Függelék

a fizikai kémia laboratóriumi gyakorlatokhoz

Tartalomjegyzék

1. A kalomel referenciaelektród elektródpotenciáljának hőmérséklet- és koncentrációfüggése 2

2. A víz sűrűségének hőmérsékletfüggése 3

3. A koncentrációk szorzatával kifejezett vízionszorzat hőmérséklet- és ionerősségfüggése 3

4. Adatok szórása 4

5. A hiba-, ill. szórásterjedés számítása 4

6. Egyenes illesztése és statisztikai jellemzése MS Excel-ben 6

6.1. Alapfogalmak 6

6.1.1. Egyenesillesztés elve 6

6.1.2. Excel trendvonal 6

6.1.3. Lineáris regresszió / paraméterbecslés MS Excelben 8

6.2. Feladatok megoldásának részlépései 9

7. Nemlineáris paraméterbecslés MS Excel-ben 10

7.1. Alapfogalmak 10

7.2. Excel Solver bővítmény 10

7.2.1. A bővítmény betöltése 10

7.2.2. A bővítmény használata 10

8. Függvény inflexióspontjának meghatározása 13

9. Műszaki-tudományos ábrák készítése 14

1. 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

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

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

[KCl]/M	lg([KCl]/M)	$\mathrm{E}^{25\,°\mathrm{C}}$/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

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

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

2. A víz sűrűségének hőmérsékletfüggése

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

$$\boxed{\rho_v(t) = 1{,}00026 - 5{,}08692 \cdot 10^{-6} \cdot t^2}$$

tapasztalati képlet a 15 °C $\leq t \leq$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.

3. 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.

4. 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:

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

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.

5. 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	$\arccos X \pm \left(\frac{\sigma_X}{\sqrt{1-X^2}}\right)$	$\arccos(0{,}5 \pm 0{,}08) =$
		$= \left(\arccos(0{,}5) \pm \left(\frac{0{,}08}{\sqrt{1-0{,}5^2}}\right)\right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{60^\circ \pm 5^\circ}}$
	$\mathrm{arctg}\,X \pm \left(\frac{\sigma_X}{1+X^2}\right)$	$\mathrm{arctg}(1{,}0 \pm 0{,}2) =$
		$= \left(\mathrm{arctg}(1{,}0) \pm \left(\frac{0{,}2}{1+1{,}0^2}\right)\right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{45^\circ \pm 6^\circ}}$

6. Egyenes illesztése és statisztikai jellemzése MS Excel-ben

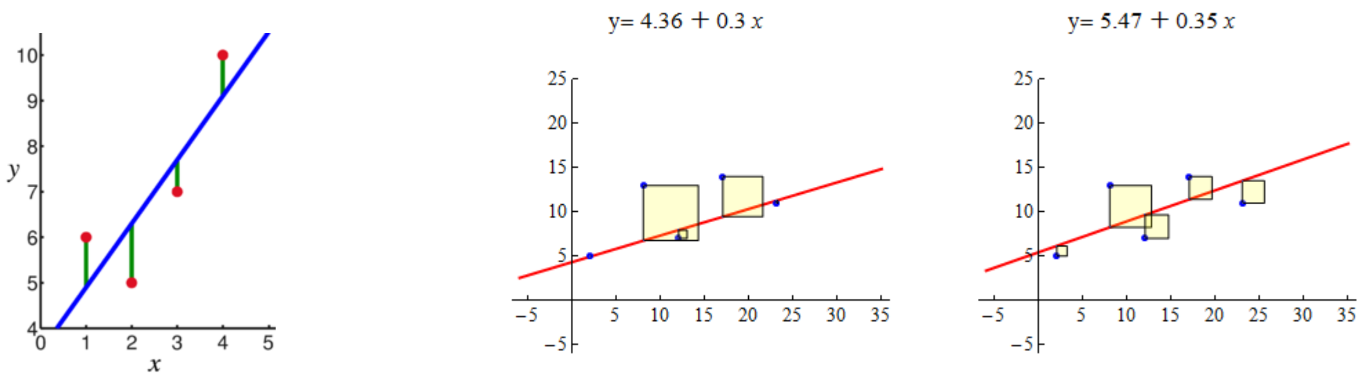
6.1. Alapfogalmak

6.1.1. Egyenesillesztés elve

- Az *"egyenesillesztés"* kifejezés alatt lineáris regressziót, vagy más szóval lineáris paraméterbecslést értünk (lásd 1. ábra, bal oldal).

- Az illesztendő egyenes egyenlete kétféle lehet: 1) $y = a \cdot x$ (azaz az y-tengellyel való metszete az origó) és 2) $y = a \cdot x + b$ (azaz az y-tengellyel való metszete illesztendő paraméter). A mérés elvéből következik, hogy melyiket kell választani. Ha pl. a Lambert–Beer-törvényt tekintjük, azaz $A = \varepsilon c \ell$, akkor az $A - c$ függvényre $x = 0$-ban $y = 0$ (hiszen ha nincs jelen az elnyelő anyag, akkor elnyelése sem lehet).

- A legjobb illeszkedés eléréséhez a programok gyakran a *legkisebb négyzetek módszerét* alkalmazzák. Ekkor az eltérés négyzetösszeg minimalizálása történik (lásd 1. ábra, jobb oldal). Egyéb függvények (pl. polinom, exponenciális stb.) is alkalmazható az eljárás.
Általános Kémia laborgyakorlaton mm-papíron történő illesztéskor: Úgy húzzák be az egyenest, hogy az összes mérési pont között, azokhoz a lehető legközelebb haladjon el!



1. ábra. **Bal oldal**: Lineáris regresszió: mért értékek (piros kör), feltételezett függvénykapcsolat (kék egyenes), és a köztük levő véletlen eloszlású eltérés (zöld összekötő). **Jobb oldal**: Lineáris paraméterbecslés legkisebb négyzetek módszerével; rossz (bal) és jó (jobb) illesztés.

6.1.2. Excel trendvonal

- *Csak illusztrációra alkalmazandó*! Megadott függvénykapcsolat alapján a mérési adatokból ábrát kell készíteni (*minden adat ábrázolandó, de nem minden adat illesztendő!*), majd erre kell felvenni a *lineáris* trendvonalat.
  - Paraméterbecslést megelőző ábrakészítés *haszna*
    - Függő és független változó helyes azonosításának ellenőrzése (az adatpárok olyan trendet követnek, amit *józan megítélés alapján* várunk)
    - Adatok között potenciálisan fennálló lineáris függvénykapcsolat vizuális mérlegelése
    - Felismert trendbe nem illeszkedő mérési adatok azonosítása
  - Függő & független változók azonosítása: Pl.: Ha egy A anyag $A \longrightarrow B + C$ séma szerint elsőrendű reakcióban bomlik, akkor az integrált sebességi egyenlet $[A]_t = [A]_0 \cdot \mathrm{e}^{-kt}$ alakú. A mért $[A]_t - t$ adatpárokból $[A]_0$ és k illesztendő paraméterek többféleképpen is meghatározhatók. Amennyiben

lineáris paraméterbecslés a cél, vegyük az egyenlet mindkét oldalának természetes alapú logaritmusát

$$\ln[A]_t = \ln[A]_0 - kt \tag{1}$$

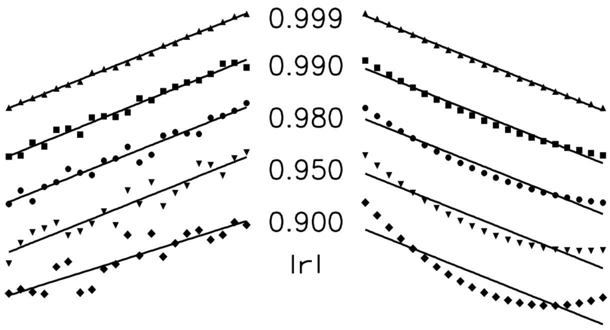
Ezt követően (minden egyéb illesztendő egyenlet esetén is) az a feladat, hogy az egyenes

$$y = a \cdot x + b \tag{2}$$

általános egyenletének megfelelően azonosítsuk az egyes paramétereket és változókat.

* A valós mérés során t halad előre (ha tetszik, mi hagyjuk telni, azaz önkényesen tudjuk változtatni) és ennek következtében $[A]_t$ változik, azaz az (1) egyenletben t a független és $\ln[A]_t$ a függő változó.
* A (2) egyenletben a független változónak (x) szorzótényezője van (a), mely az (1) egyenlet szerint $-k$ (negatív előjel!).
* Végül a (2) egyenlet szerinti additív tag (b) megfelelője az (1) egyenletben $\ln[A]_0$.
* Ezen logikát követve bármely (linearizálható) egyenlet esetén azonosíthatjuk a változókat és az illesztendő paramétereket még akkor is, ha azok összetettebb matematikai kifejezések.

- A trendvonal ábrára történő felvételével megtörténik az adatsorra legjobban illeszkedő egyenes kirajzolása és az illesztett paraméterek kiíratására (meredekség, tengelymetszet, determinációs együttható). A probléma az, hogy az illesztett egyenes statisztikai adatait nem kapjuk meg, így a továbbiakban nem lesz módunk pl. a szórások számítására.
- A trendvonal felvételekor egy további opció: egyparaméteres illesztés, azaz a tengelymetszet értékének önkényes rögzítése (0 vagy attól eltérő).
- Korrelációs (r) & determinációs együttható (R^2) értelmezése
  - Korrelációs együttható (r): Azt fejezi ki, hogy az egyenes – mint modell – milyen mértékben képes leírni az (x_i, y_i) adatpárok összefüggését, így az illeszkedés mértékének egyik mérőszáma. Másképp fogalmazva r azt mondja meg, hogy milyen erős a lineáris kapcsolat a függő (y) és független (x) változók adatai között. Minél közelebb van $|r|$ értéke egyhez, annál valószínűbb a lineáris kapcsolat. *Ezt a paramétert a laboratóriumi gyakorlatokon nem számoljuk, feltételezzük, hogy az elméleti lineáris kapcsolat valóban fennáll.*
  - Determinációs együttható (R^2): Az R^2 számítási módja és a kapott érték értelmezése az illesztett függvény fajtájától (egyenes, exponenciális stb.) és a független változók számától is függ. *A laboratóriumi gyakorlatokon egyváltozós (x), és egy- (meredekség) vagy kétparaméteres (meredekség, tengelymetszet) egyenesillesztést hajtunk végre. Ekkor $R^2 = r^2$.* A determinációs együttható *nem* azt mutatja meg, hogy az egyenes mennyire jól írja le az adatsorban észlelt trendet, hanem azt számszerűsíti, hogy az illesztett egyenes körül *milyen mértékben szórnak* a mért adatok. Amennyiben az adatsor valóban lineáris trendet követ, az 1-hez minél közelebbi R^2 egyre kisebb szórással terhelt mérést tükröz.
  - Az adatsor illesztéshez használt függvény megfelelősége, és az adatsor linearitásának mértéke közötti különbséget szemlélteti a 2. ábra. Látható, hogy egy adott R^2 értékhez két teljesen különböző illesztés is rendelhető. A bal oldali pontseregek valóban lineáris trendet követnek így R^2 értékének 1-hez közeli volta az adatsor kis szórását mutatja. Ezzel szemben a jobb oldali pontseregekre történő egyenesillesztés teljesen helytelen, noha ugyanazon R^2 értékeket eredményezi. *Végeredményben R^2 csak akkor jelent az egyenes illeszkedésére, vagy az adatsor szórására nézve hasznos információt, ha az illesztett trend valóban lineáris.* Az R^2 1-hez közeli értéke önmagában nem jelenti, hogy az adatsort lineáris trend jellemzi.



2. ábra. A korrelációs együttható abszolút értékének ($|r|$) szemléltetése. **Bal oldal**: normális eloszlású hibával terhelt adtok; **jobb oldal**: szisztematikus görbülettel rendelkező adatsorok. Ezen illesztések esetén $R^2 = r^2$, az ábra értelmezésekor nem jelent változást, hogy $|r|$ és nem R^2 került feltüntetésre.

6.1.3. Lineáris regresszió / paraméterbecslés MS Excelben

- Amennyiben nem elegendő a trendvonal alkalmazása, mert az illesztett egyenes statisztikai adataira is szükségünk van, Excel-ben a *LIN.ILL* függvényt használjuk.
- Ez egy tömbfüggvény, azaz a bemeneti és a válaszértékek több cellára is kiterjednek. A függvény használatakor CTRL+SHIFT+ENTER billenytűkombinációra van szükség.
  A laborgyakorlatokon egyváltozós (x), és egy- (meredekség) vagy kétparaméteres (meredekség, tengelymetszet) egyenesillesztéskor 2 (oszlop)×5 (sor) cellából álló tömböt kell előre kijelölni és a következő parancsot kell begépelni:

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

  majd CTRL+SHIFT+ENTER billentyűkombináció.

  - ismert_y; ismert_x $\longrightarrow$ A függő (y) és a független (x) változókat tartalmazó cellák kijelölése. A kijelölésben nem lehet megszakítás, ezért rossz mérési adatokat is tartalmazó adatsor esetén (ezt az előzetes ábrakészítés alapján ítélhetjük meg) az illesztendő adatpárokat új cellákba kell másolni.
  - konstans $\longrightarrow$ Ha értéke 1 / IGAZ: a paraméterbecslés során a tengelymetszet (b) értéke meghatározásra kerül; ha értéke 0 / HAMIS: a paraméterbecslés során a tengelymetszet (b) értéke 0 és az illesztés $y = a \cdot x$ egyenlet alapján történik (a mérés elve a meghatározó, pl. oldat abszorbanciája $c = 0$ oldott anyag koncentrációnál).
  - stat $\longrightarrow$ célszerű értéke 1 (különben a függvény nem számolja a kívánt statisztikai adatokat).

- *LIN.ILL*-el meghatározott statisztikai adatok a tömbfüggvény kiíratási formátumának megfelelően (azaz az eredetileg kijelölt 2 (oszlop)×5 (sor) cellában az alábbi értékek jelennek meg):

	1	2
1	**meredekség**	**tengelymetszet**
2	**meredekség standard hibája**	**tengelymetszet standard hibája**
3	$\mathbf{R^2}$	*a gyakorlaton nem releváns*
4	*a gyakorlaton nem releváns*	**szabadsági fokok száma**
5	*a gyakorlaton nem releváns*	*a gyakorlaton nem releváns*

  - Szabadsági fokok száma (Sz): egymástól független mérési adatok esetén $Sz = N - P$, ahol N az adatok száma és P a meghatározandó paraméterek száma.

– Standard hiba ($\neq$ szórás!), kapcsolatuk: szórás (σ) $= \sqrt{\text{szabadsági fok}} \cdot$ standard hiba

- *Megjegyzés:* Az MS Office 365 Excel verziótól 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.

6.2. Feladatok megoldásának részlépései

1. A függő (y) és a független (x) változók azonosítása a linearizált egyenlet és a szöveg alapján.
2. Az illesztendő paraméter(ek) (meredekség, tengelymetszet) azonosítása a linearizált egyenlet és a szöveg alapján.
3. Amennyiben a mérési adatok nem közvetlenül egyeznek meg az azonosított függő (y) és független (x) változókkal, úgy ezeket külön oszlopokban ki kell számítani a rendelkezésre álló mérési adatokból.
4. Amikor a függő (y) és független (x) változókat tartalmazó adatsorok (oszlopok) már rendelkezésre állnak, egy ábrát kell készíteni a linearizált egyenletnek megfelelően. Az ábra ekkor tartalmazza az összes mérési adat alapján meghatározott ábrázolandó adatpárt. Az ábra alapján azonosítani kell a trendet nem követő, *kiugró* adatpárokat, melyeket az illesztéshez nem szabad figyelembe venni.
5. Az illesztendő (*kiugró adatokat* már nem tartalmazó) adatpárokat célszerű új oszlopokba is átmásolni, majd az előbbiekben készített ábrán feltüntetni (a *kiugró adatokat* is tartalmazó adatsor mellett). Az ábrán meg kell adni, hogy melyik jelölő melyik adatsorhoz tartozik (jelmagyarázat). Az ábrán a trendvonalat az illesztendő adatokat tartalmazó adatsorra kell felvenni.
6. Az illesztendő adatokat tartalmazó oszlopok segítségével lineáris paraméterbecslést kell végrehajtani a *LIN.ILL* Excel-függvénnyel. Az elkészített ábrán kapott trendvonal és a *LIN.ILL*-ből kapott illesztési paraméterek összehasonlítása segíti annak megítélését, hogy mindent megfelelően hajtottunk-e végre.
7. Ellenőrizni kell, hogy mind az adatokat tartalmazó oszlopok, mind a készített ábra tudományos minőségű, érthető, és tartalmazza a szükséges magyarázatokat, mértékegységeket.
8. A *LIN.ILL*-ből kapott standard hibák alapján ki kell számítani a szórásokat (tengelymetszet, meredekség).
9. A linearizált egyenletnek és a szövegnek megfelelően további számítások elvégzésére lehet szükség, hogy az illesztett paraméterektől eljussunk a meghatározni kívánt mennyiségekig. Ügyeljünk arra, hogy potenciálisan mind az illesztések, mind a számítások során dimenzióval rendelkező mennyiségekkel dolgozunk, mely meghatározza a végeredmény mértékegységét is.
10. Ha a feladat kéri, figyelembe kell venni a megfelelő szórásterjedéssel kapcsolatos összefüggéseket is.

7. Nemlineáris paraméterbecslés MS Excel-ben

7.1. Alapfogalmak

- Egyenesillesztéssel megegyező gondolatmenet (adatsor és illesztett függvény közötti eltérésnégyzet-összeg minimalizálása az illesztési paraméterek változtatásával), de itt nem lineáris a trend.
- Relevancia
  - Nem linearizálható egyenletek illesztése (pl. van der Waals-egyenlet a p–V diagramhoz)
  - Amikor egy egyenletet linearizálunk, különböző matematikai műveleteket alkalmazunk. Minden egyes műveletnél szórásterjedést kell számolni, ami azt is jelenti, hogy egyre nagyobb bizonytalansággal lesz terhelt végeredmény.
- Az egyenesillesztéssel ellentétben itt a kiinduló paraméterek becslése elsődleges fontosságú. Ellenkező esetben a számítások nem konvergálnak egy megoldáshoz, azaz fizikailag értelmetlen eredményhez vezetnek. A paraméterek kiinduló értékét kémiai intuíció alapján kell megbecsülni.
- Excel-ben a Solver bővítmény alkalmas erre (egyéb programok: QtiPlot, Origin).
  (Probléma: Az Excel Solver-ben nem nyerhető ki közvetlenül az illesztett paraméterek hibája!)

