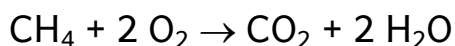


Le programme python™ suivant permet de calculer les quantités finales de réactifs et de produits pour la réaction de combustion de méthane (CH₄) dans le dioxygène :



```
1 especes=["CH4","O2","CO2","H2O"]
2 coefficients=[-1, -2, 1, 2]
3 etat_init = [8.0, 20.0, 0.0, 0.0] #quantités initiales en moles
4 etat_inter = etat_init[:]#on initialise l'état intermédiaires
5
6 dx = 0.001 #pas
7
8 x = 0 #avancement initial
9
10 while etat_inter[0]>0 and etat_inter[1]>0: #tant qu'il y a des
    réactifs
11     x = x + dx
12     etat_inter[0] = etat_init[0] + coefficients[0]*x
13     etat_inter[1] = etat_init[1] + coefficients[1]*x
14     etat_inter[2] = etat_init[2] + coefficients[2]*x
15     etat_inter[3] = etat_init[3] + coefficients[3]*x
16
17 print("==== Etat Maximal =====")
18 for i in range(4):
19     print(especes[i],": {:.2f}".format(etat_inter[i])) #on affiche le
    résultat avec 2 chiffres après la virgule
20 print("")
21 print("Avancement Maximal : xmax = {:.2f} mol".format(x))
```

Lors de l'exécution de ce programme, on obtient l'affichage suivant :

```
==== Etat Maximal =====
CH4 : -0.00
O2 : 4.00
CO2 : 8.00
H2O : 16.00

Avancement Maximal : xmax = 8.00 mol
```

Questions :

1. Compléter le tableau d'avancement et retrouver les valeurs données par le programme à l'avancement maximal :

		CH ₄	+ 2 O ₂	→	CO ₂	+ 2 H ₂ O
Etat initial	$x = 0$	8	20		0	0
Intermédiaire	x	$8 - x$	$20 - 2x$		$0 + x$	$0 + 2x$
Etat final	$x_f = x_{max}$	$8 - x_{max}$	$20 - 2x_{max}$		x_{max}	$2x_{max}$

2. La ligne n°2 contient les coefficients stœchiométriques des réactifs et des produits, pourquoi certains sont-ils négatifs ?

Ce sont les réactifs qui ont un coefficient négatif (car ils disparaissent) : cela correspond au signe "-" qui apparait dans le tableau d'avancement.

3. Quelle ligne indique au programme que l'avancement maximal a été atteint ?

C'est la ligne 10 :

La variable `etat_inter[0]` contient la quantité de l'espèce "0" c'est-à-dire le réactif CH₄ dans ce programme.

La variable `etat_inter[1]` contient la quantité de l'espèce "1" c'est-à-dire le réactif O₂ dans ce programme.

```
while etat_inter[0]>0 and etat_inter[1]>0:
```

Cette ligne signifie que tant qu'il reste l'un ou l'autre des 2 réactifs, le programme doit continuer à diminuer progressivement la quantité.

Quand l'un ou l'autre arrivera à 0, la boucle `while` va s'arrêter.

4. Quelle ligne calcule la quantité de dioxyde de carbone (CO₂) qui se forme ?

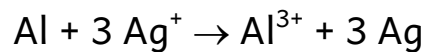
C'est la ligne 14 : `etat_inter[2] = etat_init[2] + coefficients[2]*x`

5. Comment faut-il modifier le programme pour connaître l'état final quand on a au départ : 4 mol de CH₄ et 8 mol de O₂ ?

Il faut modifier la ligne 3 : `etat_init = [8.0, 20.0, 0.0, 0.0]`

Avec les valeurs : `etat_init = [4.0, 8.0, 0.0, 0.0]`

6. Comment faut-il modifier le programme pour étudier la réaction suivante :



avec un mélange initial de 0,3 mol d'aluminium et 0,1 mol d'ion argent ?

Il faut modifier les 3 premières lignes :

```
especes=["Al", "Ag+", "Al3+", "Ag"]
coefficients=[-1, -3, 1, 3]
etat_init = [0.3, 0.1, 0.0, 0.0]
```

7. Comment faut-il modifier le programme pour étudier la réaction de dosage des ions Fe²⁺ par les ions MnO₄⁻ avec un mélange initial de 0,05 mol d'ions Fe²⁺, 0,05 mol d'ions MnO₄⁻ et 1 mol d'ions H⁺ ?

L'équation de la réaction (vue lors du TP du dosage du sel de mohr) est :



```
especes=["MnO4-", "H+", "Fe2+", "Mn2+", "H2O", "Fe3+"]
coefficients=[-1, -8, -5, 1, 4, 5]
etat_init = [0.05, 0.05, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0]
```

8. Que faut-il faire si on veut que le programme affiche d'abord l'état initial :

<pre>===== Etat Initial ===== CH4 : 8.00 O2 : 20.00 CO2 : 0.00 H2O : 0.00</pre>	<pre>===== Etat Maximal ===== CH4 : -0.00 O2 : 4.00 CO2 : 8.00 H2O : 16.00 Avancement Maximal : xmax = 8.00 mol</pre>
---	--

Il faut introduire les lignes suivantes à un endroit quelconque entre les lignes 4 et 10 :

```
print("=====  
Etat Initial  
=====")  
for i in range(4):  
    print(especes[i], ": {:.2f}".format(etat_init[i]))
```