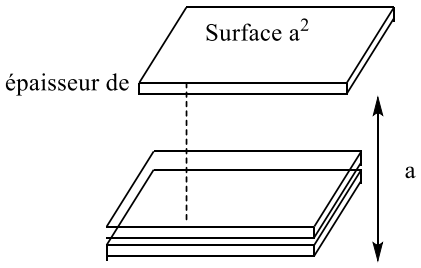
PC* 2023 / 2024
Bellevue

DS de modélisation – éléments de correction
18 Mars 2024

Q37 . L'analyse informatique qui précède a montré que pour une surface S , la surface **occupée par les fibres est S_{fibre} = 0,5831 S .**
Si on considère un échantillon cubique de Kairlin d'arête a , on peut le décrire comme une superposition de plans de surface a^2 et d'épaisseur de



Soit V_{fibre} le volume occupé par les fibres :

$$V_{fibre} = \int_0^a 0{,}5831 a^2 \, de$$

$$V_{fibre} = 0{,}5831 a^3$$

Soit $V_{fibre} = 0{,}5831\ V_{cube}$

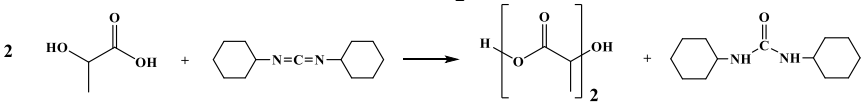
Pour un échantillon de 1 m^3 :
V_{fibre} = 0,5831 m^3 et $m_{fibre} = 1{,}4 .10^6 * 0{,}5831$
$V_{PLA} = (1 – 0{,}5831)\ m^3$ et $m_{PLA} = 1{,}25.10^6 * (1- 0{,}5831)$

m_{fibre} = 816 kg ; m_{PLA} = 521 kg

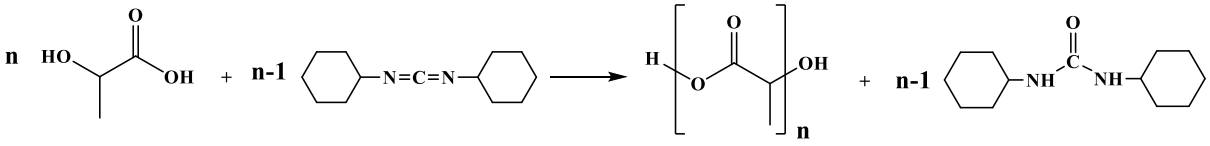
Q38 . La DMAP est *régénérée* en fin de réaction : elle peut effectivement alors être considérée comme un catalyseur .

Q39 . …..Ecriture totalement incorrecte du mécanisme !!!!

Q40 . En faisant le bilan des « étapes » décrites dans le document réponse , on obtient :



La généralisation conduit à



n_0	n_0'		
n_0 - n ξ	n_0' - (n-1)ξ	ξ	(n-1) ξ

Les 42 heures de réaction *laissent supposer* que la réaction est plutôt lente …

▪Rendement de la réaction : il est nécessaire de connaitre le réactif limitant :
Quantités de matière introduites
n_0 (acide lactique) = 150 * 1,25 / 90 = 2,08 mol
n_0 (DCC) : aucune information n'est fournie !!……⇒ on considère que l'acide lactique est le réactif limitant .

Pour le PLA , en considérant n = 10 , la masse molaire est égale à 1 + 10* (2*16+3*12+ 4) + 17 = 1+n*72 + 17 = 738 $gmol^{-1}$ (dans l'énoncé original , on donnait : M = 700 $gmol^{-1}$)
Soit **n (PLA) = 122 / 738 = 0,165 mol**

D' où le rendement $rdt = 100 \frac{n(PLA)\ obtenu}{n(PLA)\ obtenu\ si\ réaction\ totale} = 100 \frac{n(PLA)\ obtenu}{n_0 / n}$

$rdt = 100\ n \frac{n(PLA)\ obtenu}{n_0} = 100 \times 10\ \frac{0,165}{2,08}$ **rdt : 79 %**

Q41. *Il est regrettable que l'énoncé ne soit pas plus rigoureux : la vitesse de disparition et la vitesse de la réaction de polymérisation ne sont pas identiques .*
Une loi de vitesse est généralement donnée pour la vitesse de réaction : la correction quisuit est basée là dessus .
Soit v la vitesse volumique de la réaction d e polymérisation .
En supposant que le volume du milieu réactionnel peut être considéré comme invariant , cette vitesse peut être définie par : $\boldsymbol{v = -\frac{1}{n}\frac{d[Lac]}{dt}}$

La vitesse de disparition de l'acide lactique serait définie par $v_{dis} = -\frac{d[Lac]}{dt}$

A partir de la loi de vitesse fournie : $\boldsymbol{v = k_{reaction}[Lac]^2}$

L'équation différentielle vérifiée par la concentration en acide lactique s'écrit :

$$-\frac{1}{n}\frac{d[Lac]}{dt} = k_{reaction}[Lac]^2$$

Q42. La résolution de l'équation différentielle précédente conduit à

$$\frac{1}{[Lac]} = \frac{1}{[Lac]_0} + n\, k_{reaction} t$$

Q43. La condition cherchée s'écrit n (Lac) = (1 – 0,95) n_0(Lac) soit , en supposant toujours le volume réactionnel invariable (…) , **[Lac] = 0,05 [Lac]$_0$** et alors

$t_{95} = \frac{1}{n\, k_{reaction}[Lac]_0}\left(\frac{[Lac]_0}{[Lac]} - 1\right) = \frac{1}{n\, k_{reaction}[Lac]_0} \times \frac{95}{5}$ $\boldsymbol{t_{95} = \frac{19}{n\, k_{reaction}[Lac]_0}}$

Remarque : l'énoncé original demandait d'évaluer cette durée ….
Cependant compte tenu de l'imprécision du sujet ; on ne dispose pas du volume réactionnel …. qui devrait être invariant pour valider les expressions précédentes …et alors le calcul de la concentration initiale en acide lactique pose problème .
Si on prend le volume du solvant comme le volume réactionnel .
Alors **$[Lac]_0 = 2,08 / 100 = 2,08.10^{-2}$ mol cm^{-3}**
La valeur donnée pour $k_{reaction}$ était $k = 1,25.10^{-3} mol^{-1} s^{-1} cm^{-3}$: t_{95} = 73076 s ≃ 20 heures

Q44. Le volume de PLA produit est évalué à V_{PLA} = 122 / 1,25 = **97,6 cm^3**
En faisant l'approximation que l'énergie utilisée est seulement associée à l'agitateur , cette énergie s'exprime selon E = P Δt avec ΔT = 42 heures E = 1680 Wh
Soit Energie grise = $1680 / 97,6.10^{-6} = 17,2 .10^6$ Whm^{-3} **$E_{g\ PLA}$ = 17,2MWhm^{-3}**

Q45. Pour le kairlin , on fait l'approximation que l'énergie grise se limite à celle associée à la production des fibres et du PLA , soit $E_{g,\ kairlin} = V_{PLA}\ E_{gPLA} + V_{lin}\ E_{g,lin}$
où V_{PLA} et V_{lin} représentent respectivement le volume de PLA et de lin contenus dans 1 m^3 de matériau .
En utilisant la question Q37 $E_{g,\ kairlin}$ **(1m^3)** = $17,2 .10^6 * (1 – 0,5831) + 0,5831*40.10^3 = 7,2.10^6$ Wh
$E_{g\ kairlin}$ = 7,2 MWhm^{-3}