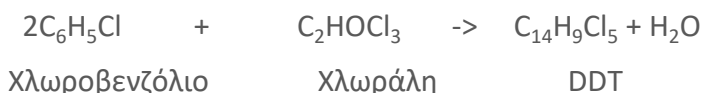


Υπολογιστική Εργασία - Γραμμική Παλινδρόμηση

Ενδεικτικές απαντήσεις

Το DDT, ένα εντομοκτόνο επιβλαβές για ψάρια, πουλιά και ανθρώπους, παράγεται από την ακόλουθη αντίδραση:



Στο πλαίσιο πειράματος σε ένα ερευνητικό εργαστήριο, αντιδρούν 1351 g χλωροβενζολίου με 515.8 g χλωράλης.

1. Ποιο αντιδραστήριο είναι το περιοριστικό αντιδρών; Ποιο αντιδραστήριο είναι σε περίσσεια και πόσο % είναι η περίσσεια;

$$n_{\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}} = 1351/112.56 = 12.00 \text{ mol}$$

$$n_{\text{C}_2\text{HOCl}_3} = 515.8/147.39 = 3.500 \text{ mol}$$

$n_{\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}}/n_{\text{C}_6\text{H}_5\text{C}} = 12.00/3.500 = 3.429 > 2$ άρα το C_2HOCl_3 είναι το περιοριστικό αντιδρών και το $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$ είναι σε περίσσεια.

$$\text{Περίσσεια } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = (12.00 - 3.500 \cdot 2)/(3.500 \cdot 2) = 0.7142 = \mathbf{71.49\%}$$

2. Πόσο DDT (σε g) παράγεται στην περίπτωση που η μετατροπή της αντίδρασης είναι 1.00 (100%);

$$m_{\text{DDT}} = 3.500 \text{ mol} \cdot (1/1) \cdot 354.48 \text{ g/mol} = \mathbf{1240.5 \text{ g}}$$

3. Εάν το παραγόμενο DDT είναι 283.6 g, ποια είναι η μετατροπή της αντίδρασης και ποια η απόδοση της διεργασίας σε (g DDT/g C_2HOCl_3) και (mol DDT/mol C_2HOCl_3);

$$f_{\text{reaction}} = 283.6 \text{ g} / 1241 \text{ g} = \mathbf{0.2286}$$

$$(\text{g DDT})/(\text{g } \text{C}_2\text{HOCl}_3) = 283.6/515.8 = \mathbf{0.5498}$$

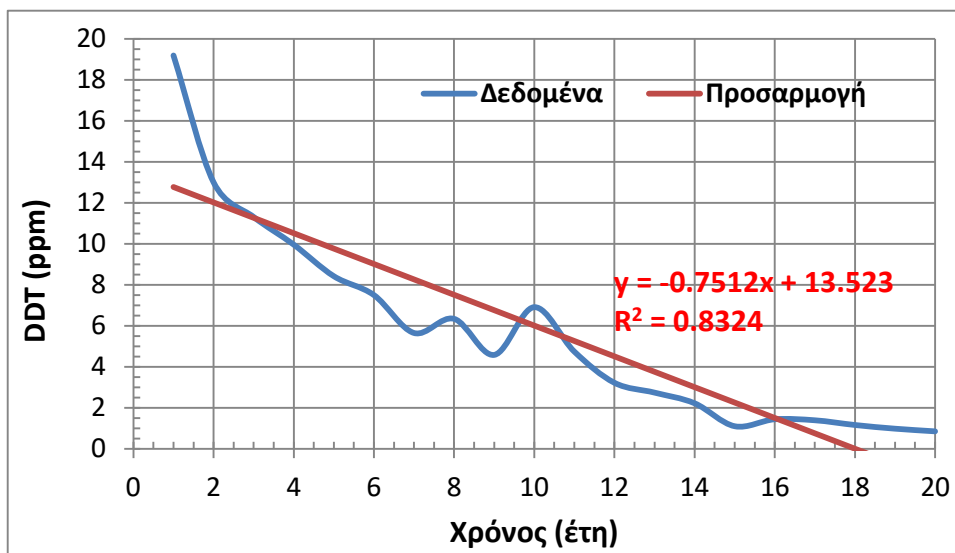
$$(\text{mol DDT})/(\text{mol } \text{C}_2\text{HOCl}_3) = (283.6/354.48)/3.5 = \mathbf{0.2286}$$

4. Στον παρακάτω Πίνακα δίνονται στοιχεία για τη σχέση ανάμεσα στο χρόνο που μεσολάβησε από την έκθεση ενός πληθυσμού σολομών στη λίμνη Μίσιγκαν (ΗΠΑ) και τη συγκέντρωση που ανιχνεύθηκε στα ψάρια αυτά.

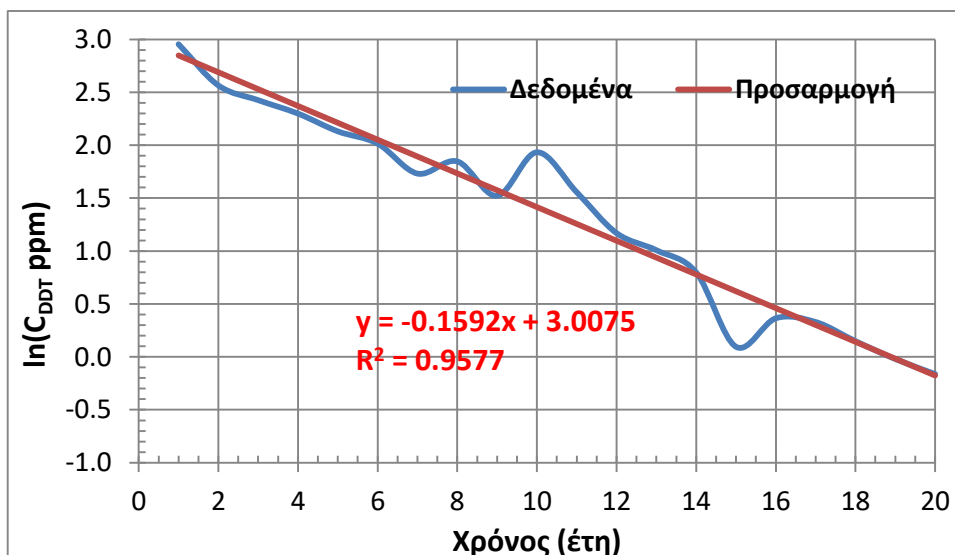
Χρόνος (Έτος από την έκθεση)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Συγκέντρωση DDT (ppm)	19.19	13.00	11.31	9.96	8.42	7.50	5.65	6.34	4.58	6.91
Χρόνος (Έτος από την έκθεση)	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Συγκέντρωση DDT (ppm)	4.74	3.22	2.74	2.22	1.10	1.44	1.39	1.16	0.98	0.85

Elements of environmental chemistry, Hites, R. A, 2007, Wiley.

- a. Να σχεδιάσετε σε διάγραμμα τη σχέση ανάμεσα στο Χρόνο και τη Συγκέντρωση DDT (ppm).
- b. Να εφαρμόσετε τη μέθοδο των ελάχιστων τετραγώνων στα δεδομένα αυτά για να βρείτε τη γραμμική προσέγγιση της σχέσης μεταξύ τους. Να παραθέσετε τα δεδομένα που έχετε υπολογίσει και να αναφέρετε την εξίσωση που υπολογίσατε και το R^2 .



- c. Επαναλάβετε τη διαδικασία χρησιμοποιώντας λογαρίθμηση. Να παραθέσετε τα δεδομένα που έχετε υπολογίσει και να αναφέρετε την εξίσωση που υπολογίσατε και το R^2 .



- d. Να υπολογίσετε το χρόνο ημιζωής του DDT χρησιμοποιώντας τη σχέση που έχετε εξάγει στο ερώτημα 4c.

$$t_{1/2} = \ln(1/2)/(-\lambda) = 0.6931/0.1592 = 4.354 \text{ έτη.}$$