Grandeur composée Méthode Monte-Carlo

(Terminale spécialité Physique-Chimie)

QR-Code cliquable

ACADÉMIE D'AIX-MARSEILLE
Liberté Égalité Fraternité

À travers l'exploitation d'un exemple simple, le présent document a pour but d'illustrer succinctement une capacité numérique de Terminale du programme de spécialité Physique-Chimie* en mobilisant une des méthodes, très répandue, de Monte-Carlo pour évaluer l'incertitude-type composée.

Une telle simulation numérique permet d'introduire, de comprendre et de vérifier des notions pour lesquelles une approche purement analytique pourrait être difficile à s'approprier par certains élèves.

À noter que dans l'exemple utilisé, une comparaison sommaire de ces méthodes de mesures est présentée.

Bien entendu, il sera nécessaire d'inscrire son action dans une démarche pédagogique adaptée et ce support n'a pas pour vocation d'être exhaustif.

MD

Langage de programmation

Le choix a été fait sur Python (langage préconisé).

Situation déclenchante

Exemple d'un dosage acido-basique.

Vidéo d'appui

Elle présente une proposition de script en accord avec la capacité numérique.

*Capacité numérique

Simuler, à l'aide d'un langage de programmation, un processus aléatoire illustrant la détermination de la valeur d'une grandeur avec incertitudes-types composées.

https://eduscol.education.fr/1648/programmes-et-ressources-en-physique-chimie-voie-gt

https://www.bipm.org/fr/ (recherche « Monte-Carlo »)

https://www.pedagogie.ac-aix-marseille.fr/jcms/c_51569

Quelques éléments

Situation déclenchante

Lors d'un dosage acido-basique, on titre un volume $V_A = 20{,}00\ mL$ d'une solution d'acide éthanoïque par une solution d'hydroxyde de sodium de concentration $C_B = 0{,}100\ mol.L^{-1}$. Le volume équivalent est $V_E = 10{,}80\ mL$.

On donne :

$u(V_E) = 0{,}05\ mL$, $u(V_A) = 0{,}03\ mL$ et $u(C_B) = 0{,}005\ mol.L^{-1}$

L'incertitude-type $u(C_A)$ sur la concentration en acide est donnée par la relation :

$$u(C_A) = C_A \times \sqrt{\left(\frac{u(V_A)}{V_A}\right)^2 + \left(\frac{u(V_E)}{V_E}\right)^2 + \left(\frac{u(C_B)}{C_B}\right)^2}$$

Détermination de la valeur de C_A

Dans un premier temps, on va étudier la variabilité de la concentration C_A en acide éthanoïque sans pour autant utiliser la formule de composition des incertitudes donnée dans la situation précédente. Ainsi, on effectue une simulation par la méthode Monte-Carlo pour générer aléatoirement différentes données (C_B, V_E et V_A) en tenant compte de leur incertitude-type dans le but de calculer la concentration en acide C_A.

En effet, dans notre exemple, les deux réactifs ont été introduits dans des quantités stœchiométriques. À l'équivalence, ils sont totalement consommés donc (la relation entre la grandeur de sortie et les grandeurs d'entrée est) :

$$C_A \times V_A = C_B \times V_E \quad \text{d'où :} \quad C_A = \frac{C_B \times V_E}{V_A}$$

Incertitude-type : la quantification de la variabilité d'une mesure X d'une grandeur est appelée incertitude-type et notée u(X).

L'incertitude-type est donnée avec un seul chiffre significatif et est arrondie au plus proche par excès. À noter que le résultat de la moyenne doit être donné avec une précision cohérente avec l'incertitude-type.

Proposition de script

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Données
VA,u_VA = 20, 0.03
CB,u_CB = 0.100, 0.005
VE,u_VE = 10.80, 0.05

# Formule liée à la situation
def CA(CB,VE,VA):
    return (CB*VE)/VA

# N tirages aléatoires selon la loi normale
def tirage_loiNormale(X,u,N):
    return np.random.normal(X,u,N)

# Simulations
N = 100000

VA_sim = tirage_loiNormale(VA,u_VA,N)
CB_sim = tirage_loiNormale(CB,u_CB ,N)
VE_sim = tirage_loiNormale(VE,u_VE,N)
CA_sim = CA(CB_sim,VE_sim,VA_sim)

# Calculs et affichages
moy = np.mean(CA_sim)
ecartType = np.std(CA_sim,ddof=1)

plt.hist(CA_sim,bins='rice',edgecolor='black')
plt.title(str(N)+' simulations')
plt.xlabel('C$_{A}$ (mol$.L^{-1}$)')

print('Moyenne =',round(moy,3),'Ecart-type =',round(ecartType,3))
```

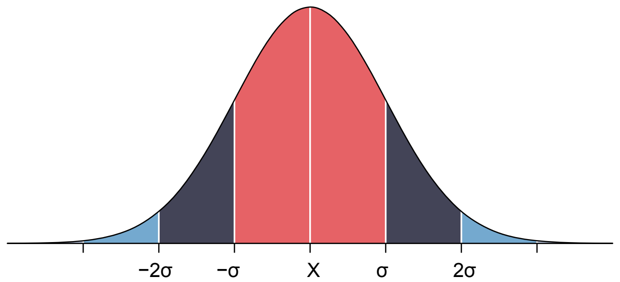
On importe les bibliothèques utiles (`Numpy` et `matplotlib`) en définissant un alias pour chacune d'entre elles

On affecte aux différentes variables les valeurs tirées de l'énoncé

Fonction Python à changer en fonction de la grandeur recherchée

On admet que l'ensemble des N valeurs possibles suit une distribution normale de valeur moyennne X et d'écart-type u

(Notations différentes pour l'écriture du script)



On effectue les différents appels de la fonction Python associée

On mobilise les méthodes disponibles de la bibliothèque `Numpy`

On affiche les résultats en tenant compte des chiffres significatifs

(À réajuster en fonction de la situation)

On trace l'histogramme de la distribution simulée

(Le graphique pourra être agrémenté !)

Exploitation possible

Résultats et calculs

En observant les résultats dans la console Python (voir vidéo), on dira qu'avec un échantillon de 100 000 valeurs générées aléatoirement par la méthode Monte-Carlo, la concentration en acide éthanoïque est de : $\overline{C_A}=0{,}054\ mol.L^{-1}$ avec une incertitude-type $u(C_A)=0{,}003\ mol.L^{-1}$.

Il est intéressant de sensibiliser les élèves sur l'influence du matériel utilisé (et du protocole choisi) sur la valeur de l'incertitude-type composée. Par exemple, en faisant varier les différentes grandeurs d'entrée, on pourra rechercher le facteur dominant permettant de diminuer l'incertitude-type composée dans un but d'améliorer la qualité du mesurage*****.

Calcul avec la méthode analytique

À partir de la relation sur l'incertitude-type $u(C_A)$ sur la concentration en acide, on effectue le calcul suivant :

$$u(C_A) = 0,54 \times \sqrt{\left(\frac{0,03}{20,00}\right)^2 + \left(\frac{0,05}{10,80}\right)^2 + \left(\frac{0,005}{0,100}\right)^2} \approx 0,027\, mol.L^{-1}$$

Soit environ $0{,}003\ mol.L^{-1}$ donc le résultat est (fort heureusement !) en accord avec celui trouvé par la méthode Monte-Carlo.

Le mot de la fin

Les deux méthodes (analytique & numérique) pour propager l'incertitude possèdent chacune leurs avantages et leurs inconvénients et il ne s'agit pas de les mettre en concurrence.

Même si la méthode Monte-Carlo pour déterminer une incertitude-type composée peut sembler lourde à mettre en œuvre suivant les cas (simples), elle demeure relativement plus riche que la méthode analytique (histogramme des valeurs prises par la grandeur, intervalle de confiance sans facteur d'élargissement, etc.).

En outre, une fois le code en poche et maîtrisé, il suffit de l'adapter à la situation donnée pour en profiter pleinement ☺.

***Mesurage** : processus consistant à obtenir expérimentalement une ou plusieurs valeurs que l'on peut raisonnablement attribuer à une grandeur.*