

Descriptif du sujet

Objectif	Utiliser un langage de programmation dans le but de déterminer la composition de l'état final d'un système chimique siège d'une transformation chimique totale (ici : $2\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$)
Niveau concerné	Physique-Chimie 1^{ère} générale – Constitution et transformations de la matière
Compétences exigibles au B.O.	<ul style="list-style-type: none"> • Déterminer la composition de l'état final d'un système siège d'une transformation chimique totale à l'aide d'un langage de programmation.
Compétences	<ul style="list-style-type: none"> • S'approprier (APP) : Extraire des informations utiles d'une observation, d'un texte ou d'une représentation conventionnelle (schéma, tableau, graphique,...) • Analyser/Raisonner (ANA/RAI) : Exploiter des informations, des résultats, des mesures... • Réaliser (REA) : Etablir les relations littérales et effectuer les calculs numériques, utiliser un langage de programmation • Valider (VAL) : Interpréter les résultats • Communiquer (COM) : Rédiger une explication, une réponse, un paragraphe argumenté ou une synthèse
Mise en œuvre	<ul style="list-style-type: none"> • Ce document est une activité de la partie constitution et transformation de la matière du programme de spécialité de première, prévue pour une durée d'une heure. • Le parcours de résolution de cette activité est différencié, trois démarches sont proposées (initiation, avancée et experte).
Matériel nécessaire	<ul style="list-style-type: none"> • Ordinateur • Logiciel Edupython, Spyder ... • Programme : Expedition_lunaire.py
Sources	<ul style="list-style-type: none"> • Logo Python (cartouche) : https://fr.wikipedia.org • Image de la verrerie (cartouche) : http://www.chemistryexplained.com • Image de la pile à combustible (contexte) : https://airandspace.si.edu • Image du module de commande et de service (document 1) : https://fr.wikipedia.org
Auteur	Jean-Charles MURS – Lycée Touchard – Le Mans (2020)



Expédition lunaire

1^{ère}

Objectif : Déterminer la composition de l'état final d'un système siège d'une transformation chimique totale à l'aide d'un langage de programmation (Python).

Contexte

Le programme Apollo fut lancé en 1961 dans le but d'envoyer des hommes sur la Lune. La NASA concrétisa cet objectif et douze hommes marchèrent sur le satellite naturel de la Terre. Le programme Apollo se termina en 1975. Le module de commande et de service est l'un des composants majeurs du programme, c'est un véhicule spatial permettant de transporter les trois astronautes composant l'équipage.

Afin d'alimenter le module de commande en eau et en électricité, la NASA utilisa, trois piles à combustible qui furent placées dans le module de service. Ces piles à combustible (PAC) produisent de l'énergie électrique grâce à une réaction d'oxydoréduction entre le dihydrogène $H_2(g)$ et le dioxygène $O_2(g)$. L'eau liquide $H_2O(l)$ formée par cette réaction fut utilisée par les astronautes.

On considère ici, une mission Apollo dont la durée de vol fut de douze jours.

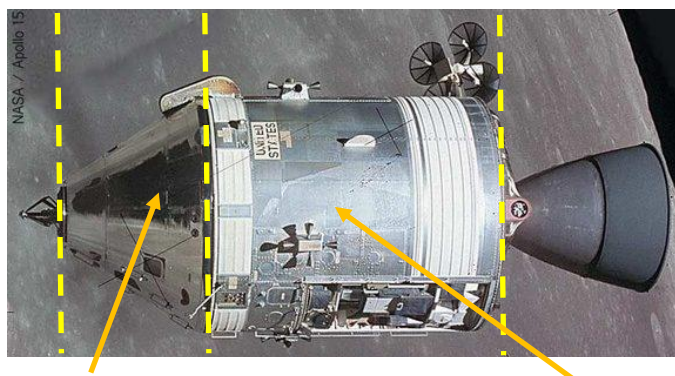


Pile à combustible du module de service

Source photo :

<https://airandspace.si.edu>

Documents à votre disposition

Document 1 : *Module de commande et de service*

Module de commande

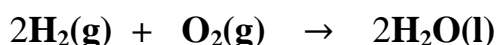
Module de service contenant les trois piles à combustible ainsi que les réservoirs de dioxygène et de dihydrogène

On admet que les réservoirs, lors de cette mission Apollo, contenaient $1,30 \times 10^4$ mol de dihydrogène ainsi que $9,50 \times 10^3$ mol de dioxygène.

