

CI 3 : INGÉNIERIE NUMÉRIQUE & SIMULATION

TP – RÉOLUTION DE L'ÉQUATION $f(x) = 0$.

Exercice 1 – pH d'une solution monoacide faible – 60 min. – Difficulté **

On se propose de montrer l'intérêt de résoudre numériquement une équation de la forme $f(x) = 0$ pour déterminer le pH d'une solution de monoacide faible (noté AH dans la suite) connaissant la concentration de soluté apporté C (exprimée en $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$) et le pK_a du couple AH/A^- .

Remarque Dans toute la suite, les questions 1, 2, 3, 4, 5, 6 et 7 seront abordées dans le cadre des travaux dirigés de sciences physiques. Seules les questions 8, 9, 10, 11, 12 et 13 font l'objet de ces travaux dirigés d'informatique.

Question 1

Écrire l'équation, noté (E), de la réaction de l'acide AH avec l'eau.

Question 2

Écrire l'équation, noté (AE), de la réaction d'autoprotolyse de l'eau.

Pour les questions 3, 4, 5 et 6 on se place dans le cas où (AE) est négligeable devant (E).

Question 3

Montrer que (AE) est négligeable devant (E) à condition que $pH \leq 5,6$ (condition (C1)).

Question 4

On considère le cas où l'acide est fortement dissocié. Montrer que tel est le cas lorsque $pH \geq pK_a + 1$ (condition (C2)) et que dans ce cas le pH de la solution est donné par :

$$pH = -\log C \quad (1)$$

Question 5

On considère le cas où l'acide est faiblement dissocié. Montrer que tel est le cas lorsque $pH \leq pK_a - 1$ (condition (C3)) et que dans ce cas le pH de la solution est donné par :

$$pH = \frac{1}{2}(pK_a - \log C) \quad (2)$$

Question 6

On considère le cas où l'acide n'est ni faiblement ni fortement dissocié. Montrer que dans ce cas le pH de la solution est donné par :

$$pH = -\log \left(\frac{-K_a + \sqrt{K_a(K_a + 4C)}}{2} \right) \quad (3)$$

Dans la questions 7, on se place dans le cas où (AE) n'est pas négligeable devant (E).

Question 7

Montrer que dans ce cas le pH de la solution est donné par $pH = -\log h$ où h est solution de l'équation du troisième degré :

$$h^3 + K_a h^2 - (K_e + K_a C) h - K_a K_e = 0 \quad (4)$$

Question 8

Écrire une fonction Python, appelée `pH_1`, prenant en paramètres la concentration C et retournant le pH de la solution à partir de la relation (1).

Question 9

Écrire une fonction Python, appelée `pH_2`, prenant en paramètres la concentration C et le pK_a , et retournant le pH de la solution à partir de la relation (2).

Question 10

Écrire une fonction Python, appelée `pH_3`, prenant en paramètres la concentration C et le pK_a , et retournant le pH de la solution à partir de la relation (3).

Question 11

Écrire une fonction Python, appelée `pH_4`, prenant en paramètres la concentration C , le pK_a et le nom de la méthode numérique (sous la forme d'une chaîne de caractères du type "dichotomie", "Newton") et retournant le pH de la solution en effectuant la résolution numérique de l'équation (4).

Il est toujours possible de calculer le pH de la solution en résolvant directement l'équation (4) puisqu'elle s'applique sans conditions. Toutefois, sa résolution n'est nécessaire que dans 7 cas sur 100. Dans les 93 autres cas, les relations (1), (2) et (3) sont suffisantes. On peut donc envisager d'appliquer le raisonnement suivant :

1. étape 1 : on calcule le pH à partir de (1). Si le pH vérifie les conditions (C1) et (C2) alors le calcul est terminé sinon on passe à l'étape 2 ;
2. étape 2 : on calcule le pH à partir de (2). Si le pH vérifie les conditions (C1) et (C3) alors le calcul est terminé sinon on passe à l'étape 3 ;
3. étape 3 : on calcule le pH à partir de (3). Si le pH vérifie la condition (C1) alors le calcul est terminé sinon on passe à l'étape 4 ;
4. étape 4 : on calcule le pH en résolvant l'équation (4).

Question 12

Écrire un programme Python permettant de calculer le pH d'une solution de monoacide faible. Ce programme fera intervenir les fonctions `pH_i` ($i = 1, 2, 3$ ou 4) définies précédemment.

Question 13

En déduire le pH d'une solution d'acide nitreux [$pK_a(HNO_2/NO_2^-) = 3,2$] et celui d'une solution d'acide éthanóïque [$pK_a(CH_3COOH/CH_3COO^-) = 4,8$] dans les quatre cas suivants :

1. $C = 1,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol} \cdot L^{-1}$;
2. $C = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot L^{-1}$;
3. $C = 1,0 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot L^{-1}$;
4. $C = 1,0 \cdot 10^{-8} \text{ mol} \cdot L^{-1}$.

Exercice 2 – Temps de chute d'un projectile – 60 min. – Difficulté ★★

On se propose de montrer l'intérêt de résoudre numériquement une équation de la forme $f(x) = 0$ en étudiant le mouvement d'un projectile au voisinage de la surface de la Terre.

Remarque

Dans toute la suite, les questions 1, 2, 4, 5 et 6 seront abordées dans le cadre des travaux dirigés de sciences physiques. Seule la question 7 fera l'objet de ces travaux dirigés d'informatique.

On étudie le mouvement d'un projectile dans le référentiel terrestre, $\mathcal{R}_0(O, \vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z, t)$ supposé galiléen, l'axe (O, \vec{u}_y) désignant la verticale ascendante (fig 1). Le champ de pesanteur \vec{g} , supposé uniforme, est noté $\vec{g} = -g\vec{u}_y$ (en notant $g = \|\vec{g}\|$).

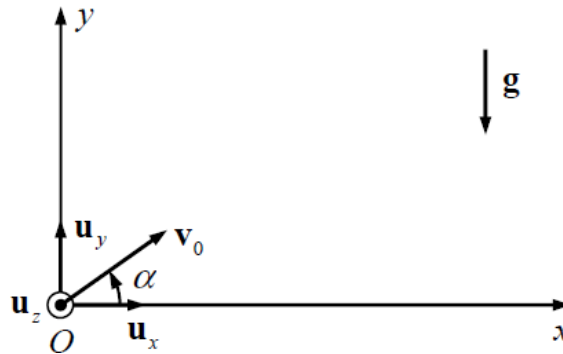


FIGURE 1 – Mouvement d'un projectile au voisinage de la surface de la Terre

Le projectile, assimilé à un point matériel M de masse m , est lancé dans l'air, à l'instant $t = 0$, depuis le point O avec un vecteur vitesse \vec{v}_0 contenu dans le plan $(O, \vec{u}_x, \vec{u}_y)$ et faisant un angle α ($0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$) avec l'axe (O, \vec{u}_x) , c'est-à-dire de la forme :

$$\vec{v}_0 = v_0(\cos \alpha \vec{u}_x + \sin \alpha \vec{u}_y) \quad (1)$$

On donne $m = 1 \text{ kg}$; $v_0 = 30 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 60$, $g = 9,81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$.

On considère que les frottements de l'air sur le projectile sont négligés.

Question 1

Montrer que les équations paramétriques de la trajectoire du point M s'écrivent :

$$\overrightarrow{OM} = \begin{cases} x(t) = v_0 \cos \alpha t \\ y(t) = -\frac{g}{2} t^2 + v_0 \sin \alpha t \end{cases} \quad (2)$$

Question 2

En déduire le temps t_c que le point M pour toucher le sol vaut :

$$t_c = \frac{2v_0 \sin \alpha}{g} \quad (3)$$

Question 3

Application numérique : Calculer t_c .

On prend en compte les frottements de l'air sur le projectile. Les frottements sont modélisés par une force de frottement \vec{F}_f opposée au vecteur vitesse $\vec{V}(M \in M/\mathcal{R}_0)$ et proportionnelle à la vitesse :

$$\vec{F}_f = -\lambda \vec{V}(M \in M/\mathcal{R}_0) \quad (4)$$

où λ désigne une constante. $\lambda = 0,1 \text{ SI}$.

Question 4

Déterminer l'unité SI de λ .

Question 5

Montrer que les équations paramétriques de la trajectoire du point M s'écrivent :

$$\overrightarrow{OM} = \begin{cases} x(t) = v_0 \tau \cos \alpha (1 - e^{-t/\tau}) \\ y(t) = \tau [g \tau + v_0 \sin \alpha] (1 - e^{-t/\tau}) - g \tau t \end{cases} \quad (5)$$

en posant $\tau = m/\lambda$.

Question 6

En déduire que le temps t'_c que met le point M pour toucher le sol vérifie l'équation :

$$\tau [g \tau + v_0 \sin \alpha] (1 - e^{-t'_c/\tau}) - g \tau t'_c = 0 \quad (6)$$

La résolution de l'équation précédente nécessite la mise en œuvre d'une méthode numérique.

Question 7

Écrire un programme Python permettant de calculer le temps t'_c en utilisant la méthode numérique de votre choix.