, $V(x, y)$ et $\vec{E}(x, y) \cdot \vec{u}_x$ en fonction de x pour la nouvelle répartition de charge

Q23. Déduire de ces courbes la répartition de charges dans le cylindre dans cette deuxième situation. Calculer le champ électrique en tout point pour cette répartition de charges dans le cas d'un cylindre infini seul dans l'espace.
On vérifiera que la valeur maximale du champ électrique calculée à l'aide de cette modélisation est compatible avec celle déduite de la **figure 5**.

II.2 - Mouvement d'un électron dans un tube d'oscilloscope

La **figure 6** montre un tube d'oscilloscope de petite dimension, dans lequel des électrons émis par la cathode sont accélérés et déviés vers un écran luminescent. La déviation est assurée par le passage des électrons entre les plaques de deux condensateurs plans : un pour la déviation horizontale, l'autre pour la déviation verticale. L'étude qui suit ne concernera que le condensateur responsable de la déviation verticale.

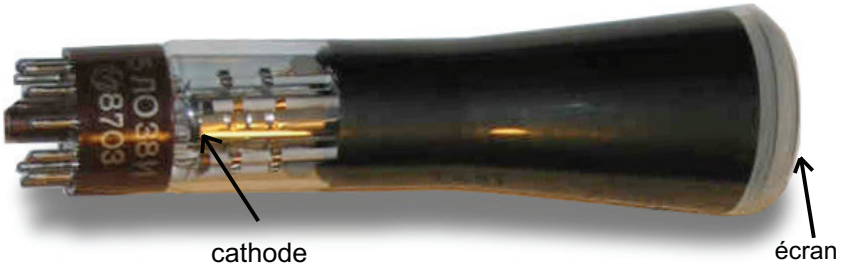


Figure 6 – Petit tube d'oscilloscope, de longueur d'environ 20 cm

On modélise la trajectoire d'un électron de la façon suivante (**figure 7** page suivante, où la zone de déviation est grisée) :

— on négligera l'effet de la pesanteur,
— émis à vitesse nulle par effet thermo-électronique au niveau de la cathode portée au potentiel nul, l'électron est accéléré à l'aide d'une tension $V_0 > 0$ afin d'acquérir à l'entrée de la zone de déviation une vitesse $\vec{v}_0$,
— pendant son trajet dans la zone de déviation, il est soumis à un champ électrique $\vec{E}$ lié aux potentiels $\pm V_p$ des plaques du condensateur, de longueur ℓ et séparées par une distance d,
— poursuivant son mouvement, il arrive sur la surface de l'écran à une distance y_s de l'axe x, l'écran étant situé à la distance D du centre du condensateur.

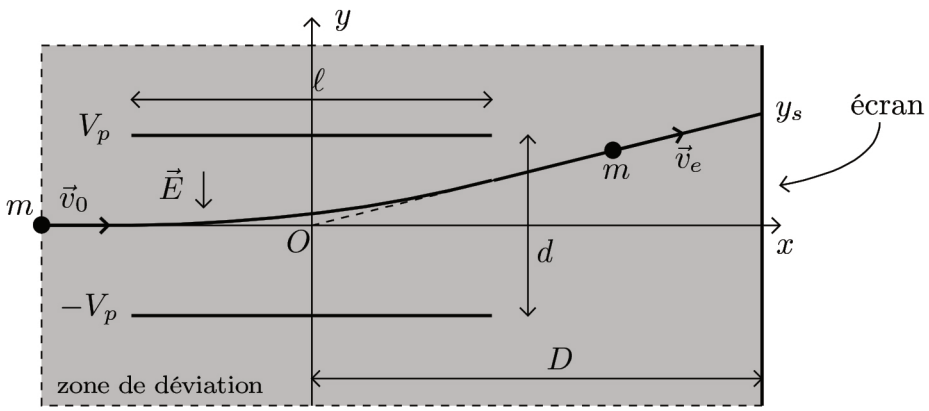


Figure 7 – Schéma de la zone de déviation

Valeurs numériques :

masse d'un électron $m = 9{,}11 \times 10^{-31}$ kg ; charge élémentaire $e = 1{,}60 \times 10^{-19}$ C

$V_0 = 950$ V ; $V_p = 180$ V ; $D = 7{,}00$ cm ; $d = 2{,}00$ cm ; $\ell = 4{,}00$ cm .

Étude physique

Q24. En appliquant la conservation de l'énergie, calculer la vitesse v_0 de l'électron à l'entrée de la zone de déviation. Faire l'application numérique. Commenter.

Q25. On modélise les plaques de déviation comme un condensateur sans effets de bord : le champ électrique est donc considéré comme nul si $|x| > \ell/2$ et uniforme si $|x| \leqslant \ell/2$, ses lignes de champ étant parallèles à l'axe Oy. Exprimer le champ $\vec{E}$ entre les plaques en fonction de V_p et d.

Q26. On suppose que la vitesse d'entrée de l'électron dans la zone de déviation est $\vec{v}_0 = v_0\,\vec{u}_x$. En appliquant les lois de la mécanique, établir l'équation de la trajectoire de l'électron entre les plaques (pour $|x| < \ell/2$).

Q27. Montrer que l'équation de la trajectoire pour $x > \ell/2$ est donnée par : $y = \dfrac{2eV_p\ell}{mdv_0^2}x$.

En déduire que l'ordonnée du spot sur l'écran est : $y_s = \dfrac{V_p}{V_0} \times \dfrac{\ell\, D}{d}$.

Faire l'application numérique pour y_s.

Étude numérique

Pour savoir si la modélisation précédente est pertinente, on va envisager une détermination numérique de la trajectoire de l'électron. Pour cela, on place le condensateur de déviation dans une enceinte carrée au potentiel nul de côté $L = 10{,}0$ cm, le centre du condensateur étant à 3,0 cm du bord gauche de l'enceinte (**figure 8** page suivante). Les autres caractéristiques électriques et géométriques sont les mêmes que précédemment.

La résolution numérique se déroule alors en deux étapes :

— calcul du potentiel et du champ électrique par la méthode de Gauss-Seidel adaptative dans l'enceinte,

— calcul de la trajectoire de l'électron à l'aide de la méthode d'Euler.

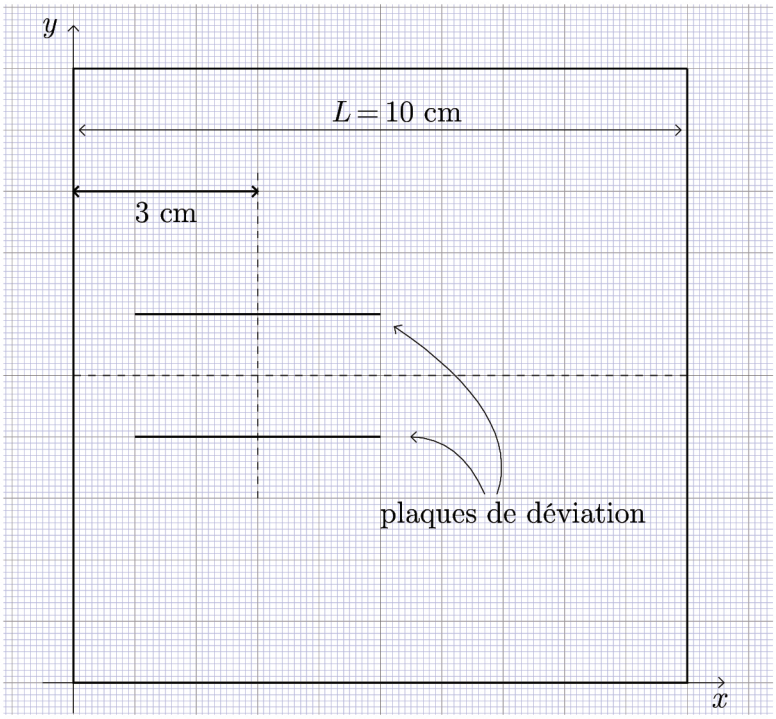


Figure 8 – Modélisation des plaques de déviation dans l'enceinte

Le programme permettant cette résolution numérique commence ainsi :

```
L = 0.100 ; N = 100 ; h = L/N
V0 = 950 ; Vp = 180
m = 9.11e-31 ; e = 1.60e-19
rhos_osc = np.zeros((N+1,N+1))
V_osc = np.zeros((N+1,N+1))
Ex_osc = np.zeros((N+1,N+1))
Ey_osc = np.zeros((N+1,N+1))
frontiere_osc = np.zeros((N+1,N+1), dtype=bool)
```

Calcul du potentiel et du champ électrique dans l'enceinte

Q28. Quelles sont les valeurs qui doivent être contenues dans le tableau `rhos` pour le problème considéré ?

Q29. Écrire la fonction `initialise_frontiere_condensateur(tab_V, tab_f)`, permettant l'initialisation des tableaux `V_osc` et `frontiere_osc` à l'aide de la ligne de code suivante :

```
initialise_frontiere_condensateur(V_osc, frontiere_osc)
```

Pour pouvoir utiliser la méthode d'Euler, il est nécessaire de pouvoir calculer les composantes $E_x(x,y)$ et $E_y(x,y)$ du champ $\vec{E}$ pour $x \in [0, L[$ et $y \in [0, L[$. Cependant, la méthode de résolution (associée à la fonction `calc_ExEy` définie dans la question **15**) ne permet de calculer les composantes `Ex_osc[i,j]` et `Ey_osc[i,j]` qu'aux nœuds du maillage.

Soit un point P de coordonnées $(x, y) \in [0, L[\times[0, L[$. Ce point est dans la cellule (i, j), où $i = \lfloor x/h \rfloor$ et $j = \lfloor y/h \rfloor$. Posons $r_x = x - ih$ et $r_y = y - jh$.

Q30. Montrer alors que :

$$E_x(x,y) \approx \texttt{Ex[i,j] + ((Ex[i+1,j] - Ex[i,j]) * rx + (Ex[i,j+1] - Ex[i,j]) * ry) / h}\,.$$

Écrire de même la formule permettant de calculer $E_y(x, y)$. En déduire qu'il est possible de calculer les composantes du champ en tout point de $\mathcal{P}$.

On supposera dans la suite que les fonctions `val_Ex(Ex,Ey,x,y,h)` et `val_Ey(Ex,Ey,x,y,h)` sont définies et retournent les valeurs des composantes du champ électrique pour le point M de coordonnées (x, y) calculées à l'aide des formules précédentes.

Calcul de la trajectoire par la méthode d'Euler

Q31. Montrer que les équations permettant de décrire le mouvement de l'électron par la méthode d'Euler sont les suivantes, avec δt comme petit incrément temporel et $\delta x, \delta v_x, \delta y, \delta v_y$ les variations pendant δt des grandeurs x, v_x, y, v_y :

$$\begin{cases} \delta x = v_x \delta t & \delta y = v_y \delta t \\ \delta v_x = -\dfrac{e}{m} E_x(x,y)\delta t & \delta v_y = -\dfrac{e}{m} E_y(x,y)\delta t \end{cases}.$$

Q32. Compte tenu du changement de la position d'origine du repère (imposée par la résolution numérique de l'équation de Poisson, **figure 8**), quelles sont les conditions initiales du mouvement de l'électron ?
Déterminer δt pour calculer environ 200 points successifs le long de la trajectoire. Faire l'application numérique.

Q33. En tenant compte des réponses aux questions précédentes, compléter le code d'initialisation des variables de la simulation (`******` dans le code suivant) :

```
Npts = 200 # nombre de points pour le tracé de la trajectoire
v0 = ******  # vitesse initiale de l'électron
dt = ******  # incrément temporel

# tableaux des coordonnées x et y de l'électron
lx = np.zeros(Npts) ; ly = np.zeros(Npts)
# tableaux des vitesses en x et en y
lvx = np.zeros(Npts) ; lvy = np.zeros(Npts)
#conditions initiales
lx[0] = ****** ; ly[0] = ******
lvx[0] = ******* ; lvy[0] = *******
```

Q34. Écrire les lignes de code implémentant la boucle de remplissage des tableaux `lx, ly, lvx, lvy` selon la méthode d'Euler.

Comparaison théorie/simulation

La **figure 9** montre le résultat de la simulation précédente. On y voit le réseau de courbes équipotentielles, ainsi que deux trajectoires 1 et 2, l'une étant associée au calcul théorique, l'autre à la simulation numérique. Chaque trajectoire est constituée de 200 points de calcul séparés d'une durée δt.

Q35. Reproduire sommairement sur la copie la **figure 9**, y ajouter le tracé de quelques lignes de champ orientées dans les différentes parties de la zone de déviation.
Identifier, en le justifiant, chaque trajectoire. Expliquer pourquoi la trajectoire 1 est plus courte que la trajectoire 2.

votre avis, peut-on se contenter de l'étude théorique pour prévoir le point d'impact de l'électron sur l'écran ? (On attend une réponse chiffrée.)