Masses molaires:

$M(O) = 16,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$; $M(H) = 1,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

Source photo : <https://fr.wikipedia.org>

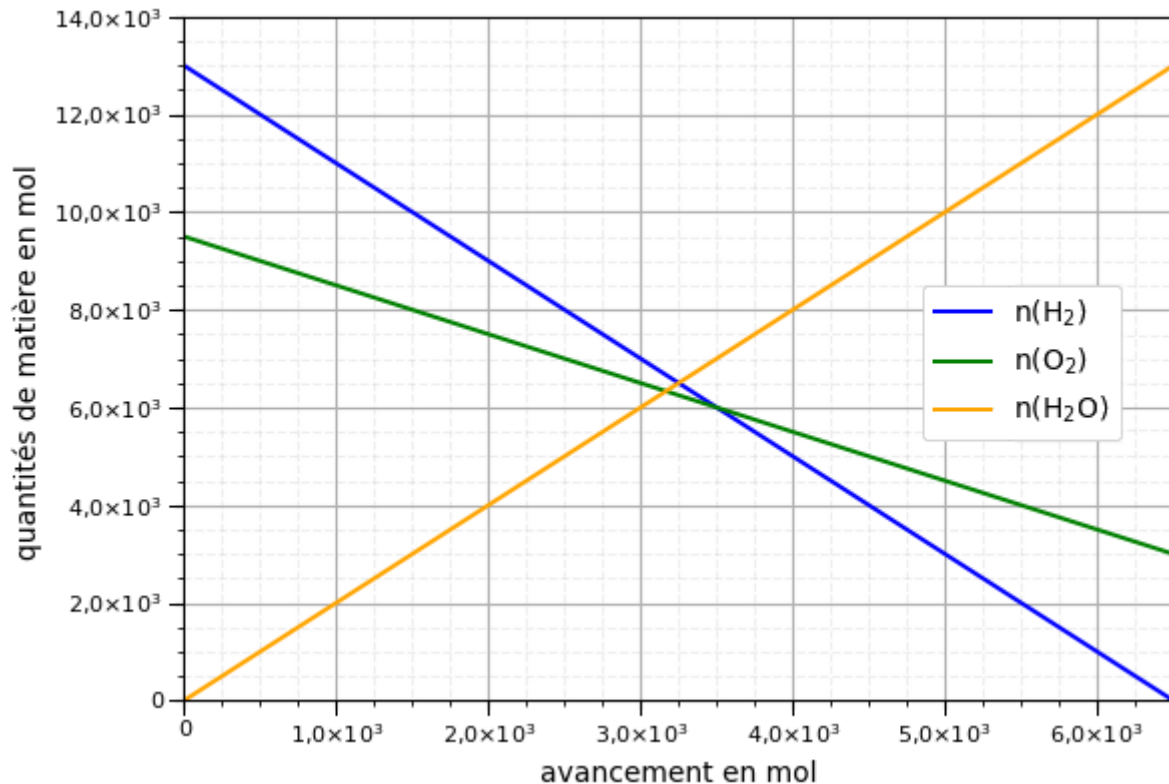
Document 2 : *Equation d'oxydoréduction se déroulant dans une pile à combustible***Document 3 :** *L'équipage d'une mission Apollo*

L'équipage comprenait trois membres, le commandant de l'équipage, le pilote du module lunaire et le pilote du module de commande et de service.

