MatteOblig TMA4106

Sander Mobeck Rabben og Sindre Håvik Langelandsvik

April 2025

Innhold

1 Introduksjon

Vi skal bruke lineær regresjon og finne en tilnærming til Lamberts-Beers lov. Dataene våre er anskaffet under lab i TMT4130, oppgave 4. Vi brukte spektrofotometri for å finne konsentrasjonen av kobolt i vårt produkt: $[Co(NH_3)_6]Cl_3$. Under labben brukte vi pakken scipy stats"i Python for å finne regresjonslinja, for så å lese av konsentrasjonen til den ukjente prøven, basert på den måle absorbansen til prøven. Nå vil vi forsøke å utføre regresjonsanalysen på disse dataene selv, og undersøke om scipy stats muligens bruker enkel, lineær regresjon.

1.1 Lamberts-Beers lov

$$A = \epsilon \cdot c \cdot l \tag{1}$$

Hvor A er absorbans, andel lys som slipper gjennom prøven ved en forhåndinnstilt bølgelengde (Gitt av hvilket stoff man ønsker konsentrasjonen av). ϵ er molar absorpsjonskoeffisient [$\mathrm{L\,mol^{-1}\,cm^{-1}}$]. l er optisk veilengde gjennom prøven [cm], alltid 1 cm for spektrofotometrene i TMT4130.

2 Målte verdier og betraktninger

Tabell 1: Målte verdier

Prøve:	Konsentrasjon [$\mathrm{mol\,L^{-1}}$]	Absorbans
1	0.025	0.1234
2	0.05	0.2463
3	0.075	0.3713
4	0.1	0.4971
5	0.125	0.6378
6	0.15	0.7454
Ukjent	Ukjent	0.4004

Vi vet at Beers lov er en lineær sammenheng, vi interpolerer og forutsier at vår ukjente prøve bør ha en konsentrasjon på omtrent $0.08\,\mathrm{mol\,L^{-1}}$.

3 Beregninger

Vi skal bruke formlene for β_0 og β_1 fra en enkel lineær regresjonsmodell:

$$y = \beta_1 x + \beta_0 \tag{2}$$

$$\beta_1 = \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{y} - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{y}}}{\|\mathbf{x}\|^2 - n(\bar{\mathbf{x}})^2} \tag{3}$$

$$\beta_0 = \bar{\mathbf{y}} - \beta_1\bar{\mathbf{x}} \tag{4}$$

Ved bruk av python, se: vedlegg A, får vi linja:

$$A = 5.040 \cdot c - 0.004147 \tag{5}$$

4 Forklaring av kode

I denne koden er datapunktene gitt i liste x og y hvor vi beregner x bar, y bar, x transponert y og lengden av x i en for løkke. Videre har vi da brukt formlene 3 og 4 for å beregne beta verdiene. Til slutt lagde vi en funksjon tilsvarende likning 2 og plottet denne med de gitte datapunktene. Videre snudde vi om på likningen 2 for å løse for x. Da kan vi sette in absorbansen for det ukjente prøven og finne konsentrasjonen som kom til $0.0803\,\mathrm{mol\,L^{-1}}$ som stemmer veldig godt.

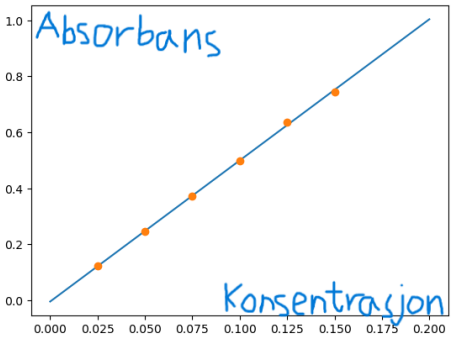
5 Konklusjon

Gjennom vår regresjonsmodell fant vi at prøven hadde konsetrasjon på $0.0803\,\mathrm{mol\,L^{-1}}$. I laboppgaven fant vi gjennom scipy stats at prøven hadde konsentrasjonen $0.0803\,\mathrm{mol\,L^{-1}}$. Her har vi rundet av tallet for ordens skyld, men regresjonsmodellen vår og scipy sin ga nøyaktig samme tall. Vi kan enkelt og greit konkludere med at scipy stats bruker en enkel lineær regresjonsmodell, basert på minste kvadraters metode. Det som derimot er litt fishy er at vi har fått $\beta_0 = -0.004$ som i praksis betyr at en prøve med 0 i konsentrasjon forsterker lyset (negativ absorbans). Hvis dette var tilfellet ville vi ha gått til en annen plass en matte oblig med denne informasjonen og blitt rike på det. Fordi da ville vi hatt energi som poppet ut av tynt vann (tynn luft ;)).

A Vedlegg

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

x = [0.025,0.05,0.075,0.1,0.125,0.15] #konsentrasjon
y = [0.1234,0.2463,0.3713,0.4971,0.6378,0.7454] #absorbsjon

prøve = 0.4004 #absorbsjon av ukjent konsentrasjon

x_mean = 0
y_mean = 0
```

```
xTy = 0
x_len = 0

for i in range(6):
    x_mean += x[i]
    y_mean += y[i]
    xTy += x[i]*y[i]
    x_len += x[i]**2

x_mean = x_mean/6
y_mean = y_mean/6
x_len = np.sqrt(x_len)


beta_1 = (xTy - 6*x_mean*y_mean)/(x_len**2-6*(x_mean**2))
beta_0 = y_mean - beta_1*x_mean

x_akse = np.linspace(0,0.2,100)

def reg(x_akse,beta_1,beta_0):
    return beta_1*x_akse + beta_0

ukjent_kons = (0.4004-beta_0)/beta_1
print(ukjent_kons)

plt.plot(x_akse,reg(x_akse,beta_1,beta_0))
plt.plot(x,y,"o")
plt.show()
```



Figur 1: plott