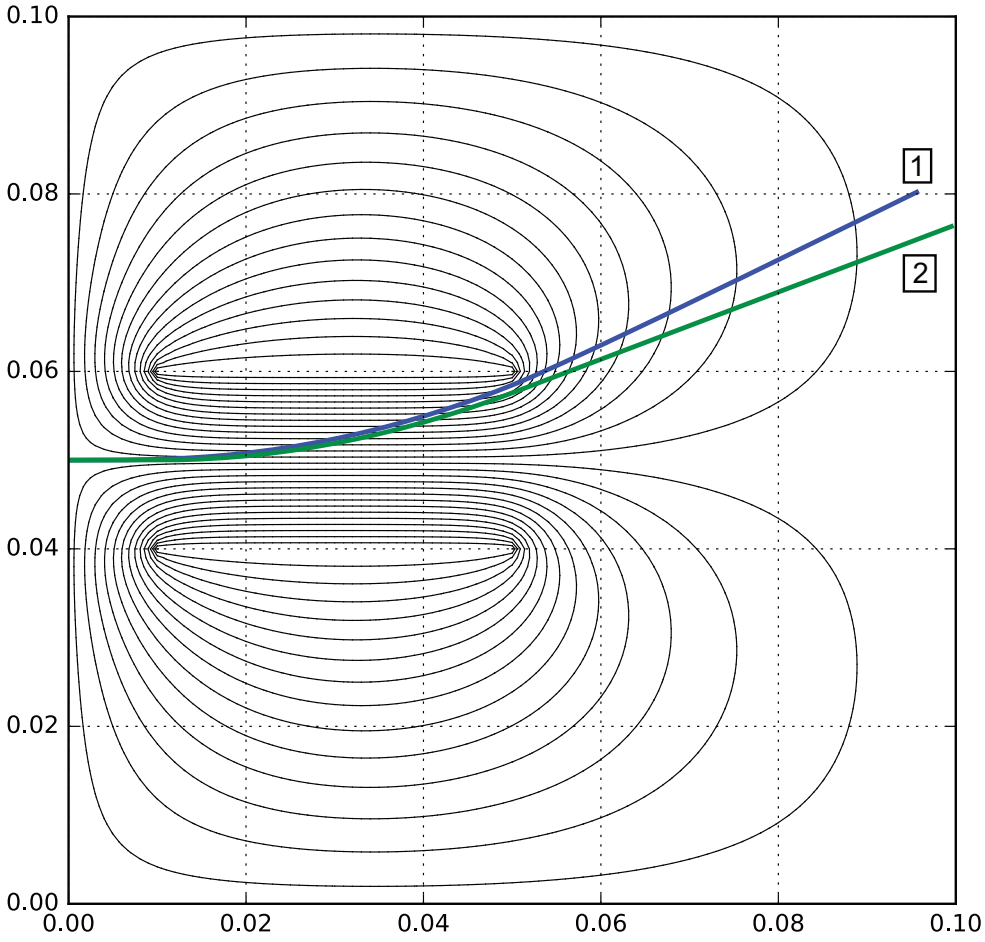


Figure 9 – Tracé dans la zone de déviation de quelques courbes équipotentielles, des trajectoires de l'électron (théorique et simulée numériquement)

Aide-mémoire numpy/matplotlib/pyplot

Importation des bibliothèques

Les bibliothèques sont importées de la façon suivante :

```
import math
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

Manipulation des tableaux numpy

La création d'un tableau `numpy` à deux dimensions dont toutes les valeurs sont initialisées à 0 est faite par l'instruction `np.zeros(format)`, `format` étant un doublet de la forme `(n_lignes , n_colonnes)` :

```
>> t0=np.zeros((2,3)); print(t0)
[[ 0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.]]
```

Pour avoir un tableau rempli de 1, on utilise `np.ones(format)` :

```
>> t1=np.ones((2,2)); print(t1)
[[ 1.  1.]
 [ 1.  1.]]
```

On peut récupérer le format d'un tableau en demandant son attribut `shape`, ce qui retourne un doublet :

```
>> print(t0.shape); print(t1.shape)
(2, 3)
(2, 2)
```

Dans le cas d'un tableau carré, on peut donc récupérer le nombre de lignes, égal au nombre de colonnes, en accédant au premier élément du doublet :

```
>> t1.shape[0]
 2
```

On peut créer un tableau `numpy` de booléens en ajoutant le type `bool`. La valeur 0 est associée à `False`, la valeur 1 à `True` :

```
>> np.zeros((2,3), bool)
[[False False False]
 [False False False]]}
>> np.ones((2,3),bool)
[[ True True True]
 [ True True True]]
```

L'accès à un élément du tableau `a` (en lecture ou en modification) se fait par `a[i,j]`, les lignes et les colonnes étant numérotées à partir de 0 :

```
>> a=np.zeros((2,3)) ; a[0,0]=1 ; a[1,2]=2
>> a
[[ 1. 0. 0.]
 [ 0. 0. 2.]]
```

Une copie indépendante d'un tableau `a` se fait à l'aide de `np.copy(a)`

