

كا، عبد
المنعم
ا.ف

1 Questions :

- 1.1 La modélisation est devenue la base de la démarche scientifique. Pourquoi ?
- 1.2 Donner une définition simple d'un modèle.
- 1.3 Lorsque l'on est confronté à un phénomène scientifique, et nous voulons le modéliser. quelles sont les 1ères étapes que nous devons faire avant de commencer la modélisation ?
- 1.4 Comment connaître l'évolution d'un système ?
- 1.5 Donnez un organigramme simple pour modéliser et simuler n'importe quel phénomène scientifique ou processus industriel.
- 1.6 Pour l'optimisation des processus chimiques, on utilise généralement les équations d'état, qui sont basées sur des modèles thermodynamiques, pourquoi et dans quel but ?
- 1.7 Le premier modèle thermodynamique qui a permis de décrire le comportement des gaz est le modèle du gaz parfait. Cette équation d'état repose sur quelle théorie ? et sur quelle hypothèse se base-t-il ?
- 1.8 Quelle est la simulation statique et la simulation dynamique ?
- 1.9 Le premier modification du modèle de gaz parfait, est le modèle de Van der Waals.
 - *Quelles sont les grandeurs à fixer et à calculer dans les 2 cas :
 - ** Ecrire l'équation du modèle Van der Waals, et définir chaque terme.
 - *** Cette équation fut la première succès d'expliquer quelle phénomène ?
- 1.10 Donner la forme générale des équations d'état cubiques généralisées, et définir chaque terme.
 - * Citer Les équations d'état les plus fréquemment utilisée.
 - ** Ecrire leurs équations, et nommer le domaine d'utilisation de chaque équation.
- 1.11 Comment résoudre le système d'équations non linéaires ?
 - *Quelles sont les Problèmes rencontrer lors de la Résolution ?

Solution :

1-) La modélisation est devenue la base de la démarche scientifique : parce qu'il est une **phase essentielle** qui se découpe un bout de réalité, compliqué, et on en fait une représentation abstraite à laquelle on va appliquer une théorie. **Le modèle obtenu n'est pas forcément figé**, on peut en faire une première étude d'un modèle très simpliste, puis ajouter des paramètres qui avaient été mis de côté dans la première modélisation pour tenter d'obtenir un modèle plus proche du réel.

2-) Définition de modèle : Représentation simplifiée d'un système ou d'un phénomène physique permettant de reproduire son fonctionnement, de l'analyser, de l'expliquer et d'en prédire certains aspects.

3-) Lorsque l'on est confronté à un phénomène scientifique : selon le cas,

→ on peut soit se servir d'un modèle préexistant, comme : Les **modèles de l'atome (modèle de l'atome de Bohr, modèle quantique de l'atome)**, les **Trois modèles de la lumière (modèle du rayon lumineux, modèle ondulatoire de la lumière, modèle corpusculaire de la lumière)**.

→ soit construire son propre modèle, comme : le **mouvement d'une voiture** (la représente par un point dans l'espace auquel on attribue une masse et une vitesse).

La **propagation des ondes sismiques** de type P (ondes de compression-dilatation, longitudinales) et de type S (ondes de cisaillement, transversales), on pourra étudier la propagation d'une **compression le long d'un ressort** et la **propagation d'une déformation le long d'une corde**.

4-) Comment connaître l'évolution d'un système ? Le but du modèle est de simplifier le réel, une fois cette étape accomplie, **il faut étudier le modèle dans le but de connaître la possible évolution du système réel, en suivant les étapes :**

→ **1) Identifier les grandeurs caractéristiques :** Dans un premier temps, il faut identifier les **grandeurs pertinentes** du système.

1.1 Grandeurs à suivre au cours du temps ou en fonction d'une autre grandeur : Pour connaître l'évolution du système, on cherche une **grandeur qui caractérise cette évolution**. On peut donc suivre cette **grandeur au cours du temps**. On peut aussi vouloir connaître **l'évolution d'une grandeur par rapport à une autre**.

1.2 Grandeurs d'influence : D'autres grandeurs sont importantes dans le sens où leur changement modifié le comportement du système.

→ **2. Utiliser les lois de la physique :** Dans tous les cas cités précédemment, la connaissance de l'évolution du système s'appuie sur des **lois de la physique** faisant intervenir les grandeurs ciblées :

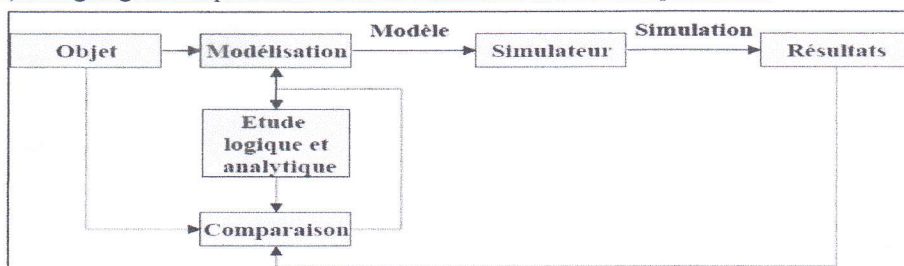
Principe fondamental de la dynamique, théorème de l'énergie cinétique ... – Loi des mailles, loi des nœuds ... A l'issue de ces lois, on obtient souvent une **équation différentielle**.

