

DataFit

Ajustement de données expérimentales par des modèles physiques

Logiciel académique gratuit • Windows et Linux

DataFit ajuste un modèle physique à des données mesurées et dit jusqu'où chaque valeur ajustée est fiable. Environ quatre-vingt-dix modèles, de l'équation de Nernst aux titrages hôte-invité, sont prêts à l'emploi ; chacun nomme ses paramètres, ses unités et les constantes dont il a besoin.

Une courbe qui passe par les points n'est pas encore un résultat. DataFit donne, pour chaque paramètre, sa valeur et son écart-type, et pour l'ajustement entier le R^2 , le chi-carré réduit et le facteur de Student employé pour les intervalles.

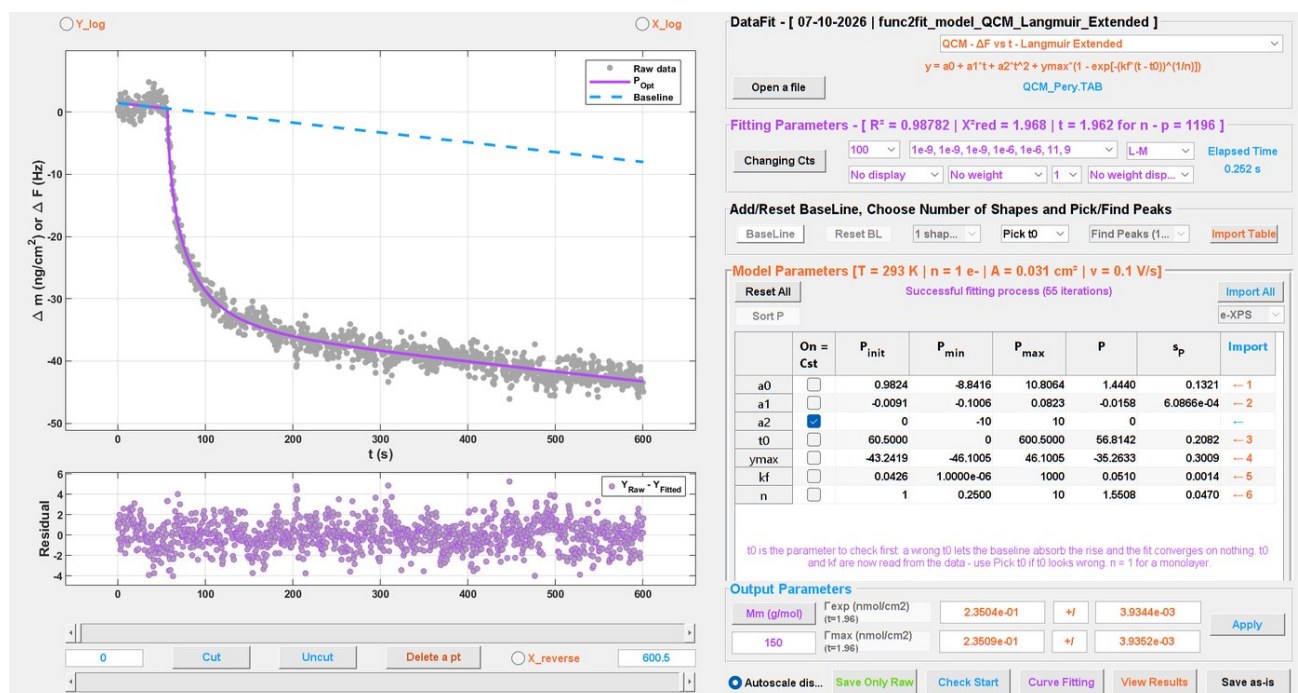


Figure 1 — La fenêtre principale après un ajustement : microbalance à quartz, modèle d'adsorption en exponentielle étirée. Données, modèle et ligne de base à gauche, résidus en dessous ; paramètres, bornes et écarts-types à droite.

En pratique

- algorithme de Levenberg-Marquardt, avec bornes ; tout paramètre peut être tenu constant
- valeurs de départ mesurées sur les données quand le modèle le permet, et contrôle du point de départ avant l'ajustement
- un paramètre arrêté contre une borne est signalé comme tel, et son incertitude n'est pas donnée comme s'il était libre
- résidus tracés sous les données, points coupés ou supprimés, fenêtre d'ajustement réglée par deux curseurs, pondération facultative par une colonne d'écarts-types

Électrochimie et surfaces

- réponses nernstiennes, voltampérométrie alternative, composantes d'impédance
- isothermes d'adsorption de Langmuir et de Frumkin
- distributions bêta cumulées, pour la dispersion des potentiels formels
- microbalance à quartz : adsorption et injection

Chimie en solution

- complexation hôte-invité : courbes de Job, stœchiométries $H_m G_n$ suivies sur l'hôte ou l'invité, constantes successives, titrages RMN
- π -stacking : nucléation-élongation en concentration ou en température, dimère, n-mère
- régressions linéaires et exponentielles

Spectres et dispositifs

- décomposition de bandes sur ligne de base polynomiale : gaussienne, lorentzienne, log-normale, Voigt, dérivées pour la RPE, formes voltampérométriques et SEC
- cellules photovoltaïques organiques (courbes J-V dans le noir et sous éclairage), transistors à effet de champ

Outils associés

- **Voltammogrammes** : fichiers Metrohm Autolab, CH Instruments et CVSim lus directement ; un outil CV qui superpose, corrige la chute ohmique, convolue et déconvolue, et trouve les pics.
- **Diffusion** : fenêtres DOSY pour espèces sphériques et cylindriques, qui donnent le rayon hydrodynamique.
- **Données venues d'ailleurs** : colonnes de nombres collées, un digitaliseur qui relève une courbe sur une figure publiée, des imports pour l'impédance et pour les courbes photovoltaïques noir/lumière, une table élémentaire XPS.
- **Résultats** : l'ajustement, ses paramètres et ses données écrits en texte et dans un classeur Excel.

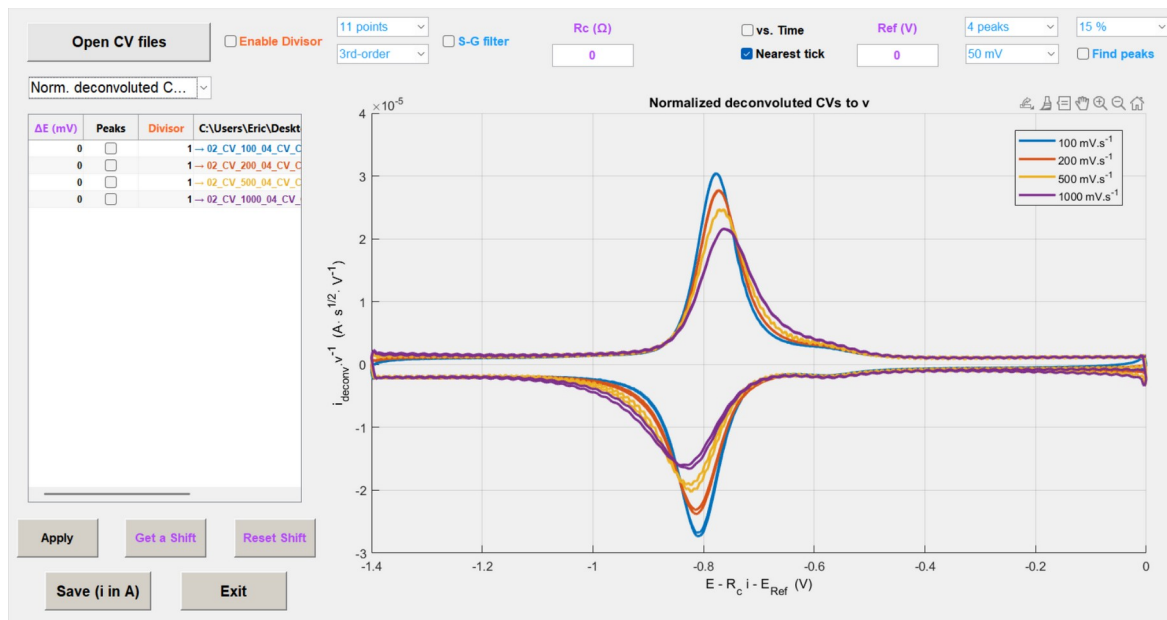


Figure 2 — L'outil CV : quatre voltammogrammes de 100 à 1000 mV/s, déconvolués et normalisés.

Contrôle

Chaque version est comparée à près de 1 900 cas enregistrés, qui couvrent les modèles, les lecteurs de fichiers et la statistique de l'ajustement. Un changement qui déplace un résultat est soit une correction, dite comme telle, soit un défaut.

Pour commencer

Un mode d'emploi en français et en anglais décrit chaque fenêtre, chaque commande, et ce que chaque modèle attend. L'interface est en anglais. Au choix d'un modèle, DataFit écrit une phrase sur ses paramètres délicats : celui qui doit rester positif, celui qu'il vaut mieux borner, celui dont la valeur de départ décide de l'ajustement.

Gratuit pour tous

DataFit est gratuit pour tous, étudiants comme chercheurs. Il est distribué en exécutables Windows et Linux 64 bits qui ne demandent que le MATLAB Runtime, gratuit : aucune licence MATLAB n'est nécessaire. Sa licence d'utilisation gratuite permet de l'installer sur autant de postes que souhaité et de le transmettre tel quel. La version de démonstration s'utilise sans formalité : tout se fait et s'affiche, rien ne s'enregistre ; la version complète est accordée, gratuitement elle aussi, aux utilisateurs inscrits avec une adresse académique.

DataFit est fourni sans **AUCUNE GARANTIE**.

Pour obtenir DataFit : écrire aux développeurs, à l'adresse echem-tools@univ-angers.fr.

Signaler un problème : Help ► Report a problem... prépare le message, que vous envoyez vous-même.

Remerciements : si DataFit contribue à une publication, à une thèse ou à un projet financé (ANR, ERC, programme européen...), les auteurs vous seraient reconnaissants de le mentionner, par exemple dans les remerciements : « Les ajustements ont été réalisés avec DataFit (O. Alévêque et E. Levillain, MOLTECH Anjou, UMR 6200 CNRS, Université d'Angers), logiciel gratuit disponible sur demande à echem-tools@univ-angers.fr. »

Olivier Alévêque et Eric Levillain — MOLTECH Anjou, UMR 6200 CNRS, Université d'Angers