```
>> b = np.copy(a) ; b[0,0]=3 ; b[1,1]=5
>> a
[[ 1. 0. 0.]
 [ 0. 0. 2.]]
>> b
[[ 3. 0. 0.]
 [ 0. 5. 2.]]
```

FIN

CONCOURS COMMUNS POLYTECHNIQUES

RAPPORT SUR L'EPREUVE ECRITE 2017 DE MODELISATION DE SYSTEMES PHYSIQUE OU CHIMIQUE LA FILIERE PC

1/ CONSIGNES GENERALES :

A) Présentation du sujet

Le sujet proposait une résolution de l'équation de Poisson dans le cadre de l'électrostatique afin d'obtenir le potentiel de champ en tout point de l'espace, suivie de deux études de cas permettant de comparer des prévisions théoriques classiques avec celles de la simulation numérique.

Première partie

Après une partie introductive théorique permettant de souligner le rôle central en électrostatique de l'équation de Poisson, une alternance d'analyses numériques et physiques étaient conduites.
Une large part est donnée à l'implémentation numérique de l'équation de Poisson permettant le calcul du potentiel électrostatique aux différents points d'un maillage défini dans le domaine d'étude. Différentes méthodes de plus en plus performantes sont envisagées, tenant compte des problèmes liés aux calculs itératifs. La rapidité de la convergence est présentée, donnant l'occasion de discuter de la complexité du programme le plus performant. Enfin, le calcul du champ électrique à partir du potentiel calculé numériquement est évoqué, donnant l'occasion d'aborder les conditions aux limites.

Deuxième partie

Les résultats de la simulation numérique produite par les algorithmes de la première partie sont alors confrontés aux résultats théoriques (résultant de modélisations simplifiées) concernant deux cas d'école :

- le fil infini chargé uniformément pour lequel il est possible d'extraire une solution analytique facilement. Cet exemple permet en outre de mettre en avant aussi bien les limites de l'approche théorique que celles de l'approche numérique. L'étude se termine en proposant le cheminement inverse : retrouver, à partir d'un résultat numérique, le modèle physique initial.
- le mouvement d'un électron dans un tube d'oscilloscope, la déviation étant induite par le passage de la particule chargée entre les plaques d'un condensateur plan fini. L'étude théorique très classique de ce problème est suivie de son étude numérique : obtention de la carte de champ électrique, puis détermination de la trajectoire de l'électron à l'aide de la méthode d'Euler.

B) Prestation des candidats

Présentation

La présentation de nombreuses copies laisse à désirer sur un assez grand nombre de points :

- questions non ou mal numérotées, écriture peu soignée, code quasi-illisible et/ou non commenté,
- résultats non mis en évidence, applications numériques sans unités,
- absence de figures ou de schémas lorsqu'ils seraient souhaitables.

On ne peut que répéter que la présentation d'une copie est essentielle afin que le correcteur puisse juger en toute objectivité les réponses apportées aux questions posées.

Partie physique

En physique, de nombreuses questions étaient très proches du cours, permettant de mesurer la connaissance indispensable de celui-ci. D'autres étaient plus subtiles et ont permis de distinguer les candidats les plus brillants.
Les démonstrations sont trop souvent partielles, les résultats affirmés sans justification correcte.
Les questions d'interprétation (analyse des graphes et des figures) sont mal traitées.
Les résultats sont globalement décevants voire inquiétants, car de trop nombreux candidats ne maîtrisent pas des notions élémentaires :

- homogénéité des résultats,
- écriture de développements limités à l'ordre 1 ou 2,
- détermination de la surface de Gauss après détermination des symétries/invariances,
- utilisation des théorèmes énergétiques dans le cadre de la mécanique classique, expression de l'énergie potentielle électrique,
- détermination de la trajectoire d'une particule chargée dans un champ électrique.

Partie informatique

En informatique, de nombreux étudiants ne réutilisent pas les fonctions préalablement introduites et codées, perdant en clarté et gaspillant un temps précieux. Un problème d'informatique est souvent conçu de façon à ce que les questions intermédiaires introduisent des fonctions qui facilitent l'écriture de la solution.
Peu ont respecté la manière dont les bibliothèques étaient chargées par l'énoncé, en particulier lors de l'utilisation des fonctions mathématiques ou de la valeur de π.

2/ REMARQUES SPECIFIQUES :

Première partie : équation de Poisson

Q 1 : nom de ε_0 souvent approximatif, unités : quelquefois en $kg.m^{-3}$.
Q 2 : rarement deux exemples sont donnés.
Q 3 : le changement de variable est étonnamment très souvent mal effectué, conduisant à un résultat faux.
Q 4 : le développement limité à l'ordre 2 est non maîtrisé.
Q 6->13 : beaucoup de confusions entre les fonctions qui modifient des tableaux « en place » et celles qui renvoient des valeurs, non utilisation des fonctions définies précédemment, non respect de la valeur de retour demandée. Initialisation des tableaux, terminaisons des boucles souvent effectuées de manière partielle.
Q 14 : la question de complexité était très abordable, mais seul un nombre extrêmement réduit de candidats l'ont traitée et très peu l'ont fait correctement : la réponse était souvent O(N) ou $O(N^2)$, et le passage à N = 1000 quasiment toujours absent.
Q 15 : les bords du tableau sont rarement pris en compte correctement.

Deuxième partie : études de cas

Q 16, 17, 18 : questions très classiques. Beaucoup ne savent pas utiliser le théorème de Gauss, on a par exemple souvent une surface de Gauss sphérique alors qu'avant ils ont expliqué que les surfaces équipotentielles étaient des cylindres. Un cercle proposé comme surface équipotentielle est évidemment une réponse incorrecte. De trop nombreux candidats ne connaissent pas l'unité du champ électrique !
Q 19 : près de la moitié des candidats ne connaissent pas l'équation d'un cercle en coordonnées cartésiennes : ils ont souvent programmé la localisation de l'intérieur d'un carré mais pas d'un cercle !
Q 20,21 : rarement correctes, la notation `tab-f` n'a parfois pas été comprise (confusion entre un tableau global et l'argument d'une fonction).
Q 22 : les commentaires manquent de finesse en général, les documents et données à disposition n'étant pas examinés avec suffisamment de détails. Par exemple, le fait que le champ calculé au centre ne soit pas exactement nul a été très rarement commenté, tout comme la valeur plus élevée du champ au bord de l'enceinte.
Q 23 : l'idée de la répartition est souvent présentée, sans réelle justification. Les calculs de champs sont rarement faits.
Q 24 : la démonstration de l'expression est trop souvent approximative.
Q 25 : erreurs de signe, oubli d'unités répété.
Q 26 : conditions initiales parfois mal exploitées.
Q 27 : cette question est rarement traitée dans son intégralité : la détermination de l'équation de la tangente à une parabole semble être une question difficile !
Q 28 : cette question, évidente, est majoritairement ratée : la nullité de `rhos` échappe à beaucoup de candidats.
Q 30 : réponses très souvent incomplètes. Beaucoup ne jugent pas nécessaire d'écrire les développements limités permettant d'aboutir aux résultats et se contentent d'inventer la formule par « analogie ».
Q 31, 32, 33 : Ces trois questions, très abordables, auraient pu être correctement traitées par la quasi-totalité des candidats, ce qui n'a pas été le cas.
Q 35 : le tracé a très souvent été très mal reproduit sur la copie, et l'interprétation physique des résultats absente.

Conclusions

Toutes les parties du problème donnaient lieu à discussion /critiques et permettaient ainsi aux étudiants de mettre en avant les compétences et la démarche d'analyse scientifique qu'ils ont pu acquérir aux cours de deux ou trois années en CPGE.
La plupart des copies abordent toutes les parties, mais bien souvent avec une absence chronique de rigueur, surtout pénalisante dans les parties algorithmiques où l'on attend que les candidats écrivent le code dans un langage obéissant à une syntaxe spécifique, elle-même évaluée.
L'annexe sur Python, pourtant bien fournie, n'a sans doute pas été bien lue par certains candidats qui ont commis des erreurs simples comme ne pas utiliser la fonction `np.copy`.

Enfin, trop souvent, les questions ne sont pas lues de manière suffisamment attentive (notation choisie peu adaptée, écriture de fonctions qui ne renvoie pas les grandeurs demandées…). Ce sont autant de points qu'il est facile de ne pas perdre.

CONCOURS COMMUNS POLYTECHNIQUES

EPREUVE SPECIFIQUE - FILIERE PC

MODELISATION DE SYSTEMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

Jeudi 5 mai : 8 h - 12 h

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.

Les calculatrices sont autorisées

Détermination du coefficient de transfert d'un polluant dans une colonne d'absorption

I. Présentation du problème

Les procédés d'absorption sont souvent utilisés pour la dépollution des gaz. Ces procédés reposent sur l'absorption préférentielle du gaz polluant par un solvant et sont la plupart du temps mis en œuvre dans des colonnes d'absorption (figure 1). Lors du contact entre les deux phases (gazeuse et liquide), le polluant est transféré du gaz vers le solvant. On récupère un gaz purifié en sortie haute de colonne et le solvant chargé du polluant en pied de colonne.

Un exemple courant est l'absorption du dioxyde de carbone présent dans les gaz de combustion à l'aide d'un solvant aminé pour éviter de rejeter ce gaz à effet de serre directement dans l'atmosphère.

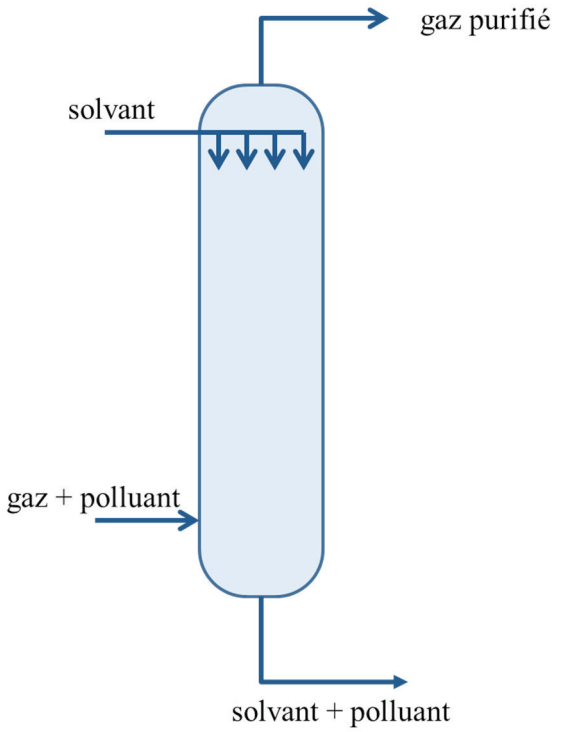


Figure 1 – Schéma d'une colonne d'absorption utilisée dans l'industrie pour la dépollution d'un gaz.

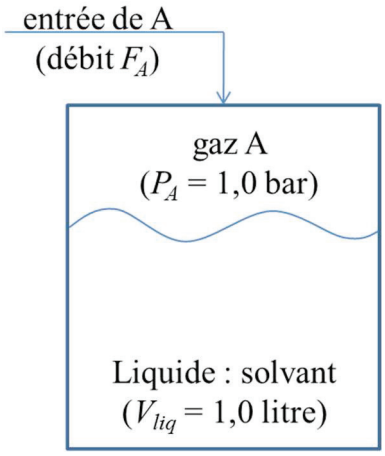
Pour dimensionner les colonnes d'absorption, on a besoin de connaître la conductance de transfert du polluant dans le solvant (notée k_L, unité : $m.s^{-1}$). Pour déterminer ce paramètre, on réalise une étude dans un réacteur de laboratoire dont les conditions de fonctionnement sont beaucoup plus simples et beaucoup mieux définies que dans une véritable colonne d'absorption. Le réacteur de laboratoire utilisé est un réacteur biphasique gaz-liquide.

Une des spécificités de ce réacteur est qu'il est alimenté par un débit variable de polluant qui est ajusté au cours du temps de manière à maintenir la pression de la phase gazeuse constante (figure 2, page 3). Au cours d'une expérience, on enregistre le débit molaire de polluant A qui entre dans le réacteur en fonction du temps. D'après la loi de Dalton, la pression totale est égale à la somme des pressions partielles des espèces dans la phase gazeuse. Comme A est seul dans la phase gazeuse, la pression totale P_{tot} est égale à la pression partielle de A, notée P_A. On suppose que le réacteur est isotherme.

La détermination directe de la conductance de transfert d'un polluant dans un solvant n'est pas aisée. On procède en deux étapes pour la déterminer :

- on détermine d'abord la valeur du produit $k_L \times a$, où a est l'aire interfaciale entre le liquide et le gaz par unité de volume de la phase liquide (unité de a : $m^2.m^{-3}$), grâce à une première expérience où le seul phénomène qui a lieu est l'absorption physique du polluant A dans le solvant ;

- on détermine ensuite les valeurs des deux paramètres k_L et a de manière indépendante grâce à une seconde expérience avec le même solvant mais qui contient cette fois-ci un réactif B qui réagit avec le gaz polluant A (absorption physique avec réaction chimique). On supposera que la réaction chimique en phase liquide s'écrit : $A + B \rightarrow produits$.



F_A : débit molaire de A qui entre dans le réacteur.

P_A : pression partielle de A dans la phase gazeuse.

V_{liq} : volume de la phase liquide (solvant).

Figure 2 – Schéma du réacteur de laboratoire utilisé pour la détermination de la conductance de transfert du polluant A.

On enregistre le débit molaire de A qui entre dans le réacteur en fonction du temps pour les deux expériences (sans réaction et avec réaction avec le réactif B). Les données se trouvent dans un fichier nommé « `data.txt` ». La première colonne correspond au temps (s). Les deuxième et troisième colonnes correspondent aux débits molaires de A enregistrés au cours des deux expériences (sans et avec réaction respectivement). Les colonnes sont séparées par des espaces (tableau 1, page 7).

II. Modélisation des phénomènes

Dans cette partie, on demande d'établir les modèles qui vont représenter l'évolution du débit molaire d'entrée F_A en fonction du temps. Les modèles sont obtenus en réalisant des bilans de matière.

II.1 Cas où le solvant ne contient pas le réactif B

Q1.1) On considère tout d'abord l'absorption du polluant A dans le solvant (cas où le solvant ne contient pas le réactif B). Le phénomène qui régit le transfert de A à l'interface entre les deux phases est la diffusion, phénomène localisé au niveau de la couche limite située à proximité de l'interface (zone délimitée par des pointillés sur la figure 3, page 4).

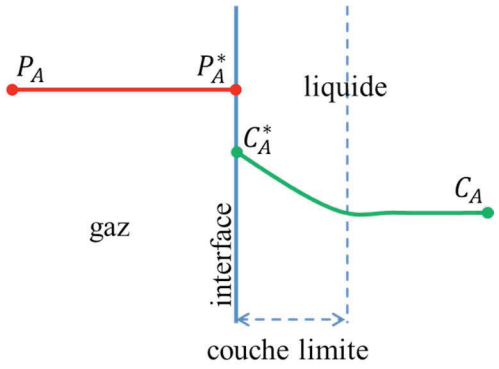


Figure 3 – Schéma représentant l'interface gaz – liquide.

La pression à l'interface P_A^* est égale à la pression partielle P_A dans la phase gazeuse car le polluant A est seul dans cette phase. La pression dans la phase gazeuse est maintenue constante ($P_A = P_A^* = 1{,}0$ bar). A l'interface, la loi de Henry permet de relier la pression P_A^* et la concentration C_A^*. D'après cette loi, la concentration de gaz dissous dans un liquide est proportionnelle à la pression partielle du gaz en contact avec le liquide à l'équilibre thermodynamique et à température constante.

Calculer la valeur de la concentration C_A^* en mol.m^{-3} à partir de la loi de Henry. On donne la constante de Henry pour A : $H = 26{,}0$ bar.L.mol^{-1}. On pourra s'appuyer sur l'analyse dimensionnelle pour écrire la loi de Henry.

Q1.2) Le débit molaire F_A^* qui traverse l'interface gaz-liquide vers le solvant s'écrit : $k_L \times a \times (C_A^* - C_A) \times V_{liq}$, où C_A^* est la concentration du polluant à l'interface, C_A est la concentration de A dans le solvant (figure 3) et V_{liq} le volume de la phase liquide.

Vérifier que l'expression $k_L \times a \times (C_A^* - C_A) \times V_{liq}$ est bien homogène à un débit molaire.

Q1.3) Sachant qu'à l'instant initial la concentration C_A de A dans la phase liquide est nulle, expliquer qualitativement comment C_A va évoluer au cours du temps. Préciser le signe du terme $k_L \times a \times (C_A^* - C_A) \times V_{liq}$.

Q1.4) On considère que la phase gazeuse se comporte comme un réacteur ouvert parfaitement agité en régime permanent (il n'y a donc pas d'accumulation de A dans cette phase) dans lequel il n'y a pas de réaction (le gaz ne fait que transiter dans cette partie du réacteur). On précise que les grandeurs intensives (température, pression, concentration) dans un réacteur ouvert parfaitement agité sont identiques en tout point.

Ecrire le bilan de matière sur le polluant A dans la phase gazeuse. Préciser le terme d'entrée et le terme de sortie intervenant dans le bilan de matière.

Q1.5) La phase liquide est modélisée par un réacteur semi-fermé parfaitement agité fonctionnant en régime transitoire. Ce type de réacteur peut être considéré comme un réacteur fermé parfaitement agité (contenant initialement le solvant dans le cas présent) possédant une entrée permettant l'ajout d'une espèce au cours du temps (le polluant A dans le cas présent).

Pour simplifier le problème, on suppose que le volume de la couche limite (zone à proximité de l'interface dans laquelle on observe un gradient de concentration du polluant dû à sa diffusion de l'interface vers la phase liquide, figure 3, page 4) est très faible et que la concentration de A dans la phase liquide est homogène. En d'autres termes, on considère que la concentration de A passe instantanément de C_A^*, à l'interface, à C_A dans la phase liquide comme indiqué sur le schéma de la figure 4.

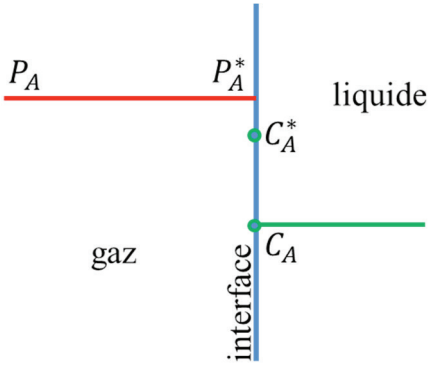


Figure 4 – Schéma simplifié de l'interface gaz–liquide.

Ecrire le bilan de matière sur le polluant A dans la phase liquide. Préciser le terme d'entrée et le terme d'accumulation.

Q1.6) Simplifier le bilan en considérant que le volume de la phase liquide reste constant au cours du temps.

Q1.7) Résoudre l'équation différentielle obtenue à la question précédente en considérant que la concentration initiale de A dans la phase liquide est nulle. On pourra effectuer un changement de variable.

Q1.8) Donner l'expression de la concentration de A en fonction du temps. Vérifier que C_A évolue bien de la manière prévue à la question **Q1.3)**, page 4.

Q1.9) Etablir l'expression du débit molaire F_A en fonction du temps. Vérifier l'homogénéité de la relation.

Q1.10) Préciser vers quelle valeur tend le débit molaire F_A pour des temps importants et indiquer vers quelle valeur tend la concentration C_A dans ce cas.

II.2 Cas où le réactif B est présent dans le solvant

Q2.1) On considère maintenant le cas où le réactif B est présent dans le solvant (à la concentration initiale C_{B0} de 1 000,0 mol.m^{-3}) et où il y a réaction entre A et B dans la phase liquide. Pour simplifier, on suppose que le réactif B ne passe pas dans la phase gazeuse (figure 5, page 6). On suppose également que la phase liquide est parfaitement agitée et que le volume reste constant. On précise que, comme dans le cas précédent, la concentration C_A de A dans la phase liquide est nulle à l'instant initial.

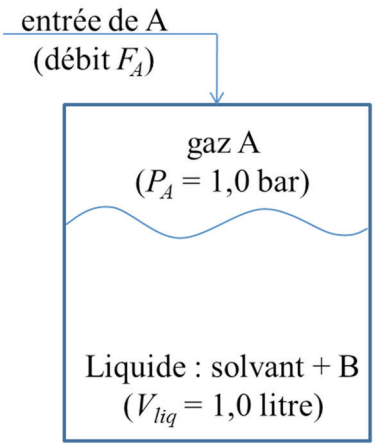


Figure 5 – Schéma du réacteur dans le cas de la deuxième expérience.

Le bilan de matière sur la phase gazeuse est-il modifié ? Justifier.

Q2.2) Des études préalables ont montré que la vitesse apparente de la réaction dans la phase liquide (notée r_{app}) est impactée par les phénomènes de diffusion de A dans la couche limite et qu'elle peut s'écrire sous la forme $r_{app} = a \times C_A^* \times \sqrt{D_A \times k \times C_B}$ pour une réaction d'ordre un par rapport à chacun des deux réactifs. D_A est la diffusivité de A dans la phase liquide ($1{,}83 \times 10^{-9}$ m^2.s^{-1}), k est la constante cinétique vraie de la réaction entre A et B (k = 0,10 m^3.mol^{-1}.s^{-1}) et C_B est la concentration de B dans la phase liquide.

Indiquer la dimension de r_{app}. Préciser son unité dans le système SI.

Q2.3) Ecrire le nouveau bilan de matière sur A dans la phase liquide en prenant en compte le nouveau terme correspondant à la réaction chimique (on fera particulièrement attention au signe).

Q2.4) Simplifier le bilan en considérant que le volume de la phase liquide reste constant.

Q2.5) Ecrire le bilan de matière sur B dans la phase liquide en considérant que la phase liquide est un réacteur fermé parfaitement agité.

Q2.6) Simplifier ce bilan en considérant que le volume de la phase liquide reste constant.

Q2.7) Donner le système de deux équations différentielles ordinaires qui régit l'évolution des concentrations de A et de B dans la phase liquide en fonction du temps.

III. Traitement numérique des données expérimentales

Dans cette partie, on propose de comparer les modèles établis dans la partie II aux résultats expérimentaux pour déterminer la valeur de l'aire interfaciale a et celle du coefficient de transfert k_L en utilisant des outils numériques.

Les portions de programme demandées au candidat peuvent être réalisées dans le langage Python ou dans le langage Scilab. Cependant, toutes les questions seront traitées dans le même langage. On veillera à apporter les commentaires suffisants à la compréhension du programme et utiliser des noms de variables explicites. Il est demandé de répondre précisément aux questions posées (par exemple, on écrira une fonction uniquement lorsque cela est explicitement demandé). Des annexes sont disponibles à la fin de l'énoncé.

III.1 Détermination de la valeur du produit $k_L \times a$

Dans cette partie, on va déterminer la valeur du produit $k_L \times a$ à partir des données expérimentales enregistrées en l'absence de réaction dans la phase liquide. Si l'expression du débit molaire de A demandée à la question **Q1.9)**, page 5, n'a pas été trouvée, on utilisera la notation formelle suivante pour écrire le code : $F_A = f(t, (k_L \times a))$.

Q3.1) Les données expérimentales sont disponibles sous forme d'un fichier texte nommé « `data.txt` » dans lequel les informations sont présentées sous forme de colonnes (tableau 1). La première colonne du fichier correspond au temps (unité : s), la deuxième au débit molaire de A (unité : mol.s^{-1}) entrant dans le réacteur enregistré au cours de la première expérience (cas de l'absorption dans le solvant sans réaction) et la troisième colonne au débit molaire de A (unité : mol.s^{-1}) entrant dans le réacteur enregistré au cours de la seconde expérience (en présence du réactif B).