→ **3. La résolution des Equations différentielles :** Une équation différentielle est une équation dont la solution est une fonction mathématique. Dans une équation différentielle, on pourra voir apparaître la fonction recherchée, mais aussi sa dérivée première et/ou sa dérivée seconde.

-La méthode de résolution peut être soit numérique (utilisation de logiciels, méthode d'Euler, méthode de R-K) soit mathématique.

-Avec la résolution numérique on obtient des approximations des solutions. Les méthodes numériques sont souvent des méthodes itératives.

5-) L'Organigramme pour la modélisation et la simulation d'un processus :



1,2 (P)
6-) Les modèles thermodynamiques peuvent aider à réduire le nombre de données expérimentales nécessaires pour un problème de conception spéciale, mais très souvent, au moins une partie des points expérimentaux sont nécessaires pour ajuster les paramètres d'interaction du modèle. (1/2)

→ Les équations d'état permettent de caractériser l'état d'un fluide et constituent l'outil de base de l'étude des propriétés de gaz ou de liquides purs, ou de leurs mélanges, voire même des mélanges les plus complexes. (1/4)
L'équation d'état, dans sa forme usuelle, est une fonction mathématique qui relie les variables d'état d'un gaz : P, V, T et n. Elle prend la forme générale suivante : (1/4)
 $f(P, V, T, n) = 0$.

L'avantage de cette dernière est son application dans un large intervalle de température et de pression pour divers composés, du gaz léger aux liquides denses. (1/4)

1,2 (P)
7-) L'élaboration de cette équation d'état repose sur la théorie cinétique, dont les hypothèses sont les suivantes : (1/4)

- le gaz est assimilé à un gaz monoatomique, (1/4)
- l'isotropie des vitesses, (1/4)
- la densité molaire uniforme ;
- aucune interaction entre les molécules (les pressions sont relativement faibles).

1,2 (P)
8-) On peut distinguer principalement deux types de simulation dans le cas des procédés chimiques : la simulation statique (steady state) et la simulation dynamique (transient state).

1. **Simulation statique:** La simulation statique d'un procédé vise à définir les propriétés des flux (débit, température, fraction vaporisée, ...), ainsi que les bilans matière et d'énergie en régime stabilisé. Le procédé est décomposé en blocs représentant les différentes opérations unitaires mises en œuvre. Les blocs sont liés entre eux par des flux de matière ou d'énergie. (1/2)

2. **Simulation dynamique:** La simulation dynamique d'un procédé vise à définir les propriétés des courants en fonction du temps, pendant des situations transitoires où le régime n'est pas stable. (1/2)

2,1 (P)
9-*) Van der Waals a modifié l'équation d'état en tenant compte des interactions entre les molécules. Il a effectué ces modifications car il y'a une utilisation limitée aux gaz à basse pression.

Les hypothèses: Selon le modèle de Van der Waals :

- Les molécules occupent un volume propre (volume exclu) incompressible. (grandeur fixe) (1/2)
- Les molécules sont soumises à des forces d'interaction. (grandeur variable à calculer). (1/2)

**) l'équation s'écrit sous la forme suivante :
$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2}$$

Cette équation contient donc deux termes ; L'un attractif et l'autre répulsif. (1/4)

***)) Cette équation fut la première à traduire l'existence d'une transition de phases de type « liquide-vapeur » et à rendre compte de l'existence d'un point critique. Elle représente moins bien les propriétés de la phase liquide que celles de la phase vapeur. (1/2)

4,25pts
10)- La forme générale des équations d'état cubiques est la suivante :

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + ubV + wb^2} \quad \left(\frac{1}{4} \times 2\right)$$

*) Les équations d'état les plus fréquemment utilisées sont : l'équation de Redlich-Kwong (RK), de Soave-Redlich-Kwong (SRK) et de Peng Robinson (PR). (1/4 x 3)

) → **Redlich-Kwong : Cette équation est une modification thermique du terme attractif. L'équation de **Redlich-Kwong** fournit des résultats améliorés pour la phase vapeur par rapport au liquide. Cette équation est donnée par l'expression suivante : (1/2)

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{T^{0.5}V(V+b)} \quad \left(\frac{1}{4} \times 2\right)$$

→ **L'équation de Soave-Redlich-Kwong (SRK)** est une modification de l'équation

Redlich-Kwong. Soave a modifié l'expression du terme attractif en faisant intervenir une fonction dépendant de la température. Cette modification permet d'améliorer le calcul des volumes des phases vapeur et liquide de certains fluides comme elle peut être appliqués pour les composés non polaires ou légèrement polaires. (1/2)

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{(v+b)v} \quad \left(\frac{1}{4} \times 2\right)$$

→ **L'équation de Peng Robinson** : Cette équation est utilisée pour des composés polaires (ainsi que pour les hydrocarbures) et donne des résultats en général plus proches des résultats expérimentaux (principalement pour les propriétés volumétriques côté liquide) que l'équation SRK. (1/2)

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v(v+b)+b(v-b)} \quad \left(\frac{1}{4} \times 2\right)$$

7pts
1/4
11)- Résolution de systèmes d'équation non linéaires : – Méthodes directes : impossibles. (1/2)

→ Méthodes itératives: **bisection (dichotomie), Fausse position, Newton, point fixe, Décomposition LU...**

• Problèmes : – Convergence – Complexité. (1/4 x 2)