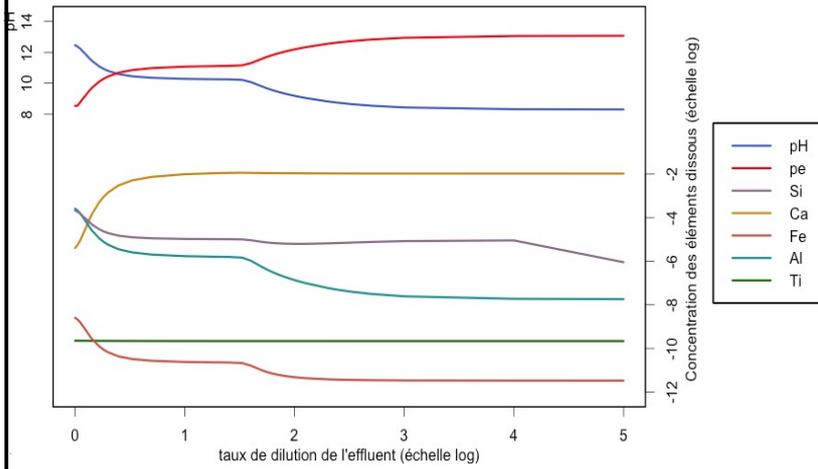


Espèces en solution en fonction de la dilution dans la mer



# Chimie et Programmation Python :

```
laurence.gastrin@U14-S208-P11:~$ python
Python 2.7.6 (default, Mar 22 2014, 22:59:56)
[GCC 4.8.2] on linux2
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>> a=2
>>> b=5
>>> c=a+b
>>> print c
7
>>> d=c
>>> e=4
>>> f=d+e
>>> print f
11
>>> g=d+f
>>> print g
18
>>>
File "<stdin>", line 1
  Élève :_ABRADOR Daryl TS2
  ^
IndentationError: unexpected indent
>>>
File "<stdin>", line 1
  Élève :_GASTRIN Laurence TS2
  ^
IndentationError: unexpected indent
>>>
File "<stdin>", line 1
  Élève :_TIRPEDIAN Nathanaelle TS1
```

<i>Introduction</i>	<i>p.3</i>
<i>I) Calcul du taux d'avancement d'un composant chimique en fonction du coefficient stœchiométrique.</i>	<i>p.4</i>
<i>II) Calcul du taux d'avancement d'un composant chimique en fonction de la conductivité et du p<math>\mathcal{H}</math>.</i>	<i>p.7</i>
<i>III) Représentation graphique des calculs de quantités de matière :</i>	
<i>_A) Représentation graphique dans le cas du taux d'avancement d'un composant chimique en fonction du coefficient stœchiométrique.</i>	<i>p.8</i>
<i>_B) Calcule du taux d'avancement en fonction du p<math>\mathcal{H}</math>.</i>	<i>p.8</i>
<i>Conclusion</i>	<i>p.9</i>
<i>Compte rendu</i>	<i>p.10</i>
<i>Annexe</i>	<i>p.10</i>

## Introduction :

Nous pouvons dans notre sujet parler de différents termes tels que : un coefficient stœchiométrique, la conductivité ou encore le pH. En chimie le coefficient stœchiométrique est caractérisé par un calcul qui permet d'analyser les quantités de réactifs et de produits qui sont en jeu au cours d'une réaction chimique. La conductivité est caractérisée par la résistance au passage du courant ou de la chaleur dans un matériau. Et pour finir le pH qui est le **potentiel hydrogène** est caractérisé par une mesure de l'activité chimique des ions hydrogènes  $H^+$  en solution. Mais c'est aussi la proportion des éléments dans une formule chimique.

C'est donc pour cela que lors du traitement de notre dossier nous l'avons donc divisé en différentes parties pour pouvoir avoir les parties suivantes telles que : les calculs du taux d'avancement de solution à l'aide d'un coefficient stœchiométrique, puis en fonction de la conductimètre et du pH. Ces quantités de matières seront ensuite représentées sous forme de graphiques. Nous avons également utilisé des programmes Python pour y parvenir à la formation de notre projet.

