

Tartalomjegyzék

1. Ismételt mérési adatok statisztikai jellemzése	1
2. Egyenes illesztése és statisztikai jellemzése táblázatkezelővel	4
3. Hibaterjedés számolása, használata egyenes illesztésével együtt	7
4. Tömbfüggvények hisztogramokhoz	11
5. Numerikus differenciálás és integrálás	12
6. Bevezetés a (wx)Maxima program használatába	14
7. Bevezetés a SciDavis/QtiPlot program használatába	19
Függelék	22
Információk a időjárási adatokról	22
A (szórás/hiba)terjedés képleteinek táblázata	23
Korrekciók	24

Megjegyzések:

- A feladatok egy részének megoldása megtalálható a feladat végén, kisbetűkkel, zárójelbe téve.
- A hivatkozások kinyomtatva nem látszanak, de rájuk kattintva a böngésző betölti a megfelelő oldalt. A bevezetéshez tartozó pdf fájlban a webcímek láthatóan is fel vannak tüntetve.
- Egyes feladatokhoz sok adat szükséges, amelyek szöveggént a **Extract_EOBS.zip** fájlban érhetőek el. Az adatok részletes leírása a függelék első alfejezetében (22. oldal) található. Azok a feladatok, amelyek ezen az adatbázison alapulnak, akkor oldhatók meg hatékonyan, ha a hallgató jól tudja használni a sorok rendezését megadott szempontok alapján, valamint a kevert statisztikai-logikai függvényeket (pl. ÁTLAGHA, SZUMHA, stb.). Arra is vigyázni kell, hogy nem minden városra teljes az adatbázis.

1. Ismételt mérési adatok statisztikai jellemzése

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- | | |
|--|--|
| <p>→ valószínűségi változó/érték fogalma</p> <p>→ átlag: $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$ (EXCEL-függvények: ÁTLAG, ÁTLAGA, ÁTLAGHA, ...)</p> <p>→ medián (EXCEL-függvény: MEDIÁN)</p> <p>→ eltérés négyzetösszeg: $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ (EXCEL-függvény: SQ)</p> <p>→ standard (néha tapasztalati) szórás:</p> | $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n}}$ (EXCEL-függvény: SZÓR.S) |
| <p>→ korrigált tapasztalati szórás</p> <p>→ ferdeség (EXCEL-függvény: FERDESÉG)</p> <p>→ csúcsosság, lapultság (EXCEL-függvény: CSÚCSOSSÁG)</p> <p>→ momentumok (1–4.) fogalma</p> | $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}}$ (EXCEL-függvény: SZÓR.M) |

10. → Gauss/normál-eloszlás/függvény tulajdonságai

11. → (in)szignifikancia próbák/tesztek
12. → mintafüggetlenség?!?!?

Feladatok:

1. „A matematikai statisztika elemei” c. online könyvecske 7. oldalán található adatokra (3.1. példa) számolja ki az órán tárgyalt statisztikai paraméterek értékeit!
2. A „Matematikai statisztika gyakorlatok” c. online könyv 4. fejezetének 4.1–4.3 gyakorlatait és 4.1–4.3 példáit oldják meg! A példákhoz tartozó, a könyvben megadott nevű adatsorok az [ezen a linken](#) letölthető archivált fájlban vannak a minta nevű alkönyvtárban. (Csak azokat a paramétereket kell kiszámolni, amiket az órán vettünk.)
3. Számolja ki a szegedi júliusi átlaghőmérsékletek átlagát és korrigált empirikus szórását! Ugyanezt tegye meg a januári adatokkal is! Szignifikáns-e az átlagok különbsége 68, 95, valamint 99,5 %-os megbízhatósági szinten? Próbálja meg értelmezni is az eredményeket!
(1920.1.1–2021.06.30 között: $22,1 \pm 3,3$ és $-0,9 \pm 4,9$ °C; 68 és 95 %-s szinten szignifikáns a különbség, 99,5 %-nál nem)
4. A 3. feladathoz hasonlóan, az ott számítandó értékeket számolja ki Hammerfest, Kiruna, Nizhny Novgorod, Copenhagen, Moscow, Mira, Madrid és Ierapetra esetében is! Válaszolja meg a következő kérdéseket:
 - a) Hasonlítsa össze és értelmezze az értékeket abból a szempontból, hogy mik a lényeges különbségek a szárazföld belsejében, illetve a vízparton fekvő városok között!
 - b) Egyértelmű összefüggés van-e a földrajzi szélesség és az átlaghőmérséklet között?
 - c) Ugyanez a tendencia jellemző-e a januári és a júliusi átlaghőmérsékletekre?
 - d) Igaz-e, hogy minden megbízhatósági szinten szignifikáns a különbség Hammerfest és Ierapetra között?
5. Számolja ki a szegeden júliusban mért időjárási adatok (minimális, átlag és maximális napi hőmérséklet, valamint légköri nyomás, esőmennyiség, napsugárzás teljesítmény és relatív páratartalom) átlagát, korrigált empirikus szórását, ferdeségét és csúcsosságát! Az adatok alapján válaszolja meg a következő kérdéseket:
 - a) A ferdeség és csúcsosság adatok alapján döntse el, hogy mely adatok írhatók le normál eloszlással jó közelítéssel és melyek nem.
 - b) Az adatok szórása összefüggésben van-e a ferdeséggel és a csúcsossággal?

Az 1920.01.01-2021.06.30. közötti adatok eredményei:		$T_{\min}/^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{átlag}}/^{\circ}\text{C}$	$T_{\max}/^{\circ}\text{C}$	p/hPa	h/mm	$P/(\text{W}/\text{m}^2)$	$R\%$
	ÁTLAG	15,7	22,1	28,3	1014,4	1,6	260,8	65,4
	SZÓR.M	2,8	3,3	4,0	3,9	4,2	56,0	10,8
	FERDESÉG	-0,18	0,02	-0,11	-0,26	4,25	-1,04	0,21
	CSÚCSOSSÁG	-0,27	-0,38	-0,27	-0,03	25,1	0,53	-0,40

6. Számolja ki a Stockholm-ban és Grussian-ben mért szélesebbesség adatok átlagát, ennek korrigált tapasztalati szórását, valamint a mért maximális szélesebbességet! Van-e szignifikáns különbség a mért adatokban 68 %-os megbízhatósági szinten? Lehet-e az átlagértékekből következtetni a maximális szélesebbesség értékekre?
(1950.1.1–1991.06.30 között: $(3,4 \pm 1,8)$ m/s, 26 m/s, valamint $(5,4 \pm 2,4)$ m/s, 19 m/s; nincs; nem)
7. Számolja ki az Amsterdam-ban és Madridban mért relatív páratartalom adatok átlagát, valamint ezek korrigált tapasztalati szórását! Van-e szignifikáns különbség a mért adatokban 68 %-os megbízhatósági szinten?
(1950.1.1–2021.06.30 között: $(83 \pm 8)\%$, valamint $(61 \pm 17)\%$; nincs)
8. Egy IUPAC adatbázisban a következő adatok szerepelnek a víziószorzat negatív logaritmusára különböző mérésekből 25 °C-on, azonos egyéb körülmények között:

NaCl oldataiban	13,75	13,72	13,74	13,70	13,69	
NaClO ₄ oldataiban	13,75	13,76	13,77	13,75	14,08	13,87

Szignifikáns-e az eltérés a kétfajta só oldatában a pK_w értékek között? A kérdést válaszolja meg 68, 95, valamint 99,5 %-os megbízhatósági szinten is!

9. Találja meg azt az EXCEL-függvényt, amely a normáeloszlást számolja, és készítsen ábrát az $-3 < x < 3$ tartományban!
10. Készítsen egy olyan EXCEL-munkafüzetet kitalált adatokkal, amely világosan megmutatja az ÁTLAG, ÁTLAGA és ÁTLAGHA függvények különbségeit!
11. Készítsen egy olyan EXCEL-munkafüzetet kitalált adatokkal, amely világosan megmutatja a FERDESÉG és a CSÚCSOSSÁG függvények függő változója előjelének értelmét!

12. (matematika kedvelőknek) Bizonyítsák be a $\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n} - \left(\frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \right)^2$ azonosságot, ahol

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}!$$

Mi lehet a gyakorlati jelentősége ennek az azonosságnak?

2. Egyenes illesztése és statisztikai jellemzése táblázatkezelővel

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- egyenesillesztés (lineáris paraméterbecslés, determinisztikus!)
lineáris regresszió)
képletek: **ezen a webcímen** elérhető fájl
megfelelő fejezete
- trendvonal az EXCEL-ben
- meredekség
- tengelymetszet
- korrelációs együttható (nem
- LIN.ILL EXCEL-függvény
- egyszerű függvény vs. tömbfüggvény a táblázatkezelőkben
- két modell: $y = a \cdot x + b$ valamint $y = a \cdot x$
- szabadsági fok
- standard hiba
- szórás ($= \sqrt{\text{szabadsági fok} \cdot \text{hiba}}$)

Feladatok:

13. Reprodukálják a kiadott linillbemutat.xlsx fájl munkalapját!
14. Házi feladat: olvassa el és próbálja megérteni a LIN.ILL függvény leírását a EXCEL súgójában a következő órára!
15. Egy színes anyag oldatainak abszorbanciája (A) az $A = \text{állandó} \cdot c$ összefüggés szerint függ a színes anyag moláris koncentrációjától. Mekkora lenne a $0,1 \text{ mol/dm}^3$ -es oldat abszorbanciája, ha a következő adatokat mértük:

$c \text{ (mmol/dm}^3\text{)}$	0,096	0,192	0,288	0,384	0,480	0,576	0,672	0,768	0,864	0,960
A	0,109	0,197	0,290	0,412	0,484	0,591	0,674	0,776	0,863	0,964

16. Egy amerikai kormányhivatal jelentése szerint, egy szál eladott cigaretta átlagos kátrány és nikotintartalma a következő módon változott 1968 és 1994 között:

év	kátrány (mg/szál)	nikotin (mg/szál)	év	kátrány (mg/szál)	nikotin (mg/szál)	év	kátrány (mg/szál)	nikotin (mg/szál)
1968	21,6	1,35	1977	16,8	1,12	1986	13,4	0,93
1969	20,7	1,38	1978	16,1	1,11	1987	13,3	0,94
1970	20,0	1,31	1979	15,1	1,07	1988	13,3	0,94
1971	20,2	1,32	1980	14,1	1,04	1989	13,1	0,96
1972	19,9	1,39	1981	13,2	0,92	1990	12,5	0,93
1973	19,3	1,32	1982	13,5	0,89	1991	12,6	0,94
1974	18,4	1,24	1983	13,4	0,88	1992	12,4	0,92
1975	18,6	1,21	1984	13,0	0,89	1993	12,4	0,90
1976	18,1	1,16	1985	13,0	0,95	1994	12,1	0,90

Másolja (vagy írja) be a fenti adatokat egy EXCEL munkalapra úgy, hogy az A oszlopban az évek, a B oszlopban a kátrány, valamint a C oszlopban a nikotin adatok legyenek! Van-e lineáris összefüggés a kátrány és a nikotintartalom között? Lineárisan változnak-e ezek az évek teltével? Készítse el az előbbi kérdésekhez tartozó három grafikont, trendvonalakkal megrajzolva, valamint a valóban lineáris összefüggés(ek) esetén a LIN.ILL függvénnyel is kiszámolva az illesztett egyenes paramétereit! Próbálja meg értelmezni az ábrákat és a számolt adatokat!

