

(% i4) kill(all)\$load(descriptive)\$load(draw)\$load(stats)\$timedate();

(% o4)

"2023-02-08 09:02:04+01:00"

1 hét bevezetés, egyváltozós statisztika

2 hét egyváltozós statisztika folytatása

2.1 Ismételt mérési adatok statisztikája:

Rengeteg függvény létezik a valószínűségi változóra (érték), nemcsak az átlag van

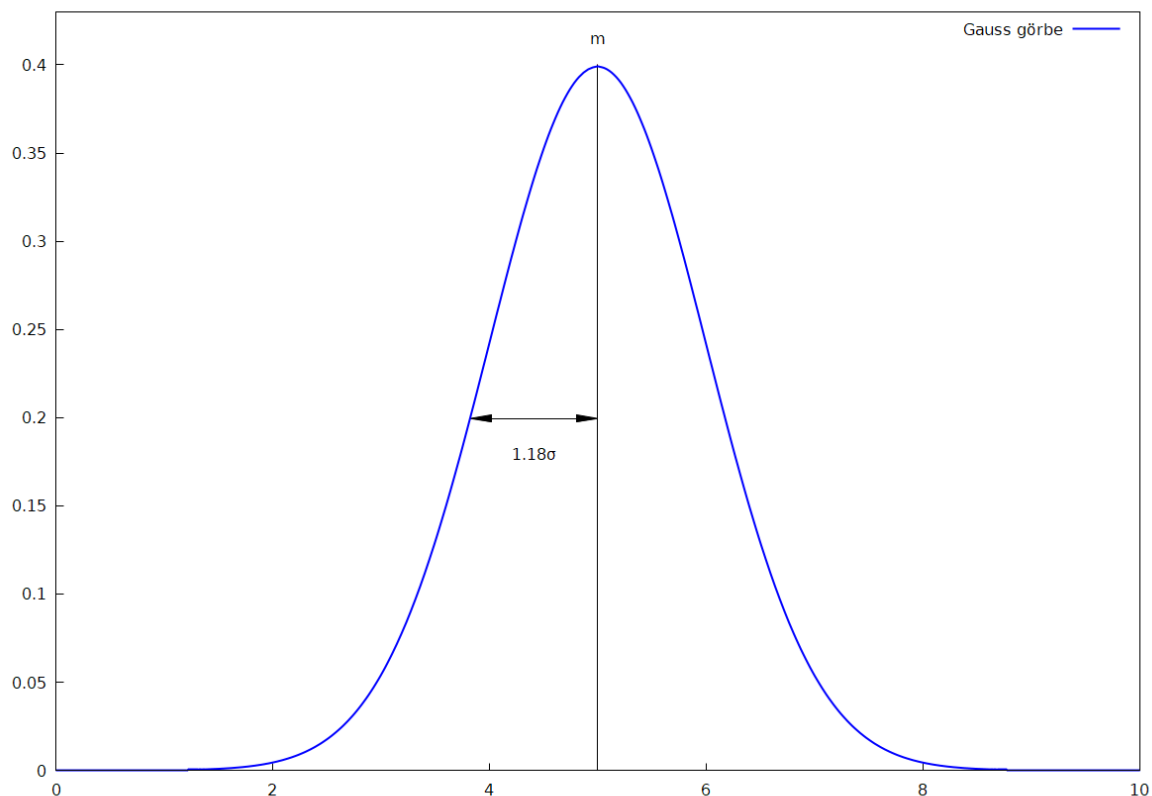
SZÓR.S vs. SZÓR.M vs. SZÓRÁS függvények

Gauss/normál/harang görbe/függvény:

(% i6) $g(x,\sigma,m):=1/(\sigma*\sqrt{2*\pi})*\exp(-(x-m)^2/(2*\sigma^2));$
wxdraw2d(user_preamble = "set size ratio 0.7",yrange=[0,0.43],color=black,line_width=1,
polygon([5,5],[0,0.4]),
head_length=0.2,head_angle=10,
vector([5,g(5,1,5)/2],[-sqrt(2*log(2)),0]),vector([5-sqrt(2*log(2)),g(5,1,5)/2],[sqrt(2*log(2)),0]),
label(["m",5,0.415],["1.18σ",5-sqrt(2*log(2))/2,g(5,1,5)/2-0.02]),
color = blue,line_width=2,key = "Gauss görbe",
explicit(g(x,1,5),x,0,10)
)\$

$$g(x, \sigma, m) := \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right)$$

