Függelék

a fizikai kémia laboratóriumi gyakorlatokhoz

Tartalomjegyzék

1. Relatív atomtömegek **2**

2. A számítások során előforduló állandók értékei **2**

3. A kalomel referenciaelektród elektródpotenciáljának hőmérséklet- és koncentrációfüggése **3**

4. KCl-oldatok fajlagos vezetése különböző hőmérsékleteken és koncentrációknál **3**

5. A víz sűrűségének hőmérsékletfüggése **3**

6. A koncentrációk szorzatával kifejezett vízionszorzat hőmérséklet- és ionerősségfüggése **4**

7. Keményítőoldat készítése **4**

8. Adatok szórása **5**

9. A hiba-, ill. szórásterjedés számítása **5**

10. Illesztett egyenes meredeksége, tengelymetszete és ezek statisztikai jellemzői. Az Excel használata az illesztett paraméterek meghatározására. **7**

10.1. Trendvonal felvétele 10
10.2. LIN.ILL függvény használata 10
10.3. Regresszió számítás 12
10.4. A Solver bővítmény használata 12

11. Függvény inflexióspontjának meghatározása **15**

12. Műszaki-tudományos ábrák készítése **16**

1. Relatív atomtömegek

Az elemek periódusos rendszere

Jelmagyarázat: IUPAC ←csoportszám→ CAS; periódus; rendszám; vegyjel; relatív atomtömeg (IUPAC, 2007, maximum 5 értékes jeggyel); elemnév

periódus	1 IA	2 IIA	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIIIB	9 VIIIB	10 VIIIB	11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
1	1 H 1,0079 hidrogén																	2 He 4,0026 hélium
2	3 Li 6,941 lítium	4 Be 9,0122 berillium											5 B 10,811 bór	6 C 12,011 szén	7 N 14,007 nitrogén	8 O 15,999 oxigén	9 F 18,998 fluor	10 Ne 20,180 neon
3	11 Na 22,990 nátrium	12 Mg 24,305 magnézium											13 Al 26,982 alumínium	14 Si 28,086 szilícium	15 P 30,974 foszfor	16 S 32,065 kén	17 Cl 35,453 klór	18 Ar 39,948 argon
4	19 K 39,098 kálium	20 Ca 40,078 kalcium	21 Sc 44,956 szkandium	22 Ti 47,867 titán	23 V 50,942 vanádium	24 Cr 51,996 króm	25 Mn 54,938 mangán	26 Fe 55,845 vas	27 Co 58,933 kobalt	28 Ni 58,693 nikkel	29 Cu 63,546 réz	30 Zn 65,38 cink	31 Ga 69,723 gallium	32 Ge 72,61 germánium	33 As 74,922 arzén	34 Se 78,96 szelén	35 Br 79,904 bróm	36 Kr 83,80 kripton
5	37 Rb 85,468 rubídium	38 Sr 87,62 stroncium	39 Y 88,906 ittrium	40 Zr 91,224 cirkónium	41 Nb 92,906 nióbium	42 Mo 95,96 molibdén	43 Tc (98) technécium	44 Ru 101,07 ruténium	45 Rh 102,91 ródium	46 Pd 106,42 palládium	47 Ag 107,87 ezüst	48 Cd 112,41 kadmium	49 In 114,82 indium	50 Sn 118,71 ón	51 Sb 121,76 antimon	52 Te 127,60 tellúr	53 I 126,90 jód	54 Xe 131,29 xenon
6	55 Cs 132,91 cézium	56 Ba 137,33 bárium	57 La† 138,91 lantán	72 Hf 178,49 hafnium	73 Ta 180,95 tantál	74 W 183,84 volfrám	75 Re 186,21 rénium	76 Os 190,23 ozmium	77 Ir 192,22 irídium	78 Pt 195,08 platina	79 Au 196,97 arany	80 Hg 200,59 higany	81 Tl 204,38 tallium	82 Pb 207,2 ólom	83 Bi 208,98 bizmut	84 Po (209) polónium	85 At (210) asztácium	86 Rn (222) radon
7	87 Fr (223) francium	88 Ra (226) rádium	89 Ac‡ (227) aktínium	104 Rf (267) rutherfordium	105 Db (268) dubnium	106 Sg (271) seaborgium	107 Bh (272) bohrium	108 Hs (270) hassium	109 Mt (276) meitnerium	110 Ds (281) darmstadtium	111 Rg (280) röntgenium							

† lantanoidák	58 Ce 140,12 cérium	59 Pr 140,91 prazeodímium	60 Nd 144,24 neodímium	61 Pm (145) prométium	62 Sm 150,36 szamárium	63 Eu 151,96 európium	64 Gd 157,25 gadolínium	65 Tb 158,93 terbium	66 Dy 162,50 diszprózium	67 Ho 164,93 holmium	68 Er 167,26 erbium	69 Tm 168,93 túlium	70 Yb 173,04 itterbium	71 Lu 174,97 lutécium
‡ aktinoidák	90 Th* 232,04 tórium	91 Pa* 231,04 protaktínium	92 U* 238,03 urán	93 Np (237) neptunium	94 Pu (244) plutónium	95 Am (243) amerícium	96 Cm (247) kűrium	97 Bk (247) berkélium	98 Cf (251) kalifornium	99 Es (252) einsteinium	100 Fm (257) fermium	101 Md (258) mendelévium	102 No (259) nobélium	103 Lr (262) laurencium

* Azoknak az elemeknek, amelyeknek nincs stabilis izotópjuk, a relatív atomtömegük nem adható meg. Ezen elemek esetében a leghosszabb élettartamú izotópjuk tömegszámát adtuk meg zárójelben. Ez alól három elem kivétel (a Th, Pa és U), mert ezeknek jellemző összetétele van a földkéregben, ezért a relatív atomtömegük megadható.

2. A számítások során előforduló állandók értékei

Jel	Érték	Név vagy leírás
c^0	1 M	standard koncentráció
F	96485 C/mol	Faraday-állandó
p_0	101325 Pa	1 atm nyomás SI-mértékegységben kifejezve
p^0	10^5 Pa	standard nyomás
R	$8{,}314\ \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol\,K}}$	egyetemes gázállandó
T_0	–273,15 °C	abszolút nulla fok

3. A kalomel referenciaelektród elektródpotenciáljának hőmérséklet- és koncentrációfüggése

A kalomel elektród elektródpotenciálját (E_{cal}, vs. SHE) ±0,1 mV-os pontossággal lehet kiszámolni különböző KCl koncentrációknál a 0 – 50 °C-os tartományban a

$$\boxed{\mathrm{E_{cal}} = \mathrm{E}^{25\,^\circ\mathrm{C}} - \sum_{i=1}^{3} \mathrm{a_i} \cdot (\mathrm{t} - 25\,^\circ\mathrm{C})^{\mathrm{i}}}$$

képlettel, ahol t a hőmérséklet °C-ban kifejezve és az $E^{25\,^\circ C}$, a_1, a_2, valamint a_3 empirikus állandók a következők:

[KCl]/M	lg([KCl]/M)	$E^{25\,^\circ C}$/V	a_1/(V/°C)	a_2/(V/°C)	a_3/(V/°C)
0,1	−1	0,3337	$8{,}75 \cdot 10^{-5}$	$3{,}00 \cdot 10^{-6}$	0
1,0	0	0,2801	$2{,}75 \cdot 10^{-4}$	$2{,}50 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-9}$
3,5	0,5441	0,2500	$4{,}00 \cdot 10^{-4}$	0	0
5,15*	0,7114	0,2412	$6{,}61 \cdot 10^{-4}$	$1{,}75 \cdot 10^{-6}$	$9 \cdot 10^{-10}$

*A telített KCl-oldat koncentrációja 25 °C-on.

Amennyiben a KCl-oldat 25 °C-on mért koncentrációja nem egyezik meg a táblázatban megadott értékekkel, akkor a négy empirikus állandó értékét a koncentráció logaritmusának függvényében interpolálni kell. Pl., ha [KCl]=0,5 M, akkor a koncentráció 10-es alapú logaritmusa −0,3010, így a

$$\frac{-0{,}301-(-1)}{0-(-1)} = \frac{\mathrm{E}^{25\,^\circ\mathrm{C}} - 0{,}3337}{0{,}2801-0{,}3337} = \frac{\mathrm{a_1} - 8{,}75\cdot10^{-5}}{2{,}75\cdot10^{-4} - 8{,}75\cdot10^{-5}} = \frac{\mathrm{a_2} - 3{,}00\cdot10^{-6}}{2{,}50\cdot10^{-6} - 3{,}00\cdot10^{-6}} = \frac{\mathrm{a_3} - 0}{4\cdot10^{-9} - 0}$$

egyenleteket kell megoldani ahhoz, hogy $E^{25\,^\circ C}$, a_1, a_2, valamint a_3 megfelelő értékeit megkapjuk.

