

IONSZELEKTÍV ELEKTÓDOK ALKALMAZÁSA
AZ ÉLELMISZER-ANALITIKÁBAN
II. A SZÁMÍTÁSTECHNIKA ALKALMAZÁSA

NGUYEN HUNG* – SISKA ELEMÉR* – ADÁNYINÉ KISBOCSKÓI NÓRA** –
MOLNÁR PÁL***

- * Veszprém megyei Állategészségügyi és Élelmiszer Ellenőrző Állomás, Veszprém
- ** Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet, Budapest
- *** Állategészségügyi és Élelmiszervizsgáló Szolgálat, Élelmiszervizsgáló Intézet, Budapest

Érkezett : 1988. augusztus 25.

A tanulmányozott téma alapján: Grand módszer a többszörös standard addíciós eljárásban [1] a mérési eredmények feldolgozására számítógépes programot készítettünk. Tekintettel a Magyarországon elterjedt személyi számítógépekre a program BASIC nyelven íródott Commodore-64-ra. E program képes a témakörben felmerülő két lényegi feladatot teljesíteni.

1. Feladat

Adott N db mérési pont (X_i, Y_i) $i = 1, 2, \dots, n$. Ezekre kell $y = ax + b$ egyenest illeszteni, a $\pm 5\%$ -nál nagyobb szórású pontokat kihagyva.

Algoritmus: legkisebb négyzetek módszere

$$F(a, \hat{b}) = \sum_{i=1}^N (\hat{a}x_i + \hat{b} - y_i)^2 \text{ hibafüggvény}$$

ennek minimuma

$$\left. \frac{\partial F}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^N (\hat{a}x_i + \hat{b} - y_i)x_i = 0 \right\}$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^N (\hat{a}x_i + \hat{b} - y_i) = 0 \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \hat{b} \sum_{i=1}^N x_i &= \sum_{i=1}^N x_i y_i \\ \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i + \hat{b} N &= \sum_{i=1}^N y_i \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i + \hat{b} N &= \sum_{i=1}^N y_i \end{aligned} \right\}$$

Legyen $S_1 = \sum_{i=1}^N x_i^2$; $S_2 = \sum_{i=1}^N x_i$; $S_3 = \sum_{i=1}^N x_i y_i$; $S_4 = \sum_{i=1}^N y_i$

$$\begin{aligned} \text{ekkor} \quad \hat{a}S_1 + \hat{b}N &= S_3 \\ &\text{egyenletrendszert kell megoldani, ahol} \\ \hat{a}S_2 + \hat{b}N &= S_4 \end{aligned}$$

$$\text{legyen} \quad \Delta = S_1N - S_2^2 \quad \text{az egyenletrendszer determinánsa és}$$

$$\text{így} \quad \hat{a} = \frac{S_3N - S_2S_4}{\Delta}; \quad \hat{b} = \frac{S_1S_4 - S_2S_3}{\Delta}$$

Ennek számítása a 212-216 programsorokban történik.

Itt $x_i = V_i$ (a hozzáadott térfogat)

$$y_i(V_0 + V_i) \pm E_i/S \quad (214. \text{ programsor})$$

Az ϵ hibahatárnál nagyobb szórású pontok rekuzióval szűrhetők ki.

($\epsilon \in]0,1[$):

Kiszámítva a fenti algoritmussal \hat{a}_1, \hat{b}_1 közelítő értékeket, az összes pontra ellenőrizzük, hogy a relatív hibára

$$\left| \frac{\hat{a}_1x_i + \hat{b}_1 - y_i}{y_i} \right| < \epsilon \quad \text{teljesül-e.}$$

Ha valamelyik pontra nem teljesül, azt a további számításból kizárva, a megfelelő pontokra újra kiszámítjuk \hat{a} , \hat{b} értékeit a fenti módon.

2. Feladat

Adott N db mérési pont (x_i, y_i) $i = 1, 2, 3 \dots n$, és az iránytangens. A mérési pontokra ilyen iránytangensű egyenest kell illeszteni.

