

## Exercícios – Lista 05 – Planejamento Experimental e Otimização

1) Quatro soluções padrão foram preparadas, cada uma contendo 16,00 % (em massa) de cloreto. Três métodos de titulação, cada um com uma técnica diferente de determinação do ponto de virada, foram usadas para analisar cada solução padrão. A ordem dos experimentos foi randomizada. Os resultados encontrados para o cloreto (% em massa) são mostrados abaixo:

Solution	Method		
	A	B	C
1	16.03	16.13	16.09
2	16.05	16.13	16.15
3	16.02	15.94	16.12
4	16.12	15.97	16.10

Teste se existe diferenças significante entre (a) as concentrações de cloreto nas diferentes soluções e (b) os resultados obtidos com os diferentes métodos.

2) Um novo método de extração assistido por micro-ondas para a recuperação de 2-clorofenol de amostras de solos foi avaliado pela aplicação em cinco diferentes solos em cada um de três dias. As porcentagens de recuperação foram:

Soil	Day		
	1	2	3
1	67	69	82
2	78	66	76
3	78	73	75
4	70	69	87
5	69	71	80

Determine se há qualquer diferença significante nas porcentagens de recuperação (a) entre solos e/ou (b) entre os dias.

3) Em estudos de um método fluorimétrico para a determinação de um surfactante aniônico dodecil sulfato de sódio (SDS) os efeitos de interferência de quatro compostos orgânicos em três relações molares SDS:composto diferentes foram estudados. As porcentagens recuperadas de SDS foram:

Organic compound	Molar ratios		
	1:1	1:2	1:3
2,3-naphthalene dicarboxylic acid	91	84	83
Tannic acid	103	104	104
Phenol	95	90	94
Diphenylamine	119	162	222

Determine se a recuperação de SDS depende da presença de composto orgânico e/ou das relações molares. Como os experimentos podem ser modificados para testar se efeitos de interações estão presentes?

4) O mercúrio é perdido de soluções armazenadas em frascos de polipropileno pela combinação com traços de estanho do polímero. A absorvância de soluções padrões aquosas de mercúrio armazenadas em tais frascos foi medida em dois níveis dos fatores:

Factor	Low	High
A – Agitation of flask	Absent	Present
C – Cleaning of flask	Once	Twice
T – Time of standing	1 hour	18 hours

Os seguintes resultados foram obtidos. Calcule os efeitos principais e as interações.

Combination of factor levels	Absorbance
1	0.099
a	0.084
c	0.097
t	0.076
ac	0.082
ta	0.049
tc	0.080
atc	0.051

5) Num experimento colaborativo inter-laboratórios a determinação de arsênio em carvão, amostras de carvão de três diferentes regiões foram mandadas para cada um de três

laboratórios. Cada um executou uma análise em duplicata de cada amostra, com os resultados mostrados abaixo (em  $\mu\text{g g}^{-1}$ )

Sample	Laboratory		
	1	2	3
A	5.1, 5.1	5.3, 5.4	5.3, 5.1
B	5.8, 5.4	5.4, 5.9	5.2, 5.5
C	6.5, 6.1	6.6, 6.7	6.5, 6.4

Verifique se não há interação inter-laboratórios significativa, e teste para diferenças significantes entre os laboratórios.

6) O pH ótimo para uma reação catalisada por enzima sabe-se estar entre 5 e 9. Determine os valores de pH nos quais os dois primeiros experimentos de um processo de otimização devem ser feitos nas seguintes circunstâncias:

(a) O pH ótimo precisa ser conhecido num intervalo máximo de 0,1 unidades de pH.

(b) Apenas seis experimentos podem ser feitos

Em (b) qual é o grau de otimização obtido?

7) Se a resposta no vértice 7 de um exemplo num simplex de otimização é 12, qual vértice deve ser rejeitado na formação de um novo simplex e quais as coordenadas deste novo vértice?