

3 Tracé de suivi cinétique, test d'ordre 1

Programmes à compléter

L'objectif de cette activité est de représenter l'évolution de la concentration d'un réactif en fonction du temps au cours d'une réaction chimique, puis de tester si la réaction est d'ordre 1.

Fichiers Python

Fiches d'accompagnement
Programmes à compléter

hatier-clic.fr/pct120

Prérequis théoriques

- Vitesse volumique de disparition
- Temps de demi-réaction
- Loi de vitesse d'ordre 1

Question 1

On commence par travailler à la question **1** avec les valeurs entrées par défaut dans le programme.

La question **1a** permet de découvrir le programme Python *tracecinetique.py*, qui trace la courbe de suivi cinétique obtenue à partir des valeurs de concentration en fonction du temps.

On utilise la courbe obtenue pour déterminer à la question **1b** la vitesse de disparition de l'espèce.

La question **1c** implique des modifications du programme afin de tracer le graphique permettant de déterminer et temps de demi-réaction.

Aux questions **1e** et **1f**, on utilise le programme *cinetiqueordre1.py* pour déterminer graphiquement si la réaction est d'ordre 1 puis pour valider (ou non) cette hypothèse grâce à une régression linéaire.

Question 2

La question **2** a pour but d'appliquer ce raisonnement dans le cas d'une autre étude expérimentale, pour laquelle on fournit de nouvelles valeurs de concentration en fonction du temps.

La question **2a** nécessite de modifier le programme *tracecinetique.py* afin de tracer la nouvelle courbe de suivi cinétique.

La question **2b** nécessite de modifier le programme *cinetiqueordre1.py* afin de vérifier si la réaction dans ces nouvelles conditions expérimentales est d'ordre 1.

Programme à compléter – *tracecinétique.py*

Modules importés

* signifie la totalité des modules de la librairie math.
plt est une abréviation pratique de la librairie matplotlib.pyplot (cf lignes 19 à 25).

```

1 from math import *
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import numpy as np
4 from scipy.stats import linregress
5
6 print("")
7 print("*****")
8 print("* Tracé de courbe de suivi cinétique *")
9 print("*   Activité 3 p. 120           *")
10 print("*****Hatier 2020**")
11
12 print("")
13 print("Attention : le séparateur décimal est le point")
14 print("")
15
16 listet=[0.0,10.0,20.0,30.0,60.0,90.0]
17 listec=[124.0,92.0,68.0,50.0,20.0,8.0]
18 # première ligne à compléter
19 plt.plot(listet,listec,color="blue")
20 # deuxième ligne à compléter
21 plt.title("Concentration c (en mmol/L) en fonction de t (en min)")
22 plt.xlabel("t (en min)")
23 plt.ylabel("Concentration c (en mmol/L)")
24 plt.show()
    
```

À modifier : données

- listet est la liste des dates t
- listec est la liste des concentrations c mesurées aux dates t correspondantes.

Ces listes sont à modifier à la question 2a.

À modifier : liste c0sur2

Cette ligne est à compléter à la question 1c afin de créer une liste dont tous les termes valent $c_0/2$.
Elle pourra être supprimée à la question 2a.

Affichage du graphique

Cette partie permet de mettre en forme et d'afficher la courbe de suivi cinétique.

À modifier : tracé du graphique

Cette ligne est à compléter à la question 1c pour tracer le graphique de la liste c0sur2 en fonction du temps. On peut utiliser la même instruction que celle du tracé de listec.
Elle pourra être supprimée à la question 2a.

Astuce La commande label permet de légender les courbes. Ces légendes peuvent être ensuite affichées par la commande plt.legend() (à ajouter ligne 24)

Programme à compléter – *Cinetiqueordre1.py*

Module importé

Le module `linregress` permet de faire des régressions linéaires. Il est extrait de la librairie `scipy.stats` (traitement statistique de données)

```

1 from math import *
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import numpy as np
4 from scipy.stats import linregress
5
6 print("")
7 print("*****")
8 print("*Cinétique d'ordre 1                *")
9 print("*  Activité 3 p. 120                  *")
10 print("*****Hatier 2020**")
11
12 print("")
13 print("Attention : le séparateur décimal est le point")
14 print("")
15
16 # définition extensive d'une liste
17 # (extrait d'un tableau de mesures)
18 listet=[0.0,10.0,20.0,30.0,60.0,90.0]
19 listec=[124.0,92.0,68.0,50.0,20.0, 8.0]
20 listelnc=[0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0]
21 modelelinY=[0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0]
22
23 # calcul de la liste des logarithmes des concentrations
24 for i in range(0,6):
25     listelnc[i]=np.log(listec[i])
26
27 # tracé du graphique donnant ln(c) en fonction de t
28 plt.plot(listet,listelnc,"*",color="red")
29
30 # calcul des paramètres de la régression linéaire
31 (a,b,rho,_,_)=linregress(listet,listelnc)
32 # a : coefficient directeur
33 # b : ordonnée à l'origine
34 # rho : coefficient de corrélation linéaire
35 print("ln(c)=",a,"t+",b,"coef. de corr. =",rho)
36 for i in range(0,6):
37     modelelinY[i]=a*listet[i]+b
38
39 # tracé de la droite de régression linéaire
40 plt.plot(listet,modelelinY,color="blue")
41 plt.xlabel("t (en min)")
42 plt.ylabel("ln(c)")
43 plt.show()

```

À modifier : données

– `listet` est la liste des dates `t`
 – `listec` est la liste des concentrations `c` mesurées aux dates `t` correspondantes
 Ces listes sont à modifier à la question **2b**.

Initialisation des listes

Les listes `listelnc` et `listec` sont initialement créées en affectant la valeur nulle par défaut à chacun des termes.

Calcul des logarithmes

Les termes de la `listelnc` sont les images des termes de la `listec` par la fonction `log`.

Attention La fonction python `log` désigne le logarithme népérien \ln .

Régression linéaire

`Linregress` permet de faire une régression linéaire (> rabat III) en calculant :

- les coefficients `a` et `b`, permettant le tracé de la droite de régression ;
- le coefficient de corrélation linéaire `rho` (question **1f**).

Calcul des coordonnées de la droite modèle

La liste `modelelinY` contient les valeurs du logarithme de la concentration calculées à partir de l'équation de la droite-modèle fournit par `lineregress`.

Affichage du graphique

Cette partie permet de mettre en forme et d'afficher la droite de régression linéaire.