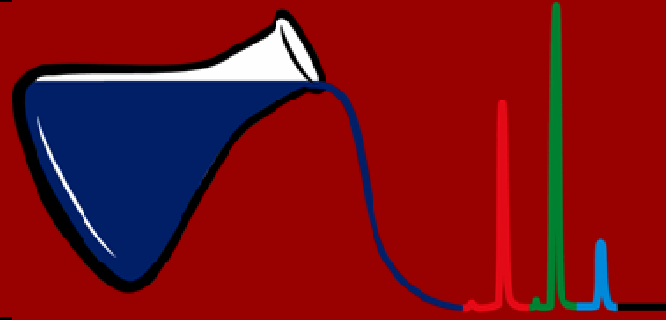


NKS Faggruppe for kjemometri

Virtuell sjokoladecakebaking med
kjemometri



Til undervisning i matematikk og naturfagene
For 6 – 10 klasse og den videregående skolen

Av Egil Nodland og Kenneth Mikalsen

Mars 2007

Innhold

Innledning	3
Gjennomføring	4
Planlegging	4
Eksperimentering	5
Analyse og modellering	6
Tolkning	7
Konklusjon	7
Kvalitetskontroll ved bruk av spektroskopiske metoder	10
Oppsummering	12
Referanser	13

Kontaktinformasjon

Egil Nodland

Kjemisk institutt, Universitetet i Bergen, Allegaten 41, 5007 Bergen

egil.nodland @ kj.uib.no

Kenneth Mikalsen

Apeltun skole, Apeltunveien 94 5238 Rådal

kenneth.mikalsen @ bergen.kommune.no

Innledning

6. trinn på Apeltun skole i Bergen har deltatt i et skoleprosjekt under årets forskningsdager. Prosjektet inngikk i undervisningen i matematikk og naturfag. Denne artikkelen er en oppsummering og er skrevet som et hjelpemiddel for dem som vil prøve dette i egen klasse.

Forskningsdagene er en nasjonal festival der forsknings- og kunnskapsbaserte institusjoner viser fram sin virksomhet for allmennheten på nye og spennende måter. Målsetningene for festivalen er å [1]:

- vekke nysgjerrighet, interesse og forståelse for forskning og forskningens resultater hos folk flest
- formidle hva forskningen betyr i vårt daglige liv
- vise sammenhengen mellom forskning, innovasjon og næringsliv
- vekke interesse i mediene for forskning og forskningsresultater
- bidra til rekruttering av unge til forskning

Ved hjelp av et dataspill var målet for oppgaven å produsere sjokoladekaker av 5-stjerners kvalitet. Produksjonen bestod av to trinn:

1) Sjokoladekakefabrikken hadde to tanker som inneholdt to forskjellige kakerører, A og B. Første del av produksjonen gikk ut på å blande rørene og steke kakene. Her skulle elevene finne riktig blandingsforhold mellom rørene og riktig steiketid og temperatur.

2) Påføring av glasur. Her skulle elevene bestemme sammensetningen av glasuren som i hovedsak bestod av smør, melis og kakao. Etter påføring av glasur tok et spektrofotometer opp et spektrum som ble benyttet til kvalitetskontroll av glasuren.

Hver kake ble testet av en hund. Den gav karakter for kaken og glasuren. Målet var å lage en kake som ble bedømt til 5 stjerner for selve kaken og 5 stjerner for glasuren. Dersom elevene klarte dette ble det mulig å få listet hele oppskriften på kaken.

Kjemometri anvender matematiske og statistiske metoder, til såkalt flervariabel dataanalyse av måleresultater fra kjemiske systemer eller prosesser. En av grunnpilarene er å omforme og redusere store datamengder til tolkbar informasjon. Noen av metodene er av så generell karakter at de er velegnet til analyse av t.d.

trivselsundersøkelsen 2006. Et annet av kjemometriens fundament er eksperimentell forsøksplanlegging hvor man ut fra så få forsøk som mulig ønsker å hente ut så mye informasjon og kunnskap som mulig. [2,3]

Gjennomføring

Elevne utførte prosjektet i perioden 18.august til 22. september. Apeltun skole har en tilstrekkelig stor park av datamaskiner slik at elevene kunne arbeid to og to. Spillet er utviklet av Must AS og krever Java 1.5. Spillet er til fri bruk og finnes på nettstedet kjemometri.org [4]

Etter en kort innføring i spillereglene og målet, løste elevene oppgaven etter prøve og feile metoden. I ettertid antok de forsiktig at dette krevde totalproduksjon av omlag 5600 kaker. De kom frem til et prisoverslag pr. kake på kr, 40- etter en handletur på nærbutikken. Til sammen ville utgiftene til kun ingrediensene komme på 224 000 kr. Prøve og feile metoden i produktutviklingen ble forkastet av elevene med begrunnelse i for høye kostnader, avfallsmengden av ubrukelige kaker, tiden det ville ta å lage og teste kakene og at det ville forbrukes store mengder gode råvarer som kunne bli brukt til annen matlaging. Dette var motivasjonen for å introdusere eksperimentell forsøksplanlegging som innbærer fem steg.

Fem steg i forsøksplanlegging;

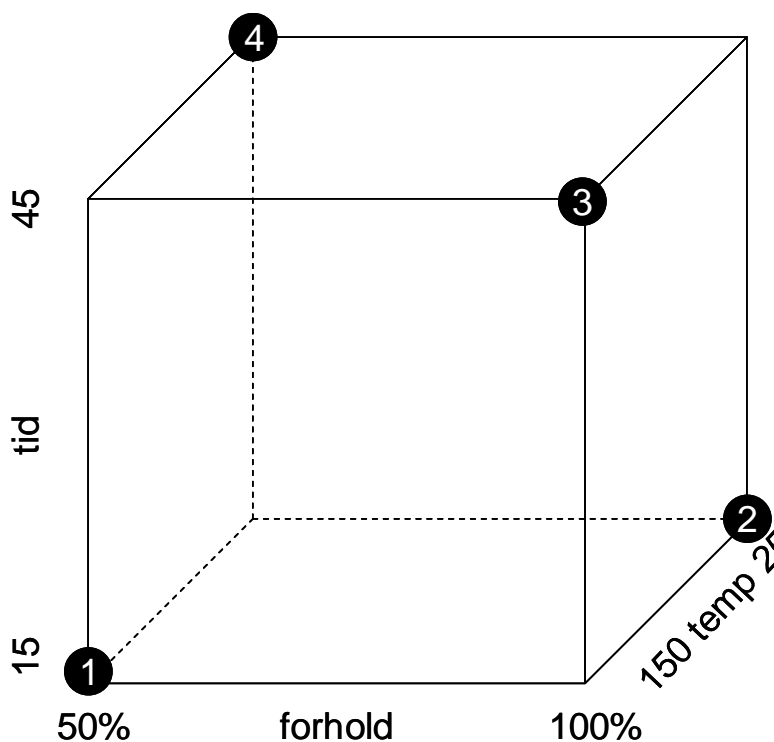
1. planlegging,
2. eksperimentering,
3. analyse og modellering,
4. tolkning
5. konkludering.

Planlegging;

Her skal faktorene som kan påvirke kvaliteten eller mengde utbytte av prosessen identifiseres. Målet her var å finne sammenhengen mellom bakeforholdene, og hvordan de burde stilles inn for å få laget 5-stjernerskake. De tre variablene, eller faktorene, som kunne endres på var blandingsforholdet mellom kakerørene, steikeovnstemperatur og steiketid. Fornuftige områder for innstillingene på variablene må også finnes. T.d. finner de fleste at steiketemperatur på 30 °C i 3 minutter er urimelig.

