

TD ISN : Résolution d'un problème par une méthode numérique

- Le problème à résoudre : calculer la valeur du pH d'une solution d'acide quelconque.
- Equation vérifiée par le pH : en appliquant les conditions de conservation de la quantité de matière, neutralité électrique de la solution, constante d'acidité, on peut établir que dans une solution d'acide faible de constante d'acidité K_a et de concentration apportée C, le pH vérifie l'égalité :

$$10^{-3pH} + K_a \times 10^{-2pH} - 10^{-pH}(10^{-14} + K_a \times C) - 10^{-14} \times K_a = 0$$

Cette égalité est vérifiée pour toutes les valeurs de concentrations apportées inférieures à $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$ et quel que soit la valeur de K_a dans l'intervalle $[10^{-14}, 1]$.

En résolvant cette équation, l'inconnue étant le pH, on pourra déterminer la valeur pH_{sol} du pH de la solution .

- Principe de la résolution :

On peut tenter d'utiliser une résolution par dichotomie.

On sait qu'une solution existe (parce que la situation physique existe) et qu'elle doit être comprise entre 0 et 14 (puisque ce sont les limites de valeurs de pH pour une solution aqueuse). On peut même prévoir qu'elle doit être comprise entre 0 et 7 puisqu'il s'agit d'une solution d'acide.

On va admettre que $10^{-3pH} + K_a \times 10^{-2pH} - 10^{-pH}(10^{-14} + K_a \times C) - 10^{-14} \times K_a$ est une fonction décroissante du pH sur l'intervalle $[0;14]$ et que donc sa valeur est positive pour $\text{pH} < \text{pH}_{\text{sol}}$ et négative pour $\text{pH} > \text{pH}_{\text{sol}}$.

On doit se donner un intervalle de tolérance pour le résultat : on arrêtera la recherche quand on aura encadré le résultat entre deux valeurs espacées de moins de 10^{-6} unités pH, par exemple.

Pour effectuer le calcul 10^x sous Java on fait appel à la méthode `Math.pow` de la classe

`Math` :

`Math.pow(10,x)` renvoie 10^x (au format `double`)

Quelques résultats attendus, pour vérifier le bon fonctionnement du programme (rappel : $K_a = 10^{-\text{pKa}}$) :

pKa	0 (cas limite des acides forts)	14 (cas limite de l'eau)	3	3	4	4	8	8
Ca (mol.L ⁻¹)	Ca	Quelconque (<0.1)	10^{-2}	10^{-4}	10^{-2}	10^{-4}	10^{-2}	10^{-4}
pH attendu	$-\log(\text{Ca})$	7	2,6	4	3	4.2	5	6

Remarque : Pour afficher le résultat, qui est une valeur double avec un nombre de chiffres raisonnable, on peut utiliser la classe DecimalFormat.

Il faudra importer cette classe en ajoutant tout à fait au début du programme, juste avant la déclaration de classe principale, la ligne

```
import java.text.DecimalFormat;
```

(Eclipse vous suggèrera de le faire pour vous si vous écrivez la ligne ci-dessous dans le programme)

La commande

```
System.out.println(new DecimalFormat("#.0").format(pH));
```

affiche la valeur de la variable pH avec

- le séparateur décimal "local" du système, c'est à dire pour nous une virgule.
- un nombre quelconque de chiffres avant la virgule
- un et un seul chiffre après la virgule, même si c'est un 0 inclus

Le paramètre "#.0" sert à décrire ce format. Vous pouvez essayer d'autres paramètres, comme "#,00" ou "#,#" ou "#,##".