**Détermination des points de fonctionnement (température et taux de conversion) d'un réacteur ouvert siège d'une transformation modélisée par une réaction isotherme unique**

**Stabilité de ces points de fonctionnement**

**Compétences python visées :**

- Définir une fonction
- Rechercher, par dichotomie, les valeurs de la variable qui annulent la fonction, ou qui lui donnent une valeur particulière.
- Tracer sur un même graphe deux fonctions réelles de la même variable réelle.
- Rechercher un point de fonctionnement, c'est-à-dire une intersection entre deux courbes.
- Selon un critère établi et connu, discuter de la stabilité d'un point de fonctionnement.
- Calculer les dérivées de deux fonctions en un même point et les comparer.

**Contexte chimique :**

Une réaction chimique se déroule en régime stationnaire dans un réacteur parfaitement agité continu (RPAC). Elle met en jeu un réactif B, minoritaire, dont la concentration à l'entrée est $[\mathrm{B}]_e = 6{,}16\ \mathrm{mol} \cdot \mathrm{L}^{-1}$.

- Le volume du réacteur est $V = 500\ \mathrm{mL}$
- L'enthalpie standard de réaction vaut $\Delta_r H^0 = -150\ \mathrm{kJ.mol}^{-1}$ ;
- Son énergie d'activation est $E_A = 157\ \mathrm{kJ.mol}^{-1}$
- Le facteur pré-exponentiel de la loi d'Arrhénius est $A = 1{,}0.10^{15}\ \mathrm{s}^{-1}$
- Le débit volumique de la solution, en entrée comme en sortie, est $D_v = 3{,}0\ \mathrm{L} \cdot \mathrm{h}^{-1}$ ;
- La solution entre dans le réacteur à $T_e = 200°\mathrm{C}$ ;
- La paroi externe du réacteur a une surface $S = 300$ cm² et est maintenue à 20°C. Le coefficient $h$ de la conducto-convection est $h = 80\ \mathrm{W} \cdot \mathrm{m}^{-2} \cdot \mathrm{K}^{-1}$.
- La masse volumique du solvant est $\mu = 900\ \mathrm{g} \cdot \mathrm{L}^{-1}$ .
- Sa capacité thermique massique est $c_p = 2{,}1\ \mathrm{J} \cdot \mathrm{g}^{-1} \cdot \mathrm{K}^{-1}$.
- La constante des gaz parfaits est $R = 8{,}31\ \mathrm{J} \cdot \mathrm{mol}^{-1} \cdot \mathrm{K}^{-1}$.

**Travail à effectuer :**

- Définir les fonctions $\alpha_{thq}(T)$ et $\alpha_{cinet}(T)$ ; Pour le premier, on prendra en compte la conducto-convection.
- Reprendre et s'approprier le programme dichotomie (cf ci-dessous) vu en informatique au cours de l'année ;
- Se servir de ce programme (en l'adaptant éventuellement) pour chercher les valeurs de la température qui rendent $\alpha_{thq}(T)$ égal à 1, et égal à 0 ;
- Tracer les courbes représentatives des deux fonctions (la droite en bleu, l'autre courbe en rouge), dans un domaine de température légèrement plus large que celui défini par les deux températures précédentes.
- Chercher numériquement les coordonnées des points d'intersection entre les deux courbes ;
- On rappelle que le point de fonctionnement du réacteur est stable si, au point où les courbes se croisent, la droite a une pente plus importante que la courbe en forme de « S ». Ecrire un morceau de programme pour calculer la dérivée d'une fonction en un point, puis un autre morceau de programme pour analyser la stabilité des 3 points de fonctionnement.

```python
def dicho(f, a, b, eps):
    ''' Donne une estimation à eps près du zéro de f entre a et b
        entrées : f, callable, fonction dont on cherche le zero
                  a, float, borne inférieure de l'intervalle de recherche
                  b, float, borne supérieure de l'intervalle
                  eps, float, précision sur la recherche du zéro
        sortie : m, float, estimation du zéro. '''
    while b-a > eps :
        m = (a+b)/2
        if f(m)*f(a) < 0 :  # le zéro est entre a et m
            b = m
        else :
            a = m
        m = (a+b)/2
    return m
```