



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ (Ι) ΧΗΜΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΑΝΟΡΓΑΝΗΣ ΚΑΙ ΑΝΑΛΥΤΙΚΗΣ ΧΗ-
ΜΕΙΑΣ

ΑΝΟΡΓΑΝΗ ΧΗΜΕΙΑ

ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΩΝ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ – ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ
ΓΡΑΜΜΗΣ ΤΑΣΗΣ (TRENDLINE) ΣΤΟ MICROSOFT EXCEL

Σ. Κατσαντώνης
Υποψήφιος Διδάκτορας ΕΜΠ

Διδάσκων:
Κ. Κορδάτος
Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα 2023

Σκοπός

Η αποτύπωση πειραματικών δεδομένων με τη μορφή μιας γραφικής παράστασης, πολλές φορές παρουσιάζει σημεία με μεγάλη διασπορά, χωρίς το σχηματισμό μιας γραμμικής ή μη γραμμικής καμπύλης. Σε αυτή την περίπτωση, μπορούν να χρησιμοποιηθούν διάφορα μαθηματικά μοντέλα για την κατασκευή μιας καμπύλης (γραμμή τάσης ή trendline), η οποία εμφανίζει τη βέλτιστη δυνατή προσέγγιση στα πειραματικά δεδομένα με την ελάχιστη δυνατή απόκλιση από καθένα από αυτά. Ένα από αυτά τα μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιείται συχνά είναι η Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων (Least Squares Method).

Από τη Μέθοδο Ελαχίστων Τετραγώνων προκύπτει η εξίσωση της γραμμής τάσης, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή του φαινομένου που μελετάται και τη διερεύνηση ύπαρξης μαθηματικής συσχέτισης ή μη, μεταξύ δύο μεταβλητών. Μέτρο για την καλή εφαρμογή της γραμμής τάσης στα πειραματικά δεδομένα, αποτελεί ο αδιάστατος αριθμός R^2 , ο οποίος ονομάζεται συντελεστής προσδιορισμού και λαμβάνει τιμές μεταξύ 0 και 1. Όσο καλύτερη είναι η εφαρμογή της γραμμής τάσης στα πειραματικά δεδομένα, τόσο περισσότερο τείνει η τιμή του R^2 στη μονάδα. Επιπλέον, η εξίσωση της γραμμής τάσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση τιμών των μεταβλητών που δεν ανήκουν σε σημεία των πειραματικών δεδομένων, όταν η τιμή της μίας μεταβλητής είναι γνωστή. Για παράδειγμα, η διαδικασία αυτή βρίσκει εφαρμογή στη κατασκευή μιας καμπύλης περιεκτικότητας ενός υδατικού διαλύματος σε μια χημική ουσία (π.χ. αιθανόλη) συναρτήσει της πυκνότητας του διαλύματος (π.χ. αιθανόλης – νερού). Έτσι, μετρώντας τη πυκνότητα διαλυμάτων γνωστής περιεκτικότητας σε αιθανόλη, προκύπτει μια καμπύλη περιεκτικότητας συναρτήσει της πυκνότητας, που ονομάζεται καμπύλη αναφοράς. Η καμπύλη αναφοράς μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό της περιεκτικότητας σε αιθανόλη ενός διαλύματος άγνωστης περιεκτικότητας (π.χ. αλκοολούχο ποτό), μέσω της μέτρησης της πυκνότητάς του.

Στη συνέχεια, περιγράφεται η διαδικασία σχεδιασμού της γραμμής τάσης για μια σειρά δεδομένων με τη βοήθεια του Microsoft Excel.

Γραμμική (linear) προσέγγιση

- Μεταφορά των πειραματικών δεδομένων στο Microsoft Excel, δημιουργώντας μία στήλη για κάθε μεταβλητή.

	A	B	C	D
1				
2		x-values	y-values	
3		0	5.0	
4		1	5.5	
5		2	6.8	
6		3	7.5	
7		4	7.2	
8		5	7.8	
9		6	9.0	
10		7	10.5	
11		8	11.0	
12		9	13.0	
13		10	14.0	
14				

- Σχεδιασμός διαγράμματος τύπου Διασποράς (*Scatter*)

The screenshot shows the Microsoft Excel interface with the **Insert** tab selected. The **Charts** group is active, and the **Scatter** chart type is chosen. A tooltip for the **Scatter** chart type is displayed, providing guidance on when to use it.