On estime les besoins de l'équipage à :

- 4,0 kg d'eau par jour et par personne.
- 0,82 kg de dioxygène par jour et par personne

Document 4 : Graphique représentant l'évolution des quantités de réactifs et de produits en fonction de l'avancement (graphique obtenu à l'aide du langage de programmation Python)



Document 5 : Programme Python fourni par le professeur

Ce programme, à compléter, permettra d'obtenir la composition finale du système où s'effectue la transformation chimique étudiée (voir équation d'oxydoréduction du document n°2)

```
nH2i = 1.30E4 #Quantité de matière initiale pour H2
nO2i = 9.50E3 #Quantité de matière initiale pour O2
```

```
# hypothèse : H2 est le réactif limitant
xmaxH2 = nH2i/2
```

```
# hypothèse : O2 est le réactif limitant
xmaxO2 = nO2i
```

```
if xmaxH2 < xmaxO2:
    xf = xmaxH2
elif xmaxO2 < xmaxH2:
    xf = xmaxO2
else: # xmaxH2 = xmaxO2
    xf = xmaxH2
```

```
nH2f = nH2i - 2*xf
nO2f = # ligne à compléter
nH2Of = # ligne à compléter
```

```
print("La quantité de matière de dihydrogène à l'état final est : ",nH2f," mol")
print("La quantité de matière de dioxygène à l'état final est : ",nO2f," mol")
print("La quantité de matière d'eau à l'état final est : ",nH2Of," mol")
```

① On pose les hypothèses :

- Si H_2 est le réactif limitant
 $x_{\max} = n(\text{H}_2)/2$
- Si O_2 est le réactif limitant
 $x_{\max} = n(\text{O}_2)$

② Trois cas possibles :

- H_2 est le réactif limitant
- O_2 est le réactif limitant
- Les proportions sont stœchiométriques

③ Calcul des quantités de matière finales :

- $n_f(\text{H}_2)$
- $n_f(\text{O}_2)$ (ligne à compléter)
- $n_f(\text{H}_2\text{O})$ (ligne à compléter)

Démarche experte

1^{ère} partie : composition finale du système chimique (Python)

Déterminer la composition finale du système à l'aide d'une méthode graphique, comparer avec les résultats du programme Python réalisé (argumenter). (APP-ANA-REA-VAL-COM)

2^{ème} partie : besoins en eau et en dioxygène pour la mission Apollo

Montrer que les quantités de matière de dihydrogène et de dioxygène embarquées dans le module de service sont suffisantes pour assurer les besoins de l'équipage en eau et en dioxygène pour cette mission Apollo. (APP-ANA-REA-VAL-COM)

Pour chacune des parties, vous devrez développer une argumentation scientifique (incluant des calculs) en vous appuyant à la fois sur les documents à votre disposition ainsi que sur vos connaissances.



Démarche avancée

1^{ère} partie : composition finale du système chimique (Python)

1. Réaliser le tableau d'avancement correspondant à l'équation d'oxydoréduction du document 2. (REA)
2. Déterminer graphiquement le réactif limitant ainsi que la valeur de l'avancement maximal x_{\max} . (APP-ANA)
3. Déterminer, à l'aide du document 4, la composition finale du système. (APP-ANA)
4. Compléter et exécuter le programme Python fourni par le professeur (document n°5). Les résultats obtenus précédemment (question 3) valident-ils votre programme Python ? (REA-VAL)

2^{ème} Partie : besoins en eau et en dioxygène pour la mission Apollo

5. Montrer que les quantités de matière de dihydrogène et de dioxygène embarquées dans le module de service sont suffisantes pour assurer les besoins de l'équipage en eau et en dioxygène pour cette mission Apollo. (ANA-REA-VAL-COM)

Pour cette partie, vous devrez développer une argumentation scientifique (incluant des calculs) en vous appuyant à la fois sur les documents à votre disposition ainsi que sur vos connaissances.