17. Egy elsőrendű reakció sebességi állandóját (k) megmértük különböző hőmérsékleteken. Az alábbi mérési adatokból határozzuk meg az Arrhenius-egyenlet $\left(k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}\right)$ alapján a reakció aktiválási energiáját (E_a) és a preexponenciális együttható (A) értékét! A számítást a fenti egyenlet linearizált alakja $\left(\ln k = -\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln A\right)$ segítségével végezzük, vagyis az abszolút hőmérséklet reciprokának függvényében ábrázolva az adott hőmérsékleten érvényes sebességi

együtthatók természetes alapú logaritmusát, az illesztett egyenes meredekségéből az aktiválási energia, tengelymetszetéből pedig a preexponenciális tényező számítható. Az egyenes illesztése során a nyilvánvalóan kiugró pontokat hagyjuk el! Készítsünk ábrát is, amely a kiugró ponto(ka)t is tartalmazza! $R=8,314 \text{ J/mol/K}$ és $0^\circ\text{C}=273,15 \text{ K}$. Az adatok:

$T/^\circ\text{C}$	k/s^{-1}	T/K	T^{-1}/K^{-1}	$\ln(k/\text{s}^{-1})$
2,5	$3,5 \times 10^{+2}$			
7,5	$4,2 \times 10^{+2}$			
13,8	$7,1 \times 10^{+2}$			
16,9	$1,1 \times 10^{+3}$			
22,0	$1,3 \times 10^{+3}$			
28,8	$2,8 \times 10^{+3}$			
32,7	$9,8 \times 10^{+3}$			
38,7	$4,4 \times 10^{+3}$			
42,6	$5,6 \times 10^{+3}$			
47,4	$7,7 \times 10^{+3}$			

18. A Daniell-elem elektromotoros erejét a Nernst-egyenlet

$$E_{ME} = (E_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}}^0 - E_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}}^0) + \frac{RT}{2F} \ln \frac{[\text{Cu}^{2+}]}{[\text{Zn}^{2+}]}$$

speciális formája adja meg. A

$[\text{Zn}^{2+}]/\text{M}$	$[\text{Cu}^{2+}]/\text{M}$	mért E_{ME}/V értékek				
1,00	1,00	1,0967	1,0905	1,0908	1,0946	1,0967
0,500	1,00	1,1050	1,1007	1,1085	1,1015	1,1050
0,333	1,00	1,1077	1,1047	1,1113	1,1051	1,1077
0,250	1,00	1,1035	1,1083	1,1105	1,1075	1,1035
1,00	1,00	1,0981	1,0950	1,0982	1,0990	1,0971
1,00	0,500	1,0889	1,0725	1,0821	1,0990	1,0864
1,00	0,250	1,0818	1,0605	1,0775	1,0662	1,0652
1,00	0,125	1,0698	1,0525	1,0655	1,0530	1,0700

táblázat az általános kémiai laboratóriumi gyakorlatok során egy csoport által mért összes adatot tartalmazza 23°C hőmérsékleten. (a) Határozzák meg a standard cellapotenciál értékét a *szórásával* együtt, egyenes illesztésével, a tengelymetszetből háromféle módon: először csak az állandó $[\text{Zn}^{2+}]$ -nál mért adatokat vegyék figyelembe, másodsor csak az állandó $[\text{Cu}^{2+}]$ -nál mért adatokkal számoljanak, végül minden adatot vegyenek figyelembe úgy, hogy a két fémion koncentrációinak arányából számolják a független változó értékét! (b) A meredekség értéke és szórása alapján döntsék el, hogy a meredekség szignifikánsan különbözik-e az elméleti $RT/(2F)$ értéktől 68, 95 és 99,5 %-os megbízhatósági szinten!

A számolások során ne átlagoljanak adatokat, de a kiugró értékeket hagyják ki az egyenes illesztéséből!

19. Egy anyag elsőrendű kinetika szerint bomlik, miközben gáz halmazállapotú termék képződik 1:1 sztöchiometriai arányban. A fejlődő gáz térfogatát mérve, a következő adatokat kapták három különböző hőmérsékleten:

T (°C)	37,7				42,1				46,1			
V_{∞} (cm ³)	36,3				35,3				38,0			
	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)
	0	0,0	1041	8,5	0	0,0	605	8,5	0	0,0	295	8,5
	34	0,5	1103	9,0	47	0,5	646	9,0	13	0,5	309	9,0
	77	1,0	1175	9,5	81	1,0	684	9,5	31	1,0	349	10,0
	125	1,5	1246	10,0	116	1,5	720	10,0	40	1,5	397	11,0
	204	2,0	1323	10,5	148	2,0	768	10,5	60	2,0	444	12,0
	268	2,5	1470	11,5	185	2,5	813	11,0	79	2,5	490	13,0
	328	3,0	1646	12,5	210	3,0	909	12,0	94	3,0	541	14,0
	393	3,5	1796	13,5	245	3,5	997	13,0	105	3,5	582	15,0
	459	4,0	1966	14,5	275	4,0	1101	14,0	122	4,0	642	16,0
	522	4,5	2113	15,5	309	4,5	1207	15,0	144	4,5	692	17,0
	583	5,0	2251	16,5	351	5,0	1318	16,0	160	5,0	752	18,0
	649	5,5	2617	19,0	392	5,5	1424	17,0	178	5,5	820	19,0
	712	6,0			416	6,0	1536	18,0	196	6,0	885	20,0
	784	6,5			449	6,5	1663	19,0	214	6,5	958	21,0
	846	7,0			487	7,0	1799	20,0	232	7,0	1034	22,0
	911	7,5			534	7,5			253	7,5	1110	23,0
	980	8,0			568	8,0			271	8,0	1200	24,0

Az elsőrendű kinetikából következik, hogy a $\ln(V_{\infty} - V) = \ln(V_{\infty} - V_0) - k \cdot t$ linearizált összefüggés írja le az adatokat.

(a) Egyenes illesztésével határozzák meg az elsőrendű sebességi állandó értékét a szórásával együtt, külön-külön mind a három hőmérsékleten!

(b) A számolt sebességi állandók és a megadott hőmérsékletek felhasználásával, az Arrhenius összefüggés alapján határozzák meg a reakció aktiválási energiáját, valamint annak szórását!

(c) Számolják ki, hogy a különböző hőmérsékleteken melyik időpillanatban éri el a fejlődő gáz térfogata a 30,0 cm³-t! Az időpont szórását is adják meg!

20. Ábrázolják az 1950–2019 között júliusban mért szegedi átlaghőmérsékleteket az évszám függvényében és az adatokra illesszenek egyenest! Igazolható-e az illesztett egyenes paramétereivel, hogy 70 év alatt az átlaghőmérséklet több, mint egy °C-kal emelkedett?
21. A 20. feladatot végezzék el az 1985–2019 közötti adatokkal is. A két egyenesillesztést összehasonlítva igazolható-e az az állítás, hogy Szegeden a hőmérséklet emelkedése gyorsul.
22. A 20. és 21. feladatokat hajtsák végre az egész évi adatokkal is. A kapott eredmények ugyanazt sugallják-e, mint a júliusi adatok, vagy van szignifikáns különbség az eredményekben?
23. A 20–22. feladatokat más városok adataival is végezzék el. Létezik-e jelentős különbség a hőmérséklet-emelkedés szempontjából az európai városok között?

3. Hibaterjedés számolása, használata egyenes illesztésével együtt

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

→ szórás- és/vagy hibaterjedés számolása

képletek: a függelék második alfejezetében található táblázat (23. oldal)

Feladatok:

24. A fentebb megadott függelék első táblázatának példáit a szórás megadására kézzel vagy számológéppel számolják végig!
25. Számítsák ki a következő táblázat egy-egy cellájában megadott kifejezések értékeit és azok szórását, majd hasonlítsák össze az adott cellában lévő műveletek eredményeit és értelmezzék a változásokat!

$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7,000 \pm 0,001)}$	$(2,000 \pm 0,001)^6$	$\lg(4,000 \pm 0,004) - \frac{1,000 \pm 0,001}{(2,000 \pm 0,002)^2}$
$\ln((2,00 \pm 0,02) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7,00 \pm 0,01)}$	$(2,00 \pm 0,01)^6$	$\lg(4,00 \pm 0,04) - \frac{1,00 \pm 0,01}{(2,00 \pm 0,02)^2}$
$\ln((2,0 \pm 0,2) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7,0 \pm 0,1)}$	$(2,0 \pm 0,1)^6$	$\lg(4,0 \pm 0,4) - \frac{1,0 \pm 0,1}{(2,0 \pm 0,2)^2}$
$\ln((2 \pm 2) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7 \pm 1)}$	$(2 \pm 1)^6$	$\lg(4 \pm 4) - \frac{1 \pm 1}{(2 \pm 2)^2}$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^9)$	$\frac{2}{2,000 \pm 0,002}$	$\frac{x \cdot \arctg(0,1 \pm 0,01)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^*$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^6)$	$\frac{2}{2,00 \pm 0,02}$	$\frac{x \cdot \arctg(1 \pm 0,1)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^{\dagger}$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^3)$	$\frac{2}{2,0 \pm 0,2}$	$\frac{x \cdot \arctg(10 \pm 1)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^{\ddagger}$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^0)$	$\frac{2}{2 \pm 2}$	$\frac{x \cdot \arctg(100 \pm 10)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^{\S}$

(az első és ötödik sor eredményei balról jobbra, valamint a nyolcadik sor harmadik eredménye: $28,324 \pm 0,001$, $(1,0000 \pm 0,0046) \times 10^{-14}$, $64,00 \pm 0,19$, $0,35206 \pm 0,00071$, valamint

$21,416 \pm 0,001$, $1,000 \pm 0,001$, $0,0522 \pm 0,0052$ (vagy $2,99^\circ \pm 0,30^\circ$), $1,000000 \pm 0,000064$) és $0,82 \pm 0,52$ (vagy $46^\circ \pm 30^\circ$)

26. A 3. és 4. feladatok néhány város júliusi és januári átlaghőmérsékletét, valamint azok korrigált empirikus szórásait számoltatták ki. A hibaterjedés szabályainak megfelelően számolják ki a városok ezen két hónap átlaghőmérsékleteinek különbségét, valamint azok szórását! A kiszámolt adatok alapján válaszolják meg a következő kérdéseket:

a) Van-e összefüggés az átlaghőmérsékletek különbsége, valamint a városok éghajlata (mennyire óceáni/szárazföldi) között? Ha igen, akkor mi ez az összefüggés?

b) A hőmérséklet-különbségek szórása korrelál-e a városok éghajlatával?

(néhány $\Delta T/^\circ\text{C}$ érték: $22,7 \pm 5,8$ (Szeged), $27,0 \pm 7,9$ (Moscow) és $14,9 \pm 3,4$ (Ierapetra))

27. Mekkora a hidroxidion koncentrációja, valamint annak szórása egy $(0,00103 \pm 0,00002)$ M sósav oldatban, ha a vízionszorzat negatív logaritmus $pK_v = 13,76 \pm 0,03$ az adott hőmérsékleten.

$((1,7 \pm 0,1) \times 10^{-11} \text{ M})$

28. A 8. feladat számolt pK_v adataiból és szórásaikból számolják ki a K_v adatokat és szórásaikat!

29. A 15. feladatban mekkora a $0,1 \text{ mol/dm}^3$ -es oldat abszorbanciájának szórása?

30. A 17. feladatban illesztett egyenes meredekségéből, tengelymetszetéből, valamint ezek szórásaiból számolják ki az aktiválási energia (E_a) és a preexponenciális együttható szórásait!

31. Az oxálsav első (K_1^d) és második (K_2^d) savi disszociációs állandóját pH-metriás titrálásokból meghatározták, és a következő eredményeket kapták: $pK_1^d=0,92\pm0,03$, valamint $pK_2^d=3,57\pm0,05$ ($pX=-\lg X$). (a) Határozzák meg K_1^d és K_2^d értékeit a szórásaikkal együtt, vigyázva arra, hogy megfelelő számú értékes jegye(ke)t adjanak meg! (b) Számolják ki a stabilitási szorzatok ($\beta_1 = 1/K_2^d$ és $\beta_2 = 1/(K_1^d \cdot K_2^d)$), valamint a tizes alapú logaritmusaik számértékét és szórását!
32. A malonsav első és második savi disszociációs állandóját pH-metriás titrálásokból meghatározták, és a következő eredményeket kapták: $pK_1^d=2,573\pm0,011$, valamint $pK_2^d=4,958\pm0,006$. (a) Határozzák meg K_1^d és K_2^d értékeit a szórásaikkal együtt, vigyázva arra, hogy megfelelő számú értékes jegye(ke)t adjanak meg! (b) Számolják ki a stabilitási szorzatok ($\beta_1 = 1/K_2^d$ és $\beta_2 = 1/(K_1^d \cdot K_2^d)$), valamint a tizes alapú logaritmusaik számértékét és szórását! (c) Az előző pontban leírt számolást végezzék el legalább három különböző számolási sorrendben, és győződjenek meg arról, hogy a végeredményként kapott szórás független a számolási sorrendtől!
33. Egy elsőrendű reakciót ($A \xrightarrow{k} C$, $[A]_t = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}$) hétszer megismételve, mindig a 120-adik másodpercben a reakciót befagyasztva, majd mintát véve meghatároztuk a reaktáns koncentrációját. A következő értékeket kaptuk: 0,0289, 0,0278, 0,0280, 0,0286, 0,0285, 0,0291 és 0,0288 mol/dm³. A kezdeti koncentráció minden esetben 0,0671 mol/dm³ volt. Számolják ki a reakció sebességi állandóját és szórását úgy, hogy az ismételt koncentráció adatok korrigált empirikus szórását használják a szórásterjedés számításának kezdőértékeként!
34. Egy malachitzöld indikátor oldat koncentrációját szeretnénk meghatározni. Ennek érdekében készítettünk egy ismert koncentrációjú oldatsorozatot és 560 nm-es hullámhosszon megmértük az oldatok abszorbanciáit (A):

c (mol/dm ³)	A	c (mol/dm ³)	A	c (mol/dm ³)	A
$2,558 \times 10^{-6}$	0,028	$2,046 \times 10^{-5}$	0,273	$3,837 \times 10^{-5}$	0,550
$5,116 \times 10^{-6}$	0,064	$2,302 \times 10^{-5}$	0,319	$4,092 \times 10^{-5}$	0,581
$7,673 \times 10^{-6}$	0,097	$2,558 \times 10^{-5}$	0,358	$4,348 \times 10^{-5}$	0,609
$1,023 \times 10^{-5}$	0,130	$2,814 \times 10^{-5}$	0,400	$4,860 \times 10^{-5}$	0,674
$1,279 \times 10^{-5}$	0,160	$3,069 \times 10^{-5}$	0,444	$5,371 \times 10^{-5}$	0,738
$1,535 \times 10^{-5}$	0,187	$3,325 \times 10^{-5}$	0,484	$5,883 \times 10^{-5}$	0,801
$1,790 \times 10^{-5}$	0,245	$3,581 \times 10^{-5}$	0,511	$6,394 \times 10^{-5}$	0,875

Megmértük az ismeretlen koncentrációjú oldat abszorbanciáját is, ami 0,574-nek adódott. A Lambert-Beer törvény értelmében ($A = \varepsilon \cdot l \cdot c$, ahol ε az egységnyi koncentrációjú oldat abszorbanciája és l az optikai úthossz) a koncentráció egyenesen arányos az abszorbanciával. Számolják ki az ismeretlen oldat koncentrációját, és annak szórását!

35. Az általános kémiai laboratóriumi gyakorlaton 10 hallgató a tiokénsav savas közegű bomlásának hőmérsékletfüggését tanulmányozta. Az oldatok opalizálásának kezdetéhez szükséges időt (Δt) mérték állandó nátrium-tioszulfát (c), valamint állandó sav koncentrációnál, de különböző hőmérsékleteken. A következő adatokat kapták:

T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)
12	284	12	340	0	494	0	560	11	337
22,5	177	22,5	220	20	190	23	149	24	173
32	122	32	125	30	133	30	102	31,8	99
41	96	42	75	40	69	40	88	41	73
51	66	52	60	50	60	50	64	50	71
11	293	11	293	0,5	494	10,5	315	10	358
22,5	170	22,5	170	23,5	190	24,2	181	24	192
33	177	33	117	29	133	30,8	115	33	90
41,5	81	41,5	81	42	69	40,6	79	43	70
52	46	52	46	50	60	50,3	48	52	45

Feltételezve, hogy a bomlás elsőrendű kinetika szerint zajlik, a reakció sebességi állandójának (k) hőmérsékletfüggését az Arrhenius-egyenlet ($k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}$) adja meg, amelyben a jelölések a reakció aktiválási energiáját (E_a), a preexponenciális együttható értékét (A), az abszolút hőmérsékletet (T) és az egyetemes gázállandót (R) jelentik. Ha feltételezzük, hogy a tiokénsav koncentrációjának változása (Δc) minden kísérletben azonos az opalizálás észleléséig, akkor a sebességi egyenletből a következő közelítő egyenlet adható meg: $\frac{\Delta c}{\Delta t} = -k \cdot c$. Ebből k -t behelyettesítve az Arrhenius-egyenletbe, átalakítás után a

$$\ln \Delta t = \ln \left(-\frac{\Delta c}{c \cdot A} \right) + \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T}$$

egyenlethez jutunk, vagyis az $\ln \Delta t$ -t az $1/T$ függvényében ábrázolva egy egyenest kapunk, amely meredekségének R -szerese adja meg az aktiválási energia értékét. A feladat ennek meghatározása a szórásával együtt. Az egyenes illesztése során a nyilvánvalóan kiugró pontokat hagyjuk el! Készítsünk ábrát is, amely a kiugró ponto(ka)t is tartalmazza! $R=8,314 \text{ J/mol/K}$ és $0^\circ\text{C}=273,15 \text{ K}$.

36. Egy összetettebb, „életszagúbb” feladat. Egy kristályvizet tartalmazó kálium szulfidot tartalmazó vegyszeres üveg feliratán olvashatatlan a kristályvíz sztöchiometriai száma, ezt kell meghatározni (vagyis x -et az $\text{K}_2\text{S} \cdot x \text{H}_2\text{O}$ összetételben). Az üvegből eltérő tömegű mintákat (w) mindig pontosan $m_{v0}=50,00 \text{ g}$ vízben oldottak, majd az oldatok fagyáspontját megmérve a következő kísérleti adatokat kapták:

w/g	1.02	1.52	1.99	2.46	3.01	4.00	5.00	5.97	7.11	7.99
$\Delta T/^\circ\text{C}$	-0.57	-0.83	-1.09	-1.33	-1.64	-2.17	-2.65	-3.16	-3.72	-4.15

A táblázatban megadott hőmérsékleti adatok jele azért ΔT , mert ezek valójában a fagyáspontcsökkenés értékei, hiszen a víz fagyáspontja 0°C . A fagyáspont csökkenés számolható is a Blagen törvény alapján:

$$\Delta T = -i \cdot K_F \cdot m_B = -i \cdot K_F \cdot \frac{\frac{w}{M_s + x \cdot M_v}}{\left(m_{v0} + \frac{x \cdot M_v}{M_s + x \cdot M_v} \cdot w \right) / 1000 \text{ g/kg}}, \text{ ahol} \quad (1)$$

i egy molekula oldott anyagból származó ionok száma disszociáció esetén (értéke 3 a K_2S -re), K_F az oldószer krioszkópos állandója, vagyis a molális fagyáspontcsökkenése (értéke a vízre $1,86^\circ\text{C/mol} \cdot \text{kg}$),

m_B az oldat Raoult-koncentrációja (vagyis molalitása) mol/kg mértékegységben megadva, M_s a vízmentes kálium szulfid relatív moláris tömege (110,26), valamint

M_v a víz relatív moláris tömege (18,02).

A konkrét számértékeket az (1) egyenletbe helyettesítve, majd egyszerűsítve a

$$\Delta T = \frac{-5580}{\left(\frac{5513 + x \cdot 901}{w} + x \cdot 18,02\right)} \quad (2)$$

összefüggéshez jutunk, ami könnyen átalakítható linearizált formába:

$$\frac{1}{\Delta T} = -\frac{5513 + 901 \cdot x}{5580} \cdot \frac{1}{w} - \frac{18,02 \cdot x}{5580} \quad (3)$$

A (3) egyenlet alapján, ha a fagyáspontcsökkenés értékeinek a reciprokát ábrázoljuk a bemért sótömeg reciprokának a függvényében, akkor egy egyenest kapunk, amelynek a meredeksége az egyszer aláhúzott rész az egyenletben, míg a tengelymetszete a kétszer aláhúzott rész. Ezek szerint az x értéke akár a meredekségből, akár a tengelymetszetből meghatározható.

a) Illesszenek egyenest a LIN.ILL tömbfüggvény segítségével a (3) összefüggés alapján! Határozzák meg a meredekség és a tengelymetszet értékét, valamint a szórásaikat!

(meredekség= $-1,784 \pm 0,017$ és tengelymetszet= $-0,0193 \pm 0,0080$)

b) Készítsék el az egyenesillesztéshez tartozó ábrát is, a műszaki-tudományos ábrakészítés szabályainak megfelelően!

c) Mind a meredekségből, mind a tengelymetszetből számítsák ki x értékét és szórását!

(meredekségből: $x=4,93 \pm 0,11$, valamint tengelymetszetből: $x=6,0 \pm 2,5$)

d) A készített ábra segítségével magyarázzák meg, miért lehet x értékét sokkal pontosabban meghatározni a meredekségből, mint a tengelymetszetből? Az ábrát nézve gondolják meg, hogy milyen hatása van annak akár a meredekségre, akár a tengelymetszetre, ha egy-egy mérési pontot a kísérleti bizonytalanságon belül megváltoztatunk?

e) A meredekségből kapott x -érték és annak szórása alapján döntsék el, hogy 68 %-os megbízhatósági szinten állíthatjuk-e, hogy a kristályvizek száma nem lehet egész szám?

Megjegyzés: Valaki gondolhatná, hogy a fenti eljárás túl bonyolult, egy egyszerű szárazra párlás jobb módszer lenne. Ez erre a vegyületre azonban nem igaz, mert magasabb hőmérsékleten a kálium szulfid reagál a vízzel a $K_2S + 2 H_2O = 2 KOH + H_2S$ egyenlet szerint.

4. Tömbfüggvények hisztogramokhoz

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- hisztogram
- GYAKORISÁG EXCEL-függvény
- Solver és Analysis ToolPak bővítmények (2010 vs. 2016, ZH-ban nem kell)
- Angol/magyar függvénynevek az EXCEL-ban ((Open/Libre)Office-ban is) pl. [ezen a webcímen](#)

Feladat:

37. Az mosn0020.csv fájl adataira úgy is alkalmazzák a GYAKORISÁG függvényt, hogy nem hagyják el az $x=-2-7$ tartomány adatait. Hasonlítsák össze az így kapott hisztogramot az órán bemutatottal, és értelmezzék a különbségeket!
38. A GYAKORISÁG függvény használatával számolja ki adott átlaghőmérsékletű napok gyakoriságát a $-38,5-32,0^{\circ}\text{C}$ tartományban, $0,5^{\circ}\text{C}$ szélességű tartományokban! A számolásokat a januári és júliusi adatokra végezze el Szeged, Hammerfest és Nizhny Novgorod esetében. A kapott gyakorisági adatokból készítsen hisztogramokat, amelyek világosan mutatják a különböző éghajlatú városok közötti eltéréseket. Mennyire vannak összhangban az elkészített ábrák a korábban számolt (5. és 26. feladatok) statisztikai jellemzőkkel (átlag, szórás, ferdeség, csúcsosság)?
39. A 38. feladathoz hasonló módon, készítsen hisztogramokat Szeged januári és júliusi (1) légköri nyomására (tartomány: 984–1047 hPa, felosztás 1 hPa-onként), (2) csapadék mennyiségére (tartomány: 0,5–48,5 mm, felosztás 0,5 mm-enként) és (3) napsugárzás teljesítményére (tartomány: 0–400 W/m², felosztás 5 W/m²-enként). Mennyire vannak összhangban az elkészített ábrák az 5. feladatban számolt statisztikai jellemzőkkel (átlag, szórás, ferdeség, csúcsosság)?
40. A 6. feladathoz kapcsolódóan, számolja ki a GYAKORISÁG függvény használatával az adott szélsőbességgű napok gyakoriságát Stockholm-ban és Grussian-ben, a 0–27 m/s tartományban, 1 m/s szélességű tartományokban! A kapott gyakorisági adatokból készítsen egy ábrát, amely mindkét hisztogramot mutatja. Az ábra elemzésével válaszolja meg, hogy mi bizonyítja, Grussian sokkal szelesebb hely, mint Stockholm, annak ellenére, hogy az átlagok különbsége nem szignifikáns.
41. A 7. feladathoz kapcsolódóan, számolja ki a GYAKORISÁG függvény használatával az adott relatív páratartalmú napok gyakoriságát Amsterdam-ban és Madridban, a 0–100 % tartományban, 1 % szélességű tartományokban! A kapott gyakorisági adatokból készítsen egy ábrát, amely mindkét hisztogramot mutatja. Az ábra elemzésével válaszolja meg, hogy mi bizonyítja, Madrid sokkal szárazabb hely, mint Amsterdam, annak ellenére, hogy az átlagok különbsége nem szignifikáns.

5. Numerikus differenciálás és integrálás

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- ^{1.} analitikus *vs.* numerikus differenciálás és integrálás
- ^{2.} differenciálhányados *vs.* differenciahányados
- ^{3.} kétpontos differenciálás
- ^{4.} többpontos differenciálás
- ^{5.} integrálás trapézsabállyal
- ^{6.} integrálás Romberg módszerével (nem kell a ZH-ban)
- ^{7.} képletekben Δx általában állandó (ekvidisztáns beosztás)
- ^{8.} nem stabil (pl. numerikus differenciálás) és stabil (pl. numerikus integrálás) számítási eljárások
- ^{9.} összefoglaló: **ezen a webcímen** elérhető fájl 2–3. oldalai
- ^{10.} simító spline-ok (nem kell a ZH-ban)

Feladatok:

42. Az arzenit és hexciano-ferrát(III) ionok közötti reakcióban az utóbbi reaktáns koncentrációja az alábbi táblázat szerint változott $[\text{AsO}_3^{3-}]_0 = 0,0364 \text{ M}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}]_0 = 0,001 \text{ M}$ és $[\text{NaOH}]_0 = 0,182 \text{ M}$ kiindulási koncentrációk mellett egy hallgatói mérésben:

$t \text{ (s)}$	$c \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	$t \text{ (s)}$	$c \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	$t \text{ (s)}$	$c \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	$t \text{ (s)}$	$c \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	$t \text{ (s)}$	$c \text{ (mol/dm}^3\text{)}$
0	$1,00 \times 10^{-3}$	70	$5,24 \times 10^{-4}$	180	$1,88 \times 10^{-4}$	280	$7,55 \times 10^{-5}$	420	$1,86 \times 10^{-5}$
30	$7,57 \times 10^{-4}$	80	$4,78 \times 10^{-4}$	200	$1,57 \times 10^{-4}$	300	$6,18 \times 10^{-5}$	450	$1,37 \times 10^{-5}$
40	$6,91 \times 10^{-4}$	100	$3,97 \times 10^{-4}$	220	$1,29 \times 10^{-4}$	320	$5,40 \times 10^{-5}$	480	$1,27 \times 10^{-5}$
50	$6,25 \times 10^{-4}$	120	$3,30 \times 10^{-4}$	240	$1,09 \times 10^{-4}$	360	$3,53 \times 10^{-5}$	540	$7,85 \times 10^{-6}$
60	$5,75 \times 10^{-4}$	150	$2,49 \times 10^{-4}$	260	$8,83 \times 10^{-5}$	380	$2,84 \times 10^{-5}$	600	$5,89 \times 10^{-6}$

Pszeudo-elsőrendű kinetikát feltételezve az adatokat a $0,001000 \cdot e^{-0,00926 \cdot t}$ egyenlet írja le.

- a) A mérési időpontokban számítsák ki az illesztett görbe analitikus deriváltjának a használatával a differenciálhányadosok számértékét! Jelölje ezeket az értékeket l_i az i -edik időpontban.
- b) Számítsák ki kétpontos numerikus differenciálással a differenciahányadosok értékét a mért időpontoknál; az adott időponthoz tartozó, valamint az ettől jobbra lévő adatpárokat felhasználva (az utolsó pontban nyilván nem kell számolni)! Jelölje ezeket az értékeket a_i az i -edik időpontban.
- c) Számítsák ki (kvázi)hárompontos numerikus differenciálással a differenciahányados értékét a mért időpontoknál; az adott időponttól balra, valamint a jobbra lévő adatpárokat felhasználva (az első és utolsó pontban nyilván nem kell számolni)! A továbbiakban ezeket is a_i -vel jelöljük az i -edik időpontban.
- d) A differencia- és differenciálhányadosok eltérését jellemezzék a következő módon:

- Számolják ki a $\frac{100}{25} \sum_{i=1}^{25} \left| \frac{a_i - l_i}{l_i} \right|$ kifejezés számértékét mind a **b)**, mind a **c)** pontokban számolt differenciahányadosokkal. Ez a kifejezés megadja a differencia- és differenciálhányadosok átlagos relatív eltérését százalékban kifejezve.
- A két számolt adat összehasonlításával adják, meg melyik a pontosabb módszer numerikus differenciálásra.
- A két számolt adat abszolút értékének értelmezésével magyarázzák meg, miért nem stabil eljárás a numerikus differenciálás!

- e) A mérési időpontokban számítsák ki az illesztett görbe analitikus határozott integráljának használatával a határozott integrálok számértékét! Jelölje ezeket az értékeket p_i az i -edik időpontban.
- f) Számítsák ki a határozott integrál számértékét a mért időpontoknál a trapézszabály használva! Jelölje ezeket az értékeket t_i az i -edik időpontban.
- g) Hasonlóan a [d\)](#) pontban leírt módhoz, számolják az átlagos relatív eltérést százalékban, csak az l_i helyett a p_i , illetve az a_i helyett a t_i értékeket használják. Ezt a értéket hasonlítva a differenciálásnál kapottakkal, magyarázzák meg, miért stabil eljárás a numerikus integrálás!

6. Bevezetés a (wx)Maxima program használatába

Telepítés, leírások:

Windows: [Ezen a webcímen](#) érhetők el a telepítő programok. Érdemes az SBCL vagy GCL fordítóval előállított programokat használni, ezek gyorsabbak a többinél. Jelenleg (2023.03.28) az 5.46.0-ás verziószámú változatot érdemes használni. Régi, lassú gépeken az 5.28.0-ás verziószámú változatot érdemes használni.

Linux: A legtöbb disztribúció tartalmazza a (wx)Maxima csomag nem túl régi változatát, így a legkényelmesebb a csomagkezelővel (package manager) telepíteni. Újabb változatokat vagy [ezen a webcímen](#) keresztül, vagy [Blahota István ppa-ján](#) keresztül lehet telepíteni Ubuntura és sok más Linux változatra.

Mac OS X: A telepítő csomagok [ezen a webcímen](#) keresztül érhetők el.

Android: Play Áruház (ez „csak” a Maximát telepíti, a grafikus felület nem a (wx)Maxima), csak hasonló.

Font a matematikai képletekhez: A [jsMath fontcsalád](#)ot érdemes telepíteni a szebb matematikai képletekhez. Az újabb változatok ezt automatikusan elvégzik, a régebbieknél kell csak az előbbi honlapot használni a letöltéshez.

Segédanyagok:

- A kurzuson szükséges tudás összegezve van a maxima_intro.wmxm fájlban. Az ebben szereplő parancsokat, függvényeket, változókat, jelöléseket kell ismerni és használni a ZH-ban. Konkrétan:
(parancs)függvények: assume, bfloat, charat, charlist, define, diff, draw2d, bf_find_root, cos, find_root, float, integrate, kill, lhs, limit, load, log, plot2d, rhs, romberg, sconcat, sin, solve, sqrt, string, tan, taylor, wxdraw2d, wxplot2d,
rendszer változók: fpprec, fpprintprec, functions, maxima_tempdir, ratprint, values,
jelölések: ;, \$, %, %in (n egy egész szám), %on (n egy egész szám), %pi, %e, %i, :, =, :=, a [] zárójelpár, a "" idézőjelpár,
- [Összegző weboldal](#), ami összegyűjti az elérhető dokumentációkat mind a (wx)Maxima-val, mind a Maxima-val kapcsolatban.
- [Maxima by Example](#) című könyv PDF formában.
- [Összegző weboldal](#), ami összegyűjti az elérhető dokumentációkat a Maxima-val kapcsolatban.
- [Magyar nyelvű bevezető jegyzet](#) a (wx)Maxima 5.28-as verziójának használatába, Blahota István tollából.

Feladatok (Megjegyzések: (1) Sok feladat az első féléves matematika szeminárium anyagából lett kölcsönözve. (2) Minden feladatot a (wx)Maxima programmal kell megoldani. (3)) Sok feladathoz kellenek relatív atomtömegek és egyéb állandók, ezek a fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlatok függelékében találhatók meg. A megadott végeredmények 0,01 pontosságú atomtömegekkel lettek kiszámolva.:

43. 1,5 kg 90 %-os alkoholt mennyi vízzel hígíthatunk 50 %-osra? (1,2 kg víz)
44. Van 2,5 kg 5 %-os oldatunk. Mennyi 20 %-os oldatot kell hozzáadni, hogy 12 %-osat kapjunk? (2,1875 kg oldat)
45. Mennyi 10 %-os és 25 %-os oldatot kell összekeverni, hogy 2 kg 20 %-os oldatot kapjunk? (2/3 kg 10 %-os és 4/3 kg 25 %-os oldat)
46. Egy karbonsav 11,0 mólszázalékos vizes oldata 24,0 tömegszázalékos. Melyik ez a karbonsav?
47. Hány gramm ammónium-nitrátot kell 100,0 gramm ammónium-szulfáttal összekeverni, hogy a

- kapott keverék 24,0 tömegszázalékos legyen nitrogénre nézve? (25,46 g ammónium-nitrát)
48. Hány gramm As_2S_3 -ot tartalmaz 100,00 g $\text{As}_2\text{S}_3/\text{As}_2\text{S}_5$ keverék, ha a 100,00 g anyag mind arzénre, mind kénre nézve 50,00–50,00 tömeg%-os? $A_r(\text{As})=74,92$ és $A_r(\text{S})=32,07$. (13,45 g arzén-trisulfid)
49. A nátrium-nitrát oldáshője 20,81 kJ/mol. Mekkora hőmérsékletre hűl le 1,00 dm³, 25,0 °C-os, 0,997 g/cm³ sűrűségű víz, ha 50,0 g 25,0 °C-os NaNO_3 -ot oldunk fel benne? Az oldat közepes fajhője 4,193 J/g/K. (22,2 °C)
50. Összeöntünk 200,0 cm³ 0,150 M nátrium-szulfát és 100,0 cm³ 0,600 M sósavoldatot. Mennyi lesz a kapott oldatban a pH értéke, ha a HSO_4^- savi disszociációs állandójának értéke 0,07 M? ($pH=0,872$)
51. Fenolt és vizet 1:1 tömegarányban összekeverünk. Két elkülönülő fázis keletkezik, amelyek 8,12 tömeg%, illetve 72,37 tömeg% fenolt tartalmaznak. Számítsuk ki a két fázis tömegeinek arányát a fenolban gazdagabb fázisra vonatkoztatva! (0,534 a tömegarány)
52. Mennyi az oxálsav ($\text{H}_2(\text{COO})_2$, a továbbiakban H_2A) 0,12 M koncentrációjú oldatában a pH értéke? Adják meg az oxálsav eltérő mértékben deprotonált formáinak egyensúlyi koncentrációit is! $K_1^{\text{ox}}=0,038 \text{ M}$, $K_2^{\text{ox}}=0,00005 \text{ M}$ ($pH=1,29$, $[\text{A}^{2-}]=5,0 \times 10^{-5} \text{ M}$, $[\text{HA}^-]=5,1 \times 10^{-2} \text{ M}$ és $[\text{H}_2\text{A}]=6,9 \times 10^{-2} \text{ M}$)
53. 60,0 g, 16,0 tömegszázalékos sóoldatból 20,0 g tömegű részletet átöntünk 180 g tömegű, x tömegszázalékos, azonos sóból készült sóoldatba. Alapos összekeverés után most ebből veszünk ki 20,0 g tömegű részletet, és visszaöntjük a maradék 16,0 tömegszázalékos oldatba. Az öntögetések és a keverés eredményeként az eredetileg 16,0 tömegszázalékos oldat töménysége 13,0 tömegszázalékra csökkent. Hány tömegszázalékos volt a kiindulási 180 g tömegű oldat az összeöntés előtt? (6,00 tömegszázalékos oldat kell)
54. Az egyik legismertebb magyar ételízesítő nátrium-klorid-tartalmát a következőképpen határoztuk meg:
- A sűrítmény 20,00 g-ját desztillált vízzel főztük, lehűlés után aktív szén hozzáadásával elszíntelenítettük, majd leszűrtük, és a szűrlet térfogatát desztillált vízzel 100,0 cm³-re állítottuk be. A szűrletből 10,00 cm³ mintát vettünk, ezt desztillált vízzel 100,0 cm³-re hígítottuk, majd ebből az oldatból vettünk 10,00 cm³-es mintákat, melyekhez 8,45 cm³ 0,06000 M koncentrációjú ezüst(I)-nitrát-oldatot, valamint salétromsavat és kálium-nitrátot adtunk. Forraltuk, hogy az ezüst-klorid-csapadék tömörödjön, majd vas(III)-nitrát indikátort adtunk az oldathoz. Az ezüst(I)-ion feleslegét 0,01000 M kálium-tiocianát-oldattal (KSCN) titráltuk, melyből átlagosan 26,65 cm³ fogyott. Hány tömegszázalékos a népszerű ételízesítő nátrium-kloridra nézve?
- (7,03 tömegszázalékos volt a nátrium-klorid a sűrítményben)
55. Fémcinket oldottunk kénsavoldatban. A reakció után kivált kristályvíztartalmú vegyület kéntartalma 11,15 tömegszázalék. Hány mol vizet tartalmaz a kristályvíztartalmú vegyület egy molja? Elvileg hány tömegszázalékos kénsavoldatban kell a cinket feloldanunk ahhoz, hogy ha a H_2SO_4 -tartalommal sztöchiometrikus mennyiségű cinket oldunk, akkor a hidrogéngáz eltávozása után az oldat egésze kikristályosodjék? (7 kristályvíz és 43,75 tömegszázalékos oldat kell)
56. A kalcium atomsúlyának (értsd abban az időben: hidrogénhez viszonyított relatív atomtömegének) meghatározásához Berzelius 1843-ban kalcium-oxidot alakított át kalcium-szulfáttá kénsavas kezeléssel úgy, hogy a kénsav feleslegét hevítéssel eltávolította. Egyik kísérlete során a kiindulási anyag 25,04 g-jából 60,36 g termék képződött. Mennyinek találta Berzelius a Ca atomsúlyát ezen mérés alapján, ha a tudós akkori ismerete szerint a kén atomsúlya 32,40 volt, míg az oxigéné 16,03? (41,03 a kalcium atomsúlya Berzelius szerint)
57. Egy fémötvözet alumíniumot, vasat és ezüstöt tartalmaz. Az ötvözet 0,4938 g-ját 0,1 M HCl -ban oldva 268,90 cm³, 23,50 °C-os, 1,053 bar nyomású gáz fejlődik. Ha az ötvözet 0,4743 g-ját 0,1 M NaOH -oldatban oldjuk, akkor 108,58 cm³, 23,50 °C-os, 1,032 bar nyomású gáz keletkezik. Mi volt a keverék tömegszázalékos és mólszázalékos összetétele?
- (17,23 tömeg% Al, 76,35 tömeg% Fe és 6,42 tömeg% Ag, illetve 30,92 mol% Al, 66,20 mol% Fe és 2,88 mol% Ag)
58. Adott nyomású, szobahőmérsékletű, metánt és acetilént tartalmazó gázelegy 63,0 cm³-ének tökéletes elégetése után a kapott gáz térfogata a kiindulási nyomáson és hőmérsékleten 96,0 cm³.

Mi volt a gázelegy mól- és térfogatszázalékos összetétele?

(47,6 % metán és 52,4 % acetilén mindkét koncentráció-mértékegységben)

59. Egy porkeverék alumíniumot, rezet és inert szennyeződést tartalmaz. Ha a porkeverék 0,1000 g-ját 300,0 cm³ 0,0100 M sósavoldathoz adjuk, akkor az oldatban a pH értéke 2,678 lesz a gázfejlődés befejeződése után. Ezután a rendszerhez 200,0 cm³ 0,03 M salétromsavoldatot adva, a nitrogén-dioxid fejlődés után az oldat pH-értéke 2,347-re változik. Adjuk meg a porkeverék tömegszázalékos összetételét!

(21,32 tömegszázalék Al, 69,60 tömegszázalék Cu és 9,08 tömegszázalék inert anyag)

60. Kalcium-karbonátot használunk egy sósavoldat, valamint egy lúgoldat pontos koncentrációjának meghatározásához. 1,000 g CaCO₃-ot 49,85 cm³ HCl-oldatban oldunk. A sav feleslegének visszatitrálásához 6,32 cm³ NaOH-oldat fogy. Külön kísérletben titrálunk 50,00 cm³ HCl-oldatot, erre 48,95 cm³ NaOH-oldat fogy. Számítsuk ki a HCl- és a NaOH-oldatok pontos koncentrációját!

(c_{sav}=0,4605 M és c_{bázis}=0,4704 M)

61. 5,000 g, kalcium-karbonátból és fémkalciumból álló porkeveréket oldunk feleslegben lévő 1,0 M sósavoldatban. Az oldás eredményeként 1,783 dm³ 37,30 °C-os, 1,000 bar nyomású gáz keletkezik. Mennyi volt a porkeverék tömegszázalékos és a fejlődött gázelegy térfogatszázalékos összetétele?

(74,43 tömeg% CaCO₃, 25,57 tömeg% Ca; 53,82 térfogat% ? gáz és 46,18 térfogat% ? gáz)

62. Vas(II)-karbonátból és fémvasból álló keverék 6,223 g-ját oldjuk feleslegben lévő sósavoldatban, miközben 1,873 dm³ normálállapotú gáz keletkezik. Mennyi volt a keverék tömegszázalékos összetétele? Mi a keletkezett gázelegy térfogatszázalékos összetétele?

(48,27 tömeg% FeCO₃, 51,73 tömeg% Fe és 68,98, valamint 31,02 térfogat%-ok a fejlődő gázokra)

63. Egy ötvözet a periódusos rendszer két egymást követő alkáliföldféméből áll. Az ötvözet 4,500 g-ját sósavban feloldva 3,332 dm³ standardállapotú H₂ fejlődik. (a) Mi az ötvözetet alkotó két fém? (b) Mi az ötvözet tömeg-, illetve mólszázalékos összetétele?

(32,85 tömeg% és 44,64 mól% a kisebb moláris tömegű fémre)

64. 0,5000 g kloridot, bromidot és inert anyagot tartalmazó mintából 0,9000 g, AgCl-ot és AgBr-ot tartalmazó csapadékkeveréket választottunk le. Ha ezt a csapadékot klóráramban hevítjük, a csapadék súlyvesztése 0,1000 g. Számítsuk ki, hogy hány tömegszázalék kloridot, illetve bromidot tartalmazott a minta!

(23,63 tömegszázalék klorid és 35,95 tömegszázalék bromid)

65. Hány tömegszázalék szenet tartalmaz az a Mg₂C és MgC₂-ből álló karbidkeverék, melynek 0,8500 g-ját elhidrolizáltatva, majd a képződött gázt elégetve 0,4779 g víz képződik. A karbidok hidrolízise során 1 mol Mg₂C-ből 1 mol CH₄, illetve 1 mol MgC₂-ből 1 mol C₂H₂ képződik.

(24,15 tömegszázalék szén)

66. Egy szilárd minta két vízmentes ezüst-halogenid keverékéből áll. A minta 0,3236 g-nyi mennyiségét 50,00 cm³ 0,1810 M kálium-cianid-oldatban oldottuk. A feleslegben maradt cianidot 28,14 cm³ 0,1010 M ezüst-nitrát mérőoldattal mértük vissza. Számítsuk ki a keverék tömegszázalékos ezüsttartalmát! Feltételezve, hogy a két halogenid a klorid és a jodid volt, számítsuk ki a mintában a klorid és a jodid tömegét is.

(56,10 tömegszázalék ezüst, 0,0277 g klorid és 0,1144 g jodid)

67. Egy nátriumot és káliumot is tartalmazó amalgám 1,0000 g-ját 150,0 cm³ desztillált vízbe tesszük és rázatjuk. Az alkálifémek kioldódása után a maradék higany tömege 0,9187 g. Az oldat 20,00 cm³-ét 0,0500 M sósavoldattal megtitrálva 8,22 cm³ sav fogy. Mennyi volt az eredeti amalgám mólszázalékos összetétele?

(31,78 mólszázalék Na, 8,45 mólszázalék K és 59,77 mólszázalék Hg)

68. Hány gramm kristályvizes réz(II)-szulfátot (CuSO₄·5H₂O) kell egy 250 cm³-es mérőlombikban feloldani ahhoz, hogy az oldat moláris koncentrációja *c* legyen, ahol *c* értéke 0,00–0,99 M között változhat? Készítsen egy olyan ábrát a Maxima program segítségével, amely a szükséges kristályvíz tartalmú réz(II)-szulfát tömegét ábrázolja a moláris koncentráció függvényében!

69. Hány gramm kristályvizes réz(II)-szulfátot (CuSO₄·5H₂O) kell 58 g vízben feloldani ahhoz, hogy az oldat tömegszázalékos összetétele *m* legyen, ahol *m* értéke 0–10,00 (m/m)% között változhat? Készítsen egy olyan ábrát a Maxima program segítségével, amely a szükséges kristályvíz

tartalmú réz(II)-szulfát tömegét ábrázolja a tömegszázalékos összetétel függvényében!

70. A Maxima segítségével rajzolja meg 1 mol anyagmennyiségű tökéletes gáz izotermáját (a $p(V)$ függvény állandó hőmérsékleten) 0, 50 és 100 °C-on, a három görbét egy diagramon feltüntetve! A térfogat tengelyén a tartomány 0,002–0,05 m³ legyen, a nyomás tengelyén az adatokat Pa-ban kell feltüntetni.

71. Számolják ki az $f(x) = 4^{-4x+3}$ függvény felezési idejét! ($T=?$; $f(t+T) = f(t)/2$ bármely t esetén) (T=1/8)

72. Számolják ki az $f(x) = 8^{3x+1}$ függvény duplázási idejét! ($T=?$; $f(t+T) = 2f(t)$ bármely t esetén) (T=1/9)

73. Határozzák meg a következő sorozatok határértékét:

$$(a) a_n = \frac{3n-4}{n+4}, (b) a_n = \left(1 + \frac{3}{n}\right)^5, (c) a_n = \frac{\sqrt{n^2} - \sqrt{5n}}{3n^4}, (d) a_n = \sqrt{n^2 + 4n + 1} - \sqrt{n^2 - 4n + 1} \text{ és } (e) a_n = \frac{\sqrt{3^n} - \sqrt{2^n}}{5n}!$$

74. Határozzák meg az alábbi határértékeket:

$$(a) \lim_{x \rightarrow 4} \frac{x^2 - 4}{x^2 - 16}, (b) \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^2 - 5x}{1 - 3x^2}, (c) \lim_{x \rightarrow -\infty} \sqrt{x^2 + x} + x, (d) \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}, (e) \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin 3x}{\sin 4x}, (f) \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\ln(1+x)}{x}, (g) \lim_{x \rightarrow 0+} x^2 \ln x, (h) \lim_{x \rightarrow 0+} \tan x \ln x \text{ és } (i) \lim_{x \rightarrow 0+} x^x!$$

75. Végezzenek számolásokat annak bizonyítására, hogy a mosogatás (vagy hígítás) sokkal hatékonyabb, ha a mosogató/hígító folyadékot nem egyszerre, hanem több kisebb részletben használják fel.

Egy kémcsőben 1,0 M FeCl₃-oldat van. Kiöntve a folyadékot, 0,1 cm³ oldat marad vissza a kémcsőben. Összesen 5 cm³ víz áll rendelkezésre a kémcső tisztítására.

a) Mekkora lesz a maradék oldat vas(III)-koncentrációja, ha az 5 cm³ víz egyszerre lesz felhasználva?

b) Mekkora lesz a maradék oldat vas(III)-koncentrációja, ha az 5 cm³ víz két lépésben, egyidejűleg 2,5 cm³-es részletekben lesz felhasználva?

c) Hatékonyabb-e a mosogatás/hígítás, ha nem egyforma térfogatú részleteket használunk a b) részhez? Számítással bizonyítsa állítását!

d) Mekkora lesz a maradék oldat vas(III)-koncentrációja, ha az 5 cm³ víz összesen öt lépésben, egyidőben 1 cm³-es részletekben lesz felhasználva?

e) Ha nem 5, hanem 2 cm³ víz áll összesen rendelkezésre a tisztításhoz, akkor ezt végtelen sok piciny részletben felhasználva mi az elérhető legkisebb koncentráció? (A megoldáshoz a Maxima limit függvényét érdemes használni.)

f) A limit függvény a feladat teljesen általános megoldására is használható. Legyen a kémcsőben lévő oldat moláris koncentrációja c , a kiöntés után a kémcsőben maradt oldat maradék térfogata V_r , míg a mosogatásra/hígításra használható oldószer összes térfogata V_t . Melyik képlet számolja ki a kémcsőben maradó oldat minimális koncentrációját?

g) Az f) pontban levezetett képlet alapján elérhető-e elméletileg, hogy az oldott anyag koncentrációja nulla legyen a hígítások elvégzése után?

$$(c_a=0,01961 \text{ M}, c_b=0,001479 \text{ M}, \text{ nem lesz hatékonyabb (pl. } 4+1 \text{ cm}^3 \text{ használata esetén } c_c=0,002217 \text{ M}), c_d=6,209 \times 10^{-6} \text{ M}, c_e=2,061 \times 10^{-9} \text{ M}, c \cdot e^{-V_r/V_t} \text{ és nem.)}$$

76. Számolják ki az e^x , e^{2x} , $\ln x$, $\ln(2x)$, $\tan x$ és $\tan(2x)$ függvények Taylor-sorainak első 10 tagját!

77. Határozzák meg a következő függvények differenciálját:

$$(a) \sqrt{x} + \frac{1}{x^3}, (b) x^{5x}, (c) \frac{\ln x - 1}{\tan x}, (d) \frac{2x}{x^2 + 1}, (e) \frac{1}{\ln x}, (f) 2^{\frac{2x}{x^2+1}}, (g) \ln(1 + \sin \sqrt{x}), (h) x^{\sqrt{x}}, (i) x^{\sin x} \text{ és } (j) (\ln x)^x!$$

78. Határozzák meg a következő határozatlan integrálok függvényalakját:

$$(a) \int \frac{1}{x} dx, (b) \int \frac{1}{\sqrt[5]{x}} dx, (c) \int \frac{2x+3}{3x+2} dx, (d) \int \frac{1+\cos x}{\sin x} dx, (e) \int 10^x e^x dx, (f) \int \frac{1}{5+x^2} dx, (g) \int \frac{1}{x \ln x} dx, (h) \int \ln x dx, (i) \int x^2 e^{3x} dx \text{ és } (j) \int \frac{1}{x^2+x^4} dx!$$

79. Határozzák meg a következő határozott integrálok számértékét:

$$(a) \int_1^3 x dx, (b) \int_0^{10} 2^x dx, (c) \int_0^1 \ln(x+1) dx, (d) \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx \text{ és } (e) \int_0^\infty e^{-x} dx!$$

80. Mennyi egy $c_s=3.8 \times 10^{-7}$ M koncentrációjú gyenge sav (HA) oldatában a pH három tizedes jegy pontossággal, ha a savi disszociációs állandó értéke $K_s=2.1 \times 10^{-7}$ M? Ilyen körülmények között a Brønsted egyenlet

$$[H^+] = K_s \frac{c_s - [H^+] + \frac{K_v}{[H^+]}}{[H^+] - \frac{K_v}{[H^+]}}$$

formája érvényes. (Érdemes ábrázolni az egyenlet jobb- és baloldalának különbségét a hidrogén-ion koncentrációjának függvényében, hogy megtaláljuk azt a koncentrációtartományt, amelyen belül keressük a gyököt.) $pK_v=13,76$. (pH=6,609)

81. Egy oldaton áthaladt összes töltésmennyiséget a $Q = \int_0^t I(t) dt$ összefüggéssel tudunk kiszámolni.

Mennyi az áthaladt összes töltésmennyiség, ha az elektrolízist 2 óra 30 percre végezzük; és az áramerősség az $I(t) = \frac{1,07 \times 10^3}{1,12 \cdot t + 2,16}$ függvény szerint változik az idő függvényében, ha az időt másodpercben és az áramerősséget amperben adjuk meg.

a) Határozzák meg a töltésmennyiséget a Maxima integrate függvényének segítségével!

(8071,3 C)

b) Határozzák meg a töltésmennyiséget a trapézszabály segítségével úgy, hogy a függvényértékeket (1) percenként, (2) másodpercenként, valamint (3) tized másodpercenként számolják ki! A trapézszabály alkalmazásához használják mind a Maxima sum függvényét, mind az Excel-t. Melyik program a hatékonyabb a gyakorlatban? ((1) 20150,3 C, (2) 8092,1 C és (3) 8071,5 C)

c) Készítsék el az $I(t)$ függvény ábráját, és ennek alapján magyarázzák meg, miért kell olyan sűrűn függvényértéket számolni a trapézszabály alkalmazásakor. hogy pontos integrálértéket kapjunk?

d) A fentiek alapján javasoljanak módot arra, hogyan lehetne a trapézszabályt hatékonyabban alkalmazni!

82. A hidrogénatom 4s pályafüggvényének négyzete megadja az elektron tartózkodási valószínűségét az atommagtól való távolság függvényében egy adott irányban (más néven elektronsűrűség):

$$\Psi^2(r) = \left(\frac{1}{1536 \sqrt{\pi}} \cdot (192 - 144r + 24r^2 - r^3) \cdot e^{-r/4} \right)^2,$$

ahol r az atommagtól mért távolság Bohr-egységben. Számítsák ki azokat a távolságokat, ahol az elektronsűrűség maximumot mutat! A három távolságot a 2,0–5,0, a 7,0–12,0 és a 16,0–30,0 Bohr-egység tartományokban keressék! (Ennek megértéséhez érdemes ábrázolni a függvényt az $r=0$ –30 Bohr-egység tartományban.) (3,420, 9,904, 22,676 Bohr-egység)

7. Bevezetés a SciDavis/QtiPlot program használatába

Telepítés, leírások:

SciDavis ([honlap](#)):

Windows: a [scidavis.2.8.0-win-dist.msi](#) fájl [ebben a könyvtárban](#).

Linux: a legtöbb disztribúció tartalmazza a SciDavis csomagot, így a legkényelmesebb a csomagkezelővel (package manager) telepíteni.

Mac OS X: a [scidavis-2.8-mac-dist.dmg](#) fájl [ebben a könyvtárban](#).

QtiPlot (a [hivatalos honlapon](#) keresztül a demo és fizetős verziók bármelyik operációs rendszerre letölthetők):

Windows: A [legális és ingyenes verziók](#) közül érdemes a [0.9.8.9 verziót](#)¹ telepíteni. Ebből a telepítőtől sajnos hiányzik a python27.dll fájl, ami viszont benne van a régebbi [0.9.8.3 verzióban](#)², vagy külön letölthető pl. [ezen a webcímen](#) keresztül (bármelyik 32 bites verzió megfelel). Ezt a fájlt be kell másolni abba a könyvtárba, ahol a qtiplot.exe van.

Linux: A legtöbb disztribúció tartalmazza a QtiPlot csomagot, így a legkényelmesebb a csomagkezelővel (package manager) telepíteni.

Mac OS X: <http://www.macupdate.com/app/mac/18834/qtiplot> (2018-ban működött, de kicsit régi, 2019-re eltűnt, jelenleg csak a demo és fizetős verziók érhetők el.)

Segédanyagok:

- A SciDavis angol nyelvű leírása [online és letölthető formában](#).
- A QtiPlot angol nyelvű leírása [online formában](#), valamint [letölthető PDF formátumban](#).

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- függvényábrázolás
- nemlineáris illesztés/paraméterbecslés/regresszió
- alapelemek a QtiPlot/SciDavis programban (táblázat/table, ábraablak/plot window, megjegyzés/note, eredményablak/result log window, projektablak/project manager)

Feladatok:

83. Az argon gáz van der Waals állandóinak meghatározásához 1,00 mol anyagmennyiségű, tiszta, $-72\text{ }^{\circ}\text{C}$ -os gáz térfogatát különböző értékekre beállítva mérték a gáz nyomását. A következő adatokat kapták:

V/m^3	5.0×10^{-5}	5.1×10^{-5}	5.2×10^{-5}	5.3×10^{-5}	5.4×10^{-5}	5.5×10^{-5}	5.6×10^{-5}
p/Pa	$3.87 \times 10^{+7}$	$3.59 \times 10^{+7}$	$3.37 \times 10^{+7}$	$3.16 \times 10^{+7}$	$2.95 \times 10^{+7}$	$2.79 \times 10^{+7}$	$2.65 \times 10^{+7}$
V/m^3	5.7×10^{-5}	5.8×10^{-5}	6.0×10^{-5}	6.1×10^{-5}	6.5×10^{-5}	7.0×10^{-5}	7.4×10^{-5}
p/Pa	$2.54 \times 10^{+7}$	$2.41 \times 10^{+7}$	$2.21 \times 10^{+7}$	$2.03 \times 10^{+7}$	$1.85 \times 10^{+7}$	$1.63 \times 10^{+7}$	$1.49 \times 10^{+7}$
V/m^3	7.9×10^{-5}	9.0×10^{-5}	1.01×10^{-4}	1.19×10^{-4}	1.40×10^{-4}	1.60×10^{-4}	1.80×10^{-4}
p/Pa	$1.36 \times 10^{+7}$	$1.22 \times 10^{+7}$	$1.11 \times 10^{+7}$	$9.63 \times 10^{+6}$	$8.69 \times 10^{+6}$	$7.65 \times 10^{+6}$	$7.13 \times 10^{+6}$
V/m^3	2.01×10^{-4}	2.21×10^{-4}	2.41×10^{-4}	2.60×10^{-4}	2.80×10^{-4}	3.01×10^{-4}	
p/Pa	$6.52 \times 10^{+6}$	$6.24 \times 10^{+6}$	$5.80 \times 10^{+6}$	$5.42 \times 10^{+6}$	$4.84 \times 10^{+6}$	$4.62 \times 10^{+6}$	

Határozzák meg az argon gáz van der Waals állandóit (a és b) a

$$\left(p + \frac{n^2 \cdot a}{V^2}\right) \cdot (V - n \cdot b) = n \cdot R \cdot T \quad \longrightarrow \quad p(V) = \frac{n \cdot R \cdot T}{V - n \cdot b} - \frac{n^2 \cdot a}{V^2}$$

¹Ez egy 7-Zip programmal tömörített file, amit a Windows nem tud kezelni, de több ingyenes és szabadon letölthető fájlkezelő (többek között a Total Commander, Multi Commander, Far, vagy akár a 7-Zip) igen.

²Ez szintén egy tömörített file, de ZIP formátumban, így a Windows Explorer/Intéző is használható a kibontására.

van der Waals gázegyenlet jobboldali formája alapján a QtiPlot (vagy SciDavis, esetleg a Maxima) program segítségével, nemlineáris paraméterbecsléssel! $R=8,314 \text{ J/mol/K}$ és $0^\circ\text{C}=273,15 \text{ K}$.

$$(a=(0,1367\pm0,0008) \text{ Pa m}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ és } b=(3,211\pm0,0008)\times10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol})$$

(Csak érdekességként egy szervetlen kémiai kérdés: Vajon miért éppen -72°C -on lehetett ezeket az adatokat megmérni?)

84. A QtiPlot/SciDavis kézikönyvének 1.3 alfejezetét értsék meg az 1.3.2 és 1.3.3 szakaszok kivételével!
85. A QtiPlot/SciDavis kézikönyvének 2.1, valamint 2.3 alfejezeteit értsék meg, és az ebben lévő ábrákat reprodukálják a programban!
86. Rajzolják meg a 68–70. feladatokhoz levezetett függvényeket a (wx)Maxima/QtiPlot/SciDavis programok segítségével!
87. Rajzolják meg a 77. feladatban megadott függvényeket a (wx)Maxima/QtiPlot/SciDavis programok segítségével!
88. Rajzolják meg a 81. feladat szövegében megadott áramerősség – idő függvényt a (wx)Maxima/QtiPlot/SciDavis programok segítségével!
89. Rajzolják meg a 82. feladat szövegében megadott tartózkodási valószínűség – távolság függvényt a (wx)Maxima/QtiPlot/SciDavis programok segítségével, a függő változó tengelyén logaritmikus beosztást használva!
90. Rajzolják meg a 16. feladat szövegében megadott kátrány- és nikotin mennyiségeket az évek számának függvényében a QtiPlot/SciDavis programok segítségével úgy, hogy a baloldali függőleges tengelyen a nikotin-, a jobboldali függőleges tengelyen pedig a kátránytartalmat tüntetik fel!
91. A 17. feladatban megadott adatokból a QtiPlot/SciDavis programok segítségével határozzák meg nemlineáris paraméterbecsléssel az Arrhenius-egyenlet $(k(T) = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}})$ paramétereinek értékét és szórását!
92. A 19. feladatban megadott adatokból a QtiPlot/SciDavis programok segítségével határozzák meg nemlineáris paraméterbecsléssel a k , V_0 és V_∞ paraméterek értékét és szórását mind a három megadott hőmérsékleten, tudva, hogy a $V(t) = V_\infty + (V_0 - V_\infty) \cdot e^{-k \cdot t}$ összefüggés érvényes a mért térfogat – idő adatpárookra!
93. A 36. feladatot oldják meg a QtiPlot/SciDavis programok valamelyikének használatával úgy, hogy a program nemlineáris paraméterbecslési képességeit használják a feladatban megadott adatokra, modellként a 10. oldalon található (2) egyenletet alkalmazva! Természetesen linearizálás nélkül csak egyféle módon számolható az eredmény. Vigyázni kell arra is, hogy a feladatban a meghatározandó adatot x jelöli, míg ez a jelölés a fenti programokban a független változónak van fenntartva. Hasonlítsák össze a linearizálással és a nemlineáris paraméterbecsléssel kapott eredményeket, különös tekintettel a szórásaikra, és próbálják értelmezni az eltéréseket!

$$(x=5,001\pm0,013)$$

94. Egy szerves kémiai reakcióban a termék szigorúan elsőrendű kinetika szerint képződik. A reakcióelegyből időnként (t) mintát véve meghatározták a konverzió százalékos értékét (vagyis az elméletileg várható érték hány százaléka képződött az adott pillanatig), és a következő adatokat kapták:

t/perc	5	30	60	120	240	360	1440
%-os konverzió	2	11	22	36	48	56	63

Az elsőrendű kinetika miatt a konverziófok egy adott pillanatban a $\%_{\max} \cdot (1 - e^{-k \cdot t})$ kifejezéssel adható meg, ahol $\%_{\max}$ a konverzió maximális foka és k az elsőrendű sebességi állandó. A táblázat adatai és a megadott kifejezés segítségével határozzák meg a kifejezésben található két paramétert, a QtiPlot/SciDavis programok (esetleg a Maxima) valamelyikének nemlineáris

illesztési képességeit alkalmazva.

$$(\%_{\max}=62\pm1 \text{ és } k=(0,0068\pm0,0003) \text{ min}^{-1})$$

Függelék

Információk a időjárási adatokról

Statisztikai számolásokat a legtöbbször csak rengeteg adat alapján érdemes számolni. Egy mindenki számára nyilvános adatbázis az **európai időjárás napi adatai** 1950 óta.³ Ez az adatbázis több tucat Gbyte-nyi adatot tartalmaz speciálisan tömörített formában. Az adatok kinyeréséhez speciális számítógépes tudás szükséges, ezért néhány választott európai település esetében az adatokat lementettük szövegfájlok formájában, és **egyetlen tömörített fájlban** érhetők el a kurzus honlapján. A városokat⁴ a következő megfontolások alapján választottuk:

Szeged(Hungary) és Budapest(Hungary) nyilván a legfontosabb városok számunkra.

Hammerfest(Norway) hivatalosan Európa legészakibb városa a Golf-áramlás végénél.

Kiruna(Sweden) szintén északi város, de már a Skandináv-hegység másik oldalán.

Murmansk(Russia) a világ legnagyobb városa az északi sarkkör felett.

Reykjavik(Iceland) és Stockholm(Sweden) a világ legészakibb fővárosai, valamint Stockholm az egyik legkevesbé szeles város.

Ierapetra(Greece) és Limassol(Cyprus) Európa legdélibb városai, attól függően, hogy Ciprust Ázsiához vagy Európához soroljuk.

Nizhniy Novgorod(Russia) a legszárazföldibb éghajlatú nagyváros az adatbázisban.

Dundee(United Kingdom) Gyakorlatilag azonos szélességi körön van, mint Nizhniy Novgorod, de óceáni éghajlattal rendelkezik.

Moscow(Russia) és Madrid(Spain) szárazföldi éghajlatú nagyvárosok, emellett Madridban van az egyik legalacsonyabb páratartalom.

Copenhagen(Denmark) és Mira(Portugal) óceáni éghajlatú városok azonos szélességi körön, mint Moscow és Madrid.

Athens(Greece), Rome(Italy) és Napoli(Italy) dél-európai nagyvárosok, emellett Athens a legmelegebb város nyáron Európában.

Grussian(France) Európa egyik legszelesebb települése.

Amsterdam(Netherlands) az egyik legnagyobb páratartalmú város az európai kontinensen.

Minden szövegfájl egy adott város napi időjárási adatát tartalmazza 1920. január 1-étől 2021. július 31-éig, habár sok adat hiányzik, egyes városok esetében akár teljes adatsorok is. Az adat lehet napi átlag, maximum vagy minimum hőmérséklet, valamint átlagos légköri nyomás, csapadékmennyiség, napsugárzás teljesítmény, szélesebbesség vagy relatív páratartalom. A fájlok neve jelzi az adatot és a várost is. Minden fájl szerkezete a következő:

- Az első sor mutatja, hogy milyen adatról és melyik városról van szó, valamint megadja a város tengerszint feletti magasságát, földrajzi szélességi és hosszúsági körét.
- A második sor a címsor az adatokhoz.
- Minden további sorban öt adat van, az év, hónap és nap, a mérés dátuma ún. EXCELtime formában, valamint a mért adat. Ha ezeket az adatokat importáljuk az EXCEL-be és a negyedik oszlop adatainak formátumát dátumformára állítjuk, akkor az az adott nap dátumát adja meg.

³Az adatok egy része 1920-tól is elérhető

⁴A városok neve itt és a feladatokban is angolul van megadva úgy, ahogy az az eredeti E-OBS adatbázisban is szerepel.

A (szórás/hiba)terjedés képleteinek táblázata

A szórás- és/vagy hibaterjedés számolásához szükséges összefüggések. A következő képletekben a kiindulási adat(ok), amely(ek)nek a szórása is ismert: $X \pm \sigma_X$ és $Y \pm \sigma_Y$. Ezen adat(ok) felhasználásával a számolt eredmény Z , és ennek szórása σ_Z . Az állandó, szórás nélküli értékek jele a . A trigonometrikus függvényeknél a szög és a szórása is radiánban értendő. Az adatokban egy „ $\pm$ ” jel választja el az adat értékét és szórását.

művelet vagy függvény	eredmény szórással ($Z \pm \sigma_Z$)	példa	$Z \pm \sigma_Z$
szorzás a -val	$a \cdot X \pm a \cdot \sigma_X $	$3 \cdot (1,2 \pm 0,3) =$	$(3 \cdot 1,2) \pm (3 \cdot 0,3) = \underline{\underline{3,6 \pm 0,9}}$
összeadás	$X + Y \pm \sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}$	$(2,2 \pm 0,3) + (8,4 \pm 0,5) =$	$(2,2 + 8,4) \pm (\sqrt{0,3^2 + 0,5^2}) = \underline{\underline{10,6 \pm 0,6}}$
kivonás	$X - Y \pm \sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}$	$(3,2 \pm 0,3) - (2,4 \pm 0,5) =$	$(3,2 - 2,4) \pm (\sqrt{0,3^2 + 0,5^2}) = \underline{\underline{0,8 \pm 0,6}}$
szorzás	$X \cdot Y \pm \sqrt{Y^2 \cdot \sigma_X^2 + X^2 \cdot \sigma_Y^2}$	$(2,2 \pm 0,2) \cdot (8,4 \pm 1,0) =$	$(2 \cdot 8,4) \pm (\sqrt{8,4^2 \cdot 0,2^2 + 2^2 \cdot 1,0^2}) = \underline{\underline{18,5 \pm 2,8}}$
osztás	$\frac{X}{Y} \pm \sqrt{\frac{Y^2 \cdot \sigma_X^2 + X^2 \cdot \sigma_Y^2}{Y^4}}$	$\frac{(22,0 \pm 2,0)}{(8,4 \pm 1,0)} =$	$\left(\frac{22,0}{8,4}\right) \pm \left(\sqrt{\frac{8,4^2 \cdot 2,0^2 + 22,0^2 \cdot 1,0^2}{8,4^4}}\right) = \underline{\underline{2,6 \pm 0,4}}$
reciprok	$\frac{1}{X} \pm \frac{\sigma_X}{X^2}$	$\frac{1}{(0,44 \pm 0,12)} =$	$\left(\frac{1}{0,44}\right) \pm \left(\frac{0,12}{0,44^2}\right) = \underline{\underline{2,3 \pm 0,6}}$
hatványozás	$X^a \pm a \cdot \sigma_X \cdot X^{a-1} $	$(3,0 \pm 0,5)^{1,2} =$	$(3,0^{1,2}) \pm (1,2 \cdot 0,5 \cdot 3,0^{1,2-1}) = \underline{\underline{3,7 \pm 0,7}}$
exponenciális függvények	$e^X \pm \sigma_X \cdot e^X$ $10^X \pm \ln(10) \cdot \sigma_X \cdot 10^X$	$e^{(2,0 \pm 0,5)} =$ $10^{(1,3 \pm 0,1)} =$	$(e^{2,0}) \pm (0,5 \cdot e^{2,0}) = \underline{\underline{7,4 \pm 3,7}}$ $(10^{1,3}) \pm (2,3 \cdot 0,1 \cdot 10^{1,3}) = \underline{\underline{20 \pm 5}}$
logaritmus függvények	$\ln X \pm \sigma_X / X$ $\lg X \pm \frac{\sigma_X}{\ln(10) \cdot X}$	$\ln(2,0 \pm 0,1) =$ $\lg(20 \pm 10) =$	$(\ln(2,0)) \pm (0,1/2,0) = \underline{\underline{0,69 \pm 0,05}}$ $(\lg(20)) \pm (10/(2,3 \cdot 20)) = \underline{\underline{1,3 \pm 0,2}}$
trigonometrikus függvények	$\sin X \pm \cos X \cdot \sigma_X$ $\cos X \pm \sin X \cdot \sigma_X$ $\operatorname{tg} X \pm \frac{\sigma_X}{(\cos X)^2}$	$\sin(60^\circ \pm 5^\circ) =$ $\cos(60^\circ \pm 5^\circ) =$ $\operatorname{tg}(45^\circ \pm 5^\circ) =$	$\left(\sin \frac{\pi}{3}\right) \pm \left(\left \cos \frac{\pi}{3}\right \cdot \frac{5 \cdot \pi}{180}\right) = \underline{\underline{0,87 \pm 0,04}}$ $\left(\cos \frac{\pi}{3}\right) \pm \left(\left \sin \frac{\pi}{3}\right \cdot \frac{5 \cdot \pi}{180}\right) = \underline{\underline{0,5 \pm 0,08}}$ $\left(\operatorname{tg} \frac{\pi}{4}\right) \pm \left(\frac{5 \cdot \pi}{180} \left/\left(\cos \frac{\pi}{4}\right)^2\right.\right) = \underline{\underline{1,0 \pm 0,2}}$
inverz trigonometrikus függvények	$\arcsin X \pm \frac{\sigma_X}{\sqrt{1 - X^2}}$ $\arccos X \pm \frac{\sigma_X}{\sqrt{1 - X^2}}$ $\operatorname{arctg} X \pm \frac{\sigma_X}{1 + X^2}$	$\arcsin(0,87 \pm 0,08) =$ $\arccos(0,5 \pm 0,08) =$ $\operatorname{arctg}(1,0 \pm 0,2) =$	$\left(\arcsin(0,87) \pm \left(\frac{0,08}{\sqrt{1 - 0,87^2}}\right)\right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{60^\circ \pm 9^\circ}}$ $\left(\arccos(0,5) \pm \left(\frac{0,08}{\sqrt{1 - 0,5^2}}\right)\right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{60^\circ \pm 5^\circ}}$ $\left(\operatorname{arctg}(1,0) \pm \left(\frac{0,2}{1 + 1,0^2}\right)\right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{45^\circ \pm 6^\circ}}$

Korrekciók

2023. február 5-e óta a következő változtatások történtek:

2023.02.07.: Hivatkozások színei visszaállítva.

2023.03.22.: A 17. és 19. feladatok táblázatainak fejlécében néhány pontosítás történt.