Ved å velge to ulike innstillinger, lavt og høyt nivå, på hver av variablene hadde vi totalt åtte ulike innstillingskombinasjoner. Disse fremkommer som hjørnene i kubens som er vist i Figur 1. Vi håpet at bare halvparten av de 8 mulige forsøkene kunne si oss noe om sammenhengen mellom innstillingene i sjokoladecakefabrikken og kakekvaliteten.

Figur 1. De fire første forsøkene er vist som svarte kuler. Kuben representerer hele det aktuelle leiteområdet.



Eksperimentering;

Elevene utførte så de fire forsøkene som er vist i tabell 1. Tallene som ligger til grunn for beregningene finnes ved å velge "Plott"-funksjonen som er plassert under bildet av hunden. Siste rekke i tabellen, Ønskelighet, er det som bestemmer antall stjerner for hver kake.

Tabell 1: Designmatrisen for forsøksplanen. Det høyeste svar hunden kunne gi var 100. Svar ≥ 90 gav 5-stjerners kaker.

Forsøk	blandings-	temp	tid	svar fra hund	Lavt, -1	Høyt, +1
--------	------------	------	-----	---------------	----------	----------

nr	forhold						
1	-1	-1	-1	0, 0 stjerner	forhold	50 %	100 %
2	1	1	-1	41, 2 stjerner	temp	150 °C	250 °C
3	1	-1	1	10, 0 stjerner	tid	15 min	45 min
4	-1	1	1	15, 1 stjerne			

Betingelsene for forsøk nr 1 leses fra tabell 1 slik; Blandingsforholdet mellom kakerørene A og B er 50/50, ovnen settes på 150 °C og steiketiden settes til 15 minutter. Betingelsene for forsøk nr 3 er at forholdet mellom røre A og B skal være 100/0, altså kun røre A, og at kaken skal steikes ved 150 °C i 45 minutter. Under datafangsten fra spillet ble klipp og lim funksjoner benyttet av elevene som behersket dette. Svarene fra hunden er gjennomsnittsverdier fra tre eller flere kaker laget under identiske betingelser. Utrekningene av middelverdiene ble gjort vha regnearkfunksjoner eller kalkulator.

Analyse og modellering;

Fra tabell 1 kunne elevene finne ut hvordan endringene i svaret fra hunden fulgte en endring i én faktor. Forsøk 1 og 4 inneholder begge kombinasjoner av temperatur og tid ved det lave blandingsforholdet. Forsøk 2 og 3 inneholder begge kombinasjoner av temp og tid ved det høye blandingsforholdet. Ved å beregne middelverdien av de to forsøkene ved det lave blandingsforholdet og middelverdien av de to forsøkene ved det høye blandingsforholdet fant elevene et mål på effekten av blandingsforholdet. Den såkalte hovedeffekten ble funnet ved å regne ut differansen mellom de to middelverdiene. Alt kunne regnes for hånd slik;

$$\text{Hovedeffekt av blandingsforholdet} = \frac{(41+10)}{2} - \frac{(0+15)}{2} = \frac{51}{2} - \frac{15}{2} = 18 \quad \text{Ligning 1}$$

Hovedeffekten måler middeffekten av blandingsforholdet ved alle mulige betingelser for de to andre variablene.

Forsøk 1 og 3 inneholder alle kombinasjoner av blandingsforhold og steiketid ved lav steiketemperatur, og forsøk 2 og 4 inneholder alle kombinasjoner av blandingsforhold og steiketid ved høy steiketemperatur.

$$\text{Hovedeffekten av steiketemperaturen} = \frac{(41+15)}{2} - \frac{(0+10)}{2} = \frac{56}{2} - \frac{10}{2} = 23$$

Ligning 2

Tilsvarende fant elevene hovedeffekten av steiketiden som differansen mellom gjennomsnittsverdien av svaret fra hunden i forsøk 3 og 4 og gjennomsnittsverdien av forsøk 1 og 2.

