

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 : $5 \text{ Fe}^{2+} + \text{MnO}_4^- + 8 \text{ H}_3\text{O}^+ = 5 \text{ Fe}^{3+} + \text{Mn}^{2+} + 12 \text{ H}_2\text{O}$

On détermine $V_e = 10,3 \text{ mL}$ sur le suivi potentiométrique et le maximum de la courbe dérivée.

$V_0 = 20,0 \text{ mL}$ à $\pm 0,03 \text{ mL}$ (rectangulaire) ;

$V_e = 10,3 \text{ mL}$ avec $u(C) = 0,25 \text{ mL}$ (gaussienne), car on prend comme estimation de l'écart-type demi-largeur de la courbe dérivée à mi hauteur soit $(10,5 - 10,0)/2 \text{ mL}$

$C = 2,02 \cdot 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$ avec $u(C) = 2,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ (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 ($pK_a = 2$) dans l'eau et déterminer son avancement volumique.
- 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 $pK_a = 1,3$ 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 K_{a1} et K_{a2} .
- 3°) Établir le diagramme de distribution des trois espèces de l'acide oxalique.