附錄 繪圖及製作回歸線

進行化學研究時,所得到的測量值常需要運用作圖法,找出實驗數據間之相互關係。因此,本附錄即以常用的 Microsoft Excel 套裝程式,示範如何運用實驗數據來作圖,同時也利用其內建功能作出回歸線。以緩衝溶液實驗(0.017 M 醋酸/醋酸鈉)所得之數據,示範以 pH 值為縱軸,加酸鹼的滴數為橫軸作圖,並求其回歸線:

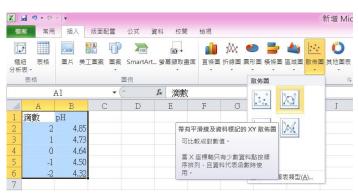
1.0 M HCl	рН	1.0 M NaOH	рН
0 滴	4.64	0 滴	4.64
1 滴	4.50	1 滴	4.73
2 滴	4.32	2 滴	4.85

(一) 數據輸入與作圖

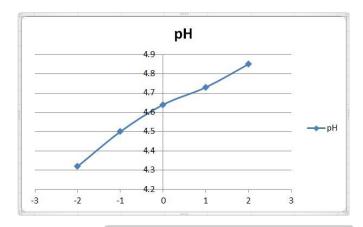
- 1. 首先開啟「程式集」的「Microsoft Excel」:
- 2. 數據輸入:於 A 欄輸入滴數(在此以加鹼的滴數為正,以加酸的滴數 為負),並於 B 欄輸入實驗測得之 pH 值。
- 3. 作圖:數據輸入後,用滑鼠將所有數據含座標軸名稱全部反白:

1	А	В	С
1	滴數	рН	
2	2	4.85	
3	1	4.73 4.64 4.50	
4	0	4.64	
5	-1	4.50	
6	-2	4.32	
7			

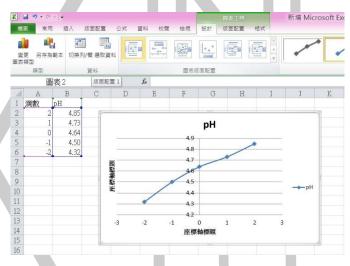
4. 點選「插入」中「散佈圖」快捷鈕中「帶有平滑線的 XY 散佈圖」:



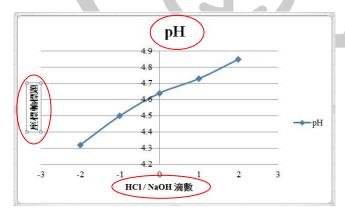
5. 出現以曲線連接各點之散佈圖:



6. 此時工具列上方會出現「設計」,點選「設計」中「版面配置」快捷鈕, 圖上出現「橫座標軸標題」及「縱座標軸標題」:



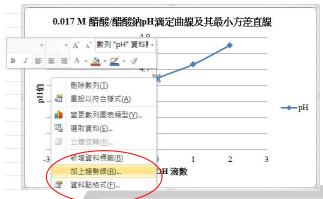
7. 以滑鼠游標 k 點選圖表中的「圖表標題」、「座標軸標題」分別輸入 其說明:



此時利用 Microsoft Excel 的基本繪圖即已完成。你可以將圖表單獨或 與數據一起列印出來。

(二) 製作回歸線

1. 加趨勢線:接續上面的作圖,以滑鼠游標 总 點選剛剛畫出來的曲線, 並按滑鼠的右鍵,出現對話窗,點選「加上趨勢線」:

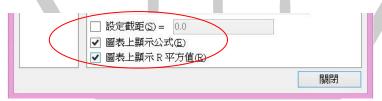


出現如下的對話窗,

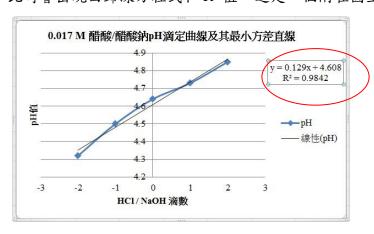
2. 選擇分析類型:點選「線性」

趨勢線格式 ?				
超勢線選項 線條色彩 線條樣式 陰影 光量和柔邊	超勢線選項 超勢預測/迴歸分析類型 ○ 指數(X) ○ 線性(L)			
	○ 多項式(P) 順序(D): 2 章			
	② 乘幕(W) ② 参動平均(M) 週期(E): 2 ◆			

3. 回歸線方程式:勾選「圖表上顯示公式」及「圖表上顯示 R 平方值」,



此時會出現回歸線方程式和 R²值,這是一個附在圖上的文字方塊,



所求得回歸線即為圖中黑線(—— 線性(pH)),其方程式即為 $y = 0.129x + 4.608 \circ R^2 則表示此回歸線和原本實驗數據曲線契合程度,數值越接近 <math>1$ 表示越契合。

(三)多條曲線

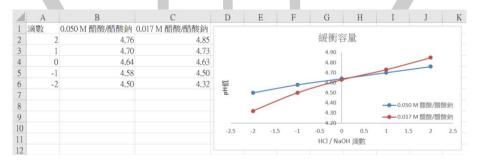
以緩衝溶液實驗(0.050 M、0.017 M 醋酸/醋酸鈉)所得之數據,示範以 pH 值為縱軸,加酸鹼的滴數為橫軸作圖,將多條曲線合併於一個圖表上:

1.0 M HCl	0.050 M 醋酸/ 醋酸鈉	0.017 M 醋酸/ 醋酸鈉	1.0 M NaOH	0.050 M 醋酸/ 醋酸鈉	0.017 M 醋酸/ 醋酸鈉
0 滴	4.64	4.63	0 滴	4.64	4.63
1 滴	4.58	4.50	1 滴	4.70	4.73
2 滴	4.50	4.32	2 滴	4.76	4.85

1. 數據輸入後,選取所有數據含座標軸名稱:

		А	В	С	D
4	1	滴數	0.050 M 醋酸/醋酸鈉	0.017 M 醋酸/醋酸鈉	
	2	2	4.76	4.85	
	3	1	4.70	4.73	
	4	0	4.64	4.63	
N	5	-1	4.58	4.50	
	6	-2	4.50	4.32	
	7				

2. 以「帶有平滑線的 XY 散佈圖」繪製圖表後,出現 2 條曲線:



3. 再分別加上趨勢線,即可完成作圖:

