

Régression linéaire avec la calculatrice GRAPH 35+

Utilisons la calculatrice GRAPH 35+ 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 θ .

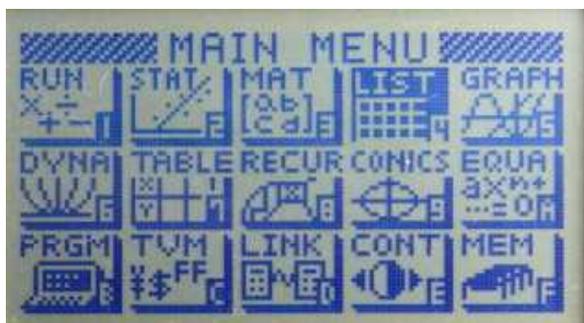
La forme linéarisée de la loi d'Arrhénius $k = A \cdot \exp \frac{-E_A}{R.T}$ est $\ln(k) = \ln(A) - \frac{E_A}{R.T}$.

Le tableau de valeur utilisé est le suivant :

$\theta / ^\circ\text{C}$	k / 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 / s^{-1}

Commençons par entrer les valeurs du tableau dans deux colonnes List 1 et List 2.
Dans le menu principal, sélectionner LIST.



Une fenêtre s'ouvre avec le contenu des différentes listes.

En déplaçant avec le curseur, entrer les valeurs dans les listes List 1 et List 2.

	List 1	List 2	List 3	List 4
1	20	0.122		
2	25	0.172		
3	30			
4	35			
5				

0.240

SRTA SRTD DEL DELA INS

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 liste List 3 va contenir toutes les valeurs de $\frac{1}{T}$.

Déplacer le curseur sur l'entête de la liste List 3 :

	List 1	List 2	List 3	List 4
1	20	0.122		
2	25	0.172		
3	30	0.24		
4	35	0.331		
5				

SRTA SRTD DEL DELP INS

Taper ensuite la formule $(L_1 + 273)^{-1}$. Pour taper List 1, taper [OPTN] puis [LIST] puis [List] et enfin 1.

	List 1	List 2	List 3	List 4
1	20	0.122		
2	25	0.172		
3	30	0.24		
4	35	0.331		
5				

(273+List 1)⁻¹
List L→M Dim Fill Seq ▸

En tapant [ENTER], la liste List 3 se remplit avec les valeurs de $\frac{1}{T}$.

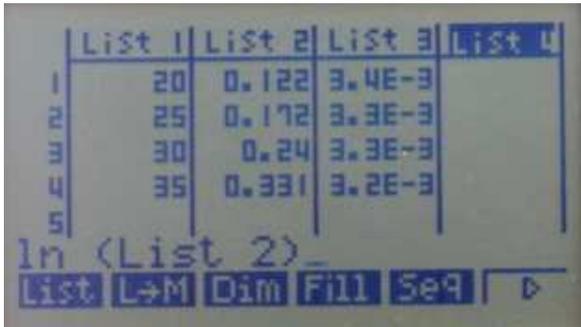
	List 1	List 2	List 3	List 4
1	20	0.122	3.4E-3	
2	25	0.172	3.3E-3	
3	30	0.24	3.3E-3	
4	35	0.331	3.2E-3	
5				

3.412969283E-03
List L→M Dim Fill Seq ▸

De même, la liste List 4 va contenir toutes les valeurs de $\ln(k)$.

Déplacer le curseur sur l'entête de la liste List 4 :

Taper ensuite la formule ln(List 2).



En tapant [ENTER], la liste List 4 se remplit avec les valeurs de ln(k).



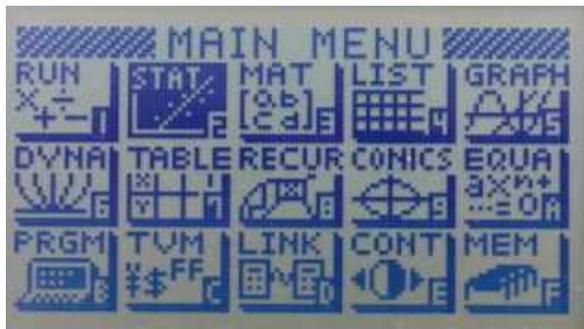
Les listes List 1 à List 4 correspondent au tableau ci-dessous :

$\theta / ^\circ\text{C}$	k / s^{-1}	$\frac{1}{T} / \text{K}^{-1}$	$\ln(k)$
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

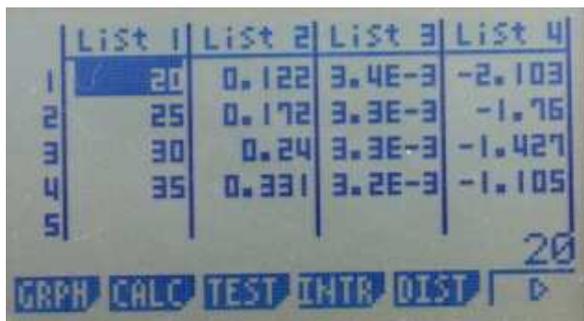
Troisième étape : Régression linéaire

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

Revenir au menu principal puis sélectionner [STAT].