Algoritmus: módosított legkisebb négyzetek módszere

$$F(\hat{b}^*) = \sum_{i=1}^N (ax_i + \hat{b}^* - y_i)^2$$

$$\frac{dF}{db} = 2 \sum_{i=1}^N (ax_i + \hat{b}^* - y_i) = 0$$

ebből:

$$a \sum_{i=1}^N x_i + Nb^* = \sum_{i=1}^N y_i$$

legyen:

$$S_1 = \sum_{i=1}^N x_i; S_2 = \sum_{i=1}^N y_i$$

így a $S_1 + Nb^* = S_2$ amiből $b^* = \frac{S_2 - aS_1}{N}$

A számítás a 236–240 programsorokban történik.

A megengedettnél nagyobb szórású pontok az 1. Feladathoz hasonló rekurzióval szűrhetők ki (a 240–243 programsorokban).

A program ismertetése

A program Commodore – 64 személyi számítógépre íródott BASIC nyelven.

A program felépítése:

I. Helyfoglalás a változóknak (100–107 sor)

II. Használt szubrutinok (110–205 sor)

1. *adatsor beolvasása szekvenciális lemezes file-ból*

(DISK INPUT) (110–114 sor)

A rutin kikeresi az adatsort, beolvassa V_0 -t, N -t (az adatsorok számát), ezután N db V_i , E_i beolvasását hajtja végre.

Hibalehetőségek:

- nincs olyan nevű file,
- nincs elegendő adatsor.

Ilyenkor a megfelelő hibaüzenetet írja ki és előlről kezdi a programot.

2. *INPUTKIVÁLASZTÁS* (117–123 sor)

Háromféle inputot fogad el az F1, F3, F5 billentyűk hatására

F1: adatbevitel lemezről

F3: kézi adatbevitel

F5: program vége.

3. *ÁLLOMÁNYNÉV BEOLVASÁSA* (FILENÉV) (126–127 sor)

Billentyűzetről olvas, csak szabályos nevet fogad el (min. 1, max. 16 karakter), addig várakozik, míg inputot nem kap.

4. *Y/N VÁLASZ* (130 – 133 sor)

„(Y/N)”-t ír ki, és „Y”, vagy „N” válaszig várakozik.

5. *DISCK OUTPUT* (136 – 140)

Adatsorok kiírását végzi szekvenciális lemezes fileba, hasonló az 1. szubrutinhoz.

6. *VÁRAKOZÁS* (143 – 144 sor)

Egy tetszőleges billentyű lenyomásáig vár.

7. *RAJZ* (147 – 168 sor)

Kiválasztja a legnagyobb és legkisebb X_1 és Y_1 értékeket, a képernyőméretek figyelembevételével ezekre normálja a grafikont. Ezek után megrajzolja a koordináta-tengelyeket, valamint a pontokat. Ugyancsak arányosan megszerkeszti a számított egyenest. A rutin lehetővé teszi a kész ábra kinyomtatását is.

8. *ADATOK BEVITTELE* (általában) (171 – 190)

Először a 2. szubrutint hívja, majd ha lemezről akarunk adatokat beolvasni, az 1. rutint. Kézi adatbevittelnél először V_o -t és N-t kéri, majd V_i , E_i értékeit ($i=1,2,3\dots N$).

Az adatbevétel után kiírja a bevitt adatokat, lehetőséget ad módosítani rajtuk. Ezek után az adatsor kimenthető lemezre az 5. szubrutin hívásával.

9. *TÁBLÁZAT KINYOMTATÁSA* (ADATKIVITTEL) (193 – 204 sor)

A táblázat fejrésében a következő jelképek szerepelnek:

V (cm^3)	E (mV)	E/S	$10 E/S$	$(V_o + V) 10$	E/S	JÓ
-----------------------	----------	-------	----------	----------------	-------	----

(a programban:)

V (cm^3) jelenti: V_i (V(I))

E (mV) jelenti: E_i (E(I))

E/S jelenti: $\pm E/S$ (ES)

$10 E/S$ jelenti: $10 \pm E/S$ (K(I))

$(V + V) 10^{E/S}$: (Y(L,I))

JÓ jelenti: +: az 5%-os hibahatáron belül van

-: az adat kívül esik a hibahatáron.

10. *VÉGEREDMÉNYEK* kinyomtatása (207 – 208 sor)

DV: V (cm^3)

C: az oldat koncentrációja mol/dm^3 -ben

M: az oldat koncentrációja mg/dm^3 -ben

A program blokkvázlatát az 1. ábra mutatja be.

