

TP ÉTUDE D'UNE RÉACTION A L'AIDE DE PYTHON

objectif : effectuer l'étude de l'avancement d'une réaction avec l'environnement Python

méthode : L'exemple de la réaction du sulfure d'hydrogène avec le dioxyde de soufre est développé ci-dessous ; à vous de vous en inspirer pour créer le programme permettant de suivre la réaction de votre choix (trouvée dans le manuel, sur le web...) avec les quantités initiales de votre choix.

Compte-rendu : Il comportera l'introduction, une capture du programme, le graphique d'évolution ainsi que la conclusion.



Évolution d'un système chimique

Exemple de réaction chimique

On considère la réaction totale entre l'hydrogène sulfureux (H₂S) et le dioxyde de soufre (SO₂) qui produit du soufre et de l'eau et modélisée par l'équation :



État final

```
a, b, c, d = 2, 1, 3, 2          # coefficient stœchiométrique de H2S
n_H2S, n_SO2, n_S, n_H2O = 1, 1, 0, 0  # Quantités de matière initiales
x = 0          # Initialisation de l'avancement
dx = 0.01      # Pas de l'avancement
while (n_H2S>0) and (n_SO2>0) :
    x = x + dx          # Incrémentation de l'avancement
    n_H2S = n_H2S - a*dx  # Nouvelle quantité de matière
    n_SO2 = n_SO2 - b*dx
    n_S = n_S + c*dx
    n_H2O = n_H2O + d*dx
print('Avancement final = ',round(x,2), ' mol')
print('n(H2S) = ', round(n_H2S,2))
print('n(SO2) = ', round(n_SO2,2))
print('n(S) = ', round(n_S,2))
print('n(H2O) = ', round(n_H2O,2))
```

Résultats :

```
Avancement final = 0.5 mol
n(H2S) = -0.0
n(SO2) = 0.5
n(S) = 1.5
n(H2O) = 1.0
```

Evolution des quantités de matière

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

```
a, b, c, d = 2, 1, 3, 2          # coefficient stœchiométrique de H2S
n_H2S, n_SO2, n_S, n_H2O = 1, 1, 0, 0  # Quantités de matière initiales
n_H2S, n_SO2, n_S, n_H2O = [n0_H2S], [n0_SO2], [n0_S], [n0_H2O]  # Initialisation des tableaux
x = [0]
dx = 0.01
```

```
while (n_H2S[-1]>0) and (n_SO2[-1]>0) :
    x.append(x[-1] + dx)
    n_H2S.append(n_H2S[-1] - a*dx)
    n_SO2.append(n_SO2[-1] - b*dx)
    n_S.append(n_S[-1] + c*dx)
    n_H2O.append(n_H2O[-1] + d*dx)
xMax = x[-1]
plt.plot(x,n_H2S,label = "Réactif H2S")
plt.plot(x,n_SO2,label = "Réactif SO2")
plt.plot(x,n_S,label = "Produit S")
plt.plot(x,n_H2O,label = "Produit H2O")
plt.title("Evolution d'une réaction chimique")
plt.xlabel("Avancement x (mol)")
plt.xlim(0,xMax)
plt.ylabel("Quantité de matière (mol)")
plt.ylim(0,2)
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()
```

Copie du programme :

```
a, b, c, d = 2, 1, 3, 2
n_H2S, n_SO2, n_S, n_H2O = 1, 1, 0, 0
x = 0
dx = 0.01
while (n_H2S>0) and (n_SO2>0) :
    x = x + dx
    n_H2S = n_H2S - a*dx
    n_SO2 = n_SO2 - b*dx
    n_S = n_S + c*dx
    n_H2O = n_H2O + d*dx
print('Avancement final = ',round(x,2), ' mol')
print('n(H2S) = ', round(n_H2S,2))
print('n(SO2) = ', round(n_SO2,2))
print('n(S) = ', round(n_S,2))
print('n(H2O) = ', round(n_H2O,2))
import matplotlib.pyplot as plt
a, b, c, d = 2, 1, 3, 2
n_H2S, n_SO2, n_S, n_H2O = 1, 1, 0, 0
n0_H2S, n0_SO2, n0_S, n0_H2O = 1, 1, 0, 0
n_H2S, n_SO2, n_S, n_H2O = [n0_H2S], [n0_SO2], [n0_S], [n0_H2O]
x = [0]
dx = 0.01
while (n_H2S[-1]>0) and (n_SO2[-1]>0) :
    x.append(x[-1] + dx)
    n_H2S.append(n_H2S[-1] - a*dx)
    n_SO2.append(n_SO2[-1] - b*dx)
    n_S.append(n_S[-1] + c*dx)
    n_H2O.append(n_H2O[-1] + d*dx)
    xMax = x[-1]
plt.plot(x,n_H2S,label = "Réactif H2S")
plt.plot(x,n_SO2,label = "Réactif SO2")
plt.plot(x,n_S,label = "Produit S")
plt.plot(x,n_H2O,label = "Produit H2O")
plt.title("Evolution d'une réaction chimique")
plt.xlabel("Avancement x (mol)")
plt.xlim(0,xMax)
plt.ylabel("Quantité de matière (mol)")
plt.ylim(0,2)
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()
```

Console Python

```
Avancement final = 0.5 mol
n(H2S) = -0.0
n(SO2) = 0.5
n(S) = 1.5
n(H2O) = 1.0
```