$$\text{Hovedeffekten av steiketid} = \frac{(10+15)}{2} - \frac{(0+41)}{2} = \frac{25}{2} - \frac{41}{2} = -8$$

Ligning 3

Tolkning;

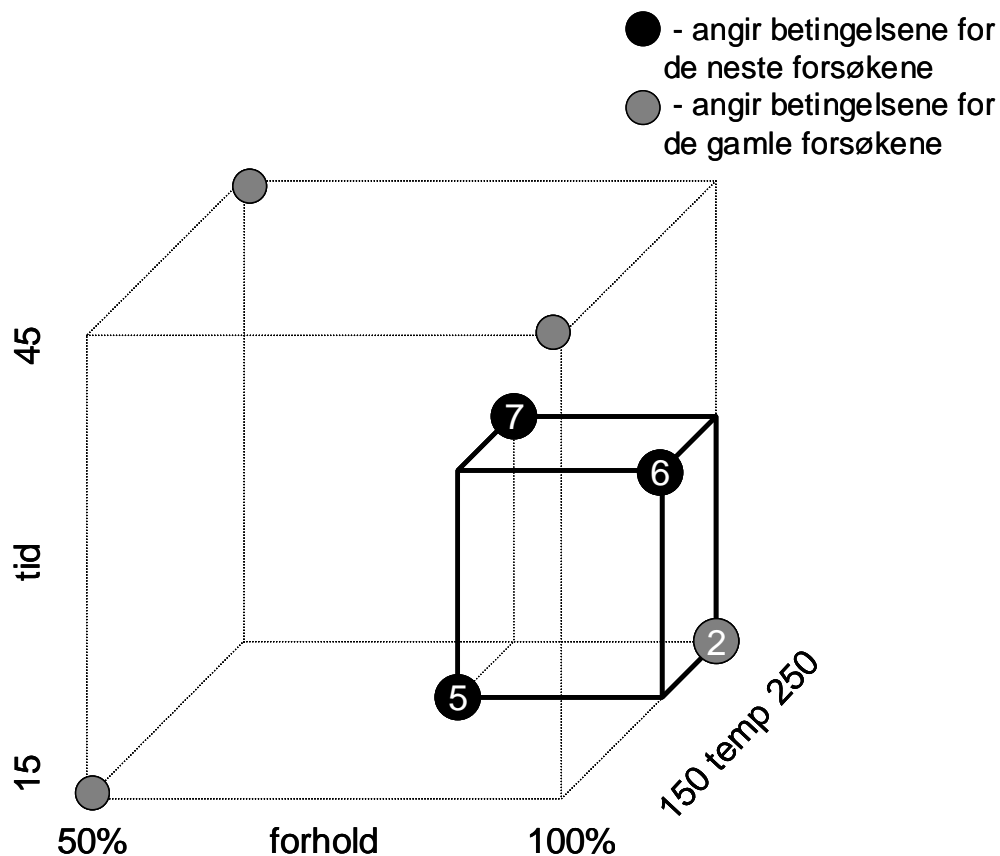
Tolkningen av disse hovedeffektene er som følger; Ved å gå fra lave til høye innstillinger på blandingsforhold og steiketemperatur gav hunden oss flere stjerner fordi hovedeffektene var positive. Ved å gå fra kort til lang steiketid gav hunden oss færre stjerner fordi hovedeffekten var negativ.

Konklusjon;

Fortegnet på hver hovedeffekt fortalte oss i hvilken retning vi skulle gå for å få flere stjerner, men vi viste ikke hvor langt vi skulle gå. Når man leiter seg systematisk frem etter høyeste punkt i ukjent, men klart avgrenset terreng er det vanlig å halvere intervallene for hver gang. Elevene startet derfor en ny runde av forsøksplanleggingen i fem trinn.

