

## 『反応速度』の演習 のメモ

最小二乗法による近似直線は、以下のように計算できる。結果だけ示すが、表計算ソフトや関数電卓の上でもできるので、ぜひ慣れておこう。導出は「基礎科学実験 A」（電気通信大学編）のテキストにあるほか、<http://homepage3.nifty.com/gakuyu/suti/least/least1.pdf> などにもある。

$$y = ax + b; \quad a = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad (= \frac{\sum (x_i - x_{avg})(y_i - y_{avg})}{\sum (x_i - x_{avg})^2})$$
$$b = \frac{\sum y_i - a \sum x_i}{n} \quad (= y_{avg} - ax_{avg})$$

(以下は) 「無機化学演習」小倉興太郎著(丸善)からの出題である。6.3 と 6.4 については解答編にあるやり方は推奨しない。必ず最小二乗法で解答すること。プロットも描いてみることを。

CASIO の fx-991ES を例にとる。

- (1) MODE 続いて、3:STAT を選ぶ。
- (2) 次の画面で 2:A+BX を選ぶ。
- (3) 次の画面で表の x、y データを入力する。入力キーは「=」である。カーソルで入力場所を選ぶ。
- (4) データセット入力が終われば、いったん、「AC」で外に出る(表データは消えない)。
- (5) SHIFT 続いて STAT (テンキーの 1) を押す。
- (6) 7:Reg を選ぶ。
- (7) 次の画面で 1:A (または 2:B) を選ぶ。
- (8) A (または B) が表示されるので、「=」を押すことにより、回答が得られる。
- (9) 外に出るには「AC」、ただし表データは消えない。入力のやり直しや、関数型の再選択などもできる。他のパラメーターたとえば平均とか自乗平均とか標準偏差なども表示することができる。
- (10) 表データのクリアは、(1)に戻ればよい。

エクセルを用いる場合

- (1) A 列、B 列にデータを入力したら、メニューから「挿入→グラフ→散布図」でグラフを作成する。
- (2) グラフをアクティブにしてメニューから「グラフ→近似曲線の追加→線形近似」で直線を得る。
- (3) 直線をダブルクリックして、「近似曲線の書式設定→オプション」に入り、「グラフに数式を表示する」、「グラフに R-2 乗値を表示する」、をチェックし、OK する。
- (4)  $y = \text{〇〇}x + \text{□□}$  のような表示がグラフに重ね書きされる。この表示桁数に不満があるときは、これをダブルクリックして、「データラベルの書式設定→表示形式→分類: 数値 (もしくはユーザー定義)」を選び、小数点以下の桁数に適宜数値を入れる。

【発展】最適パラメーター(傾斜、切片など)にも統計的エラーバーを付けることもできる。いずれのプラットフォームであっても、近似曲線(直線)はどのような計算方式により得られたものであるのかを(報告書を書く前に、報告の内容に責任を持つ為に)知っておく必要があるだろう。