



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ  
Εθνικό και Καποδιστριακό  
Πανεπιστήμιο Αθηνών

---

## Φυσικοχημεία 2 – Εργαστηριακές Ασκήσεις

Εισαγωγή

Αθανάσιος Τσεκούρας

Τμήμα Χημείας

---

1. Γενικές Παρατηρήσεις για τις Εργαστηριακές Ασκήσεις Φυσικοχημείας .....	3
2. Οδηγίες για την γραφή των ασκήσεων .....	3
3. Γενικές Οδηγίες.....	5
4. Ορθοί και λανθασμένοι τρόποι απεικόνισης δεδομένων σε διάγραμμα.....	5
5. Γραφική επεξεργασία δεδομένων (επανάληψη για εμπέδωση) .....	8
6. Περί σφαλμάτων μετρήσεων και αποτελεσμάτων .....	11
6.1 Προσδιορισμός σφάλματος (ή αβεβαιότητας) ενός αποτελέσματος .....	11
6.2 Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων .....	12
6.3 Γραμμική προσαρμογή .....	12
6.4 Γενική περίπτωση της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων .....	17
6.5 Στατιστικά Βάρη.....	18
7. Πίνακας φυσικών σταθερών .....	19
8. Μετατροπές μονάδων .....	19

# 1. Γενικές Παρατηρήσεις για τις Εργαστηριακές Ασκήσεις Φυσικοχημείας

Σκοπός των ασκήσεων είναι η κατανόηση φυσικών φαινομένων και μεγεθών και η μέτρησή τους. Η κατανόηση αρχίζει με την μελέτη των σημειώσεων, συντελείται κατά κύριο λόγο στο εργαστήριο και ολοκληρώνεται με την επεξεργασία των μετρήσεων και την σύνταξη της έκθεσης. Η συμμετοχή σας σε όλες τις φάσεις είναι απαραίτητη ώστε να αποκτάτε κάθε φορά νέες γνώσεις.

Για να πετύχει αυτή η διαδικασία είναι απαραίτητο να τηρείτε τα παρακάτω:

- **Προετοιμασία** για το εργαστήριο: ανάγνωση του σχετικού κεφαλαίου ώστε να γνωρίζετε με τι θα ασχοληθείτε στο εργαστήριο και στοιχειώδη θεωρία σχετική με το αντικείμενο. Ο βαθμός προετοιμασίας σας ελέγχεται πριν την έναρξη της ασκήσεως στο εργαστήριο.
- **Εκτέλεση και καταγραφή** του πειράματος: λήψη μετρήσεων με προσεκτική καταγραφή όλων των μεταβλητών που τις επηρεάζουν καθώς και των αποκλίσεων από τις υποδείξεις των οδηγιών. Σημειώνετε όλες τις πειραματικές συνθήκες και τις μετρήσεις αμέσως μετά την παρατήρηση (όχι από υπόθεση ή από μνήμης) σε τετράδιο με αριθμημένες σελίδες το οποίο θα ελέγχεται και θα υπογράφεται από τον επιβλέποντα της κάθε άσκησης πριν την αποχώρησή σας από το εργαστήριο.
- **Επεξεργασία** των μετρήσεων για τον προσδιορισμό φυσικών ποσοτήτων: Για την σύνταξη των εργαστηριακών εκθέσεων στα τετράδια, τα οποία παραδίδετε κάθε εβδομάδα, να χρησιμοποιείτε τις υποδείξεις των εργαστηριακών βοηθημάτων και να λάβετε υπόψη τα εξής:

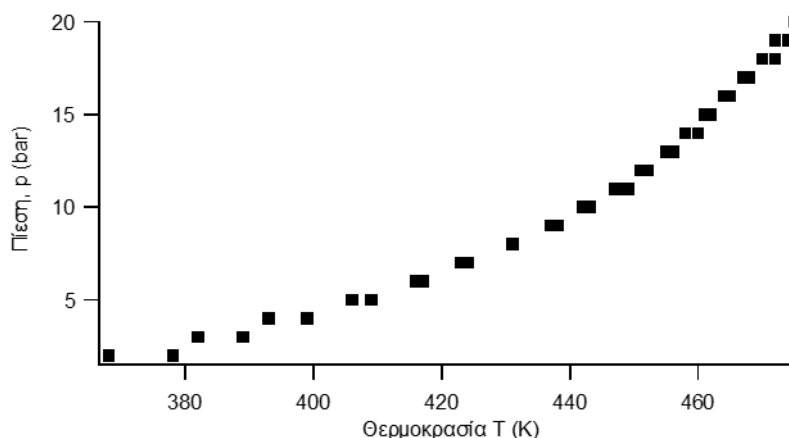
## 2. Οδηγίες για την γραφή των ασκήσεων

Κάθε πείραμα πρέπει να περιγράφεται από μια εργασία με τα εξής μέρη: Θεωρία, Πειραματικό μέρος, Μετρήσεις και επεξεργασία, Συμπεράσματα και σχόλια.

- **Θεωρία:** Σύντομη: Ποιό φαινόμενο μελετούμε, γιατί και με ποιά τεχνική. Παραθέτουμε χωρίς απόδειξη τις μαθηματικές σχέσεις οι οποίες είναι απαραίτητες για την επεξεργασία των μετρήσεων.
- **Πειραματικό μέρος:** Περιεκτικό – Γράφετε τα βήματα της διαδικασίας και τις τιμές των παραμέτρων που είναι κοινές ή περίπου σταθερές για όλες τις μετρήσεις. Σημειώνετε πώς έγινε το πείραμα, με όποιες αποκλίσεις από τις οδηγίες. Συμπληρώνετε σχόλια όπου βοηθούν τον αναγνώστη (τον διορθωτή ή εσάς σε μελλοντική ανάγνωση).
- **Μετρήσεις – επεξεργασία – υπολογισμοί:** Να παραθέτετε τους τύπους που χρησιμοποιείτε από τις οδηγίες και να δίνετε ένα αναλυτικό παράδειγμα υπολογισμού κάθε τύπου.

Αν οι τιμές δίνονται σε πίνακα, κάθε στήλη να έχει ένα σύμβολο της ποσότητας, μονάδες σε παρένθεση, τρόπο υπολογισμού με σύντομο τύπο (=  $A \times B$ ), αν χωράει, ή αριθμό σχέσης από το κείμενο της επεξεργασίας (ή θεωρίας). Η πρώτη στήλη να έχει τον αύξοντα αριθμό (α/α) κάθε σημείου ώστε να μπορεί να γίνει αναφορά σε κάθε σημείο χωριστά.

$\alpha/\alpha$	$V_{\delta}$ (mL)	$V_a$ (mL)	$V_i$ (mL)	$C_a$ (mol L <sup>-1</sup> ) (= $V_a/V_{\delta} \times 0.1$ )	$n_s$ (mol g <sup>-1</sup> ) (σχέση 13)
1	5	25.27	22.87	0.5054	$4.45 \times 10^{-4}$
2	5	20.07	17.77	0.4054	$3.43 \times 10^{-4}$



Τάση ατμών H<sub>2</sub>O συναρτήσει θερμοκρασίας

Ενδιάμεσα και τελικά αποτελέσματα να δίνονται με μονάδες και κατάλληλο αριθμό σημαντικών ψηφίων, ενδεικτικό της ακρίβειάς τους. Όπου είναι δυνατό να δίνεται το σφάλμα (αβεβαιότητα) του αποτελέσματος. π.χ.  $1.23 \times 10^2$  J ή  $1.23 \times 10^2$  J  $\pm$  4 J ή  $(1.23 \pm 0.04) \times 10^2$  J ή  $1.23(4) \times 10^2$  J.

Τα διαγράμματα να είναι αριθμημένα και να συνοδεύονται από περιγραφή λίγων λέξεων από κάτω. Οι άξονές τους να έχουν υποδιαιρέσεις, όνομα (ή και σύμβολο) φυσικών μεγεθών και μονάδες. Η μέγιστη και ελάχιστη τιμή του κάθε άξονα να μην διαφέρει πολύ από τις συντεταγμένες των ακραίων πειραματικών σημείων (η τιμή 0 δεν είναι αναγκαίο να φαίνεται σε κάθε άξονα). Τα πειραματικά σημεία να είναι ευδιάκριτα και, αν ανήκουν σε χωριστές σειρές μετρήσεων, να σημειώνονται με διαφορετικά σύμβολα τα οποία θα εξηγούνται στο υπόμνημα του διαγράμματος. Η τοποθέτηση χωριστών σειρών μετρήσεων στο ίδιο διάγραμμα διευκολύνει την σύγκρισή τους και αναδεικνύει το υπό εξέταση φαινόμενο.

- **Συμπεράσματα και σχόλια:** Αναφέρετε (επαναλαμβάνοντας προηγούμενες τιμές ή ποιοτικές διαπιστώσεις) τα κυριότερα αποτελέσματα των μετρήσεων, τα αντιπαραβάλλετε με τιμές από την βιβλιογραφία και αναδεικνύετε την ενδεχόμενη σημασία ορισμένων παρατηρήσεων. Επίσης επισημαίνετε δυσκολίες και ατέλειες κατά την διεξαγωγή ή επεξεργασία του πειράματος.

