

Lineaire regressie met excel: de functie LIJNSCH

Zet X- en Y-waarden in twee kolommen. Concentratie: X-as, gemeten grootheid: Y-as.

De functie LIJNSCH geeft verschillende statistische grootheden.

Je krijgt deze als volgt:

Ga in een lege cel staan (voorbeeld: B9) en kies de functie LIJNSCH.

Vul het invulscherm als volgt in:

Y-bekend: selecteer de Y-waarden

X-bekend: selecteer de X-waarden

Const: waar

Stat: waar

Selecteer een blokje cellen van 2 x 3, in het voorbeeld: B9... C11.

En nu:

F2

Ctrl+shift+enter

	A	B	C	D	E
1	VOORBEELD	X	Y		
2	LIJNSCH	0	0		
3	X = conc. X (mg/L)	2	0,108		
4	Y = Extinctie	4	0,232		
5		6	0,339		
6		8	0,467		
7					
8					
9	m	0,05825	-0,0038	b	
10	s _m	0,000967	0,004739	s _b	
11	R ²	0,999173	0,006118	s _y	
12					
13					

Excel berekent enkele grootheden.

In het *dit voorbeeld* is naast de cel de betekenis aangegeven, moet je dus zelf invullen als je dat wilt:

m richtingscoëfficiënt

s_m standaarddeviatie van m

R² correlatiecoëfficiënt in kwadraat

b as afsnijding (intercept)

s_b standaarddeviatie van b

s_y standaarddeviatie in een Y voor een ingevulde waarde van X.

Sommige van deze waarden zullen we gebruiken bij de berekening van de standaarddeviatie in X bij gegeven Y-waarde.

In kolom B zorg je voor een aantal waarden:

B13 n aantal X,Y-paren

B14 gemiddelde Y

B15 kwadratensom $x-x_{gem}$

In de C-kolom staat steeds de uitleg! Deze formules moet je dus zelf invullen.

B17 vul Y-waarde in

B18 1 voor 1
onafhankelijke
meting van het
monster

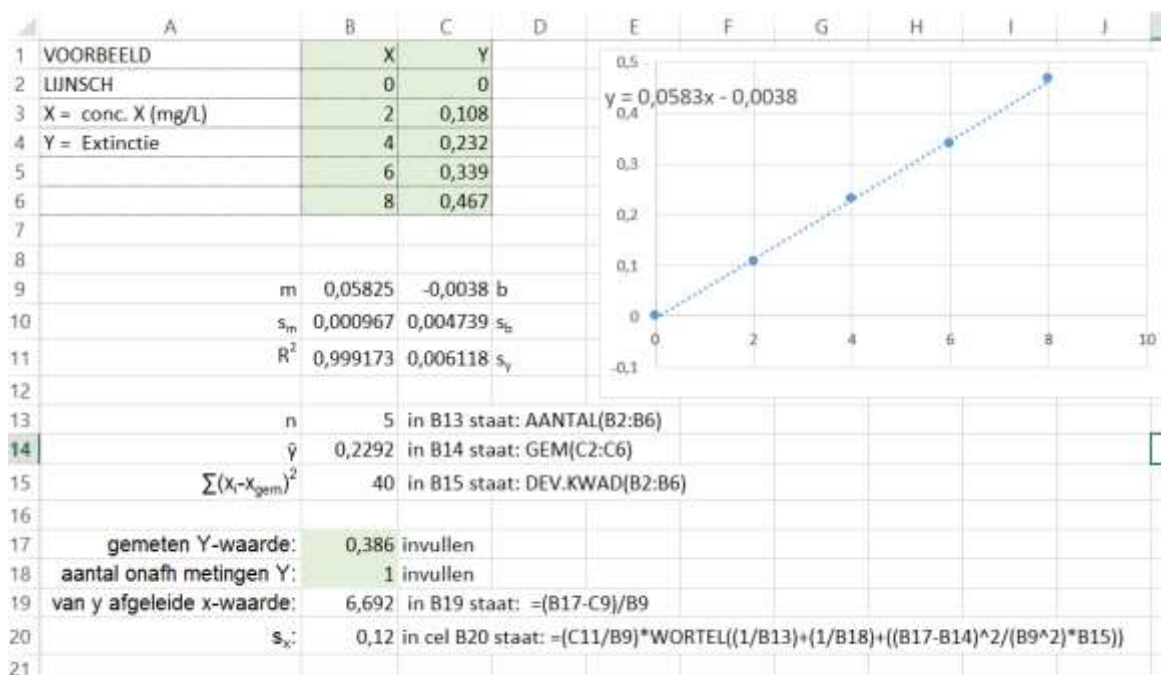
B19 X-waarde berekend uit ingevulde Y.

	A	B	C	D	E	F	G
1	VOORBEELD	X	Y				
2	LIJNSCH	0	0				
3	X = conc. X (mg/L)	2	0,108				
4	Y = Extinctie	4	0,232				
5		6	0,339				
6		8	0,467				
7							
8							
9		m	0,05825	-0,0038	b		
10		s_m	0,000967	0,004739	s_b		
11		R^2	0,999173	0,006118	s_y		
12							
13		n	5	in B13 staat: AANTAL(B2:B6)			
14		\bar{y}	0,2292	in B14 staat: GEM(C2:C6)			
15		$\sum(X_i - X_{gem})^2$	40	in B15 staat: DEV.KWAD(B2:B6)			
16							
17		gemeten Y-waarde:	0,386	invullen			
18		aantal onafh metingen Y:	1	invullen			
19		van y afgeleide x-waarde:	6,692	in B19 staat: =(B17-C9)/B9			
20							
21							
22							

Standaardafwijking in X

Hoe je een meetwaarde afrondt hangt af van de onnauwkeurigheid. Deze wordt in de laboratoriumpraktijk bepaald aan de hand van vele metingen van steeds hetzelfde monster. Een kwaliteit-controlemonster. Op school doe je meestal maar enkele metingen. Als indruk van de onnauwkeurigheid gebruik je dan de *standaarddeviatie* (standaardfout).

Excel geeft deze wel voor (uit X berekende) Y-waarden maar niet voor (uit Y berekende) X-waarden. Een berekening voor de fout in X staat hieronder.



Vul in cel B20 de formule in die in C20 als tekst staat.

$$=(C11/B9)*WORTEL((1/B13)+(1/B18)+((B17-B14)^2/(B9^2)*B15))$$

In B20 verschijnt de standaarddeviatie van de X-waarde.

Het eerste cijfer van de standaarddeviatie is het laatste cijfer van de meetwaarde.

Gemeten en ingevulde Y-waarde: 0,386

Gevonden X-waarde: 6,69

Standaarddev: 0,12

Standaardfout in x voor gemeten Y in kalibratielijn (ijklijn):

$$s_x = \frac{s_y}{m} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{k} + \frac{(y - \bar{y})^2}{m^2 \sum (x_i - \bar{x})^2}}$$

Met dank aan Daniel C. Harris: Quantitative Chemical Analysis

Grootheid	waarde in cel
s_x standaarddeviatie van x bij bekende y	B20
s_y standaarddeviatie van y	C11
m richtingscoëfficiënt	B9
n aantal meetparen	B15
k aantal onafhankelijke meetwaarden voor y	B18
y gemeten y-waarde	B17
\bar{y} gemiddelde van de y-waarden	B14
$\sum (x_i - \bar{x})^2$ kwadratensom van x	B15