```
00.0 1.9231E-04 1.9230E-04
10.0 1.8293E-04 1.9108E-04
20.0 1.7401E-04 1.8991E-04
30.0 1.6552E-04 1.8878E-04
40.0 1.5745E-04 1.8771E-04
50.0 1.4977E-04 1.8667E-04
```

Tableau 1 – Données expérimentales contenues dans le fichier « `data.txt` ».

Q3.1.a) Indiquer la syntaxe à utiliser pour charger le fichier « `data.txt` » qui contient les données expérimentales. Donner le code permettant de créer trois vecteurs t^{exp}, F_A^{exp1} et F_A^{exp2} correspondant respectivement aux données des première, deuxième et troisième colonnes. Donner également le code qui permet de déterminer le nombre de points expérimentaux n.

Q3.1.b) Donner la syntaxe permettant de tracer sur un graphe l'évolution du débit molaire de A en fonction du temps dans le cas où seul le phénomène d'absorption physique est étudié.

Q3.2) On souhaite déterminer la valeur du produit $k_L \times a$ grâce au modèle établi à la question **Q1.9)**, page 5, par une méthode d'optimisation numérique de paramètres. La méthode utilisée est celle des moindres carrés. Il s'agit d'une méthode qui permet de comparer des données expérimentales à un modèle mathématique la plupart du temps issu d'une théorie.

Dans le cas présent, le modèle mathématique correspond à l'expression du débit molaire F_A, que l'on notera F_A^{th1} par la suite, déterminé à la question **Q1.9)**, page 5. Ce débit molaire est une fonction du temps t et du produit $k_L \times a$ que l'on souhaite déterminer. La méthode des moindres carrés donne la valeur optimale du produit $k_L \times a$ qui permet de calculer un débit molaire théorique F_A^{th1} représentant le mieux le débit molaire expérimental F_A^{exp1}. Cette valeur optimale est celle qui permet de minimiser la somme quadratique des déviations des mesures aux prédictions. Cette somme, notée $S(k_L \times a)$, peut se mettre sous la forme suivante :

$$S(k_L \times a) = \sum_{i=1}^{n} \left(F_{Ai}^{exp1} - F_{Ai}^{th1}(k_L \times a) \right)^2$$

avec n le nombre de points expérimentaux, i l'indice correspondant au point expérimental enregistré au temps t_i^{exp} $(1 \leq i \leq n)$, F_{Ai}^{exp1} le débit molaire expérimental obtenu au temps t_i^{exp} et $F_{Ai}^{th1}(k_L \times a)$ le débit molaire théorique calculé au temps t_i^{exp} grâce au modèle établi à la question **Q1.9)**, page 5.

Ecrire une fonction `smc(kla,t_exp,Fa_exp1)` qui retourne la valeur de la quantité S. Cette fonction aura comme argument d'entrée le produit $k_L \times a$ et les vecteurs t^{exp} et F_A^{exp1} créés à la question **Q3.1.a)**, page 7.

Q3.3) Une des méthodes utilisées pour trouver le minimum d'une fonction f est celle proposée par Nelder-Mead. Il s'agit d'un algorithme d'optimisation non linéaire basé sur le concept de simplexe à $n + 1$ sommets dans un espace à n dimensions. Dans le cas d'une fonction d'une variable $(n = 1)$, un simplexe est un segment.

L'algorithme de Nelder-Mead est une procédure itérative. Partant d'un segment initial $[MN]$, l'algorithme va générer une succession de segments par des transformations simples au cours des itérations : le segment se déplace et se réduit jusqu'à ce que ses extrémités se rapprochent d'un point où la fonction présente un minimum (ce minimum peut être un minimum local).

Soient x_M et x_N les abscisses des points M et N. Les transformations subies par le segment (illustrées à la figure 6, page 9) sont basées sur la comparaison des valeurs de la fonction f aux extrémités du segment.

- La première étape consiste à réindexer si nécessaire les deux extrémités du segment de manière à ce que $f(x_M) \leq f(x_N)$.
- L'extrémité N pour laquelle la fonction f est maximale est remplacée par une nouvelle extrémité. On introduit alors le point R, réflexion de N par rapport à M, tel que $x_R = x_M + (x_M - x_N)$.
- Si $f(x_R) < f(x_M)$, le segment est étiré dans cette direction (car la réflexion se rapproche du minimum). On introduit un point E (étirement du segment) tel que $x_E = x_M + 2(x_M - x_N)$ qui permet éventuellement de se rapprocher encore un peu plus du minimum. Le point N est substitué par le point R si $f(x_R) < f(x_E)$, sinon par E.
- Si $f(x_R) > f(x_M)$, le segment est réduit dans la direction opposée de la réflexion (car la réflexion s'éloigne du minimum). On introduit le point C_1 (contraction du segment) qui est défini par $x_{C_1} = x_N + 1/2\,(x_M - x_N)$. Si $f(x_{C_1}) < f(x_M)$, N est remplacé par C_1. Sinon N est remplacé par C_2, homothétie de rapport -1 et de centre M du point C_1 $(x_{C_2} = x_M + 1/2\,(x_M - x_N))$.

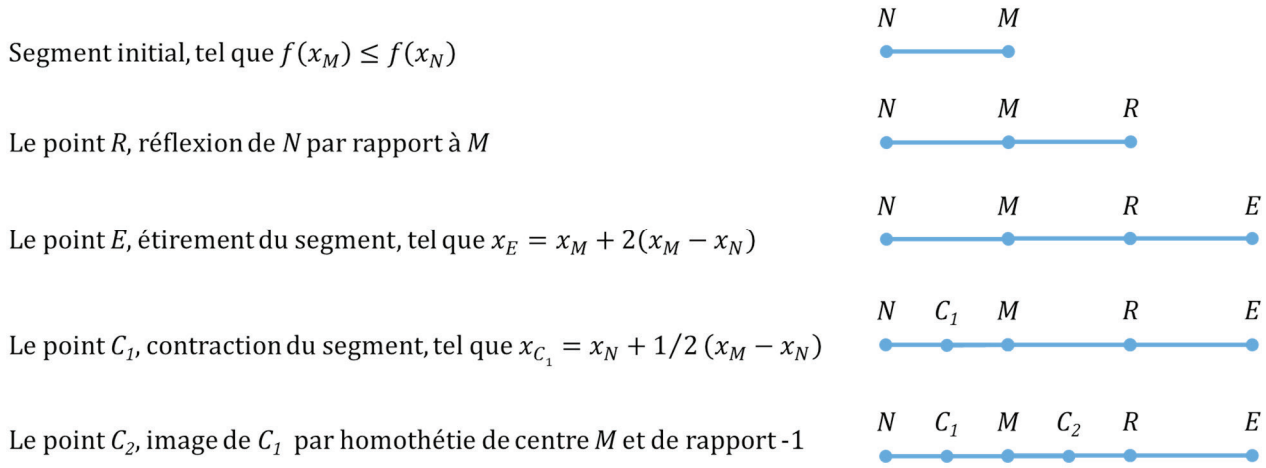


Figure 6 – Illustration des transformations subies par le segment initial $[MN]$ dans la méthode d'optimisation de Nelder-Mead.

Q3.3.a) Soit $f(x)$ une fonction dont on cherche le minimum. Soient x_M et x_N les abscisses des extrémités d'un segment $[MN]$. Ecrire le code permettant de réindexer les deux extrémités du segment de manière à ce que $f(x_M)$ soit inférieure ou égale à $f(x_N)$.

Q3.3.b) Partant du segment $[MN]$ réindexé, écrire le code permettant de transformer le segment $[MN]$ au cours d'une itération de la méthode de Nelder-Mead. Chaque étape du code devra être commentée.

Q3.3.c) Construire une boucle permettant de réaliser des itérations successives de la méthode de Nelder-Mead. On prendra $x_M^0 = 1$ et $x_N^0 = 10^{-5}$ pour les abscisses des deux extrémités du segment initial $[MN]$. Cette boucle sera interrompue lorsque l'écart relatif $abs\left(\frac{x_M - x_N}{x_M}\right)$ sera inférieur à 10^{-4} ou lorsque le nombre maximum d'itérations, fixé par l'utilisateur, sera atteint soit $Itmax = 1\,000$.

Q3.4) La méthode de Nelder-Mead appliquée à la fonction $S(k_L \times a)$ conduit à $(k_L \times a)_{opt} = 5{,}0 \times 10^{-3}$. Donner le code permettant de calculer le débit molaire théorique grâce à la valeur optimisée du produit $(k_L \times a)_{opt}$.

Q3.5) Indiquer la syntaxe à utiliser pour comparer sur un même graphe les débits molaires théorique et expérimental. Expliquer l'intérêt de comparer la courbe théorique et les points expérimentaux.

Q3.6) On souhaite développer un algorithme de tri permettant de réindexer les sommets d'un simplexe à $p + 1$ sommets ($X = \{x_1, x_2, \ldots x_{p+1}\}$) dans le cadre de la généralisation de la méthode de Nelder-Mead appliquée à une fonction quelconque $z(x)$ de p variables ($x \in \mathbb{R}^p$). On propose d'utiliser la méthode du tri par sélection pour réindexer les sommets du simplexe de sorte que les valeurs que prend la fonction $z(x)$ en chaque sommet du simplexe soient classées de manière croissante.

La méthode du tri par sélection repose sur la recherche du plus petit élément d'une liste. Une fois identifié, on échange cet élément avec le premier élément de la liste. Il s'agit d'une procédure itérative (figure 7). Lors de la première itération, on échange le premier élément (i = 1) avec le plus petit de la liste. Lors de la i^e itération, on échange le i^e élément par le plus petit élément en ne considérant que ceux à partir de la i^e position.

Vecteur initial	10	2	- 3	5	- 1	20	60	48	- 15	9
1re itération	**- 15**	2	- 3	5	- 1	20	60	48	**10**	9
2e itération	*- 15*	**- 3**	**2**	5	- 1	20	60	48	10	9
3e itération	*- 15*	*- 3*	**- 1**	5	**2**	20	60	48	10	9

Figure 7 – Représentation schématique des trois premières itérations de la méthode de tri par sélection.

Ecrire le code permettant de réindexer les sommets du simplexe $X = \{x_1, x_2, \dots x_{p+1}\}$ de sorte que les valeurs que prend la fonction $z(x)$ en chaque sommet du simplexe soient classées de manière croissante. On supposera que la fonction $z(x)$ est déjà définie.

III.2 Détermination des valeurs de a et k_L

Dans cette partie, on souhaite déterminer la valeur de l'aire interfaciale a en comparant les débits molaires expérimentaux obtenus lors de la deuxième expérience (en présence du réactif B dans le solvant) avec le débit molaire théorique calculé à partir du modèle établi à la question **Q2.7)**, page 6. Ce modèle est un système de deux équations différentielles ordinaires que l'on peut écrire sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \dfrac{dC_A}{dt} = g\big(t, C_A, C_B, a, (k_L \times a)\big) \\ \dfrac{dC_B}{dt} = h(t, C_A, C_B, a) \end{cases}$$

La fonction g est une fonction du produit $k_L \times a$ dont la valeur a été déterminée grâce à la première expérience ($(k_L \times a)_{opt}$ = 5,0 × 10^{-3} s^{-1}), du temps t, des concentrations C_A et C_B de A et B dans le solvant et de l'aire interfaciale a. La fonction h est une fonction du temps t, des concentrations C_A et C_B de A et B dans le solvant et de l'aire interfaciale a.

On propose d'utiliser la méthode d'Euler pour résoudre le système d'équations différentielles.

Q3.7) Ecrire deux fonctions `G(t,CA,CB,A,kla)` et `H(t,CA,CB,A)` permettant de calculer les valeurs des fonctions $g\big(t, C_A, C_B, a, (k_L \times a)\big)$ et $h(t, C_A, C_B, a)$.

Q3.8) La méthode utilisée pour résoudre le système d'équations différentielles est la méthode d'Euler à pas fixe. On note t_0 le temps initial, t_f le temps final d'intégration et Δt le pas d'intégration.

Q3.8.a) Soient n le nombre d'expériences réalisées et Δt^{exp} l'intervalle de temps entre deux mesures expérimentales successives du débit molaire du polluant A. Pour réaliser la comparaison entre les débits molaires théoriques et expérimentaux, on ne s'intéresse qu'aux valeurs du débit molaire théorique F_{Ai}^{th2} aux instants particuliers $t_i^{exp} = \Delta t^{exp} \times i$ avec i variant de 1 à n.

La méthode d'Euler ne permet d'obtenir un résultat correct que si le pas d'intégration, Δt, est suffisamment faible. Par conséquent, on souhaite utiliser un pas d'intégration Δt cent fois plus petit que l'intervalle de temps entre deux mesures expérimentales Δt^{exp}. Le temps d'intégration est donc discrétisé en intervalles de durée Δt et les valeurs des concentrations C_A et C_B sont calculées aux instants particuliers $t_j = \Delta t \times j$ avec j variant de 0 à m.

Donner la syntaxe permettant de calculer le pas de temps Δt ainsi que le nombre d'intervalles m (m est un nombre entier) en fonction de t_0 (le premier élément du vecteur t^{exp}), t_f (le dernier élément du vecteur t^{exp}) et Δt^{exp} (l'intervalle de temps entre deux mesures expérimentales successives du débit molaire).

Q3.8.b) Donner une expression de $C_A(t + \Delta t)$ à l'ordre 1 ($o(\Delta t)$) en fonction de C_A et $\frac{dC_A}{dt}$ évaluées en t à l'aide d'un développement limité de la fonction $t \mapsto C_A(t)$.

Q3.8.c) En déduire une valeur approchée de $\left.\frac{dC_A}{dt}\right|_t$ à l'ordre 0 ($o(1)$) en fonction de $C_A(t)$, $C_A(t + \Delta t)$ et Δt. Faire de même pour donner une valeur approchée de $\left.\frac{dC_B}{dt}\right|_t$ à l'ordre 0 ($o(1)$) en fonction de $C_B(t)$, $C_B(t + \Delta t)$ et Δt.

Q3.8.d) On note C_{Aj} et C_{Bj} les concentrations $C_A(t_j)$ et $C_B(t_j)$. De même, on note C_{Aj+1} et C_{Bj+1} les concentrations $C_A(t_{j+1})$ et $C_B(t_{j+1})$. Donner une expression de la dérivée par rapport au temps de C_A évaluée à l'instant t_j, notée $\left.\frac{dC_A}{dt}\right|_{t_j}$, en fonction de Δt, C_{Aj} et C_{Aj+1}. De même, donner une expression de la dérivée par rapport au temps de C_B évaluée à l'instant t_j, notée $\left.\frac{dC_B}{dt}\right|_{t_j}$, en fonction de Δt, C_{Bj} et C_{Bj+1}.

Q3.8.e) Donner le système de deux équations permettant de calculer C_{Aj+1} et C_{Bj+1} en fonction de $C_{Aj}, C_{Bj}, \Delta t, g\left(t_j, C_{Aj}, C_{Bj}, a, (k_L \times a)\right)$ et $h(t_j, C_{Aj}, C_{Bj}, a)$.

Q3.8.f) Ecrire une fonction `Euler(G,H,t0,tf,CA0,CB0,Dt,m,a,kla)` qui retourne deux vecteurs : le vecteur temps et le vecteur correspondant à la concentration C_A calculée par la méthode d'Euler.

Q3.9) On souhaite utiliser la méthode des moindres carrés pour déterminer la valeur optimale de l'aire interfaciale a en utilisant une stratégie similaire à celle utilisée pour obtenir la valeur optimisée du produit $(k_L \times a)$. Pour cela, on a besoin de connaître les valeurs du débit molaire de A F_{Ai}^{th2} calculé aux instants particuliers $t_i^{exp} = \Delta t^{exp} \times i$ avec i variant de 1 à n.

Donner le code permettant de créer un vecteur F_A^{th2} contenant les valeurs du débit molaire de A calculé aux instants particuliers t_i^{exp} à partir des valeurs de la concentration de A (C_A^{th2}) calculées en utilisant la fonction `Euler` de la question **Q3.8.f)**.

Q3.10) La valeur optimale de l'aire interfaciale a est celle qui permet de minimiser la fonction $S_2(a)$ qui peut se mettre sous la forme suivante :

$$S_2(a) = \sum_{i=1}^{n} \left(F_{Ai}^{exp2} - F_{Ai}^{th2}(a) \right)^2$$

avec F_{Ai}^{exp2} le débit molaire expérimental obtenu au temps t_i^{exp}, $F_{Ai}^{th2}(a)$ le débit molaire théorique calculé au temps t_i^{exp} (question **Q3.9)**, page 11) et n le nombre de points expérimentaux.

Donner le code permettant de construire une fonction `smc2(a,t_exp,Fa_exp2)` qui retourne la valeur de la quantité S_2. Cette fonction aura comme argument d'entrée l'aire interfaciale a et les vecteurs t^{exp} et F_A^{exp2} créés à la question **Q3.1.a)**, page 7.

Q3.11) La méthode de Nelder-Mead appliquée à la fonction $S_2(a)$ conduit à a_{opt} = 10,0 $m^2.m^{-3}$. Indiquer le code pour calculer le coefficient de transfert k_L et afficher les valeurs de a_{opt} et k_L à l'écran.

III.3 Utilisation du modèle pour réaliser des simulations

Maintenant que l'on connaît les valeurs des paramètres a et k_L, on souhaite utiliser le modèle pour réaliser des prédictions. On propose d'étudier l'influence de la concentration initiale C_{B0} du réactif B dans la phase liquide sur le débit molaire en entrée du réacteur (F_A^{th2}).

Q3.12) Expliquer qualitativement comment doit varier le débit molaire en entrée du réacteur avec la concentration initiale du réactif B.

Q3.13) Justifier le concept « d'accélération du transfert par la réaction chimique ».

Q3.14) Ecrire le code qui permettrait de réaliser une prédiction du débit molaire F_A^{th} à l'aide du modèle et des paramètres optimisés (k_L et a) en prenant C_{B0} comme valeur pour la concentration initiale du réactif B, une valeur rentrée par l'utilisateur (unité : $mol.m^{-3}$). On prendra le même pas Δt que précédemment et comme durée d'intégration 1 000 s.

Q3.15) On souhaite calculer la quantité de matière de polluant A, n_A, à partir du débit molaire F_A^{th} obtenu à la question précédente par intégration sur l'intervalle 0 – 1 000 s. La méthode utilisée pour réaliser l'intégration est la méthode des trapèzes. Donner le code permettant de calculer n_A par cette méthode.

ANNEXE A : COMMANDES ET FONCTIONS USUELLES DE SCILAB

A=[a b c d;e f g h;i j k l]

Description : commande permettant de créer une matrice dont la première ligne contient les éléments a, b, c, d, la seconde ligne contient les éléments e, f, g, h et la troisième, les éléments i, j, k, l.

Exemple : A=[1 2 3 4 5;3 10 11 12 20;0 1 0 0 2]

⇨ 1. 2. 3. 4. 5.
3. 10. 11. 12. 20.
0. 1. 0. 0. 2.

A(i,j)

Description : fonction qui retourne l'élément (i, j) de la matrice A. Pour accéder à l'intégralité de la ligne i de la matrice A, on écrit $A(i,:)$. De même, pour obtenir toute la colonne j de la matrice A, on utilise la syntaxe $A(:,j)$.

Arguments d'entrée : les coordonnées de l'élément dans la matrice A.

Argument de sortie : l'élément (i, j) de la matrice A.

Exemple : A=[1 2 3 4 5;3 10 11 12 20;0 1 0 0 2]
A(2,4)
⇨ 12
A(2,:)
⇨ 3. 10. 11. 12. 20.
A(:,3)
⇨ 3.
11.
0.

x=[x1:Dx:x2]

Description : commande permettant de créer un vecteur dont les éléments sont espacés de Dx et dont le premier élément est x_1 et le dernier élément est le plus grand multiple de Dx inférieur ou égal à x_2.

ATTENTION : le vecteur ainsi créé est un vecteur ligne. Pour convertir un vecteur ligne en un vecteur colonne, on le transpose en utilisant l'apostrophe « ' » : x_trans=x'.

Exemple *:* x=[2:0.5:4.2]

⇨ 2. 2.5 3. 3.5 4.
x_trans=x'
⇨ 2.
2.5
3.
3.5
4.

zeros(n,m)

Description : fonction créant une matrice (tableau) de dimensions $n \times m$ dont tous les éléments sont nuls.

Arguments d'entrée : deux entiers n et m correspondant aux dimensions de la matrice à créer.

Argument de sortie : un tableau (matrice) d'éléments nuls.

Exemple : zeros(3,4)

⇨ 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0.

plot(x,y)

Description : fonction permettant de tracer sur un graphique n points dont les abscisses sont contenues dans le vecteur x et les ordonnées dans le vecteur y.
Arguments d'entrée : un vecteur d'abscisses x (tableau de dimension n) et un vecteur d'ordonnées y (tableau de dimension n).
Exemple :
```
x= [3:0.1:5]
y=sin(x)
plot(x,y)
```

read("nom_fichier",m,n)

Description : fonction permettant de lire les données sous forme de matrice dans un fichier texte et de les stocker dans une matrice.
Arguments d'entrée : un nom de fichier contenant des données sous forme de matrice de dimension (m,n) et les dimensions de la matrice m (nombre de lignes) et n (nombre de colonnes). On prend m = −1 si le nombre de lignes n'est pas connu a priori.
Exemple :
```
data= read("fichier.txt",−1,2)
//dans cet exemple, data est une matrice constituée des deux premières
//colonnes se trouvant dans le fichier nommé fichier.txt.
```

sum(x)

Description : fonction permettant de faire la somme des éléments d'un vecteur ou tableau
Arguments d'entrée : un vecteur ou un tableau de réels, entiers ou complexes.
Argument de sortie : un scalaire y qui est la somme des éléments de x.
Exemple :
```
y= sum(x)
//y retourne la somme des éléments de x.
```

ANNEXE B : FONCTIONS DE PYTHON

B.1. BIBLIOTHEQUE NUMPY DE PYTHON

Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque numpy a préalablement été importée à l'aide de la commande : **import numpy as np**

On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

np.array(liste)

Description : fonction permettant de créer une matrice (de type tableau) à partir d'une liste.
Argument d'entrée : une liste définissant un tableau à 1 dimension (vecteur) ou 2 dimensions (matrice).
Argument de sortie : un tableau (matrice).
Exemple :
```
np.array([4,3,2])
⇨ [4 3 2]
np.array([[5],[7],[1]])
⇨ [[5]
   [7]
   [1]]
np.array([[3,4,10],[1,8,7]])
⇨ [[3 4 10]
   [1 8 7]]
```

$A[i,j]$.

Description : fonction qui retourne l'élément $(i+1, j+1)$ de la matrice A. Pour accéder à l'intégralité de la ligne i+1 de la matrice A, on écrit $A[i,:]$. De même, pour obtenir toute la colonne j+1 de la matrice A, on utilise la syntaxe $A[:,j]$.
Arguments d'entrée : une liste contenant les coordonnées de l'élément dans le tableau A.
Argument de sortie : l'élément $(\mathrm{i}+1, \mathrm{j}+1)$ de la matrice A.
ATTENTION : en langage Python, les lignes d'un tableau A de dimension $n \times m$ sont numérotées de 0 à $n-1$ et les colonnes sont numérotées de 0 à $m-1$
Exemple : A=np.array([[3,4,10],[1,8,7]])
A[0,2]
⇨ 10
A[1,:]
⇨ [1 8 7]
A[:,2]
⇨ [10 7]

np.zeros((n,m))

Description : fonction créant une matrice (tableau) de dimensions $n \times m$ dont tous les éléments sont nuls.
Arguments d'entrée : un tuple de deux entiers correspondant aux dimensions de la matrice à créer.
Argument de sortie : un tableau (matrice) d'éléments nuls.
Exemple : np.zeros((3,4))
⇨ [[0 0 0 0]
[0 0 0 0]
[0 0 0 0]]

np.linspace(Min,Max,nbElements)

Description : fonction créant un vecteur (tableau) de $nbElements$ nombres espacés régulièrement entre Min et Max. Le 1er élément est égal à Min, le dernier est égal à Max et les éléments sont espacés de $(Max - Min)/(nbElements - 1)$:
Arguments d'entrée : un tuple de 3 entiers.
Argument de sortie : un tableau (vecteur).
Exemple : np.linspace(3,25,5)
⇨ [3 8.5 14 19.5 25]

np.loadtxt('nom_fichier',delimiter='string',usecols=[n])

Description : fonction permettant de lire les données sous forme de matrice dans un fichier texte et de les stocker sous forme de vecteurs.
Arguments d'entrée : le nom du fichier qui contient les données à charger, le type de caractère utilisé dans ce fichier pour séparer les données (par exemple un espace ou une virgule) et le numéro de la colonne à charger (ATTENTION, la première colonne porte le numéro 0).
Argument de sortie : un tableau.
Exemple : data=np.loadtxt('fichier.txt',delimiter=' ',usecols=[0])
#dans cette exemple data est un vecteur qui correspond à la première
#colonne de la matrice contenue dans le fichier fichier.txt

B.2. BIBLIOTHEQUE MATPLOTLIB.PYPLOT DE PYTHON

Cette bibliothèque permet de tracer des graphiques. Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque matplotlib.pyplot a préalablement été importée à l'aide de la commande :
import matplotlib.pyplot as plt

On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

plt.plot(x,y)

Description : fonction permettant de tracer un graphique de n points dont les abscisses sont contenues dans le vecteur x et les ordonnées dans le vecteur y. Cette fonction doit être suivie de la fonction **plt.show()** pour que le graphique soit affiché.
Arguments d'entrée : un vecteur d'abscisses x (tableau de dimension n) et un vecteur d'ordonnées y (tableau de dimension n).
Argument de sortie : un graphique.
Exemple :

```
x= np.linspace(3,25,5)
y=sin(x)
plt.plot(x,y)
plt.title('titre_graphique')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```

plt.title('titre')

Description : fonction permettant d'afficher le titre d'un graphique.
Argument d'entrée : une chaîne de caractères.

plt.xlabel('nom')

Description : fonction permettant d'afficher le contenu de nom en abscisse d'un graphique.
Argument d'entrée : une chaîne de caractères.

plt.ylabel('nom')

Description : fonction permettant d'afficher le contenu de nom en ordonnée d'un graphique.
Argument d'entrée : une chaîne de caractères.

plt.show()

Description : fonction réalisant l'affichage d'un graphe préalablement créé par la commande **plt.plot(x,y)**. Elle doit être appelée après la fonction plt.plot et après les fonctions plt.xlabel et plt.ylabel.

B.3. FONCTION INTRINSEQUE DE PYTHON

sum(x)

Description : fonction permettant de faire la somme des éléments d'un vecteur ou tableau.
Arguments d'entrée : un vecteur ou un tableau de réel, entier ou complexe.
Argument de sortie : un scalaire y qui est la somme des éléments de x.
Exemple :

```
y= sum(x)
 //y retourne la somme des éléments de x.
```

FIN

CONCOURS COMMUNS POLYTECHNIQUES

RAPPORT SUR L'EPREUVE ECRITE 2016 DE MODELISATION DE SYSTEMES PHYSIQUE OU CHIMIQUE DE LA FILIERE PC

1/ REMARQUES GENERALES

a) Présentation du sujet

Le sujet portait sur la détermination du coefficient de transfert d'un polluant dans une colonne d'absorption utilisée pour la dépollution des gaz.
La première partie donnait une description du problème posé : à savoir, la détermination de cette grandeur physico-chimique dans un réacteur de laboratoire avec deux phases (phase gazeuse et phase liquide) modélisées par des réacteurs idéaux simples et traités en cours (réacteurs ouvert et fermé). La détermination du coefficient de transfert d'un polluant se fait en deux étapes. Lors de la première, la phase liquide est uniquement constituée d'un solvant qui va absorber le polluant et l'exploitation des résultats (évolution du débit molaire de polluant absorbé en fonction du temps) permet de remonter à la valeur du produit du coefficient de transfert et de l'aire interfaciale. Lors de la deuxième étape, le solvant contient un réactif qui va réagir avec le polluant, ce qui a pour effet d'accélérer le transfert. Ceci permet de remonter à la valeur de l'aire interfaciale, puis à celle du coefficient de transfert du polluant.
La deuxième partie consistait en la mise en équation du problème par écriture de bilans de matière en réacteurs idéaux (réacteurs fermé et ouvert). En l'absence de réactif dans le solvant, on obtenait par intégration du bilan de matière l'expression théorique du débit molaire de polluant absorbé en fonction du temps. En présence du réactif, le modèle obtenu était un système de deux équations différentielles ordinaires.
La troisième partie portait sur le traitement numérique des données expérimentales (évolution du débit molaire de polluant absorbé en fonction du temps) à l'aide des bilans de matière établis dans la partie précédente pour déterminer les valeurs du produit du coefficient de transfert et de l'aire interfaciale. Dans un premier temps, la valeur du produit du coefficient de transfert et de l'aire interfaciale a été déterminée par une méthode d'optimisation numérique de paramètres (la méthode des moindres carrés) avec recherche du minimum de la somme quadratique des déviations des mesures aux prédictions grâce à l'algorithme de Nelder-Mead. Cette méthode faisait appel à un algorithme de tri. Dans un second temps, la valeur de l'aire interfaciale a été déterminée par une stratégie similaire (méthode des moindres carrés). Cette fois-ci, le modèle était un système de deux équations différentielles dont la résolution a été réalisée par la méthode d'Euler vue en cours. Dans un troisième temps, le modèle et les paramètres optimisés ont été utilisés pour réaliser des prédictions.

Le sujet était de difficulté moyenne et faisait appel à des notions transversales et complémentaires de chimie, de physique, de mathématiques et d'informatique. Les parties étaient rédigées de manière indépendante pour ne pas bloquer les candidats qui auraient pu être en difficultés 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 et de Scilab 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) Prestation des candidats

Le langage informatique utilisé a été uniquement Python.

Les codes fournis dans les copies par les candidats étaient parfois difficiles à lire en raison de la présentation (mal écrit, code sur plusieurs pages, pas de couleur, pas de commentaires).

Les notations de l'énoncé ne sont pas toujours respectées, ce qui complique la correction.
Certains candidats font la confusion entre langage mathématique et langage informatique, voire mélangent les deux, ce qui complique la correction. Les indentations sont parfois oubliées.

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

Certains candidats ont pris la liberté de donner un algorithme de tri qui était différent de celui demandé dans le sujet, ne répondant ainsi pas à la question posée.

Les dernières questions ont souvent été abordées dans l'esprit d'obtenir un maximum de points.

