

Egil Nodland, Kenneth Mikalsen

Virtuell sjokoladecakebaking med kjemometri!

Innledning

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

Under fjorårets forskningsdager deltok 6. trinn på Apeltun skole i Bergen i et skoleprosjekt. Prosjektet inngikk i undervisningen i matematikk og naturfag. Denne artikkelen er en oppsummering av prosjektet, og er skrevet som et

hjelpemiddel for dem som vil prøve dette i egen klasse.

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

1) Blande, røre og steike. Sjokoladecakefabrikken har to tanker som inneholder to forskjellige rører. Første del av produksjonen gikk ut på å blande rørene og steike kakene. Oppgaven til elevene var å 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. triv-

Egil Nodland

Universitetet i Bergen
egil.nodland@kj.uib.no

Kenneth Mikalsen

Apeltun skole
kenneth.mikalsen@bergen.kommune.no

selsundersøkelsen 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

Elevene utførte prosjektet i perioden 18. august til 22. september 2006. Apeltun skole har en tilstrekkelig stor park av datamaskiner slik at elevene kunne arbeide 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].

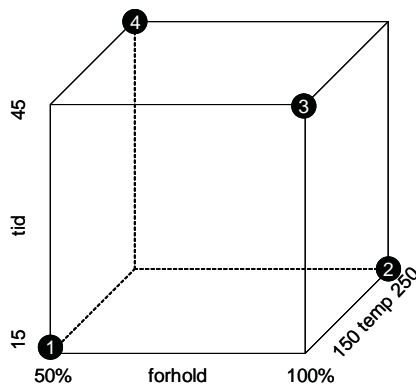
Etter en kort innføring i spillereglene og målet, løste elevene oppgaven etter prøve og feile metoden. I ettertid antok de forsiktig at dette krevde totalproduksjon av omlag 5600 kaker. De kom frem til et prisoverslag pr. kake på kr 40,- etter en handletur på nærbutikken. Til sammen ville utgiftene til kun ingrediensene komme på kr 224000,-. Prøve og feile metoden i produktutviklingen ble forkastet av elevene med begrunnelse i for høye kostnader, avfallsmengden av ubrukelige kaker, tiden det ville ta for 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. Denne består av følgende fem steg: planlegging, eksperimentering, analyse og modellering, tolkning og til slutt 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, steikeovns-temperatur 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 sjokoladefabrikken 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.

Forsøk nr	forhold	temp	tid	svar fra hund
1	-1	-1	-1	0
2	1	1	-1	41
3	1	-1	1	10
4	-1	1	1	15

	Lavt, -1	Høyt, +1
forhold	50 %	100 %
temp	150 °C	250 °C
tid	15 min	45 min

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

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:

Hovedeffekt av blandingsforholdet =

$$\frac{(41+10)}{2} - \frac{(0+15)}{2} = \frac{51}{2} - \frac{15}{2} = 18$$

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.

Hovedeffekten av steiketemperaturen =

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

Ligning 2

Tilsvarende fant de hovedeffekten av steiketiden som differansen mellom gjennomsnittsverdien

av svaret fra hunden i forsøk 3 og 4 og gjennomsnittsverdien av forsøk 1 og 2.

Hovedeffekten av steiketid =

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

Ligning 3

Tolkning

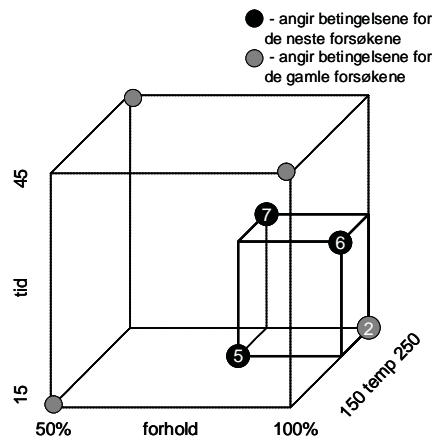
Tolkningen av disse hovedeffektene er som følger;

Ved å gå fra lave til høye innstillinger på blandingsforhold og steiketemperatur gav hunden oss flere stjerner! Hovedeffektene er positive.

Ved å gå fra kort til lang steiketid gav hunden oss færre stjerner! Hovedeffekten er negativ.

Konklusjon

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.

