

## Régression linéaire avec la calculatrice TI-Nspire

Utilisons la calculatrice TI-Nspire pour vérifier par régression linéaire la loi d'Arrhénius et déterminer la valeur de l'énergie d'activation d'une réaction dont on donne la valeur de la constante de vitesse à différentes températures  $\theta$ .

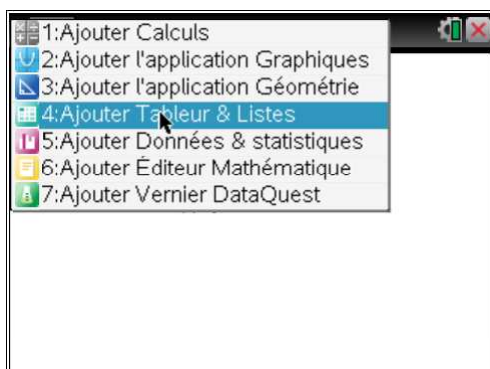
La forme linéarisée de la loi d'Arrhénius  $k = A \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{R \cdot T}\right)$  est  $\ln(k) = \ln(A) - \frac{E_A}{R \cdot T}$ .

Le tableau de valeur utilisé est le suivant :

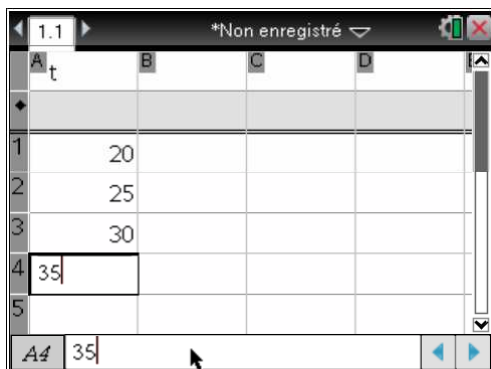
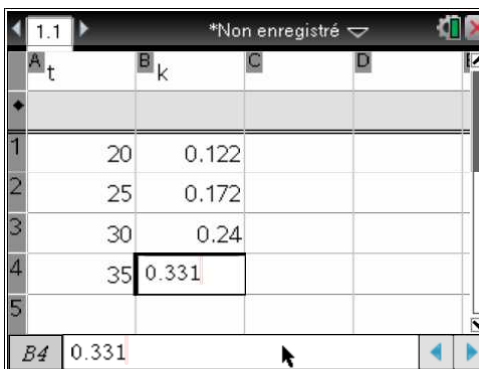
$\theta / ^\circ\text{C}$	$k / \text{s}^{-1}$
20	0,122
25	0,172
30	0,240
35	0,331

### Première étape : Entrée des valeurs de $\theta / ^\circ\text{C}$ et de $k / \text{s}^{-1}$

Ouvrons l'application "Tableur & Listes" :



Commençons par entrer les valeurs du tableau dans deux colonnes qu'on nommera t et k.

A screenshot of the TI-Nspire Table & Lists application. The table has columns labeled A, B, C, and D. Column A is labeled 't'. The values 20, 25, 30, and 35 are entered in rows 1, 2, 3, and 4 of column A. The status bar at the bottom shows 'A4 35'.A screenshot of the TI-Nspire Table & Lists application. The table has columns labeled A, B, C, and D. Column A is labeled 't' and column B is labeled 'k'. The values 0.122, 0.172, 0.24, and 0.331 are entered in rows 1, 2, 3, and 4 of column B. The status bar at the bottom shows 'B4 0.331'.

**Deuxième étape : Calcul automatique des valeurs de 1/T avec T en K et ln(k)**

Au lieu de calculer  $\frac{1}{T}$  et  $\ln(k)$  pour chaque ligne du tableau, on va faire les calculs pour toutes les lignes en même temps.

La 3<sup>ème</sup> colonne va contenir toutes les valeurs de  $\frac{1}{T}$ .

Déplacer le curseur sur l'entête de la 3<sup>ème</sup> colonne et la nommer x.

