

# Back to basics: avoiding errors in scientific research and publications

Bojana Obradovic

Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, P. O. Box 3503, 11120 Belgrade, Serbia

*Keywords: errors; adsorption; statistics; fundamental knowledge*

*Dostupno na Internetu sa adrese časopisa: <http://www.ache.org.rs/HI/>*

EDITORIAL

UDK: 001: 005.94

*Hem. Ind.* **73** (3) 143-146 (2019)

The number of scientific publications is constantly increasing accompanied with an increasing number of manuscript retractions, yet at a relatively low rate of 0.04 % [1]. The major concern is fraud and different kinds of scientific misconduct that were found in about half of the retracted manuscripts [1]. The rest was due to unintentional errors discovered after the manuscripts were published. Still, the impact of these intentional or unintentional published errors may be high even if the manuscript is retracted. Several studies have reported continuous citations of retracted manuscripts extending up to several years after retraction [2,3]. Also, the vast majority of these citations were non-negative or positive (without the reference to retraction) implying that the authors were not aware of retraction [2,3]. Such superficial reviews of the published literature, especially if the original works are not consulted, could be a source of mistakes and inconsistencies that could be further propagated in the scientific literature and difficult to eradicate.

An example is in the area of experimental studies and modeling of kinetics and thermodynamics of adsorption of contaminants from aqueous solutions, the topic that is also relevant for the journal *Hemijska industrija*. It was found that majority of declined manuscripts on this topic had similar organization, experimental methods, data correlation and interpretation with common deficiencies [4]. In a detailed critical review by Tran and coworkers [5] accompanied with a comment on this manuscript by Kopinke and coworkers [6] thorough examination of the common mistakes is provided together with correct expressions and original citations of the relevant adsorption kinetics models and isotherms. Some cases of the most frequent experimental errors include not precisely defined experimental conditions and especially pH changes during the experiment, scarce measurements during the initial adsorption times, and equilibrium values assumed at certain times (*e.g.* 24 h) without the proof that the true equilibrium was reached [5]. In adsorption kinetics modeling errors are even amplified since there are many incorrectly copied expressions applied and reported in literature [5]. Also linearized forms of kinetic expressions and isotherms often yield "spurious correlations". The examples are the well-known and largely used pseudo-second order (PSO) kinetic model [7] and the Langmuir isotherm [8], both applied in several linearized forms. The problem is that most of these forms include the same variable on both sides of the equation, both in the dependent and the independent variable such as plotting  $t/C_t$  against  $t$  where  $C_t$  is the concentration of adsorbed contaminant on the adsorbent at the time  $t$  in the PSO model. By multiplying time in the ordinate, the initial data points, which chiefly determine the adsorption kinetics, center near the origin only slightly affecting the linear fit while data measured at later times, near the equilibrium, will carry more weight in the linear regression [7]. This leads to a substantial improvement in linear correlation resulting in a greater correlation coefficient [7]. Plotting of the PSO model predictions and experimental data in the nonlinear form usually reveals weaknesses of the fit especially at early adsorption times while calculations of coefficients of determination ( $R^2$ ) for the model in linear and nonlinear forms can quantitatively show the difference [5]. Unfortunately, many studies report just  $R^2$  values for the applied linear forms of different kinetic models as a sole measure of the goodness of the fit, which can lead to invalid conclusions. Additionally, it was reported that different linearized forms of the Langmuir equation yielded different values of fitted parameters [8]. Therefore, it is highly recommended that nonlinear regression methods are applied in conjunction with chi-squared ( $\chi^2$ ) test along with  $R^2$  values in order to determine the best models for adsorption kinetics and isotherms for each experimental study [5].

---

E-mail: [hi\\_ed@ache.org.rs](mailto:hi_ed@ache.org.rs)

<https://doi.org/10.2298/HEMIND190630018O>



Another area of frequent mistakes is statistical analysis of experimental data [9,10]. Wrongly calculated  $p$ -values (probability values) may indicate certain findings as significant, which may have broader consequences in adoption and even excess of false positive results [10,11]. Scientists are thus recommended to include statistics experts in the design and analysis of experiments from the start and to provide detailed descriptions of statistical analyses in the manuscripts [9].

A separate issue is addressing errors in published articles, which was reported to be often cumbersome and lengthy largely due to reluctance of journals to take action and unclear procedures for post-publication peer review, correction and/or retraction [9]. A wider and more diverse set of corrective tools is needed that would clearly indicate errors in original publications and explain added corrections [12]. Also, corrections and post-publication review should be recognized and encouraged by the scientific community [9,12].