Planlegging 2; Leiteområdet kunne derfor innskrenkes til hhv 75 % -100 % for blandingsforholdet, 200-250 °C for steiketemperatur og til 15-30 minutters steiketid. Det nye leiteområdet er vist i figur 2.

Figur 2. Etter de fire første forsøkene kan leiteområdet innskrenkes til den lille terningen. Kun tre nye forsøk var nødvendig å utføre.



Ekspirimentering 2;

Tabell 2: Designmatrisen for de neste forsøkene. Det høyeste svar hunden kunne gi var 100. Svar ≥ 90 gav 5-stjerners kaker.

Forsøk nr	blandingsforhold	temp	tid	svar fra hund		Lavt, -1	Høyt, +1
5	-1	-1	-1	84, 4 stjerner	forhold	75 %	100 %
2*	1	1	-1	41, 2 stjerner	temp	200 °C	250 °C
6	1	-1	1	22, 1 stjerne	tid	15 min	30 min
7	-1	1	1	64, 3 stjerner			

2* - forsøket ble utført i første runde

Analyse og modellering 2; Med de nye svarene fra hunden ble nye analyser og beregninger tilsvarende lign. 1 til 3 utført.

$$\text{Hovedeffekt av blandingsforholdet} = (41+22)/2 - (84+64)/2 = 63/2 - 148/2 = -42,5$$

Hovedeffekt av temperatur = $(41+ 64)/2 - (84+22)/2 = 105/2 - 106/2 = -0,5$

Hovedeffekt av tid = $(22+ 64)/2 - (84+41)/2 = 86/2 - 125/2 = -19,5$

Tolkning 2; Denne gangen var alle hovedeffektene negative. Ved å gå fra lave til høye innstillinger på alle variablene gav hunden dem færre stjerner.

Konklusjon 2; Etter å ha begrenset leiteområdet ytterligere i henhold til hva de nye hovedeffektene fortalte ble ytterligere tre nye forsøk gjort. I tillegg ble et såkalt senterpunkt eksperiment utført. Da hadde elevene funnet fram til et sett variabelinnstillinger som gav stabil produksjon av 5-stjernes kaker på kun elleve forsøk, en betydelig innsparing i forhold til de 5600 forsøkene etter prøve og feile metoden. Tabell 3 viser noen av innstillingene til de siste forsøkene. Det overlates til leseren å finne fornuftige verdier for de tomme feltene. Senterpunktene er middelverdiene av de lave og høye innstillingene. F. eks ville senterpunktet for forsøkene i tabell 2 vært som følger; forhold $(75+100)/2 = 87,5$, temperatur $(200+250)/2 = 225$ °C og tid $(15+30)/2 = 22,5$ minutter.

Tabell 3: Designmatrisen for de siste forsøkene. Det høyeste svar hunden kunne gi var 100. Svar ≥ 90 gav 5-stjerners kaker.

Forsøk nr	blandings- forhold	temp	tid	svar fra hund		Lavt, -1	Høyt, +1
5*	-1	-1	-1	84, 4 stjerner	forhold	75 %	?
8	1	1	-1	,5 stjerner	temp	200 °C	?
9	1	-1	1	,5 stjerner	tid	15 min	?
10	-1	1	1	,5 stjerner			
11							
senterpunkt	0	0	0	,5 stjerner	senterpunkt	?	?

