

## Regresjon av absorpsjonsdata

I Uorganisk Kjemi gjorde vi et forsøk hvor vi målte absorpsjon ved en gitt bølgelengde ved hjelp av spektrofotometri på løsninger med kjent konsentrasjon og brukte målingene til å finne konsentrasjonen til en ukjent prøve. Da brukte vi en scipy-funksjon til å gjøre regresjon på dataene. Nå som jeg har lært andre måter å gjøre regresjon på, tenkte jeg det kunne være interessant å bruke det vi har lært i TMA4106, gjøre regresjonen på nytt og sammenlikne med grafen vi fikk da vi gjorde forsøket.

### Litt teori

Mange forbindelser vil ha bestemte farger når de er løst i vann. I forsøket vi gjorde brukte vi løsninger med  $\text{CuSO}_4$  som har en karakteristisk blåfarge. Fargeegenskapen kan brukes til å sende lys gjennom løsninger og måle absorpsjonen.

Sammenhengen mellom absorbans ved en bestemt bølgelengde og konsentrasjonen av det absorberende stoffet kan beskrives med Beers Lov:

$$A = \varepsilon \cdot c \cdot l$$

der  $A$  er absorbansen,  $c$  er konsentrasjonen av det absorberende stoffet,  $\varepsilon$  er en molar absorpsjonskoeffisient og  $l$  er optisk veilengde gjennom løsningen.  $\varepsilon$  og  $l$  vil være konstante når man jobber med samme bølgelengde og størrelsen på kvettene som løsningen er i ikke endres. Da vil absorbansen som funksjon av konsentrasjonen bli på formen  $y = ax + b$ , hvor  $a = \varepsilon \cdot l$ . Denne funksjonen kan brukes til å finne konsentrasjonen til en prøve med ukjent konsentrasjon.

(Brandvik et al., 2023, s. 31-35)

### Gjøre regresjon med TMA4106-kunnskaper

Jeg vil altså sette opp og løse normallikningene med verdiene vi målte, slik at jeg kan finne konstantene  $a$  og  $b$ .

Ådne Stadsvoll

Her er måleresultatene:

c [mol/L]	A
0.002	0.0953
0.004	0.2008
0.006	0.2883
0.008	0.3917
0.010	0.4807
0.012	0.5586
0.014	0.6688
0.016	0.7656
0.018	0.8433
0.020	0.9418
0.022	1.0291
0.024	1.1331

## Utrekninger

$$A^T A V = A^T Y$$

$$\text{Der } A = \begin{pmatrix} 0.002 & 1 \\ 0.004 & 1 \\ 0.006 & 1 \\ 0.008 & 1 \\ 0.010 & 1 \\ 0.012 & 1 \\ 0.014 & 1 \\ 0.016 & 1 \\ 0.018 & 1 \\ 0.020 & 1 \\ 0.022 & 1 \\ 0.024 & 1 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad Y = \begin{pmatrix} 0.0953 \\ 0.2008 \\ 0.2883 \\ 0.3917 \\ 0.4807 \\ 0.5586 \\ 0.6688 \\ 0.7656 \\ 0.8433 \\ 0.9481 \\ 1.0291 \\ 1.1331 \end{pmatrix}$$

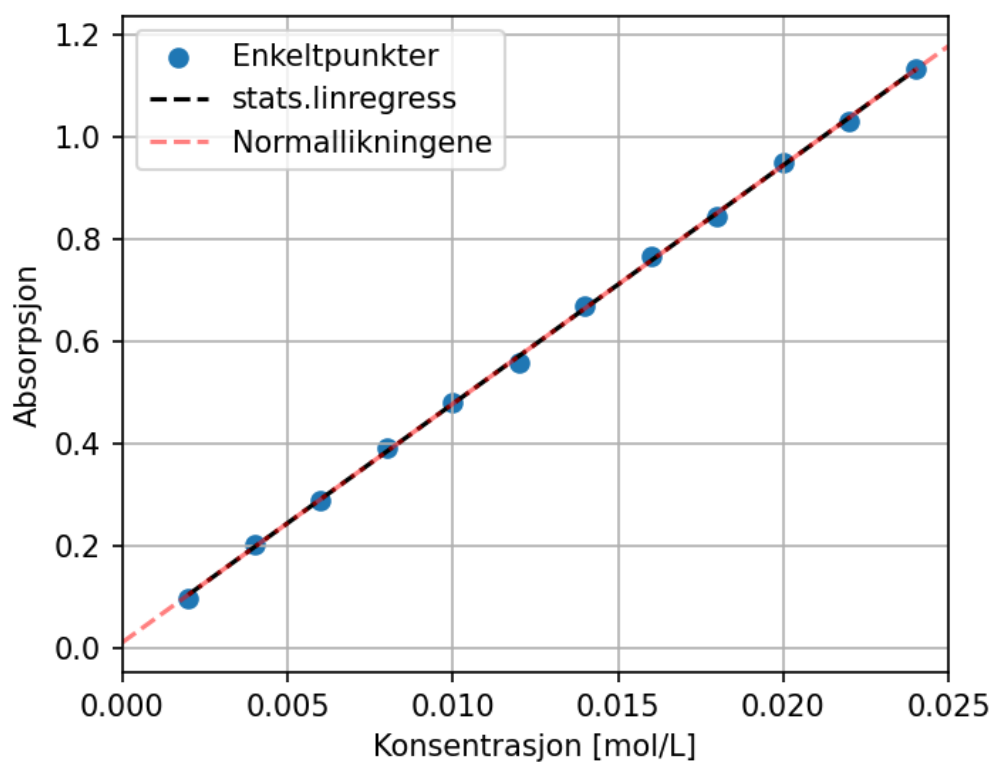
Setter inn i python og løser systemet. Får at

