LabNbook

Le Cahier Numérique pour l'Apprentissage CollaborActif

Rencontres LabNbook

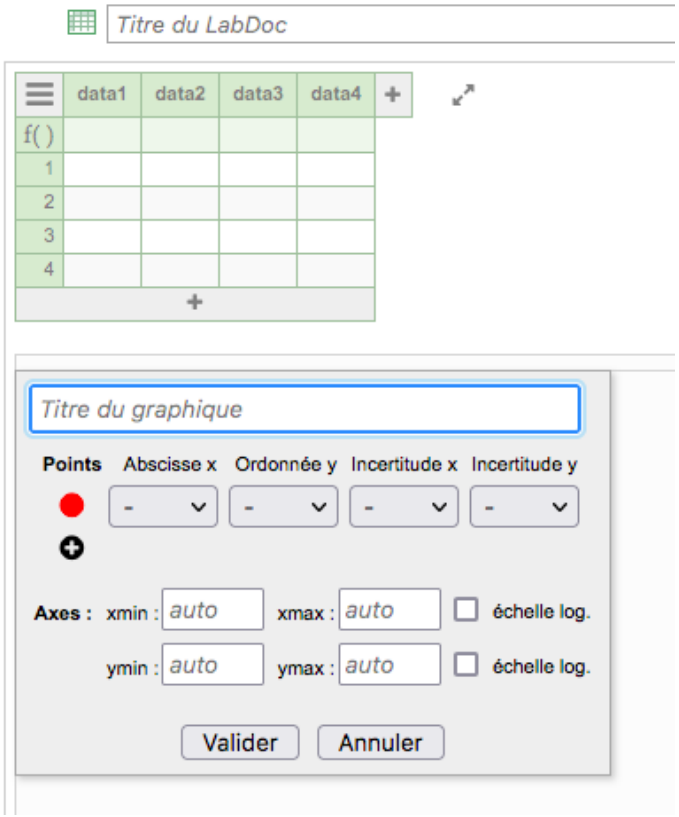
Modélisation : tout ce que vous avez toujours voulu savoir sur Fitex !

29 juin 2021

De la maltraitance des données expérimentales

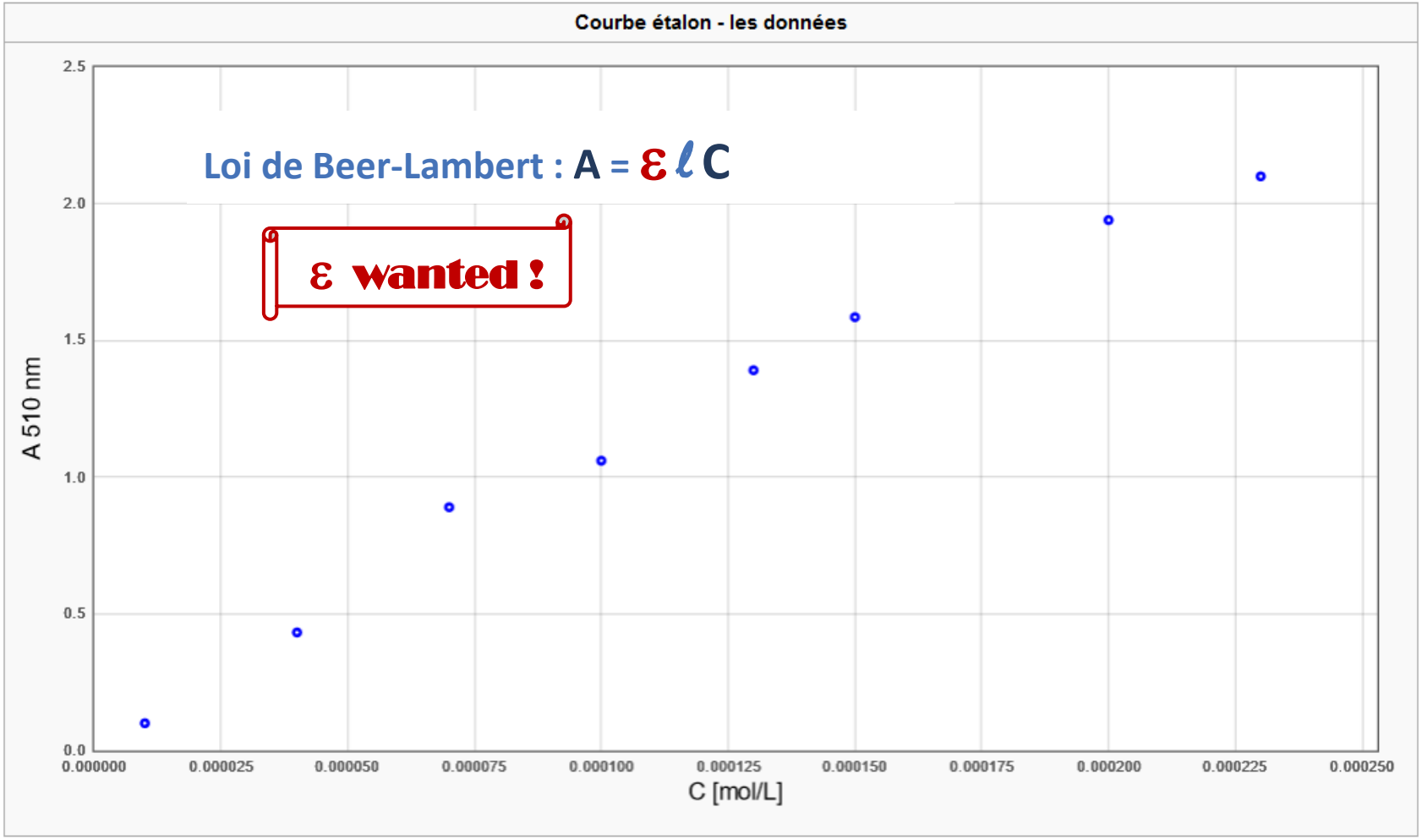
ou

Comment aider nos étudiants à mieux comprendre et traiter leurs données ?

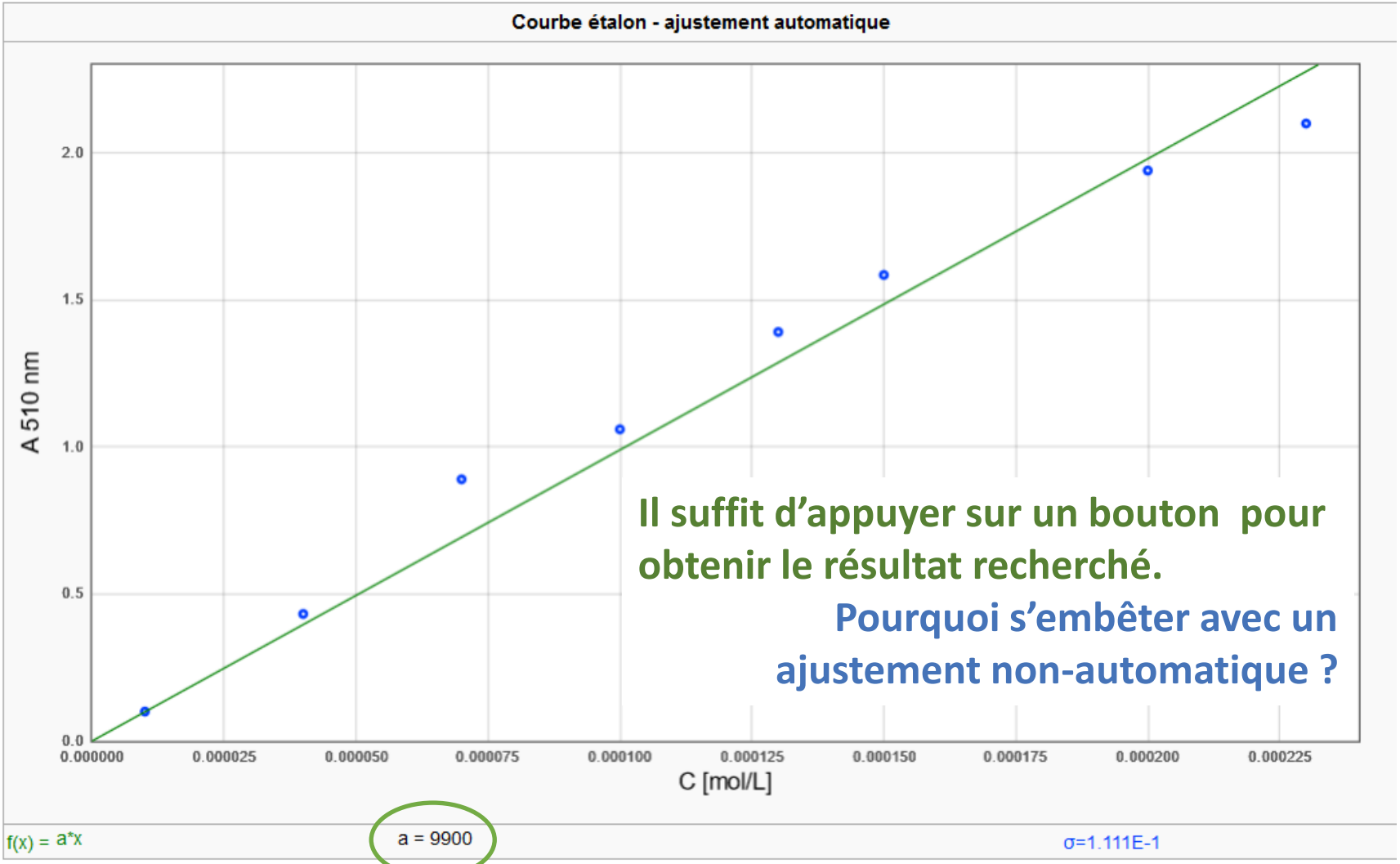


Fitex : outil de traitement des données, graphes et modélisation mathématique.

Exemple - un modèle linéaire en chimie



Ajustement presse-bouton (automatique) d'un modèle linéaire

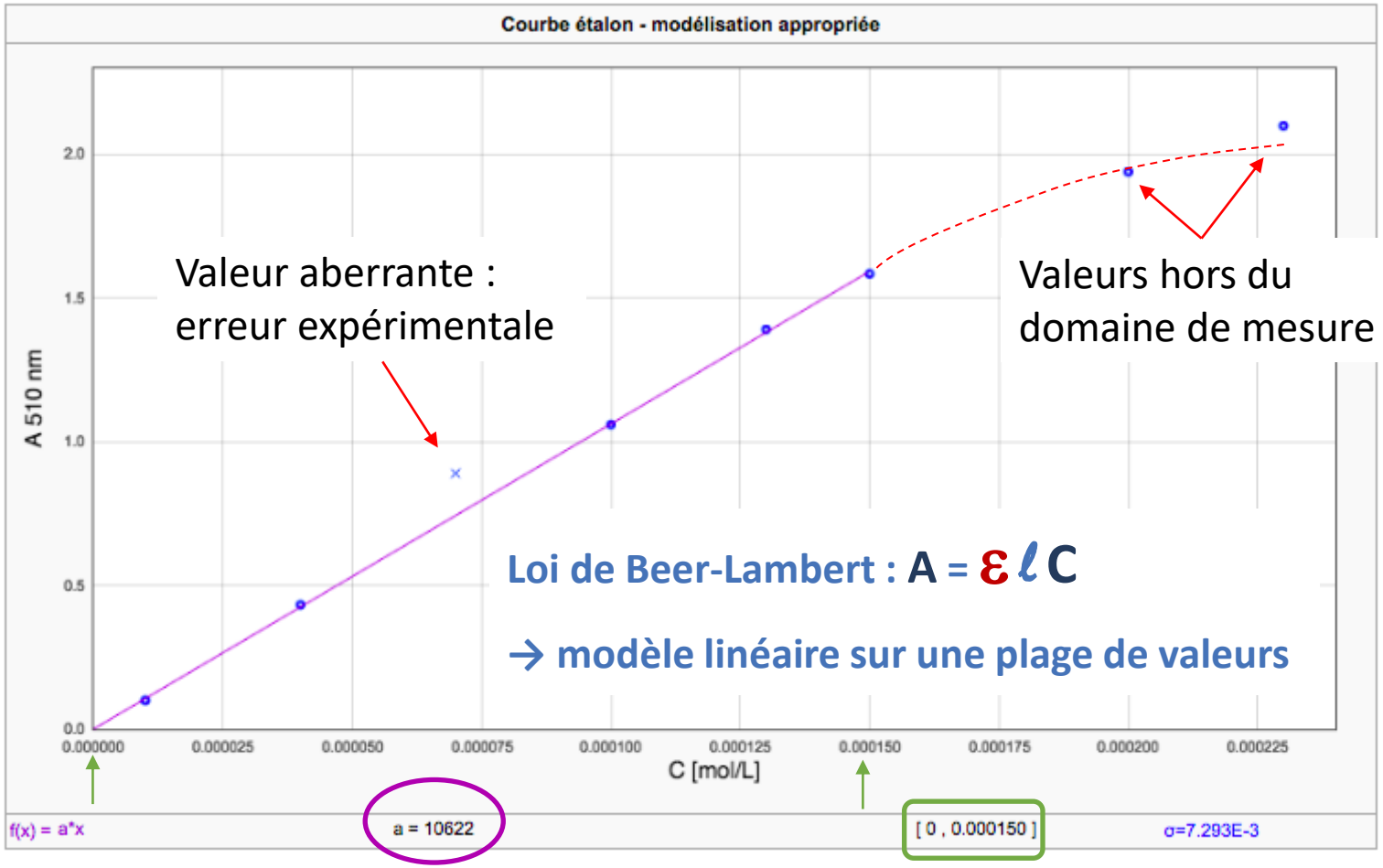


Il suffit d'appuyer sur un bouton pour obtenir le résultat recherché.

Pourquoi s'embêter avec un ajustement non-automatique ?

Résultat : pente = 9900 L.mol^{-1}

Modélisation adéquate (avec Fitex)



Résultat : pente = 10622 L.mol^{-1}

Plage de valeurs
prises en comptes

Votre partage d'expérience

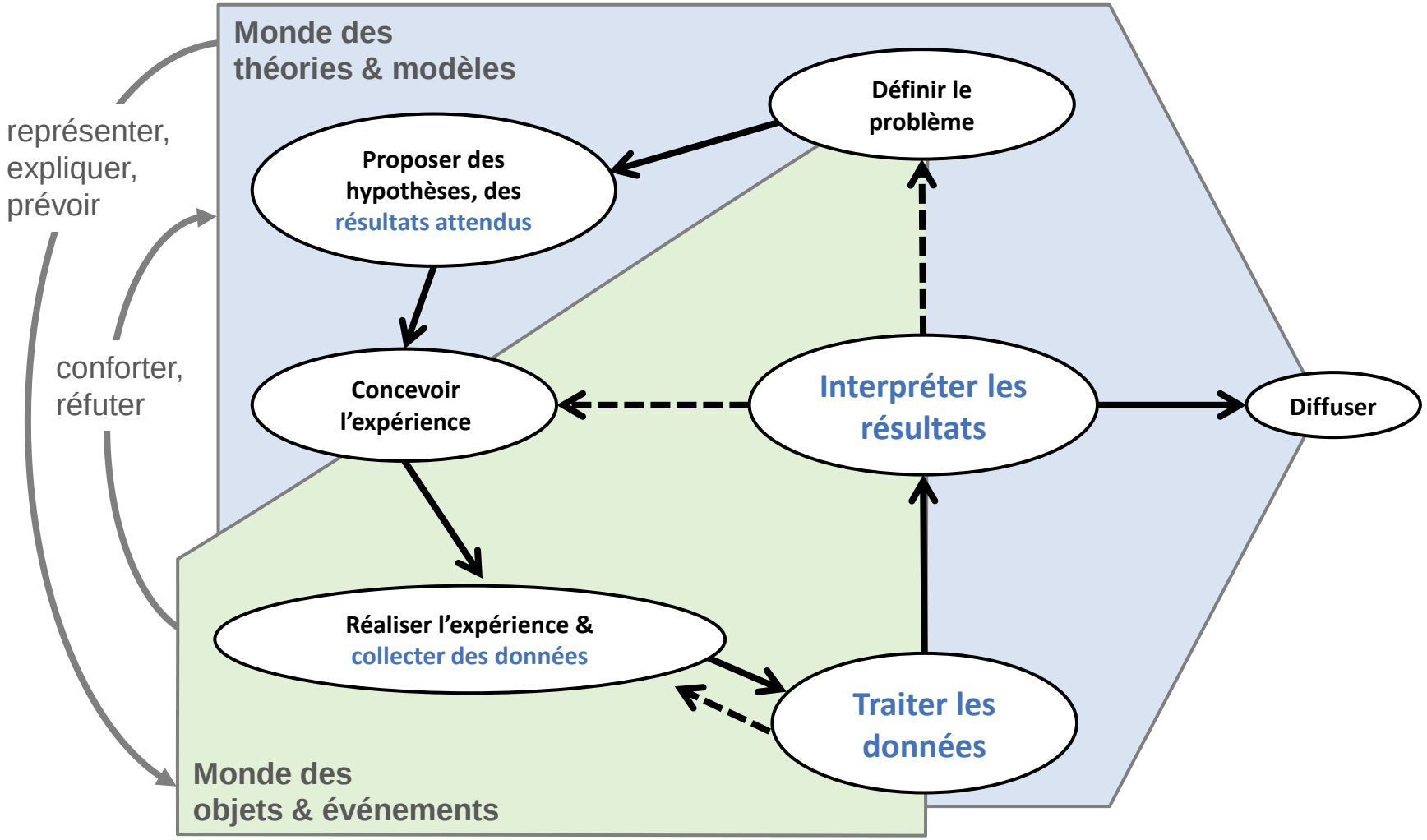
De la maltraitance des données expérimentales

ou

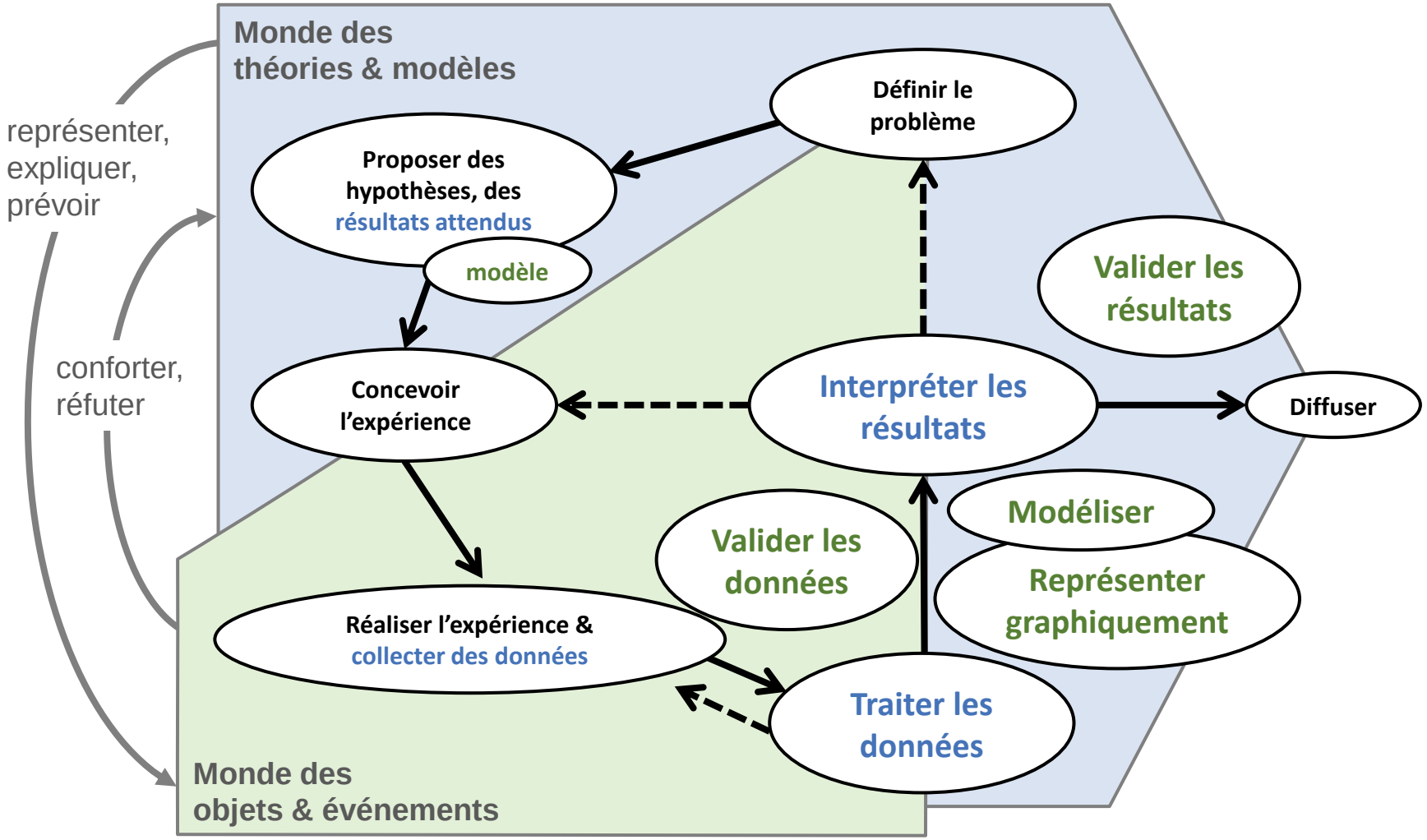
Comment aider nos étudiants à mieux comprendre et traiter leurs données ?

- Quelles difficultés rencontrez-vous avec vos étudiants ?
- Quels intérêts d'un ajustement automatique ? Non automatique ?

