

Matte oblig:

Sofie Hjelle

I denne oppgaven har jeg valgt å bruke lineær regresjon for å finne et polynom som beskriver sammenhengen mellom absorbans og molaritet fra et eksperiment i uorganisk lab. Hensikten med laben var blant annet å finne konsentrasjonen til en ukjent løsning med målt absorbans på 0.610. Absorbansen i alle prøvene, både de med kjent molaritet og den med ukjent, ble målt ved bruk av et spektrofotometer.

Data fra lab:

Molaritet, mol/dm^3	Absorbans, A
0.00200	0.098
0.00400	0.194
0.00600	0.292
0.00800	0.392
0.0100	0.489
0.0120	0.564
0.0140	0.670
0.0160	0.780
0.0180	0.885
0.0200	0.964
0.0220	1.030
0.0240	1.144
Ukjent	0.610

For å finne det lineære regresjonspolynomet, bruker vi formelen for lineær regresjon:

$$y = ax + b$$

Her er y absorbansen, og x molariteten.

For å finne a og b , løser vi:

$$A^T A v = A^T y$$

Her er A en matrise som inneholder de uavhengige variablene (molariteten og en konstant verdi 1), A^T er den transporterte matrisen, v er vektoren som inneholder a og b , og y er vektoren som inneholder absorbans-verdiene.

Begynner med å sette opp matrisene A , A^T , v og y :

Se bildet på neste side.

$$A = \begin{pmatrix} 2 \cdot 10^3 & 1 \\ 4 \cdot 10^3 & 1 \\ 6 \cdot 10^3 & 1 \\ 8 \cdot 10^3 & 1 \\ 1 \cdot 10^2 & 1 \\ 1,2 \cdot 10^2 & 1 \\ 1,4 \cdot 10^2 & 1 \\ 1,6 \cdot 10^2 & 1 \\ 1,8 \cdot 10^2 & 1 \\ 2 \cdot 10^2 & 1 \\ 2,2 \cdot 10^2 & 1 \\ 2,4 \cdot 10^2 & 1 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} 0,098 \\ 0,194 \\ 0,292 \\ 0,392 \\ 0,489 \\ 0,564 \\ 0,670 \\ 0,780 \\ 0,885 \\ 0,964 \\ 1,030 \\ 1,144 \end{pmatrix}$$

$$A^T = \begin{pmatrix} 2 \cdot 10^3 & 4 \cdot 10^3 & 6 \cdot 10^3 & 8 \cdot 10^3 & 1 \cdot 10^2 & 1,2 \cdot 10^2 & 1,4 \cdot 10^2 & 1,6 \cdot 10^2 & 1,8 \cdot 10^2 & 2 \cdot 10^2 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2,2 \cdot 10^2 & 2,4 \cdot 10^2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$v = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Finne a og b i $ax+b$ ved å løse $A^T A v = A^T y$

Matrisemultiplikasjon, løsning for vektoren v , og plotting utføres i python. Bilder av scriptet og output ligger på sidene nedenfor.

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Matrisemultiplikasjon

A = np.array([[2*10**(-3), 1], [4*10**(-3), 1], [6*10**(-3), 1], [8*10**(-3), 1], [1*10**(-2), 1],
              [1.2*10**(-2), 1], [1.4*10**(-2), 1], [1.6*10**(-2), 1], [1.8*10**(-2), 1], [2*10**(-2), 1],
              [2.2*10**(-2), 1], [2.4*10**(-2), 1]])

AT = A.T

y = np.array([0.098, 0.194, 0.292, 0.392, 0.489, 0.564, 0.670, 0.780, 0.885,
              0.964, 1.030, 1.144])

# AT*A
ATxA = np.dot(AT, A)
# AT*y
ATxy = np.dot(AT, y)

print(f"ATxA:\n{ATxA}")
print(f"ATxy:\n{ATxy}")

# Løser ATAv = ATy
v = np.linalg.solve(ATxA, ATxy)
print(f"v blir \n{v}. \na = {v[0,0]}, b = {v[1,0]}")

```

```

ATxA:
[[2.60e-03 1.56e-01]
 [1.56e-01 1.20e+01]]
ATxy:
[[0.124704]
 [7.502   ]]

v blir
[[4.75139860e+01]
 [7.48484848e-03]].
a = 47.513986013986, b = 0.007484848484848815.

```

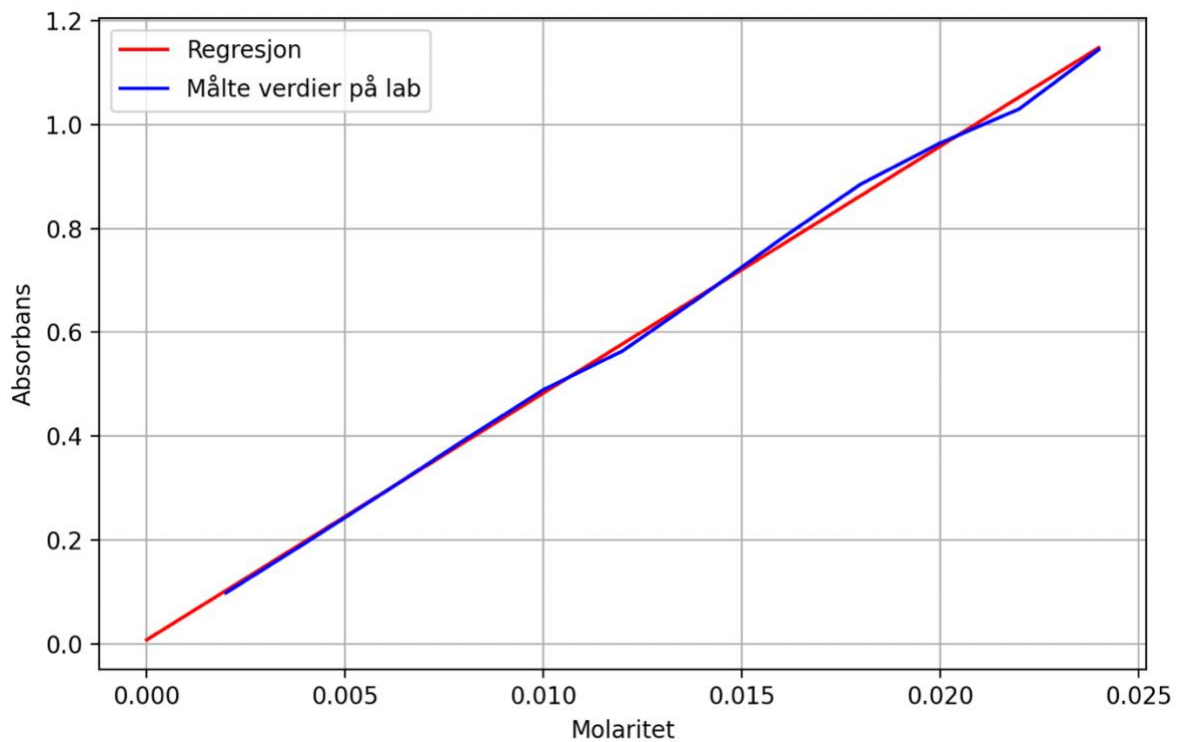
```

def reg(x):
    |   polynom = float(v[0,0])*x + float(v[1,0])
    |   return polynom

x = np.linspace(0, 2.4*10**(-2), 500)
y = reg(x)

plt.figure(figsize=(8,5))
plt.plot(x, y, color='r', label='Regresjon')
plt.plot(Molaritet, Absorbans, color='b', label='Målte verdier på lab')
plt.xlabel('Molaritet')
plt.ylabel('Absorbans')
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.show()

```



Basert på grafene ser regresjonen ut som en god tilnærming til de faktiske verdiene.

Regner ut den ukjente konsentrasjonen til løsningen med absorbans 0.610 ved bruk av regresjonen funnet i python:

$$f(x) = 47.514x + 0.00748$$

$$\begin{aligned}
 f(x) &= 47,514x + 0,00748 \\
 f(x) &= 0,610 \\
 0,610 &= 47,514x + 0,00748 \\
 \Rightarrow x &= \frac{0,610 - 0,00748}{47,514} = 0,01268
 \end{aligned}$$

Konsentrasjonen av den ukjente prøven ble 0.01268 mol/dm fra regresjonspolynomet, noe som er veldig likt det beregnede svaret på lab, 0.01247 mol/dm. Dette tyder også på at regresjonen er god tilnærming.

Det er et lite avvik mellom de to verdiene for konsentrasjonen av den ukjente prøven. Avviket kan skyldes flere faktorer, for eksempel små feil i målingene eller antakelsen som ble gjort på lab om at $b = 0$ ved kalibrert utstyr mot en blindprøve. Det ble antatt at skjæringspunktet b skulle være 0, men regresjonen ga et resultat på 0.00748, kanskje grunnet små variasjoner i utstyret.

Til verdiene i dette labforsøket virker lineær regresjon som en god modell. Lineær regresjon vil kunne være en god modell så lenge forholdet mellom molaritet og absorbans er tilnærmet lineært, noe vi kan se i tabellen på første side at de i dette tilfelle cirka er.