

Logiciel Regressi - Découverte

Plan de travail de la séance

Modélisation affine / linéaire	2
Méthode de la gamme étalon.....	2
Méthode des ajouts dosés	2
Modélisation affine multiple	3
Méthode des tangentes et dérivées	3
Méthode des tangentes	3
Méthode des dérivées	4

Modélisation affine / linéaire

Méthode de la gamme étalon

Un dosage a été réalisé par spectrophotométrie, en utilisant la méthode de la gamme étalon.

Valeurs d'absorbance obtenues pour une gamme de CuSO_4 (mesure à $\lambda = 800 \text{ nm}$)

C (mol.L ⁻¹)	blanc	0,008	0,016	0,024	0,032	0,040
A	0	0,088	0,175	0,266	0,360	0,456

La solution à doser a subi deux dilutions et, pour chacune d'elle, la valeur de l'absorbance a été mesurée :

Solution diluée 10 fois	$A_1 = 0,140$
Solution diluée 5 fois	$A_2 = 0,284$

- Tracer la courbe $A = f(C)$
- La modéliser avec le modèle adéquat
- Ajouter un titre. Bien faire apparaître l'équation de la courbe et le coefficient de corrélation.
- Utiliser l'outil graphique « Valeurs modélisées » pour déterminer les concentrations en CuSO_4 dans les deux fioles essai
- Enregistrer la courbe sous le nom : *Nom_Gamme.rw3*

Méthode des ajouts dosés

Un dosage a été réalisé par spectrophotométrie, en utilisant la méthode des ajouts dosés

Cette méthode de dosage sera vue plus tard dans l'année.

Fiole	F ₀	F ₁	F ₂	F ₃	F ₄	F ₅
Absorbance	0,446	0,592	0,729	0,853	1,054	1,220
C_M (mol.L ⁻¹)	0	$5,7 \cdot 10^{-5}$	$1,14 \cdot 10^{-4}$	$1,71 \cdot 10^{-4}$	$2,28 \cdot 10^{-4}$	$2,85 \cdot 10^{-4}$

- Tracer la courbe $A = f(C_M)$
- La modéliser avec le modèle adéquat, bien faire apparaître l'équation de la courbe et le coefficient de corrélation.
- Enregistrer la courbe sous le nom : *Nom_Ajouts.rw3*

Modélisation affine multiple

Le dosage d'une solution de chlorure d'ammonium (NH_4Cl) par de la soude (NaOH) à exactement $0,100 \text{ mol.L}^{-1}$ a été réalisé avec un suivi conductimétrique. Lors de la manipulation, une prise d'essai $E = 10,00 \text{ mL}$ a été introduite dans le bécher, ainsi qu'un volume d'eau $V_{\text{eau}} = 75 \text{ mL}$.

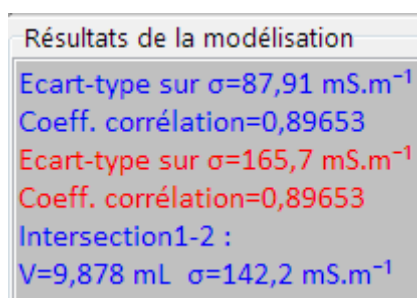
Ouvrir le fichier *Conducti.rw3* avec Regressi, puis tracer la courbe $\sigma = f(V)$.

Dans « Grandeur », « Tableau », cliquer sur « Ajouter Y+ ». Cela permet d'ajouter une nouvelle colonne : dans la fenêtre qui s'ouvre, sélectionner « Grandeur calculée ». Créer alors une grandeur qui s'appellera σ_{corr} et dont l'expression est la suivante :

$$\sigma_{\text{corr}} = \sigma \times \frac{E + V_{\text{eau}} + V}{E + V_{\text{eau}}}$$

- Tracer les courbes $\sigma = f(V)$ et $\sigma_{\text{corr}} = f(V)$ et comparer.
- Ne laisse ensuite que la seconde courbe et la modéliser en utilisant deux modèles (affine). Le volume équivalent se détermine à l'intersection des deux droites ainsi tracées. Cette intersection n'est pas à déterminer avec le réticule, mais doit être calculée par l'ordinateur.

Exemple de ce qui peut être obtenu :



Le volume équivalent déterminé ici est $V_{\text{eq}} = 9,88 \text{ mL}$. La valeur du coefficient de corrélation n'a pas d'importance.

Remarque : certains dosages pourront donner lieu à deux volumes équivalents. Le suivi conductimétrique montrera alors deux ruptures de pente : il sera nécessaire de procéder à trois modélisations.

- Enregistrer le fichier sous le nom : *Nom_conducti.rw3*

Méthode des tangentes et dérivées

Lors de dosages suivis par pH-métrie ou potentiométrie (courbes $\text{pH} = f(V)$ et $\square E = f(V)$), les courbes obtenues ne peuvent être modélisées par des régressions linéaires. La lecture du volume équivalent se fait au point d'inflexion de la courbe.

Méthode des tangentes

Ouvrir le fichier *pHmetrie.rw3* : visualiser le graphe $\text{pH} = f(V)$ et faisant apparaître les ellipses d'incertitude.

- Dans le menu « coordonnées », tracer une ligne pour relier les points : tester « segments » et « lissages » (les différents types).

- Tester également le tracé des tangentes¹ : essayer les trois méthodes. Entre chaque, clic droit, puis *RaZ des tangentes*.
- Faire apparaître la zone de virage d'un indicateur coloré adapté au suivi de ce dosage (dans « Coordonnées », puis onglet « Chimie »)

Méthode des dérivées

Pour tout ce qui suit, la courbe de pH tracée doit être lissée et le travail se fait toujours sur ce même graphique.

- créer la grandeur dpH, la dérivée de la courbe $\text{pH} = f(V)$. La créer trois fois (dpH1, dpH2 et dpH3), en faisant varier le nombre de points pris pour le calcul (cliquer sur « option » lors de la création de la grandeur).
- Déterminer la valeur du volume équivalent

Remarque : ne pas hésiter à jouer sur les échelles (courbe $\text{pH}=f(V)$ avec l'échelle à gauche et courbe $\text{dpH1}=f(V)$ avec l'échelle à droite par exemple). L'objectif est d'utiliser pleinement l'ensemble de la fenêtre de l'écran.

Pour augmenter la précision de ce dosage, nous allons resserrer la précision autour de l'équivalence : ajouter les points suivants au tableau de valeur² :

Volume (mL)	pH
10,06	3,73
10,08	3,96
10,09	4,51
10,11	9,67
10,12	10,09
10,14	10,30
10,16	10,44
10,17	10,55
10,19	10,63
10,20	10,70
10,22	10,77
10,23	10,82
10,25	10,87
10,50	11,29
10,75	11,49

- Déterminer à nouveau la valeur du volume équivalent après avoir tracé à nouveau la dérivée.
- Enfin, créer une dernière grandeur : la dérivée seconde (dérivée de la dérivée), que l'on notera d2pH. Déterminer à nouveau le volume équivalent (celui-ci se détermine au croisement entre la dérivée seconde et l'axe des abscisses).

¹ La méthode des tangentes n'est rigoureusement applicable que si la courbe présente un saut de pH symétrique.

² sélectionner les données, copier les, passer dans le tableau de Regressi, placer le curseur en dernière ligne vide, « coller page » (Regressi crée une page 2 avec les nouvelles données), puis dans le menu page « grouper » et sélectionner les pages à grouper.