

PROGRAMME 1 :

Equation de titrage : $2 \text{MnO}_4^- (\text{aq}) + 5 \text{H}_2\text{O}_2 (\text{aq}) + 6 \text{H}^+ (\text{aq}) = 2 \text{Mn}^{2+} (\text{aq}) + 5 \text{O}_2 (\text{g}) + 8 \text{H}_2\text{O} (\text{l})$

- Relation à l'équivalence : $\frac{n(\text{MnO}_4^-)_{\text{eq}}}{2} = \frac{n(\text{H}_2\text{O}_2)_{\text{titré}}}{5}$

⚠⚠⚠ attention aux coeff stœchiométriques

Soit $\frac{C_{\text{per}} \times V_{\text{eq}}}{2} = \frac{C \times V_0}{5} \Rightarrow C = \frac{5 \times C_{\text{per}} \times V_{\text{eq}}}{2 \times V_0}$

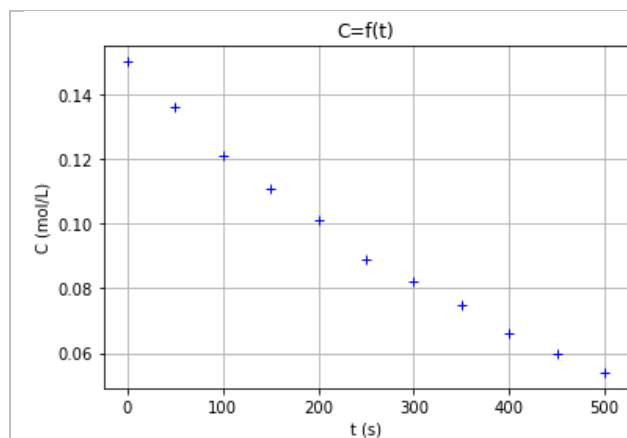
3- Calcul de C

C=[C0]

for i in range(len(Veq)) :

C.append(5*Cper*Veq[i]/(2*V0))

- On trace $C=f(t) \Rightarrow$ ce n'est pas une droite (la cinétique n'est pas d'ordre 0 !)



Valeurs de C

```
[0.13599999999999998,
0.121,
0.111,
0.10099999999999999,
0.089,
0.08199999999999999,
0.075,
0.066,
0.06,
0.054000000000000006]
```

- On trace $\ln C=f(t)$ puisque $v = -\frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = k[\text{H}_2\text{O}_2]$ soit $-\frac{dc}{dt} = kC \Rightarrow \ln C = \ln C_0 - k \times t$

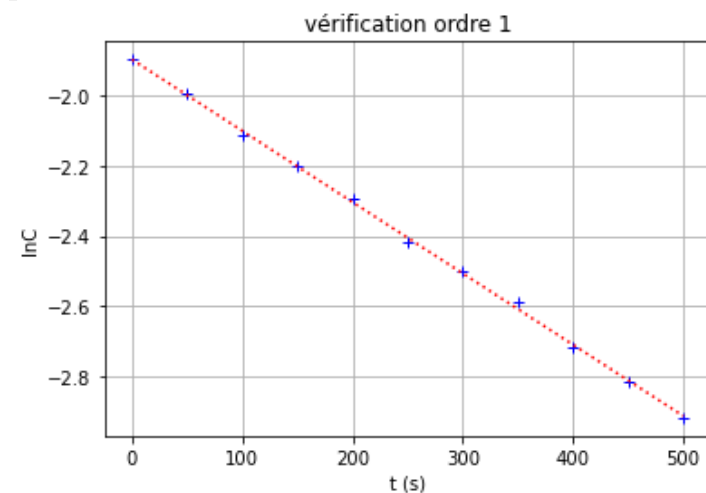
Pour cela : on calcule $\ln C$ (attention il faut faire une boucle si on manipule des listes)

#3- Calcul de $\ln C$ puisqu'on suppose un ordre 1

$\ln C = []$

for i in range(len(C)):

$\ln C.append(\text{np.log}(C[i]))$



C'est une droite !

$\Rightarrow$ on fait la régression linéaire et on demande au programme de nous afficher k avec son unité (et si possible un nombre de CS raisonnable)

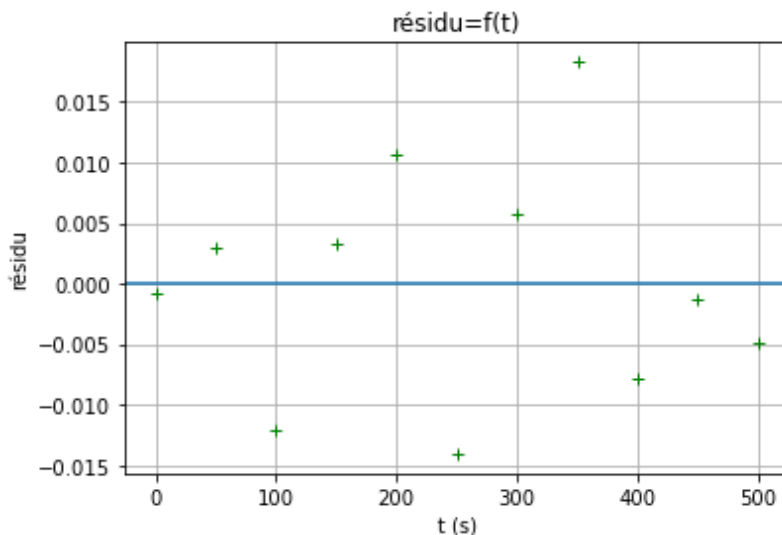
$k = 2.03 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