Démarche d'initiation

1^{ère} partie : composition finale du système chimique (Python)

1. Réaliser le tableau d'avancement correspondant à l'équation d'oxydoréduction du document 2. (REA)
2. Déterminer graphiquement le réactif limitant ainsi que la valeur de l'avancement maximal x_{\max} . (APP-ANA)
3. En utilisant le graphique du document n°4, indiquer les quantités de matière finales des réactifs et des produits ($n_f(\text{H}_2)$, $n_f(\text{O}_2)$ et $n_f(\text{H}_2\text{O})$). (APP)
4. Compléter et exécuter le programme Python fourni par le professeur (document n°5). Les résultats obtenus précédemment (question 4) valident-ils votre programme Python ? (ANA-REA)

2^{ème} partie : besoins en eau et en dioxygène pour la mission Apollo

5. Calculer les masses de dihydrogène (H_2) et de dioxygène (O_2) contenues dans les réservoirs du module de service (document n°1). (REA)
6. Calculer la masse $m(\text{O}_2)$ restante. (REA)
7. Expliquer pourquoi la masse restante en dioxygène est si importante. (ANA)
8. Calculer la masse d'eau produite par les piles à combustible du module de service. (REA)
9. Montrer que les masses de dihydrogène et de dioxygène embarquées dans le module de service sont suffisantes pour assurer les besoins de l'équipage en eau et en dioxygène lors de cette mission Apollo. (VAL)

Eléments de correction :

1.

Equation chimique		$2 \text{H}_2(\text{g})$	+	$\text{O}_2(\text{g})$	→	$2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
Etat	Avancement	$n(\text{H}_2)$		$n(\text{O}_2)$		$n(\text{H}_2\text{O})$
État initial	0	$n_0(\text{H}_2)$		$n_0(\text{O}_2)$		0
État intermédiaire	x	$n_0(\text{H}_2) - 2x$		$n_0(\text{O}_2) - x$		$0 + 2x$
État final	$x_f = x_{\text{max}}$	$n_0(\text{H}_2) - 2x_f$		$n_0(\text{O}_2) - x_f$		$0 + 2x_f$

2. A l'état final, d'après le document 4, le dihydrogène est totalement consommé, c'est donc le réactif limitant. Graphiquement, on observe que l'avancement maximal x_{max} est égal à $6,5 \times 10^3$ mol. Ceci est confirmé par le calcul suivant :

Le dihydrogène H_2 étant totalement consommé à l'état final, on a :

$$x_f = x_{\text{max}}$$

$$n_0(\text{H}_2) - 2x_{\text{max}} = 0 \quad \text{soit} \quad x_{\text{max}} = \frac{n_0(\text{H}_2)}{2}$$

Application numérique :

$$x_{\text{max}} = \frac{1,30 \times 10^4}{2} = 6,50 \times 10^3 \text{ mol}$$

3. Par lecture graphique, on obtient :

$$n_f(\text{H}_2) = 0 \text{ mol}$$

$$n_f(\text{O}_2) = 3,0 \times 10^3 \text{ mol}$$

$$n_f(\text{H}_2\text{O}) = 13,0 \times 10^3 \text{ mol}$$

Le réactif limitant est donc le dihydrogène car il a été totalement consommé.

4. Partie du programme à compléter :

$$\begin{aligned} n_{\text{H}_2\text{f}} &= n_{\text{H}_2\text{i}} - 2 * x_f \\ n_{\text{O}_2\text{f}} &= n_{\text{O}_2\text{i}} - x_f \\ n_{\text{H}_2\text{O}\text{f}} &= 2 * x_f \end{aligned}$$

Résultats du programme Python	<p>La quantité de matière de dihydrogène à l'état final est : 0.0 mol</p> <p>La quantité de matière de dioxygène à l'état final est : 3000.0 mol</p> <p>La quantité de matière d'eau à l'état final est : 13000.0 mol</p>
Résultats par lecture graphique	$\begin{aligned} n_f(\text{H}_2) &= 0 \text{ mol} \\ n_f(\text{O}_2) &= 3,0 \times 10^3 \text{ mol} \\ n_f(\text{H}_2\text{O}) &= 13,0 \times 10^3 \text{ mol} \end{aligned}$

On obtient les mêmes valeurs de quantités de matière pour la composition du système chimique à l'état final aussi bien avec le programme Python que par lecture graphique. Le programme Python est donc validé.

