

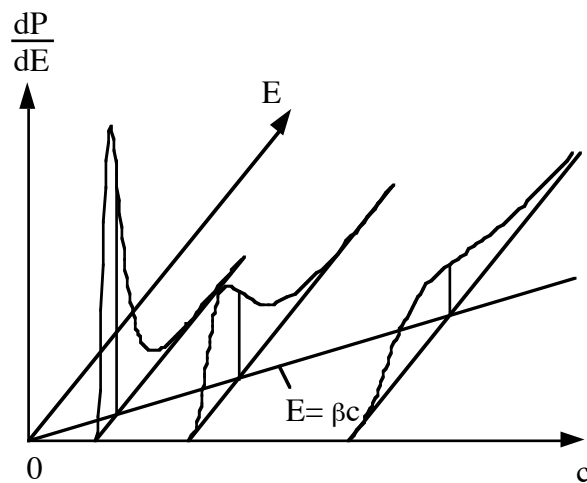
Bei der Produktion einer aromatischen Substanz wird die Konzentration des sich bildenden Materials in der Reaktionslösung photometrisch überwacht. Bei einer fixen Wellenlänge im UV-Bereich wird die Extinktion in einer Durchflusszelle aus Quarz kontinuierlich gemessen. Als Referenz dient eine gleiche Zelle, die mit Lösungsmittel gefüllt ist.

Für eine Einzelmessung wird das Signal 5 Sekunden integriert und der Mittelwert ausgegeben.

Das Verhalten des Messgeräts wird mit folgendem Modell beschrieben:

Proportionaler Zusammenhang zwischen Extinktion E und Konzentration c . Die Messwerte bei konstanter Konzentration sind lognormalverteilt. Die Standardabweichung der Verteilung ist proportional zur Konzentration.

Das bedeutet, dass die Größen $\ln(E_i/c_i)$ einer Normalverteilung mit konstantem Mittelwert und Standardabweichung folgen. Die Dichteverteilung lässt sich graphisch so darstellen:



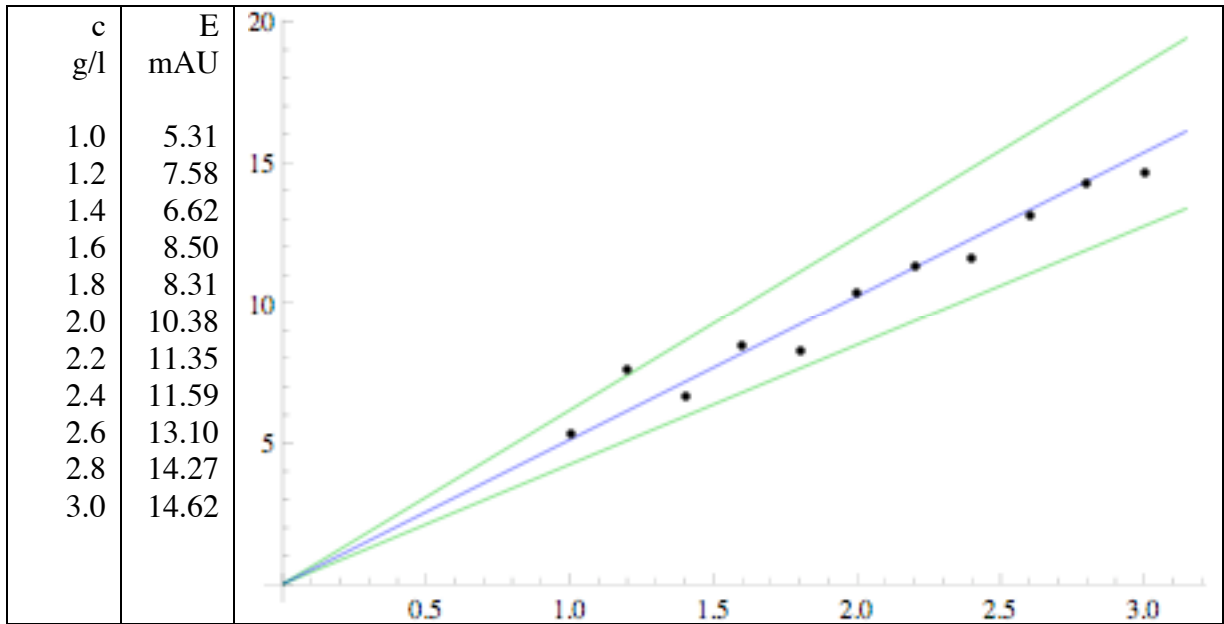
Damit die Kalibrationsgerade durch den Nullpunkt geht, wird zu Beginn der Messungen über eine Einzelmessung ein elektronischer Nullabgleich durchgeführt. Der so gemessene Wert wird also in der Folge von allen Messwerten abgezogen.

Mit Lösungen bekannter Konzentration wird das Messgerät kalibriert. Dabei werden folgende Ergebnisse erhalten:

Spalte 1: Konzentration c (g/l)

Spalte 2: Extinktion (mAU)

Graphik: Datenpunkte, Regressionsgerade, 95%-Fehlerschranke für Einzelwerte



Die maximale Konzentration am Ende der Reaktion beträgt ca. 2 g/l.

Beurteilen Sie die Beschreibung des Messgeräts kritisch. Wären Sie auch so vorgegangen?
Stellen Sie Unzulänglichkeiten des Modells fest? Was würden Sie gegebenenfalls ändern?

Glauben Sie, dass der Datenpunkt (1.2 g/l, E=7.58 mAU) als möglicher Ausreißer eine spezielle Behandlung erfordert?