### 3. Γενικές Οδηγίες

Να επισυνάψτε φωτοτυπίες των μετρήσεων με εμφανή την ημερομηνία εκτελέσεως της άσκησης και τα ονόματα των συνεργαζόμενων φοιτητών.

Να διατηρείτε δύο τετράδια μεγάλου μεγέθους τα οποία θα παραδίδετε εναλλάξ πριν από την επόμενη άσκηση. Καθυστέρηση στην παράδοση του τετραδίου επιφέρει μείωση της βαθμολογίας και προστίθεται στις συσσωρευμένες σας εκκρεμότητες.

Η συνεργασία κατά την εκτέλεση των ασκήσεων μπορεί να συνεχίζεται και στην επεξεργασία των μετρήσεων, δεν πρέπει όμως να καταλήγει σε αντιγραφή ολόκληρων εργασιών, η οποία, όταν γίνεται αντιληπτή, θα τιμωρείται με σημαντική μείωση βαθμού και μηδενισμό όταν τα γραφόμενα δεν έχουν σχέση με την εργαστηριακή άσκηση που εκτελέσατε ή με τις οδηγίες επεξεργασίας τις οποίες έχετε. Φωτοτυπίες πινάκων ή διαγραμμάτων δεν γίνονται δεκτές.

Η απώλεια μέχρι δύο εργαστηριακών ημερών λόγω απουσίας ή ανεπιτυχούς συμμετοχής (ελλιπής προετοιμασία ή ελλιπής γραφή τετραδίου) αναπληρώνεται στο τέλος του εξαμήνου. Αν εκκρεμούν 3 ή περισσότερες ασκήσεις, ο φοιτητής υποχρεώνεται να επαναλάβει το εξάμηνο σε επόμενη χρονιά.

Μη διστάζετε να ρωτάτε για καθετί.

28/11/2005, 2/9/2008, 28/8/2010

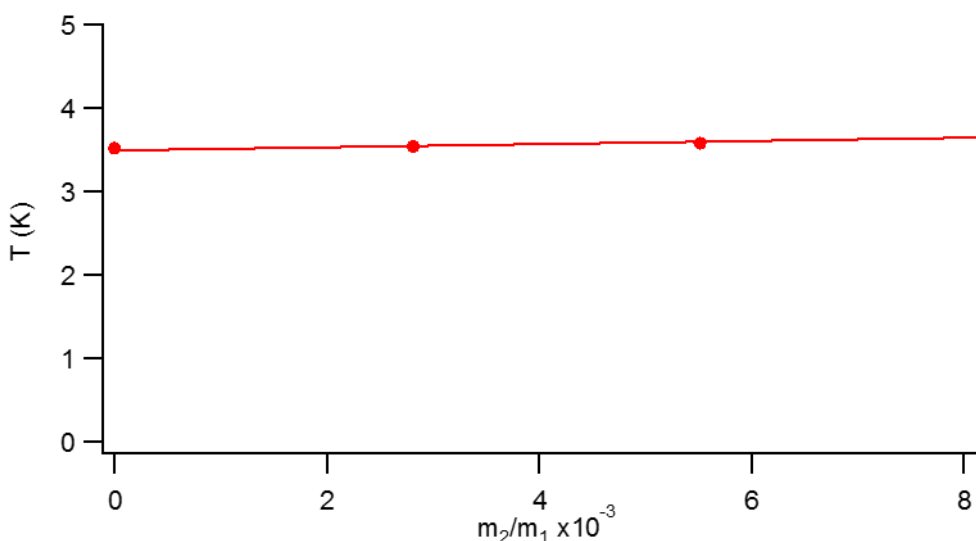
### 4. Ορθοί και λανθασμένοι τρόποι απεικονίσεως δεδομένων σε διάγραμμα

Από μετρήσεις σημείου ζέσεως σειράς διαλυμάτων προκύπτουν τα εξής δεδομένα:

T (K)	$m_2/m_1$
3.52	0.00000
3.54	0.00281
3.58	0.00552
3.68	0.00821

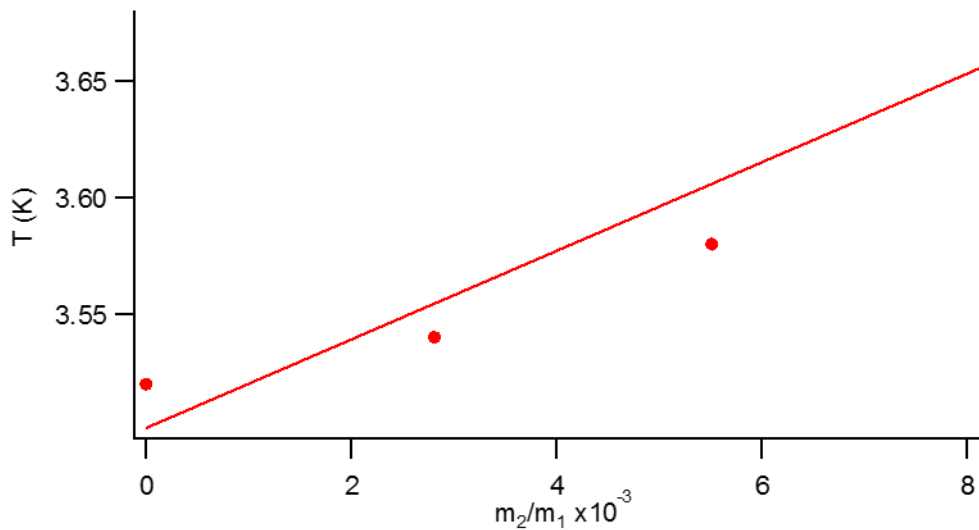
Σύμφωνα με την θεωρία τα δεδομένα πρέπει να περιγράφονται από ευθεία με εξίσωση  $y = a x + b$ , όπου  $y = T$  και  $x = m_2/m_1$ .

Κατασκευάζουμε διάγραμμα με τις τιμές αυτές:



Υπολογίζουμε την εξίσωση της ευθείας με την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων και βρίσκουμε ότι  $y = 18.97x + 3.502$ . Η στατιστική επεξεργασία προσδιορίζει και τις αβεβαιότητες των  $a$  και  $b$ :  $\sigma_a = 4.9$ ,  $\sigma_b = 0.025$ . Πώς εξηγείται η μεγάλη τιμή του  $\sigma_a$  η οποία φαίνεται παράδοση κρίνοντας από την ποιότητα του διαγράμματος με το μάτι; Μήπως το διάγραμμα αντί να αναδεικνύει την καλή ποιότητα των μετρήσεων συγκαλύπτει την κακή τους ποιότητα με ατυχή επιλογή των διαστημάτων τιμών στους άξονες;

Κατασκευάζουμε το ίδιο διάγραμμα έχοντας αναπτύξει τις τιμές του κατακόρυφου άξονα ώστε να αξιοποιείται όλος ο διαθέσιμος χώρος από τις μετρήσεις:



Δεν χρειάζεται να επαναλάβουμε τον υπολογισμό της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων γιατί τα δεδομένα είναι τα ίδια, άρα και η εξίσωση της ευθείας είναι η ίδια με πριν. Όμως τώρα είναι σαφές γιατί έχει μεγάλη αβεβαιότητα η κλίση της ευθείας.

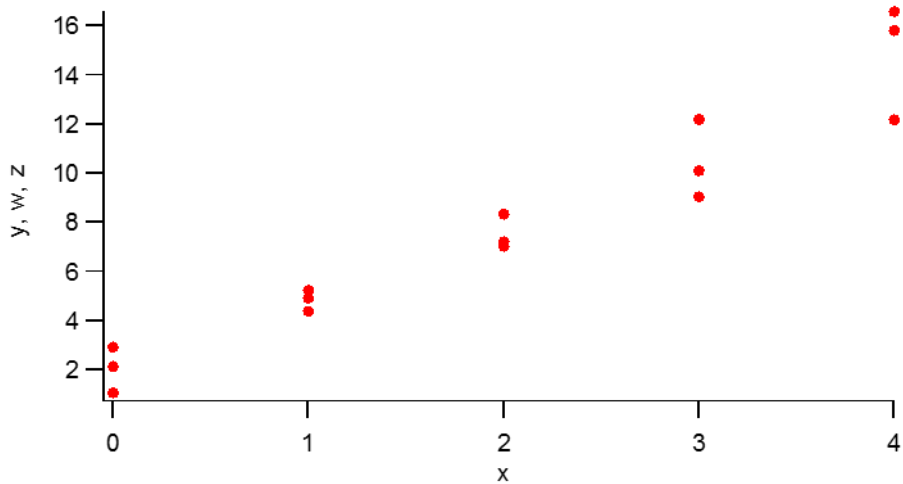
Δηλ. για να φανεί η ποιότητα των μετρήσεων και η διακύμανση των τιμών είναι απαραίτητο να γίνεται τέτοια επιλογή του διαστήματος τιμών στους άξονες ώστε να αξιοποιείται όλη η επιφάνεια του διαγράμματος.

Όταν σε ένα διάγραμμα θέλουμε να παραστήσουμε 2 ή περισσότερες σειρές μετρήσεων, είναι σκόπιμο να χρησιμοποιούμε κατάλληλο συμβολισμό για να διακρίνουμε ποια σημεία αντιστοιχούν σε ποιά σειρά μετρήσεων. Για αυτό το λόγο ποικίλουμε το χρώμα ή το σύμβολο (+, \*, □, ■, ●, ○) και σημειώνουμε σε υπόμνημα τι παριστάνουμε με κάθε σύμβολο και χρώμα.

