

48 Programmer avec Python

Programme à compléter

L'objectif de cet exercice est de vérifier si la réaction de décomposition en phase gazeuse du pentaoxyde d'azote, décrite dans l'exercice 47 p. 137 du manuel, suit une loi d'ordre 1.

Fichiers Python

Programme à compléter
Fiche d'accompagnement

hatier-clic.fr/pct137

Prérequis théoriques

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

Le programme est à compléter à la question a avec les valeurs de concentration de N_2O_5 et des dates t fournies dans l'exercice 47 p. 137 du manuel.

Les données fournies par le programme sont utilisées à la question b pour valider l'hypothèse de réaction d'ordre 1.

La question c implique de modifier le programme afin de pouvoir déterminer la valeur du temps de demi-réaction à partir de la droite-modèle.

Programme à compléter

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("*  Exercice 48 p. 137            *")
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=...
19 listec=...
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 # première ligne à compléter : calcul de t1/2
37 # deuxième ligne à compléter : affichage de la valeur de t1/2
38 for i in range(0,6):
39     modelelinY[i]=a*listet[i]+b
40
41 # tracé de la droite de régression linéaire
42 plt.plot(listet,modelelinY,color="blue")
43 plt.xlabel("t (en min)")
44 plt.ylabel("ln(c)")
45 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 compléter à la question **a**.

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`.

À modifier : calcul et affichage du temps de demi-réaction

Ces deux lignes sont complétées à la question **c**.

La commande `print()` permet d'afficher des résultats dans la console python.

Affichage du graphique

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

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 `linregress`.