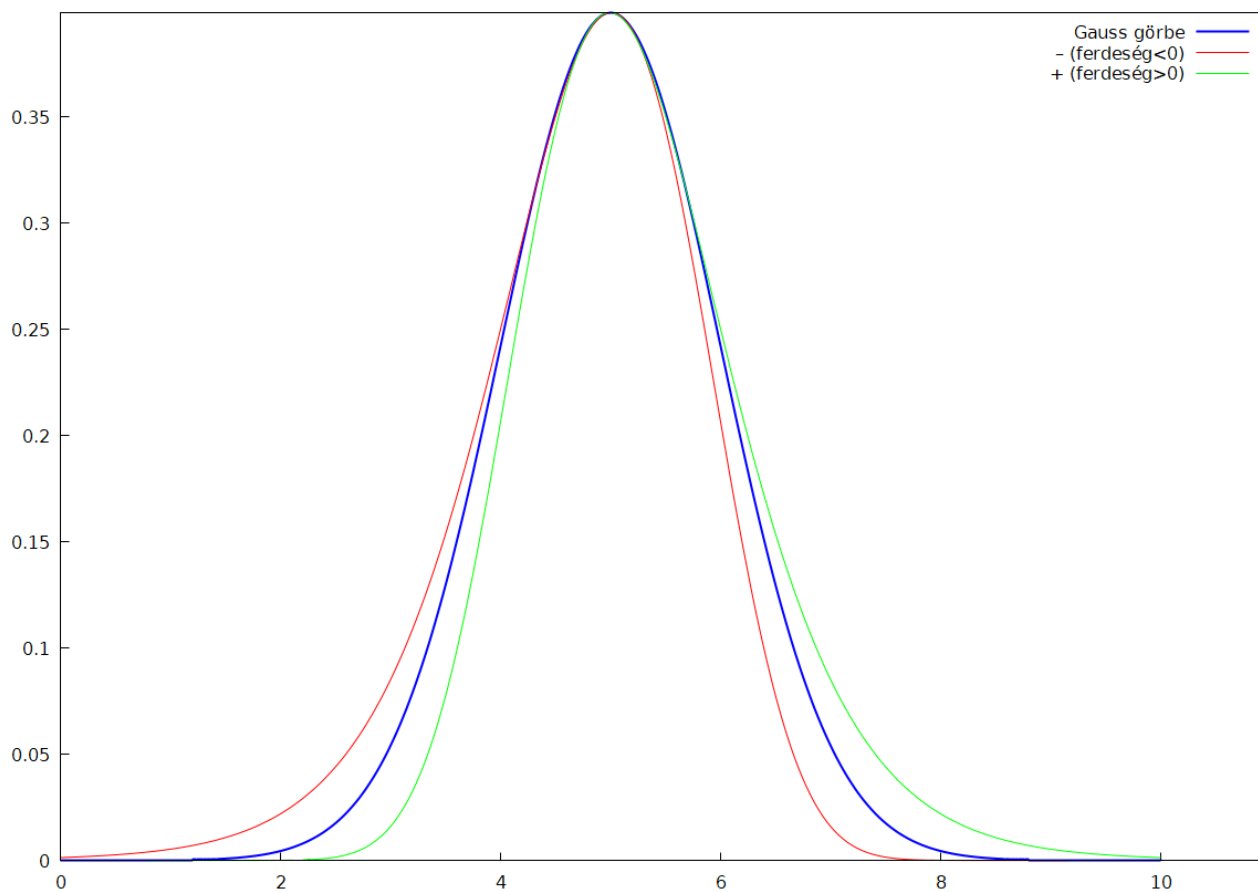
(% o5)



(% t6)

Ferdeség (skewness):

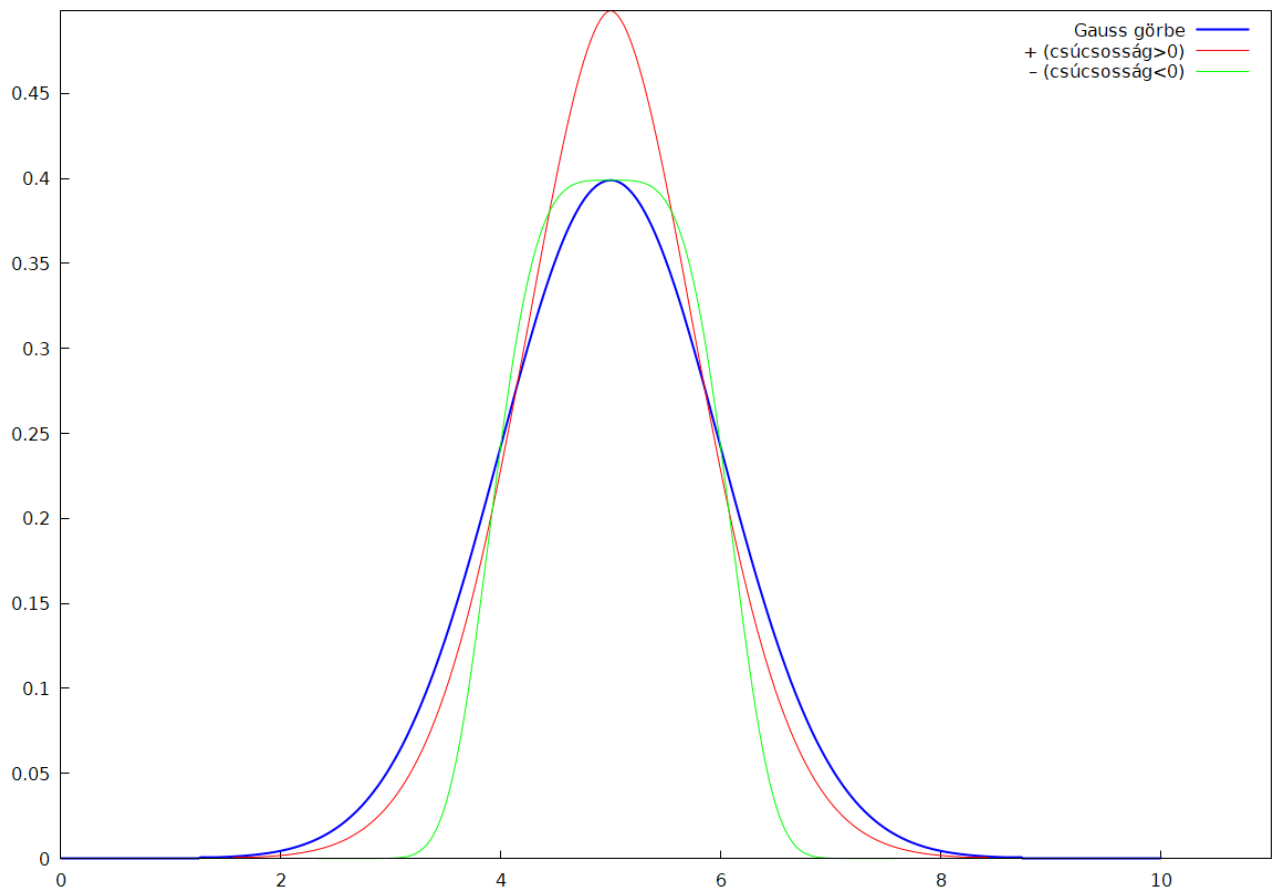
```
(% i10) Gsnf(x):=g(((0.028*(x+37.7)+0))^ 9,1,5)$Gspf(x):=g(((0.028*(10-x+37.7)+0))^ 9,1,5)$
float([skewness([ 3,4,4,5,5,5,6,6,7]),
skewness([2,3,4,4,5,5,5,6,6,7]),
skewness([ 3,4,4,5,5,5,6,6,7,8])])$
wxdraw2d(user_preamble = "set size ratio 0.7",xrange=[0,11],
color = blue,line_width=2,key = "Gauss görbe",explicit(g(x,1,5),x,0,10),
color = red,line_width=1,key = "- (ferdeség<0)",explicit(Gsnf(x),x,0,10),
color = green,line_width=1,key = "+ (ferdeség>0)",explicit(Gspf(x),x,0,10))$
```



(% t10)

Csúcsosság, laposság (kurtosis):

```
(% i14) Gspc(x):=1/0.8/sqrt(2*%pi)*exp(-abs(x-5)^ 1.8/0.64/2)$
Gunc(x):=1/sqrt(2*%pi)*exp(-abs(x-5)^ 4/2)$
float([kurtosis([5-sqrt(2*log(2)),5,5,5,5, 5+sqrt(2*log(2))]),
kurtosis([5-sqrt(2*log(2)),5,5,5,5,5+sqrt(2*log(2))]),
kurtosis([5-sqrt(2*log(2)),5,5,5, 5+sqrt(2*log(2))])])$
wxdraw2d(user_preamble = "set size ratio 0.7",xrange=[0,11],
color = blue,line_width=2,key = "Gauss görbe",explicit(g(x,1,5),x,0,10),
color = red,line_width=1,key = "+ (csúcsosság>0)",explicit(Gspc(x),x,0,10),
color = green,line_width=1,key = "- (csúcsosság<0)",explicit(Gunc(x),x,0,10))$
```

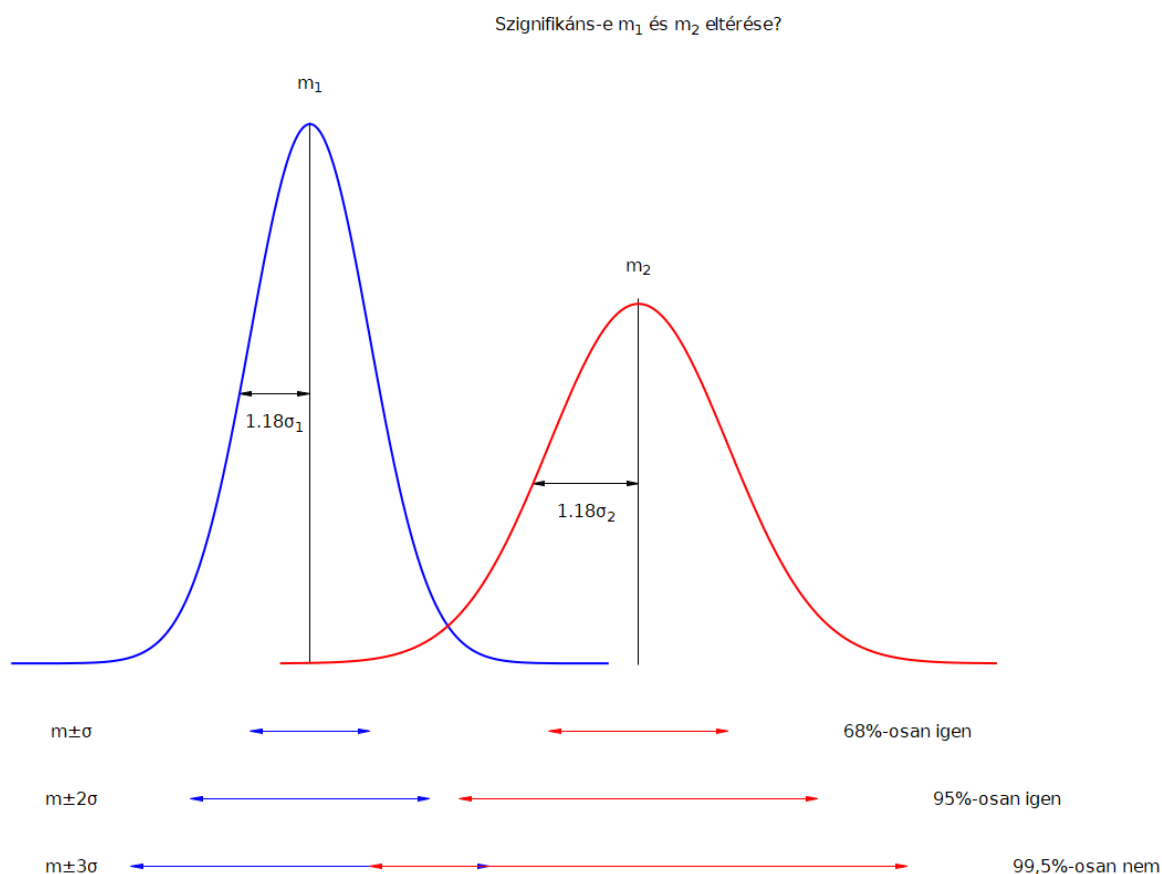


(% t14)

Hf: első három példa

2.2 Szignifikancia, megbízhatóság:

```
(% i15) wxdraw2d(user_preamble = "set size ratio 0.7", xrange=[0,21], yrange=[-0.2,0.45],
axis_left=false,axis_right=false,axis_top=false,axis_bottom=false,xtics=false,ytics=false,
title="Szignifikáns-e  $m_1$  és  $m_2$  eltérése?",
color=black,line_width=1,polygon([5,5],[0,0.4]),polygon([10.5,10.5],[0,0.27]),
head_length=0.2,head_angle=10,
vector([5,g(5,1.5)/2],[-sqrt(2*log(2)),0]),vector([5-sqrt(2*log(2)),g(5,1.5)/2],[sqrt(2*log(2)),0]),
vector([10.5,g(10.5,1.5,10.5)/2],[-3/2*sqrt(2*log(2)),0]),vector([10.5-3/2*sqrt(2*log(2)),
g(10.5,1.5,10.5)/2],[3/2*sqrt(2*log(2)),0]),
label(["m_1",5,0.430],["1.18 $\sigma_1$ ",5-sqrt(2*log(2))/2,g(5,1.5)/2-0.02],["m_2",10.5,0.295],
["1.18 $\sigma_2$ ",10.5-3/2*sqrt(2*log(2))/2,g(10.5,1.5,10.5)/2-0.02],["m $\pm\sigma$ ",1,-0.05],
["m $\pm2\sigma$ ",1,-0.10],["m $\pm3\sigma$ ",1,-0.15],
["68%-osan igen",15,-0.05],["95%-osan igen",16.5,-0.10],["99,5%-osan nem",18,-0.15]),
color = blue,
vector([5-1,-0.05],[2,0]),vector([5+1,-0.05],[-2,0]),
vector([5-2,-0.10],[4,0]),vector([5+2,-0.10],[-4,0]),
vector([5-3,-0.15],[6,0]),vector([5+3,-0.15],[-6,0]),
line_width=2,explicit(g(x,1.5),x,0,10),
color = red,line_width=1,
vector([10.5-1.5,-0.05],[3,0]),vector([10.5+1.5,-0.05],[-3,0]),
vector([10.5-3.0,-0.10],[6,0]),vector([10.5+3.0,-0.10],[-6,0]),
vector([10.5-4.5,-0.15],[9,0]),vector([10.5+4.5,-0.15],[-9,0]),
line_width=2,explicit(g(x,1.5,10.5),x,4.5,16.5))$
```



(% t15)

Szegedi átlaghőmérsékletekkel bemutatni

Sok adat kell, adatfüggetlenség !? (mi a baj ezzel)

3 hét egyenes illesztése, hibaterjedés

3.1 Egyenes illesztése (sokszor linearizálás után) és statisztikai jellemzése:

```
(% i25) disp("Példa:")$disp(c[A,t]=c[A,0]*e^-k*t)$disp(ln(c[A,t])=ln(c[A,0])-k*t)$
disp("Vagyis az aktuális koncentráció logaritmusa a t függvényében elvileg egyenes.")$
data:[[1,60.0],[2,55.5],[3,47.6],[4,60.8],[5,52.6],[6,51.7],[7,47.8],[8,52.1],[9,51.8],
[10,50.6],[11,41.6],[12,44.2],[13,42.6],[14,33.7],[15,35.7],[16,29.1],[17,36.4],
[18,30.0],[19,25.7],[20,28.9],[21,22.4],[22,25.1],[23,21.2],[24,19.8],[25,16.1],
[26,11.2],[27,7.3],[28,6.7],[29,6.2],[30,2.3]]$
ab:take_inference(b_estimation,linear_regression(data));
wxdraw2d(user_preamble="set size ratio 0.7",xrange=[0,31],yrange=[0,65],
axis_right=false,axis_top=false,xticks=false,yticks=false,
color=black,point_size=1.2,point_type=7,points(data),
line_width=2,polygon([0,30],[ab[1],ab[1]+30*ab[2]]),
line_width=1.3,head_length=0.5,head_angle=10,
vector(data[3],[0,ab[1]+data[3][1]*ab[2]-data[3][2]]),vector([data[3][1],
ab[1]+data[3][1]*ab[2],[0,data[3][2]-ab[1]-data[3][1]*ab[2]]),
line_type=dots,line_width=3,explicit(1.25*x+20,x,1,29),
label(["?",28,52],["(x_i,y_i) i=1..n",12,56],["y=a*x+b",22,12],["Δ",3.6,53]))$
S_min(a,b)=sum((y[i]-(a*x[i]+b))^2,i,1,n);
disp("Megoldandó egyenletrendszer:")$
[diff(S_min(a,b),a)=0,diff(S_min(a,b),b)=0];
```