5* - forsøket ble utført i andre runde

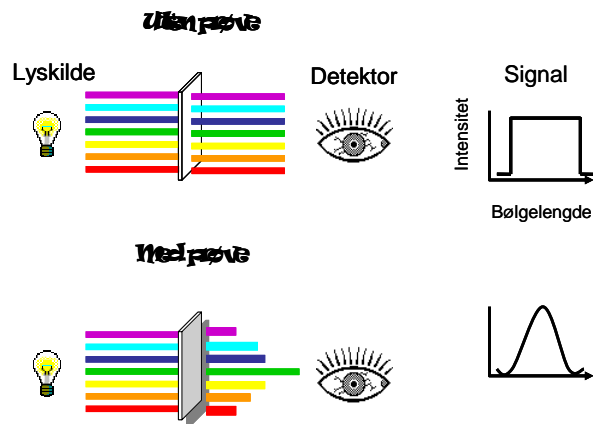
Kvalitetskontroll ved bruk av spektroskopiske metoder

Samme metodikk som over kan brukes til å finne frem til sammensetningen av 5-stjerners glasur. Dette overlater vi imidlertid som en øvelse til leseren.

Den synlige delen av det elektromagnetiske spektrum består av stråling (lys) ved ulike bølgelener som oppfattes som fargene rødt, oransje, gult, grønt, blått og

fiolett. Sammen oppfattes den strålingen som hvitt lys. Prinsippet for et spektrometer er vist i figur 3.

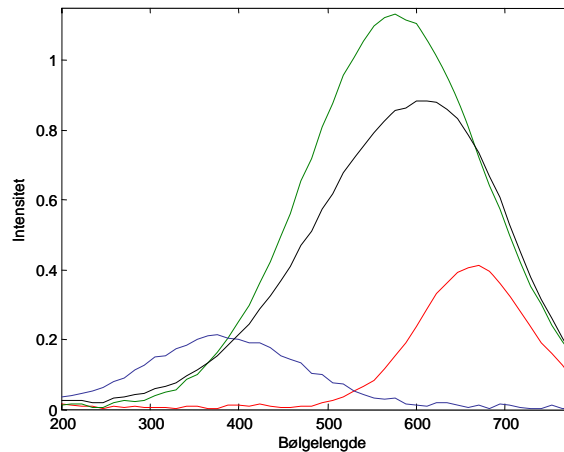
Figur 3. Prinsippskisse av et spektrometer for det synlige området



Øverst: Fra venstre produserer en lyskilde synlig lys med lik intensitet på alle bølgelengder. Dette passer uhindret til detektoren på høyre side av prøvekammeret. Det registrerte signalet inneholder alle bølgelengder, med lik intensitet. Nederst: lyset fra kilden passerer en prøve som absorberer stråling ved korte(fiolett) og lange (rød) bølgelengder. Det grønne lyset absorberes ikke av prøven. Det registrerte signalet er unikt for prøven og kan brukes til identifisering.

I sjokoladefabrikken var spekteret til den perfekte glasuren oppgitt. Hovedingrediensene som kunne endres på var smør, melis og kakao. Hver av dem hadde sin egen signalform som vist i figur 4. Disse formene endres ikke med økende mengde, men størrelsen gjør det.

Figur 4. Spektra av perfekt glasur og de rene hovedingrediensene smør, melis og kakao.



Svart=perfekt glasur, blå=kakao, grønn=melis, rød=smør

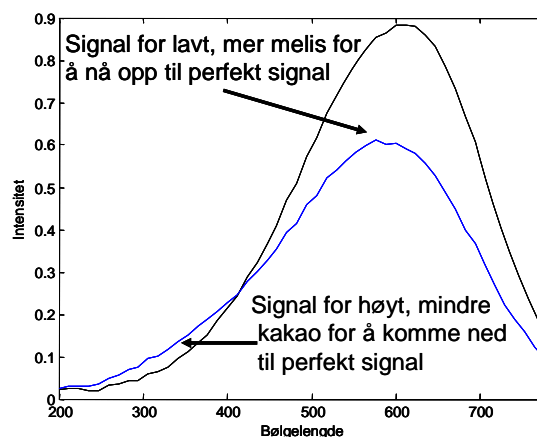
Spekteret for glassuren, S_g , fremkommer som summen av spektrene av hver ingrediens, multiplisert med de respektive mengder, m , som er benyttet. Dette er en anvendelse av Beer-Lamberts lov for blandinger.

$$S_g = m_1 S_1 + m_2 S_2 + m_3 S_3 \quad \text{Ligning 4}$$

Senket skrift henviser til de tre ulike ingrediensene.