4. KCl-oldatok fajlagos vezetése különböző hőmérsékleteken és koncentrációknál

t/°C	18	19	20	21	22	23	24
0,01 M KCl	0,001225	0,001251	0,001278	0,001305	0,001332	0,001359	0,001386
0,1 M KCl	0,01119	0,01143	0,01167	0,01191	0,01215	0,01239	0,01264
1,0 M KCl	0,09822	0,10014	0,10207	0,10400	0,10554	0,10789	0,10984
t/°C	25	26	27	28	29	30	
0,01 M KCl	0,001413	0,001441	0,001468	0,001496	0,001524	0,001552	
0,1 M KCl	0,01288	0,01313	0,01337	0,01362	0,01387	0,01412	
1,0 M KCl	0,11180	0,11377	0,11524	–	–	–	

A táblázatban a fajlagos vezetés $\Omega^{-1}\mathrm{cm}^{-1}$ mértékegységben van megadva és a koncentráció 25 °C-ra vonatkozik.

5. A víz sűrűségének hőmérsékletfüggése

Öt tizedesjegy pontossággal megadja a víz sűrűségét g/cm^3 mértékegységben, adott t (°C-ban megadott) hőmérsékleten a

$$\boxed{\rho_\mathrm{v}(\mathrm{t}) = 1{,}00026 - 5{,}08692\cdot10^{-6}\cdot \mathrm{t}^2}$$

tapasztalati képlet a 15 °C ≤ t ≤35 °C tartományban.

Amennyiben más hőmérséklet tartomány szükséges, akkor a következő (jóval bonyolultabb) empirikus összefüggést kell használni:

$$\rho_v(t) = a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot t^i,$$

ahol számoláskor a következő empirikus adatokat kell behelyettesíteni:

tartomány	0 – 55 °C	0 – 31 °C	0 – 55 °C	0 – 100 °C
értékes tizedes jegy	4	6	5	5
n	3	5	5	10
a_0	0,99987	0,9998406403	0,9998419163	0,99984014
a_1	$5{,}291 \cdot 10^{-05}$	$6{,}801284 \cdot 10^{-05}$	$6{,}694929 \cdot 10^{-05}$	$6{,}8755 \cdot 10^{-05}$
a_2	$-7{,}47 \cdot 10^{-06}$	$-9{,}11644 \cdot 10^{-06}$	$-8{,}91382 \cdot 10^{-06}$	$-9{,}3732 \cdot 10^{-06}$
a_3	$3{,}36 \cdot 10^{-08}$	$1{,}02356 \cdot 10^{-07}$	$8{,}77509 \cdot 10^{-08}$	$1{,}38951 \cdot 10^{-07}$
a_4	–	$-1{,}22323 \cdot 10^{-09}$	$-7{,}80638 \cdot 10^{-10}$	$-3{,}87034 \cdot 10^{-09}$
a_5	–	$8{,}11007 \cdot 10^{-12}$	$3{,}35582 \cdot 10^{-12}$	$1{,}152421 \cdot 10^{-10}$
a_6	–	–	–	$-2{,}552887 \cdot 10^{-12}$
a_7	–	–	–	$3{,}700248 \cdot 10^{-14}$
a_8	–	–	–	$-3{,}290154 \cdot 10^{-16}$
a_9	–	–	–	$1{,}623754 \cdot 10^{-18}$
a_{10}	–	–	–	$-3{,}3993 \cdot 10^{-21}$

Pl., ha 54 °C-on van szükségünk a víz sűrűségére 4 tizedes jegy pontossággal, akkor ez a

$$\rho_v(t) = 0{,}99987 + 5{,}291 \cdot 10^{-05} \cdot 54 - 7{,}47 \cdot 10^{-06} \cdot 54^2 + 3{,}36 \cdot 10^{-08} \cdot 54^3 = 0{,}9862 \mathrm{g/cm^3}$$

módon számolható.

6. A koncentrációk szorzatával kifejezett vízionszorzat hőmérséklet- és ionerősségfüggése

A vízionszorzat negatív logaritmusát két tizedes jegy pontossággal megadja adott t hőmérsékleten (°C-ban megadva) és I (25 °C-ra vonatkozó) ionerősségnél a

$$\boxed{pK_v = 13{,}99 - 1{,}02 \cdot \sqrt{I} - 0{,}0343 \cdot (t - 25)}$$

tapasztalati képlet a $15°C \leq t \leq 30$ °C tartományban és 0,05 M-nál kisebb ionerősségeknél.

7. Keményítőoldat készítése

Kb. 100 cm^3 ~0,5 %-os keményítő oldat készítéséhez 0,1 g szalicilsavat oldunk 100 cm^3 forrásban lévő desztillált vízben egy ~250 cm^3-es Erlenmeyer-lombikban. Egy kémcsőben ~0,5 g burgonyakeményítőt kb. 10 cm^3 desztillált vízzel összerázunk, majd ezt a forrásban lévő szalicilsav oldatba öntjük. Az oldatot addig forraljuk, amíg az áttetszően opalizáló nem lesz (ez nem több, mint két perc). Ezután az oldatot lehűtjük, és vattapamacson leszűrjük. Az így kapott keményítőoldat hűtőszerkényben tárolva kb. két hónapig áll el. Kukoricakeményítővel dolgozva ugyanez az eljárás, de a keményítőoldat két hét után már nem használható. Amennyiben a keményítőoldatot hamar (4 – 5 napon belül) felhasználjuk, akkor a fenti eljárásból a szalicilsav kimaradhat, de minden egyebet ugyanúgy kell végezni.

8. Adatok szórása

Több gyakorlaton előfordul, hogy ugyanazt az értéket, pl. egy sebességi együtthatót több mérésből is meghatározunk. Ezek az értékek mérési és egyéb bizonytalanságok miatt általában nem egyeznek meg teljesen. Tegyük fel, hogy m-szer mértünk meg egy értéket és a j-edik adatot jelöljük z_j-vel. Ekkor a legvalószínűbb értéknek az egyedi adatok számtani átlagát tekintjük, amelynek értéke ($\bar{z}$), valamint szórása ($\sigma_{\bar{z}}$) a következő képletekkel adhatók meg:

$$\boxed{\bar{z} = \frac{\sum\limits_{j=1}^{m} z_j}{m}} \quad \text{és} \quad \boxed{\sigma_{\bar{z}} = \sqrt{\frac{\sum\limits_{j=1}^{m} (z_j - \bar{z})^2}{m-1}}} = \sqrt{\frac{m \cdot \sum\limits_{j=1}^{m} z_i^2 - \left(\sum\limits_{j=1}^{m} z_i\right)^2}{m \cdot (m-1)}}.$$

Például az MS Office Excel-ben ezek az értékek az *ÁTLAG* és a *SZÓR.M* függvények segítségével számolhatók. Más táblázatkezelőben a képlet alapján keressék meg a megfelelő függvényeket.

9. A hiba-, ill. szórásterjedés számítása

A hibaterjedés (pontosabban a szórásterjedés, de ezt a fogalmat beszédben ritkán használjuk) számítása gyakori feladat az értékeléskor. Sokak számára csak az alapműveletekre alkalmazható leegyszerűsített szabály ismert: a szórások abszolút értékét kell összeadni összeadás és kivonás esetén, míg szorzásnál és osztásnál a szórások relatív értékei adandóak össze. Ez az eljárás azonban mindig túlbecsüli az eredmény szórását és a legegyszerűbb elemi függvényekre (pl. négyzetgyök, logaritmus) sem alkalmazható. A következőkben azokat a képleteket adjuk meg levezetések nélkül, amelyek segítségével a szórás számítása korrekt módon elvégezhető.