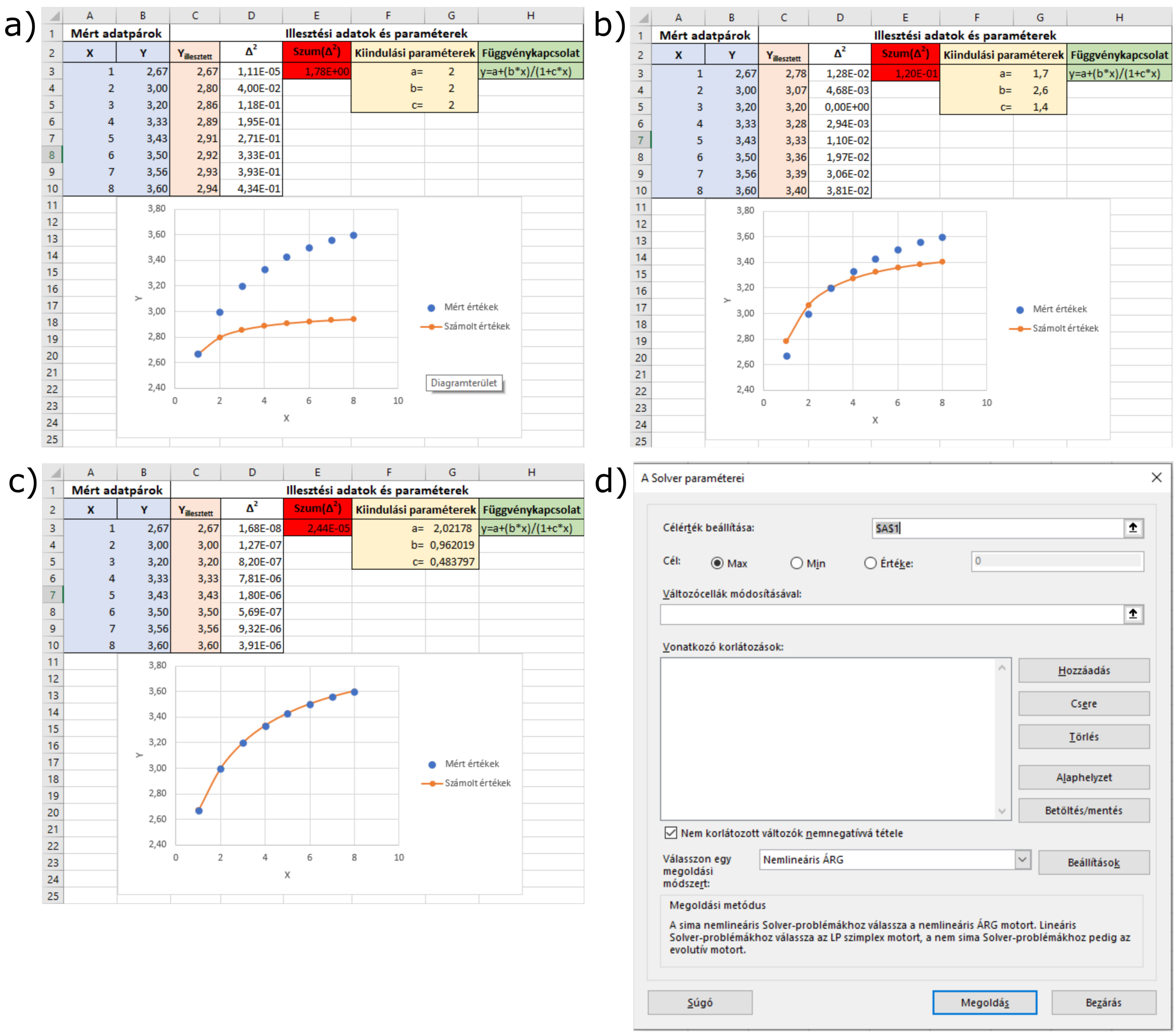
7.2. Excel Solver bővítmény

7.2.1. A bővítmény betöltése

1. Egyéni aktiválás szükséges: *Fájl/Beállítások/Bővítmények* $\longrightarrow$ *Kezelés: Excel-bővítmények, Ugrás* $\longrightarrow$ *Solver bővítmény, OK*
2. A bővítmény betöltése után a bővítmény elérhető az *Adatok* panelen az utolsó menüpontban.

7.2.2. A bővítmény használata

1. A *mért adatpárok*at (illetve szükség esetén az azokból számolható illesztendő mennyiségeket) táblázatba foglaljuk (függő (y) és független (x) változók; 3a ábra A & B oszlopok).
2. A függő (y) és független (x) változók felhasználásával egy ábrát készítünk (diszkrét kék jelölők a 3a ábrán látható diagramon). Noha a paraméterbecslés végrehajtható az ábra elkészítése nélkül is, annak megléte nagyban segíti az eredmények vizuális megítélését.
3. A feladat szövege alapján ismert a *függvénykapcsolat*, aminek a segítségével a *mért adatpárok*ra az illesztést végre kell hajtanunk. A *függvénykapcsolat*ot a könnyebb átláthatóság kedvéért célszerű feltüntetni a munkalapon is (3a ábra H oszlop).
   (a) A *függvénykapcsolat* alapján azonosítjuk az *illesztendő paraméterek*et; feltüntetjük őket a táblázatban és adunk nekik egy tetszőleges *kiindulási érték*et (3a ábra F & G oszlopok).
   (b) A *mért adatpárok*at és az *illesztendő paraméterek*et tartalmazó cellák megfelelő (abszolút vagy relatív) hivatkozásával beprogramozzuk a függő változó *függvénykapcsolat*nak megfelelően *számolt* értékeit ($Y_{\text{illesztett}}$, 3a C oszlop; jelen példa esetén a C3 cellába a következő kifejezés kerül: $= \$G\$3 + (\$G\$4 * A3)/(1 + \$G\$5 * A3)$, mely egyszerűen kiterjeszthető a C oszlop többi cellájára).
   (c) Az $Y_{\text{illesztett}}$ értékeket is feltüntetjük az ábrán (folytonos narancssárga vonallal összekötött narancssárga jelölők a 3a ábrán látható diagramon).



3. ábra. Az Excel Solver bővítmény kezelőfelülete és használata.

4. A mért (Y) és a *függvénykapcsolat* alapján számolt ($Y_{\text{illesztett}}$) függő változó értékek különbségének a négyzetét kiszámoljuk minden adatpár esetén (Δ^2, 3a ábra D oszlop; jelen példa esetén a D3 cellába a következő kifejezés kerül: $=(B3-C3)^2$, mely egyszerűen kiterjeszthető a D oszlop többi cellájára), majd ezeket összegezzük ($Szum(\Delta^2)$, 3a ábra E oszlop; jelen példa esetén az E3 cellába a következő kifejezés kerül: $=SZUM(D3:D10)$).
   A legkisebb négyzetek módszerének alkalmazásakor az a cél, hogy az így kiszámolt eltérésnégyzet-összeg ($Szum(\Delta^2)$) értékét minimalizáljuk az illesztendő paraméterek (3a ábra F & G oszlopok) megfelelő módosításával. Az illesztési paraméterek szisztematikus, puszta kézzel történő módosítása csak nagyon lassan vezetne eredményre, ezért van szükség az Excel Solver által végzett illesztésre.

5. Megnyitjuk a Solver felhasználói felületét az Excel fejlécében az *Adatok* panel utolsó menüpontjára kattintva (3d ábra). A panel kitöltése:
   (a) *Célérték beállítása:* $Szum(\Delta^2)$ értéket tartalmazó cella (E3) behivatkozása.
   (b) *Cél:* A legkisebb négyzetek módszerének alkalmazásakor a cél az eltérésnégyzetösszeg ($Szum(\Delta^2)$) minimalizálása, így a *Min*-t választjuk.

(c) *Változócellák módosításával:* Az illesztendő paraméterek kiindulási értékeit tartalmazó cellák (G3 : G5).

(d) *Vonatkozó korlátozások:* Itt állítható be, ha például egy illesztendő paraméternek felső korlátja van, vagy nem lehet negatív szám a probléma valóságtartalma miatt. (Jelen példában nem szükséges korlátozást megadni.)

(e) *Válasszon egy megoldási módszert:* Nemlineáris ÁRG (Általános Regressziós Görbe) megfelelő. A választható listában lefelé haladva a módszerek egyre széleskörűbben alkalmazhatók, viszont egyre nagyobb gépigényűek is.

(f) A *Megoldás*ra kattintva az Excel Solver megkísérli a célértékcella ($Szum(\Delta^2)$) minimalizálását az illesztendő paraméterek változtatásával. Ennek két kimenetele lehet:

   i. Az illesztendő paraméterek kiindulási értékeként megadott értékekből kiindulva a paraméterbecslés sikeresen lefut (ez a ritkább eset). Ekkor az Excel az illesztendő paraméterek celláiban megadja az optimalizált értékeket. Az illesztés jóságáról a korábban készített ábra változása ad információt, azaz ideális esetben a számolt értékek adatsora jó átfedésbe kerül a mért értékekkel (3c ábra G3 : G5 cellák értékei és diszkrét kék jelölőkön áthaladó narancssárga folytonos vonal).

   ii. Gyakoribb eset, hogy az illesztendő paraméterek kiindulási értékei nem megfelelőek és a megoldás eredményei nem konvergálnak, azaz az Excel Solver nem kap értelmezhető eredményt. Ekkor célszerű bezárni a Solver felhasználói paneljét, és az egyes illesztendő paraméterek nagyságrendjét próbálgatással kell megbecsülni. Azt kell figyelni, hogy a paraméterek manuális változtatásának hatására az illesztett adatokat mutató narancssárga vonal mikor kezd el a mért adatokhoz közelíteni (3a és b ábrák közötti különbség). Ezt a próbálgatást addig kell folytatni, amíg az adott kiinduló értékeket használva az Excel Solver már konvergáló eredményt kap (3c ábra).

   Azon függvények illesztésekor, melyek nagyon érzékenyen reagálnak a paraméterek változtatására egy bizonyos tartományon belül, előfordulhat, hogy az Excel Solver által adott eredmény jobb, mint a kiindulási állapot, de az illeszkedés még nem elfogadható. Ilyenkor célszerű a Solvert újra futtatni az előbb megtalált paraméterekkel. Amennyiben ezen paraméterek közelében jobb illeszkedés is elérhető, a Solver meg fogja találni. Amikor az újrafuttatás nem változtat a paramétereken, nem szükséges tovább próbálkozni.

(g) Egy sikeres paraméterbecslést követően is mindig ellenőrizni kell, hogy noha a mért és az illesztett adatok átfedése megfelelő, az illesztett paraméterek megfelelnek-e a felőlük támasztott valóságtartalom követelményeinek (pl. p–V adatpárok van der Waals-egyenlettel történő illesztésekor nem kapunk-e negatív számot a vonzó kölcsönhatást kifejező paraméterre).

8. Függvény inflexióspontjának meghatározása

Egy függvény inflexióspontjának meghatározása legegyszerűbben deriválás segítségével lehetséges. A 4. 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:

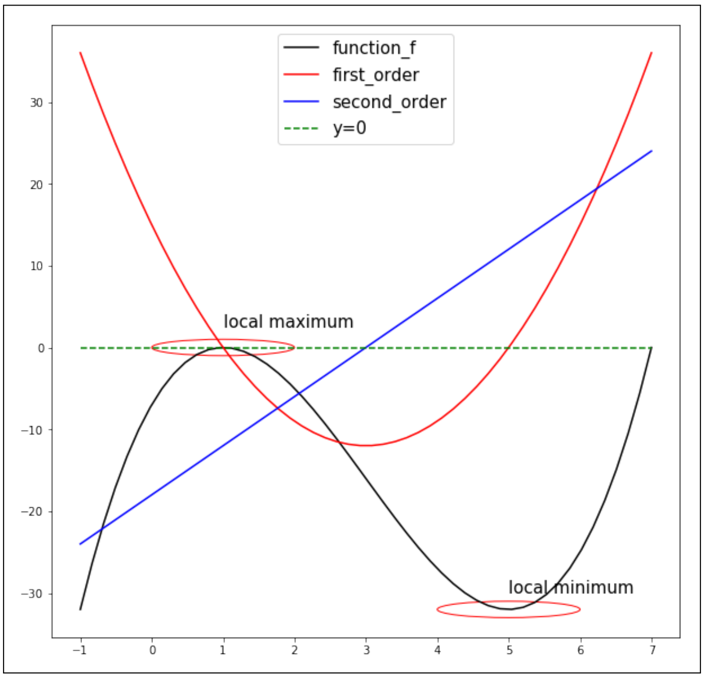
$$\mathrm{f}(\mathrm{x}) = \mathrm{a_n} \cdot \mathrm{x}^{\mathrm{n}} + \mathrm{a_{n-1}} \cdot \mathrm{x}^{\mathrm{n}-1} + \cdots + \mathrm{a_2} \cdot \mathrm{x}^2 + \mathrm{a_1} \cdot \mathrm{x}^1 + \mathrm{a_0}\,. \tag{3}$$

Ekkor az első derivált

$$\mathrm{f}'(\mathrm{x}) = \mathrm{n} \cdot \mathrm{a_n} \cdot \mathrm{x}^{\mathrm{n}-1} + (\mathrm{n}-1) \cdot \mathrm{a_{n-1}} \cdot \mathrm{x}^{\mathrm{n}-2} + \cdots + 2 \cdot \mathrm{a_2} \cdot \mathrm{x} + \mathrm{a_1}\,. \tag{4}$$

Az $f'(x)$ függvényt még egyszer deriválva kapjuk a második deriváltat. Az eredeti függvény (jelen esetben a (3) 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.).



4. 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.

9. 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.

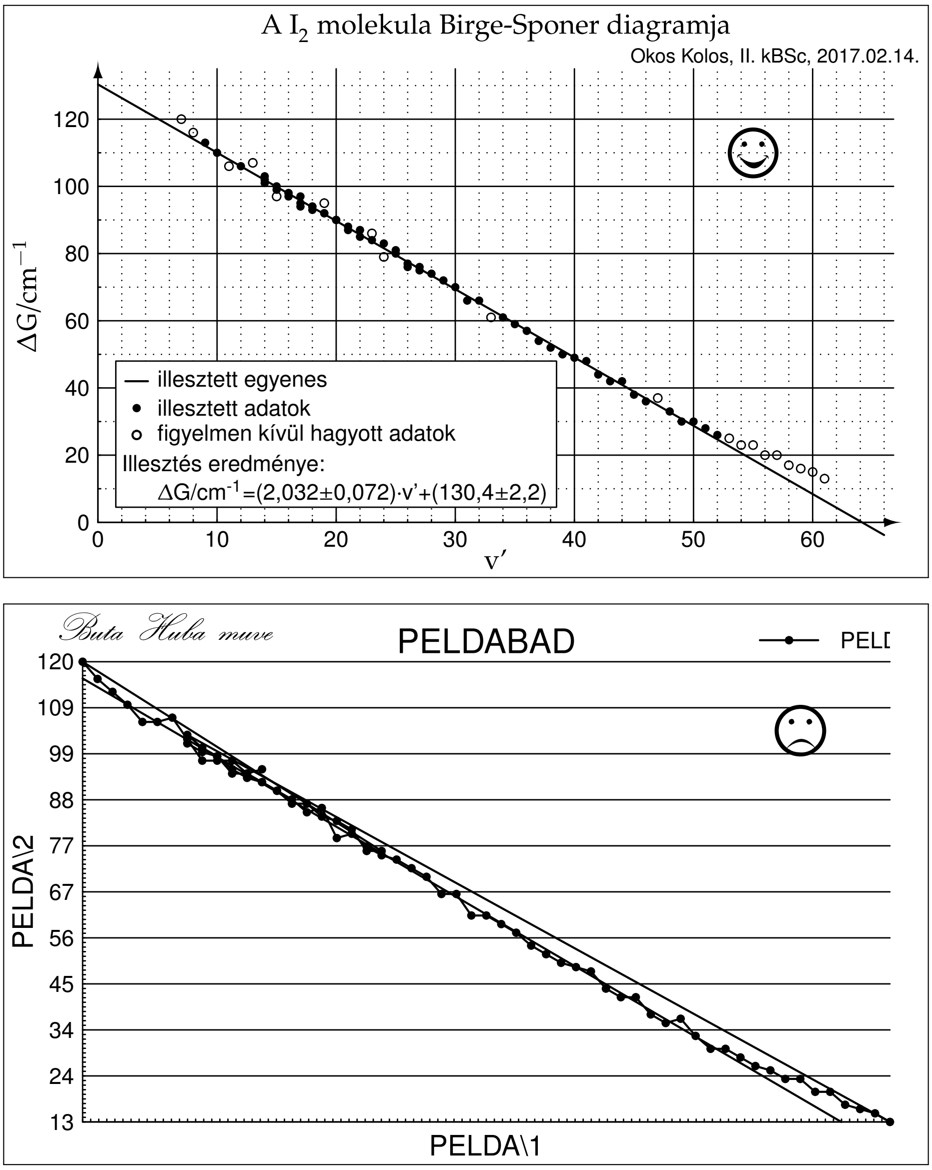
Az eddigiekből is kitűnhet, hogy az ábrakészítő programok felületes ismerete sokszor nem elég. *Általában nem lehet elfogadni kész ábraként, amit egy program az adatok bevitele után az alapbeállításaival felrajzol a képernyőre, hanem olyan szinten kell megtanulni az alkalmazott program kezelését, hogy 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. Az 5. 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. az 5. 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,



5. 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. Az 5. 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.