I figur 5 er det vist hvordan spekteret av en 2-stjerners glasur kunne sett ut.

Figur 5. Spektrum av en 2-stjerners glasur bestående av 50g smør, 150g melis og 25g kakao.



Svart=perfekt glasur, blå=2-stjerners glasur.

I bølglengdeområdet rundt 590 nm er signalet for svakt. For å øke signalstyrken må mengden av ingrediensen som har sin maksimale signalstyrke i samme område

økes. Dette er melis, som har sitt maksimum på omlag 580 nm. I bølglengdeområdet rundt 300nm er signalet for høyt i forhold til den perfekte glasuren. Mengden av ingrediensen som har sin maksimale signalstyrke i dette området må reduseres. Kakao har sitt maksimum på omlag 370nm. Med denne kunnskapen i bagasjen løste elevene glasurgåten hurtig.

Prosjektet ble avsluttet ved at 6 elever som representerte variasjonen av klassen laget et 15 minutters foredrag. Generalprøven ble holdt for resten av klassen. Fredag 22. september deltok hele klassen på forskningsdagene i Bergen, og foredraget gitt for elever fra en av de andre deltagende skolene.

Oppsummering.

Kunnskapsnivået blant 11-åringene i denne klassen spriker, som i de fleste andre klasser antar vi. Noen hadde full forståelse for at det var lurt å vente til ovntemperaturen var konstant før de hentet svarene fra hunden vha av klipp og lim funksjoner. Noen beregnet gjennomsnittsvar av 3-5 kaker med 3 desimalers nøyaktighet vha kalkulator. Andre slet med tallene opp til 1000, enn si å regne med dem. Innledningsvis slet alle med var forståelsen av å gjøre systematiske forsøk som vist i tabell 1. Etter hvert ble gevinsten av en slik fremgangsmåte verdsatt.. Den aller største bøygen var å håndtere lign. 1-3. Svarene fra hunden var gitt som desimaltall. Vi valgte å forenkle dette til heltall. Parenteser og multiplisering med positive og negative fortegn var for de aller fleste utenfor rekkevidde – og det inntil da dekkede pensum. Når ligningene ble presentert som vist ovenfor, klarte mange å regne ut hovedeffektene. Dette ble gjort med et utvalg elever.

Elever med kjente lese- og skrivevansker klarte seg meget bra, og var blant de første som lyktes med å bake 5-stjerners kaker. Av de 6 elevene som var plukket ut til å lage foredraget valgte en å trekke seg grunnet nervøsitet. De andre satt ut over normal skoletid, og en trosset lettere sykdom for å kunne øve på og delta på fremførelsen.

For eldre elever bør spillet kunne brukes uten tilpassninger av hvordan tallmaterialet presenteres. I tillegg til gjennomsnittsberegninger av flere kaker, kan spredningsberegninger inkluderes for å kunne estimere usikkerhet i hovedeffekter. Begrepet samvariasjon, eller korrelasjon kan belyses. I tillegg til å beregne hovedeffekter kan vekselvikninger beregnes. For elever i videregående skole kan man gå videre til regresjonsanalyse og responsflatemodellering.

Referanser

[1] <http://www.forskningsdagene.no/c26720/artikkel/vis.html?tid=29652>

[2] Box, George E.P.; Hunter, William G. og Hunter, J. Stuart (1978) *Statistics for experimenters. An introduction to design, data analysis, and model building*. John Wiley & Sons, New York

[3] http://www.chemometrics.se/index.php?option=com_content&task=view&id=18&Itemid=1

[4] <http://www.kjemometri.org/nyheter/Forskningsdagene2006/Sjokoladekakefabrikken.htm>