Tételezzük fel, hogy van két adatunk, amelyeknek a szórása is ismert: $X \pm \sigma_X$ és $Y \pm \sigma_Y$. Ezen adatok valamelyikének vagy mindkettőnek a felhasználásával akarunk egy eredményt (Z) kiszámolni és tudni akarjuk Z szórását (σ_Z) is. Az 1. táblázatban összefoglaljuk, hogy az alapműveletek és a legfontosabb függvénytranszformációk esetén milyen képletek alkalmazásával lehet az eredmény szórását megadni. Ha az eredmény több alapművelet vagy függvénytranszformáció alkalmazását igényli, akkor a táblázatban megadott képleteket egymás után többször alkalmazva juthatunk el a végeredményhez. Például:

$$\begin{aligned}
\ln(2{,}0 \pm 0{,}1) + (0{,}4 \pm 0{,}02)^{0{,}5} &= \left(\ln 2 \pm \frac{0{,}1}{2}\right) + \left(0{,}4^{0{,}5} \pm (|0{,}5 \cdot 0{,}02 \cdot 0{,}4^{-0{,}5}|)\right) \\
&= (0{,}693 \pm 0{,}050) + (0{,}632 \pm 0{,}016) \\
&= (0{,}693 \pm 0{,}632) + \left(\sqrt{0{,}05^2 \pm 0{,}016^2}\right) \\
&= \underline{\underline{1{,}34 \pm 0{,}05 \text{ (vagy } 1{,}336 \pm 0{,}052)}}
\end{aligned}$$

1. táblázat. A szórás számítása az alapműveletek és a legfontosabb függvénytranszformációk esetén. A következő képletekben a-val jelöljük az állandó, szórás nélküli értékeket, és a trigonometrikus függvényeknél a szög és a szórása is radiánban értendő. A többi jelölés magyarázatát lásd a szövegben.

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

10. Illesztett egyenes meredeksége, tengelymetszete és ezek statisztikai jellemzői. Az Excel használata az illesztett paraméterek meghatározására.

A gyakorlatok során meghatározandó értékeket gyakran egy egyenes illesztéséből kapott meredekség és/vagy tengelymetszet értékéből számoljuk. Ebben a részben levezetés nélkül összefoglaljuk azokat a képleteket, amelyek egy egyszerű számológéppel is lehetővé teszik az illesztett egyenes paramétereinek, valamint azok szórásainak számolását. Mielőtt azonban megadnánk a képleteket, két fontos megjegyzést kell tenni:

1. Az itt megadott képletek első látásra riasztóan bonyolultnak tűnhetnek, azonban a használatuk valójában egyszerű. Ezt könnyű belátni, ha az olvasó az alábbiakban részletezett példát egy számológép segítségével saját maga végigszámolja. További könnyebbség lehet, hogy a tudományos számológépek többsége már számol statisztikai függvényeket. Ezekkel a számolások még gyorsabbá tehetők, mert a tudományos számológépek statisztikai módja a számolások során szükséges részeredményeket automatikusan megadja.
2. Nagyon sok speciális és általános program (pl. a táblázatkezelők) képes egyenes paramétereinek illesztésére. A laboratóriumi gyakorlatok során valószínűleg ezek használata lesz a gyakoribb. Ezek a programok azonban a legtöbbször *nem* a meredekség és a tengelymetszet szórását, hanem azok hibáját adják meg statisztikai paraméterként, pedig a kettő nem ugyanaz! Néha az is előfordul, hogy a leírás szerint a program szórást számol, de valójában hibát ír ki. A szórás és a hiba közötti kapcsolatot a

$$\text{szórás} = \sqrt{\text{adatok száma}} \cdot \text{hiba} \tag{1}$$

összefüggés adja meg.

Az alábbiakban felírt képletekben a következő jelöléseket használjuk:

- n az illesztés során használt adatpárok száma,
- x_i a *független* változó értéke az i-edik adatpárban ($i = 1 \dots n$),
- y_i a *függő* változó értéke az i-edik adatpárban ($i = 1 \dots n$),
- a az illesztett egyenes meredeksége ($y = a \cdot x + b$ vagy $y = a \cdot x$),
- b az illesztett egyenes tengelymetszete ($y = a \cdot x + b$),
- σ_a az illesztett egyenes meredekségének szórása,
- σ_b az illesztett egyenes tengelymetszetének szórása,
- S_x és S_y az x_i és y_i adatok összege,
- S_{xy} az x_i és y_i adatok páronkénti szorzatainak összege,
- S_{xx} az x_i adatok négyzeteinek összege,
- S_Δ az y_i adatok, valamint a meredekségből és tengelymetszetből számolható függő változók ($a \cdot x_i + b$) eltérései négyzeteinek összege, azaz

$$\boxed{S_x = \sum_{i=1}^{n} x_i, \quad S_y = \sum_{i=1}^{n} y_i, \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i, \quad S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \quad \text{és} \quad S_\Delta = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b)^2.}$$

Ezek alapján az illesztett egyenes meredeksége (a), valamint a meredekség szórása (σ_a), amennyiben az egyenes az origón megy keresztül ($b = 0$):

$$\boxed{a = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}} \quad = \quad \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i\right) \Bigg/ \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) \tag{2}$$

$$\boxed{\sigma_a = \sqrt{\frac{n}{n-1} \cdot \frac{S_\Delta}{S_{xx}}}} \quad = \quad \sqrt{\frac{n}{n-1} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}}. \tag{3}$$

Amennyiben az illesztett egyenes tengelymetszete nem $b = 0$, a meredekség és szórása:

$$\boxed{a = \frac{n \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y}{n \cdot S_{xx} - S_x^2}} \quad = \quad \frac{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \tag{4}$$

$$\boxed{\sigma_a = \sqrt{\frac{n^2}{n-2} \cdot \frac{S_\Delta}{n \cdot S_{xx} - S_x^2}}} \quad = \quad \sqrt{\frac{n^2}{n-2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b)^2}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}}. \tag{5}$$

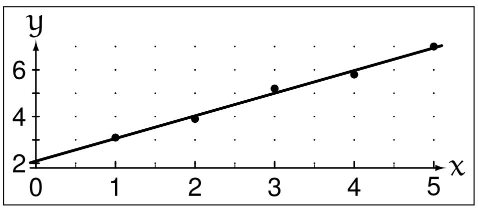
Az illesztett egyenes tengelymetszete (b), valamint a tengelymetszet szórása (σ_b):

$$\boxed{b = \frac{S_{xx} \cdot S_y - S_x \cdot S_{xy}}{n \cdot S_{xx} - S_x^2}} \quad = \quad \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i\right)}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \tag{6}$$

$$\boxed{\sigma_b = \sqrt{\frac{n \cdot S_{xx}}{n-2} \cdot \frac{S_\Delta}{n \cdot S_{xx} - S_x^2}}} \quad = \quad \sqrt{\frac{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2}{n-2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b)^2}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}}. \tag{7}$$

A következőekben az egyenesillesztés számolási technikáját mutatjuk be egy részletes példán keresztül az előbbiekben definiált jelölések segítségével. Az egyenesillesztéshez használt adatpárok és azok grafikus megjelenítése a következő:

i:	1	2	3	4	5
x_i:	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
y_i:	3,1	3,9	5,2	5,8	7,0



Ekkor a számolások részeredményei:

$$\begin{aligned}
S_x &= 1{,}0+2{,}0+3{,}0+4{,}0+5{,}0=15{,}0\\
S_y &= 3{,}1+3{,}9+5{,}2+5{,}8+7{,}0=25{,}0\\
S_{xy} &= 1{,}0\cdot 3{,}1+2{,}0\cdot 3{,}9+3{,}0\cdot 5{,}2+4{,}0\cdot 5{,}8+5{,}0\cdot 7{,}0=84{,}7\\
S_{xx} &= 1{,}0^2+2{,}0^2+3{,}0^2+4{,}0^2+5{,}0^2=55{,}0\\
n\cdot S_{xx}-S_x^2 &= 5\cdot 55{,}0-15{,}0^2=50{,}0
\end{aligned}$$

A meredekség és a tengelymetszet értékei ((4) és (6) egyenletek alapján):

$$a=\frac{5\cdot 84{,}7-15{,}0\cdot 25{,}0}{50{,}0}=0{,}97 \qquad \text{és} \qquad b=\frac{55{,}0\cdot 25{,}0-15{,}0\cdot 84{,}7}{50{,}0}=2{,}09$$

További részeredmény:

$$\begin{aligned}
S_\Delta &= (3{,}1-0{,}97\cdot 1{,}0-2{,}09)^2+(3{,}9-0{,}97\cdot 2{,}0-2{,}09)^2+(5{,}2-0{,}97\cdot 3{,}0-2{,}09)^2+\\
&+ (5{,}8-0{,}97\cdot 4{,}0-2{,}09)^2+(5{,}9-0{,}97\cdot 5{,}0-2{,}09)^2=0{,}091
\end{aligned}$$

A meredekség és a tengelymetszet szórásának értékei ((5) és (7) egyenletek alapján):

$$\sigma_a=\sqrt{\frac{5^2}{5-2}\cdot\frac{0{,}091}{50{,}0}}=0{,}12 \quad \text{és} \quad \sigma_b=\sqrt{\frac{5\cdot 55{,}0}{5-2}\cdot\frac{0{,}091}{50{,}0}}=0{,}41\,.$$

Az illesztett paraméterek szórása helyett (mellet) gyakran használjuk az illesztés jóságának megítélésére az ún. korrelációs együtthatót (R). A korábbiakkal analóg módon bevezetve az

$$\mathrm{S_{yy}}=\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}}\mathrm{y_i^2}$$

jelölést, a korrelációs együttható

$$\mathrm{R}=\frac{\mathrm{n\cdot S_{xy}-S_x\cdot S_y}}{\sqrt{(\mathrm{n\cdot S_{xx}-S_x^2})\cdot(\mathrm{n\cdot S_{yy}-S_y^2})}}\,.$$

Belátható, hogy a korrelációs együttható -1 és $+1$ közötti értéket vehet fel. Minél nagyobb abszolút értékben, annál inkább lineáris a kapcsolat, azaz annál inkább korrelálnak az adatok. $\mathrm{R}=0$ felel meg az korreláció teljes hiányának. Az előző példa adatai alapján $\mathrm{R}=0{,}9952$, ami egy jó illesztést jelent.

A korrelációs együttható helyett szokásosabb annak négyzetének, a determinációs (regressziós) együtthatónak (R^2) a használata:

$$\mathrm{R}^2=\frac{(\mathrm{n\cdot S_{xy}-S_x\cdot S_y})^2}{(\mathrm{n\cdot S_{xx}-S_x^2})\cdot(\mathrm{n\cdot S_{yy}-S_y^2})}=1-\frac{\mathrm{n}\cdot\mathrm{S}_\Delta}{\mathrm{n\cdot S_{yy}-S_y^2}}\,.$$

Az előző példa adatai alapján $\mathrm{R}^2=0{,}9904$. R^2 gyors diagnosztikát tesz lehetővé. Ha $\mathrm{R}^2\approx 1$ (S_Δ kicsi, jó korreláció), akkor az $\mathrm{x-y}$ kapcsolat tényleg lineáris. Ha $\mathrm{R}^2\approx 0$, (S_Δ nagyon nagy) akkor biztosan nincs korreláció. Másképp megfogalmazva: az egyenes illesztésnél S_Δ-t minimalizáljuk, azaz R^2-et maximalizáljuk.

Időigényes lenne minden gyakorlaton, minden illesztést a fenti módon leírtaknak megfelelően kézzel (számológéppel) végrehajtani. Ezért dolgozták ki a különböző táblázatkezelő és illesztő programokat, amelyekből mindenki azt használja, ami a legjobban tetszik, illetve amelyik rendelkezésre áll. Az *Oktatási szint* számítógépein ilyenek pl. a QtiPlot és az MS Office Excel programok. A továbbiakban az egyenes illesztés (lineáris regresszió) különböző lehetőségeit mutatjuk be az Excel program segítségével.

10.1. Trendvonal felvétele

Csak illusztrációra javasolt! Ha már van egy kész ábrájuk a mérési adatokból, erre kérhetnek különböző *előrejelzéseket*, *függvénykapcsolatokat*, ún. trendvonalat (pl. lineáris, exponenciális, polinomiális, stb.).

Ha a *lineáris* trendvonalat választják, a program kiszámolja a legjobban illeszkedő egyenest az adatsorra, s lehetőség van az illesztett egyenes paramétereinek (meredekség, tengelymetszet és R^2) kiíratására is. Választhatnak egyparaméteres illesztést is (ha ez megfelel a mérés elvének), ahol a tengelymetszet értékét Önök rögzítik, s a program csak a meredekséget számolja. A trendvonal felvételének előnye, hogy gyors és látványos. Ugyanakkor hátránya, hogy nem szolgáltat statisztikai adatokat és az R^2 kiszámítása egyparaméteres módban hibásan történik (programhiba!). Az 1. ábrán bemutatott példákból látszik, hogy a determinációs együttható (egy valós szám négyzete) negatív lett a második adatsor esetén! Azon kívül, hogy ez egy programhiba, arra is felhívja a figyelmet, hogy az adatokra nem illeszthető egyenes, és érdemes megnézni, mely pontokat mérték–számolták–gépelték be rosszul! *Megjegyzés:* Az MS Office 365-ben az Excel már jól számol!

Polinomiális *trendvonal* felvételekor a panelen lehetőség van a polinom fokszámának megadására is. Az illesztést először célszerű kis fokszámú polinommal megpróbálni. Nem megfelelő illeszkedés esetén egyesével kell növelni a polinom fokszámát, amíg a görbe a kívánt módon le nem írja az adatsort a vizsgált tartományban. A polinom egyenletének és statisztikai paramétereinek meghatározására a LIN.ILL függvényt kell használni.

10.2. LIN.ILL függvény használata

Az Excel függvények egyenes illesztésre leghasznosabb/gyorsabb/egyszerűbb változata, amely az egyenes meredeksége és tengelymetszete mellett statisztikai paramétereket is ad. *A LIN.ILL* függvény a legkisebb négyzetek módszerével kiszámolja a megadott adatokhoz legjobban illeszkedő egyenes egyenletét, és eredményként az egyenest leíró tömböt adja vissza. A *LIN.ILL* más függvényekkel együtt való használatával kiszámíthatja lineáris ismeretlen paraméterekkel rendelkező, más típusú (például logaritmikus, polinomiális, exponenciális és hatványsor-) modellek statisztikáit is. Mivel ez a függvény egy tömböt ad eredményül, tömbképletként kell bevinni. Azaz, pl. egy egyváltozós esetben (csak egy független változó, x-adatsor van) jelöljenek ki egy 2×5 cellából álló tömböt, írják be a függvényt:

$$= \mathrm{LIN.ILL}(\mathrm{ismert\_y; ismert\_x; konstans; stat})\,,$$

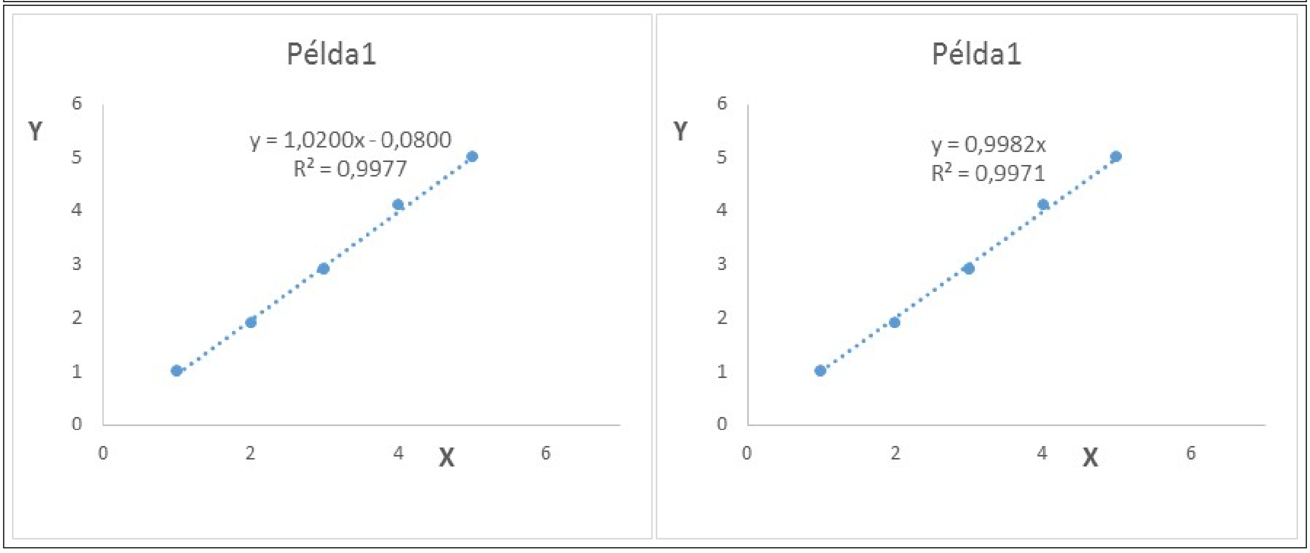
majd egyszerre nyomják meg CTRL+SHIFT+ENTER billentyűkombinációt. A kiírt értékekről a 2. ábrán bemutatott táblázat, illetve a függvény súgója ad útmutatást. A függvény a tengelymetszet és a meredekség standard hibáját adja, amelyből a szórás az (1) egyenlet alapján számolható. Láthatóan a függvény ugyan azt az eredményt adja, mint a *kézi számolás*, de statisztikai paraméterekkel együtt. *Megjegyzés:* Az MS Office 365 Excel-ben a LIN.ILL (és a többi tömbfüggvény is) megadható lineáris egyenletként, azaz nem kell előre kijelölni egy tömböt. Az Excel automatikusan lefoglalja a megfelelő számú cellát, s nem kell a CTRL+SHIFT+ENTER billentyűkombináció sem, elég az ENTER. A kompatibilitás miatt a fentebb leírt "régi" módszer továbbra is működik!