Az algoritmus lényeges része az „A” jelű programegység (2. ábra).

Az „A” egység első lépésben lehetőséget ad az input jellegének megválasztására a 2. szubrutin segítségével. Amennyiben lemezről kívánunk beolvasni, működésbe lép az 1. szubrutin, ha nem, akkor a 8., mely kézi adatbevittet tesz lehetővé. Ezek után matematikai módszerek segítségével a bevitt adatokat egy egyenesre illeszti, és kiszámolja az egyes pontok eltérését.

Az eredményeket kiírja a képernyőre, s lehetőséget ad a papíron való megjelenítésre is. Ha ki szeretnénk nyomtatni, a 9. rutin ezt végrehajtja. Ezután a 7. rutin segítségével a mérési eredmények diagramját is kirajzoltathatjuk.

A főprogram a vakpróba bevitelével kezdődik, lefolyik az „A” részprogram, majd megkezd a minta bevitelét, s úgyszintén lefuttatja rajta az „A” programrészt.

Miután a kapott adatokból megszerkesztette a diagramot, bekéri a titrálószer koncentrációját, valamint a vizsgálandó anyag móltömegét, s kiszámítja a ΔV -t, illetve az anyag koncentrációját. Ezeket képernyőre kiírja, s jelzi, hogy (a 10. szubrutinnal) képes kinyomtatni az adatokat, a 7.-sel pedig egy grafikonon tudja megjeleníteni a vakpróba és a minta egyenesét. Mindezek után új minta, illetve új mérési adatok vizsgálatára ad lehetőséget.

Főprogram (208-363 sor)

A programmal mérési sorok adatai kiértékelhetők. Egy mérési sor egy vakpróbas és egy vagy több mintaoldal adataiból áll. Először a vakpróba adatait kell felvinni, erre történik egy \hat{a} , \hat{b} , paraméterű egyenes illesztése. Ezután bevihető a minta adatsor, melyre a program azonos iránytangensű, \hat{b}^* paraméterű egyenest illeszt. A vakpróba és a minta egyenesei külön-külön és együttesen is megjeleníthetők grafikonon, a számítási eredményeket a program táblázatos formában közli. A táblázatok és rajzok kívánság szerint kinyomtathatók printeren. Egy vakpróba és minta oldalból a program a minta koncentrációját is kiszámítja és közli. Ezek után az adott vakpróbával újabb minták is kiszámíthatók, vagy új mérési sor vakpróbájának és mintáinak adatai vihetők be kívánság szerint.

A mérési adatok bevitele történhet interaktív módon, kézzel, akkor a kész adatsor a felhasználó igénye szerint lemezes file-be menthető későbbi felhasználásra. Másik lehetőség a bevételre a már kész, lemezen levő adatfileok felhasználása.

A program változói:

Y (J,I) J=0, 1 az Y_i mérési értékek (max. 20 db) tárolásához.

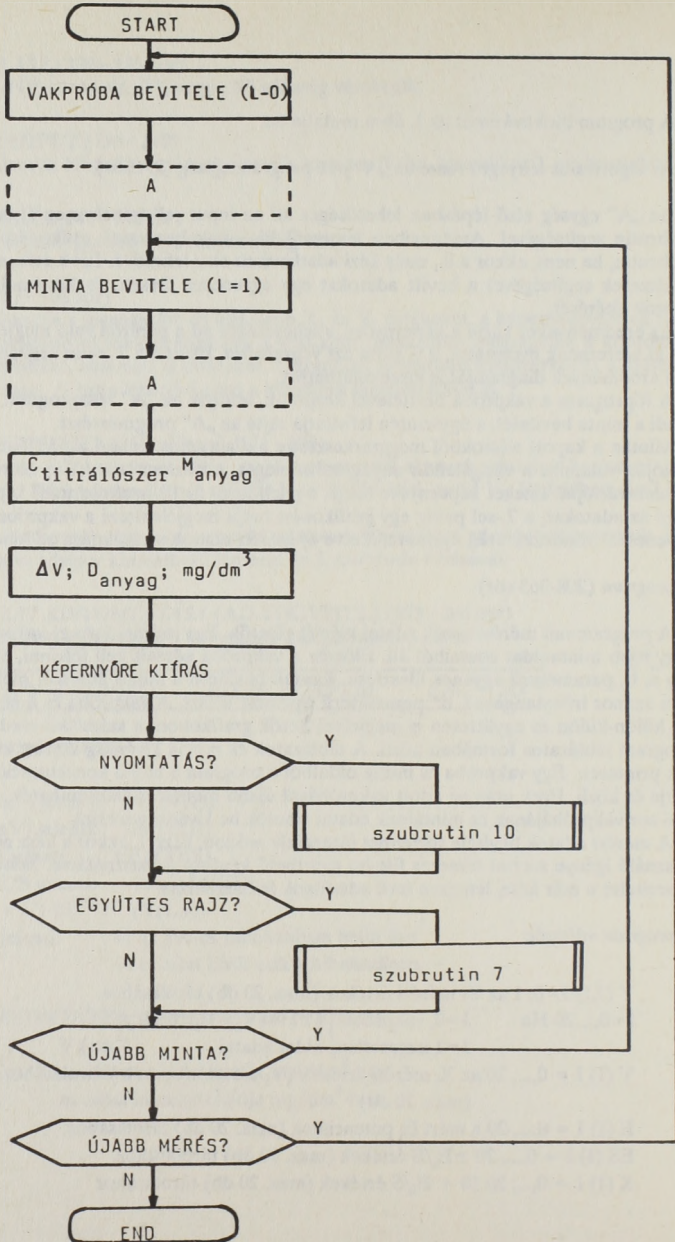
I=0, ..., 20 Ha $J=0$, vakpróba } ($Y_1 = (V_0 + V_1)10 \pm E_i/S$
 $J=1$ ismeretlen } oldal adatai

V (I) I = 0, ..., 20 az X_i mérési értékek (V_i oldattérfogatok) tárolásához.
(max. 20 db)

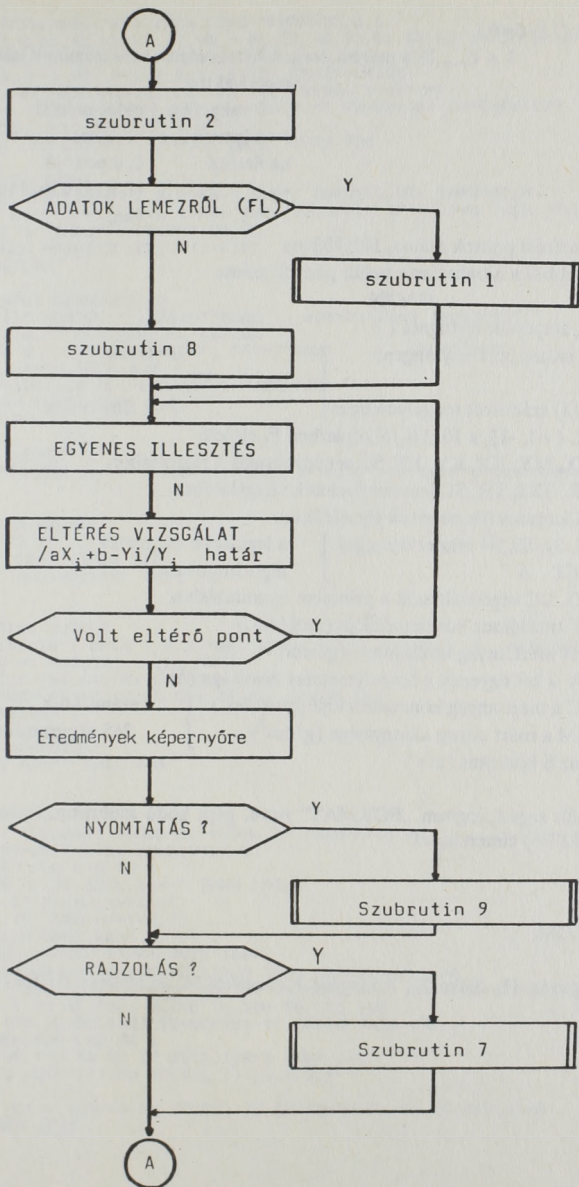
E (I) I = 0, ..., 20 a mért E_i potenciálok (max. 20 db) tárolásához.

ES (I) I = 0, ..., 20 $\pm E_i/S$ értékek (max. 20 db) tárolásához.

K (I) I = 0, ..., 20 $10 + E_i/S$ értékek (max. 20 db) tárolásához



1. ábra: PROGRAM BLOKKVÁZLAT



2. ábra: "A" JELŰ PROGRAMEGYSÉG BLOKKVÁZLATA

J% (J,I) J=0,1

I = 0, ..., 20 a mérési pontok hibahatáron belülségének jelzésére szolgáló

segédvektor

J=0 vakpróba } oldat mérési

J=1 ismeretlen } pontjai

ha értéke 0, a pont jó

-1, a pont szórás határon kívül van.

N mérési pontok száma, $1 \leq N \leq 20$

M ebből a hibahatáron belüli pontok száma

$1 \leq M \leq N$

V_o alapoldat térfogata ()

A, számított iránytangens

} J=0 vak

(y = Ax + Bj)

B (J) számított tengelymetszet

} J=1 ismeretlen

EL { +1, -1 }, a $10 \pm E_1/S$ képletben E₁ előjele

MX, MY, KX, KY, XT, SC segédváltozók a rajzoláshoz.

ER, ER\$, TR, SC lemezműveletek vizsgálatához

F\$ lemezes file nevének tárolásához.

S1, S2, S3, S4 részlet összegek } a legkisebb négyzetek

DET Δ } algoritmushoz

LG, DC segédváltozók a printerre nyomtatáshoz

CT titrálószer koncentrációja (mol/dm³)

MA mért anyag móltömege (g/mol)

DV a két egyenes x-tengelymetszet távolsága (ΔV)

CC a mért anyag koncentrációja (mol/dm³) } számításuk

MM a mért anyag mennyisége (g/dm³) } 265 programsorban

S az S konstans (mV)

Használt segédprogram „FORMAT” nevű, gépi kódú szubrutin, formázott kiíratásra, SCE00 (52736) címen indul.

IRODALOM

(1) Nguyen H., Siska E., Adányiné Kisboeckői N. és Molnár P.: ÉVIKE 34 (1988) 4, 212-217.


```

100 IF PEEK(53075)<>ASC("E") THEN LOAD "FORMAT",8,1
101 DIM L,I,J,M,K,MM,MY,KX,XT,V0,N,FL,ER,TR,SC,S1,S2,S3,S4,DET,A,B,S,LG,DC
102 DIM EL,CT,MA,CC,MM,A#,Y#,F#,ER#,C#,V#
103 DIM JX(L,20),Y(L,20),V(20),B(1),E(20),ES(20),K(20)
104 DEF FN XC(X)=(X-KX)/MX+10: DEF FN YC(Y)=190-(Y-KY)/MY
105 V#="-----": Y#="-----": F#="-----": C#="CHR$(13)
106 LG=53069: DC=LG+1: POKE LG-1,0
107 POKE53280,8: POKE53281,8: PRINT"☐": GOTO 208
108 :
109 REM ---- DISK INPUT
110 OPEN 1,8,15,"I0": OPEN 2,8,2,F#+",S,R": INPUT#2,V0: INPUT#2,N
111 FOR I=0 TO N: V(I)=I: JX(L,I)=0: INPUT#2,E(I): IF E(I)=0 THEN JX(L,I)=-1
112 NEXT: CLOSE 2: INPUT#1,ER,ER#,TR,SC
113 IF ER>20 THEN PRINT"☐";ER;ER#;TR;SC: GOSUB 143
114 CLOSE 1: RETURN
115 :
116 REM ---- INPUT KIVALASZTAS
117 PRINT"☐";F#;" ADATOK ":": PRINT"☐" adatbevitel lemezrol"
118 PRINT"☐" F# " ADATBEVITEL KEZZEL"
119 PRINT"☐" F# " PROGRAM VEGE": PRINT"☐" VALASZTAS"
120 GET A#: IF A#="" THEN 120
121 FL=ASC(A#)-134: IF FL<-1 OR FL>1 THEN 120
122 IF FL=1 THEN FL=0: END
123 F#="": RETURN
124 :
125 REM ---- FILENEV
126 F#="": INPUT"☐" FILENEV ";F#: IF F#="" OR LEN(F#)>16 THEN 126
127 RETURN
128 :
129 REM ---- Y/N VALASZ
130 PRINT" (Y/N) ?"
131 GET Y#: IF Y#="" THEN 131
132 IF Y#<>"Y" AND Y#<>"N" THEN 131
133 RETURN
134 :
135 REM ---- DISK OUTPUT
136 OPEN 1,8,15,"I0": OPEN 2,8,2,"0"+F#+",S,W": PRINT#2,V0: PRINT#2,N
137 FOR I=0 TO N: PRINT#2,E(I): NEXT
138 CLOSE 2: INPUT#1,ER,ER#,TR,SC
139 IF ER>20 THEN PRINT"☐";ER;ER#;TR;SC: GOSUB 143
140 CLOSE 1: RETURN
141 :
142 REM ---- VARAKOZAS
143 GET A#: IF A#="" THEN 143
144 RETURN
145 :
146 REM ---- RAJZ
147 PRINT"☐": !GCLEAR: !BCOL 8: !LCOL 0: !GRAPHICS 1
148 MX=V(N): MY=A#V(N)+B: KY=A#V(0)+B
149 IF K=3 THEN FOR L=0 TO 1
150 FOR I=0 TO N: IF JX(L,I)=-1 THEN 153
151 IF KY>Y(L,I) THEN KY=Y(L,I)
152 IF MY<Y(L,I) THEN MY=Y(L,I)
153 NEXT: IF K=3 THEN NEXT L
154 IF K<3 THEN KX=(KY-B)/A: GOTO 156
155 KX=(KY-B(0))/A: IF KX>(KY-B(1))/A THEN KX=(KY-B(1))/A
156 MX=(MX-KX)/300: MY=(MY-KY)/180: XT=FN XC(V(0)): TR=(310-XT)/N: SC=310
157 !LINE XT,5 TO XT,190: !LINE 10,190 TO 315,190
158 !LINE SC,188 TO SC,192: SC=SC-TR: IF SC>10 THEN 158
159 IF K=3 THEN FOR L=0 TO 1
160 B=B(L): FOR I=0 TO N: IF JX(L,I)=-1 THEN 162
161 !CIRCLE FN XC(V(1)),FN YC(Y(L,I)),2.5,2.5
162 NEXT
163 !LINE FN XC((KY-B)/A),FN YC(KY) TO FN XC(V(N)),FN YC(A#V(N)+B)
164 IF K=3 THEN NEXT

```

```

165 GOSUB 143: !GRAPHICS 0: PRINT" RAJZ NYOMTATORA":; GOSUB 130
166 IF Y$="N" THEN 168
167 !GRAPHICS 1: OPEN 1,4: !HARD#1: CLOSE 1: !GRAPHICS 0
168 RETURN
169 :
170 REM ---- ADATOK BEVITELE
171 GOSUB 117: IF FL THEN GOSUB 126: GOSUB 110: IF ER<20 THEN 179
172 IF FL THEN 171
173 N=0: INPUT"ADATOK SZAMA":N: IF N<=0 OR N>INT(N) THEN 173
174 V0=0: INPUT"V0 .... (ML)":V0 .... (ML):V0: IF V0<=0 THEN 174
175 N=N-1: PRINT"ADATOK ": FOR I=0 TO N: V(I)=1: J%(L,I)=0: PRINT
176 PRINT I;TAB(4);"ML ..... E ": E(I)=0: INPUT E(I)
177 IF E(I)=0 THEN J%(L,I)=-1
178 NEXT
179 PRINT"ADATOK :":PRINT"V0 (ML).....":V0: PRINT: FOR I=0 TO N
180 PRINT I;TAB(4);"ML ..... E":E(I): NEXT: IF L=0 THEN 182
181 PRINT" S (MV).....":S
182 PRINT"MEGFELTEL":; GOSUB 130: IF Y$="Y" THEN 184
183 IF Y$="N" THEN 171
184 IF FL THEN 187
185 PRINT"MENTES LEMEZRE":; GOSUB 130
186 IF Y$="Y" THEN GOSUB 126: GOSUB 136
187 RETURN
188 :
189 REM ---- ADATKIVITEL (PRINTER)
190 OPEN 1,4: PRINT#1,C$;C$;P$;" ADATAI ":; IF F$<>" THEN PRINT#1,,F$;
191 PRINT#1,C$;C$;" S=";S;C$;V$
192 PRINT#1," V(ML) E(MV) E/S 101E/S (V0+V)101E/S
193 PRINT#1,V$: FOR I=0 TO N: IF J%(L,I)=-1 THEN 200
194 A$="+": IF J%(L,I) THEN A$="-"
195 POKE LG,5: POKE DC,1: CMD 1: SYS (52736) V(I)
196 POKE LG,11: POKE DC,2: SYS (52736) E(I)
197 POKE LG,10: POKE DC,3: SYS (52736) ES(I)
198 POKE LG,17: POKE DC,4: SYS (52736) K(I)
199 POKE LG,17: POKE DC,4: SYS (52736) Y(L,I): PRINT#1," ";A$;
200 NEXT: PRINT#1,C$;V$: PRINT#1,"TG=";A:PRINT#1," B=";B
201 PRINT#1,V$: CLOSE 1: RETURN
202 :
203 REM ---- VEGEREDMENYEK (PRINTER)
204 OPEN 1,4: PRINT#1,"DV=";DV;"ML":C$;"C =";CC;"MOL/L":C$;"M =";MM;"MG/L"
205 PRINT#1,V$: CLOSE 1: RETURN
206 :
207 REM **** VAKPROBA ADATOK
208 P$="VAKPROBA": L=0: K=1: GOSUB 171
209 S=0: INPUT"OS .... (MV)":S: IF S=0 THEN 209
210 :
211 REM **** EGYENES ILLESZTES
212 S1=0: S2=0: S3=0: S4=0: SC=0: M=N+1:EL=-1: IF E(1)-E(0)>0 THEN EL=1
213 FOR I=0 TO N: IF J%(L,I) THEN M=M-1: GOTO 216
214 ES(I)=EL+E(I)/S: K(I)=101E(S(I)): Y(L,I)=(V0+V(I))*K(I)
215 S1=S1+V(I)*K(I): S2=S2+V(I): S3=S3+V(I)*Y(L,I): S4=S4+Y(L,I)
216 NEXT: DET=M*S1-S2*S2: A=(M*S3-S2*S4)/DET: B=(S1*S4-S3*S2)/DET: B(L)=B
217 FOR I=0 TO N: IF J%(L,I) THEN 219
218 TR=A*V(I)+B: IF ABS(Y(L,I)-TR)/Y(L,I)>>1.00 THEN J%(L,I)=1: SC=-1
219 NEXT: IF SC THEN 212
220 REM **** VAKPROBA EREDMENYEK
221 PRINT"JO V"," E"," (V0+V)*101E/S",
222 PRINT"-----"
223 FOR I=0 TO N: IF J%(L,I)=-1 THEN 226
224 A$="+": IF J%(L,I) THEN A$="-"
225 PRINT A$," ";V(I),E(I),Y(L,I)
226 NEXT
227 PRINT"RAZ EGYENES ADATAI : "
228 PRINT" TG=";A: PRINT " B=";B
229 PRINT"NYOMTATAS":; GOSUB 130: IF Y$="Y" THEN GOSUB 190
230 PRINT"RAJZOLAS ":; GOSUB 130: IF Y$="Y" THEN GOSUB 147
231 :
232 REM **** MINTA BEVITELE
233 P$="MINTA": L=1: K=2: GOSUB 171
234 :
235 REM **** EGYENES ILLESZTES

```

```

236 S1=0: S2=0: SC=0: M=N+1
237 FOR I=0 TO N: IF J%(L,I) THEN M=M-1: GOTO 240
238 ES(I)=EL*(E(I)/S: K(I)=10*(ES(I): Y(L,I)=(V0+V(I))*K(I)
239 S1=S1+V(I): S2=S2+Y(L,I)
240 NEXT: B=(S2-A*S1)/M: B(L)=B: FOR I=0 TO N: IF J%(L,I) THEN 242
241 TR=A*V(I)+B: IF ABS((Y(L,I)-TR)/Y(L,I))>.05 THEN J%(L,I)=1: SC=-1
242 NEXT: IF SC THEN 236
243 :
244 REM *** MINTA EREDMENYEK
245 PRINT "CJO V"," E"," (V0+V)*10^E/S":
246 PRINT "-----"
247 FOR I=0 TO N: IF J%(L,I)=-1 THEN 250
248 A#="+": IF J%(L,I) THEN A#="-"
249 PRINT A#;" ";V(I),E(I),Y(L,I)
250 NEXT
251 PRINT "UJAZ EGYENES ADATAI :":
252 PRINT "U TG=";A: PRINT " B=";B
253 PRINT "U NYOMTATAS";: GOSUB 130: IF Y#="Y" THEN GOSUB 190
254 PRINT "U RAJZOLAS ";: GOSUB 130: IF Y#="Y" THEN GOSUB 147
255 :
256 REM *** EGYUTTES EREDMENYEK
260 INPUT "C TITRALOSZER ... (MOL/L) ";CT
262 INPUT "U M.MERT ANYAG .... (G/MOL) ";MA
265 DV=-EL*(B(1)-B(0))/A: CC=(DV*CT)/(V0+DV): MM=CC*MA*1000
270 PRINT "U EGYUTTES EREDMENYEK ": PRINT "-----"
280 PRINT "U DV ..... (ML) ";DV: PRINT "U C .... (MOL/L) ";CC
285 PRINT "U M ..... (MG/L) ";MM
360 PRINT "U NYOMTATAS";: GOSUB 130: IF Y#="Y" THEN GOSUB 204
361 PRINT "U RAJZOLAS ";: GOSUB 130: IF Y#="Y" THEN K=3: GOSUB 147
362 PRINT "C UJABB MINTA";: GOSUB 130: IF Y#="Y" THEN 233
363 PRINT "U UJABB MERES";: GOSUB 130: IF Y#="Y" THEN 208

```

READY.

IONSZELEKTÍV ELEKTRÓDOK ALKALMAZÁSA AZ ÉLELMISZERANALITIKÁBAN II. A SZÁMÍTÁSTECHNIKA ALKALMAZÁSA

Nguyen Hung – Siska Elemér – Adányiné Kisbocskói Nóra – Molnár Pál

A módosított Gran-módszer egyszerűbb és gyorsabb kivitelezése céljából Commodore-64 számítógépre programot készítettünk. A számítógépes értékelés hozzájárul ahhoz, hogy a mérési eredmények reprodukálhatósága és pontossága lényegesen meghaladja a hagyományos módszerét.

USE OF IONSELECTIVE ELECTRODES IN FOOD ANALYTICS

II. USE OF COMPUTER TECHNIQUE

Nguyen, H. - Siska, E. - Adányi-Kisbocskói, N. - Molnár, P.

The authors made a program for Commodore-64 computer in order to the modified Gran-method should be simpler and faster. The reproducibility and accuracy of survey data exceed the traditional method by means of computer evaluation.

РАЗДЕЛЕНИЕ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ D – И L – АМИНОКИСЛОТ В ДИАСТЕРЕОМЕР ДИПЕПТИДНОЙ ФОРМЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ ИОНООБМЕННОЙ КОЛОНЧАТОЙ ХРОМАТОГРАФИИ II. РАЗДЕЛЕНИЕ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2-СУЛЬФОНКИСЛОТНЫХ-АЛАНИЛ ДИПЕПТИДОВ

Я. Чапо, Б. Пенке, Ж. Чапонэ-Киши

После лиофилизации из отдельных аминокислот, активным эфиром ($\text{BOC}/_2$ - L - СуSS - $(\text{ONSu})/_2$ и оксидацией пермуравьиной кислотой, были синтезированы 2-сульфонкислотные-аланил дипептиды. Диастереомер дипептиды появлялись на хроматограмме непосредственно после цистеиновой кислоты, отделение их друг от друга, а также от образовавшейся в результате избытка активного эфира цистеиновой кислоты было хорошим. Точность определения была удовлетворительной, величина коэффициента вариации находилась в интервале 5-10%.

ANWENDUNG DER IONSELEKTIVEN ELEKTRODEN IN DER LEBENSMITTELANALYTIK II. ANWENDUNG DER RECHENTECHNIK

Nguyen Hung - E. Siska - K. N. Adányiné - P. Molnár

Zur einfacheren und schnelleren Ausführung der modifizierten Gran-Methode wurde ein Programm für Commodore 64 erarbeitet. Die rechnergestützte Auswertung trägt dazu bei, daß die Reproduzierbarkeit und Präzision der Meßergebnisse gegenüber den entsprechenden Maßzahlen der traditionellen Methode wesentlich überlegen sind.