Les listes réapparaissent. Taper sur [CALC] (F2).



	List 1	List 2	List 3	List 4
1	21	0.122	3.4E-3	-2.103
2	25	0.172	3.3E-3	-1.76
3	30	0.24	3.3E-3	-1.427
4	35	0.331	3.2E-3	-1.105
5				

At the bottom of the screen, the menu options GRAPH, CALC (highlighted), TEST, DISTR, and DIS1 are visible.

Pour sélectionner les colonnes, taper sur [SET] (F6).

Choisir pour 2var XList et 2var YList respectivement List 3 et List 4 en descendant le curseur et en tapant sur [List3] (F3) et [List4] (F4).

```

1Var XList :List1
1Var Freq :List2
2Var XList :List3
2Var YList :List4
2Var Freq :1

```

List1 List2 List3 List4 List5 List6

Revenir à la fenêtre précédente en tapant [EXIT].

Faire la régression en tapant [REG] (F3).

	List 1	List 2	List 3	List 4
1	20	0.122	3.4E-3	-2.103
2	25	0.172	3.3E-3	-1.76
3	30	0.24	3.3E-3	-1.427
4	35	0.331	3.2E-3	-1.105
5				

20

X Med X^2 X^3 X^4 D

Taper sur [X] (F1).

La régression linéaire se fait et les résultats s'affichent (a = pente ; b = ordonnée à l'origine ; r = coefficient de corrélation ; r^2 = carré de r).

```

LinearReg
a = -6005.9461
b = 18.3942433
r = -0.99999998
r^2 = 0.999999966
y = ax + b

```

1VAR 2VAR REG SET

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

Revenir aux listes en tapant deux fois sur [EXIT].

	List 1	List 2	List 3	List 4
1	21	0.122	3.4E-3	-2.103
2	25	0.172	3.3E-3	-1.76
3	30	0.24	3.3E-3	-1.427
4	35	0.331	3.2E-3	-1.105

20

GRPH CALC TEST DISTR

Taper [GRPH] (F1).

Pour sélectionner les colonnes, taper sur [SET] (F6).

	List 1	List 2	List 3	List 4
1	21	0.122	3.4E-3	-2.103
2	25	0.172	3.3E-3	-1.76
3	30	0.24	3.3E-3	-1.427
4	35	0.331	3.2E-3	-1.105

20

GRPH1 GRPH2 GRPH3 SEL SET

En utilisant le curseur et les touches F1 à F6, sélectionner pour le type de graphe "Scatter" et choisir pour XList et YList respectivement List 3 et List 4.

StatGraph1

Graph Type : Scatter

XList : List3

YList : List4

Frequency : 1

Mark Type : .

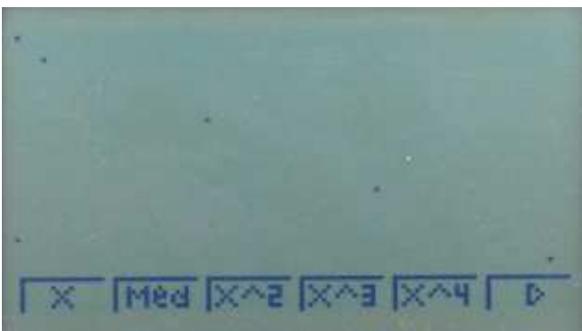
List1 List2 List3 List4 List5 List6

Revenir à la fenêtre précédente en tapant [EXIT].

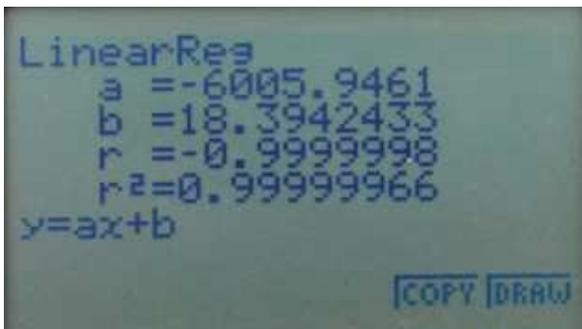
	List 1	List 2	List 3	List 4
1	20	0.122	3.4E-3	-2.103
2	25	0.172	3.3E-3	-1.76
3	30	0.24	3.3E-3	-1.427
4	35	0.331	3.2E-3	-1.105

20
GPH1 GPH2 GPH3 SEL SET

Tracer le graphe en tapant [GPH1].

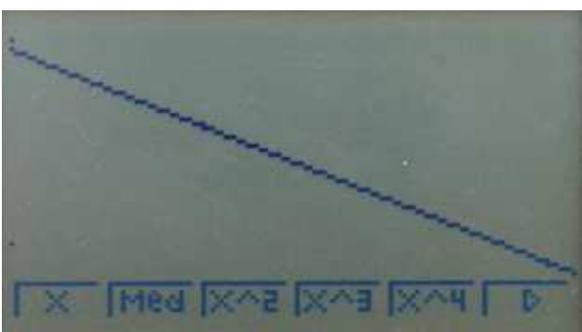


Pour y ajouter la droite de régression, sélectionner [X] (F1). Les résultats de la régression s'affichent.



Taper sur [DRAW] (F6)

Les points apparaissent avec la droite.



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