5. Calcul des masses de dihydrogène (H_2) et de dioxygène (O_2) :

$$m = n \times M$$

Pour le dihydrogène :

$$m_0(\text{H}_2) = n_0(\text{H}_2) \times M(\text{H}_2)$$

$$m_0(\text{H}_2) = 1,30 \times 10^4 \times 2,0 = 2,6 \times 10^4 \text{ g} \quad \text{soit} \quad m_0(\text{H}_2) = 26 \text{ kg}$$

Pour le dioxygène :

$$m_0(\text{O}_2) = n_0(\text{O}_2) \times M(\text{O}_2)$$

$$m_0(\text{O}_2) = 9,50 \times 10^3 \times 32,0 = 3,04 \times 10^5 \text{ g} \quad \text{soit} \quad m_0(\text{O}_2) = 304 \text{ kg}$$

6. Calcul de la masse de dioxygène restante :

$$m = n \times M$$

$$m(\text{O}_2)_{\text{restant}} = n_f(\text{O}_2) \times M(\text{O}_2)$$

$$m(\text{O}_2)_{\text{restant}} = 3,0 \times 10^3 \times 32,0 = 9,6 \times 10^4 \text{ g}$$

$$m(\text{O}_2)_{\text{restant}} = 96 \text{ kg}$$

7. La masse restante est importante car cela représente le dioxygène disponible pour les besoins de l'équipage (respiration).

8. Calculer de la masse d'eau produite :

$$m = n \times M$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = x_f(\text{H}_2\text{O}) \times M(\text{H}_2\text{O})$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 13,0 \times 10^3 \times 18,0 = 2,34 \times 10^5 \text{ g}$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 234 \text{ kg}$$

9.

Besoin en dioxygène pour 12 jours et 3 astronautes :

$$m_{\text{nécessaire}}(\text{O}_2) = 12 \times 3 \times 0,82 = 3,0 \times 10^1 \text{ kg}$$

Besoin en eau pour 12 jours et 3 astronautes :

$$m_{\text{nécessaire}}(\text{H}_2\text{O}) = 12 \times 3 \times 4,0 = 1,4 \times 10^2 \text{ kg}$$

Les masses disponibles pour les trois astronautes en eau et en dioxygène étant respectivement de 234 kg et 96 kg. L'eau produite par les P.A.C ainsi que le dioxygène restant sont donc suffisants pour les besoins de l'équipage.

Programme complet :

```
nH2i = 1.30E4 #Quantité de matière initiale pour H2
nO2i = 9.50E3 #Quantité de matière initiale pour O2

# hypothèse : H2 est le réactif limitant
xmaxH2 = nH2i/2

# hypothèse : O2 est le réactif limitant
xmaxO2 = nO2i

if xmaxH2 < xmaxO2:
    xf = xmaxH2

elif xmaxO2 < xmaxH2:
    xf = xmaxO2

else: # xmaxH2 = xmaxO2
    xf = xmaxH2

nH2f = nH2i - 2*xf
nO2f = nO2i - xf # ligne à compléter
nH2Of = 2*xf # ligne à compléter

print("La quantité de matière de dihydrogène à l'état final est : ",nH2f," mol")
print("La quantité de matière de dioxygène à l'état final est : ",nO2f," mol")
print("La quantité de matière d'eau à l'état final est : ",nH2Of," mol")
```