"Példa:"

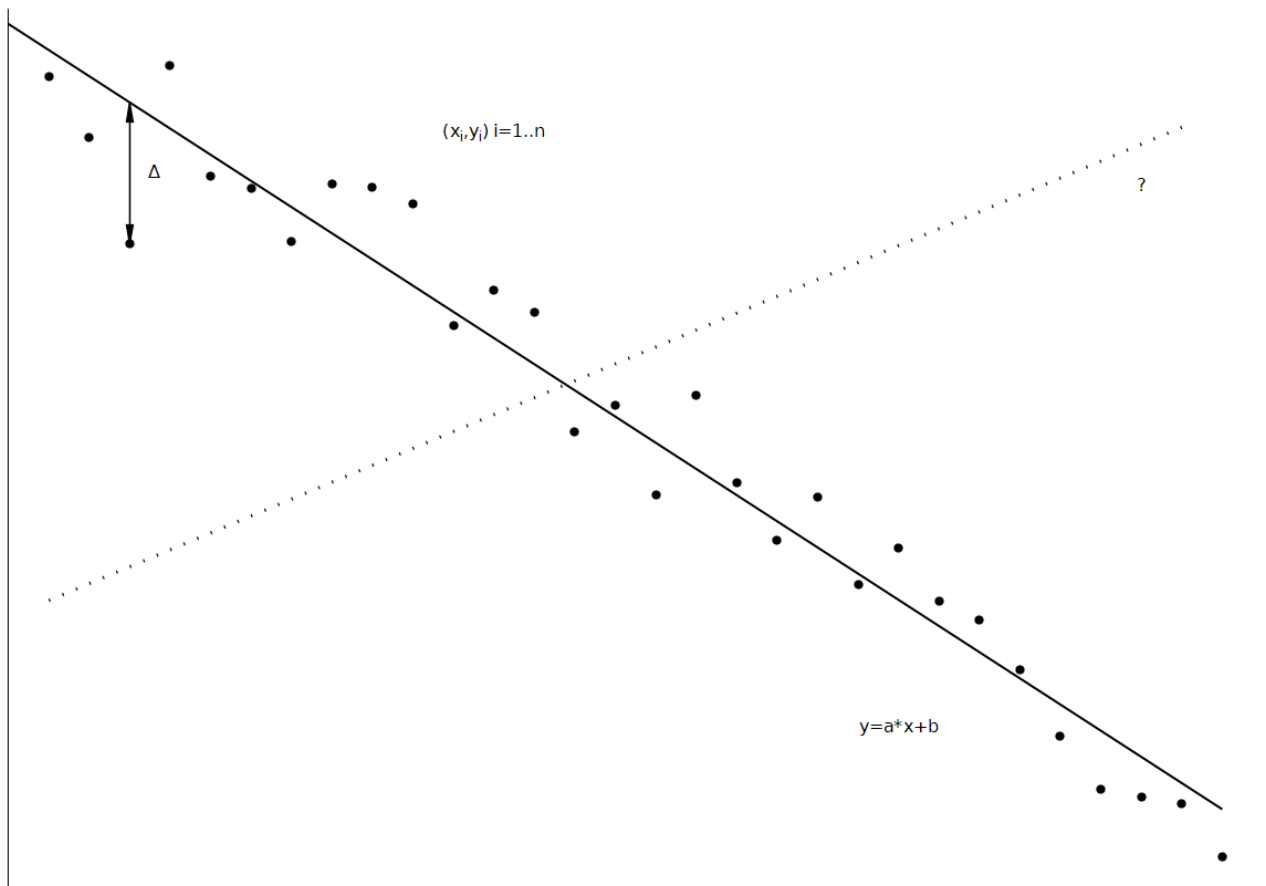
$$c_{A,t} = c_{A,0} e^{-k \cdot t}$$

$$\ln(c_{A,t}) = \ln(c_{A,0}) - k t$$

"Vagyis az aktuális koncentráció logaritmusa a t függvényében elvileg egyenes."

[63.908275862069, -1.93666295884316]

(ab)



(% t22)

$$S_{\min}(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \quad (\% o23)$$

"Megoldandó egyenletrendszer:"

$$\left[\frac{d}{da} S_{\min}(a, b) = 0, \frac{d}{db} S_{\min}(a, b) = 0 \right] \quad (\% o25)$$

Szórás vs. hiba

r magyarázata

3.2 Hiba/szórás terjedése

Hibaterjedés vagy szórásterjedés:

Mit "tudunk" eddig:

+ vagy - : abszolút hibák összegződnek;

· vagy / : relatív hibák összegződnek

De! Pl. $pK = 4,72 \pm 0,05$ vagy $pK_v = 13,75 \pm 0,03$ esetén mekkora a K és a K_v szórása?

Hf: 24–25. példák (fontos minél előbb, hogy rögződjenek a technikák)

4 hét hisztogramok, mátrixműveletek, gyakorlás

4.1 Hisztogrammok

Példa sok véletlen adatra: Na₂SO₄ Raman spektruma

GYAKORISÁG függvény. Példa: Sn(OH)₃ Mössbauer spektruma

Függvények angol nevei InterNeten.

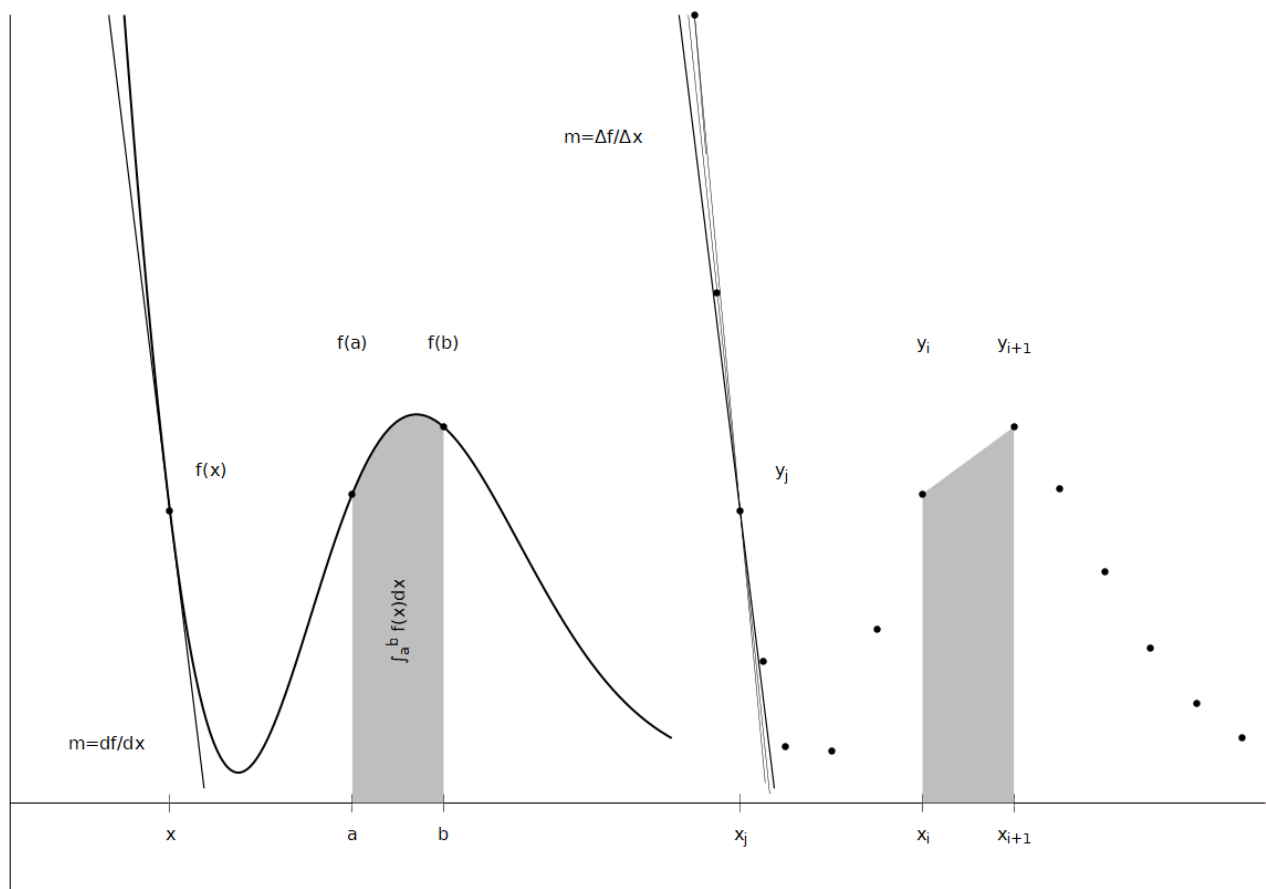
5 hét gyakorlás

6 hét gyakorlás

7 hét 1. ZH

7.1 Numerikus differenciálás és integrálás:

```
(% i30) xdata:[0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.6,0.8,1.0,1.4,1.6,1.8,2.0,2.2,2.4]$
ydata:(xdata-0.5)^ 2*exp(-xdata^ 2)+0.01$
xdata:xdata+2.5$
deriv(x):=2*(x-0.5)*%e^ (-x^ 2)-2*(x-0.5)^ 2*x*%e^ (-x^ 2)$
wxdraw2d(user_preamble = "set size ratio 0.7",xrange=[-0.5,5],yrange=[-0.03,0.26],
axis_bottom=false,axis_right=false,axis_top=false,xtics=false,ytics=false,
color=black,polygon([-0.5,5],[0,0]),
line_width=2, point_size=0.9,point_type=7,
color=grey,fill_color=grey,filled_func=0,
explicit((x-0.5)^ 2*exp(-x^ 2)+0.01,x,1,1.4),
explicit((ydata[9]-ydata[8])/(xdata[9]-xdata[8])*(x-xdata[8])+ydata[8],x,3.5,3.9),
color=black,filled_func=false,
explicit((x-0.5)^ 2*exp(-x^ 2)+0.01,x,0,2.4),
points(xdata,ydata),
points([xdata[3]-2.5,xdata[8]-2.5,xdata[9]-2.5],[ydata[3],ydata[8],ydata[9]]),
line_width=1.2,
explicit(deriv(xdata[3]-2.5)*(x-xdata[3]+2.5)+ydata[3],x,-0.1,0.35),
explicit(deriv(xdata[3]-2.5)*(x-xdata[3])+ydata[3],x,2.4,2.85),
line_width=0.5,
explicit((ydata[3]-ydata[2])/(xdata[3]-xdata[2])*(x-xdata[2])+ydata[2],x,2.4,2.83),
explicit((ydata[3]-ydata[1])/(xdata[3]-xdata[1])*(x-xdata[1])+ydata[1],x,2.4,2.81),
explicit((ydata[2]-ydata[1])/(xdata[2]-xdata[1])*(x-xdata[1])+ydata[1],x,2.4,2.55),
polygon([xdata[3]-2.5,xdata[3]-2.5],[-0.003,0.003]),
polygon([xdata[8]-2.5,xdata[8]-2.5],[-0.003,0.003]),
polygon([xdata[9]-2.5,xdata[9]-2.5],[-0.003,0.003]),
polygon([xdata[3],xdata[3]],[-0.003,0.003]),
polygon([xdata[8],xdata[8]],[-0.003,0.003]),
polygon([xdata[9],xdata[9]],[-0.003,0.003]),
label(["f(x)",0.38,0.11],["m=df/dx",-0.08,0.02],["f(a)",xdata[8]-2.5,ydata[8]+0.05],
["f(b)",xdata[9]-2.5,0.05+ydata[8]],
["x",xdata[3]-2.5,-0.01],["a",xdata[8]-2.5,-0.01],["b",xdata[9]-2.5,-0.01],
["y_i",2.88,0.11],["m=Δf/Δx",2.1,0.22],["y_i",xdata[8],ydata[8]+0.05],
["y_i+1",xdata[9],0.05+ydata[8]],
["x_i",xdata[3],-0.01],["x_i",xdata[8],-0.01],["x_i+1",xdata[9],-0.01]
),
label_orientation=vertical,
label(["∫_a^b f(x)dx",xdata[8]+xdata[9]-5)/2,0.06])$
```



(% t30)

2, 3 és több pontos módszerek a differenciáláshoz

Integrálási módszerek:

trapéz-szabály

Simpson's formula: miért kell ezzel vigyázni?

Romberg-módszer

8 hét Bevezetés a Maximába

8.1 Maxima

Maxima, QtiPlot és Octave rövid összehasonlítása

Leírások

Maxima történet:

– DARPA, a 2 m\$ grant → 1963:

project MAC (Maths and Computers)

– inside MAC: 1968–1982

MIT's MACSYMA (MAC's Symbolic Manipulator)

– 1982–1999 commercial Symbolics Macsyma

(and DOE Macsyma for Windows XP is still exists)

– Paralell: 1982 MIT version for US govermental researches

– Bill Schelter tended it from 1982 until his 2001 death

– Macsyma is permitted to GPL'd → Maxima

31–40. parancsok menüből is

A View menü

Súgó használata, Search-ben keresni

$\cos x = \cos(x)$, de a programok csak az utóbbit értik (sin és tg/tan dettó)!

9 hét gyakorlás

10 hét ábrakészítés (SciDavis/QtiPlot), gyakorlás

Bemutató példa: első feladat a megfelelő fejezetben (jelenleg a 81.).

Kiemelni, hogy a van der Waals gázegyenlet nem linearizálható.

Nem(-)linearis illesztés/regresszió/paraméterbecslés: az elv ugyanaz, mint az egyenes illesztésénél, DE!:

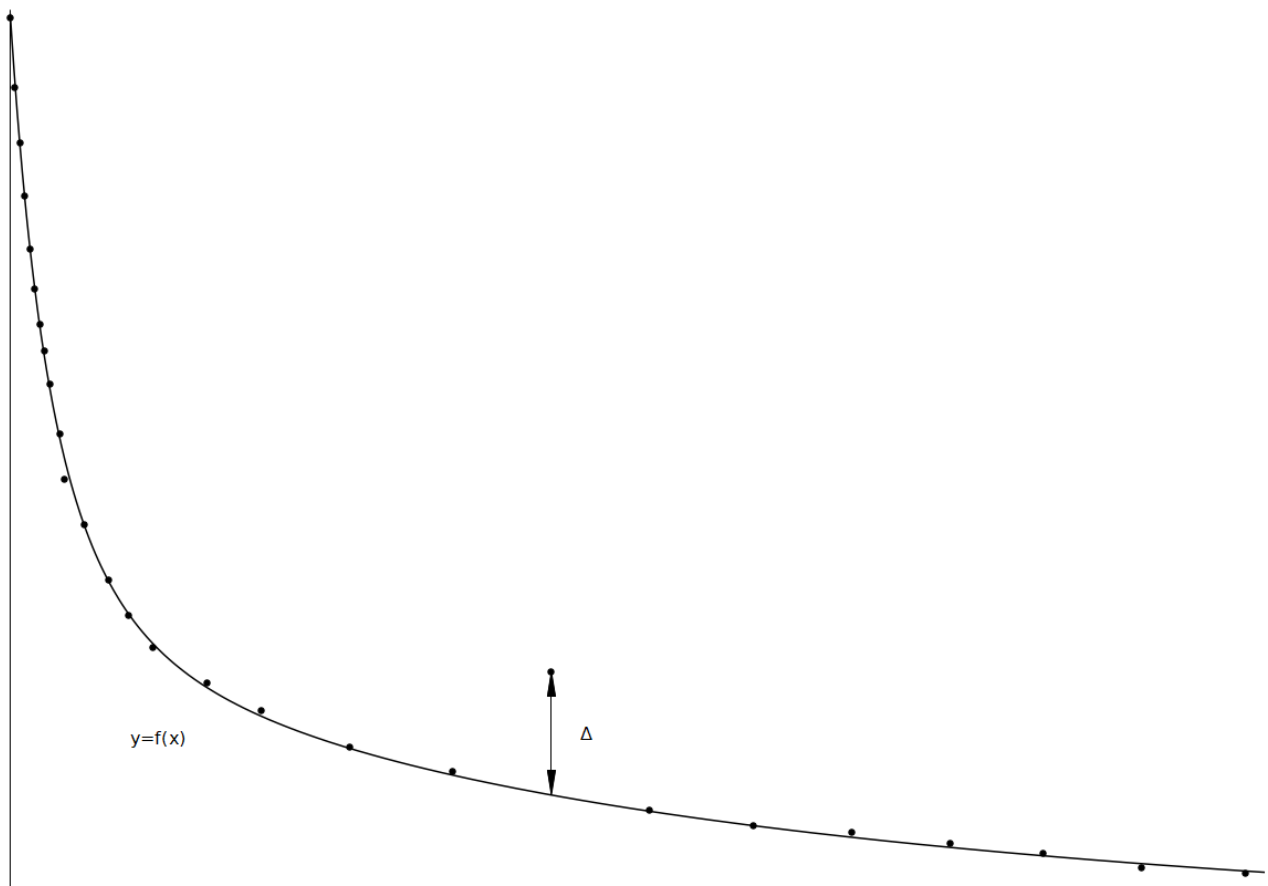
– KEZDŐÉRTÉK mindig kell (kémiai/matematikai

megfontolások + józan paraszti ész) és

– 100%-osan biztos eredmény soha sincs

(de 99,9999...% igen).

```
(% i32) data:[[5.0,3.87],[5.1,3.59],[5.2,3.37],[5.3,3.16],[5.4,2.95],[5.5,2.79],[5.6,2.65],[5.7,2.54],
[5.8,2.41],[6.0,2.21],[6.1,2.03],[6.5,1.85],[7.0,1.63],[7.4,1.49],[7.9,1.36],[9.0,1.22],
[10.1,1.11],[11.9,0.963],[14.0,0.869],[16.0,1.265],[18.0,0.713],
[20.1,0.652],[22.1,0.624],[24.1,0.580],[26.0,0.542],[28.0,0.484],[30.1,0.462]]$
wxdraw2d(user_preamble = "set size ratio 0.7",xrange=[5,30.5],yrange=[0.4,3.9],
axis_right=false,axis_top=false,xticks=false,ytics=false,
color=black,point_size=0.9,point_type=7,points(data),line_width=1.5,
explicit((8.314*(273.15-72)/(x/1e5-3.212e-5)-0.1367/(x/1e5)^2)*1e-7,x,5,30.5),
line_width=1.0,head_length=0.5,head_angle=10,
vector(data[20],[0,(8.314*(273.15-72)/(data[20][1]/1e5-3.212e-5)-0.1367/
(data[20][1]/1e5)^2)*1e-7-data[20][2]]),
vector([data[20][1],(8.314*(273.15-72)/(data[20][1]/1e5-3.212e-5)-0.1367/
(data[20][1]/1e5)^2)*1e-7],
[0,data[20][2]-(8.314*(273.15-72)/(data[20][1]/1e5-3.212e-5)-0.1367/
(data[20][1]/1e5)^2)*1e-7]),
line_type=dots,line_width=3,
label(["y=f(x)",8,1],["Δ",16.7,1.02]))$
```



(% t32)

Főbb lépések:

- ASCII importálás, vagy EXCEL-ből átmásolás
- ideális gáznyomás számítása (oszlopkitöltés eltérése az EXCEL-től
- i szerepe számoláskor a QtiPlotban, a SciDavisben ilyen nincs
- táblázat formája, címadás, X-Y sorrend fontossága
- modellekben az x az x
- kezdeti értékek: $V > b$, valamint $p \cdot V^2 > a$ és a 2. tag kisebb, mint az első
- első ábra után alapvető formázások (címek, jelmagyarázat)
- úgy alakítom, ahogy akarom.

Különbségek a QtiPlot (többet tud) és a SciDavis (megbízhatóbb működés) között

A RESULT.LOG és a Project Explorer szerepe

A végső projekt file az micsoda

QtiPlot esetén a táblázatok kitöltésénél az i, mint sorszám szerepe példákon keresztül

11 hét gyakorlás

12 hét 2. ZH

13 hét pótló és javító ZH-k

14 Kimaradók