Med de nye svarene fra hunden ble nye analyser og beregninger tilsvarende ligningene 1 til 3 utført. Denne gangen var alle hovedeffektene

negative. Ved å gå fra lave til høye innstillinger på alle variablene gav hunden dem færre stjerner. 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-stjerners kaker på kun elleve forsøk, en betydelig innsparing i forhold til de 5600 forsøkene etter ”prøve og feile”-metoden.

Kvalitetskontroll ved bruk av spektroskopiske metoder

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

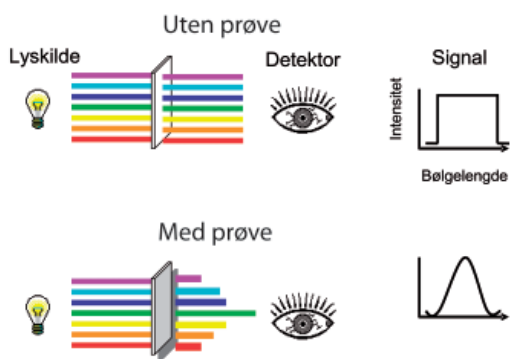
Den synlige delen av det elektromagnetiske spektrum består av stråling (lys) ved ulike bølgelengder som oppfattes som fargene rødt, oransje, gult, grønt, blått og fiolett. Sammen oppfattes den strålingen som hvitt lys. Prinsippet for et spektrometer er vist i figur 3.

I sjokoladecakefabrikken 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.

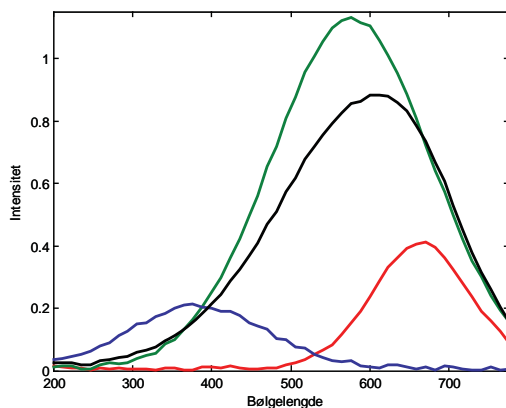
Spekteret for glasuren, S_g , fremkommer som summen av spektrene av hver ingrediens, multiplisert med de respektive mengder, m , som er benyttet. Dette er en anvendelse av Beer-Lamberts lov for blandinger. Vi har dermed $S_g = m_1 S_1 + m_2 S_2 + m_3 S_3$, senket skrift henviser til de tre ulike ingrediensene.

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

I bølgelengdeområdet 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 bølgelengdeområdet rundt 300 nm er sig-

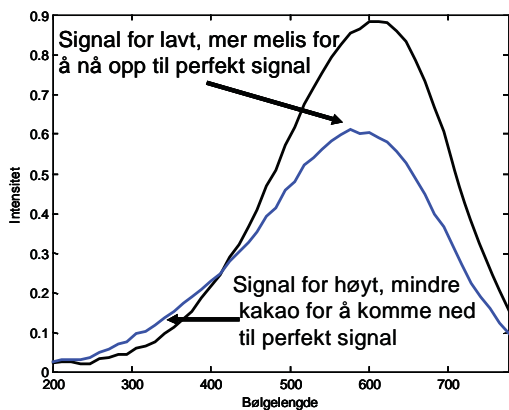


Figur 3. Prinsippskisse av et spektrometer for det synlige området. Øverst: Fra venstre produserer en lyskilde synlig lys med lik intensitet på alle bølgelengder. Dette passer uhindret til detektoren på høyre side av prøveområdet. Det registrerte signalet inneholder alle bølgelengder, med lik intensitet. 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.



Figur 4. Spektra av perfekt glassur og de rene hovedingrediensene smør, melis og kakao. Svart=perfekt glassur, blå=kakao, grønn=melis, rød=smør

nalet 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 om lag 370nm. Med denne kunnskapen i bagasjen løste elevene



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

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 ble holdt 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 ovnstemperaturen var konstant før de hentet svarene fra hunden vha. av "klipp og lim"-funksjoner. Noen beregnet gjennomsnittsvær 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 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 ligning 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 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 tilpasninger 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 vekselvirkninger 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>