

Tentamen Statistiek 1 voor Scheikunde (2DS00) op maandag 6 oktober 2003, 14.00-17.00 uur

De uitwerkingen van de opgaven dienen duidelijk geformuleerd en overzichtelijk opgeschreven te worden. Het gebruik van een *onbeschreven* Statistisch Compendium en notebook is toegestaan. De numerieke waarden in de datasets zijn weergegeven in de Engelse decimale notatie.

De benodigde data sets van de tentamenopgaven zijn beschikbaar via <http://www.win.tue.nl/~sandro/2DS00/tentamens.html>.

Uitwerkingen van het tentamen zullen zo spoedig mogelijk in te zien zijn op het WWW via URL:

<http://www.win.tue.nl/~sandro/2DS00/>

---

1. Bij deze opgave gebruiken we de data set **nitraation.sf3**. Deze dataset bevat 15 herhaalde metingen van een nitraationconcentratie (uitgedrukt in mg/ml) in een bepaalde oplossing.
  - a) Bepaald een 95%-betrouwbaarheidsinterval voor zowel de verwachte waarde als de standaardafwijking van de nitraationconcentratie. Geef de details van een handmatige berekening of de keuzes binnen Statgraphics.
  - b) De betrouwbaarheidsintervallen bij a) gaan uit van bepaalde veronderstellingen. Onderzoek via geschikte grafieken en toetsen of de meetgegevens aan deze veronderstellingen voldoen.
2. Bij een chemisch experiment wordt een gastank gebruikt die onder druk staat. Voor het experiment is het van belang dat de luchtdichtheid in de tank nauwkeurig bepaald wordt. De luchtdichtheid  $\rho$  kan helaas niet direct gemeten worden, maar moet bepaald worden m.b.v. de volgende betrekking  $p = \rho RT$ , waarbij  $p$  de druk in de tank,  $T$  de absolute temperatuur en  $R$  de gasconstante (8.314 J/mol/K) is. Neem aan dat er op  $R$  geen meeton nauwkeurigheid is. De tank opereert normaal gesproken bij  $T = 298 K$ .
  - a) Wat is variatiecoëfficiënt van de luchtdichtheid, als de temperatuur met een standaardafwijking van  $2 K$  en de druk in de tank met een variatiecoëfficiënt van 1% bepaald kunnen worden?
  - b) Hoe groot mag variatiecoëfficiënt van de druk in de tank maximaal zijn als de temperatuur met een standaardafwijking van  $1 K$  bepaald kan worden en men wil dat de variatiecoëfficiënt van de luchtdichtheid maximaal 0,5% is?
3. Bij deze opgave gebruiken we de dataset **roerder.sf3**. Het vermogen  $P$  dat nodig is om een roerder van een bepaald type te laten werken in een bepaald medium is vooral afhankelijk van het toerental en diameter van de roerder, alsmede van de dichtheid en de viscositeit van het medium. Deze relatie kan het

beste beschreven worden in termen van een relatie tussen de dimensieloze onafhankelijke variabele  $Re$  en de afhankelijke variabele  $N_p$ , die direct gerelateerd is aan  $P$ . Voer regressie-analyses uit met enkele eenvoudige modellen. Kies een goed passend model en voer daarop een volledige regressie-analyse uit. Verwijder eventuele verdachte waarnemingen.

4. De sterkte van een kop koffie hangt af van de hoeveelheid droge stof, die oplost tijdens het zetten. Deze opgeloste hoeveelheid droge stof (ODS) blijkt een verband te hebben met de deeltjesgrootte verdeling van de gemalen koffie. Hoe kleiner de koffiedeeltjes, hoe meer ODS. De verdeling van de deeltjesgrootte wordt gekarakteriseerd door een D10, D50 en D90 diameter. De dataset **ODSkoffie.sf3** bevat metingen aan het zetten van koffie met ODS waarden en bijbehorende D10, D50 en D90 waarden.
  - a) Onderzoek of D10, D50 en D90 afzonderlijk de ODS verklaren.
  - b) Maak een model dat de ODS beschrijft door alle 3 de factoren te gebruiken. Welke factoren zijn significant?
  - c) Vind een verklaring voor de tegenstrijdige resultaten bij de onderdelen a) en b). Hoe heet het verschijnsel dat U bij b) gevonden heeft?
  - d) Wat is het beste model dat ODS beschrijft door 1 of meer van de 3 factoren te gebruiken?
  - e) Onderzoek of het door U gekozen model aan de modelveronderstellingen (normaliteit, gelijke varianties e.d.) voldoet.
  
5. In een batchreactor worden ethylacetaat (EAc) en natriumhydroxide ( $OH^-$ ) gemengd om via een reactie ethanol en acetaat te vormen. Het is van belang om de reactiesnelheid goed te modelleren. De concentraties kunnen niet direct gemeten worden. Op grond van theoretische overwegingen kan men het volgende model opstellen dat de geleiding  $\sigma_t$  in de reactor op tijdstip  $t$  relateert aan de reactiesnelheidsconstante  $k$ :

$$\sigma_t = \frac{([OH^-]_0 - [EAc]_0) \cdot (\sigma_0 - \sigma_\infty)}{[OH^-]_0 - ([EAc]_0 \cdot e^{-( [OH^-]_0 - [EAc]_0 ) kt})} + \sigma_\infty,$$

waarbij  $\sigma_0$ ,  $\sigma_\infty$  en  $k$  te bepalen parameters zijn. Om dit model te controleren worden metingen gedaan, die te vinden zijn in het bestand **verzeping.sf3**. Bij deze metingen was  $[EAc]_0 = 0,0157$  M en  $[OH^-]_0 = 0,01032$  M. Voer een niet-lineaire regressie uit om de volgende twee vragen te beantwoorden:

- a) Is het model een goede theoretische beschrijving van de reactiekinetiek of zijn er nog aspecten die niet mee genomen zijn?
- b) Kan het model gebruikt worden om het reactieverloop goed te voorspellen?