# **UTILISER REGRESSI EN TP DE CHIMIE**

Avertissement : ce tutoriel a été réalisé avec la version 4.5.9 (07/07/2019). Des différences minimes peuvent être observées sur une autre version. À vous de vous adapter !

Lancer le logiciel



## I. ENTRER DES DONNÉES

Soit une expérience donnant accès à la mesure de 2 grandeurs : V et pH (suivi pH-métrique d'un titrage acido-basique par exemple). On veut rentrer ces mesures dans un tableau Regressi.

#### 1) Cliquer sur Fichier $\rightarrow$ Nouveau $\rightarrow$ Clavier.

Fichie	r Edition	Fenêtre	Pages	Options	Aide			
D	Nouveau					•	Clavier	
-	<b>.</b> .				50		C 1.C	

2) Remplir alors le tableau qui apparaît avec le nom des variables.

Entrée de de	onnées au	clavier		×
Comment	aire			
Variables	expérime	ntales		
Symbole	Unité	Signification	Minimum	Maximum
V	mL		0	
рН			0	
			0	
			0	
La premièr Tri auto Chacune d Essayez de Paramètre	re variabl matique s es autres e travaille es expéri	e est la variable de tri selon la première vari variables définit par r en S.I. sans préfixe r mentaux	i et par défaut l'absc able Incrément défaut une ordonnée n k (sauf kg !)	isse du graphe tation automatique e <u>O</u> K
Symbole	Unité	Signification		X <u>A</u> bandon

Attention : → pour les noms, ne pas écrire d'espace, de lettre avec accent, plus de 8 caractères, des signes d'opération (comme / par exemple), de parenthèse.
 → entrer en premier la grandeur qui sera l'abscisse dans la suite

 $\rightarrow$  entrer en premier la grandeur qui sera l'abscisse dans la

- Astuce:  $\rightarrow$  Il est inutile d'indiquer les limites car elles sont gérées automatiquement par la suite ; il n'y a généralement pas de paramètre à indiquer non plus.
- 3) Après avoir cliqué sur OK, on est dans le menu *Grandeurs/Tableau*. Il n'y a plus qu'à entrer les valeurs de V et de pH au fur et à mesure du titrage. En appuyant sur « entrée », on change de colonne puis de ligne quand celle-ci est pleine.



Astuce:  $\rightarrow$  Pour un titrage, il faut tracer la courbe en direct : on peut afficher simultané le tableau de valeur et le graphe pH = f(V) en allant dans Fenêtre  $\rightarrow$  mosaïque Vert.



### **II. GESTION DES GRANDEURS**

Dans le menu Grandeurs/Tableau, on peut :

• ajouter/enlever des grandeurs expérimentales (une colonne) en cliquant sur :



• supprimer une ligne en utilisant le bouton droit de la souris tout en ayant le curseur sur la ligne à supprimer.

Dans le menu Grandeurs/Expressions, on peut :



• ajouter des grandeurs calculées à partir de grandeurs expérimentales en cliquant sur :

**Y**<sub>4</sub> Ajouter

L'exemple suivant montre comment définir une dérivée.

11

Incertitude

In Fourier

Sup. ligne

Création d'une grandeur		? ×
Type de grandeur Variable exp. Paramètre exp. Grandeur calc.	Symbole de la grandeur   grandeur     Unité de la grandeur	✓ <u>O</u> K ★ Abandon ? <u>A</u> ide
<ul> <li>Dérivée</li> <li>Intégrale</li> <li>Lissage</li> <li>Variable texte</li> </ul>	grandeur= d volumeA ~ Options	

 $\rightarrow$  dans ce cas, ne pas oublier de choisir **Dérivée** et de définir un **Symbole** pour la *Attention* : grandeur Fichier Edition Fenêtre Pages Options Aide

Paramètres

volum pHA

1

Trier

mL

i

🔁 🔁 🥅 Grandeurs

Y.

Ajouter

Une nouvelle colonne avec la grandeur calculée apparaît dans le menu Grandeurs/Tableau:

enlever ou modifier des grandeurs calculées en effectuant directement l'opération sur la formule dans la zone de texte, sans oublier de cliquer ensuite sur Mise à jour.

	mL		cm -					
26	36.50	5.070	0.3540	0				
deu	lrs	Parame	ètres 🛄	Tableau	Expres	sions	√α	N
ZO	ne ite	<b>Y</b> + Ajouter	<b>?</b> Syntaxe	√ Mise à jou	r Imprimer	Copier		
1154	ite	Classiques	Signal	der=D	IFF(pHA,v	olume	A)	
		Chatie						

Graphe

Sup. colonne

der -3

☐ Tableau Expressions √α MathPlayer

### **III. GESTION DU GRAPHE**

Le menu *Graphe* permet de voir, par défaut, la courbe pH = f(V) si les deux premières colonnes du tableau sont V et pH.

Quelques fonctions utiles :

- toupe et et et ermettent de zoomer ou dézoomer sur la courbe tracée ;
- X Auto : permet de revenir au réglage par défaut pour afficher une belle courbe
- Manuel : permet de gérer manuellement les extrema en abscisses et en ordonnées. On peut toujours revenir au tracé par défaut en cliquant sur l'option précédente.

La fonction ouvre une fenêtre permettant de gérer tout de qui touche aux courbes tracées :

Coordonnées du graphe	? ×
pHA=f(voli	Y Ajouter une courbe
Abscisse Zéro inclus Graduations volumeA ~ 🗌 linéaire ~	✓ <u>o</u> ĸ
Ordonnée Zéro inclus Graduations Echelle	X <u>A</u> bandon
Options de représentation de pHA(volumeA)       ✓ Ligne       ■ Noir       ✓ Segments	Aide       Image: Woins d'options
Point Cercle V Taille 2 Pas 1	Couleurs, tailles 🏢
Mécanique Optique Chimie Texte Astronomie	
Vitesse Accélération Coordonnées incorrectes	
Options générales Abscisse unique Zéros Y identiques Epaisseur des traits Courbes séparées (et non superposées) Tracé de grille Eche	elle bloquée
Polaire     Axes passant par zéro	)

Dans cette fenêtre on peut :

- choisir la variable en abscisse et celle en ordonnée ;
- choisir le nombre de courbes (ordonnées à gauche et à droite si les 2 grandeurs en ordonnée n'ont pas la même unité).

Mais aussi :

- choisir la couleur des points et des courbes ;
- choisir le style de points (croix, carré...), le style de courbe (pointillé, gras...).
- lisser une courbe qui relie un ensemble de points ...

La fonction Coutils provoque l'apparition du menu déroulant qui permet d'effectuer les actions suivantes sur le graphe :

- Texte : écriture de textes avec choix de la taille et de la couleur ;
- Ligne : dessin d'un segment continu ou non ;
- Gomme : pour effacer le texte ou la ligne ou un point de mesure ou autre ;
- Réticule : donne les coordonnées du point où est la souris sur le graphe ;
- Curseur tangente : permet d'avoir la pente en un point d'une courbe.

Pour plus de détails sur ces deux dernières fonctions, voir le tutoriel sur les titrages acido-basiques.

Astuce: → pour faire apparaître une grille sur le graphe, aller dans Options, Graphique et cocher Tracé de grille par défaut

Options						?	×
Calcul	Affich	nage	Répertoires	Imprimante			
Acquisit	tion	Préfe	érences	Graphique	<ul> <li>Image: A start of the start of</li></ul>	<u>C</u>	<u>k</u>
✓ Tracé de	×	<u>A</u> bar	ndon				
Ordra du lia	grille par	r defaut	Radi	an traduit en π/n	2	Δi	de



### IV. RÉGRESSION LINÉAIRE

Regressi permet d'ajuster une droite modèle (y = ax + b) en utilisant une méthode des moindres carrés : le programme cherche à minimiser la somme des carrés des écarts entre les points expérimentaux et la droite modèle.

1) Cliquer sur l'icône modélisation, un nouveau 2) Cliquer sur Modèles puis affine puis volet de fenêtre s'ouvre avec de nouvelles icônes.

a	1		<b>1</b> 90	
Evoressi	Modeles on du mod	Bornes	Degre	
Lypiessi	on du mou	eie		
1	🖌 Ajuster	Trace	é auto.	
1 <	< < 2.32	>	>> ±	
	2,52			
				5
				tio
Résultat	s de la mod	lélisation		H sa
				dél
				5

Ajuster. La régression est alors effectuée avec l'équation écrite dans la fenêtre en haut à gauche : on peut en déduire la pente de cette droite et son ordonnée à l'origine.

Optio	ns	М	dèles	Borne	s	D	90 egré	
Expre	essio	n d	lu modè	le				
A=a'	°c+k	0						
$\sim$	1	Ύ Α	juster	<b>⊠</b> Tr	acé	aut	<mark>0.</mark>	
b	<<	<	-0,001	63	>	>>	±	
а	<<	<	2,34		>	>>	±	
								, n
Résu	ltats	de	la modé	lisatio	n			fsat
Chi2	/(N-	p)	=0,225	i				déh
Inter	valle	e d	e confi	ance	à	95%	6	Ň
a=(2	,3 ±	0,4	4)10 <sup>-3</sup> I	m³.m	ol	1		
b=(-	2 ±2	22)	10-3					

 $\rightarrow$  par défaut, tous les points sont pris par la modélisation. On peut réduire le spectre Astuce : en déplaçant les droites verticales en pointillées. Cocher à nouveau Ajuster pour valider.

Pour réaliser des régressions linéaires sur des portions différentes d'une courbe :

- Commencer par une première régression linéaire sur une portion de la courbe ;
- Cliquer sur Bornes, Bornes et nouveau modèle, sélectionner les points à l'aide du curseur apparu (clic gauche au-delà du premier point et déplacer la souris pour inclure dans le cadre tous les points);
- Cliquer sur **OK** ou adapter la modélisation si nécessaire ;
- Cliquer sur ajuster ;
- Recommencer depuis le second point autant de fois que nécessaire.

# V. INCERTITUDES

La gestion des incertitudes est délicate sur Regressi. Le plus simple est d'enregistrer ses données sous forme d'un fichier texte .txt :

#### → Cliquer sur Fichier → Enregistrer sous

Fichier	Edition	Fenêtre	Pages Opti	ons Aide	2	2		
No	ouveau					3	Clavier	
	Er	nregistrer l	e fichier en	cours sou	IS		er	
	Fich	ier Editio	on Fenêtre	e Pages	Opti	ons	Aide	
		Nouveau	ı				•	rier
		Ouvrir					F3	
	8	Enregistr	rer				F2	
		Enregistr	rer sous					⊕ <b>`</b>
		Fusionne	er					Loupe

 $\rightarrow$  choisir d'enregistrer sous le format « Texte avec tabulation »

Les données sont enregistrées dans un fichier .txt et peuvent être exportées sous Python pour le calcul des incertitudes-type et le tracé des courbes avec les barres d'incertitudes. *Voir Fiche 3 « Régression Linéaire »* 

### CONCLUSION

Si vous maitrisez le contenu de ce document, vous savez faire l'essentiel avec Regressi en chimie. Il y a beaucoup d'autres options, à vous de les découvrir en vous entraînant !

Le logiciel est libre de droit et téléchargeable à l'adresse suivante :

http://regressi.fr/WordPress/wp-maj/default.html

### LU DANS LES RAPPORTS DU JURY...

« Le logiciel gratuit *Regressi* est le tableur retenu pour le traitement des données. Comme chaque paillasse ne possède pas de son poste informatique, il est nécessaire pour le candidat d'écrire ses tableaux de valeurs sur une feuille afin de les entrer ensuite sur tableur et de traiter ces données. Il est également possible de réaliser les courbes sur papier millimétré. [...] [Ce] logiciel est librement accessible en ligne, et [le jury] encourage les candidats à s'y familiariser en amont de l'épreuve. (Mines2023/2024) »

« La maîtrise des logiciels par les candidat·e·s est trop lacunaire et cela les pénalise. Les étapes suivantes posent souvent des difficultés : choix des axes, superposition de courbes issues d'expériences différentes, qualité des régressions ou possibilité de ne faire des régressions que sur un sous-ensemble de points, méthode des tangentes, de la dérivée, affichage simultané de la courbe et des valeurs numériques. (ENS2018 à 2023) »

« Les figures imprimées sont très souvent incomplètes (pas de titre, pas d'unités...) et le choix de l'échelle n'est pas judicieux. (CCINP2024) »