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 SPECIFIQUES

- Partie II : Modélisation des phénomènes
  - Le passage d'une unité à l'autre (mol/L → mol/m^3) pose souvent problème.
  - Il y a une confusion entre dimension et unité.
  - Le bilan en réacteur ouvert en régime permanent n'est pas maîtrisé alors qu'il est conceptuellement plus simple que le bilan en réacteur fermé.
  - Beaucoup se lancent dans une démonstration complexe qui n'aboutit pas, bien que ce ne soit pas l'esprit de la question.
  - L'intégration de l'équation différentielle du premier ordre a parfois posé problème.
  - L'analyse dimensionnelle de la vitesse apparente a parfois posé problème.
  - Problème de signe pour le bilan sur B (accumulation forcément négative puisque B est consommé en réacteur fermé).
- Partie III.1 :
  - Confusion entre « read » du langage Scilab et « np.load.txt » du langage python.
  - Utilisation d'une boucle de 0 à len(t_exp) pour calculer len(t_exp).
  - Confusion entre « len » et « sum ».
  - Réindexation de f(xn) et f(xm) au lieu de xn et xm.
  - Syntaxe de réindexation fausse : oubli de la variable temporaire permettant de stocker une des valeurs pendant l'échange.
  - Il manque return à la fin des fonctions.
  - Utilisation de fonctions alors que ce n'était pas utile et pas demandé.
  - Confusion OR / AND dans la condition de la boucle WHILE.
  - Arguments peu probants pour expliquer l'utilité de la comparaison des courbes expérimentale et théorique (les algorithmes de recherche de minimum peuvent conduire à un minimum local).
- Partie III.2 :
  - Des erreurs sur les développements limités (non homogènes).
  - Les candidats repartent parfois de la formule discrétisée apprise par cœur pour redémontrer le développement limité de base.
  - Pour le calcul des concentrations par la méthode d'Euler, le calcul de CB est souvent manquant alors qu'il est nécessaire pour le calcul de CA.
  - Confusion entre « print » et « return ».
- Partie III.3 :
  - Les questions qualitatives ont souvent été bien traitées lorsque les candidats ont eu le temps.
  - La méthode des trapèzes, bien qu'elle figure au programme, a rarement été traitée et lorsqu'elle l'a été, avec plus ou moins de succès.

CONCOURS COMMUNS POLYTECHNIQUES

EPREUVE SPECIFIQUE - FILIERE PC

MODELISATION DE SYSTEMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

Durée : 4 heures

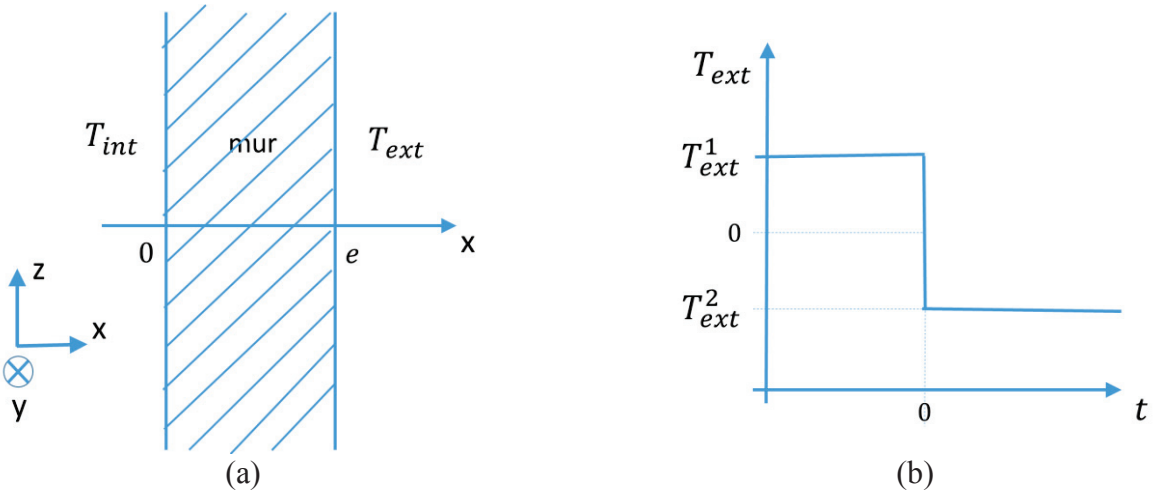
N.B. : le candidat attachera la plus grande importance à la clarté, à la précision et à la concision de la rédaction. Si un candidat est amené à repérer ce qui peut lui sembler être une erreur d'énoncé, il le signalera sur sa copie et devra poursuivre sa composition en expliquant les raisons des initiatives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

Les calculatrices sont interdites

Le sujet comporte deux parties indépendantes. Le candidat précisera au début de sa copie le langage de programmation (Python ou Scilab) qu'il a choisi et toutes les questions seront traitées dans le même langage. Un bonus sera accordé aux copies soignées avec des programmes bien commentés. Plusieurs fonctions du langage Scilab sont rappelées en annexe A. Les candidats choisissant le langage Python pourront utiliser les bibliothèques numpy et matplotlib.pyplot. Une documentation simplifiée de plusieurs fonctions de ces bibliothèques est présente en annexes B et C.

SIMULATION NUMERIQUE DU TRANSFERT THERMIQUE DANS UN MUR EN REGIME TRANSITOIRE

On étudie les transferts thermiques dans le mur d'une maison, figure 1(a). La température à l'intérieur de la maison est constante dans le temps et égale à $T_{int} = 20$ °C. Aux temps négatifs ($t < 0$), la température extérieure est égale à $T_{ext1} = 10$ °C. A $t = 0$, elle chute brusquement à $T_{ext2} = -10$ °C et elle reste égale à cette valeur aux temps positifs ($t > 0$), figure 1(b). On souhaite étudier l'évolution du profil de température dans le mur au cours du temps.



Figures 1 (a) - Schéma du mur étudié. (b) - Evolution de la température extérieure au cours du temps.

Le mur a une épaisseur $e = 40$ cm. Les propriétés physiques du mur sont constantes : conductivité thermique $\lambda = 1{,}65\ \mathrm{W.m^{-1}.K^{-1}}$, capacité thermique massique $c_p = 1\,000\ \mathrm{J.kg^{-1}.K^{-1}}$, masse volumique $\rho = 2\,150\ \mathrm{kg.m^{-3}}$.

PARTIE I : ETUDE PRELIMINAIRE

Dans cette partie, on établit l'équation gouvernant les variations de la température et on la résout en régime permanent.

I.A. Equation gouvernant la température

On suppose que la température dans le mur T ne dépend que du temps t et de la coordonnée x.

I.A.1. A quelle condition peut-on supposer que la température ne dépend pas des coordonnées y et z ?

I.A.2. Donner l'équation générale qui décrit le transport de chaleur dans un solide en l'absence de source d'énergie. Comment cette équation se simplifie-t-elle sous les hypothèses de la question I.A.1 ?

I.B. Conditions aux limites

On envisage plusieurs types de conditions aux limites.

(i) La température est imposée aux limites du système.

(ii) La paroi extérieure est isolée par un matériau de très faible conductivité.

I.B.1. Traduire chacune de ces conditions aux limites sur la fonction $T(x,t)$ et/ou sa dérivée.

Dans toute la suite, on adoptera des conditions aux limites de type température imposée.

I.C. Solutions en régime permanent

I.C.1. Résoudre l'équation obtenue à la question I.A.2. en régime permanent, avec les conditions aux limites de type températures imposées (question I.B.(i)) :

- pour un instant particulier négatif $t_1 < 0$,
- pour un instant particulier positif $t_2 > 0$, très longtemps après la variation de température extérieure, quand le régime permanent est de nouveau établi dans le mur.

I.C.2. Quelle est la nature des profils $T(x)$ obtenus (en régime permanent) à ces deux instants ? Tracer à la main les deux profils sur un même graphique sur la copie.

I.C.3. Sur le même graphique, tracer à la main qualitativement les profils intermédiaires à différents instants entre la variation brutale de la température extérieure ($t = 0$) et l'instant t_2 où le régime est de nouveau permanent.

PARTIE II : RESOLUTION NUMERIQUE

II.A. Equation à résoudre

On cherche à résoudre numériquement l'équation aux dérivées partielles :

$$\alpha \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \qquad (1)$$

où α est une constante. A l'équation (1) sont associées les conditions :

$$\begin{aligned} &T(0,t) = T_{int} && \text{pour tout } \ t > 0 \\ &T(e,t) = T_{ext2} && \text{pour tout } \ t > 0 \\ &T(x,0) = ax + b && \text{pour tout } \ x \in [0,e] \end{aligned}$$

II.A.1. Quelle est l'expression de α en fonction des paramètres physiques du mur ?

II.A.2. Exprimer a et b en fonction de T_{int}, T_{ext1} et e.

Pour effectuer la résolution de l'équation (1), nous utiliserons la méthode des différences finies présentée dans la partie II.B.

II.B. Méthode des différences finies

II.B.1. Discrétisation dans l'espace et dans le temps

On divise l'intervalle $[0, e]$, représentant l'épaisseur du mur, en $N + 2$ points, numérotés de 0 à $N + 1$, régulièrement espacés de Δx (figure 2, page suivante). Cette division est appelée « discrétisation ». La distance Δx est appelée le « pas d'espace ». A l'intérieur du mur (frontières intérieure et extérieure exclues) se trouvent donc N points. On cherche à obtenir la température en ces points particuliers à chaque instant.

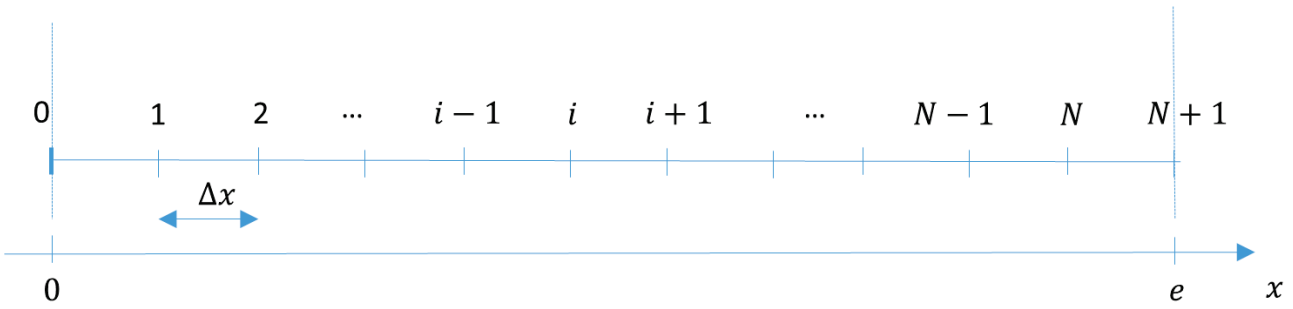


Figure 2 - Discrétisation spatiale dans la direction x.

II.B.1.a. Donner l'expression de Δx en fonction de N et de l'épaisseur du mur e.

II.B.1.b. Donner l'abscisse x_i du i^e point en fonction de i et Δx, sachant que $x_0 = 0$ et $x_{N+1} = e$.

Le temps est discrétisé en $ItMax$ intervalles de durée Δt et on ne s'intéresse au profil de température qu'aux instants particuliers $t_k = k.\Delta t$. L'intervalle élémentaire de temps Δt est appelé le « pas de temps ».

Pour résoudre l'équation (1), deux méthodes sont proposées :
- méthode utilisant un schéma explicite,
- méthode utilisant un schéma implicite.

II.B.2. Méthode utilisant un schéma explicite

II.B.2.a. A l'aide d'un développement limité de la fonction $x \mapsto T(x,t)$, donner une expression de $T(x+\Delta x,t)$ à l'ordre 3 ($o(\Delta x^3)$) en fonction de T et de ses dérivées partielles par rapport à x évaluées en (x,t). De même, donner une expression de $T(x-\Delta x,t)$ à l'ordre 3.

II.B.2.b. En déduire une expression approchée à l'ordre 1 ($o(\Delta x)$) de $\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x,t}$ (dérivée partielle spatiale seconde de T évaluée au point x à l'instant t) en fonction de $T(x+\Delta x,t)$, $T(x-\Delta x,t)$ et $T(x,t)$ et Δx.

On note T_i^k la température $T(x_i,t_k)$, évaluée au point d'abscisse x_i à l'instant t_k. De même, on note $T_{i+1}^k = T(x_i+\Delta x,t_k)$ et $T_{i-1}^k = T(x_i-\Delta x,t_k)$.

II.B.2.c. Déduire de la question précédente une expression approchée de $\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x_i,\,t_k}$ (dérivée partielle spatiale seconde de T évaluée en x_i à l'instant t_k) en fonction de T_i^k, T_{i+1}^k et T_{i-1}^k et Δx.

La dérivée partielle temporelle de l'équation (1) est maintenant approchée grâce à un développement limité.

II.B.2.d. A l'aide d'un développement limité de la fonction $t \mapsto T(x,t)$, donner une expression de $T(x,t+\Delta t)$ à l'ordre 1 ($o(\Delta t)$) en fonction de T et de sa dérivée partielle par rapport à t évaluées en (x,t).

II.B.2.e. En déduire une valeur approchée de $\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{x,t}$ (dérivée partielle par rapport au temps de T évaluée au point x à l'instant t) à l'ordre 0 ($o(1)$) en fonction de $T(x,t+\Delta t)$, $T(x,t)$ et Δt.

II.B.2.f. Donner une expression de $\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{x_i,\, t_k}$ (dérivée partielle par rapport au temps de T évaluée en x_i à l'instant t_k) en fonction de Δt, T_i^k et T_i^{k+1}, avec $T_i^{k+1} = T(x_i, t_k + \Delta t)$.

L'équation (1) est valable en chaque point d'abscisse x_i et à chaque instant t_k.

II.B.2.g. Ecrire la forme approchée de cette équation au point i et à l'instant k en approchant $\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x,t}$ avec la formule obtenue à la question II.B.2.c. et en approchant $\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{x,t}$ avec la formule obtenue à la question II.B.2.f.

II.B.2.h. Montrer que l'équation obtenue à la question II.B.2.g peut s'écrire sous la forme :

$$T_i^{k+1} = rT_{i-1}^k + (1-2r)T_i^k + rT_{i+1}^k \qquad (2)$$

en précisant la valeur du paramètre r en fonction de $\Delta x, \Delta t$ et α.