Scatter

Use this chart type to:

- Compare at least two sets of values or pairs of data.
- Show relationships between sets of values

Use it when:

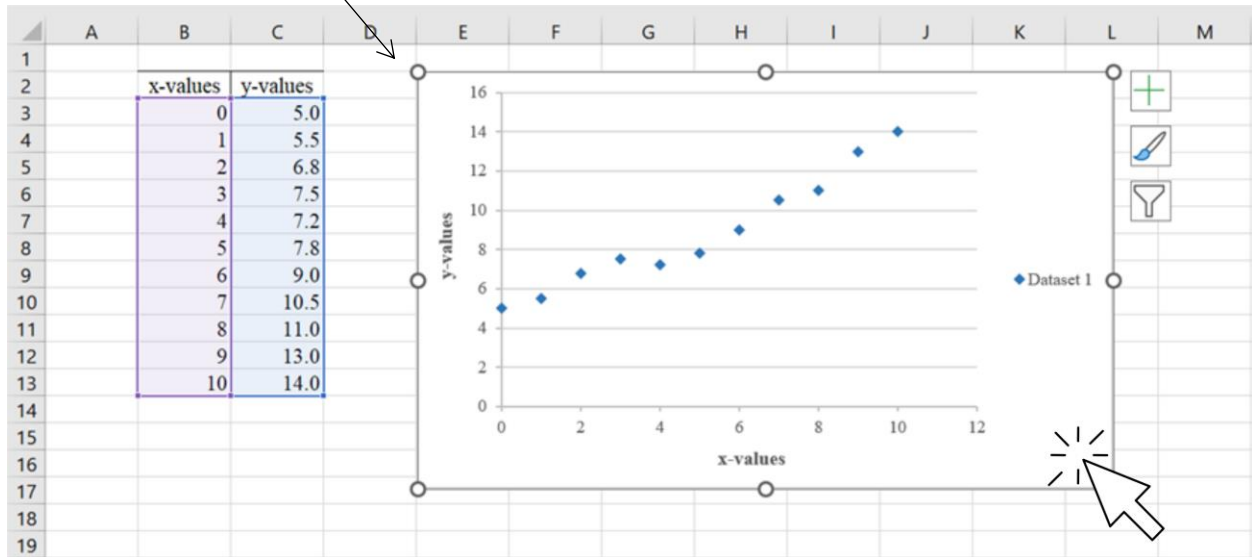
- The data represents separate measurements.

The background data table is as follows:

	A	B	C	D
1				
2		x-values	y-values	
3		0	5.0	
4		1	5.5	
5		2	6.8	
6		3	7.5	
7		4	7.2	
8		5	7.8	
9		6	9.0	
10		7	10.5	
11		8	11.0	
12		9	13.0	
13		10	14.0	
14				

- Παρατηρώντας τη μορφή του διαγράμματος, επιλέγεται ο τύπος της γραμμής τάσης που προσεγγίζει καλύτερα τα πειραματικά δεδομένα, ως εξής:

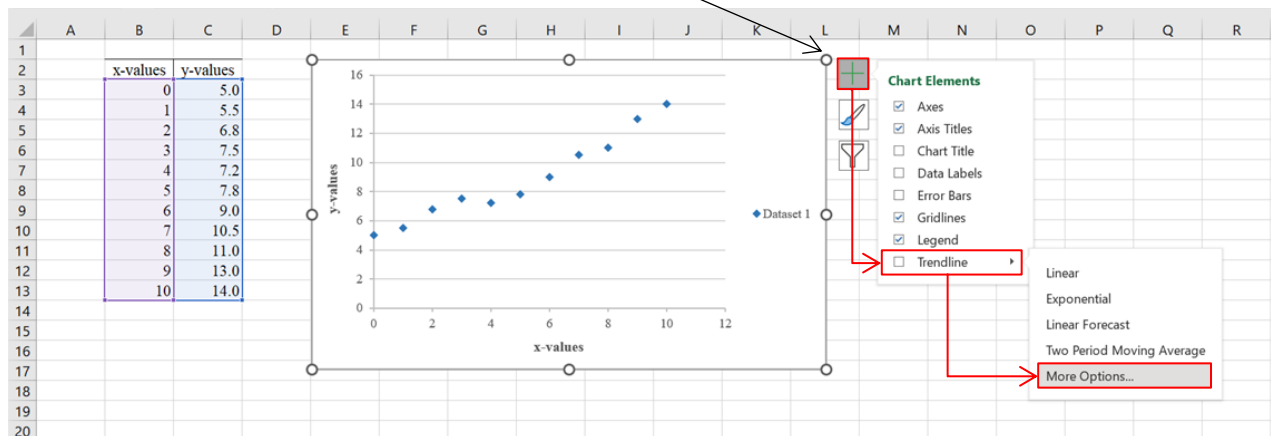
Επιλογή της γραφικής παράστασης

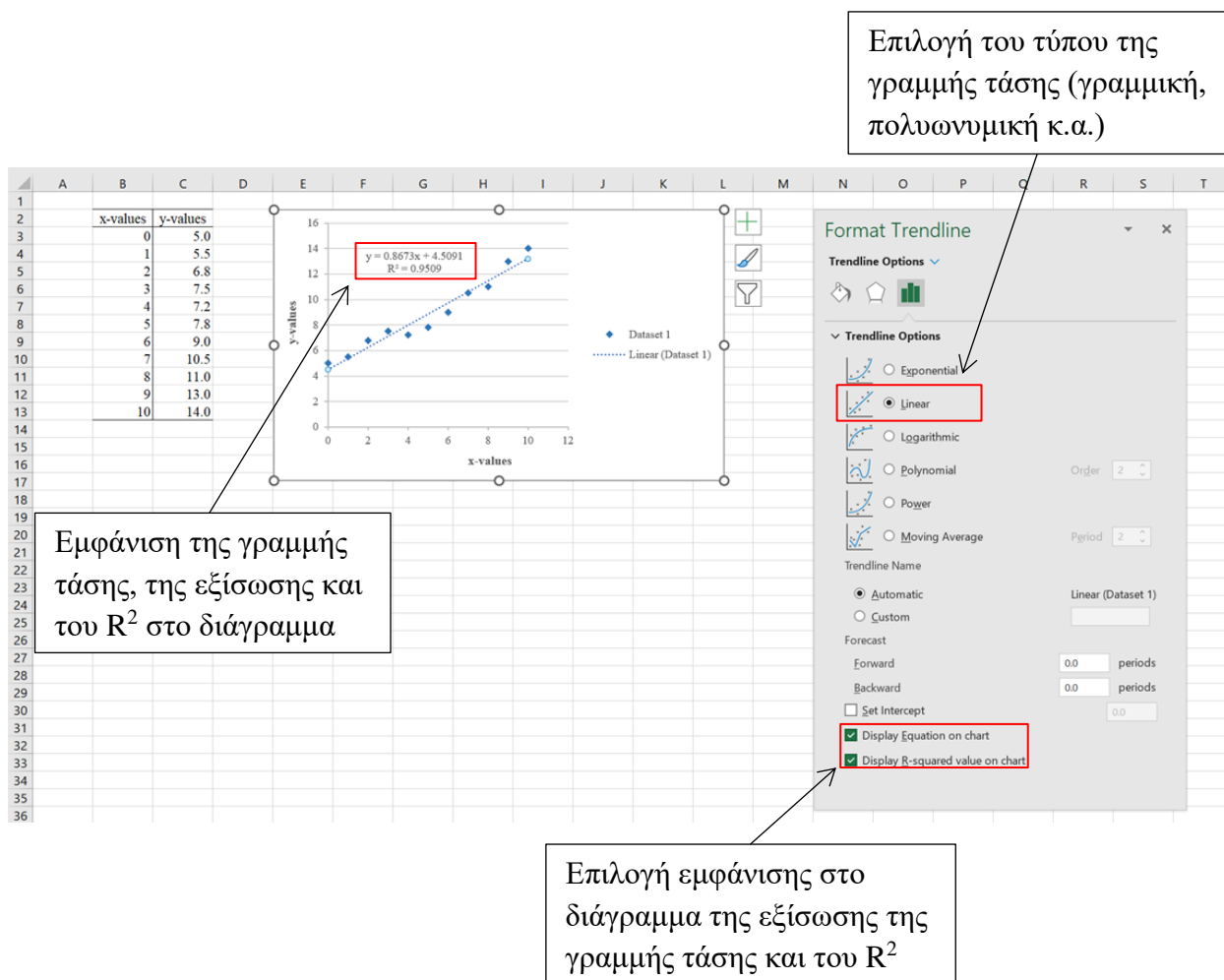


Επιλογή του εικονιδίου



→ Trendline → More Options

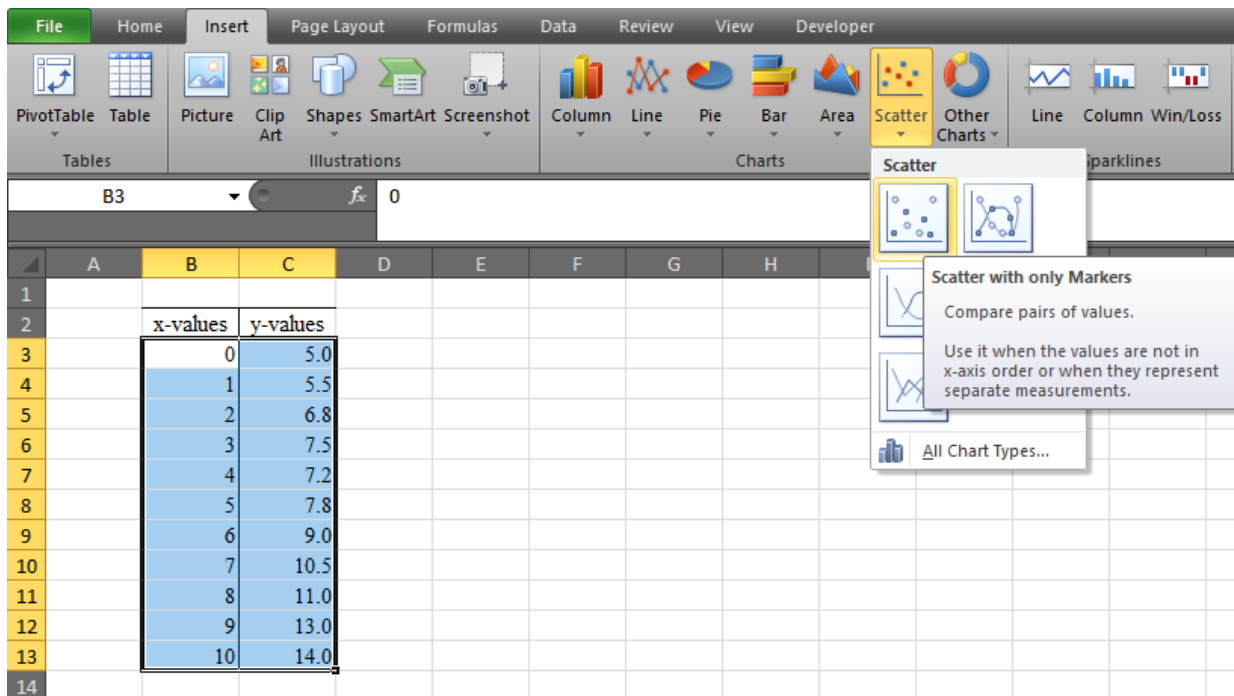




Με αυτό τον τρόπο, κατασκευάζεται μια καμπύλη αναφοράς, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό των μεταβλητών x και y , όταν μια από τις δύο είναι γνωστή. Επιπλέον, η εξίσωση της γραμμής τάσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση των σημείων τομής με τους άξονες.