$$\beta_1 = 46.7$$

$$\beta_0 = 0.00985$$

Funksjonen blir da  $A(c) = 46.7c + 0.00985$

## Plot av målingene



Her har jeg plottet enkeltpunkter av de 12 målingene, funksjonen som ble funnet med scipy-funksjonen «stats.linregress» og funksjonen som jeg fikk ved å løse normallikningene. Jeg ser at resultatet da jeg løste normallikningene ble likt som regresjonen med stats.linregress.

Artig å se at det stemmer!

## Python-kode for løsning av normallikningene

```
1  import numpy as np
2
3  #Definerer A og Y matrisene ved å sette inn verdiene for konsentrasjon og absorbans
4  A = np.array([[0.002, 1],
5               [0.004, 1],
6               [0.006, 1],
7               [0.008, 1],
8               [0.010, 1],
9               [0.012, 1],
10              [0.014, 1],
11              [0.016, 1],
12              [0.018, 1],
13              [0.020, 1],
14              [0.022, 1],
15              [0.024, 1]])
16
17  Y = ([0.0953],
18       [0.2008],
19       [0.2883],
20       [0.3917],
21       [0.4807],
22       [0.5586],
23       [0.6688],
24       [0.7656],
25       [0.8433],
26       [0.9481],
27       [1.0291],
28       [1.1331],])
29
30  # Regner ut A^T*A og A^T*Y
31  ATA = np.dot(A.T, A)
32  ATy = np.dot(A.T, Y)
33
34  # Løser for V, for å finne beta_1 og beta_0
35  V = np.linalg.solve(ATA, ATy)
36
37  print(f"V(beta_1, beta_0) er:{V}")
```

## Python-kode for plottingen

```
1  import numpy as np
2  import matplotlib.pyplot as plt
3  from scipy import stats
4
5  #Tar inn verdiene for konsentrasjon og absorpsjon
6  konsentrasjon, absorpsjon = np.loadtxt('Verdier.txt', unpack=True, dtype=float, usecols=(2,3),
7  delimiter=None)
8
9  #Plotter enkeltpunkter, konsentrasjon vs. absorpsjon
10 plt.figure(figsize=(5,4), dpi=150)
11 plt.scatter(konsentrasjon, absorpsjon, label="Enkeltpunkter")
12
13 #Gjør regresjon med stats.linregress-funksjonen og plotter grafen
14 slope, intercept, r_value, p_value, std_err = stats.linregress(konsentrasjon, absorpsjon)
15 plt.plot(konsentrasjon, konsentrasjon*slope + intercept, ls='--', color='k', label="stats.linregress")
16
17 #Plotter Absorpsjonsfunksjonen med beta-verdiene som jeg fikk ved å løse normallikningene
18 beta_1 = 46.7
19 beta_0 = 0.00985
20
21 def Absorbans(c):
22     return beta_1 * c + beta_0
23
24 c_verdier = np.linspace(0, 0.025, 100)
25 A_verdier = Absorbans(c_verdier)
26
27 plt.plot(c_verdier, A_verdier, color="r", ls="--", alpha=0.5, label="Normallikningene")
28
29 plt.grid()
30 plt.xlabel("Konsentrasjon [mol/L]")
31 plt.ylabel("Absorpsjon")
32 plt.xlim(0,0.025)
33 plt.legend()
34 plt.savefig("Plot Oblig")
35 plt.show()
```

## Kilder

Brandvik, T., Einarsrud, M., Gaukås, N. H., Olsen, G. H., Skjærvø, S. L. & Storsve, A. (2023) *Laboratoriehefte: TMT4130 Uorganisk kjemi. 10. utgave*. NTNU.