L'équation (2) est appelée schéma numérique explicite. Si on connaît la température en tous les points $x_1, x_2, \ldots, x_{N-1}, x_N$ à l'instant t_k, on peut calculer grâce à elle la température en tous les points à l'instant ultérieur t_{k+1}.

II.B.2.i. L'équation (2) est-elle valable dans tout le domaine, c'est-à-dire pour toute valeur de $i,\ 0 \leq i \leq N+1$? Que valent T_0^k et T_{N+1}^k ?

II.B.2.j. Dans cette question, on élabore une fonction `schema_explicite` permettant de calculer la température en chaque point au cours du temps selon la formule (2). Parmi les variables d'entrée se trouvera un vecteur `T0` de dimension N, défini en dehors de la fonction, contenant les valeurs de la température aux points de discrétisation à l'instant initial. Au sein de la fonction, un algorithme calculera itérativement la température avec un nombre maximal d'itérations `ItMax`. En sortie de la fonction, on récupérera le nombre d'itérations réellement effectuées, `nbIter` et une matrice `T_tous_k`, de dimensions $N \times ItMax$. Chaque colonne de cette matrice contient le vecteur $\boldsymbol{T^k}$ dont les éléments sont les valeurs de la température aux N points $x_1, \ldots, x_N$ (points à l'intérieur du mur) à l'instant k :

$$\boldsymbol{T^k} = \begin{pmatrix} T_1^k \\ T_2^k \\ \ldots \\ T_{N-1}^k \\ T_N^k \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad \texttt{T\_tous\_k} = \begin{pmatrix} T_1^1 & T_1^2 & \ldots & T_1^k & \ldots & T_1^{k-1} & T_1^k \\ T_2^1 & T_2^2 & & T_2^k & & T_2^{k-1} & T_2^k \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ T_{N-1}^1 & T_{N-1}^2 & \ldots & T_{N-1}^k & \ldots & T_{N-1}^{k-1} & T_{N-1}^k \\ T_N^1 & T_N^2 & & T_N^k & & T_N^{k-1} & T_N^k \end{pmatrix}.$$

On souhaite arrêter le calcul lorsque la température ne varie presque plus dans le temps. Dans ce but, on évaluera la norme 2 de $\boldsymbol{T^k - T^{k-1}}$ à chaque itération. La définition de la norme 2 est rappelée à la question II.B.2.j.*(vi)*.

II.B.2.j.*(i)* Ecrire l'en-tête de la fonction en précisant bien les paramètres d'entrée et de sortie.

II.B.2.j.*(ii)* Le schéma numérique (2) permet d'approcher avec succès la solution à la condition $r < 1/2$. Programmer un test qui avertit l'utilisateur si cette condition n'est pas respectée.

II.B.2.j.*(iii)* Affecter la valeur 2 000 à `ItMax`. Créer la matrice `T_tous_k` de dimensions $N \times ItMax$ en la remplissant de zéros.

II.B.2.j.*(iv)* Remplacer la première colonne de `T_tous_k` par le vecteur des valeurs initiales `T0`.

II.B.2.j.*(v)* Calculer le profil de température à l'instant $k = 1$ $(t = \Delta t)$, en distinguant le cas $i = 1$, le cas $2 \leq i \leq N - 1$ et le cas $i = N$. Affecter ces valeurs à la deuxième colonne de `T_tous_k`.

II.B.2.j.*(vi)* Ecrire une fonction `calc_norme` qui calcule la norme 2 d'un vecteur. On rappelle que la norme 2 d'un vecteur $\boldsymbol{V}$ s'écrit :

$$\|\boldsymbol{V}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} V_i^2} \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} V_1 \\ \vdots \\ V_i \\ \vdots \\ V_N \end{pmatrix}.$$

II.B.2.j.*(vii)* Elaborer une boucle permettant de calculer itérativement le profil de température aux instants $t_k = k.\Delta t$ avec $k \geq 2$. Cette boucle sera interrompue lorsque la norme 2 du vecteur $\boldsymbol{T^k - T^{k-1}}$ deviendra inférieure à 10^{-2} ou lorsque le nombre d'itérations atteindra la valeur $ItMax$ (prévoir les deux cas). Utiliser, pour cela, la fonction `calc_norme` définie à la question II.B.2.j.*(vi)*.

II.B.2.j.*(viii)* Ecrire la fin de la fonction afin de renvoyer tous les arguments de sortie définis au début de la question II.B.2.j.

II.B.3. Méthode utilisant un schéma implicite

Le schéma explicite (2) ne converge que si le pas de temps Δt est suffisamment faible par rapport au pas d'espace Δx. Si l'on souhaite effectuer un calcul pour un temps physique long, beaucoup d'itérations seront nécessaires et le temps de calcul sera très long. C'est pourquoi on préfère d'autres types de schémas appelés schémas implicites.

Dans cette partie, la dérivée partielle seconde par rapport à x de la température apparaissant dans l'équation (1) est évaluée au point d'abscisse x_i et à l'instant $k + 1$:

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x,t} \approx \left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x_i, t_{k+1}}$$

et la dérivée partielle par rapport à t est évaluée au point d'abscisse x_i et à l'instant k :

$$\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{x,t} \approx \left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{x_i, t_k}.$$

II.B.3.a. Donner la nouvelle expression approchée de l'équation (1) définie en page 3.

II.B.3.b. Montrer que l'équation obtenue à la question II.B.3.a. peut être mise sous la forme

$$T_i^k = -rT_{i-1}^{k+1} + (1 + 2r)T_i^{k+1} - rT_{i+1}^{k+1} \quad . \qquad (3)$$

L'équation (3) est appelée schéma implicite car la température à l'instant t_k est exprimée en fonction de la température à l'instant ultérieur t_{k+1}.

Le système d'équations ainsi obtenu peut être écrit sous la forme :

$$M\boldsymbol{T}^{k+1} = \boldsymbol{T}^{k} + r\,\boldsymbol{v} \qquad (4)$$

où M est une matrice carrée $N \times N$ et $\boldsymbol{T}^{k}$ et $\boldsymbol{T}^{k+1}$ sont les vecteurs de dimension N définis par :

$$\boldsymbol{T}^{k} = \begin{pmatrix} T_1^k \\ T_2^k \\ \dots \\ T_{N-1}^k \\ T_N^k \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{T}^{k+1} = \begin{pmatrix} T_1^{k+1} \\ T_2^{k+1} \\ \dots \\ T_{N-1}^{k+1} \\ T_N^{k+1} \end{pmatrix}$$

et $\boldsymbol{v}$ est un vecteur de taille N faisant intervenir les conditions aux limites.

II.B.3.c. Préciser l'expression de la matrice M et l'expression du vecteur $\boldsymbol{v}$.

A chaque pas de temps, il faut inverser le système matriciel :

$$M\boldsymbol{T}^{k+1} = \boldsymbol{T}^{k} + r\,\boldsymbol{v}$$

pour obtenir $\boldsymbol{T}^{k+1}$à partir de $\boldsymbol{T}^{k}$.

II.B.3.d. Le but de cette question est d'écrire une fonction `CalcTkp1` qui permet de résoudre un système matriciel tridiagonal en utilisant l'algorithme de Thomas présenté ci-dessous.

Algorithme de Thomas :
On cherche à résoudre un système matriciel tridiagonal de la forme :

$$M\,\boldsymbol{u} = \boldsymbol{d} \qquad (5)$$

où M est une matrice de dimensions $N \times N$ tridiagonale, c'est-à-dire une matrice dont tous les éléments sont nuls, sauf sur la diagonale principale, la diagonale supérieure et la diagonale inférieure

$$M = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & 0 & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_N & b_N \end{pmatrix}$$

et où les vecteurs $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{d}$, de dimension N, s'écrivent **:**

$$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{d} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{N-1} \\ d_N \end{pmatrix}$$

Dans cet algorithme, on calcule d'abord les coefficients suivants :

$$c'_1 = \frac{c_1}{b_1}$$
$$c'_i = \frac{c_i}{b_i - a_i c'_{i-1}} \quad \text{pour} \quad i = 2, 3, \dots, N-1$$

et

$$d'_1 = \frac{d_1}{b_1}$$
$$d'_i = \frac{d_i - a_i d'_{i-1}}{b_i - a_i c'_{i-1}} \quad \text{pour} \quad i = 2, 3, \dots, N\,.$$

Les inconnues $u_1, u_2, \dots, u_N$ sont alors obtenues par les formules :

$$u_N = d'_N$$
$$u_i = d'_i - c'_i u_{i+1} \quad \text{pour} \quad i = N-1, N-2, \dots, 2, 1\ .$$

II.B.3.d.*(i)* En utilisant l'algorithme de Thomas, écrire une fonction `CalcTkp1` qui permet de calculer le vecteur $\boldsymbol{u}$, solution du système matriciel (5), à partir de la matrice *M* et du vecteur $\boldsymbol{d}$.

II.B.3.e. Dans cette question, une fonction `schema_implicite` est élaborée avec les mêmes arguments d'entrée et de sortie que la fonction `schema_explicite` (définis à la question II.B.2.j.**)** et qui utilise les mêmes critères d'arrêt (définis à la question II.B.2.j.*(vii)*).

II.B.3.e.*(i)* Ecrire l'en-tête de la fonction en précisant les paramètres d'entrée et de sortie.

II.B.3.e.*(ii)* Affecter la valeur 2 000 à `ItMax`. Créer la matrice `T_tous_k` dont les dimensions sont $N \times ItMax$ en la remplissant de zéros.

II.B.3.e.*(iii)* Remplacer la 1re colonne de `T_tous_k` par le vecteur des valeurs initiales `T0`.

II.B.3.e.*(iv)* Définir la matrice `M` et le vecteur `v` qui interviennent dans l'équation (4).

II.B.3.e.*(v)* Calculer le profil de température à l'instant $k = 1$ $(t = \Delta t)$. Affecter ces valeurs à la deuxième colonne de `T_tous_k`.

II.B.3.e.*(vi)* Ecrire une boucle permettant de calculer itérativement le profil de température aux instants ultérieurs $t_k = k \times \Delta t$ avec $k \geq 2$, en prévoyant un arrêt lorsque la norme 2 du vecteur $\boldsymbol{T^k - T^{k-1}}$ devient inférieure à 10^{-2} ou lorsque le nombre d'itérations atteint la valeur `ItMax` (prévoir les deux cas). Utiliser pour cela la fonction `calc_norme` définie à la question II.B.2.j.*(vi)*.

II.B.3.e.*(vii)* Ecrire la fin de la fonction afin de renvoyer tous les arguments de sortie définis au début de la question II.B.2.j.

II.C. Programme principal

II.C.1. Début du programme

II.C.1.a. Définir les variables `epais` (épaisseur du mur), `conduc` (conductivité thermique), `rho` (masse volumique), `Cp` (capacité thermique massique), `Tint` (température intérieure), `Text1`

(température extérieure pour les instants $t < 0$), `Text2` (température extérieure pour les instants $t > 0$), `N` (nombre de points de calcul **à l'intérieur du mur**) et `Dt` (intervalle de temps élémentaire) et leur affecter les valeurs correspondant au problème physique défini au début de l'énoncé. On prendra un nombre de points de discrétisation $N = 60$ et un pas de temps Δt de 25 secondes.

II.C.1.b. Calculer les coefficients `a` et `b` avec la formule trouvée à la question II.A.2.

II.C.1.c. Créer un vecteur `x` dont les éléments $x_1, x_2, \ldots, x_N$ sont définis à la question II.B.1.b.

II.C.1.d. Calculer le vecteur des températures initiales `T0`.

II.C.1.e. Calculer `alpha` selon la formule trouvée à la question II.A.1. Calculer `r` en utilisant la formule calculée à la question II.B.2.h.

II.C.2. Calcul des températures

II.C.2.a. Ecrire un morceau de programme qui demande à l'utilisateur quel schéma (explicite ou implicite) il souhaite utiliser et qui appelle la fonction correspondante.

II.C.3. Analyse du résultat

II.C.3.a. Ecrire un morceau de programme permettant de tracer sur un même graphique le profil de température en fonction de `x` tous les 100 pas de temps.

II.C.3.b. Faire afficher le temps en heures au bout duquel le régime permanent est établi.

Fin de l'énoncé

ANNEXE A : COMMANDES ET FONCTIONS USUELLES DE SCILAB

A=[a b c d;e f g h;i j k l]

Description : commande permettant de créer une matrice dont la première ligne contient les éléments a, b, c, d, la seconde ligne contient les éléments e, f, g, h et la troisième, les éléments i, j, k, l.

Exemple : A=[1 2 3 4 5;3 10 11 12 20;0 1 0 0 2]

```
⇨   1.   2.   3.   4.   5.
    3.   10.  11.  12.  20.
    0.   1.   0.   0.   2.
```

A(i,j)

Arguments d'entrée : les coordonnées de l'élément dans le tableau A.

Argument de sortie : l'élément (i, j) de la matrice A.

Description : fonction qui retourne l'élément (i, j) de la matrice A. Pour obtenir toute la colonne j de la matrice A, on utilise la syntaxe $A(:, j)$. De même, pour accéder à l'intégralité de la ligne i de la matrice A, on écrit $A(i, :)$.

Exemple :

```
A=[1 2 3 4 5;3 10 11 12 20;0 1 0 0 2]
A(2,4)
⇨  12
A(:,3)
⇨    3.
     11.
     0.
A(2,:)
⇨  3.   10.   11.   12.   20.
```

x=[x1:Dx:x2]

Description : commande permettant de créer un vecteur dont les éléments sont espacés de Dx et dont le premier élément est x_1 et le dernier élément est le plus grand multiple de Dx inférieur ou égal à x_2.

ATTENTION : le vecteur ainsi créé est un vecteur ligne. Pour convertir un vecteur ligne en un vecteur colonne, on le transpose en utilisant l'apostrophe « ' » : x_trans=x'.

Exemple *:*

```
x=[2:0.5:6.3]
⇨  2.   2.5   3.   3.5   4.   4.5   5.   5.5   6.
x_trans=x'
⇨  2.
   2.5
   3.
   3.5
   4.
   4.5
   5.
   5.5
   6.
```

zeros(n,m)

Arguments d'entrée : deux entiers n et m correspondant aux dimensions de la matrice à créer.

Argument de sortie : un tableau (matrice) d'éléments nuls.

Description : fonction créant une matrice (tableau) de dimensions $n \times m$ dont tous les éléments sont nuls.

Exemple : zeros(3,4)

⇨ 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0.

plot(x,y)

Arguments d'entrée : un vecteur d'abscisses x (tableau de dimension n) et un vecteur d'ordonnées y (tableau de dimension n).

Description : fonction permettant de tracer sur un graphique n points dont les abscisses sont contenues dans le vecteur x et les ordonnées dans le vecteur y.

Exemple :
```
x= [3:0.1:5]
y=sin(x)
plot(x,y)
```

ANNEXE B : BIBLIOTHEQUE NUMPY DE PYTHON

Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque numpy a préalablement été importée à l'aide de la commande : **import numpy as np**

On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

np.array(liste)

Argument d'entrée : une liste définissant un tableau à 1 dimension (vecteur) ou 2 dimensions (matrice).

Argument de sortie : un tableau (matrice).

Description : fonction permettant de créer une matrice (de type tableau) à partir d'une liste.

Exemple :
```
np.array([4,3,2])
⇨ [4 3 2]
np.array([[5],[7],[1]])
⇨ [[5]
   [7]
   [1]]
np.array([[3,4,10],[1,8,7]])
⇨ [[3 4 10]
   [1 8 7]]
```

$\boldsymbol{A[i,j]}$.

Arguments d'entrée : un tuple contenant les coordonnées de l'élément dans le tableau A.

Argument de sortie : l'élément $(i+1, j+1)$ de la matrice A.

Description : fonction qui retourne l'élément $(i+1, j+1)$ de la matrice A. Pour obtenir toute la colonne j+1 de la matrice A, on utilise la syntaxe $A[:, j]$. De même, pour accéder à l'intégralité de la ligne i+1 de la matrice A, on écrit $A[i, :]$.

ATTENTION : en langage Python, les lignes d'un A de dimension $n \times m$ sont numérotées de 0 à $n-1$ et les colonnes sont numérotées de 0 à $m-1$

Exemple :
```
A=np.array([[3,4,10],[1,8,7]])
A[0,2]
⇨ 10
A[:,2]
⇨ [10 7]
A[1,:]
⇨ [1 8 7]
```

np.zeros((n,m))

Arguments d'entrée : un tuple de deux entiers correspondant aux dimensions de la matrice à créer.
Argument de sortie : un tableau (matrice) d'éléments nuls.
Description : fonction créant une matrice (tableau) de dimensions $n \times m$ dont tous les éléments sont nuls.
Exemple : np.zeros((3,4))

⇨ [[0 0 0 0]
[0 0 0 0]
[0 0 0 0]]

np.linspace(Min,Max,nbElements)

Arguments d'entrée : un tuple de 3 entiers.
Argument de sortie : un tableau (vecteur).
Description : fonction créant un vecteur (tableau) de $nbElements$ nombres espacés régulièrement entre Min et Max. Le 1er élément est égal à Min, le dernier est égal à Max et les éléments sont espacés de $(Max - Min)/(nbElements - 1)$:
Exemple : np.linspace(3,25,5)

⇨ [3 8.5 14 19.5 25]

ANNEXE C : BIBLIOTHEQUE MATPLOTLIB.PYPLOT DE PYTHON

Cette bibliothèque permet de tracer des graphiques. Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque matplotlib.pyplot a préalablement été importée à l'aide de la commande :
import matplotlib.pyplot as plt

On peut alors utiliser les fonctions de la bibliothèque, dont voici quelques exemples :

plt.plot(x,y)

Arguments d'entrée : un vecteur d'abscisses x (tableau de dimension n) et un vecteur d'ordonnées y (tableau de dimension n).
Description : fonction permettant de tracer sur un graphique de n points dont les abscisses sont contenues dans le vecteur x et les ordonnées dans le vecteur y. Cette fonction doit être suivie de la fonction **plt.show()** pour que le graphique soit affiché.
Exemple :

```
x= np.linspace(3,25,5)
y=sin(x)
plt.plot(x,y)
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```

plt.xlabel(nom)

Argument d'entrée : une chaîne de caractères.
Description : fonction permettant d'afficher le contenu de nom en abscisse d'un graphique.

plt.ylabel(nom)

Argument d'entrée : une chaîne de caractères.
Description : fonction permettant d'afficher le contenu de nom en ordonnée d'un graphique.

plt.show()

Description : fonction réalisant l'affichage d'un graphe préalablement créé par la commande **plt.plot(x,y)**. Elle doit être appelée après la fonction plt.plot et après les fonctions plt.xlabel et plt.ylabel.

CONCOURS COMMUNS POLYTECHNIQUES

RAPPORT SUR L'EPREUVE ECRITE 2015 DE MODELISATION DE SYSTEMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES DE LA FILIERE PC

1/ CONSIGNES GENERALES :

a) Présentation du sujet

Le sujet portait sur la résolution de l'équation de la chaleur par des méthodes numériques. La première partie physique permettait d'établir les équations et les conditions aux limites sur lesquelles la seconde partie allait travailler pour trouver une solution approchée par des méthodes numériques. Deux méthodes classiques de résolution étaient proposées : une par méthode explicite, assez facile à mettre en œuvre mais nécessitant un pas de temps faible et une par méthode explicite, un peu plus délicate mais plus stable.

Le sujet était de difficulté moyenne et alliait des questions de physique, de mathématiques et de programmation. Un des objectifs du sujet était de faire réaliser par le candidat le programme dans son intégralité, morceau par morceau. En conséquence, certaines questions étaient redondantes.

L'énoncé était suffisamment clair puisque la plupart des candidats ont bien compris ce qui leur était demandé. Il était découpé en parties indépendantes et certains résultats intermédiaires étaient donnés, ce qui permettait aux candidats de ne pas être bloqués.

Le niveau de difficulté des questions était varié, ce qui a permis de classer les candidats.

Une annexe présentait les principales fonctions de Python et de Scilab utiles à la résolution de ce sujet, ce qui permettait d'aider les candidats aux connaissances informatiques fragiles et permettait de ne pas défavoriser les élèves 5/2.

b) Problèmes constatés par les correcteurs

- De nombreux candidats ne savent pas faire correctement un développement limité.

- Très peu de candidats utilisent correctement l'instruction « print ».

- Beaucoup d'erreurs d'indices.

- Beaucoup d'étudiants oublient d'initialiser les matrices.

- Certains étudiants confondent les signes « == » et « = ».

- De nombreux étudiants font des fonctions sans nécessité.

- Certaines questions de programmation pouvaient être traitées de différentes manières, ce qui rendait la notation difficile.

- La plupart des candidats ont abordé le sujet avec sérieux, sauf quelques rares candidats qui n'ont pas du tout traité les questions de programmation.

Un nombre non négligeable de candidats ne font pas encore la différence entre l'écriture mathématique d'une expression et son écriture en langage de programmation (grandeurs ou fonctions non définies, non-respect de la syntaxe pour les opérations de multiplication, division, élévation à la puissance, etc.), ce qui a été difficile à corriger et à sanctionner, surtout quand la réponse était correcte.

Dans la plupart des copies, les indentations sont clairement visibles, soit en respectant un décalage constant et clair, soit en indiquant directement les indentations avec des lignes verticales (objets au même niveau d'indentation) ou horizontales (nombre d'indentation à chaque ligne). Toutefois, certaines copies présentaient des indentations « fluctuantes ». Cela nuit fortement à la lecture du code.

Les copies étaient globalement propres à de rares exceptions près. Il est important que les candidats mettent en valeur les résultats à l'issue de leur raisonnement et indique clairement la question qu'ils sont en train de traiter.

Les commentaires étaient trop peu présents. Il est important que le correcteur puisse comprendre la démarche des candidats surtout lorsque plusieurs solutions sont envisageables. Certains candidats ont utilisé des couleurs différentes pour les commentaires, c'est une très bonne idée pour les faire ressortir.

Les candidats ont pour beaucoup utilisé les syntaxes de liste plutôt que la syntaxe tableau de numpy. Ceci a induit, pour une partie des copies, des programmations 'lourdes' et des erreurs d'affectation dans les tableaux. Certains ont alors programmé des opérations telles que la multiplication par un scalaire, l'addition et la différence, ce qui alourdissait inutilement la programmation.

Lors de l'écriture d'un « while », surtout avec plusieurs conditions d'arrêt, les candidats seraient bien avisés d'écrire la négation mathématique. « Je veux m'arrêter si P » correspond à « je continue tant que non(P) » ; cela éviterait peut-être des erreurs du type « or » au lieu de « and » et « < » au lieu de « >= ».

Des élèves ont fait un usage inutile de la commande « break ».

Des affectations de variables sont réalisées dans le mauvais sens (2000=nbIter).

2/ REMARQUES SPECIFIQUES :

PARTIE I : ETUDE PRELIMINAIRE

I.A. Equation gouvernant la température

I.A.1. Question souvent mal traitée par les candidats.

I.A.2. Question bien traitée. L'équation de la diffusion thermique est connue ainsi que l'expression du coefficient de diffusion en fonction des paramètres du solide.

I.B. Conditions aux limites

La condition aux limites de type flux nul a été rarement énoncée correctement.

I.C. Solutions en régime permanent

La résolution en régime permanent et le tracé des solutions sont dans l'ensemble très bien traités. Le tracé des profils intermédiaires est souvent bien réalisé : l'erreur la plus classique consiste en un tracé de droites où la température en $x = e$ varie au cours du temps.

PARTIE II : RESOLUTION NUMERIQUE

II.A. Equation à résoudre

II.A.1. Quelques erreurs.

II.A.2. Certains utilisent Text2 au lieu de Text1, mais ils n'ont pas été pénalisés.

II.B. Méthode des différences finies

II.B.1.a. et b. Questions bien réussies.

II.B.2. Méthode utilisant un schéma explicite.

II.B.2.a. Beaucoup d'erreurs dans le développement limité DL : les coefficients étaient faux, le DL était fait au mauvais ordre, oubli du o(Dx3).

II.B.2.b. et c. Questions plutôt bien réussies. Le candidat a obtenu des points pour le raisonnement même s'il a fait des erreurs aux questions précédentes.

II.B.2.d. Question bien réussie. Quelques oublis du o(Dt).

II.B.2.e. et f. Questions bien réussies.

II.B.2.g. et h. Questions plutôt bien réussies. Le candidat a obtenu des points pour le raisonnement même s'il a fait des erreurs aux questions précédentes.

II.B.2.i. Question bien réussie.

II.B.2.j.(i) Beaucoup oublient les variables "Tint" et "Text" en argument d'entrée.

II.B.2.j.(ii) Beaucoup d'élèves n'avertissent pas l'utilisateur de la mauvaise valeur de « r », contrairement à ce qui était demandé dans l'énoncé. Beaucoup ne semblent pas connaître la commande « print ».

II.B.2.j.(iii) Question bien traitée mais oubli fréquent de définir la valeur de « N ». Parfois, affectation inversée « 2000=NbIter ».

II.B.2.j.(iv) Question généralement bien traitée.

II.B.2.j.(v) Des erreurs d'indice.

II.B.2.j.(vi) Question très bien réussie dans l'ensemble.

II.B.2.j.(vii) Des erreurs dans la boucle « while » (utilisation de « or » au lieu de « and », erreurs dans les signes d'inégalité). Des erreurs d'indice.

II.B.2.j.(viii) Certains oublient de donner une valeur à « nbIter » avant de la renvoyer.

II.B.3. Méthode utilisant un schéma implicite.

II.B.3.a. et b. Questions plutôt bien réussies. Le candidat a obtenu des points pour le raisonnement même s'il a fait des erreurs aux questions précédentes.

II.B.3.c. Question assez bien réussie. Matrice M globalement bien identifiée. Beaucoup d'erreurs sur le vecteur v.

I.B.3.d.(i) Beaucoup d'erreur d'indices. Les vecteurs n'ont souvent pas le bon nombre d'éléments. Dernière boucle rarement écrite correctement.

I.B.3.e.(i) Beaucoup oublient « Tint » et « Text » en argument d'entrée.

I.B.3.e.(ii) Question bien traitée mais oubli fréquent de définir la valeur de « N ». Parfois, affectation inversée « 2000=NbIter ».

I.B.3.e.(iii) Question généralement bien traitée.

I.B.3.e.(iv) Beaucoup d'erreur d'indice dans les boucles et mauvaises définitions des éléments aux bords de la matrice.

I.B.3.e.(v) Peu de candidats ont répondu à cette question. Question plutôt bien traitée mais certains oublient de rajouter « r*v » au deuxième argument d'entrée de « CalcTkp1. »

I.B.3.e.(vi) Des erreurs dans la boucle « while » (utilisation de « or » au lieu de « and », erreurs dans les signes d'inégalité). Des erreurs d'indice. Certains élèves n'appellent pas la fonction « CalcTkp1 ».

I.B.3.e.(vii) Certains oublient de donner une valeur à « nbIter » avant de la renvoyer.

II.C. Programme principal

II.C.1.a. Certains confondent écriture mathématique et programmation et utilisent d'autres noms de variables que ceux donnés dans l'énoncé, avec des symboles grecs par exemple ou des indices/exposants dans les noms de variables. Certains se compliquent la tâche en utilisant des fonctions.

II.C.1.b. Question plutôt bien traitée sauf quand « Text2 » a été utilisé au lieu de « Text1 ».

II.C.1.c. Beaucoup d'erreurs dans cette question. Le vecteur n'a souvent pas la bonne taille ou ses indices sont faux.

II.C.1.d. Question bien réussie.

II.C.1.e. Certains confondent écriture mathématique et programmation.

II.C.2. Certains ne connaissent pas la commande « input ». Non renvoi de « T_tous_k » et « nbIter ».

II.C.3. Analyse du résultat

II.C.3.a. Les courbes étaient généralement présentes sur un graphique avec des labels aux axes, toutefois de trop nombreux candidats ont voulu tracer T(t) alors que T(x) était demandé. Certains oublient de faire afficher le graphique avec « pl.show() ».

II.C.3.b. La question a été très peu abordée alors qu'il ne s'agissait que d'une simple conversion nombre de pas de temps vers heure en utilisant Dt. Certains candidats ont oublié de diviser le temps par 3 600 pour obtenir un résultat en heures. Tous les candidats ne connaissent pas la commande « print ».

3/ CONCLUSIONS :

Une immense majorité des candidats a utilisé le langage Python. Moins de 10 élèves ont traité l'épreuve en langage Scilab.

De nombreuses questions étaient très faciles, en particulier dans la partie physique et dans la résolution numérique par schéma implicite. Quelques questions, en particulier pour le schéma implicite, étaient plus délicates. Le sujet a donc permis de trier les candidats.

Les étudiants ayant fait preuve de sérieux dans les différentes matières ont rencontré peu de difficulté.