Analyse numérique 2 avec Python™

Lire les documents : « Python - graphiques avec Matplotlib » ;
« Python - résolution d'équation avec fsolve » ;
« Python - tracé diagramme de distribution »

Télécharger et étudier les documents Google Colab sur les mécanismes réactionnels de base :

– Fiche_méthodologique_1_Mesures_et_incertitudes.ipynb ;
– Fiche Composition chimique du système dans l'état final.ipynb ;
– Fiche diagramme de distribution acide_base.ipynb ;

Analyse numérique 2.1 Calcul incertitude pour un dosage

Équation du dosage : $\mathbf{5\ Fe^{2+} + MnO_4^- + 8\ H_3O^+ = 5\ Fe^{3+} + Mn^{2+} + 12\ H_2O}$

On détermine Ve = 10,3 mL sur le suivi potentiométrique et le maximum de la courbe dérivée.

V_0 = 20,0 mL à ± 0,03 mL (rectangulaire) ;

Ve = 10,3 mL avec u(Ve) = 0,25 mL (gaussienne), car on prend comme estimation de l'écart-type demi-largeur de la courbe dérivé à mi hauteur soit (10,5 – 10,0)/2 mL

C = $2{,}02.10^{-2}$ mol.L^{-1} avec u(C) = $2{,}0.10^{-4}$ mol.L^{-1} (gaussienne)

1°) Déterminer la concentration de la solution des ions Fe^{2+}.

2°) Calculer l'incertitude de la concentration de la solution des ions Fe^{2+} par une méthode type Monte-Carlo. Adapter la notation de la concentration de la solution des ions Fe^{2+}.

Analyse numérique 2.2 Calcul avancement volumique pour une réaction équilibrée

1°) Établir l'équation de la réaction d'un acide faible (pKa = 2) dans l'eau et déterminer son avancement volumique pour une concentration de 0,01 mol.L^{-1}.

2°) En déduire la valeur du pH.

Analyse numérique 2.3 Représentation d'un diagramme de distribution pour les espèces issues d'un polyacide

On étudie l'acide oxalique noté H_2A de pKa = 1,3 et 4,3.

1°) Définir la conservation de la matière pour les 3 espèces de l'acide oxalique ; définir les deux constantes d'acidité de l'acide oxalique.

2°) En déduire l'expression des % des trois espèces en fonction de h et de Ka1 et Ka2.

3°) Établir le diagramme de distribution des trois espèces de l'acide oxalique.