

5. Lineární regrese

Motivace:

Lineární regrese je metoda umožňující proložení bodů v grafu přímkou. Materiálové obory hledají závislost vlastností materiálů na parametrech jeho přípravy (závislost permitivity nebo pevnosti kompozitu na obsahu plniva). Procesní inženýry zajímá závislost viskozity při vstřikování na teplotě nebo složení materiálu. Potravináři studují třeba závislost roztékavosti sýra na obsahu tavících solí nebo pH výrobku na obsahu kyseliny citronové. Chemik Karel Balling měřil závislost hustoty na koncentraci cukerného roztoku. Pro měření v potravinářských oborech byla proto zvolena závislost koncentrace cukerného roztoku na množství přidané vody.

Požadované znalosti:

1. Měření cukroměrem.
2. Střední hodnota, směrodatná odchylka souboru, směrodatná odchylka průměru, zákon šíření chyb, test rozdílu středních hodnot.
3. Sestrojení grafu závislosti dvou veličin.
4. Použití funkce LINREGRESE.
5. Interpretace výstupů funkce LINREGRESE.

Základní pojmy:

Koncentrace:

Koncentrace obecně charakterizuje složení směsi. Koncentraci rozpuštěné látky v roztoku lze definovat několika způsoby:

Molární koncentrace (molarita) je látkové množství rozpuštěné látky v jednotce objemu roztoku.

Molální koncentrace (molalita) je látkové množství rozpuštěné látky v jednotce hmotnosti roztoku.

Hmotnostní zlomek je podíl hmotnosti rozpuštěné látky k celkové hmotnosti roztoku.

Molární zlomek je podíl látkového množství rozpuštěné látky k látkovému množství roztoku.

Cukroměr:

Cukroměr měří hmotnostní zlomek sacharózy v roztoku. Je to hustoměr pracující na principu Archimédova zákona. Náš cukroměr je cejchován v Ballingových stupních a měří v rozsahu 0 - 29 °Blg. Ballingova stupnice byla navržena pro teplotu 17,5 °C. My budeme měřit při laboratorní teplotě a takto vzniklou chybu budeme ignorovat (hustota vody při 17,5 °C a 24 °C se liší o 0,1 %). Do zkumavky cukroměru nalejeme takové množství roztoku, aby byla zkumavka naplněna přibližně po rysku. Do zkumavky vložíme cukroměr a hladina roztoku na stupnici ukáže koncentraci roztoku. Cukroměr se při měření nesmí dotýkat dna a neměl by se

Karel Balling

1805 – 1868

Karel Joseph Napoleon Balling – český chemik, profesor chemie na Pražské polytechnice. Zabýval se kvasnou chemií. 1939 sestrojil cukroměr. Navrhl Ballingovu stupnici, kde 1 °Blg odpovídá 1 hmotnostnímu procentu cukru v roztoku. Ballingova stupnice popisuje hustotu mladiny, která pak určuje stupňovitost piva. Např. 12° pivo bylo vyrobeno z mladiny, která měla 12 °Blg, tedy 120 g (12 %) cukru v kilogramu mladiny. 12° pivo obsahuje 4,5 – 5 % alkoholu. Když uvážíme, že z 1 g cukru se vytvoří 0,5 g alkoholu (a 0,5 g CO₂), tak to do sebe zapadá.

dotýkat stěn zkumavky. Ballingovy stupně h odpovídají koncentraci roztoku v procentech. Koncentraci (hmotnostní zlomek) w můžeme spočítat jako $w = h/100$.

Princip měření:

Cílem měření je zjistit počáteční koncentraci cukrového roztoku w_0 , ze závislosti koncentrace ředěného roztoku na množství přidané vody.

Označme m_v hmotnost vody v neředěném roztoku, m_c hmotnost cukru v neředěném roztoku, m hmotnost přidané vody a w hmotnostní zlomek roztoku.

Koncentrace (hmotnostní zlomek) w je pak definována vztahem

$$w = \frac{m_c}{m_v + m + m_c} \quad (1)$$

pokud rovnici převrátíme, dostaneme

$$\frac{1}{w} = \frac{m_v}{m_c} + 1 + \frac{1}{m_c} m = \frac{1}{m_c} m + \frac{1}{w_0} \quad (2)$$

což je rovnice přímky $y = ax + b$ pokud označíme

$$y = \frac{1}{w}; x = m; a = \frac{1}{m_c} \text{ a } b = \frac{m_v}{m_c} + 1 = \frac{1}{w_0}. \quad (3)$$

Počáteční koncentraci roztoku můžeme spočítat jako $w_0 = 1/b$.

Počáteční hmotnost roztoku m_p lze spočítat z počáteční koncentrace a hmotnosti cukru:

$$m_p = \frac{m_c}{w_0} = \frac{b}{a}. \quad (4)$$

Použité přístroje a pomůcky:

1. Cukroměr, laboratorní váhy.

Úkoly měření:

1. Vedoucí laboratoře vám přidělí 30 – 40 ml cukerného roztoku s koncentrací nad 30 °Blg.
2. Zjistěte vážením hmotnost cukerného roztoku.
3. Ředte roztok přidáváním 5 g (5 ml) destilované vody pro koncentraci vyšší než 13 °Blg a 10 g (10 ml) destilované vody pro koncentrace menší než 13 °Blg. Ředění provádějte tak, že obsah zkumavky cukroměru vrátíte do nádoby s roztokem, přilejete potřebné množství destilované vody, zamícháte a odlejte potřebné množství roztoku do zkumavky cukroměru pro další měření.
4. Do tabulky zapisujte do jednoho sloupce množství přidané vody m a do druhého sloupce odpovídající koncentraci roztoku w_{Blg} . Pokud je na začátku měření koncentrace vyšší než rozsah cukroměru, nechejte odpovídající políčka koncentrace prázdná.
5. Měřte, dokud koncentrace neklesne pod 8 °Blg.
6. Dopočítejte sloupec $100/w_{Blg}$ (vztahy odvozené v principu měření pracují s hmotnostním zlomkem, zatímco w_{Blg} je v procentech, proto je ta stovka ve vzorci, abychom dostali převrácenou hodnotu hmotnostního zlomku).
7. Vyneste do grafu závislost $1/w$ na m .
8. Proložte přímkou závislost $1/w$ na m . Vypočítejte hmotnost cukru m_c ze směrnice přímky a . Z absolutního členu přímky b vypočítejte počáteční koncentraci roztoku $w_0 = \frac{1}{b}$.

Vypočítejte počáteční hmotnost roztoku $m_p = \frac{b}{a}$.

Všechny veličiny samozřejmě počítáme s nejistotou. Při výpočtu dbejte na to, aby všechny hmotnosti byly ve stejných jednotkách (gramech nebo kilogramech), pak ve stejných jednotkách obdržíte i výsledky.

9. Srovnejte (otestujte) počáteční hmotnost roztoku zjištěnou přímo vážením v úkolu 2. a hmotnost zjištěnou z regrese v bodě 7. Protože hmotnost vážením je zjištěna řádově přesněji než z regrese, můžeme chybu vážení ignorovat (považovat vážení za přesné) a použít test střední hodnoty.

Seznam doporučené literatury:

- [1] Halliday D., Resnick R., Walker J.: Fyzika, VUT v Brně, Nakladatelství VUTIUM, (2000).
- [2] Meloun M., Militký J.: Statistická analýza experimentálních dat, Academia, Nakladatelství Akademie věd České republiky (2004).