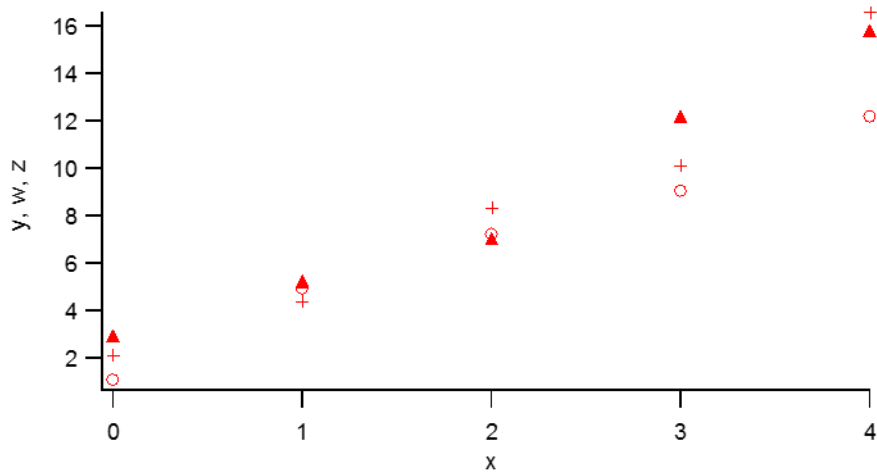
Δίνονται 3 σειρές μετρήσεων:

x	y	w	z
0.00	2.13	1.07	2.92
1.00	4.39	4.92	5.24
2.00	8.34	7.22	7.04
3.00	10.10	9.05	12.19
4.00	16.58	12.18	15.81

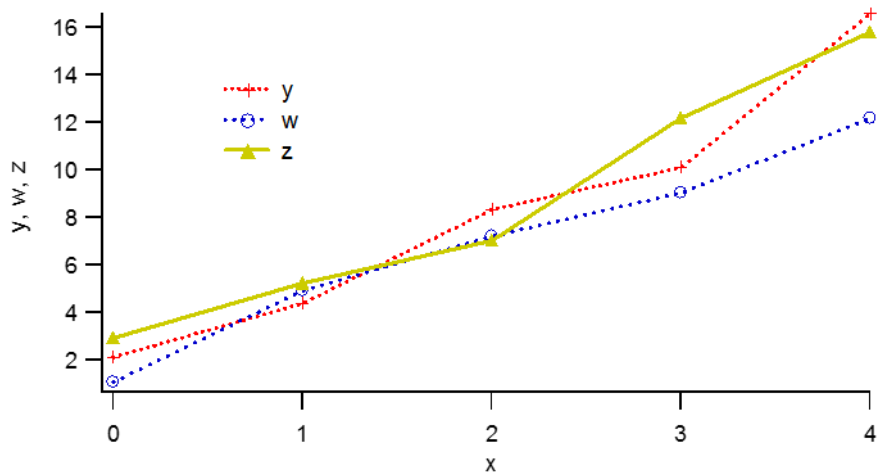
Σχεδιάζουμε διάγραμμα με όλες τις τιμές  $y$ ,  $w$ ,  $z$  συναρτήσει των τιμών  $x$ :



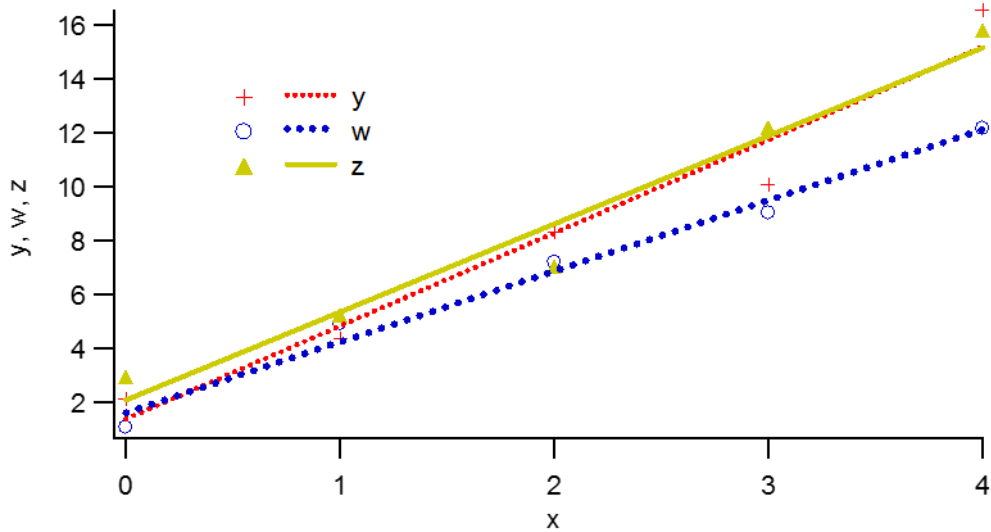
Δεν μπορούμε να διακρίνουμε πώς ομαδοποιούνται οι τιμές. Όμως αν αλλάξουμε συμβολισμό, αυτό είναι εφικτό:



ή, ακόμη καλύτερα:



Αν εφαρμόσουμε την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων στις 3 σειρές μετρήσεων προκύπτουν οι εξής ευθείες:



με εξισώσεις αντίστοιχα:

$$y = 3.46 (\pm 0.4) x + 1.4 (\pm 1)$$

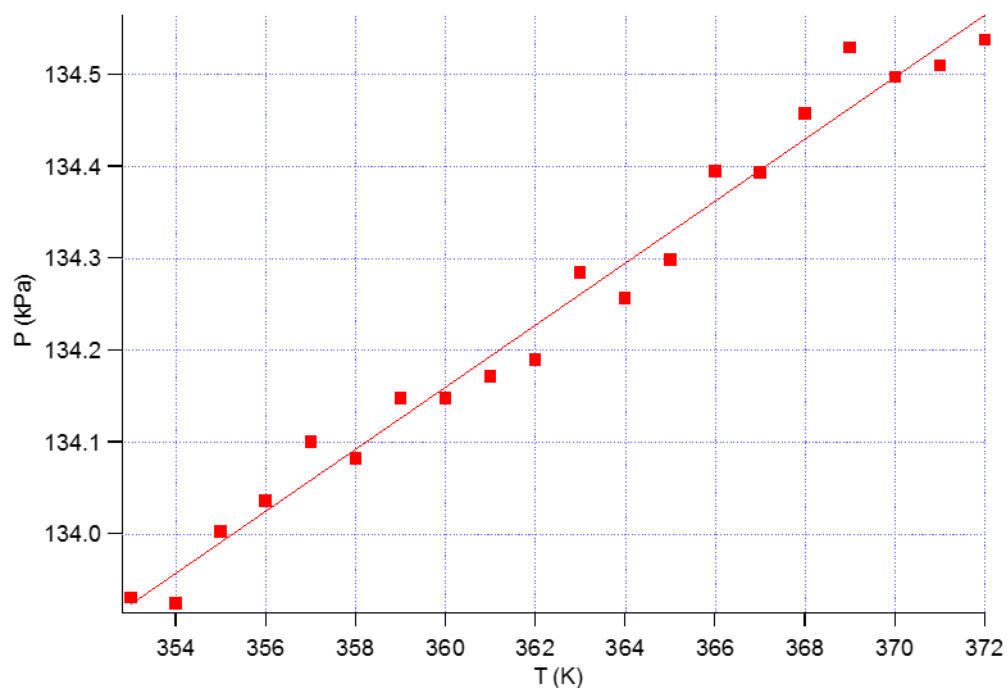
$$w = 2.63 (\pm 0.19) x + 1.61 (\pm 0.5)$$

$$z = 3.27 (\pm 0.4) x + 2.1 (\pm 0.9)$$

## 5. Γραφική επεξεργασία δεδομένων (επανάληψη για εμπέδωση)

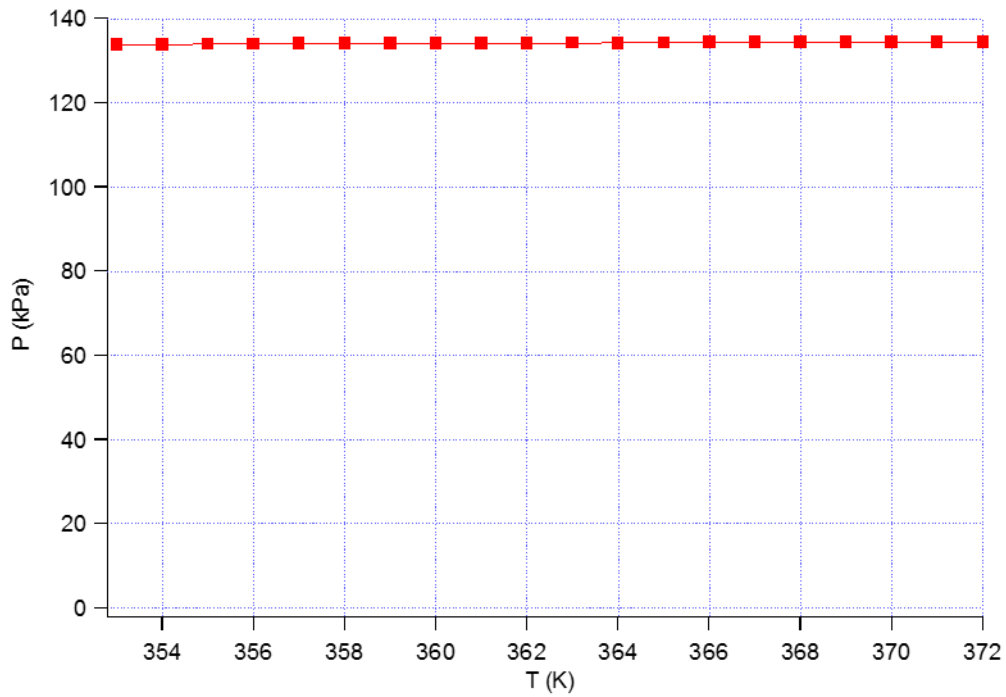
Πολλές φορές τα δεδομένα μας περιγράφονται ικανοποιητικά από μια γραμμική συνάρτηση, δηλ. τα ζεύγη τιμών  $(x_i, y_i)$  έχουν τέτοιες τιμές ώστε να υπάρχουν παράμετροι  $\alpha$  και  $\beta$  οι οποίες να ικανοποιούν σε μεγάλη προσέγγιση την σχέση

$$y_i = \alpha x + \beta \text{ για όλα τα δεδομένα με } i = 1, 2, \dots, N.$$

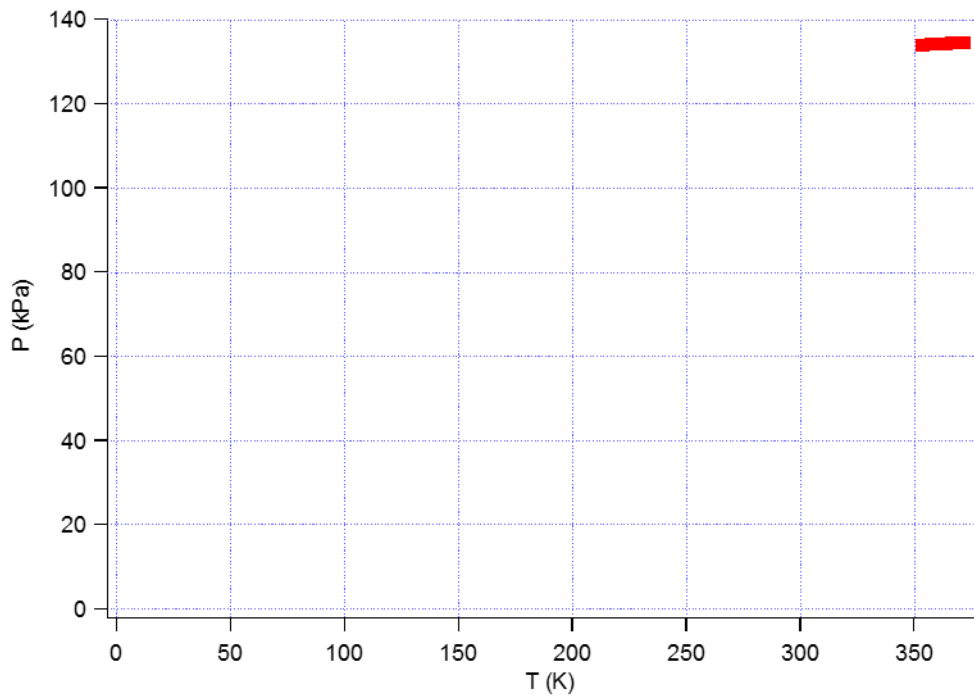




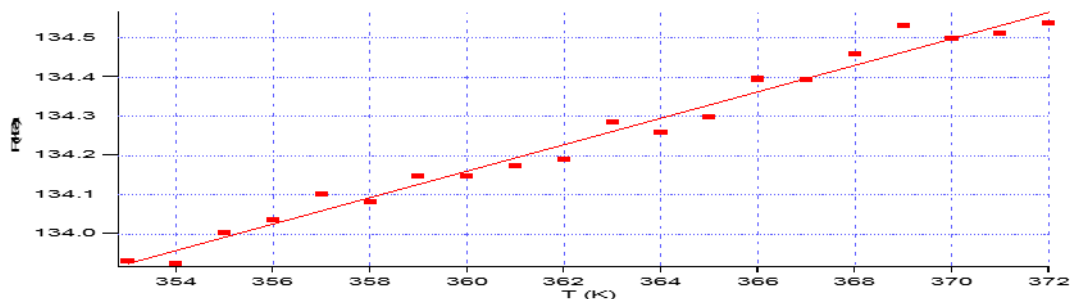
Όταν σχεδιάζουμε τα δεδομένα σε διάγραμμα, επιλέγουμε το διάστημα τιμών σε κάθε άξονα να είναι το κατάλληλο ώστε τα σημεία να μην περιορίζονται σε μικρό τμήμα, όπως στο επόμενο σχήμα:



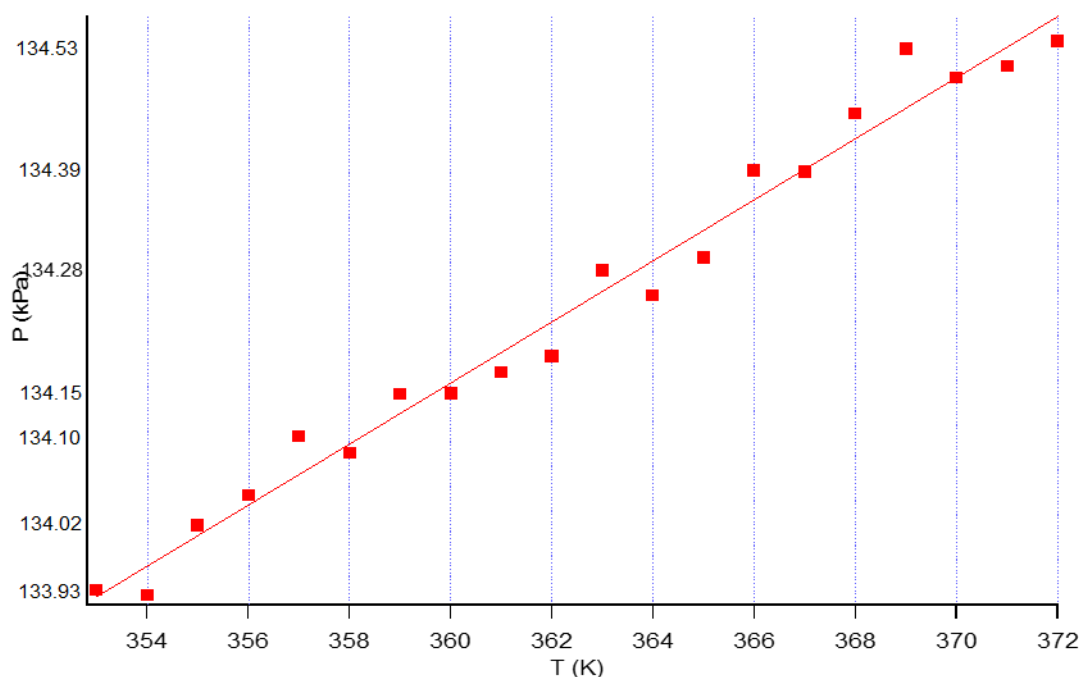
ή στο επόμενο:



Φροντίζουμε να είναι ευανάγνωστες οι τιμές στους άξονες και σε ισαπέχουσες θέσεις, όχι έτσι:



ή έτσι:



Η καλύτερη ευθεία μπορεί να σχεδιασθεί με οπτική εκτίμηση ή με υπολογισμό (με την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων). Αν την σχεδιάσουμε με οπτική εκτίμηση, προσπαθούμε να ισοκαταλείνουμε τα σημεία εκατέρωθεν της ευθείας. Αν κάνουμε υπολογισμό της εξίσωσης που περιγράφει την ευθεία, δεν χαράσσουμε την ευθεία κατ' εκτίμηση, αλλά χρησιμοποιούμε την εξίσωση για να προσδιορίσουμε τις συντεταγμένες δύο σημείων, τα σημειώνουμε στο διάγραμμα και τα ενώνουμε με ευθεία γραμμή.

Η εξίσωση της ευθείας κατά τον οπτικό σχεδιασμό της καλύτερης ευθείας απαιτεί εκτίμηση της κλίσης ( $\alpha$ ) και του σταθερού όρου ( $\beta$ ). Οι δύο παράμετροι έχουν τις κατάλληλες μονάδες ώστε η πράξη  $\alpha x + \beta$  να δίνει μέγεθος με μονάδες του  $y$ . Παρατηρώντας το (σωστό) διάγραμμα διαπιστώνουμε ότι η ευθεία περνά από τα σημεία (355.2 K, 134 kPa) και (370 K, 134.5 kPa).

$$\text{Άρα } \alpha = \frac{(134.5 - 134.0) \text{ kPa}}{(370 - 355.2) \text{ K}} = \frac{0.5 \text{ kPa}}{14.8 \text{ K}} = 0.03378 \frac{\text{kPa}}{\text{K}}.$$

Ο σταθερός όρος υπολογίζεται με την βοήθεια της κλίσης και του ενός εκ των δύο σημείων, π.χ.  $\beta = 134.5 \text{ kPa} - 0.03378 \text{ kPa K}^{-1} \times 370 \text{ K} = 122.00 \text{ kPa}$ .

Δεν μετρούμε τις συντεταγμένες των σημείων σε εκατοστά του μέτρου, ή, αν το κάνουμε, πολλαπλασιάζουμε τις τιμές αυτές με τους συντελεστές αναλογίας, δηλ. πόσα kPa ή K αντιστοιχούν

ανά εκατοστό. Αν παραλείψουμε τους συντελεστές, η κλίση έχει τιμή η οποία, αντί να εξαρτάται από τις πειραματικές τιμές, εξαρτάται από την δική μας επιλογή του τρόπου σχεδίασεως των τιμών στο διάγραμμα.

Με την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων, οι παράμετροι υπολογίζονται ως εξής:

$\alpha = 0.03373 \text{ kPa K}^{-1}$  και  $\beta = 122.02 \text{ kPa}$ . Οι τιμές αυτές είναι πολύ κοντά στις τιμές που προσδιορίσαμε γραφικά. Η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων έχει το πλεονέκτημα ότι μας δίνει μια αμερόληπτη (ανεξάρτητη από τον παρατηρητή) τιμή για τις παραμέτρους και παρέχει επίσης τις αβεβαιότητες των παραμέτρων. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα, οι αβεβαιότητες είναι  $\sigma_\alpha = 0.0012$  και  $\sigma_\beta = 0.4$ .

25/6/2008, 1/7/2008

## 6. Περί σφαλμάτων μετρήσεων και αποτελεσμάτων

### 6.1 Προσδιορισμός σφάλματος (ή αβεβαιότητας) ενός αποτελέσματος

Σφάλμα μιας μετρήσεως: σφάλμα αναγνώσεως, π.χ.  $\pm 1/2$  υποδιαιρέσεως κλίμακος.

Σφάλμα πολλαπλών, επαναληπτικών μετρήσεων:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} = \left( \frac{1}{N(N-1)} \left[ N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2 \right] \right)^{1/2} \quad (1)$$

Πρόκειται για την τυπική απόκλιση εφόσον υποθέσουμε ότι κάθε μέτρηση ακολουθεί τυχαία κατανομή σφάλματος.  $\bar{x}$  είναι η μέση τιμή της μεταβλητής  $x$  και την χρησιμοποιούμε ως την καλύτερη προσέγγιση

$$\text{της πραγματικής τιμής της } x. \quad \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \quad (2)$$

όπου  $x_1, x_2, \dots, x_N$  είναι οι μετρήσεις της μεταβλητής  $x$ .

Η **τυπική απόκλιση**,  $\sigma$ , είναι παράμετρος της κανονικής κατανομής (κατανομής Gauss) η οποία (κατανομή) περιγράφει την πιθανότητα (για την ακρίβεια, την πυκνότητα πιθανότητας\*) ευρέσεως της

$$\text{τιμής } x \text{ της μετρούμενης ποσότητας } f(x) = A \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x_i - \bar{x}}{\sigma} \right)^2 \right], \quad (3)$$

$$\text{όπου } A = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \text{ έτσι ώστε } \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1. \quad (4)$$

Ισχύει ότι  $\int_{\bar{x}-\sigma}^{\bar{x}+\sigma} f(x) dx = 0.68 = 68\%$ . Δηλαδή, όταν αναφέρουμε για μια μέτρηση ότι έχει τυπική απόκλιση

$\sigma$ , δηλώνουμε ότι η πιθανότητα να βρεθεί μια μέτρηση στο διάστημα  $[\bar{x}-\sigma, \bar{x}+\sigma]$  είναι 68%. Ακόμη πιο συνοπτικά εννοούμε το ίδιο πράγμα όταν γράφουμε ότι η τιμή μιας ποσότητας είναι π.χ.  $14.23 \pm 0.07$  ή  $14.23(7)$ , όπου εννοείται ότι  $\bar{x} = 14.23$  και  $\sigma = 0.07$ .

**Σημαντικά ψηφία:** Αν υπολογίσουμε  $\bar{x} = 14.2325783$  και  $\sigma = 0.06972476$ , δεν έχει έννοια να καταγράψουμε όλα τα ψηφία γιατί δεν είναι σημαντικά. Η σωστή απάντηση είναι  $14.23 \pm 0.07$ .

\* Η πιθανότητα ευρέσεως της τιμής της μετρούμενης ποσότητας στο διάστημα  $(x, x+dx)$  δίνεται από το διαφορικό  $f(x)dx$ .

**Διάδοση σφάλματος:** Αν έχουμε  $x_3 = x_1 \pm x_2$ , τότε  $\sigma_3^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2$ . (5)

Αν  $x_4 = x_1 \cdot x_2$ , τότε  $\left(\frac{\sigma_4}{x_4}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_1}{x_1}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_2}{x_2}\right)^2$ . (6)

Γενικά, αν  $y = f(x)$ , τότε  $\sigma_y^2 = \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \sigma_x^2$ . (7)

Τέλος, αν  $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  και οι μεταβλητές  $x_i$  είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους (δηλ. δεν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ τους) τότε  $\sigma_y^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2$  (8)

Γενικότερα:  $\sigma_y^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2 + 2 \sum_{i < j} \left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right) \left(\frac{\partial y}{\partial x_j}\right) \sigma_{x_i x_j}^2$ , (9)

όπου  $\sigma_{x_i x_j}^2$  είναι η συνδιακύμανση των μεταβλητών  $x_i$  και  $x_j$ , που αποτελεί μέτρο της συσχέτισης των μεταβλητών αυτών. Η σχέση (9) αποτελεί τον πλήρη τύπο διαδόσεως σφάλματος.

## 6.2 Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων

Πρόκειται για γενική μέθοδο προσδιορισμού των παραμέτρων ( $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ ) μιας πρότυπης σχέσης ( $y = f(x)$ ) η οποία θεωρούμε ότι περιγράφει τις μετρήσεις μας ( $y_1, y_2, \dots, y_N$ ). Η μέθοδος υποθέτει ότι οι αποκλίσεις των υπολογιζόμενων τιμών  $f(x_i)$  από τις μετρήσεις  $y_i$ , δηλ. οι ποσότητες  $y_i - f(x_i)$  ακολουθούν κανονική κατανομή και οι παράμετροι προσδιορίζονται με ελαχιστοποίηση της ποσότητας  $S$  (ή  $\chi^2$  στην

βιβλιογραφία) όπου  $S = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2$ . (10)

Αυτό το άθροισμα ονομάζουμε άθροισμα τετραγώνων των αποκλίσεων.

Αν π.χ. η  $f(x)$  έχει 3 παραμέτρους, τις  $\alpha, \beta$  και  $\gamma$ , τότε  $\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \frac{\partial S}{\partial \beta} = \frac{\partial S}{\partial \gamma} = 0$ . (11)

Προκύπτει έτσι σύστημα εξισώσεων ως προς  $\alpha, \beta, \gamma$  ισάριθμες με τις παραμέτρους της  $f(x)$ .

## 6.3 Γραμμική προσαρμογή

Η γνωστότερη περίπτωση εφαρμογής της μεθόδου είναι για  $f(x) = \alpha x + \beta$ . (12)

Αν  $x_1, x_2, \dots, x_N$  είναι οι τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής  $x$  και  $y_1, y_2, \dots, y_N$  οι αντίστοιχες μετρήσεις της εξαρτημένης μεταβλητής  $y$ , τότε ζητούμε τις τιμές των  $\alpha$  και  $\beta$  για τις οποίες

$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = 0$  και  $\frac{\partial S}{\partial \beta} = 0$ , όπου  $S = \sum_{i=1}^N (y_i - \alpha x_i - \beta)^2$ .

$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = 0 \Rightarrow \sum [-2x_i (y_i - \alpha x_i - \beta)] = 0 \Rightarrow \sum x_i y_i - \alpha \sum x_i^2 - \beta \sum x_i = 0$  και

$\frac{\partial S}{\partial \beta} = 0 \Rightarrow \sum [-2(y_i - \alpha x_i - \beta)] = 0 \Rightarrow \sum y_i - \alpha \sum x_i - \beta \sum 1 = 0$ .

Επιλύουμε ως προς α και β:

$$\alpha = \frac{1}{D} (N \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i) \text{ και} \quad (13\alpha)$$

$$\beta = \frac{1}{D} (\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i), \quad (13\beta)$$

$$\mu\epsilon \ D = N \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2. \quad (13\gamma)$$

Ο συντελεστής συσχέτισης  $r$  είναι ο λόγος της συνδιακύμανσης των  $x$  και  $y$  προς την ρίζα του γινομένου των διακυμάνσεων των μεταβλητών αυτών:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i y_i - \bar{y} \sum_{i=1}^N x_i - \bar{x} \sum_{i=1}^N y_i + N \bar{x} \bar{y}}{\sqrt{\left[ \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^N x_i)^2}{N} \right] \left[ \sum_{i=1}^N y_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^N y_i)^2}{N} \right]}} \Rightarrow$$

$$r = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i y_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i}{\sqrt{\left[ N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2 \right] \left[ N \sum_{i=1}^N y_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N y_i \right)^2 \right]}} \quad (14)$$

Πολλοί υπολογιστές τσέπης ή προγράμματα υπολογίζουν τα  $\alpha$  και  $\beta$ . Λίγοι όμως δίνουν τα σφάλματα (τυπικές αποκλίσεις) των  $\alpha$  και  $\beta$ . Σύμφωνα με την γενική σχέση μεταδόσεως σφάλματος (8),

$$\sigma_\alpha^2 = \sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{\partial \alpha}{\partial x_i} \right)^2 \sigma_{x_i}^2 + \left( \frac{\partial \alpha}{\partial y_i} \right)^2 \sigma_{y_i}^2 \right] \text{ και } \sigma_\beta^2 = \sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{\partial \beta}{\partial x_i} \right)^2 \sigma_{x_i}^2 + \left( \frac{\partial \beta}{\partial y_i} \right)^2 \sigma_{y_i}^2 \right]. \quad (15)$$

Οι τιμές  $x_i$  δεν έχουν σφάλμα (προϋπόθεση για την μέθοδο) και συνήθως θεωρούμε ότι όλες τις τιμές  $y_i$ , έχουν το ίδιο σφάλμα, δηλ.  $\sigma_{x_i} = 0$  και  $\sigma_{y_i} = \sigma_y$ , όπου

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{S}{N-2}} = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \alpha x_i - \beta)^2}{N-2}} \Rightarrow$$

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{\sum y_i^2 - 2\alpha \sum x_i y_i - 2\beta \sum y_i + \alpha^2 \sum x_i^2 + \beta 2\alpha \sum x_i + \beta N}{N-2}}. \quad (16)$$

$$\text{Τότε: η (15α) γίνεται } \sigma_\alpha^2 = \sigma_y^2 \sum \left( \frac{\partial \alpha}{\partial y_i} \right)^2 \quad (17)$$

$$\text{Όμως από τη σχέση (13α) έχουμε: } \frac{\partial \alpha}{\partial y_i} = \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial y_i} (N \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i) = \frac{1}{D} (N x_i - \sum x_i)$$

άρα:

$$\sigma_{\alpha}^2 = \sigma_y^2 \sum \left( \frac{1}{D} (N x_i - \sum x_i) \right)^2 = \left( \frac{\sigma_y}{D} \right)^2 N D = \frac{N}{D} \sigma_y^2. \quad (18)$$

Παρομοίως,  $\sigma_{\beta}^2 = \frac{1}{D} \sigma_y^2 \sum x_i^2. \quad (19)$

Η υπολογισμένη εξίσωση της ευθείας μας επιτρέπει να υπολογίσουμε (να προβλέψουμε) μια τιμή  $y$  για οποιαδήποτε επιλεγμένη τιμή  $x$ . Και εδώ η αβεβαιότητα αυτής της τιμής του  $y$  μπορεί να προσδιορισθεί με την βοήθεια της σχέσεως μεταδόσεως του σφάλματος (8), πάντα με την ρητή προϋπόθεση των μη συσχετιζόμενων μεταβλητών.

Η υπολογισμένη τιμή του  $y$  είναι:  $y_c = \alpha x + \beta$ . Το  $x$  δεν έχει σφάλμα. Οι παράμετροι  $\alpha$  και  $\beta$  υπολογίζονται από τις σχέσεις (13) με βάση το σύνολο των ζευγών των τιμών  $(x_i, y_i)$ , άρα τα σφάλματα των  $\alpha$  και  $\beta$  δεν είναι ανεξάρτητα. Συνεπώς η (8) γίνεται:

$$\sigma_{y_c}^2 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial y_c}{\partial y_i} \right)^2 \sigma_y^2, \text{ όπου} \quad (20)$$

$$y_c = \alpha x + \beta = \frac{\left( N \sum_{j=1}^N x_j y_j - \sum_{j=1}^N x_j \sum_{j=1}^N y_j \right) x + \sum_{j=1}^N x_j^2 \sum_{j=1}^N y_j - \sum_{j=1}^N x_j \sum_{j=1}^N x_j y_j}{D} \quad (21)$$

οπότε  $\frac{\partial y_c}{\partial y_i} = \frac{\left( N x_i - \sum_{j=1}^N x_j \right) x + \sum_{j=1}^N x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^N x_j}{D}$  και

$$\left( \frac{\partial y_c}{\partial y_i} \right)^2 = \left( \frac{\left( N x_i - \sum_{j=1}^N x_j \right) x + \sum_{j=1}^N x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^N x_j}{D} \right)^2 =$$

$$\left( \frac{\partial y_c}{\partial y_i} \right)^2 = \frac{1}{D^2} \left[ \left( N x_i - \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 x^2 + \left( N x_i - \sum_{j=1}^N x_j \right) \left( \sum_{j=1}^N x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^N x_j \right) x + \left( \sum_{j=1}^N x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right] =$$

$$= \frac{1}{D^2} \left[ \left( N^2 x_i^2 - 2 N x_i \sum_{j=1}^N x_j \left( \sum_{j=1}^N x_j \right) \right) x^2 + \right. \\ \left. + 2 \left( N x_i \sum_{j=1}^N x_j^2 - N x_i^2 \sum_{j=1}^N x_j - \sum_{j=1}^N x_j \sum_{j=1}^N x_j^2 + x_i \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) x + \right. \\ \left. + \left( \sum_{j=1}^N x_j^2 \right)^2 - 2 x_i \sum_{j=1}^N x_j \sum_{j=1}^N x_j^2 + x_i^2 \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right] =$$

οπότε η (20) γίνεται:

$$\begin{aligned}
\sigma_{y_c}^2 &= \frac{\sigma_y^2}{D^2} \sum_{i=1}^N \left[ \left( N^2 x_i^2 - 2N x_i \sum_{j=1}^N x_j + \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) x^2 + \right. \\
&+ 2 \left( N x_i \sum_{j=1}^N x_j^2 - N x_i^2 \sum_{j=1}^N x_j - \sum_{j=1}^N x_j \sum_{j=1}^N x_j^2 + x_i \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) x + \\
&\left. + \left( \sum_{j=1}^N x_j^2 \right)^2 - 2x_i \sum_{j=1}^N x_j \sum_{j=1}^N x_j^2 + x_i^2 \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right] = \\
&= \frac{\sigma_y^2}{D^2} \left[ \left( N^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - 2N \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 + N \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) x^2 + \right. \\
&+ 2 \left( N \sum_{i=1}^N x_i \sum_{j=1}^N x_j^2 - N \sum_{i=1}^N x_i^2 \sum_{j=1}^N x_j - N \sum_{j=1}^N x_j \sum_{j=1}^N x_j^2 + \sum_{i=1}^N x_i \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) x + \\
&\left. + N \left( \sum_{j=1}^N x_j^2 \right)^2 - 2 \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \sum_{j=1}^N x_j^2 + \sum_{i=1}^N x_i^2 \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right] = \\
&= \frac{\sigma_y^2}{D^2} \left[ N \left( N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) x^2 - 2 \sum_{i=1}^N x_i \left( N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^1 \right) x + \sum_{j=1}^N x_j^2 \left( N \sum_{j=1}^N x_j^2 - \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) \right] = \\
&= \frac{\sigma_y^2}{D^2} \left( N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 \right) \left[ N x^2 - 2x \sum_{i=1}^N x_i + \sum_{j=1}^N x_j^2 \right] \Rightarrow \\
\text{Συνεπώς: } \sigma_{y_c}^2 &= \frac{\sigma_y^2}{D} \left[ N x^2 - 2x \sum_{i=1}^N x_i + \sum_{j=1}^N x_j^2 \right] \quad (22)^*
\end{aligned}$$

Αν είχαμε θεωρήσει (λανθασμένα) ότι δεν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των παραμέτρων α και β, και εφαρμόζαμε την σχέση (8), θα προέκυπτε με την βοήθεια των (18) και (19) το εξής:

$$\sigma_{y_c}^2 = \sigma_\alpha^2 x^2 + \sigma_\beta^2 = \frac{\sigma_y^2}{D} \left[ N x^2 + \sum_{i=1}^N x_i^2 \right] \quad (23)$$

Η σχέση (22) μπορεί να μας δώσει μια ζώνη αβεβαιότητας για τις υπολογισμένες τιμές του y. Διερεύνηση της (22) μας επιτρέπει να βρούμε ποιες είναι οι πιο αξιόπιστες υπολογισμένες τιμές y, δηλ. να βρούμε για ποιες τιμές x το σφάλμα του υπολογισμένου y γίνεται ελάχιστο. Θα συμβεί αυτό στην θέση όπου η πρώτη παράγωγος της (22) ως προς x γίνεται 0.

$$\frac{\partial \sigma_{y_c}^2}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\sigma_y^2}{D} \frac{\partial}{\partial x} \left[ N x^2 - 2x \sum_{i=1}^N x_i + \sum_{j=1}^N x_j^2 \right] = 0 \Rightarrow 2N x - 2 \sum_{i=1}^N x_i = 0 \Rightarrow x = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N} = \bar{x} \quad (24)$$

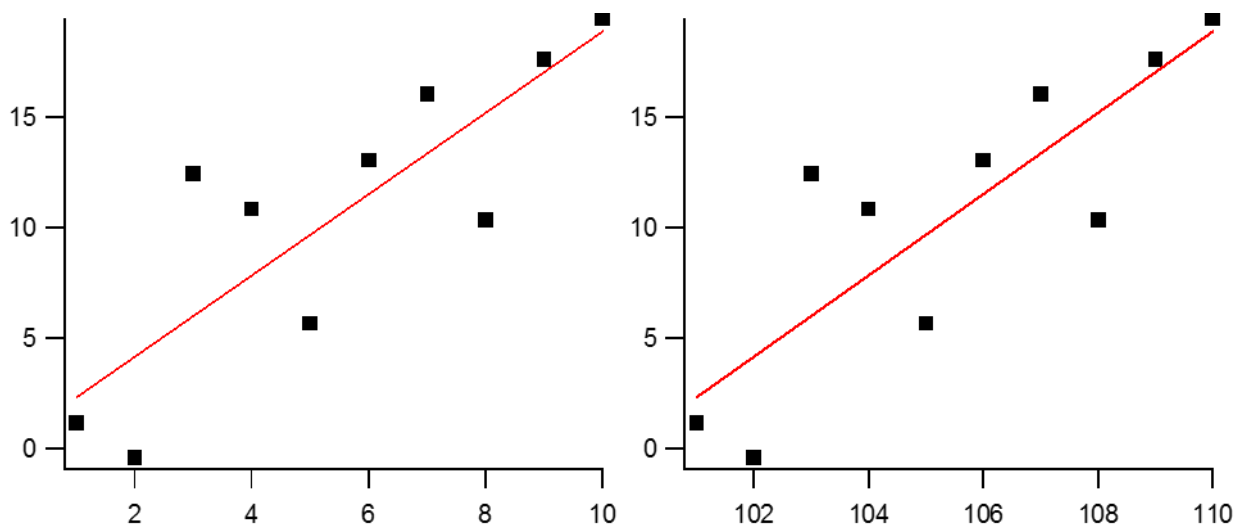
Αυτό το αποτέλεσμα είναι πολύ λογικό: Οι πληροφορίες της καμπύλης (της ευθείας) είναι πιο αξιόπιστες στο κέντρο βάρους των τιμών του οριζώντιου άξονα. Προκειμένου για ισαπέχουσες τιμές x αυτό είναι στην μέση του διαστήματος.

\* Για x = 0, έχουμε y<sub>c</sub> = β και η σχέση (22) μας δίνει το σ<sub>β</sub><sup>2</sup>.

Μια ποσότητα που προσδιορίζεται συχνά είναι η τετμημένη επί την αρχή, δηλ. για  $y = 0$ ,  $x = \gamma = -\frac{\beta}{\alpha}$ . Το σφάλμα του  $\gamma$  δεν μπορεί να υπολογισθεί από την σχέση (6), αλλά, με πορεία ανάλογη αυτής που κατέληξε στην σχέση (22), προκύπτει

$$\sigma_{\gamma}^2 = \frac{\sigma_y^2}{D\alpha^2} \left[ N\gamma^2 - 2\gamma \sum_{i=1}^N x_i + \sum_{i=1}^N x_i^2 \right] \quad (25)$$

Στα ακόλουθα διαγράμματα παριστάνονται δύο σειρές 10 δεδομένων και οι αντίστοιχες υπολογισμένες ευθείες με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.



Οι αντίστοιχες εξισώσεις των ευθειών είναι:

$$y = (1.8 \pm 0.4)x + (0.5 \pm 3)$$

$$y = (1.8 \pm 0.4)x + (-18 \pm 4) \cdot 10^1$$

x(1)	y	x(2)
1	1.14	101
2	-0.41	102
3	12.43	103
4	10.83	104
5	5.65	105
6	13.04	106
7	16.06	107
8	10.33	108
9	17.62	109
10	19.49	110

Ποσότητα	1 <sup>η</sup> σειρά	2 <sup>η</sup> σειρά	Ποσότητα	1 <sup>η</sup> σειρά	2 <sup>η</sup> σειρά
N	10	10	D	825	825
$\sum x_i$	55	1055	$\alpha$	1.84206	1.84206
$\sum x_i^2$	385	111385	$\beta$	0.486667	-183.719
$\sum y_i$	106.18	106.16	$\sigma_y$	3.91831	3.91831
$\sum x_i y_i$	735.96	11354	$\sigma_{\alpha}$	0.431392	0.431392
$\sum y_i^2$	1530.18	1530.18	$\sigma_{\beta}$	2.67672	45.5287
S	122.825	122.825	r	0.833693	0.833693

Πίνακες με τις τιμές των 2 σειρών δεδομένων και οι αντίστοιχες υπολογισμένες ποσότητες

Η κλίση ( $\alpha$ ), η τυπική της απόκλιση ( $\sigma_{\alpha}$ ), το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων (S) και ο συντελεστής συσχέτισης ( $r$ ) είναι ίδια για τις δύο σειρές δεδομένων γιατί η μόνη διαφορά είναι μια μετάθεση κατά 100 των τετμημένων. Αν υπολογίσουμε την τιμή του  $y$  για  $x = 5$  και  $x = 105$  από την αντίστοιχη εξίσωση χρησιμοποιώντας 7 σημαντικά ψηφία, αντί για 2 που υπαγορεύουν οι αβεβαιότητες, η τιμή που βρίσκουμε είναι επίσης η ίδια:  $y = 9.70$ . Οι αντίστοιχες αβεβαιότητες σύμφωνα με την σχέση (22) υπολογίζονται ως εξής:



Από την (16) προκύπτει ότι  $\sigma_y = \sqrt{\frac{122.8}{10-2}} = 3.9$

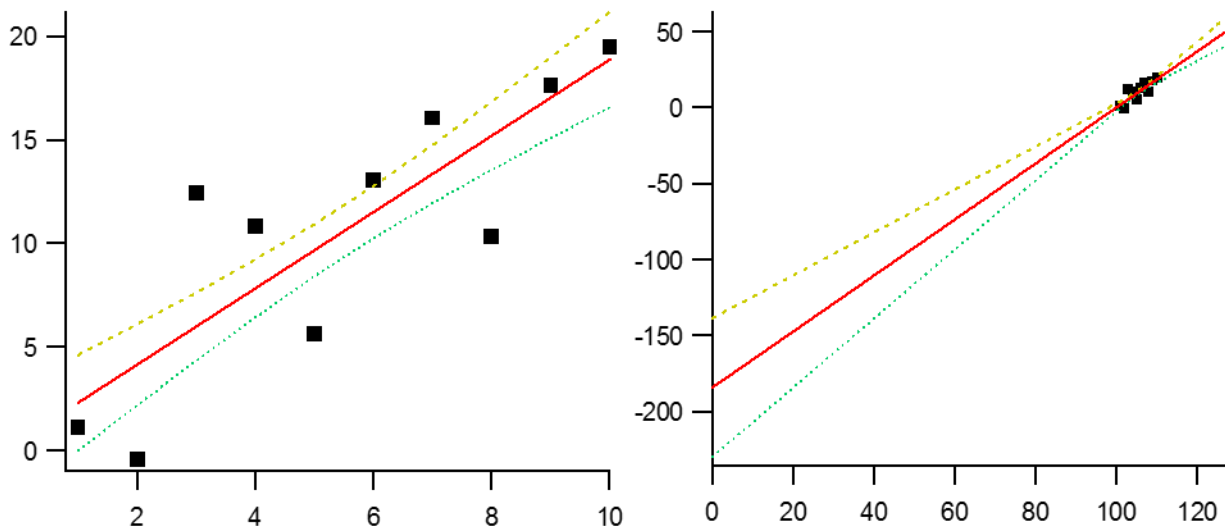
$D = 825$  και για τις δύο σειρές, ομοίως η παρένθεση στην (22) είναι 85, άρα τελικά η αβεβαιότητα του  $y_c$  είναι 1.3 και επομένως  $y_c = 9.7 \pm 1.3$ .

Οι παραπάνω εμπειρικές παρατηρήσεις αποδεικνύονται αν αντικαταστήσουμε σε όλες τις σχέσεις τις τιμές  $x_i$  με  $x_i' = x_i + x_0$ . π.χ. η ποσότητα  $D$  της σχέσεως (13γ) (ο κοινός παρονομαστής των παραμέτρων  $\alpha$  και  $\beta$ ) μετατρέπεται ως εξής:

$$\begin{aligned} D' &= N \sum_{i=1}^N x_i'^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i' \right)^2 = N \sum_{i=1}^N (x_i + x_0)^2 - \left( \sum_{i=1}^N (x_i + x_0) \right)^2 = \\ &= N \sum_{i=1}^N (x_i^2 + 2x_i x_0 + x_0^2) - \left( \sum_{i=1}^N x_i + N x_0 \right)^2 = \\ &= N \sum_{i=1}^N x_i^2 + 2N x_0 \sum_{i=1}^N x_i + N^2 x_0^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2 - 2N x_0 \sum_{i=1}^N x_i - N^2 x_0^2 = N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2 = D \end{aligned}$$

Αν χρησιμοποιούσαμε την λανθασμένη σχέση (23), θα προέκυπτε τυπική απόκλιση 3.4 για την πρώτη σειρά δεδομένων και 64 για την δεύτερη. Μπορεί να μην παρατηρήσουμε ότι η τιμή 3.4 είναι παράδοξη, αλλά το 64 είναι προφανώς λάθος. Το συμπέρασμα είναι ότι η σχέση υπολογισμού του σφάλματος υπολογισμένης ποσότητας μπορεί να γίνει με βάση την σχέση (8) μόνον όταν οι ποσότητες δεν έχουν συσχέτιση.

Ας χρησιμοποιήσουμε την σχέση (22) για κάθε μία από τις σειρές δεδομένων για να προσδιορίσουμε την ζώνη αβεβαιότητας. Επιβεβαιώνουμε την διαπίστωση ότι στο κέντρο βάρους των τετμημένων έχουμε την υψηλότερη ακρίβεια στην ικανότητα προβλέψεως των τεταγμένων. Επίσης βλέπουμε πόσο μεγάλο είναι το σφάλμα του  $\beta$  για την 2<sup>η</sup> σειρά.



## 6.4 Γενική περίπτωση της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων

Η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων γενικεύεται για οποιαδήποτε μορφή της συναρτήσεως  $f(x)$ . Αν η εξάρτηση της  $f(x)$  από τις παραμέτρους  $\alpha, \beta, \dots$  δεν είναι γραμμική, τότε η  $\frac{\partial f}{\partial \alpha}$  είναι συνάρτηση του  $\alpha$

και το σύστημα που προκύπτει δεν είναι γραμμικό ως προς τις παραμέτρους  $\alpha, \beta, \dots$ . Σε τέτοιες περιπτώσεις χρησιμοποιούνται επαναληπτικοί αλγόριθμοι διαδοχικών προσεγγίσεων για τον προσδιορισμό των τιμών των παραμέτρων οι οποίες ελαχιστοποιούν το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων  $S$ .

## 6.5 Στατιστικά Βάρη

Αν οι μετρήσεις  $y_i$  δεν έχουν τα ίδια σφάλματα, προσδίδουμε στις ακριβέστερες μετρήσεις (αυτές με μικρότερο σφάλμα) μεγαλύτερη βαρύτητα. Αυτό επιτυγχάνεται με την χρήση στατιστικών βαρών, τα οποία είναι συντελεστές κάθε όρου του αθροίσματος  $S$  και υπολογίζονται από τη σχέση

$$w_i = \frac{1}{\sigma_{y_i}^2} \quad (26)$$

Τότε οι σχέσεις με τις οποίες υπολογίζονται οι παράμετροι  $\alpha$  και  $\beta$  τροποποιούνται ως εξής για την πρότυπη σχέση  $f(x)=\alpha x+\beta$ :

$$\alpha = \frac{1}{D'} \left( \sum w_i \sum w_i x_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i y_i \right) \text{ και}$$

$$\beta = \frac{1}{D'} \left( \sum w_i x_i^2 \sum w_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i x_i y_i \right) \text{ με } D' = \sum w_i \sum w_i x_i^2 - \left( \sum w_i x_i \right)^2. \quad (27)$$

Μια περίπτωση όπου η χρήση των στατιστικών βαρών επιβάλλεται προκύπτει όταν μετασχηματίζουμε την πρότυπη σχέση  $f(x)$  για να χρησιμοποιήσουμε μια γραμμική σχέση. π.χ. αν  $f(x) = C e^{-kx}$ , μπορούμε να λογαριθμήσουμε τις μετρήσεις  $y_i$  και να προσδιορίσουμε τους συντελεστές  $\alpha$  και  $\beta$  της σχέσης  $z = \alpha x + \beta$ , όπου  $z_i = \ln(y_i)$ , από τους οποίους υπολογίζονται οι  $C$  και  $k$  ως  $k = -\alpha$  και  $C = e^\beta$ .

Αν οι μετρήσεις  $y_i$  έχουν ίδιο σφάλμα,  $\sigma_y$ , αυτό δεν θα ισχύει για τα  $\sigma_{z_i}$ . Για να διατηρηθεί η βαρύτητα των σφαλμάτων των μετρήσεων πρέπει να γίνει χρήση στατιστικών βαρών  $w_i = \frac{1}{\sigma_{z_i}^2}$  με

$$\sigma_{z_i} = \left( \frac{\partial z_i}{\partial y_i} \right) \sigma_{y_i} = \left( \frac{\partial \ln y_i}{\partial y_i} \right) \sigma_{y_i} = \frac{1}{y_i} \sigma_y, \text{ άρα } w_i = \frac{y_i^2}{\sigma_y^2}.$$

Τελικά, οι παράμετροι δίνονται από τις σχέσεις:

$$-k = \alpha = \frac{1}{D'} \left( \sum y_i^2 \sum y_i^2 x_i \ln y_i - \sum y_i^2 x_i \sum y_i^2 \ln y_i \right) \text{ και}$$

$$\ln C = \beta = \frac{1}{D'} \left( \sum y_i^2 x_i^2 \sum y_i^2 \ln y_i - \sum y_i^2 x_i \sum y_i^2 x_i \ln y_i \right)$$

$$\text{με } D' = \sum y_i^2 \sum y_i^2 x_i^2 - \left( \sum y_i^2 x_i \right)^2. \quad (28)$$

## 7. Πίνακας φυσικών σταθερών

Φυσικό Μέγεθος	Σύμβολο	Τιμή	Μονάδα
Ταχύτητα του φωτός	c	299 792 458	m s <sup>-1</sup>
Μαγνητική επιδεκτικότητα του κενού	μ <sub>0</sub>	4π 10 <sup>-7</sup> = 12.566 370 614... x 10 <sup>-7</sup>	N A <sup>-2</sup>
Ηλεκτρική διαπερατότητα του κενού, 1/μ <sub>0</sub> c <sup>2</sup>	ε <sub>0</sub>	8.854 187 817... x 10 <sup>-12</sup>	C <sup>2</sup> m <sup>-2</sup> N <sup>-1</sup> ή F m <sup>-1</sup>
Σταθερά της βαρύτητας	G	6.673 84(80) x 10 <sup>-11</sup>	m <sup>3</sup> kg <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup>
Σταθερά του Planck ħ = h/2π	h ħ	6.626 069 57(29) x 10 <sup>-34</sup> 1.054 571 726(47) x 10 <sup>-34</sup>	J s J s
Φορτίο ηλεκτρονίου	e	1.602 176 565(35) x 10 <sup>-19</sup>	C
Μάζα ηλεκτρονίου	m <sub>e</sub>	9.109 382 91(40) x 10 <sup>-31</sup>	kg
Μάζα πρωτονίου	m <sub>p</sub>	1.672 621 777(74) x 10 <sup>-27</sup>	kg
Σταθερά Avogadro	N <sub>A</sub>	6.022 141 29(27) x 10 <sup>23</sup>	mol <sup>-1</sup>
Σταθερά Faraday, N <sub>A</sub> e	F	96 485.3365(21)	C mol <sup>-1</sup>
Σταθερά των ιδανικών αερίων	R	8.314 4621(75)	J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>
Σταθερά Boltzmann, R/N <sub>A</sub>	k	1.380 6488(13) x 10 <sup>-23</sup>	J K <sup>-1</sup>
Ατομική μονάδα μάζας, M( <sup>12</sup> C)/N <sub>A</sub>	u	1.660 538 921(73) x 10 <sup>-27</sup>	kg
Σταθερά λεπτής υφής, e <sup>2</sup> /4πε <sub>0</sub> ħc	α	7.297 352 5698(24) x 10 <sup>-3</sup>	
Σταθερά Rydberg, α <sup>2</sup> m <sub>e</sub> c/2h	R <sub>∞</sub>	10 973 731.568 539(55)	m <sup>-1</sup>
Σταθερά Stefan-Boltzmann, (π <sup>2</sup> /60) k <sup>4</sup> /ħ <sup>3</sup> c <sup>2</sup>	σ	5.670 373(21) x 10 <sup>-8</sup>	W m <sup>-2</sup> K <sup>-4</sup>

Πηγή: *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1527 (2012)

## 8. Μετατροπές μονάδων

$$1 \text{ cal} = 4.184 \text{ J} \quad 1 \text{ Btu} = 252 \text{ cal} = 1.055 \text{ kJ} \quad 1 \text{ Btu/h} = 0.2931 \text{ W}$$

$$1 \text{ eV} = 1.602 176 487 \times 10^{-19} \text{ J} = 96 485.339 9 \text{ J mol}^{-1} = 23 060.549 7 \text{ cal mol}^{-1} = 8 065.544 65 \text{ cm}^{-1}$$

$$E_h = 1 \text{ hartree} = \alpha^2 m_e c^2 = \frac{e^4 m_e}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{e^2}{a_0} = 2R_\infty hc = 4.35974394(22) \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$a_0 = 1 \text{ bohr} = \frac{\alpha}{4\pi R_\infty} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0.52917720859(36) \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ L} = 1 \times 10^{-3} \text{ m}^3$$

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ torr} = 1.01325 \text{ bar} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa} = 14.696 \text{ lb in}^{-2} \text{ (psi)}$$

# Σημειώματα

## Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.0

## Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Εθνικών και Καποδιστριακών Πανεπιστημίων Αθηνών, Αθανάσιος Τσεκούρας, 2015.

Αθανάσιος Τσεκούρας. «Φυσικοχημεία 2 – Εργαστηριακές Ασκήσεις. Εισαγωγή». Έκδοση: 1.0. Αθήνα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: <http://opencourses.uoa.gr/courses/CHEM107>

## Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Μη Εμπορική Χρήση Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων»



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

## Διατήρηση Σημειωμάτων

- Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:
- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.

## Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