Amint említettük, a LIN.ILL függvénnyel az adatokra illesztett polinom egyenlete és annak statisztikai paraméterei is meghatározhatók. Csak úgy, mint az előző esetben itt is tömbfüggvénnyel van dolgunk. Első lépésként annyi cellából álló mátrixot kell kijelölni, mely 5 sorból áll és annyi oszlopból, ami az illesztendő polinom fokszámánál egyel nagyobb. A polinom fokszámának (n) meghatározásához célszerű az adatpontokra trendvonalat felvenni, ennek ismeretében a LIN.ILL használata gyorsabb. A cellák kijelölése után a következőt kell begépelni:

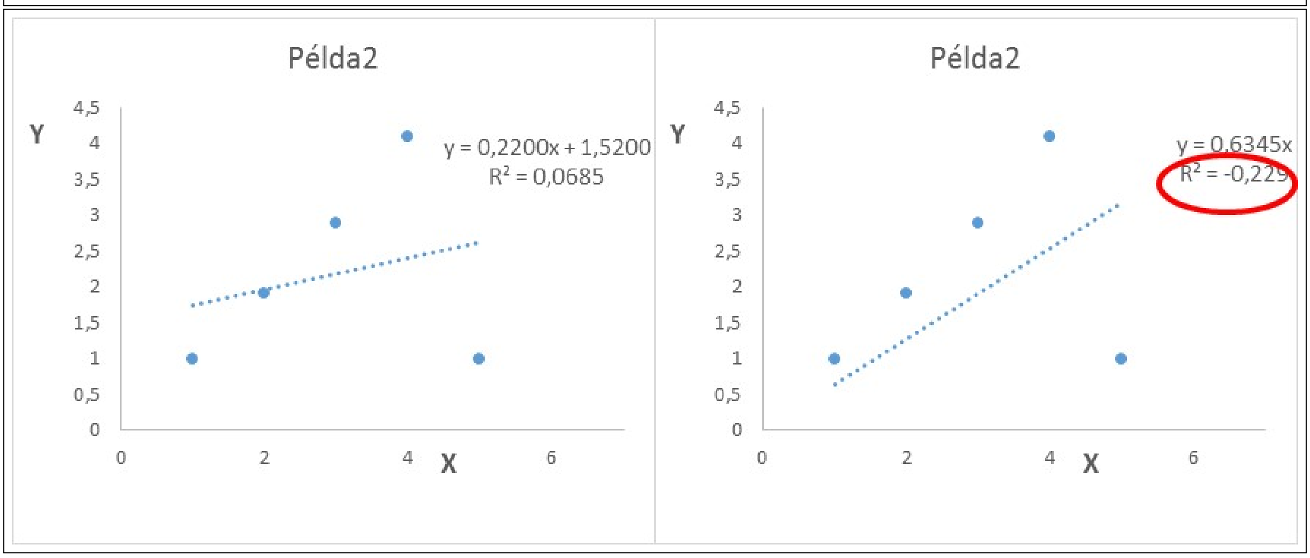
$$= \mathrm{LIN.ILL}(\mathrm{ismert\_y; ismert\_x\hat{\ }\{1,2,\ldots,n\}; konstans; stat})\,,$$

ahol *konstans* és *stat* értéke egyaránt 1 és a parancs jóváhagyásához a CTRL+SHIFT+ENTER billentyűkombinációt kell egyszerre lenyomni. A kiírt értékekről a függvény súgója, illetve internetes leírása ad

Adatsor		Illesztés két paraméterrel		Illesztés egy paraméterrel	
X	Y	a(meredekség)	b(tengelymetszet)	a(meredekség)	b(tengelymetszet)
1	1	1,0200	-0,0800	0,9982	0
2	1,9	szórás	szórás	szórás	szórás
3	2,9	0,0632	0,2098	0,0260	
4	4,1	R=	0,9988		
5	5	R^2=	0,9977	R^2=	0,9995

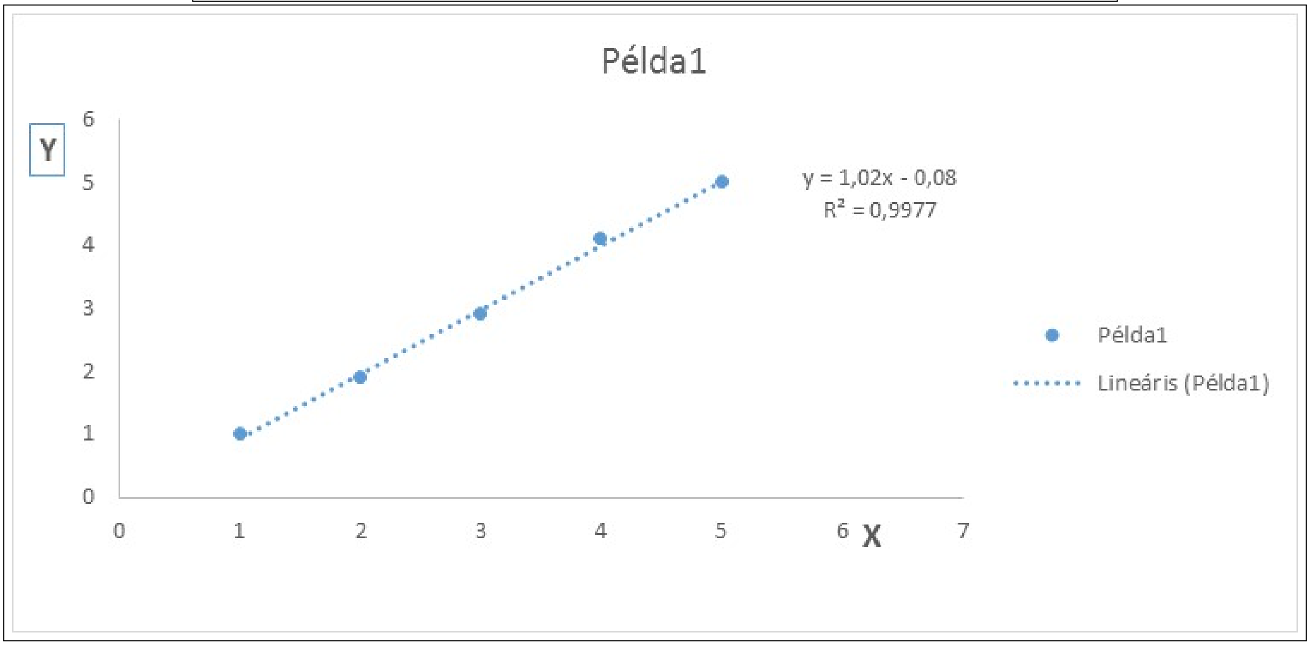


Adatsor		Illesztés két paraméterrel		Illesztés egy paraméterrel	
X	Y	a(meredekség)	b(tengelymetszet)	a(meredekség)	b(tengelymetszet)
1	1	0,2200	1,5200	0,6345	0
2	1,9	szórás	szórás	szórás	szórás
3	2,9	1,0475	3,4743	0,4443	
4	4,1	R=	0,2617		
5	1	R^2=	0,0685	R^2=	0,7183



1. ábra. A trendvonal használatának illusztrálása egy egyenes illesztéshez megfelelő (felső panel) és egy arra alkalmatlan (alsó panel) adatsor esetén. Az illesztések a korábban megadott képletek alapján történtek.

Adatsor		LIN.ILL eredménye			
X	Y	meredekség	1,02	-0,08	tengelymetszet
1	1	st. hiba	0,028284271	0,093808	st. hiba
2	1,9	R^2	0,997698504	0,089443	
3	2,9		1300,5	3	szabadsági fok
4	4,1		10,404	0,024	
5	5				



2. ábra. A *LIN.ILL* használatának illusztrálása kétparaméteres esetben az előző, egyenes illesztéshez megfelelő adatsor esetén.

útmutatást. *Megjegyzés:* A fentebb megadott szintaxis MS Office 365 esetén nem működik. Ekkor a tömbváltozó megadásakor a vessző helyett *backslash*-t kell használni, azaz az ismert_x^{1,2,...,n} kifejezés helyére ismert_x^{1\2\...\n}-t kell írni.

10.3. Regresszió számítás

Az Excel alapváltozatában a File / Beállítások / Bővítmények menü alatt találnak néhány kiegészítő alkalmazást, amit aktiválni lehet. Ezek egyike az *Analysis ToolPak*, amely statisztikai és műszaki elemzéshez kínál adatelemzési eszközöket. Ha ezt aktiválják, az ADATOK *fül* lenyitásával az utolsó sorban megjelenik egy *Adatelemzés* funkció. Ebben található (sok más statisztikai segédlet mellett) a *Regresszió*. Ez adja a legrészletesebb statisztikát egy egyenes illesztésről. Meg kell jegyezni, hogy az algoritmusa eltér a *LIN.ILL* számolásától, ezért kicsit más eredményeket adhat.

10.4. A Solver bővítmény használata

A *Solver* bővítmény ugyanúgy aktiválható, mint az *Analysis ToolPak*, és ugyanott jelenik meg az Excel menüben. Itt Önöknek kell felépíteniük az elemzést, pl. a legkisebb négyzetek módszerének alkalmazásával. Azaz a *Solver* segítségével minimalizálni kell a(z) (mérési)adatok és az illesztett értékek közötti különbségek négyzeteinek összegét, s így kapják meg azt a két paramétert (tengelymetszet és meredekség), amely a legjobban illeszkedő egyenest jelenti.

A 3. ábra egy példát mutat be a *Solver* használatára. A beviteli adatok között szerepel az illesztendő adatsor (X és Y), valamint becsülni kell a *Kiindulási paraméterek*et. A *Függvénykapcsolat* alapján a prog-

X	Y	Illesztett Y	Δ^2	Szum(Δ^2)	Kiindulási paraméterek			Függvénykapcsolat	
1	1	2	1	5,23	a=	1		y=ax+b	
2	1,9	3	1,21		b=	1			
3	2,9	4	1,21						
4	4,1	5	0,81						
5	5	6	1						

X	Y	Illesztett Y	Δ^2	Szum(Δ^2)	Végső paraméterek			Függvénykapcsolat	
1	1	0,998182	3,31E-06	0,029818	a=	0,998182		y=ax+b	
2	1,9	1,996364	0,009286		b=	0			
3	2,9	2,994545	0,008939						
4	4,1	3,992727	0,011507						
5	5	4,990909	8,26E-05						

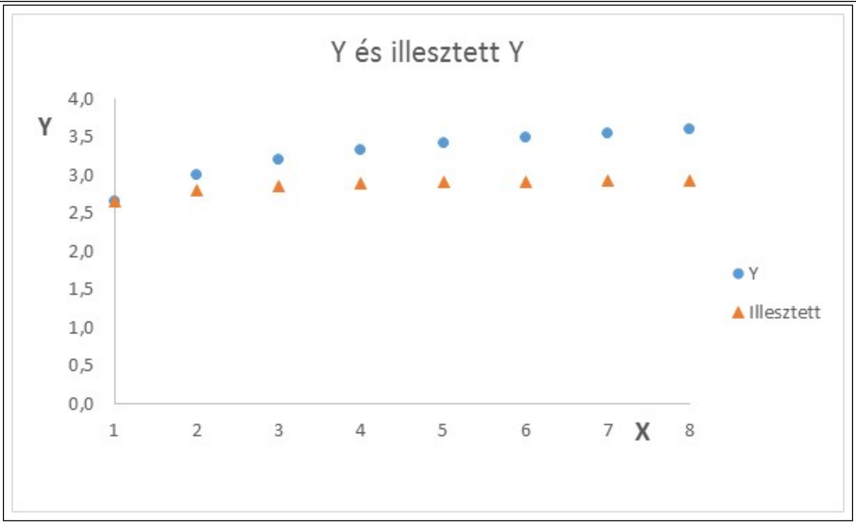
3. ábra. Az Excel *Solver* használatának bemutatása: futtatás előtt (felső panel) és után (alsó panel).

ram számolja az *Illesztett függőváltozót (Y-t)*. Δ az illesztett és az illesztendő (a gyakorlat során a mért) adatok különbsége. A *Solver* alkalmazásakor a *Célérték* a *Szum(*Δ^2) értéke, ezt minimalizálja a program. A *Változócellák* az *a* és *b* értékei, amelyeket illeszti a program, hogy a *Célérték* minimális legyen. A *Solver* futtatása után kapott értékek (3. ábra, alsó panel) szórástartományon belül megegyeznek a korábbikban bemutatottakkal.

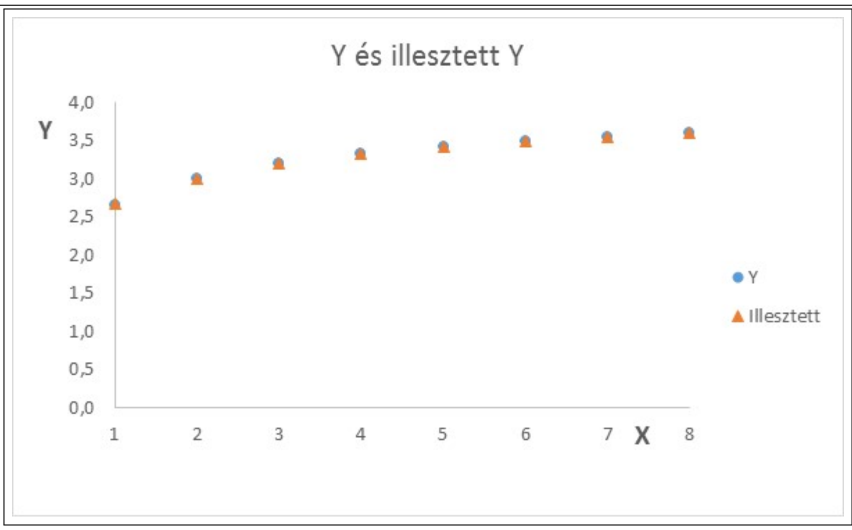
Az előbb bemutatott példa ellenére a *Solver* használatának nem a lineáris regresszió a lényege, hiszen egyenest illeszteni sokféleképpen lehet. Vegyék észre, hogy a *Függvénykapcsolat*ot Önök definiálják (*Illesztett Y*), azaz bármiféle nemlineáris függvény paramétereit ugyanezen módszerrel számolhatják. Nincs korlátozás az illesztendő paraméterek számában sem. *Fontos: Lineáris illesztésnél a kezdeti paraméterek rossz választása nem okoz hibát, mindig lesz megoldás. Nemlineáris illesztésnél a rossz kezdeti paraméter jelentheti azt, hogy a számolás nem konvergál, nem lesz igazi megoldás. A kiindulási paramétereket fizikai–kémiai alapon kell megválasztani!* A nemlineáris illesztés a lineáris regressziónál leírtakkal analóg módon történik, ahogyan ezt a 4. ábra is szemlélteti. Ha a kiindulási és az illesztett adatok jelentősen eltérnek egymástól, akkor a trend nem írható le a megadott *Függvénykapcsolat*tal és aligha fogadható el az eredmény.

A *Solver* egyébként ugyanígy / hasonlóan használható nemlineáris egyenlet megoldására is.

X	Y	Illesztett Y	Δ^2	Szum(Δ^2)	Kiindulási paraméterek		Függvénykapcsolat
1	2,67	2,6666667	1,11E-05	0,623487	a=	2	$y = a + \dfrac{bx}{1+cx}$
2	3,00	2,8	0,04		b=	2	
3	3,20	2,8571429	0,117551		c=	2	
4	3,33	2,8888889	0,194579				
5	3,43	2,9090909	0,271346				
6	3,50	2,9230769	0,33284				
7	3,56	2,9333333	0,392711				
8	3,60	2,9411765	0,434048				



X	Y	Illesztett Y	Δ^2	Szum(Δ^2)	Végső paraméterek		Függvénykapcsolat
1	2,67	2,67013148	1,73E-08	1,06E-05	a=	2,022273	$y = a + \dfrac{bx}{1+cx}$
2	3,00	2,9995384	2,13E-07		b=	0,961015	
3	3,20	3,19897106	1,06E-06		c=	0,483371	
4	3,33	3,33267984	7,18E-06				
5	3,43	3,42855794	2,08E-06				
6	3,50	3,5006709	4,5E-07				
7	3,56	3,55688034	9,73E-06				
8	3,60	3,60192471	3,7E-06				



4. ábra. Az Excel *Solver* használatának bemutatása nemlineáris illesztés esetén: futtatás előtt (felső panel) és után (alsó panel).

11. Függvény inflexióspontjának meghatározása

Egy függvény inflexióspontjának meghatározása legegyszerűbben deriválás segítségével lehetséges. Az 5. ábrán bemutatott függvény (fekete) első deriváltjaként kapott függvény (piros) x-tengellyel alkotott metszéspontja (azaz 0 értéke) megadja az eredeti függvény (fekete) lokális szélsőértékeinek a helyeit. (Ha ez első derivált nulla és a második derivált (kék) nem nulla, akkor a függvénynek (lokális) szélsőértéke van.) Az eredeti függvény (fekete) második deriváltjaként kapott függvény (kék) x-tengellyel adott metszéspontja megadja az eredeti függvény (fekete) inflexiós pontjának helyét az adott tartományon. (Az első deriváltnak szélsőértéke van, a második derivált nulla, s a harmadik derivált nem nulla.)

Polinomok deriválása analitikusan is könnyen elvégezhető (nagy fokszám esetén programcsomagok használata jelentősen gyorsítja a folyamatot). Legyen az adatsorra illesztett polinom a következő alakú:

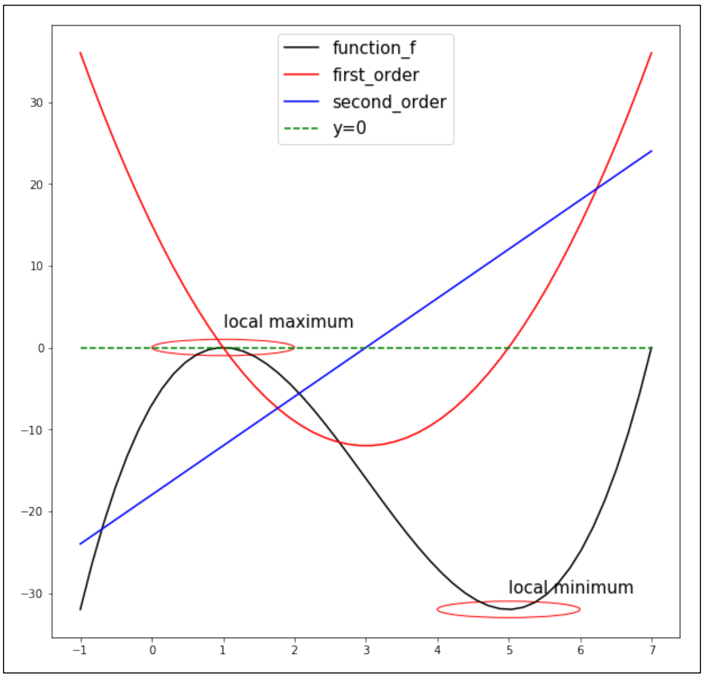
$$f(x) = a_n \cdot x^n + a_{n-1} \cdot x^{n-1} + \cdots + a_2 \cdot x^2 + a_1 \cdot x^1 + a_0 \,. \tag{8}$$

Ekkor az első derivált

$$f'(x) = n \cdot a_n \cdot x^{n-1} + (n-1) \cdot a_{n-1} \cdot x^{n-2} + \cdots + 2 \cdot a_2 \cdot x + a_1 \,. \tag{9}$$

Az $f'(x)$ függvényt még egyszer deriválva kapjuk a második deriváltat. Az eredeti függvény (jelen esetben a (8) egynelettel leírt polinom) inflexióspontjának helyének meghatározásához azt keressük, hogy a második derivált függvényértéke mely x-érték esetén zérus a vizsgált tartományban.[1]

Megjegyzés: A második deriváltként kapott polinom gyökeinek keresése a középiskolai matematika tananyag alapján megoldható, amennyiben ezen polinom foka nem nagyobb, mint kettő. Nagyobb fokszámok esetén numerikus gyökkereső program használata vezethet eredményre (pl. Matlab, Wolfram Mathematica, wxMaxima, stb.).



5. ábra. Függvény első és második deriváltjának, illetve inflexióspontjának grafikus szemléltetése.

[1]Matematikailag az inflexiós pont azonosításának további szükséges feltétele, hogy a függvény első és második deriváltja létezzen és folytonos legyen az adott tartományon, illetve hogy a második derivált $x = 0$-nál előjelet váltson.

12. Műszaki-tudományos ábrák készítése

Mind a kézzel, milliméterpapíron elkészített, mind a számítógépes ábrákkal szemben ugyanazok a követelmények:

- Lehetőleg minden mért adat, vagy azok transzformáltjai szerepeljenek az ábrán.
- Legyen megfelelő – szükség esetén mértékegységgel ellátott – címe mind a tengelyeknek, mind az ábrának. A feliratok mind szakmai, mind nyelvtani szempontból legyenek helyesek. Lehetőleg név és dátum is szerepeljen az ábrán.
- A tengelyek beosztásának és a címkefeliratoknak olyanoknak kell lenniük, hogy az adatok könnyen ábrázolhatók és visszaolvashatók legyenek, és minimalizálják az ábra haszontalan területeit. Ezt az elvet mindig a konkrét feladatra kell alkalmazni, pl. egyenesillesztés esetén néha szükséges, hogy a tengelymetszet akkor is rajta legyen az ábrán, ha kívül esik a mért adatok tartományán.
- Görbeillesztés esetén az ábrának tartalmaznia kell mind az illesztett, mind az illesztésből kihagyott adatokat (megkülönböztetett jelzéssel!), valamint az illesztett görbét is, az illesztett paraméterek értékével együtt.
- Több görbe és / vagy adatsor együttes ábrázolása esetén az egyes görbék vagy adatsorok legyenek világosan elkülöníthetők.

Természetesen lehetnek egyéb elvárások is a konkrét feladattól függően. Ritkán a követelmények egyikemásika nem teljesíthető 100 %-osan (pl. ha egy rossz pont nagyságrendekkel különbözik a többitől, az teljesen eltorzítja az ábrát), de az esetek túlnyomó többségében a fentiek betartása elegendő hibátlan ábrák készítéséhez.

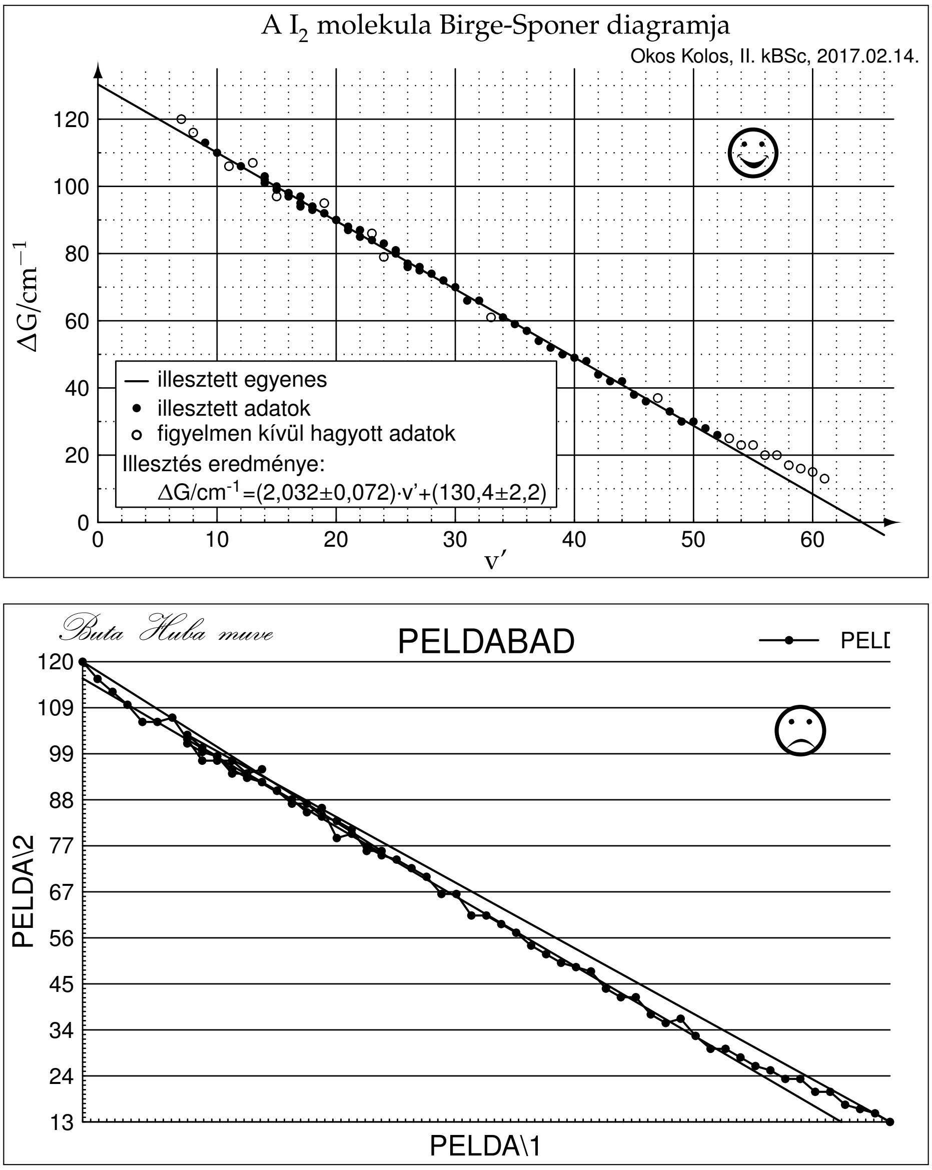
Az eddigiekből is kitűnhet, hogy az ábrakészítő programok felületes ismerete sokszor nem elég. *Általában nem lehet elfogadni kész ábraként, amit egy program az adatok bevitele után az alapbeállításaival felrajzol a képernyőre, hanem olyan szinten kell megtanulni az alkalmazott program kezelését, hogy a fenti követelmények teljesíthetők legyenek!* A tudományos életben ezt fokozottan kell hangsúlyozni, mert a legtöbb kereskedelemben lévő program (főleg a táblázatkezelők) a közgazdasági és prezentációs célokra készített ábrákhoz igazítja az alapbeállításokat, és nem a tudományos életben fokozottabban megkövetelt pontosság és teljesség igényéhez.

Az alábbiak egy példán keresztül mutatják be azokat a jellemző hibákat, amiket a leggyakrabban szoktak elkövetni számítógéppel történő ábrakészítés során. A 6. ábra alsó és felső panelje ugyanarra az adatsorra történő egyenesillesztést illusztrálja. A felső panel teljes mértékben megfelel a fentebb részletezett követelményeknek, míg az alsó panel a – tapasztalat szerint – leggyakrabban előforduló hibákat mutatja. Ezek könnyen elkerülhetők a használt program megfelelő szintű ismeretével. A függelék ezen szakaszának további része a két panel összevetésével segíteni igyekszik a következő tipikus hibák és hiányosságok elkerülését:

Automatikus pontösszekötés: Majdnem minden program alapbeállítása az, hogy a bevitt pontokat valamilyen szimbólummal jelöli és azokat egyenes szakaszokkal köti össze. Az összekötésnek a legtöbb esetben nincs értelme, csak a „szem vezetésére” szokták használni tendenciák bemutatására, főleg közgazdasági grafikonokon. Tudományos ábrákon vonallal illesztett görbét szokás jelölni, így a mért pontok összekötése félrevezető. Ráadásul érthetetlen ábrákhoz vezethet, ha az adatok nincsenek szigorúan növekvő vagy csökkenő sorrendben, pl. a 6. ábra alsó paneljében egyetlen nem sorrendben lévő pont egy felesleges vonalat ad.

Rossz tengelytartomány: Néhány program automatikusan ráteszi az ábrára a koordinátarenszer origóját. Az ábrázolandó pontok tartományától függően ez ahhoz vezethet, hogy az ábra kicsiny részére zsúfolódik össze minden pont, azok menete kivehetetlen lesz.

Egyenetlen tengelybeosztás: Sok program a tengelyek minimális és maximális értékét az adatsorokból kapható minimális és maximális értékhez rendeli. Az alsó panelen az y-tengely beosztása rossz, mert a 13 – 120 tartományt nem lehet jól felosztani tíz részre. Ráadásul a beosztások feliratai pontatlanok,



6. ábra. Egy kifogástalanul (felső panel) és egy a tipikus hibákat bemutató (alsó panel) számítógépes ábra.

csak egész értékre vannak megadva. Emiatt hibás a visszaolvasás, azonos hosszúságú tartományokhoz eltérő értékek tartoznak (pl. $120 - 109 \neq 109 - 99$)! A felhasználónak tudnia kell, hogyan lehet beállítani a tengelyek minimális és maximális értékeit, a beosztás sűrűségét és a beosztások helyét jelző számok kiiratási formátumát!

Automatikus tengelyválasztás: Emiatt rossz beosztás, értelmetlen vagy hiányzó címek és beosztásfeliratok lehetnek a tengelyeken. Az alsó panelen hiányoznak az x-tengely beosztásainak feliratai, a semmitmondó automatikus tengelycímek az adatállomány nevéből és a felhasznált oszlopok sorszámából adódnak, a szélső adatok pedig szinte „lelógnak” az ábráról.

Semmitmondó főcím: Nehezíti az ábra megértését, főleg ha az értelmezés és a készítés között sok idő telik el. Sok program alapértelmezése, hogy főcímként a grafikus beállításokat tartalmazó állomány nevét definiálja.

Név, cím vagy dátum hiánya: Bosszantó információvesztés lehet. Példánkban a rossz ábrán a dátum hiányzik.

Rossz pozícionálás: Az ábra valamely részén szerencsésebb esetben csak komikus, rosszabb esetben információvesztéshez vezethet. Esetünkben a jelmagyarázó blokk annyira rossz helyen van az alsó panelen, hogy a fele lemaradt.

Automatikus jelmagyarázó blokk: Az automatikus jelmagyarázó blokk (angolul *legend*) általában semmit sem mond. Vagy egyáltalán ne használjunk ilyen blokkot, vagy pontosan töltsük ki! A jelmagyarázó blokknak akkor van értelme, ha egy ábrán több görbét tüntetünk fel és rövid utalásokkal akarjuk segíteni az ábra megértését.

Rácsozat: Ha van, gondosan kell beállítani. Nem segíti az ábra olvasását a túl sűrű rácsozat, mert szinte elfedi a görbéket. A ritka rácsozat sem jó, mivel a függvényértékeket nagyon nehéz visszaolvasni ilyen esetekben. Sokszor tisztább az ábra, ha egyáltalán nincs rácsozat. Az biztosan nem jó, ha vagy csak a vízszintes, vagy csak a függőleges rácsvonalak vannak feltüntetve, ahogy azt a rossz ábra mutatja.

Nem megfelelő betűtípus és / vagy betűnagyság használata: Jobb esetekben csak csúnya vagy komikus feliratokhoz vezet, rosszabb esetben félreértésre is alkalmat adhat. A 6. ábra alsó paneljén a név értelmetlenül csicsás és nem ékezetes betűkkel készült. Ábrákon általában érdemes egyszerű vonalvezetésű és vastagabb betűtípusokat használni (pl. Swiss, Arial, Helvetica, Tahoma, Verdana, Calibri, stb. típusok).

Az elhagyott pontok nem szerepelnek az ábrán, vagy jelöletlenek: Ha nem tüntetjük fel az ábrán az illesztésnél figyelmen kívül hagyott pontokat, akkor információt vesztünk a mérések valódi pontosságáról és a pontelhagyások okairól. Ha a rossz pontokat az illesztettekkel azonos módon jelöljük (ahogy ez a rossz ábrán látható), akkor a számított adatok reprodukálása lesz nehéz.