The journal *Hemijska industrija* aims to publish high-quality scientific research results, innovations and advancements in industrial practices, technologies and products, all based on reliable and accurate scientific methods and theoretical backgrounds. In an attempt to provide a source of fundamental scientific information we are re-introducing the section "Let's refresh our knowledge", which will assemble articles in special topics by invited academics and experts in the field. We hope that such articles will be helpful for young researchers, scientists and engineers as a starting and trustworthy point for performing research and practice in a particular area. We also believe that it is valuable to periodically restate the fundamental knowledge in an effort to eradicate erroneous concepts and approaches repeated in literature. The journal *Hemijska industrija* also welcomes post-publication peer reviews and possible concerns and corrections should be sent to the Editorial team.

# Potvratak na osnovna znanja: način da se izbegnu greške u naučnim istraživanjima i publikacijama

Bojana Obradović

Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, P. O. Box 3503,  
11120 Beograd, Srbija

*Ključne reči: greške; adsorpcija; statistika; fundamentalna znanja*

REČ UREDNIKA

Broj naučnih radova konstantno raste, ali raste i broj povučenih radova, pri čemu je taj procenat još uvek ipak mali i iznosi oko 0,04 % [1]. Glavna zabrinutost se odnosi na prevare i različite oblike naučnog nepoštenja koji su nađeni u oko 50 % povučenih radova [1]. Ostatak je povučen zbog nenamernih grešaka koje su otkrivene nakon što su radovi publikovani. Ipak, uticaj namernih i nenamernih publikovanih grešaka može biti veliki čak i kada je rad povučen. Nekoliko istraživanja je pokazalo da su povučeni radovi i dalje citirani čak i nekoliko godina posle povlačenja [2,3]. Takođe, većina tih citata je bila pozitivna (bez navođenja povlačenja citiranog rada) što upućuje na zaključak da autori nisu bili upoznati sa činjenicom da je citirani rad bio povučen [2,3]. Takav površan pregled literature, posebno ako se ne pregledaju i ne koriste primarni radovi u kojima su prvi put predstavljeni određeni rezultati ili teorije, može da bude izvor grešaka i nedoslednosti koje dalje mogu da se prenose i šire u naučnoj literaturi, i koje je onda teško iskoreniti.

Jedan od primera je u oblasti eksperimentalnih istraživanja i modelovanja kinetike i termodinamike adsorpcije zagađujućih materija iz vodenih rastvora, koja je takođe relevantna i za časopis *Hemijska industrija*. Uočeno je da je većina odbijenih radova u toj oblasti imala sličnu strukturu, eksperimentalne metode, korelacije podataka i interpretaciju rezultata sa istim propustima [4]. U detaljnom, kritičkom preglednom radu [5] uz komentar na taj rad koga su dali Kopinke i saradnici [6] predstavljena je iscrpna analiza uobičajenih grešaka, kao i tačne formulacije i originalni navodi relevantnih kinetičkih modela i adsorpcionih izoterma. Neke od najčešćih eksperimentalnih grešaka su neprecizno definisani eksperimentalni uslovi i to, posebno, promene pH vrednosti tokom eksperimenta, nedovoljan broj merenja u toku početnog vremena adsorpcije i *a priori* usvajanje određenih izmerenih vrednosti (npr. nakon 24 h) kao ravnotežnih bez provere da li je ravnoteža zaista i dostignuta [5]. Pri modelovanju kinetike adsorpcije, greške su čak i brojnije, pošto se u literaturi može naći mnogo pogrešno prepisanih i tako primenjenih jednačina [5]. Takođe, linearizovani oblici kinetičkih jednačina i izoterma često predstavljaju "lažne korelacije". Primeri su poznati i široko korišćeni kinetički model pseudo-drugog reda [7] i Lengmirova izoterma [8], koji su linearizovani u nekoliko oblika. Problem je u tome što većina tih oblika sadrži istu promenljivu sa obe strane jednačine odnosno i u zavisnoj i u nezavisnoj promenljivoj. To je na primer slučaj pri prikazivanju zavisnosti  $t/C_t$  od  $t$  u modelu pseudo-drugog reda gde je  $C_t$  koncentracija adsorbovanog kontaminanta na adsorbentu u određenom vremenskom trenutku  $t$ . Množenjem zavisno promenljive ( $1/C_t$ ) vremenom, početne tačke koje u najvećoj meri određuju kinetiku adsorpcije, grupišu se pri koordinatnom početku i time malo utiču na linearnu regresiju dok tačke određene u kasnijim vremenskim intervalima, blizu ravnoteže, nose veću težinu i približavaju se linearnosti [7]. Na taj način se linearna korelacija značajno poboljšava dajući veće korelacione koeficijente [7]. Kada se tako određeni model pseudo-drugog reda primeni za predviđanje koncentracije adsorbovanog kontaminanta i ove vrednosti se grafički prikažu i uporede sa eksperimentalnim podacima, lako se uočavaju nedostaci korelacije, posebno u početnim vremenima adsorpcije. Uz to, proračun vrednosti koeficijenta determinacije ( $R^2$ ) za model u linearizovanom i nelinearizovanom obliku kvantitativno pokazuje razliku između ova dva oblika jednačine modela [5]. Nažalost, u mnogim publikacijama prikazane su samo  $R^2$  vrednosti određene za linearizovane oblike kinetičkih modela kao jedini pokazatelji primenljivosti modela što može da dovede do pogrešnih zaključaka. Uz to, pokazano je da primena različitih linearizovanih oblika Lengmirovog modela na iste eksperimentalne podatke daje različite vrednosti parametara [8]. Usled toga, za određivanje najboljih modela kinetike adsorpcije i adsorpcionih izoterma za određene eksperimentalne podatke preporučuje se primena metoda regresione analize u nelinearizovanom obliku uz hi-kvadrat ( $\chi^2$ ) test zajedno sa vrednostima  $R^2$  [5].

