

Régression linéaire avec la calculatrice TI-82, TI-83 ou TI-84

Utilisons la calculatrice TI-82, TI-83 ou TI-84 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 L_1 et L_2 .

Taper [STAT] puis 1 pour sélectionner **1:Edite**.

```
20000 CALC TESTS
1:Edite...
2:TriCroic(
3:TriDécroic(
4:EffListe
5>ListesDéfaut
```

Taper [ENTER]. Une fenêtre s'ouvre avec le contenu des différentes listes.

En déplaçant avec le curseur, entrer les valeurs dans les listes L_1 et L_2 .

```
L1      |L2      |L3      |Z
-----|-----|-----|
20.0E0  |122E-3  |         |
25.0E0  |172E-3  |         |
30.0E0  |240E-3  |         |
35.0E0  |331E-3  |         |
-----|-----|         |
L2(4) = .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 liste L_3 va contenir toutes les valeurs de $\frac{1}{T}$.

Déplacer le curseur sur l'entête de la liste L_3 :

L1	L2	L3	3
20.0E0	122E-3	-----	
25.0E0	172E-3		
30.0E0	240E-3		
35.0E0	331E-3		
-----	-----		

$L_3 = (L_1 + 273)^{-1}$

Taper ensuite la formule $(L_1 + 273)^{-1}$. Pour taper L_1 , taper [2ND] puis [1].

En tapant [ENTER], la liste L_3 se remplit avec les valeurs de $\frac{1}{T}$.

L1	L2	L3	3
20.0E0	122E-3	8.19E-3	
25.0E0	172E-3	5.8E-3	
30.0E0	240E-3	4.17E-3	
35.0E0	331E-3	3.02E-3	
-----	-----	-----	

$L_3(1) = .0034129692...$

De même, la liste L_4 va contenir toutes les valeurs de $\ln(k)$.

Déplacer le curseur sur l'entête de la liste L_4 :

L2	L3	L4	4
122E-3	3.4E-3	-----	
172E-3	3.4E-3		
240E-3	3.3E-3		
331E-3	3.2E-3		
-----	-----		

$L_4 = \ln(L_2)$

Taper ensuite la formule $\ln(L_2)$.

En tapant [ENTER], la liste L_4 se remplit avec les valeurs de $\ln(k)$.

L2	L3	L4	4
122E-3	3.4E-3	-2.47E0	
172E-3	3.4E-3	-1.8E0	
240E-3	3.3E-3	-1.4E0	
331E-3	3.2E-3	-1.1E0	
-----	-----	-----	

$L_4(1) = -2.10373423...$

Les listes L₁ à L₄ correspondant 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 L₃) ; la variable y correspond aux différentes valeurs de ln(k) (donc de L₄).

Taper [STAT].

Déplacer le curseur sur [CALC] puis taper [4] pour sélectionner **4:RegLin(ax+b)**.

```
EDIT [2] [0] TESTS
1:Stats 1-Var
2:Stats 2-Var
3:Med-Med
4:RegLin(ax+b)
5:RegQuad
6:RegCubique
7:RegQuatre
```

Taper [ENTER].

Taper L₃, L₄. (régression avec x = L₃ et y = L₄).

```
RegLin(ax+b) L3,
L4
```

Si on souhaite tracer ensuite la droite correspondante, il faut ajouter Y_i.

Par exemple, taper L₃, L₄, Y₁. (régression avec x = L₃ et y = L₄ et Y₁).

Pour accéder aux variables Y₁, Y₂, ... , taper [VARS] puis déplacer le curseur sur [Y-VARS], taper [1] pour sélectionner **1:Fonction...** et sélectionner la variable souhaitée (ex : taper [1] pour sélectionner **1:Y₁**).

```
RegLin(ax+b) L3,
L4,Y1
```

Taper [ENTER]. La régression linéaire se fait et les résultats s'affichent (a = pente ; b = ordonnée à l'origine ; r = coefficient de corrélation ; r² = carré de r).

```
RegLin
y=ax+b
a=-6.005946E3
b=18.394243E0
r²=999.9997E-3
r=-999.9998E-3
```

Si r et r^2 ne s'affichent pas, procéder de la façon suivante.

```
RegLin
y=ax+b
a=-6.005946E3
b=18.394243E0
```

Taper [2ND] puis [0] pour ouvrir le catalogue.

```
CATALOGUE      0
▶Caractères
abs(
actHor1
actMintr
affChDt(
affChHr(
affDate
```

Descendre le curseur sur **CorrelAff** (ou **DiagnosticOn** en anglais).

```
CATALOGUE      0
CoordPol
CoordRect
▶CorrelAff
CorrelNAff
cos(
▶Dec
défDate(
```

Taper [ENTER] deux fois.

```
CorrelAff      Fait
■
```

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

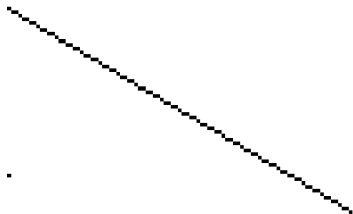
La fonction Y_1 est entrée automatiquement ; taper [Y=] pour vérifier :

```
Graph1 Graph2 Graph3
\Y1 -6005.946195
X+18.394243
\Y2=
\Y3=
\Y4=
\Y5=
\Y6=
```

Taper [ZOOM] puis [9] pour sélectionner **9:ZoomStat**.

```
ZOOM MEMOIRE
4↑ZDécimal
5:ZOrthonormal
6:ZStandard
7:ZTri9
8:ZEntier
9 ZoomStat
0:ZMinMax
```

Taper [GRAPH] pour tracer la courbe Y_1 .



Pour que les points utilisés pour la régression apparaissent sur le graphe, procéder de la façon suivante.

Taper [2ND] puis [Y=] puis [1] pour sélectionner **1.Graph1...**

```
GRAPH STATUS
1 Graph1...Aff
  ^ L3 L4 +
2 Graph2...NAff
  ^ L1 L2 ■
3 Graph3...NAff
  ^ L1 L2 .
4 ↓ GraphNAff
```

En déplaçant le curseur et en tapant sur [ENTER], sélectionner **Aff** , **L₃** pour ListeX et **L₄** pour ListeY.

```
Graph1 Graph2 Graph3
Aff NAff
Type: L1 L2 L3 L4
      H1 H2 H3 H4
ListeX:L3
ListeY:L4
Marque: [ ] + .
```

Tapier ensuite [GRAPH]. Les points apparaissent.



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