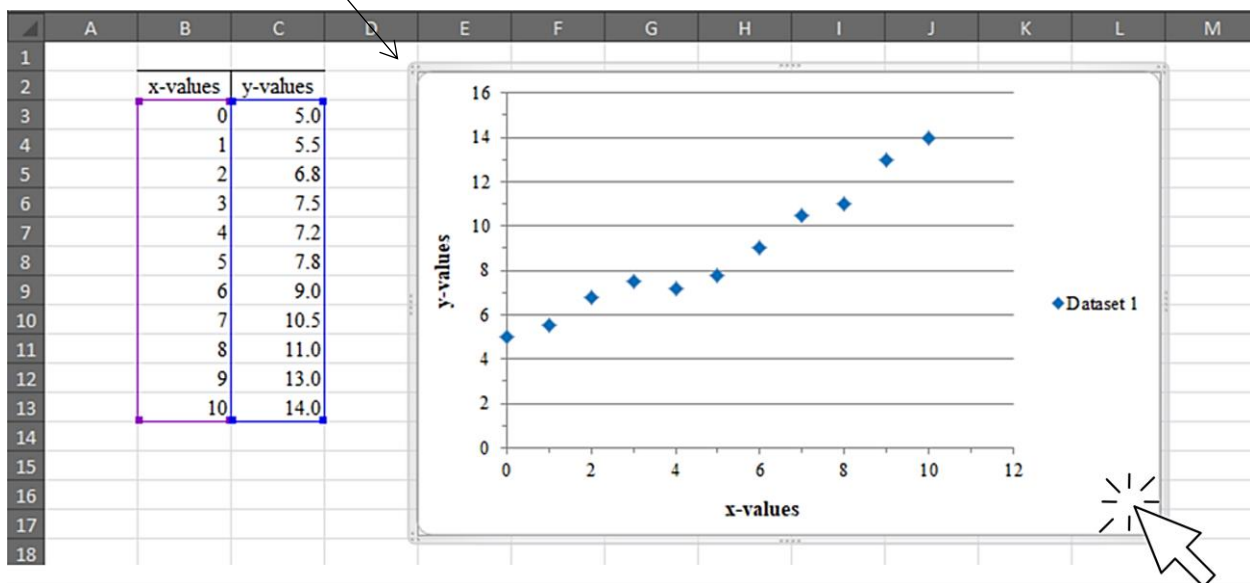
Στη συνέχεια, παρουσιάζεται η διαδικασία σχεδιασμού της γραμμής τάσης με χρήση παλαιότερης έκδοσης του Microsoft Excel.

- Σχεδιασμός διαγράμματος τύπου Διασποράς (*Scatter*)

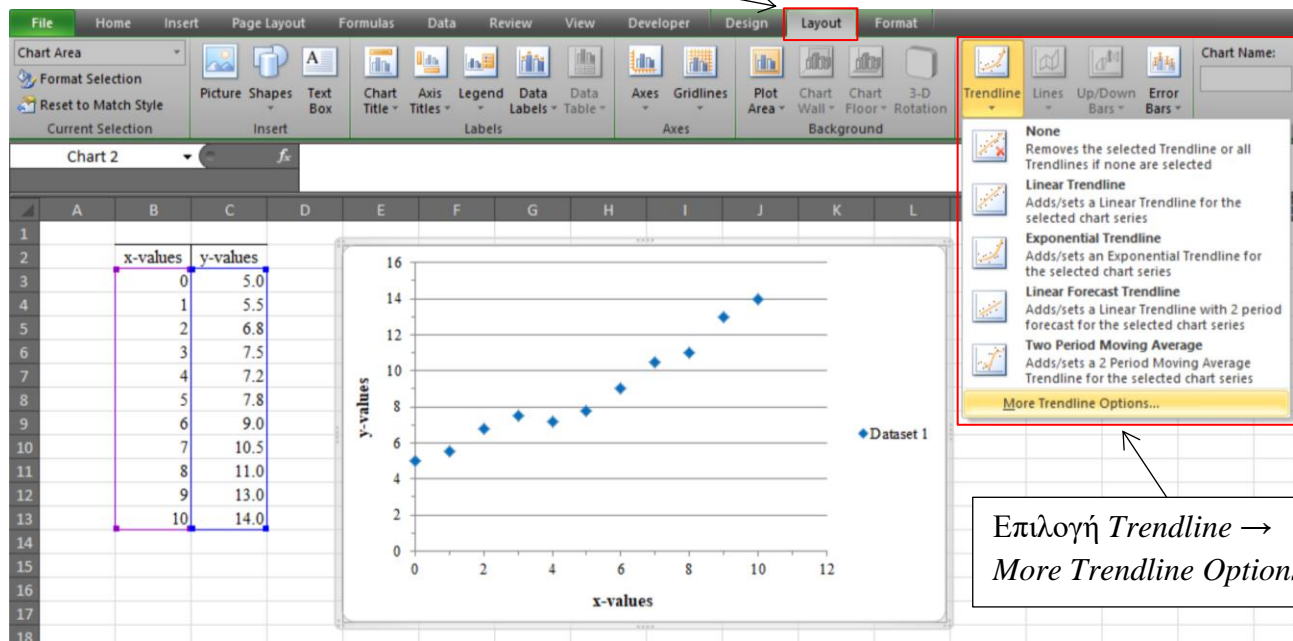


- Παρατηρώντας τη μορφή του διαγράμματος, επιλέγεται ο τύπος της γραμμής τάσης που προσεγγίζει καλύτερα τα πειραματικά δεδομένα, ως εξής:

Επιλογή της γραφικής παράστασης



Μετάβαση στη καρτέλα *Layout*



Εμφάνιση νέου παραθύρου:

Format Trendline

Trendline Options

Trend/Regression Type

☐ Exponential

☒ Linear

☐ Logarithmic

☐ Polynomial Order: 2

☐ Power

☐ Moving Average Period: 2

Trendline Name

☒ Automatic: Linear (Dataset 1)

☐ Custom:

Forecast

Forward: 0.0 periods

Backward: 0.0 periods

☐ Set Intercept = 0.0

☒ Display Equation on chart

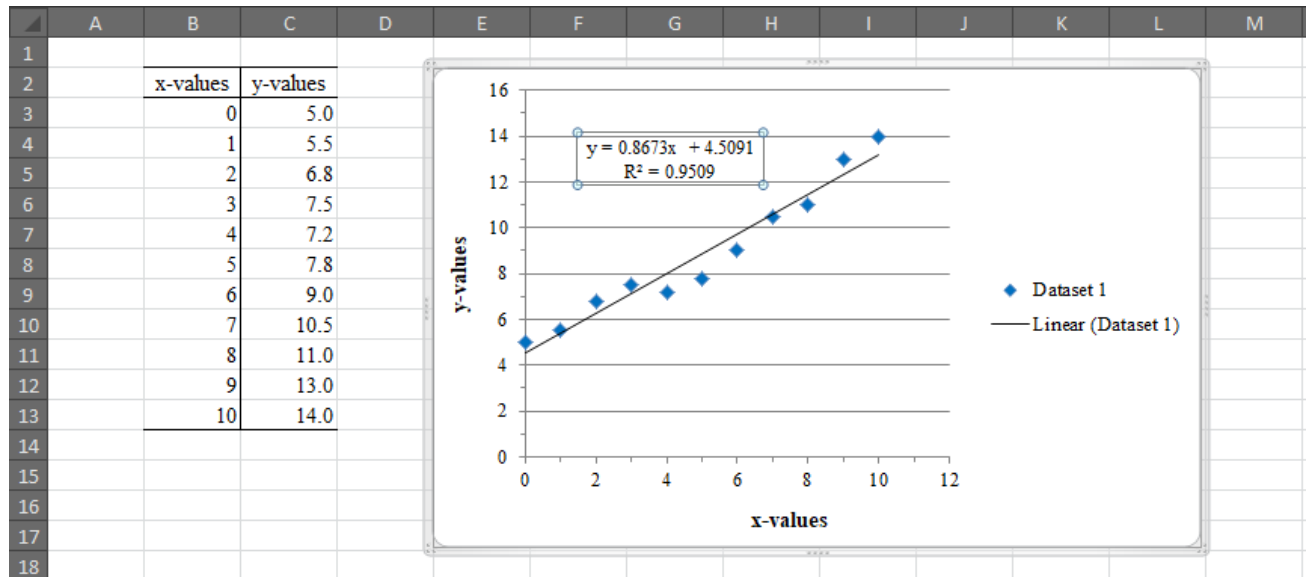
☒ Display R-squared value on chart

Close

Επιλογή του τύπου της γραμμής τάσης (γραμμική, πολυωνυμική κ.α.)

Επιλογή εμφάνισης στο διάγραμμα της εξίσωσης της γραμμής τάσης και του R^2

- Εμφάνιση της γραμμής τάσης, της εξίσωσης και του R^2 στο διάγραμμα των πειραματικών δεδομένων



Πολυωνυμική (polynomial) προσέγγιση

Με αντίστοιχο τρόπο μπορεί να σχεδιαστεί η γραμμή τάσης πειραματικών δεδομένων, τα οποία σχηματίζουν καμπύλη μη γραμμικής μορφής, όπως για παράδειγμα πολυωνυμικής μορφής:

