

RÉGRESSION LINÉAIRE AVEC LA CALCULATRICE TI 89

PRINCIPE

Soit une grandeur y qui dépend d'une grandeur x suivant la relation affine : $y = ax + b$

On connaît différents points de mesure expérimentaux $(x_1, y_1), \dots, (x_i, y_i), \dots, (x_n, y_n)$.

On veut déterminer les valeurs de a et b .

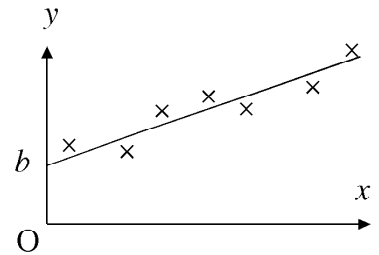
On veut aussi déterminer la valeur de y pour une valeur quelconque de x .

● 1^{ère} méthode : méthode graphique

On place les points de mesure $(x_1, y_1), \dots, (x_i, y_i), \dots, (x_n, y_n)$ dans le plan (Ox, Oy) .

On trace la droite qui passe au mieux par les points de mesure.

On en déduit graphiquement la valeur de la pente a et l'ordonnée à l'origine b .



● 2^{ème} méthode : régression linéaire à la calculatrice

- Ouvrir l'éditeur de données et de matrices, choisir **Nouveau** et dans **Type** : choisir **Données**.

- Entrer les valeurs de x dans la colonne **c1**.

- Entrer les valeurs de y dans la colonne **c2**.

Touche : **F5** Calc Type de calculs..... **RegLin**
xc1
yc2
Sauve EQReg dans..... **y1(x)**

La calculatrice affiche les valeurs de a et b , et le coefficient de corrélation.

Plus le coefficient de corrélation est proche de 1, plus les points de mesure sont alignés.

L'équation de la droite de régression linéaire est enregistrée sous le nom **y1(x)**.

Il faut toujours afficher le graphique pour vérifier que les points sont bien alignés.

Affichage du graphique : Vérifier d'être en **MODE** **Graph** **FONCTION**

Dans l'éditeur de données et de matrices : Touche : **F2** Conf Graph Touche : **F1** Choix

Type graphe..... **Nuage**
Marq **Croix**
xc1
yc2

Touche : **Y=** **F2** ZoomDonn (Zoom Données ajuste les échelles en fonction des données)

Le graphique s'affiche ; on voit les points de mesure et la droite de régression linéaire.

On peut voir si certains points sont aberrants.

* On peut calculer la valeur de y pour n'importe quelle valeur de x .

Par exemple, si on cherche la valeur de y pour $x = 5,23$, on tape dans l'écran habituel de la calculatrice : **y1(5,23)** et la valeur de y s'affiche.

* On peut aussi calculer la valeur de x pour n'importe quelle valeur de y .

Par exemple, si on cherche la valeur de x pour $y = 4,27$, on tape dans l'écran habituel de la calculatrice : **résol(y1(x) = 4,27, x)** et la valeur de x s'affiche.

EXEMPLES

* 1^{er} exemple : gaz parfait (relation entre P et T)

On a mis une mole d'un gaz parfait dans un récipient de volume constant et égal à 20 litres.

On a mesuré la pression P pour différentes températures T .

T (K)	220	240	260	280	300	320
P (bars)	0,91	1,01	1,05	1,15	1,26	1,32

En déduire la valeur de la constante R des gaz parfaits.

On sait que : $PV = RT$

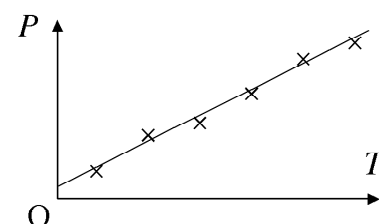
La relation entre P et T est linéaire.

- Entrer les valeurs de T dans la colonne c1.
- Entrer les valeurs de P (en pascals) dans la colonne c2.
- Faire la régression linéaire.

La calculatrice affiche : $a = 414,3$

Le coefficient de corrélation est proche de 1.

- Afficher le graphique à la calculatrice.
- Vérifier que les points sont bien alignés.



$$\text{Comme } PV = RT : P = \frac{R}{V} T \quad a = \frac{R}{V} \quad R = aV \quad \text{Rép. : } R = 8,29 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

* 2^{ème} exemple : gaz parfait (relation entre P et V)

On a mis une mole d'un gaz parfait dans un cylindre maintenu à une température constante et égale à 300 K.

On a mesuré la pression P pour différents volumes V .

V (litres)	10	15	20	25	30	35
P (bars)	2,4	1,9	1,3	0,97	0,81	0,71

En déduire la valeur de la constante R des gaz parfaits.

On sait que : $PV = RT \quad P = RT \frac{1}{V}$

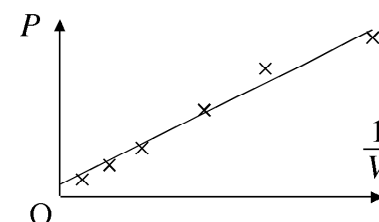
La relation entre P et $\frac{1}{V}$ est linéaire.

- Entrer les valeurs de $\frac{1}{V}$ (V en m^3) dans la colonne c1.
- Entrer les valeurs de P (en pascals) dans la colonne c2.
- Faire la régression linéaire.

La calculatrice affiche : $a = 2479,8$

Le coefficient de corrélation est proche de 1.

- Afficher le graphique à la calculatrice.
- Vérifier que les points sont bien alignés.



$$\text{Comme } a = RT : R = \frac{a}{T} \quad \text{Rép. : } R = 8,27 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

* 3^{ème} exemple : cinétique chimique

Soit la réaction : $\text{Fe}^{2+}(\text{aq}) + \text{Co}^{3+}(\text{aq}) \rightarrow \text{Fe}^{3+}(\text{aq}) + \text{Co}^{2+}(\text{aq})$

On mélange, à 25 °C, 100 ml d'une solution d'ions Fe^{2+} à $10^{-3} \text{ mol.l}^{-1}$ et 100 ml d'une solution d'ions Co^{3+} à $10^{-3} \text{ mol.l}^{-1}$.

On mesure la concentration $[\text{Fe}^{2+}]$ en fonction du temps t .

$t \text{ (s)}$	20	40	60	80	100	120
$10^4 [\text{Fe}^{2+}]$ (mol.l^{-1})	2,78	1,92	1,47	1,19	1,01	0,86

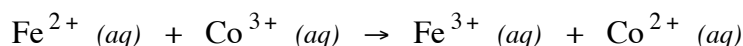
Montrer que les résultats expérimentaux sont en accord avec une cinétique d'ordre global 2.

Déterminer la valeur de la constante de vitesse k .

Déterminer la concentration $[\text{Fe}^{2+}]$ pour $t = 140 \text{ s}$, puis $t = 160 \text{ s}$.

Déterminer l'instant t pour que la concentration $[\text{Fe}^{2+}]$ soit égale à $3,5 \cdot 10^{-4} \text{ mol.l}^{-1}$.

On fait un tableau d'avancement en considérant les concentrations molaires de Fe^{2+} , Co^{3+} , Fe^{3+} et Co^{2+} .



$t = 0$	a_0	a_0	0	0
t	$a_0 - \xi$	$a_0 - \xi$	ξ	ξ

La vitesse V de la réaction est égale à : $V = -\frac{d[\text{Fe}^{2+}]}{dt} = k[\text{Fe}^{2+}]^p [\text{Co}^{3+}]^q$

Dans le cas présent : $[\text{Fe}^{2+}] = [\text{Co}^{3+}]$ $-\frac{d[\text{Fe}^{2+}]}{dt} = k[\text{Fe}^{2+}]^{p+q}$

On postule que l'ordre global de la réaction est égal à 2 : $p + q = 2$

$$-\frac{d[\text{Fe}^{2+}]}{dt} = k[\text{Fe}^{2+}]^2 \quad -[\text{Fe}^{2+}]^{-2} d[\text{Fe}^{2+}] = k dt$$

On intègre cette équation différentielle entre l'instant initial $t = 0$ et un instant t quelconque :

$$\frac{1}{[\text{Fe}^{2+}]_t} - \frac{1}{[\text{Fe}^{2+}]_{t=0}} = k t$$

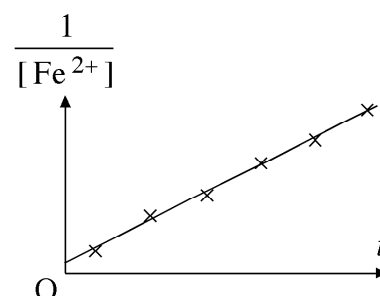
$$\frac{1}{[\text{Fe}^{2+}]_t} = k t + \frac{1}{[\text{Fe}^{2+}]_{t=0}}$$

La relation entre $1/[\text{Fe}^{2+}]$ et t est affine.

- Entrer les valeurs de t dans la colonne c1.
- Entrer les valeurs de $1/[\text{Fe}^{2+}]$ dans la colonne c2.
- Faire la régression linéaire.

La calculatrice affiche : $a = 79,76$ et : $b = 2007$

Le coefficient de corrélation est proche de 1.



- Afficher le graphique à la calculatrice.
- Vérifier que les points sont bien alignés.

La loi des vitesses est donc vérifiée et l'ordre global de la réaction est bien égal à 2.

Comme $a = k$: $k = 79,76 \text{ l} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

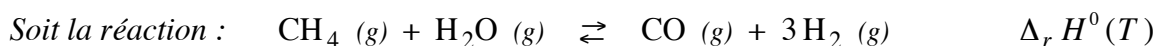
- Taper dans l'écran habituel de la calculatrice : $y1(140)$ et $y1(160)$

Donc : $[\text{Fe}^{2+}]_{t=140\text{s}} = 7,59 \cdot 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$ $[\text{Fe}^{2+}]_{t=160\text{s}} = 6,77 \cdot 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$

- Taper dans l'écran habituel de la calculatrice : $\text{résol}(y1(x) = 1/3,5 \cdot 10^{-4}, x)$

Donc : $t = 10,6 \text{ s}$

* 3^{ème} exemple : conversion du méthane



On a mesuré la constante d'équilibre K^0 pour différentes températures T .

$T \text{ (K)}$	700	800	900	1000	1100
K^0	0,0008	0,03	0,77	12,2	120

En supposant que $\Delta_r H^0(T)$ ne dépend pas de la température, déterminer $\Delta_r H^0$ et la température d'inversion.

La relation de Van t'Hoff donne : $\frac{d}{dT} (\ln K^0(T)) = \frac{\Delta_r H^0(T)}{RT^2}$

Comme $\Delta_r H^0(T)$ est constante, on intègre la relation de Van t'Hoff entre les températures T_0 et T :

$$\ln K^0(T) - \ln K^0(T_0) = \frac{\Delta_r H^0}{R} \left(-\frac{1}{T} + \frac{1}{T_0} \right)$$

$$\ln K^0(T) = -\frac{\Delta_r H^0}{R} \frac{1}{T} + \left(\frac{\Delta_r H^0}{R} \frac{1}{T_0} + \ln K^0(T_0) \right)$$

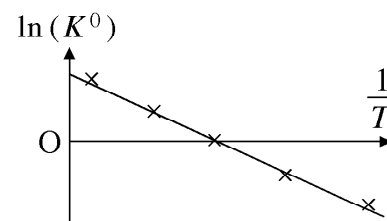
La relation entre $\ln K^0(T)$ et $\frac{1}{T}$ est affine.

- Entrer les valeurs de $\frac{1}{T}$ dans la colonne c1.
- Entrer les valeurs de $\ln K^0(T)$ dans la colonne c2.
- Faire la régression linéaire.

La calculatrice affiche : $a = -23015$ et : $b = 25,51$

Le coefficient de corrélation est proche de 1.

- Afficher le graphique à la calculatrice.
- Vérifier que les points sont bien alignés.



Comme $a = -\frac{\Delta_r H^0}{R}$: $\Delta_r H^0 = -aR$ $\Delta_r H^0 = 191,3 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

- Déterminer la température d'inversion T_{inv} : $K^0(T_{inv}) = 1$ $\ln K^0(T_{inv}) = 0$

Donc : $T_{inv} = 902 \text{ K}$