De plus nous pouvons nous poser comme question : Comment peut-on déterminer le point équivalent afin de titrer une solution acide inconnue grâce au langage Python ?

## *1) Calcul du taux d'avancement d'un composant chimique en fonction du coefficient stœchiométrique.*

Pour pouvoir avoir les graphiques nous avons utiliser Pygal. Pygal est donc un logiciel a qui mis en évidences des valeurs entrer sur un éditeur de texte , qui c'est ensuite transcrits dans un Terminal.

Bien évidemment avant tout cela nous avons procéder au téléchargement de Pygal qui s'est donc fait dans un Terminal . Suite a cela nous avons mis les valeurs dans un éditeur de texte , comme par exemple avec celui que vous trouverez ci-dessous :

```
tableau.py x
import pygal

xy_chart = pygal.XY(stroke=False)
xy_chart.title = 'Evolution des quantites de matieres au cours du dosage'

xy_chart.add('NA', [(0,1.04),(1,1.04),(2,1.04),(3,1.04),(4,1.04),(5,1.04),(6,1.04),(7,1.04),(8,1.04),(9,1.04),(10,1.04),(11,1.04),(12,1.04),
(13,1.04),(14,1.04),(15,1.04),(16,1.04),(17,1.04),(18,1.04),(19,1.04),(20,1.04),(21,1.04),(22,1.04),(23,1.04),(24,1.04),(25,1.04)])

xy_chart.add('NB', [(0,0),(1,0.1),(2,0.2),(3,0.3),(4,0.4),(5,0.5),(6,0.6),(7,0.7),(8,0.8),(9,0.9),(10,1),(11,1.1),(12,1.2),(13,1.3),(14,1.4),
(15,1.5),(16,1.6),(17,1.7),(18,1.8),(19,1.9),(20,2),(21,2.1),(22,2.2),(23,2.3),(24,2.4),(25,2.5)])

xy_chart.add('xf', [(0,0),(1,0.1),(2,0.2),(3,0.3),(4,0.4),(5,0.5),(6,0.6),(7,0.7),(8,0.8),(9,0.9),(10,1),(11,1.04),(12,1.04),(13,1.04),(14,1.04),
(15,1.04),(16,1.04),(17,1.04),(18,1.04),(19,1.04),(20,1.04),(21,1.04),(22,1.04),(23,1.04),(24,1.04),(25,1.04)])

xy_chart.add('nf(Cl-)', [(0,1.04),(1,1.04),(2,1.04),(3,1.04),(4,1.04),(5,1.04),(6,1.04),(7,1.04),(8,1.04),(9,1.04),(10,1.04),(11,1.04),(12,1.04),
(13,1.04),(14,1.04),(15,1.04),(16,1.04),(17,1.04),(18,1.04),(19,1.04),(20,1.04),(21,1.04),(22,1.04),(23,1.04),(24,1.04),(25,1.04)])

xy_chart.add('nf(Na+)', [(0,0),(1,0.1),(2,0.2),(3,0.3),(4,0.4),(5,0.5),(6,0.6),(7,0.7),(8,0.8),(9,0.9),(10,1),(11,1.1),(12,1.2),(13,1.3),
(14,1.4),(15,1.5),(16,1.6),(17,1.7),(18,1.8),(19,1.9),(20,2),(21,2.1),(22,2.2),(23,2.3),(24,2.4),(25,2.5)])

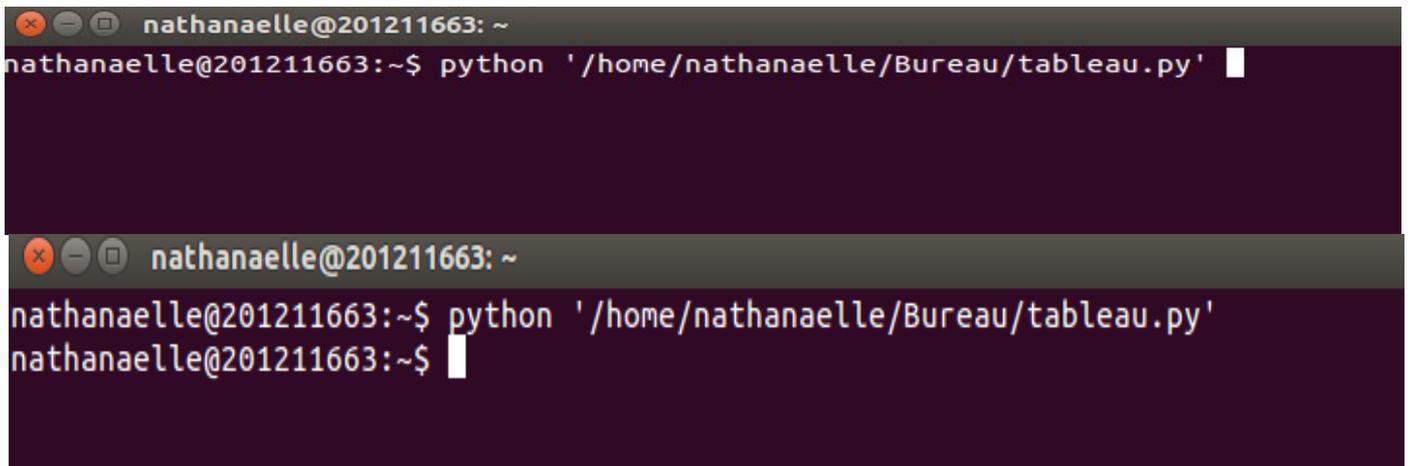
xy_chart.add('nf(H3O+)', [(0,1.04),(1,0.94),(2,0.84),(3,0.74),(4,0.64),(5,0.54),(6,0.44),(7,0.34),(8,0.24),(9,0.14),(10,0.04),(11,0),(12,0),
(13,0),(14,0),(15,0),(16,0),(17,0),(18,0),(19,0),(20,0),(21,0),(22,0),(23,0),(24,0),(25,0)])

xy_chart.add('nf(OH-)', [(0,0),(1,0),(2,0),(3,0),(4,0),(5,0),(6,0),(7,0),(8,0),(9,0),(10,0),(11,0.06),(12,0.16),(13,0.26),(14,0.36),(15,0.46),
(16,0.56),(17,0.66),(18,0.76),(19,0.86),(20,0.96),(21,1.06),(22,1.16),(23,1.26),(24,1.36),(25,1.46)])

xy_chart.render_to_file('Evolution des quantites de matieres au cours du dosage.svg')
```

Puis lors de la finition du programme nous l'avons mis dans un Terminal , en l'insérant de manières suivante :

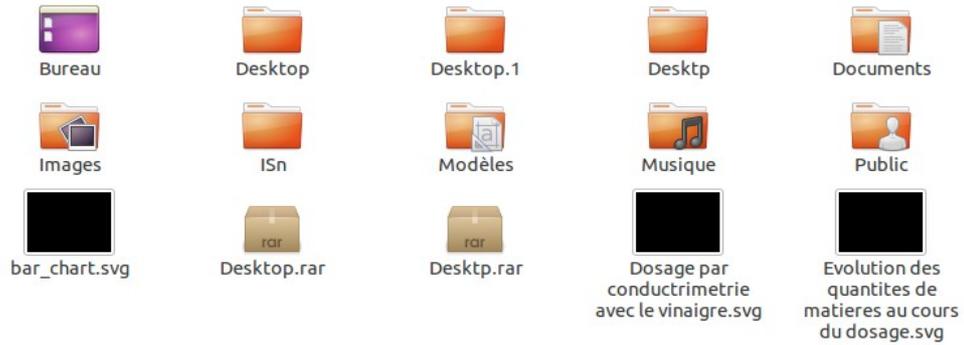
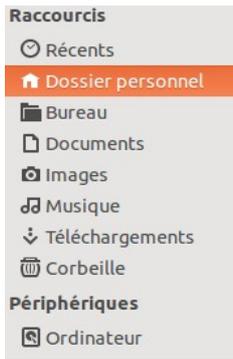
D'ailleurs l'on utilisera cette méthode de faire glisser le fichier dans le terminal en ayant comme antécédent python et un espace pour faire fonctionner tout les programmes python de ce projet.



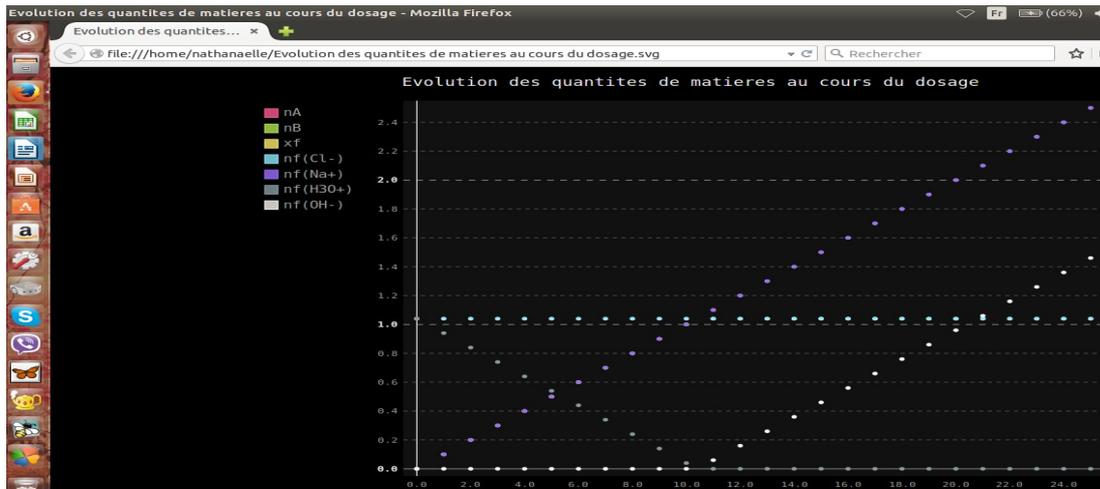
```
nathanaelle@201211663: ~
nathanaelle@201211663:~$ python '/home/nathanaelle/Bureau/tableau.py'

nathanaelle@201211663: ~
nathanaelle@201211663:~$ python '/home/nathanaelle/Bureau/tableau.py'
nathanaelle@201211663:~$
```

Une fois la deuxième commande apparue nous trouverons notre image dans le dossier avec le titre correspond comme sur l'image suivante :



Pour pouvoir obtenir le résultat en image, nous devons ouvrir le fichier avec le Navigateur Web Firefox et ainsi nous obtiendrons ceci :



Cependant nous avons également eu recours au programme Python pour pouvoir calculer l'évolution des quantités de matière au cours du dosage comme nous pouvons voir ci-dessous :

```

equation_bilan_isn_2015.py x
# -*- coding: utf-8 -*-
Ca = input(" Entrez la valeur de la concentration d'acide chlorhydrique (mol/L) : ")
Va = input(" Entrez la valeur du volume d'Acide Chlorhydrique (mL) : ")
Cb = input(" Entrez la valeur de la concentration de Soude (mol/L) : ")
Vb = 0
na = Ca*Va
nb = Cb*Vb
nOxonium=0
nHydroxyle=0
for Vb in range(0,26):
    if na == nb: # condition à l'équivalence
        Ve=na/Cb
        concentration=(Cb*Ve)/Va
        xf = na = nb
        print ("La valeur du volume equivalent est Ve =",Ve,"mL")
        print ("L'avancement final est xf =",xf,"mol")
        print ("La concentration d'acide dans la solution est : ", concentration,"mL")
        print ("Les réactifs limitants OH- et H3O+ sont entièrement consommés ")
    elif na>nb: # condition avant l'équivalence
        xf=nb
        nHydroxyle=na-xf
        print ("L'avancement final est xf =",xf,"mol")
        print ("La quantité matière final d'ions Hydroxyle nF(OH-) = ", nHydroxyle,"mol")
        print ("Le réactif limitant OH- est entièrement consommé")
    else: # condition après l'équivalence
        xf=na
        nOxonium=nb-xf
        print ("L'avancement final est xf =",xf,"mol")
        print ("La quantité de matière final d'ions Oxonium est nF(OH-) = ", nOxonium,"mol")
        print ("Le réactif limitant H3O+ est entièrement consommé")

```

Suite a cela nous avons aussi utiliser ce programme :

```

daryl@daryl-G551JM: ~
daryl@daryl-G551JM:~$ python '/home/daryl/Bureau/Projet_Bac_ISN(Abrador_Gastrin_Tirpedian)/programme_python/avant_apres_ou_a_l_equivalence.py'
Entrez la valeur de la concentration d'acide Chlorhydrique (mol/L) : 0.3
Entrez la valeur du volume d'Acide Chlorhydrique (mL) : 10
Entrez la valeur de la concentration de Soude (mol/L) : 2
Entrez la valeur du volume de Soude (mol) : 25

```

```
daryl@daryl-G551JM: ~
daryl@daryl-G551JM:~$ python '/home/daryl/Bureau/Projet_Bac_ISN(Abrador_Gastrin_Tirpedian)/programme_python/avant_apres_ou_a_l_equivalence.py'
Entrez la valeur de la concentration d'acide Chlorhydrique (mol/L) : 0.2
Entrez la valeur du volume d'Acide Chlorhydrique (mL) : 2
Entrez la valeur de la concentration de Soude (mol/L) : 0.1
Entrez la valeur du volume de Soude (mol) : 4
('La valeur du volume equivalent est Ve =', 4.0, 'mL')
('L'avancement final est xf =", 0.4, 'mol')
('La concentration d'acide dans la solution est : ", 0.2, 'mL')
Les réactifs limitants OH- et H3O+ sont entièrement consommés
daryl@daryl-G551JM:~$
```

```
daryl@daryl-G551JM: ~
daryl@daryl-G551JM:~$ python '/home/daryl/Bureau/Projet_Bac_ISN(Abrador_Gastrin_Tirpedian)/programme_python/avant_apres_ou_a_l_equivalence.py'
Entrez la valeur de la concentration d'acide chlorhydrique (mol/L) : 0.3
Entrez la valeur du volume d'Acide Chlorhydrique (mL) : 4
Entrez la valeur de la concentration de Soude (mol/L) : 0.2
Entrez la valeur du volume de Soude (mol) : 3
('L'avancement final est xf =", 0.6000000000000001, 'mol')
('La quantite matiere final d'ions Hydroxyle nf(OH-) = ", 0.5999999999999999, 'mol')
Le réactif limitant H3O+ est entièrement consommé
daryl@daryl-G551JM:~$
```

```
daryl@daryl-G551JM: ~
daryl@daryl-G551JM:~$ python '/home/daryl/Bureau/Projet_Bac_ISN(Abrador_Gastrin_Tirpedian)/programme_python/avant_apres_ou_a_l_equivalence.py'
Entrez la valeur de la concentration d'acide chlorhydrique (mol/L) : 0.2
Entrez la valeur du volume d'Acide Chlorhydrique (mL) : 3
Entrez la valeur de la concentration de Soude (mol/L) : 0.5
Entrez la valeur du volume de Soude (mol) : 2
('L'avancement final est xf =", 0.6000000000000001, 'mol')
('La quantite de matiere final d'ions Oxoium est nf(H3O+) =", 0.3999999999999999, 'mol')
Le réactif limitant OH- est entièrement consommé
daryl@daryl-G551JM:~$
```

## 1) Calcul du taux d'avancement d'un composant chimique en fonction de la conductivité et du pH

Ainsi ces trois programmes différents ont permis de déterminer le volume équivalent à partir de conductivité donnée. C'est-à-dire qu'à partir des mesures de conductivité, l'on a déterminé les équations des deux segments de droite et les coordonnées du point d'intersection entre ces deux droites. D'ailleurs l'association de ses trois programmes a permis de construire le tableau de la conductivité ou même voir celui du pH.

Ce programme permet de remplir le tableau de la conductivité :

```
# -*- coding: utf-8 -*-
n=input("Entrez n : ")
conductivite=[]
for i in range(0,n):
    print(i)
    conductivite.append(input("Entrez la valeur de la conductivité : "))
    print("V = {} mL et Sigma = {} µS/cm".format(i,conductivite[i]))
print conductivite
```

Ce programme ci dessous lui permet comme indiqué de remplir le tableau pour les différents ions présent dans la solution avec i désignant le volume de soude ajouté :

```
# -*- coding: utf-8 -*-
n=input("Entrez n : ")
Ca = input(" Entrez la valeur de la concentration d'acide chlorhydrique (mol/L) : ")
Va = input(" Entrez la valeur du volume d'Acide Chlorhydrique (mL) : ")
Cb = input(" Entrez la valeur de la concentration de Soude (mol/L) : ")
na = Ca*Va
Ve=na/Cb
nChlorure= []
nOxonium= []
nHydroxyle= []
nSodium= []

for i in range(0,n):
    nb = Cb*i
    nSodium.append(nb)
    nChlorure.append(na)
    if i<Ve:
        xf = na-nb
        nOxonium.append(xf)
        nHydroxyle.append(0)
    else:
        xf = nb-na
        nOxonium.append(0)
        nHydroxyle.append(xf)
print("Le tableau pour l'ion Oxonium est:",nOxonium)
print("Le tableau pour l'ion chlorure est:",nChlorure)
print("Le tableau pour l'ion chlorure est:",nHydroxyle)
print("Le tableau pour l'ion chlorure est:",nSodium)
```

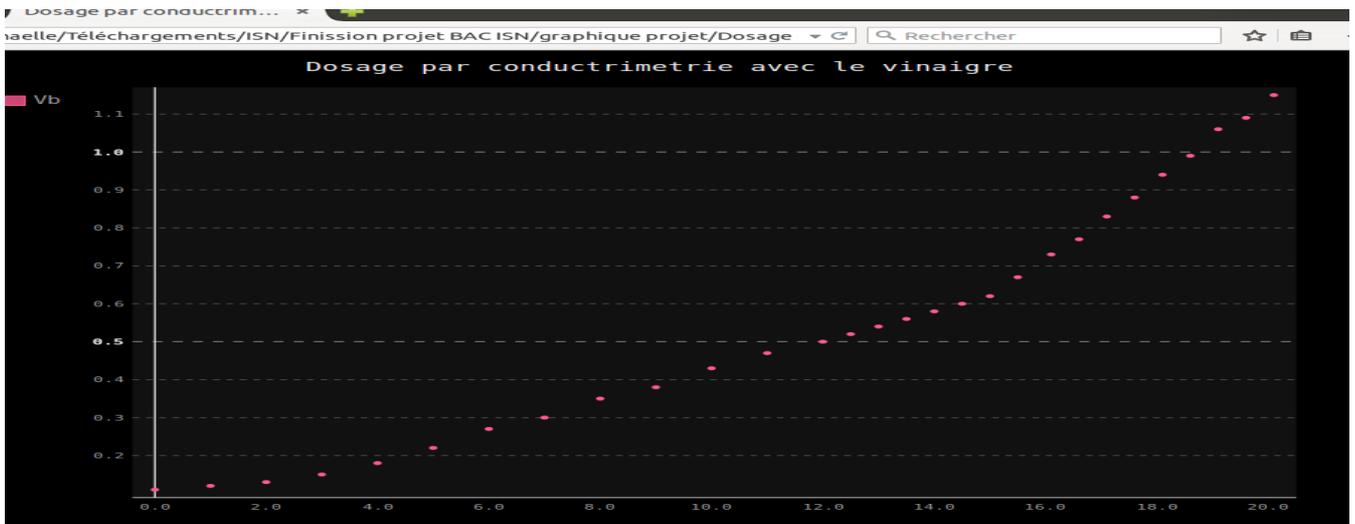
Et pour finir, dans ce dernier programme nous calculons le volume équivalent, toujours grâce aux valeurs entrées dans le programme où l'on remplit le tableau de valeur de la conductivité :

```
# -*- coding: utf-8 -*-
conductivite =[1500,1450,1400,1350,1300,1250,1200,1150,1100,1120,1140,1160,1180,1200,1220,1240,1260,1280,1300]
n=len(conductivite)-1
Vmin1,Vmin2=0,0
Max1= conductivite[0]
Min1= conductivite[0]
Min2= conductivite[0]
Max2= conductivite[18]
for i in range(0,18):
    if conductivite[i+1] < conductivite[i]:
        Min1=conductivite[i]
        Vmin1=i
        Min2=conductivite[i+2]
        Vmin2=i+2
a1=float(Min1-Max1)/Vmin1
b1=float(Max1)
a2=float(Max2-Min2)/(n-Vmin2)
b2=float(Max2-a2*n)
Ve=float(b2-b1)/(a1-a2)
print(a1,b1)
print(a2,b2)
print("La valeur du volume equivalent est",Ve,"mL")
```

### III) Représentation graphique des calculs de quantités de matière.

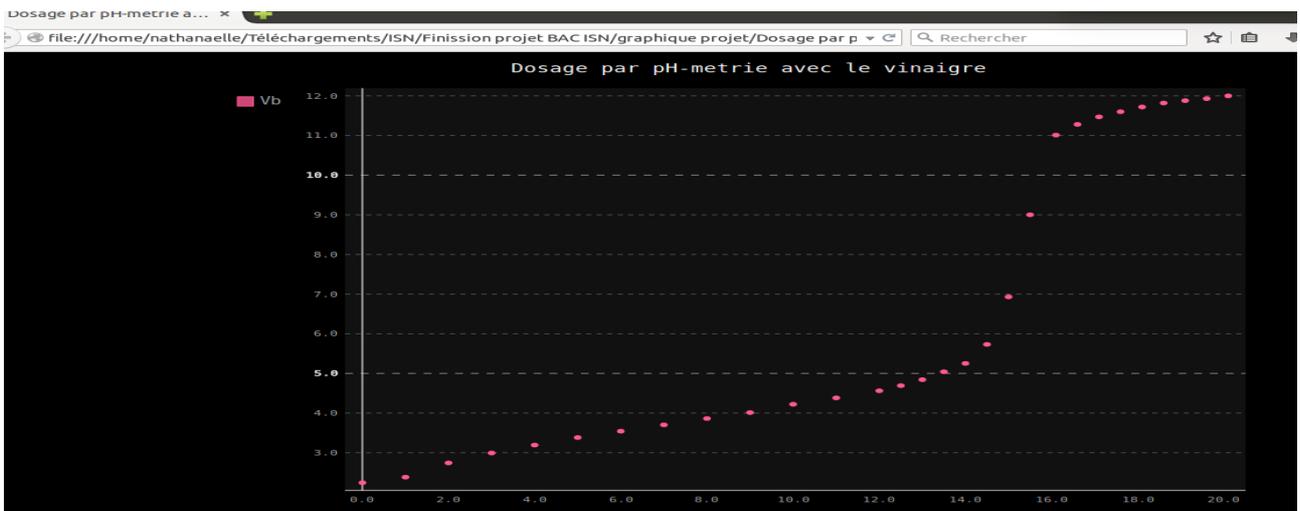
#### A) Représentation graphique dans le cas du taux d'avancement d'un composant chimique en fonction du coefficient stœchiométrique.

Nous avons donc reproduit le même protocole que dans l'utilisation Pygal précédent pour la représentation du dosage par conductimètre avec le vinaigre :



#### B) Calcule du taux d'avancement en fonction du pH.

Nous avons également fait pour le Dosage par pH-métrie avec le vinaigre , et ainsi le graphique obtenu :



## *Conclusion*

C'est donc grâce aux programmes Python, mais aussi à Pygal que nous avons pu déterminer le point équivalent de solution acide inconnue. Mais que nous avons pu avoir les graphiques en fonction de la réaction de nos solutions. Ainsi cela fait que nous avons pu avoir les valeurs de nos réactifs, tel qu'ils soient à l'équivalence, après ou avant l'équivalence. Ces valeurs sont donc faites soit par pH-métrie, soit par conductimétrie.

## Compte Rendu

Notre projet a eu du mal à prendre forme, en effet, lors du choix des sujets nous n'avions pas eu notre mot à dire. C'est ce qui a montré avant tout notre désespoir pour ce sujet. Nous avons donc eu un sujet imposé concernant la chimie. Suite à cela nous avons rencontré divers problèmes lors de sa lecture mais aussi de sa compréhension. Ce qui nous a mis encore une fois dans l'abandon, mais quand nous sommes enfin parvenues à répondre aux questions du sujet, il a fallu les mettre sous forme de programmes Python. C'est après cela que les difficultés liées aux programmes ont réellement commencé; puis nous avons sollicité de l'aide auprès de nos professeurs, mais les aides se faisant via mails ne sont pas toujours évidentes à la compréhension. En effet, nous avons pris un certain temps à comprendre ce qu'ils nous expliquaient mais malgré cela nous avons fait des erreurs de programmations. Cependant lors de la rentrée des vacances de Mai, nous avons donc pris sur nos heures de révision des oraux pour pouvoir avancer, et obtenir d'avantage d'aides de nos professeurs, ce qui fut fructueux sur un certain point.

Mais nous n'avons toujours pas terminé notre projet, quelques jours à la date limite de sa remise, ce qui nous décourage mais malgré cela nous avons gardé notre sang-froid et nous avons continué notre sujet pour pouvoir l'améliorer, même si nous sommes toujours face à un problème de programmations en ce qui concerne la conductimétrie, nous voulons finir notre projet pour pouvoir le présenter.

## Annexe

<http://openclassrooms.com/courses/apprenez-a-programmer-en-python>

<https://groups.google.com/forum/#!searchin/isn-ts2-lar/pygal/isn-ts2-lar/KX9JEZbxjQY/PqJzXftW0N4J> (pygal)

<https://groups.google.com/forum/#!searchin/isn-ts2-lar/utf/isn-ts2-lar/g9esKxwuyjk/HhpknaHp88J>  
(caractères spéciaux)

<http://apprendre-python.com/page-apprendre-listes-list-tableaux-tableaux-liste-array-python-cours-debutant> (tableau = liste)

[http://pygal.org/chart\\_types/#did3](http://pygal.org/chart_types/#did3) (graphique)

<http://www.futura-sciences.com/magazines/matiere/infos/dico/d/physique-conductivite-2070/>

<http://www.apprendre-python.com/page-apprendre-listes-list-tableaux-tableaux-liste-array-python-cours-debutant>

[http://fr.wikipedia.org/wiki/Potentiel\\_hydrog%C3%A8ne](http://fr.wikipedia.org/wiki/Potentiel_hydrog%C3%A8ne)

[http://fsincere.free.fr/isn/python/cours\\_python\\_fichier.php](http://fsincere.free.fr/isn/python/cours_python_fichier.php)

<http://www.commentcamarche.net/forum/affich-12183664-python-insertion-d-image>

<https://wiki.python.org/moin/TkInter>

<http://mathsp.tuxfamily.org/spip.php?rubrique57>

[http://fr.wikipedia.org/wiki/Python\\_%28langage%29](http://fr.wikipedia.org/wiki/Python_%28langage%29)

[http://fsincere.free.fr/isn/python/cours\\_python\\_ch4.php](http://fsincere.free.fr/isn/python/cours_python_ch4.php)

<http://python.lycee.free.fr/boucles.html#tant-que>

<http://blog.savoirfairelinux.com/2014/travailler-donnees-saleae-en-python/>

<http://fr.wikipedia.org/wiki/St%C5%93chiom%C3%A9trie>