Dans la case au-dessous, taper " $=1/(t+273)$ " puis taper [ENTER].

	t	k	x
1			$=1/(t+273)$
2	20		0.122
3	25		0.172
4	30		0.24
5	35		0.331

Formula bar:  $x=1/(t+273)$

Un conflit est détecté. Sélectionner "Référence de variable".

Conflit détecté  
 $=1/(t+273)$ .  
t : Colonne ou Variable ?  
Référence de variable  
OK Annuler

De même, la 4<sup>ème</sup> colonne va contenir toutes les valeurs de  $\ln(k)$ .

Déplacer le curseur sur l'entête de la 4<sup>ème</sup> colonne et la nommer y.

Dans la case au-dessous, taper " $=\ln(k)$ " puis taper [ENTER]. Un conflit est à nouveau détecté. k représente la variable. Sélectionner "Référence de variable".

Conflit détecté  
 $=\ln(k)$ .  
k : Colonne ou Variable ?  
Référence de variable  
OK Annuler

	t	k	x	y
1			$=1/(t+273)$	$=\ln(k)$
2	20		0.122	-2.10373
3	25		0.172	-1.76026
4	30		0.24	-1.42712
5	35		0.331	-1.10564

Formula bar:  $D1 = -2.1037342342489$

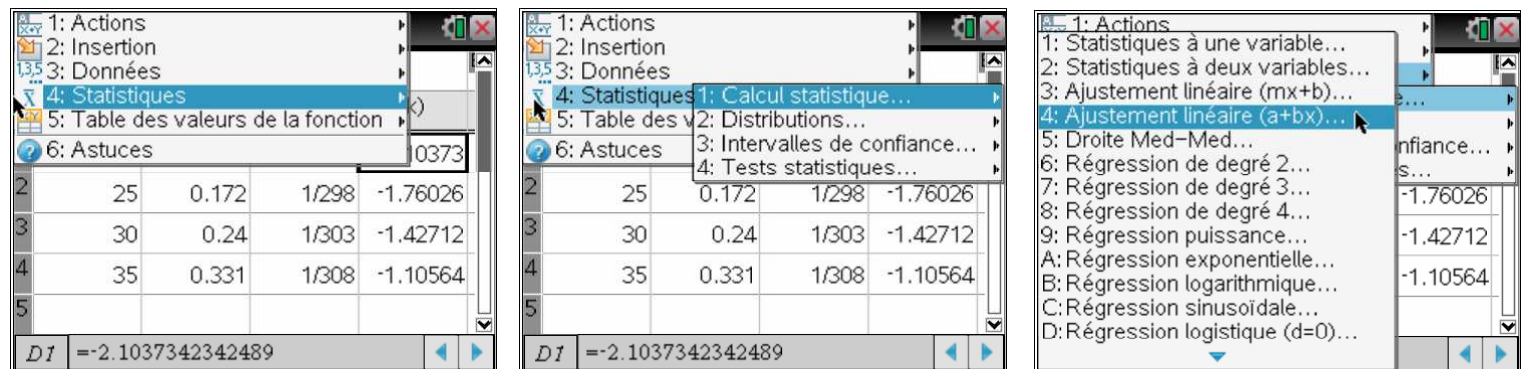
Les colonnes 1 à 4 correspondent au tableau ci-dessous :

$\theta / ^\circ\text{C}$	$k / \text{s}^{-1}$	$\frac{1}{T} / \text{K}^{-1}$	$\ln(k)$
t	k	x	y
20	0,122	0,003413	-2,104
25	0,172	0,003356	-1,760
30	0,240	0,003300	-1,427
35	0,331	0,003247	-1,106

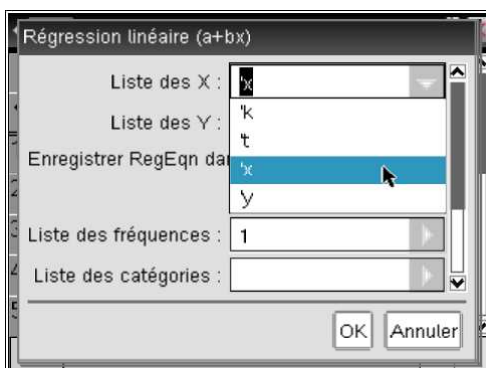
### Troisième étape : Régression linéaire

Faisons maintenant la régression linéaire ; la variable x correspond aux différentes valeurs de  $\frac{1}{T}$  (donc de la 3<sup>ème</sup> colonne) ; la variable y correspond aux différentes valeurs de  $\ln(k)$  (donc de la 4<sup>ème</sup> colonne).

Taper sur [MENU] puis sélectionner [4: STATISTIQUES] puis [1: Calcul statistique...] puis [4: Ajustement linéaire (a+bx)...].



Sélectionner alors "x " pour la liste des x et "y" pour la liste des y.



Laisser "1" à la liste des fréquences.

C	D	E	F
x	y		
=1/(t+273)=ln(k)			=LinRegB
1/298	-1.76026	RegEqn	a+b*x
1/303	-1.42712	a	18.3942
1/308	-1.10564	b	-6005.95
		r <sup>2</sup>	1.
		r	-1.

F1 = "Régression linéaire (a+bx)"

Les résultats de la régression linéaire s'affichent. La valeur du coefficient de corrélation ( $|r| \approx 1$ ) montre que les points sont alignés et donc que la loi d'Arrhénius est vérifiée.

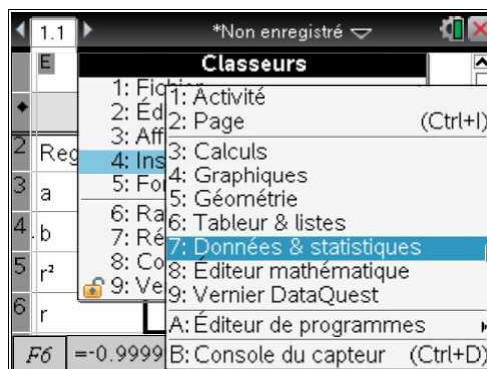
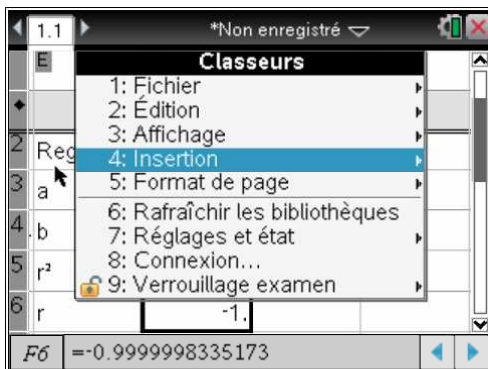
La valeur de  $a = -6006 = \frac{-E_A}{R}$  permet de calculer  $E_A = -a.R = 49,9 \text{ kJ.mol}^{-1}$ .

La valeur de  $b = 18,39 = \ln(A)$  permet de calculer la valeur du facteur préexponentiel :  $A = 9,74.10^7 \text{ s}^{-1}$ .

### Quatrième étape : Tracé

Si on souhaite tracer ensuite la droite correspondante, insérons une page "Données & statistiques".

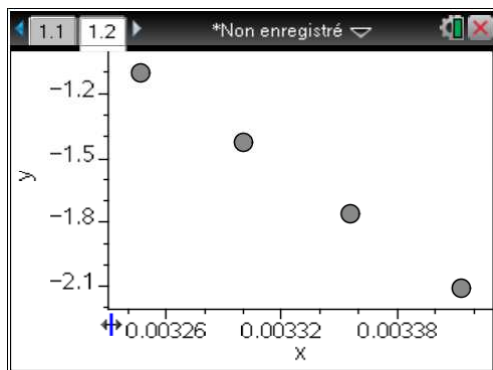
Taper sur [MENU] puis sur [4: Insertion] puis sur [7: Données & statistiques].



Déplacer ensuite le curseur sur l'axe des abscisses et à l'apparition du message, cliquer et appuyer sur [ENTREE] pour sélectionner la variable "x".

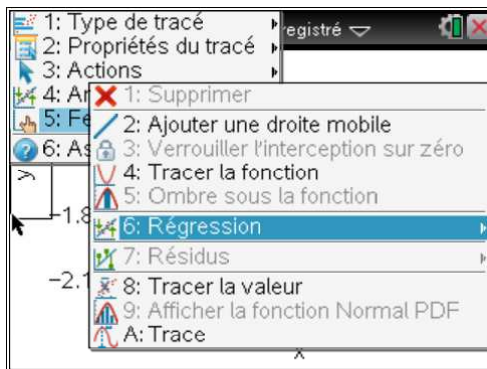
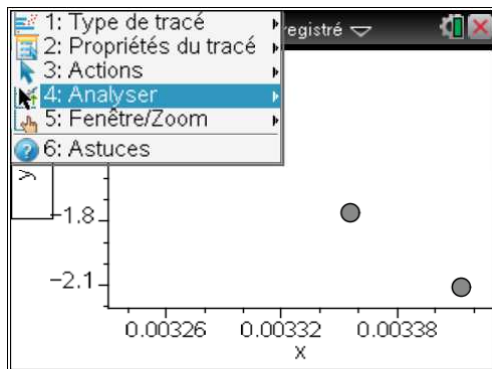


De même, déplacer ensuite le curseur sur l'axe des ordonnées et à l'apparition du message, cliquer et appuyer sur [ENTREE] pour sélectionner la variable "y".

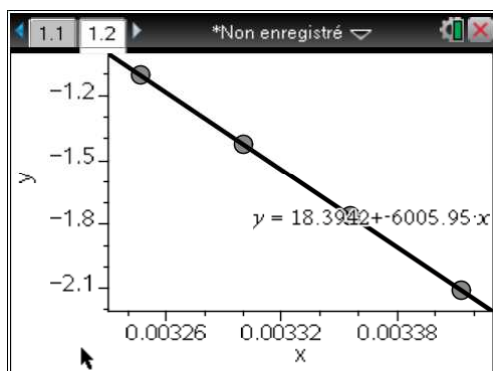


Le nuage de points est alors représenté.

Pour afficher la droite de régression, taper sur [MENU] puis sur [4: Analyser] puis sur [6: Régression] puis sur [2: Afficher droite (a+bx)].



La droite de régression s'affiche.



Ici, tous les points sont sur la droite ; il n'y a donc aucun point aberrant.

**esc** Ferme les menus et les boîtes de dialogue affichés à l'écran. Interrompt également les calculs en cours.

**Scratchpad** Ouvre l'application Scratchpad pour effectuer des calculs rapides et des représentations graphiques.

**tab** Déplace le curseur dans le champ de saisie suivant.

**ctrl** Permet d'accéder à la fonction ou au caractère affiché au-dessus de chaque touche. Cette touche active également les raccourcis lorsqu'elle est combinée à d'autres touches.

**shift** Permet de saisir en majuscule la prochaine lettre que vous tapez.

Utilisez le **pavé tactile TI-Nspire™** comme vous le feriez avec celui d'un ordinateur portable. Vous pouvez également utiliser les bords extérieurs du pavé tactile pour vous déplacer vers la droite, la gauche, le haut et le bas.

**on** Allume l'unité. Lorsque l'unité est allumée, cette touche permet d'afficher l'écran d'accueil.

**doc** Ouvre le menu Classeur.

**menu** Affiche le menu de l'application ou le menu contextuel.

**del** Supprime le caractère précédent.

**var** Affiche les variables stockées.

**enter** Évalue une expression, exécute une instruction ou sélectionne une option de menu.