$\Rightarrow$ on calcule les résidus : différence entre la valeur expérimentale et celle attendue par la régression linéaire.

```
# 3- Calcul de la regression linéaire attendue et exploitation
reglin=np.polyfit(t,lnC,1)
k=-reglin[0]
lnC_theo=np.polyval(reglin,t) #calcule les valeurs obtenues par
residu=[]
for i in range(len(lnC)):
    residu.append(lnC[i]-lnC_theo[i]) #cad la différence entre l

# 4- affichage de k
print('k={:.2e} s-1'.format(k))
```

On trace les résidus :



Si les résidus sont bien répartis autour de la valeur 0 (l'axe des abscisses) c'est bon signe !
mais il reste **à calculer les incertitudes**

PROGRAMME 2

On définit bien

- les demi-étendues : pour des distributions rectangulaires (uniforme en python), comme les tolérances des verreries
- les incertitudes (ou écart type) pour les distributions gaussienne (normale en python) comme celles définies avec un %tage d'erreur.
- Le nombre d'expériences virtuelles que l'on compte faire N (prendre $N \geq 10000$)

```
D_V0=0.1 #mL
D_Veq=0.05 #mL
u_Cper=0.01*Cper #mol/L
V_Veq= 8 #mL pour le calcul d
N=10000
```

On génère les N expériences qui vont conduire à une liste de N valeurs de Cper, V0 et Veq pour cela on utilise le module random. Puis on calcule les N valeurs de C et le N valeur de lnC

```
Cper_MC=rd.normal(Cper, u_Cper,N)
Veq8_MC=Veq8+D_Veq*rd.uniform(-1,1,N)
V0_MC=V0+D_V0*rd.uniform(-1,1,N)

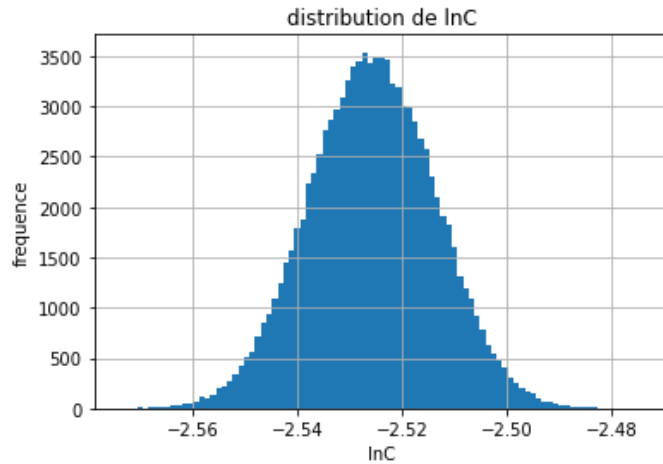
C8_MC=5*Cper_MC*Veq8_MC/(2*V0_MC)
lnC8_MC=np.log(C8_MC)
```

Il reste à faire le calcul de l'écart type qui correspond à l'incertitude et à demander son affichage :

```
#3- calcul de l'incertitude
u_lnC8=np.std(lnC8_MC,ddof=1)

#4- affichage de k
print('u_lnC8={:.1e} s-1'.format(u_lnC8))

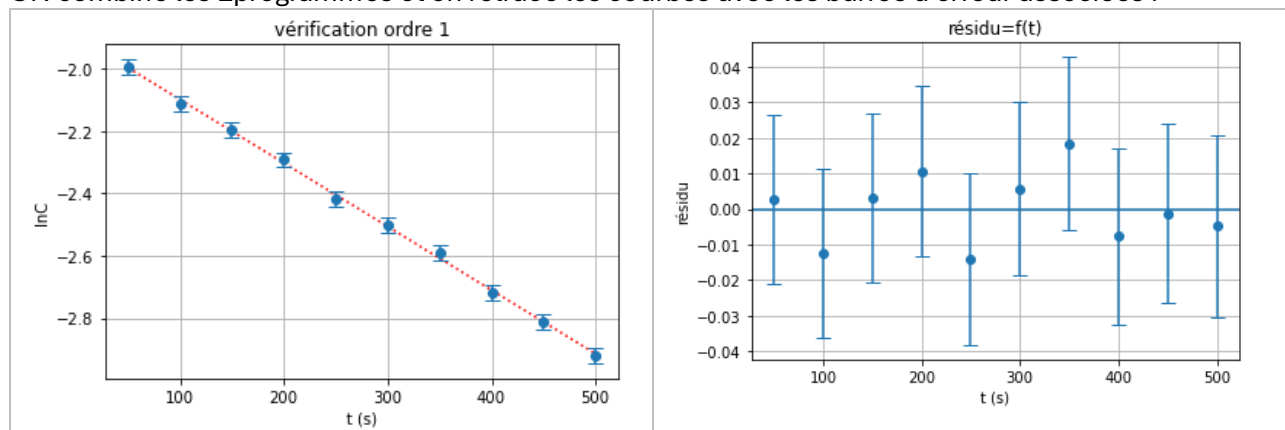
# 4-tracé de l'histogramme
plt.hist(lnC8_MC,bins= 'rice')
```



$u_{\ln C8}=1.2e-02$

PROGRAMME 3

ON combine les 2programmes et on retrace les courbes avec les barres d'erreur associées :



Avec les barres d'erreur on voit que la modélisation est incluse dans la valeur expérimentale $\pm u$.
La modélisation est donc cohérente.

(Valeurs de $u_{\ln C}$:

```
[0.011797328075126352,
0.011842114791541606,
0.011873501491402183,
0.011948280802892829,
0.012037901839850389,
0.012107959806237245,
0.012204396849529415,
0.01237543116560074,
0.012562382974591908,
0.01276714429048911]
```

)