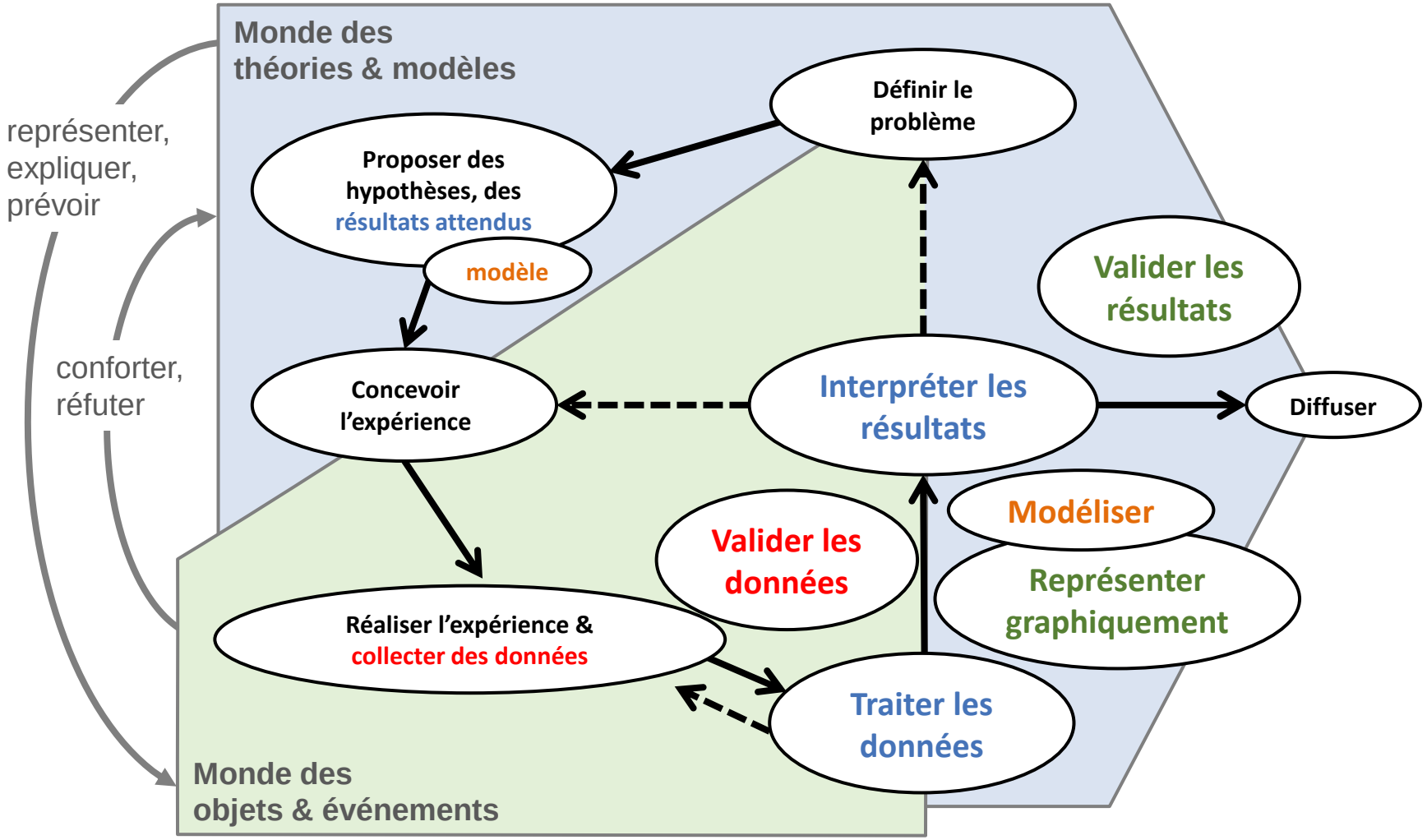
Cycle expérimental



Cycle expérimental



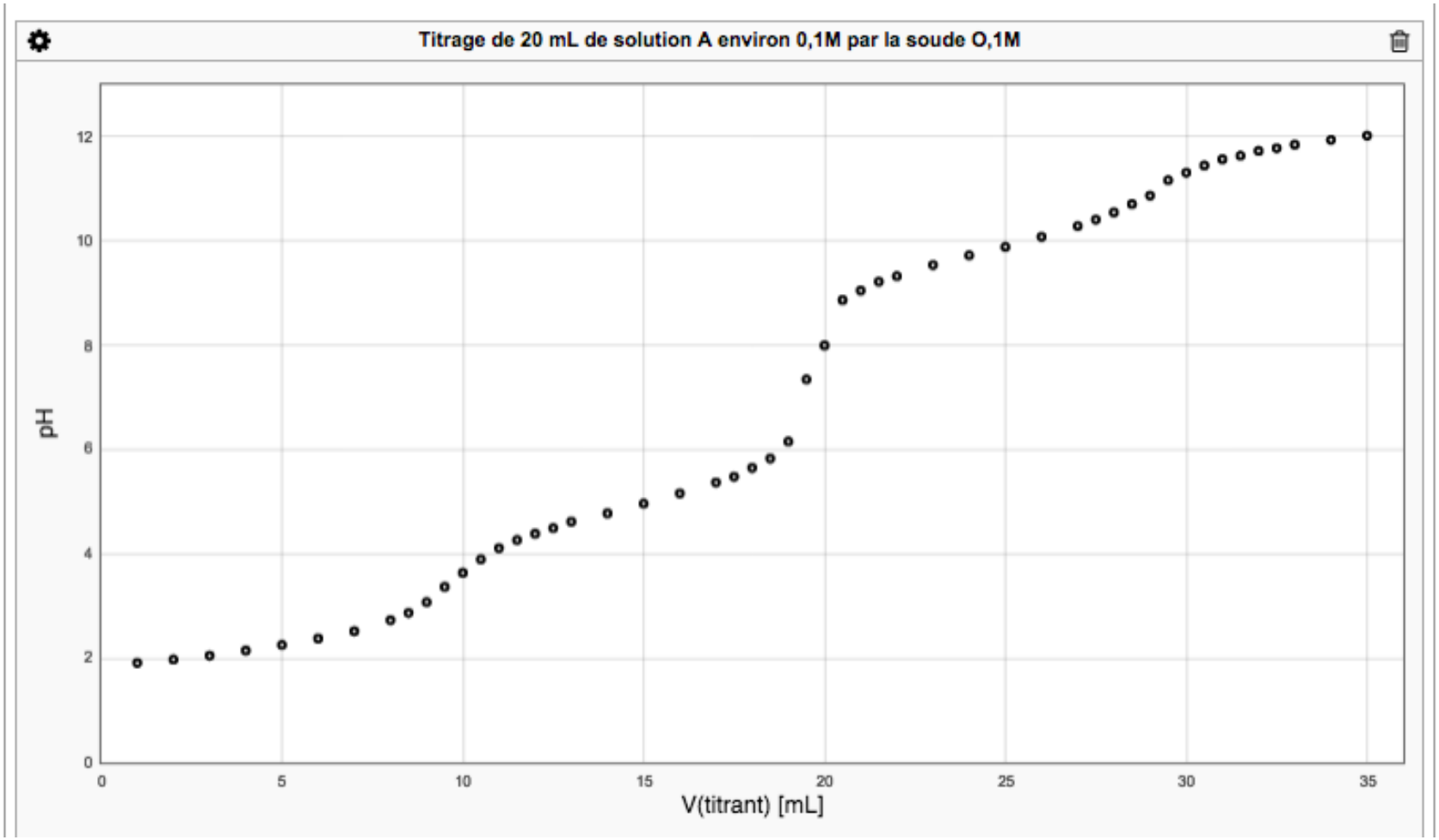
Cycle expérimental



Thème 1 : Choisir un modèle adapté aux données expérimentales

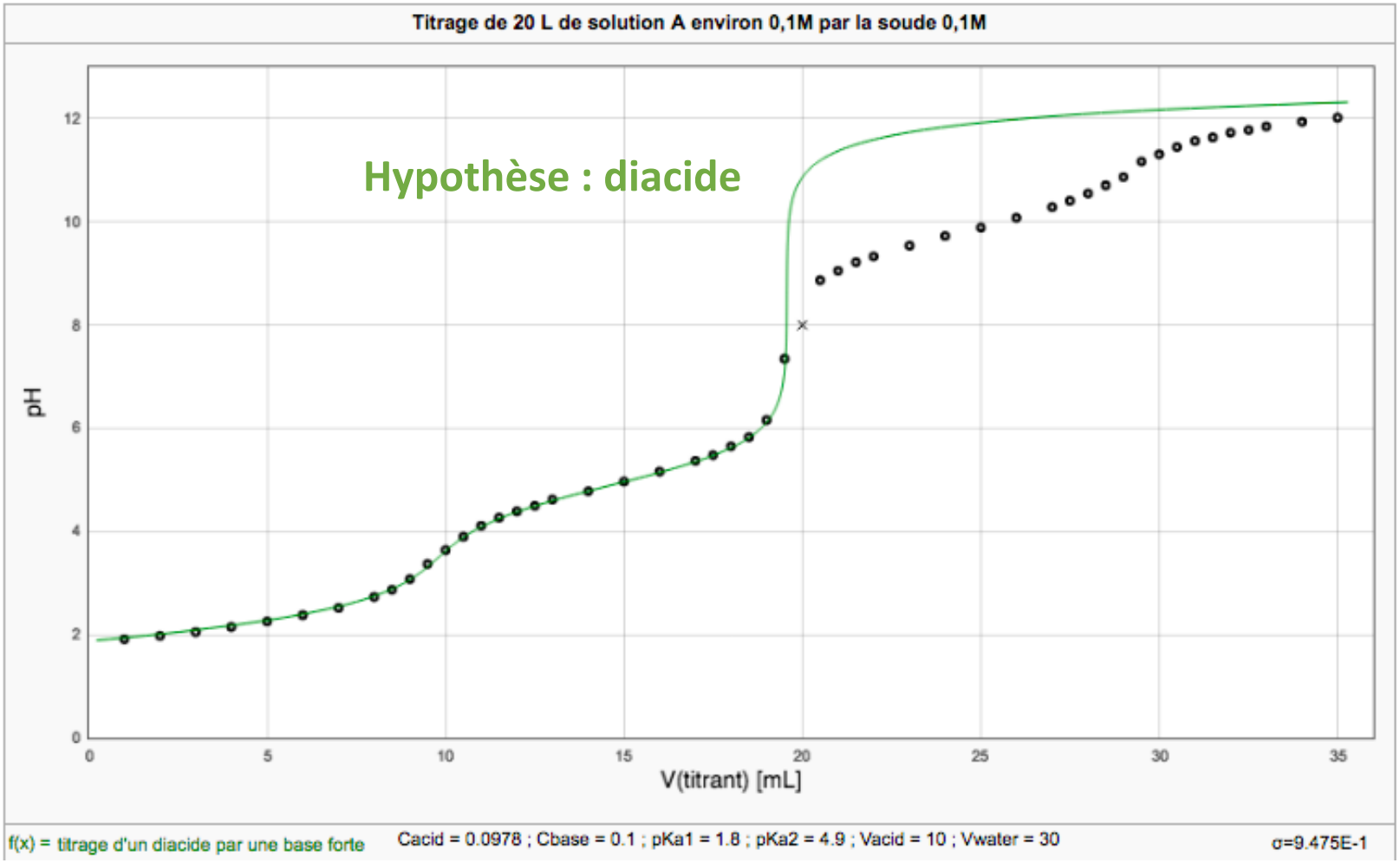
Choisir un modèle adéquat pour résoudre un problème, en testant & comparant des modèles

MEP 101 : Identifier un acide aminé par titrage



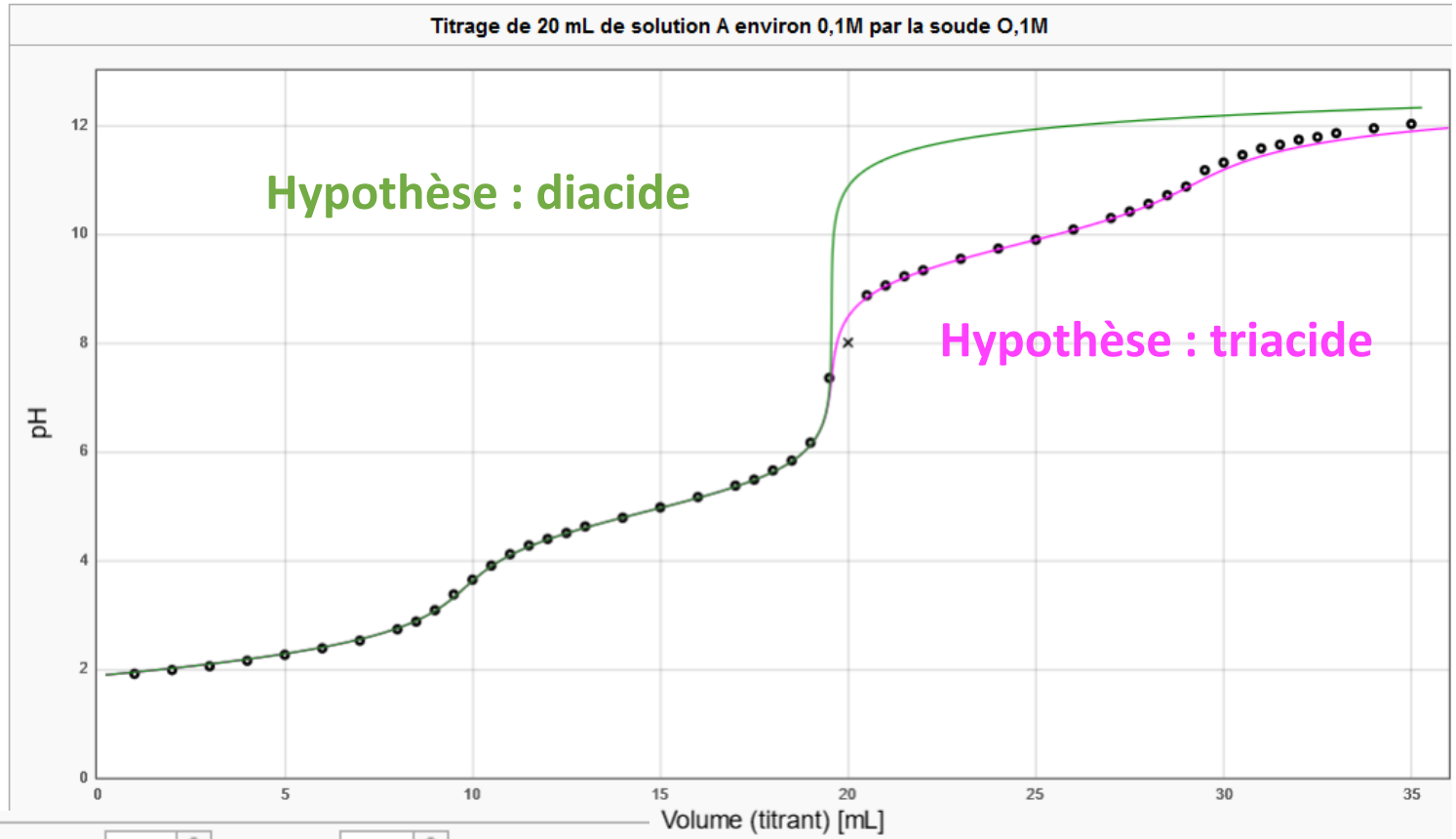
Choisir un modèle adéquat pour résoudre un problème, en testant & comparant des modèles

MEP 101 : Identifier un acide aminé par titrage



Choisir un modèle adéquat pour résoudre un problème, en testant & comparant des modèles

MEP 101 : Identifier un acide aminé par titrage



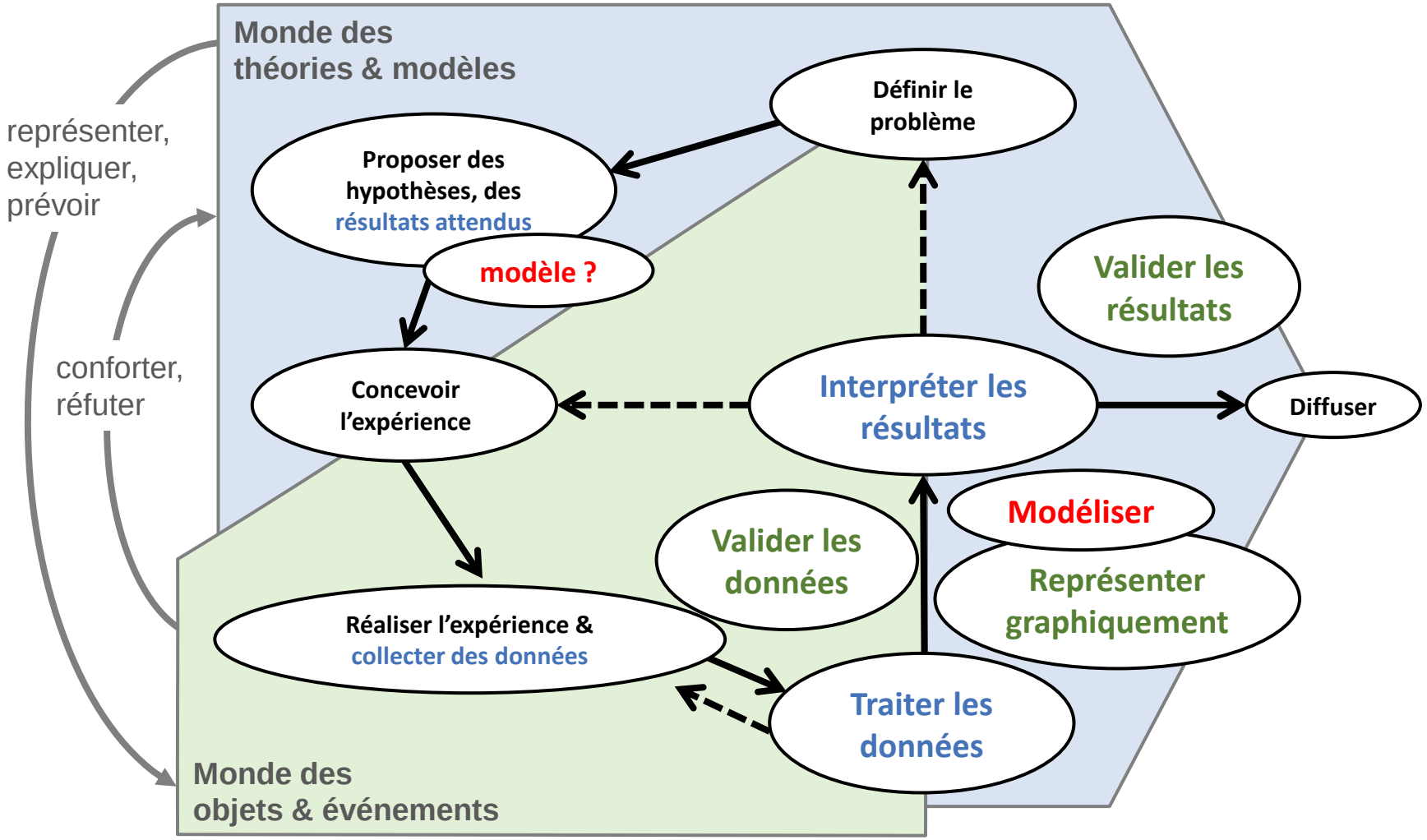
Cacid = 0.0978 Cbase = 0.1 pKa1 = 1.8
pKa2 = 4.9 pKa3 = 9.8 Vacid = 10 Vwater = 30

Cacid = 0.0978 Cbase = 0.1 pKa1 = 1.8
pKa2 = 4.9 Vacid = 10 Vwater = 30

f(x) ▸ titrage d'un triacide par une base forte

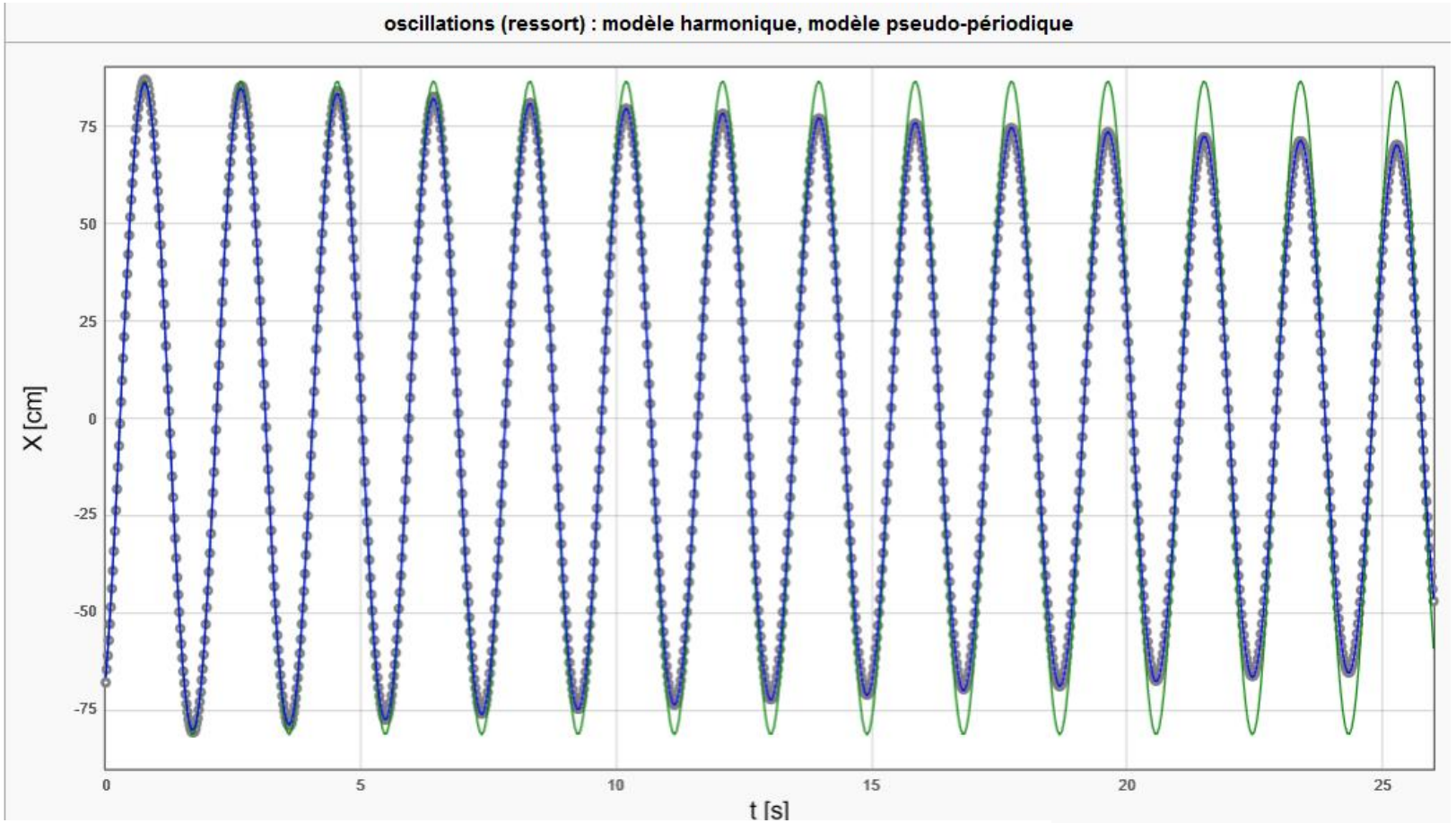
f(x) ▸ titrage d'un diacide par une base forte

Cycle expérimental



Choisir un modèle adéquat pour déterminer une grandeur, en testant & comparant des modèles

MEC201 : mouvement d'un système masse-ressort

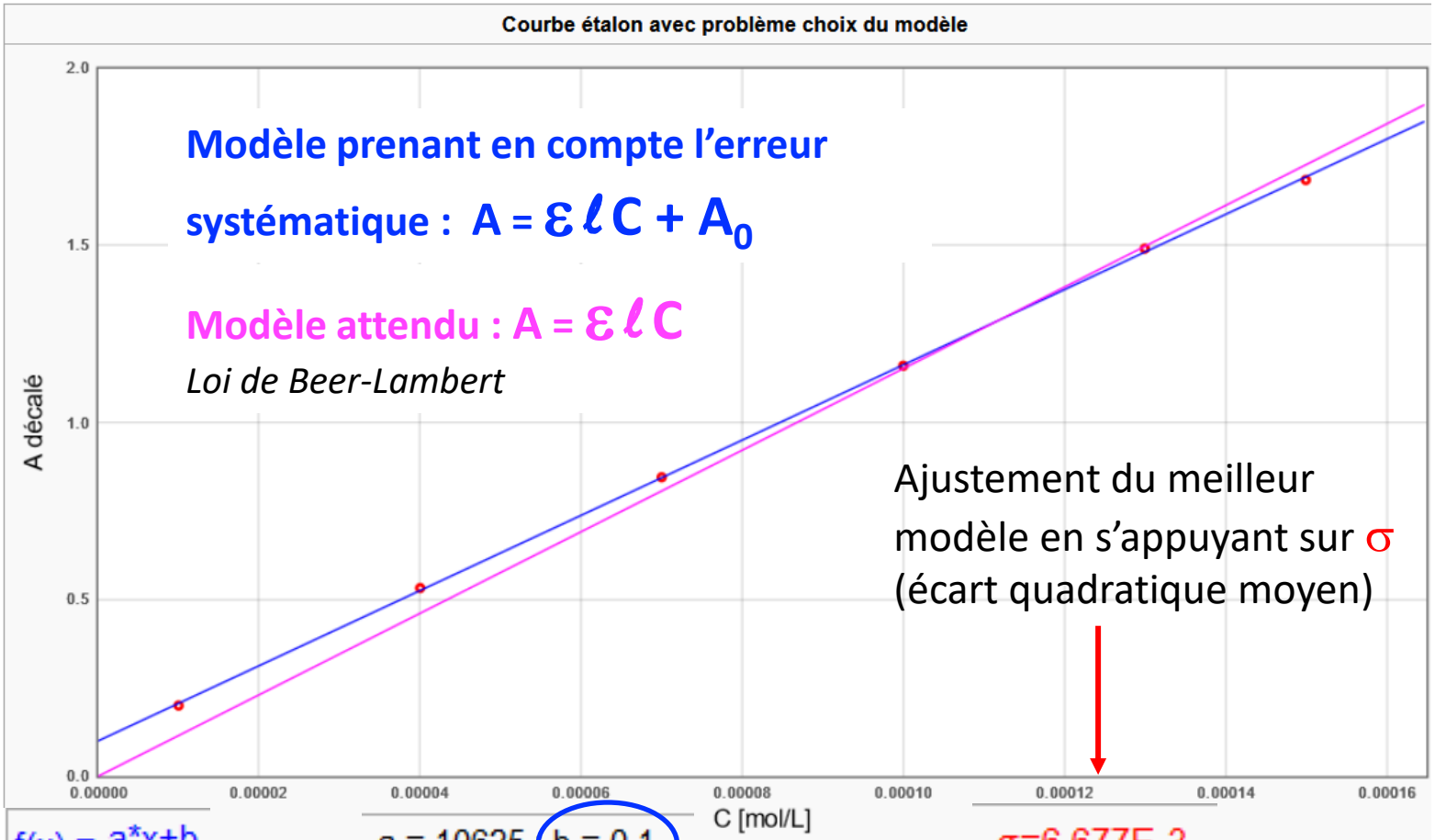


Hypothèse harmonique (frottements négligeables) $f(x) = A*\sin((x+t0)*2*pi/T)+x0$

Hypothèse pseudo-périodique (frottement fluide faible) $f(x) = A*\exp(-\alpha*x)*\sin((x+t0)*2*pi/T)+x0$

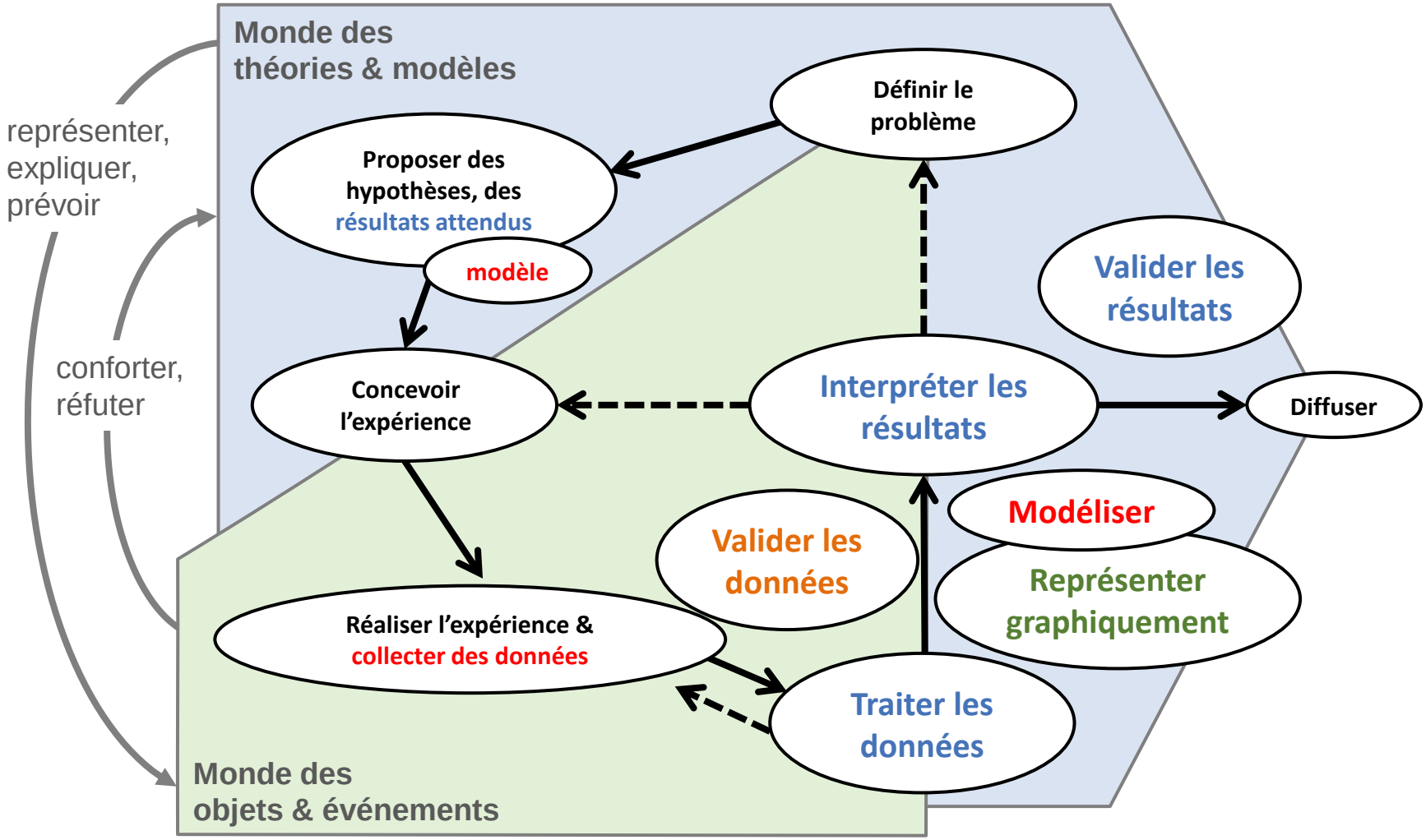
Identifier un problème dans les données par confrontation à un modèle attendu

MEP 203 : une erreur classique dans le choix du « zéro » *(solution de référence)*



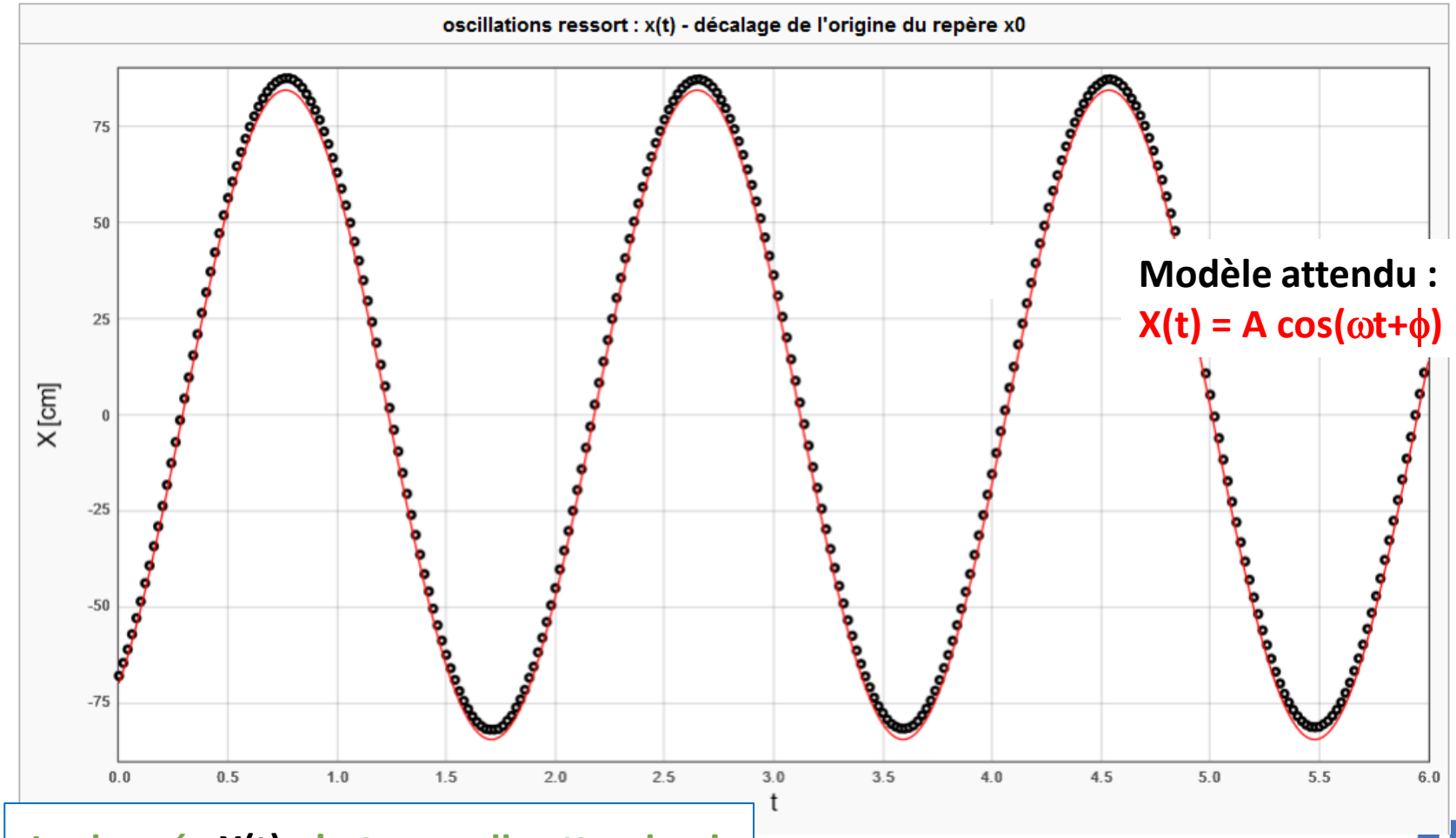
f(x) = a*x+b	a = 10625 b = 0.1	σ=6.677E-3
f(x) = a*x	a = 11519	σ=5.116E-2

Cycle expérimental



Identifier un problème dans les données par confrontation à un modèle attendu

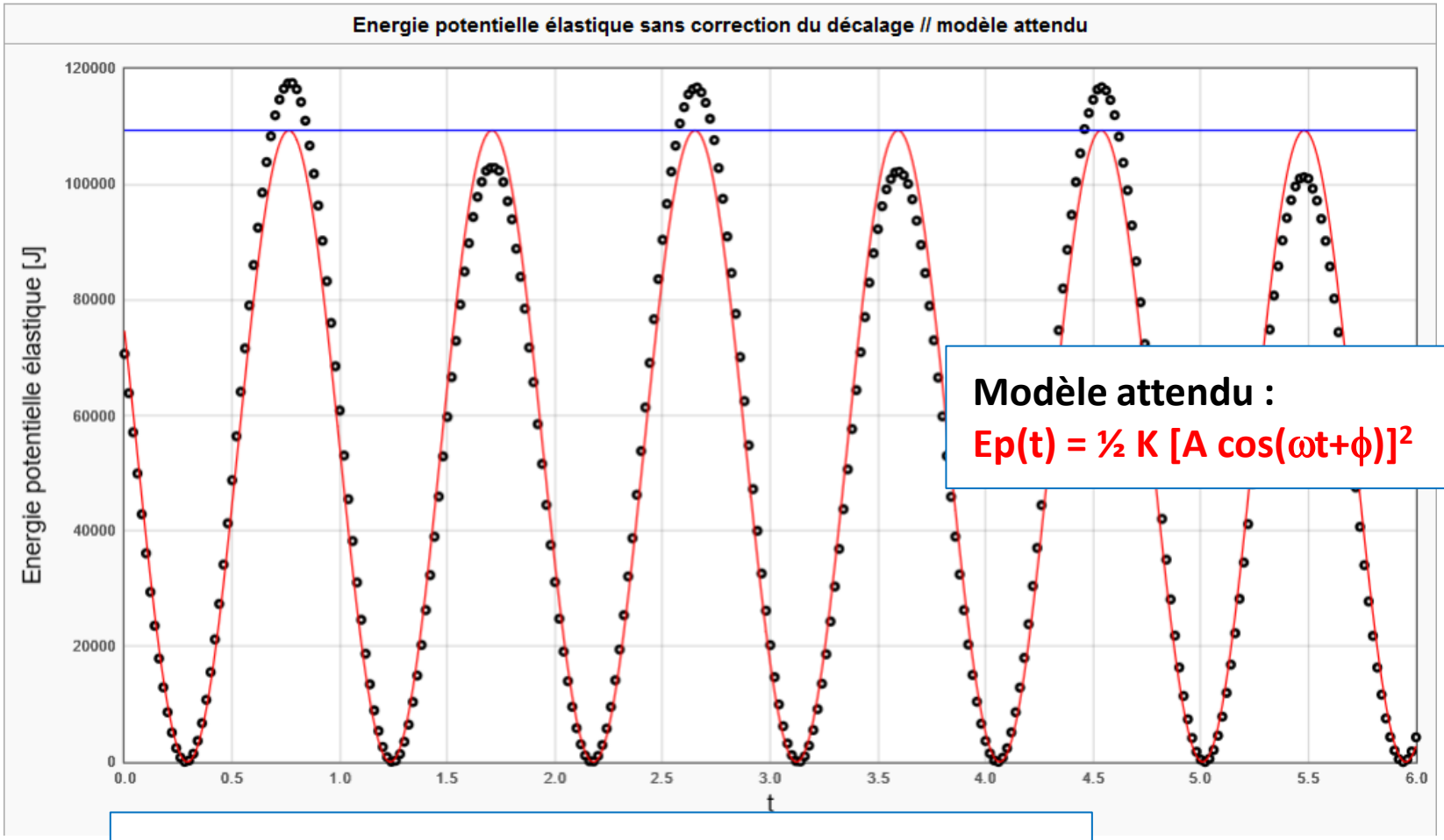
MEC201 : une origine de repère difficile à caler : $X(t) = A\cos(\omega t+\phi)$ + X0



La donnée X(t) n'est pas celle attendue !

Identifier un problème dans les données par confrontation à un modèle attendu

MEC201 : $X(t) = A\cos(\omega t+\phi) + X_0$ → $Ep(t) = ½\, K\, X^2$ // $Ep(t) = ½\, K\, (X-X_0)^2$

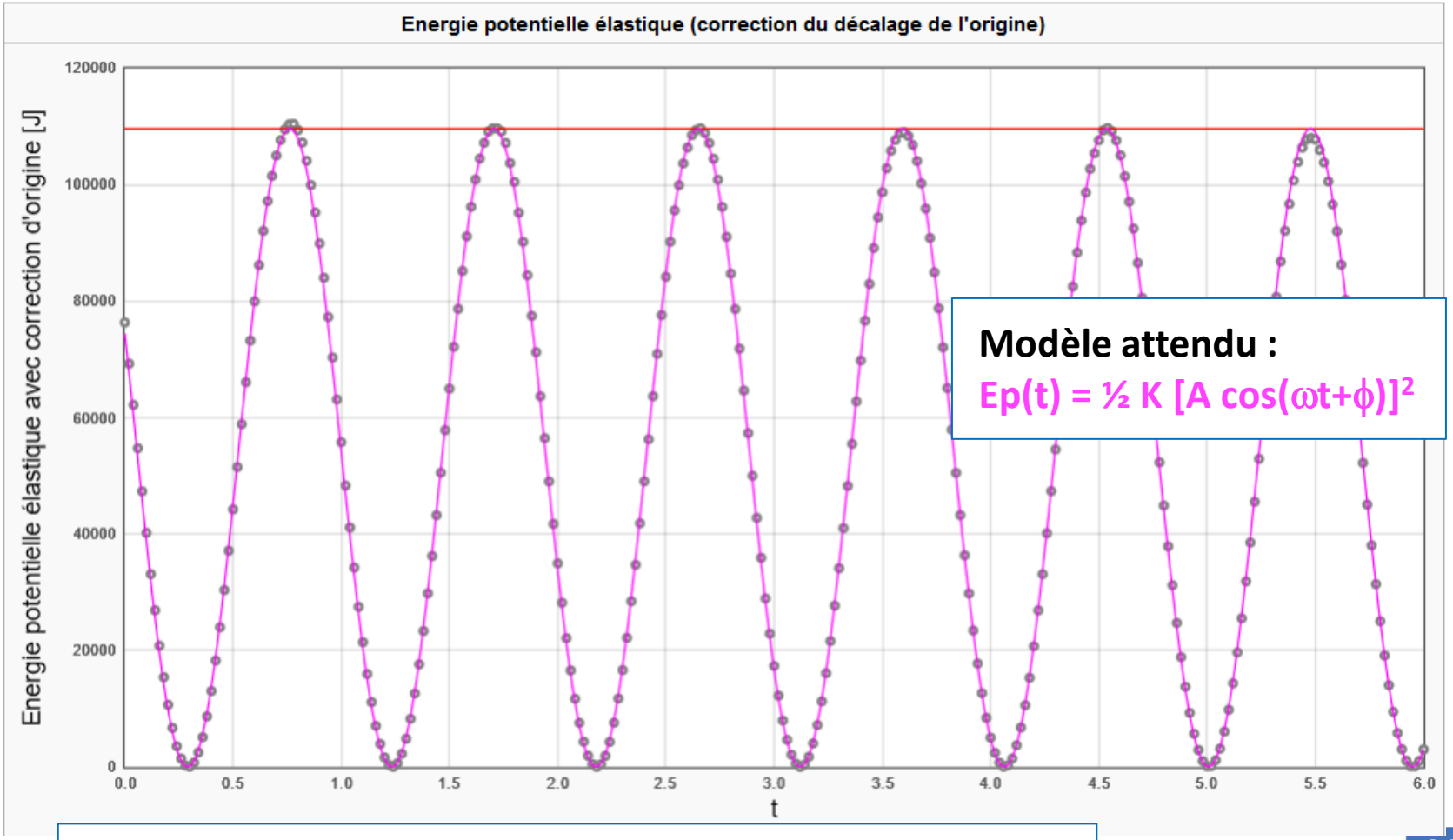


Modèle attendu :
$Ep(t) = ½\, K\, [A\cos(\omega t+\phi)]^2$

La donnée traitée ½ K X(t)^2 n'est pas celle attendue !

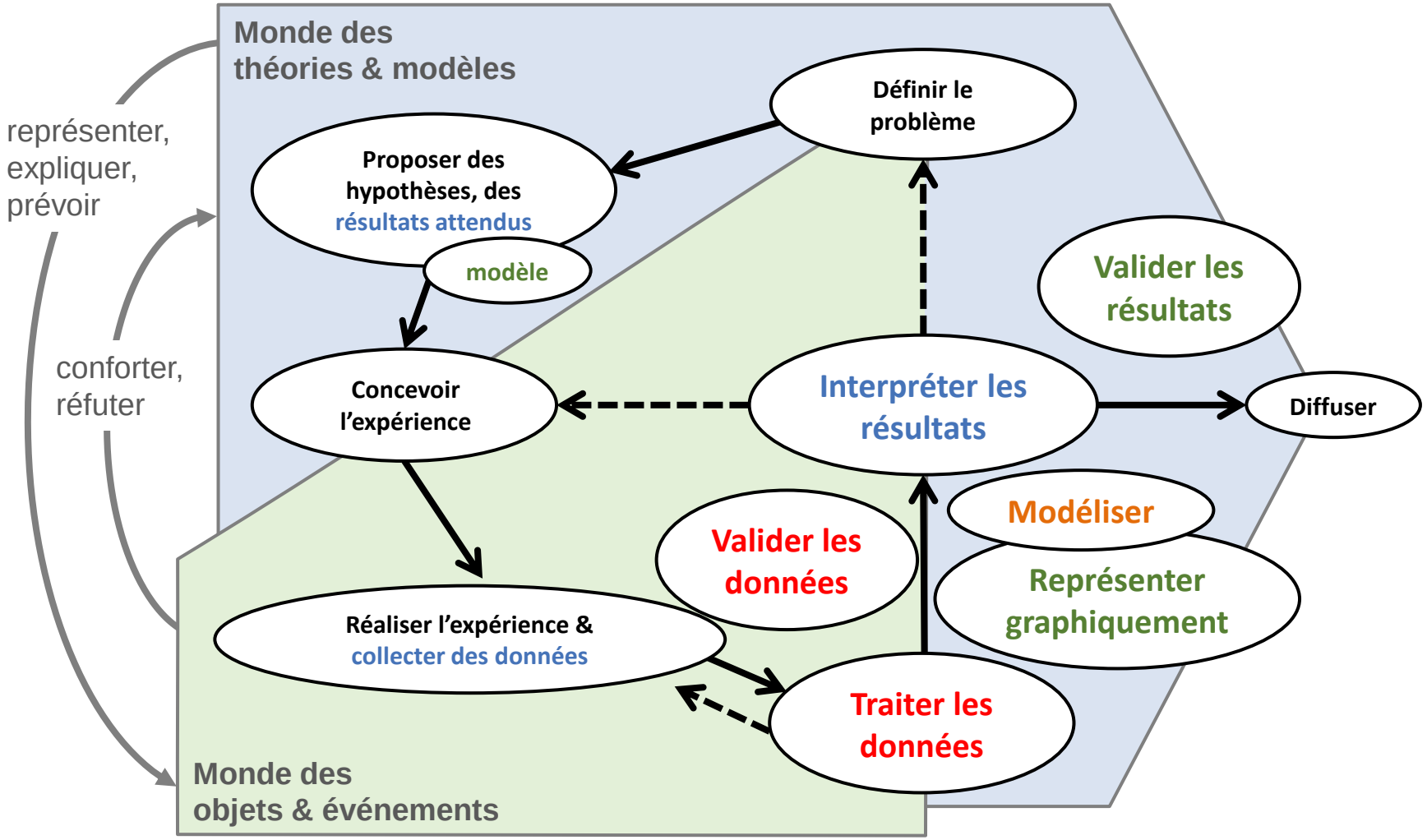
Identifier un problème dans les données par confrontation à un modèle attendu

MEC201 : $X_{cor}(t) = X(t) - X_0 = A\cos(\omega t+\phi)$ → $Ep(t) = ½ K X_{cor}^2$



La donnée traitée a été corrigée : $Ep(t) = ½ K (X(t)-X_0)^2$

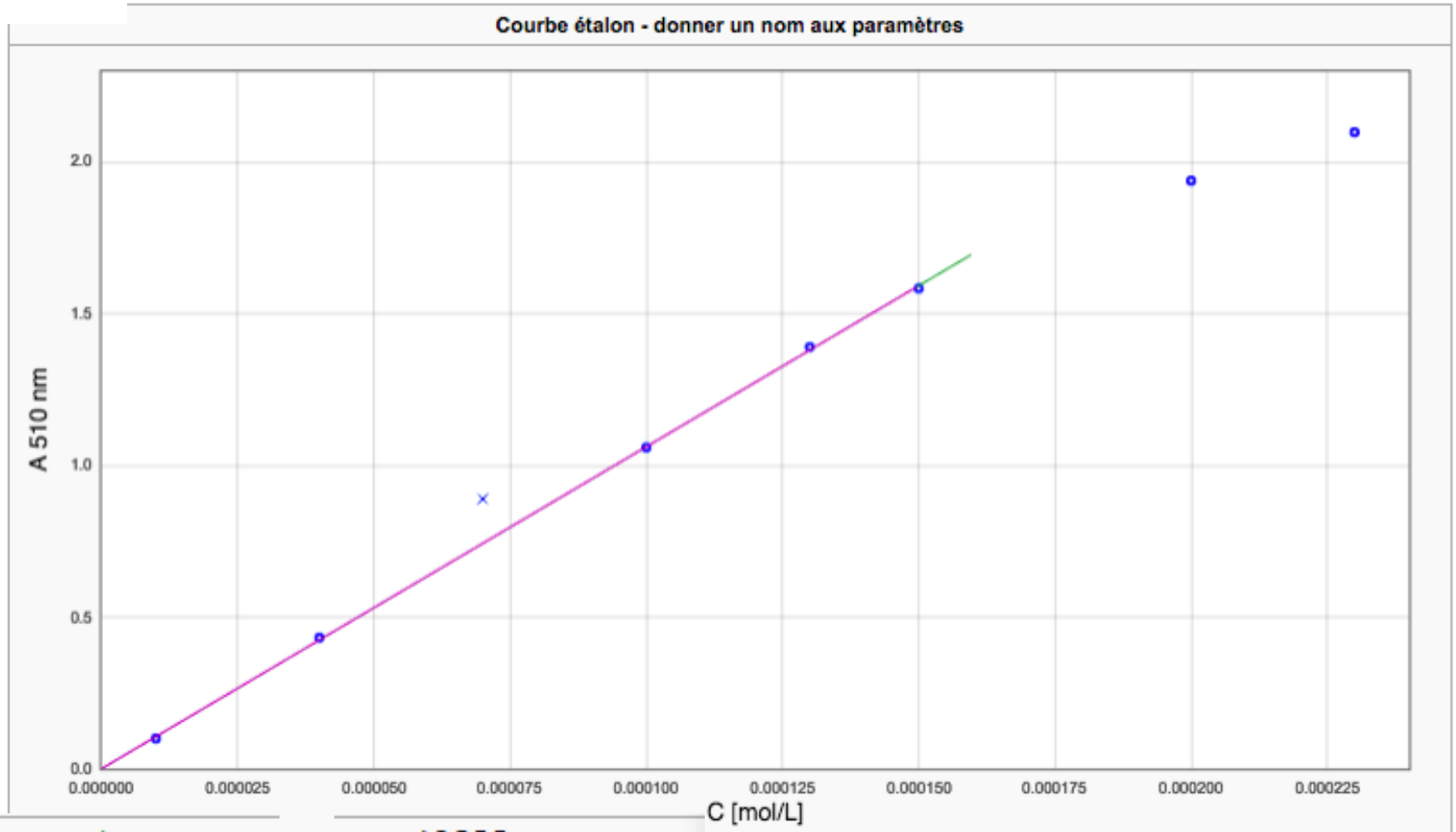
Cycle expérimental



Thème 2 : Comprendre la signification des paramètres d’un modèle

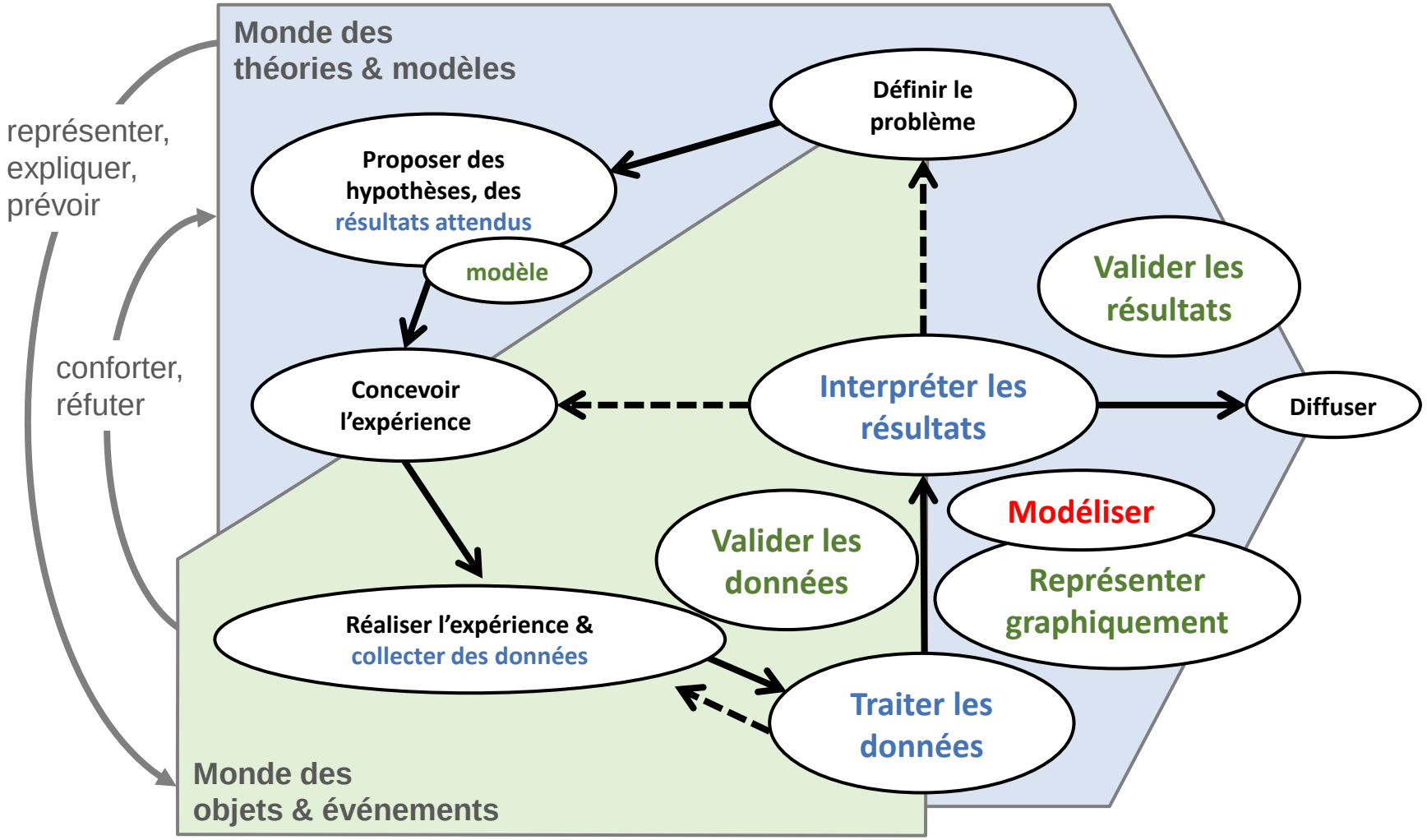
Donner du sens à un modèle mathématique en faisant apparaître les grandeurs d'intérêt

MEP 203



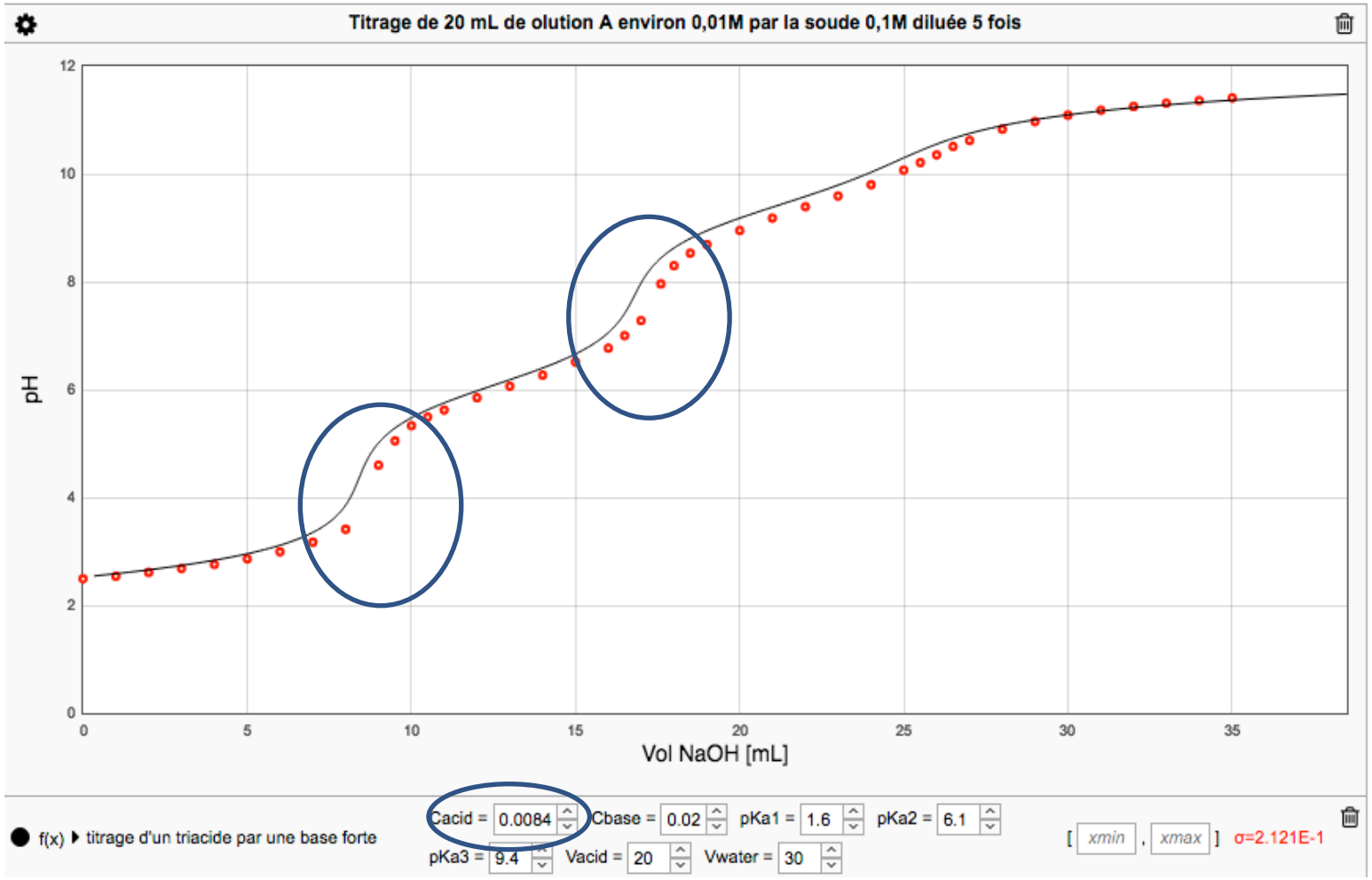
f(x) = a*x	a = 10622	[0 , 0.00016]	σ=7.293E-3
f(x) = epsilon*L*x	epsilon = 5311 ; L = 2	[0 , 0.00015]	σ=7.293E-3

Cycle expérimental



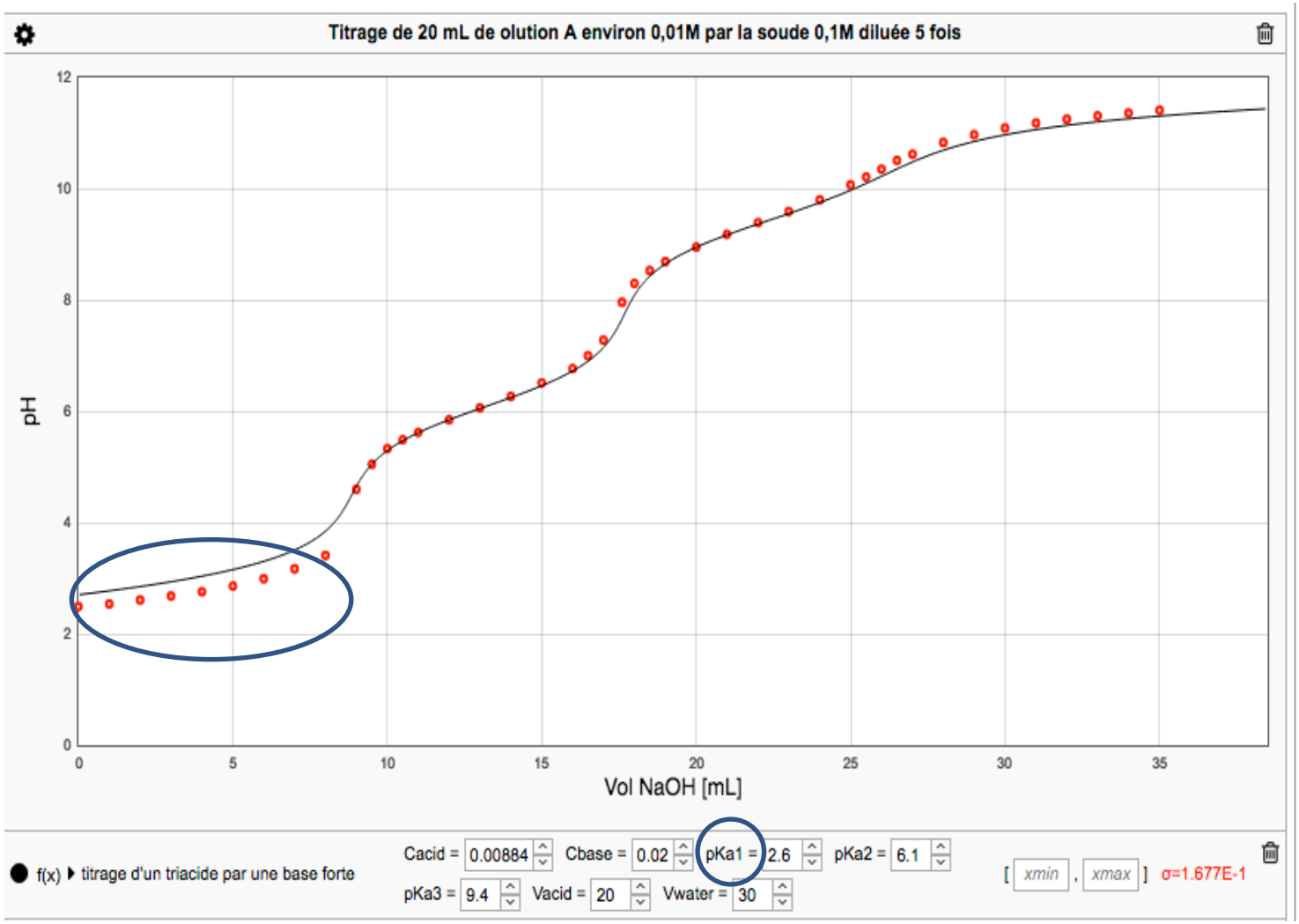
Ajuster les paramètres sur les données expérimentales

MEP 101



Ajuster les paramètres sur les données expérimentales

MEP 101

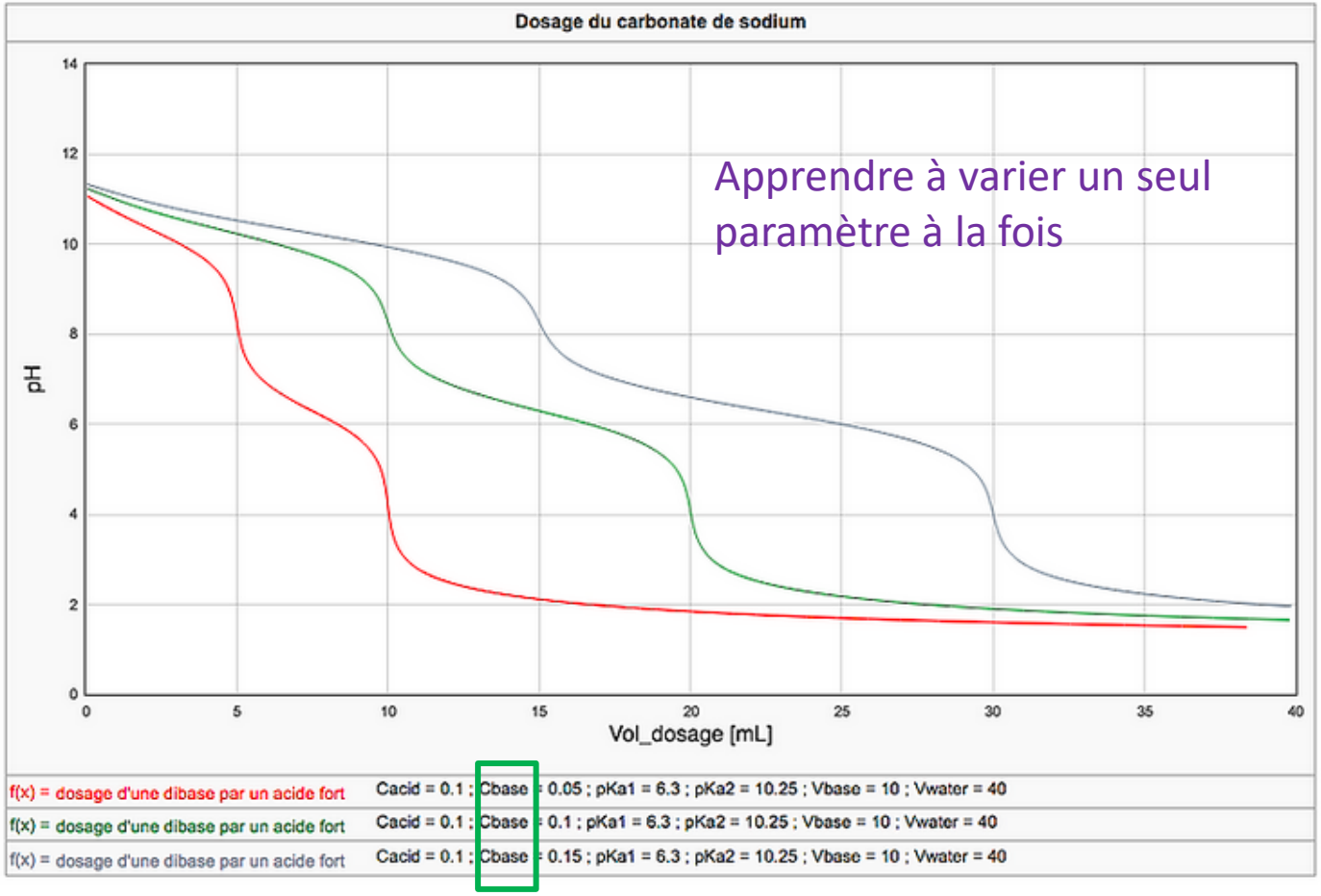


Exploration visuelle « théorique » d'un modèle (sans données)

CHI 401

Dosage théorique du carbonate de Na par le chlorhydrique

pH | Vol_dosage [mL]

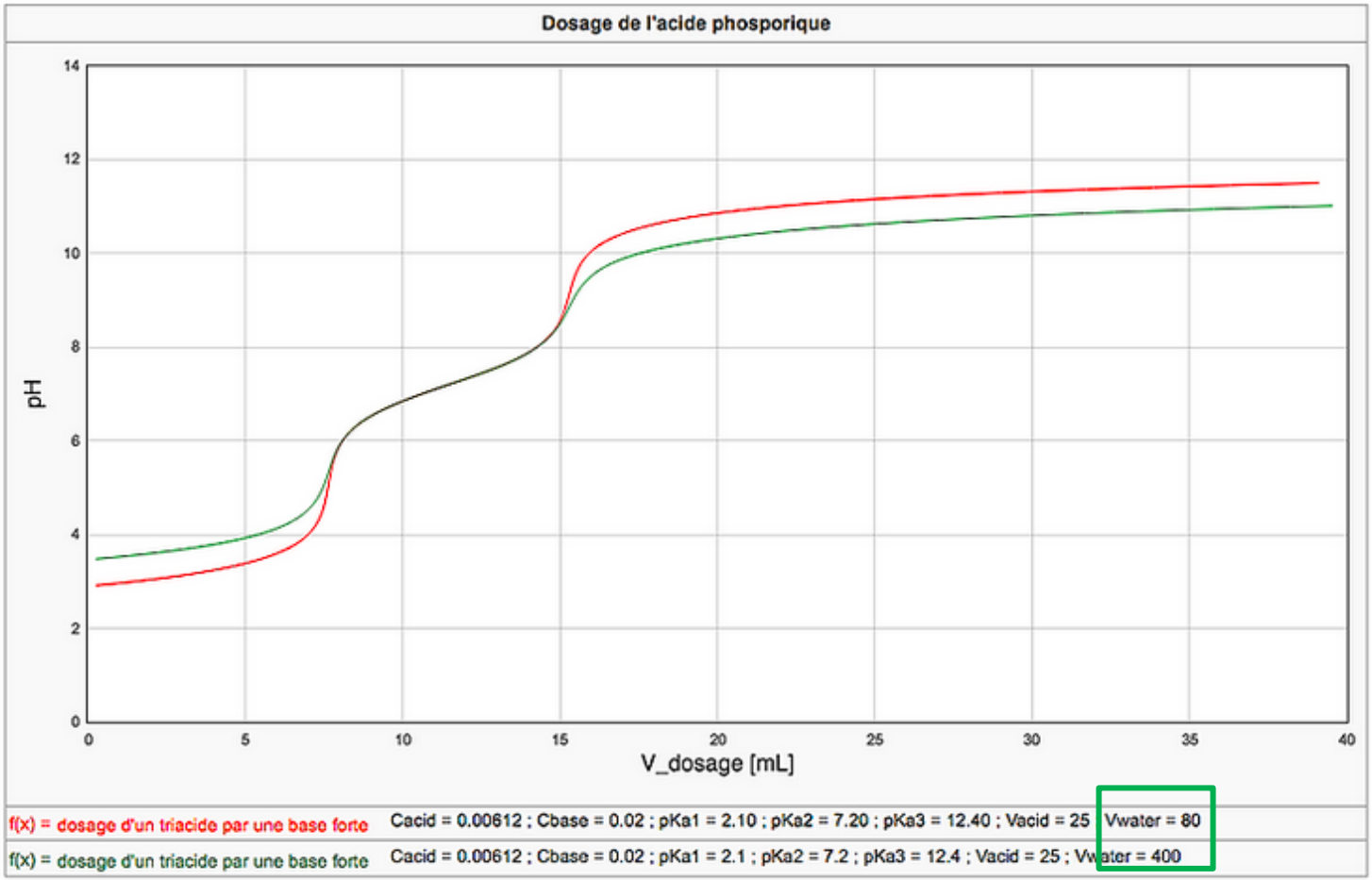


Exploration visuelle « théorique » d'un modèle (sans données)

CHI 401

Courbe théorique de dosage de l'acide phosphorique par la soude

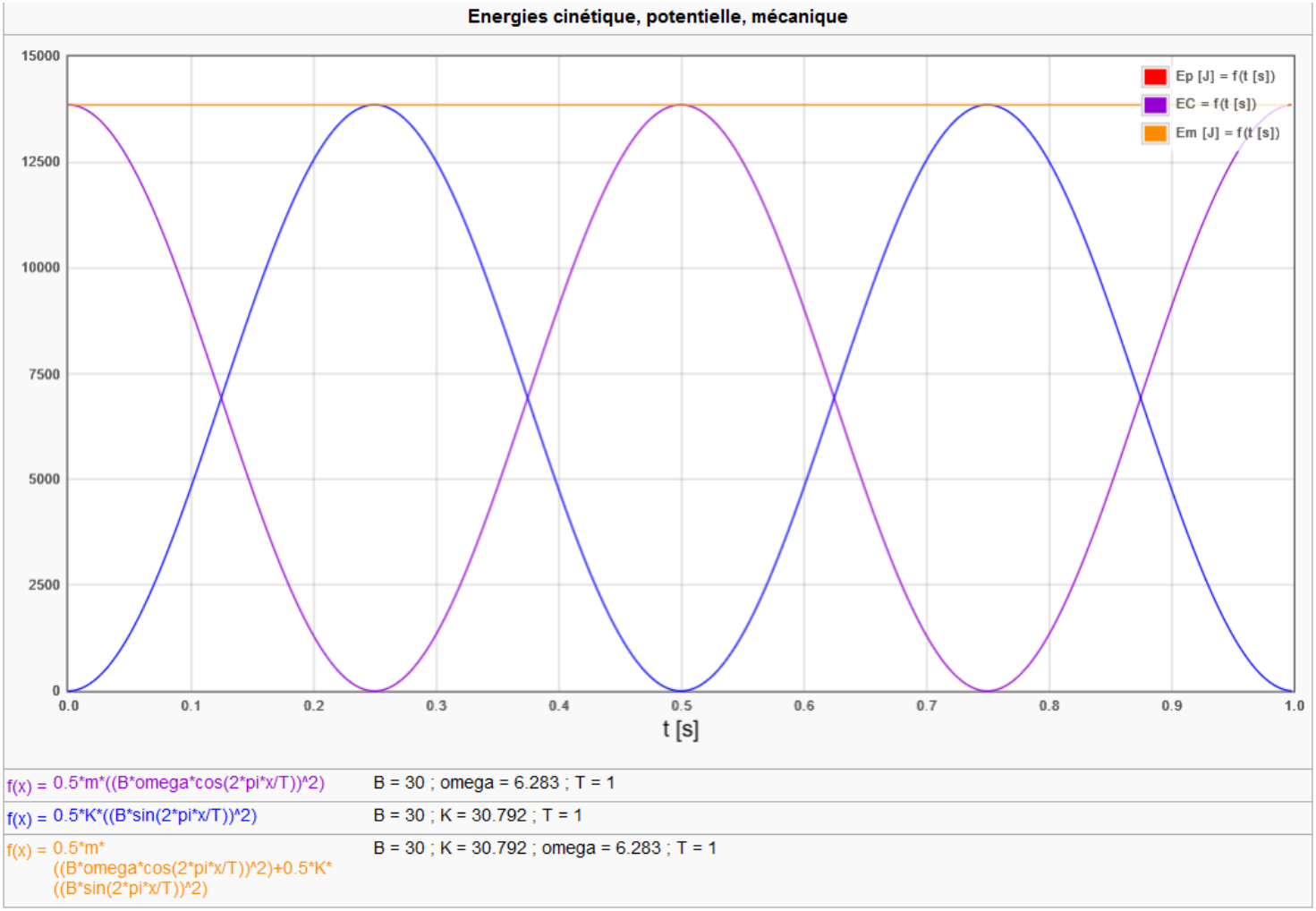
V_dosage [mL] | pH



Exploration visuelle « théorique » d'un modèle (sans données)

MEC201 : Ce qu'on montre toujours aux étudiants ...

mais qu'ils ne font jamais eux-mêmes !



LabNbook

Le Cahier Numérique pour l'Apprentissage CollaborActif

LIG

UNIVERSITÉ Grenoble Alpes

Grenoble INP

Liberté • Égalité • Fraternité
RÉPUBLIQUE FRANÇAISE

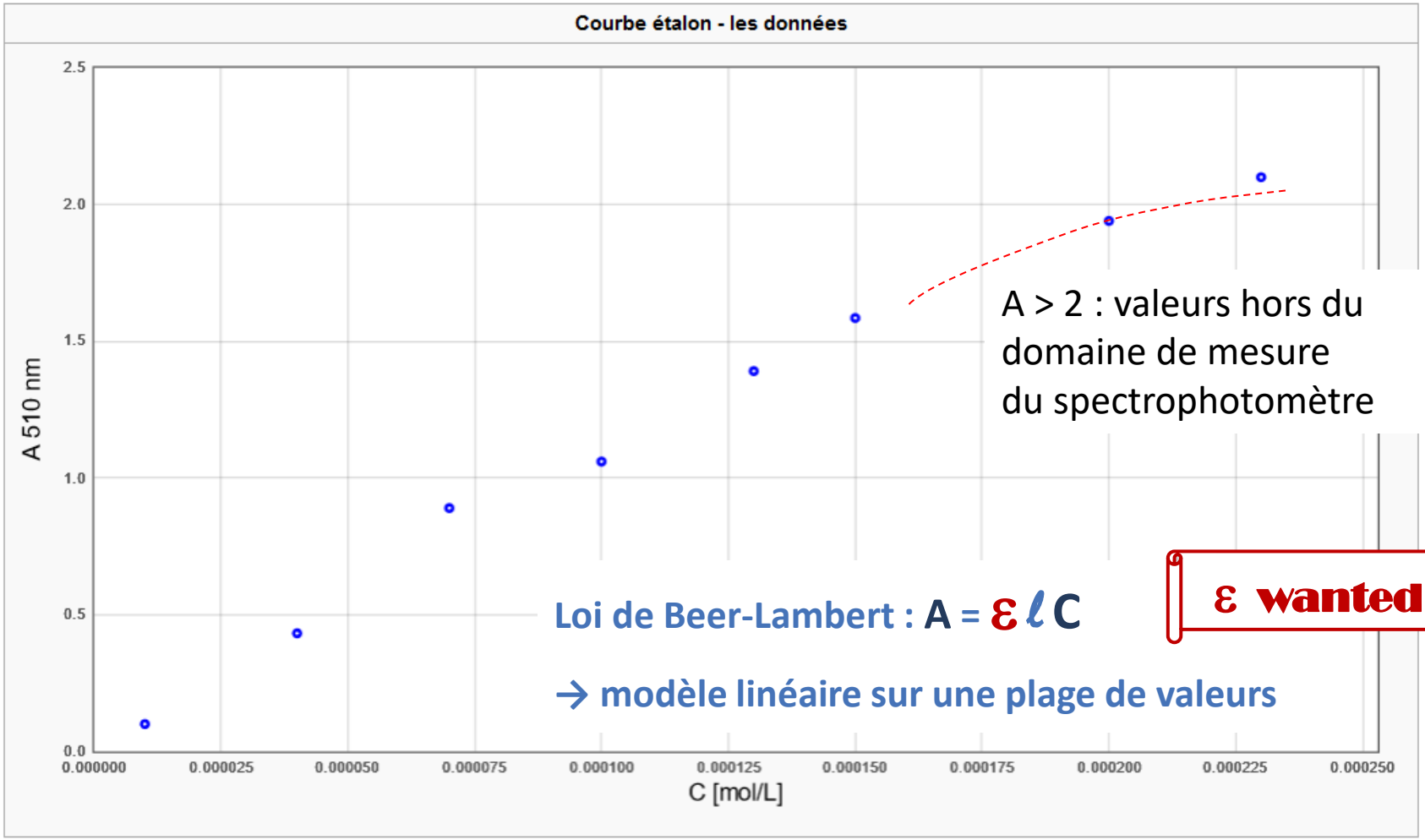
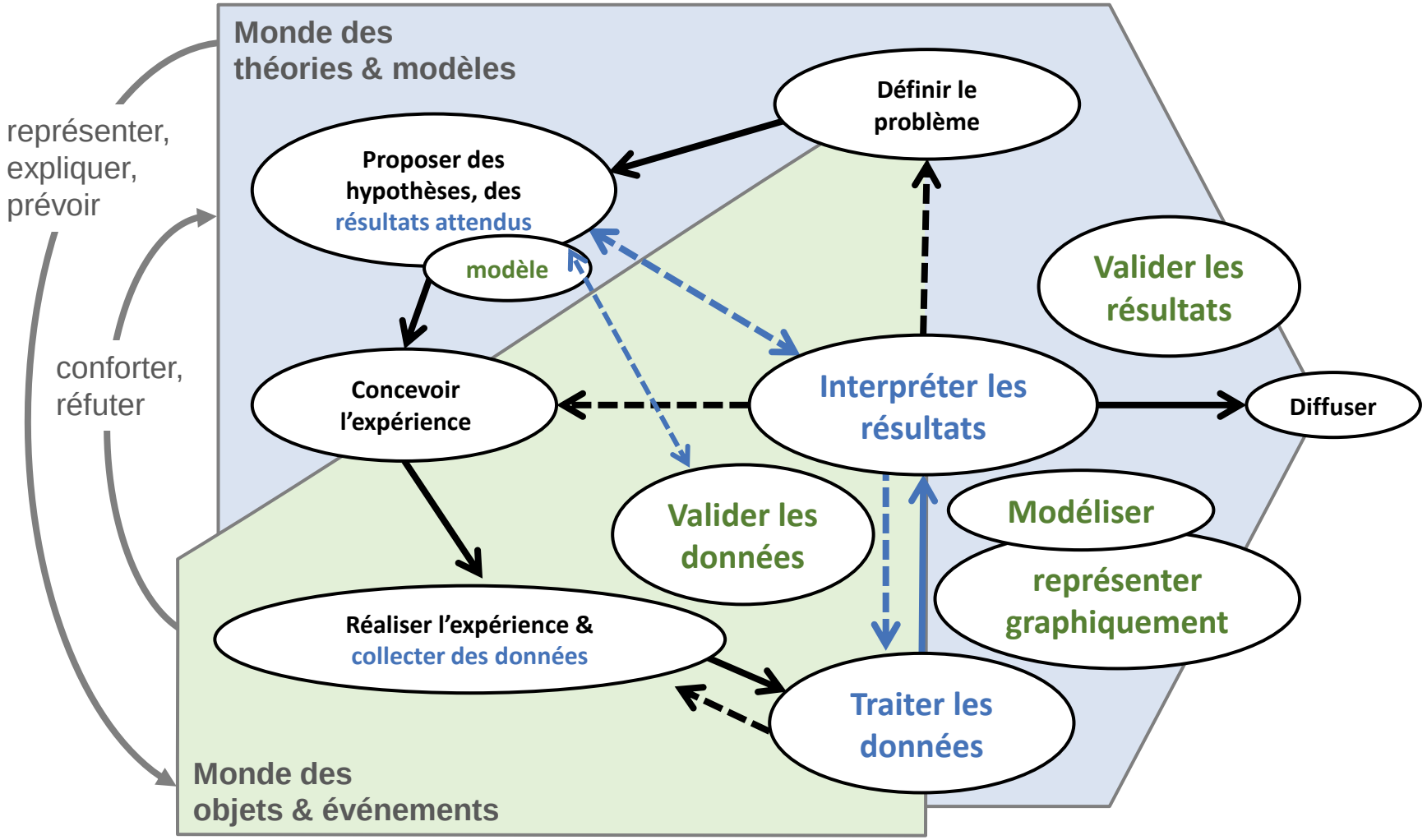
MINISTÈRE
DE L'ENSEIGNEMENT
SUPÉRIEUR,
DE LA RECHERCHE
ET DE L'INNOVATION

INVESTISSEMENTS D'AVENIR

financé par
IDEX Université Grenoble Alpes

ICÉ

Exemple - un modèle linéaire en chimie



Cycle expérimental