Druga oblast u kojoj se često nalaze greške je statistička analiza eksperimentalnih podataka [9,10]. Pogrešno izračunate  $p$ -vrednosti (nivo značajnosti) mogu da navedu na pogrešan zaključak da su neki rezultati statistički značajni što može da ima šire posledice u prihvatanju i čak prekomernosti lažno pozitivnih rezultata u naučnoj literaturi [10,11]. Zbog toga se istraživačima preporučuje da uključe eksperte iz statistike u koncipiranje i analizu eksperimenata od samog početka, kao i da u publikacijama detaljno prikažu korišćene metode statističke analize [9].

Poseban problem predstavlja tretiranje grešaka u publikovanim radovima što je opisano kao često komplikovan i dugotrajan proces velikim delom zbog ustezanja časopisa da preduzmu određene korake, kao i usled nejasnih procedura recenziranja, korekcija i/ili povlačenja radova nakon što su publikovani [9]. Istaknuta je potreba za širim i raznovrsnijim korektivnim merama kojima će se jasno ukazati na greške u originalno publikovanim radovima i objasniti urađene korekcije [12]. Takođe, naučna zajednica treba da podstakne i nagradi korigovanje i recenziranje već publikovanih radova [9,12].

Časopis *Hemijska industrija* nastoji da objavljuje visoko-kvalitetne naučne rezultate, inovacije i unapređenja u industrijskoj praksi, tehnologijama i proizvodima, koji su bazirani na primeni verodostojnih naučnih metoda i teorijskih osnova. U nameri da obezbedimo platformu za nalaženje fundamentalnih naučnih podataka i saznanja, ponovo uvodimo rubriku "Osvežimo svoja znanja" koja će sadržavati radove po pozivu univerzitetskih profesora i eksperata u određenim oblastima. Nadamo se da će ti radovi biti od koristi mladim istraživačima, naučnicima i inženjerima kao pouzdano polazište za istraživanja i rad. Takođe, verujemo da je povremeno podsećanje na fundamentalna znanja dragoceno za pokušaj da se iskorene neki pogrešni koncepti i pristupi koji se ponavljaju u naučnoj literaturi. Časopis *Hemijska industrija* podstiče recenzije i moguće korekcije publikovanih radova koje treba slati Uređivačkom timu.

## REFERENCES

- [1] Brainard J, You J. What a massive database of retracted papers reveals about science publishing's 'death penalty'. *Science*, 2018; doi:10.1126/science.aav8384
- [2] Bolboacă SD, Buhai D-V, Aluș M, Bulboacă AE. Post retraction citations among manuscripts reporting a radiology-imaging diagnostic method. *PLoS ONE*. 2019; 14(6): e0217918.
- [3] Bucci EM. On zombie papers. *Cell Death Dis*. 2019; 10:189
- [4] Tien C. Remarks on adsorption manuscripts revised and declined: An editorial. *J Hazard Mater*. 2008; 150: 2–3.
- [5] Tran HN, You S-J, Hosseini-Bandegharaei A, Chao H-P. Mistakes and inconsistencies regarding adsorption of contaminants from aqueous solutions: A critical review. *Water Res*. 2017; 120: 88-116
- [6] Kopinke F-D, Georgi A, Goss K-U. Comment on "Mistakes and inconsistencies regarding adsorption of contaminants from aqueous solution: A critical review, published by Tran et al. [Water Research 120, 2017, 88e116]". *Water Res*. 2018; 129: 520-521
- [7] Zhang JZ. Avoiding spurious correlation in the analysis of chemical kinetic data. *Chem Commun*. 2011; 47: 6861–6863
- [8] Bolster CH, Hornberger GM. On the use of linearized Langmuir equations. *Soil Sci Soc Am J*. 2008; 71: 1796-1806
- [9] Allison DB, Brown AW, George BJ, Kaiser KA. Reproducibility: A tragedy of errors, *Nature*. 2016; 530(7588): 27–29
- [10] Nuijten MB. Preventing statistical errors in scientific journals, *Eur Sci Ed*. 2016; 42(1): 8-10
- [11] Francis G. The frequency of excess success for articles in Psychological Science. *Psychon B Rev*. 2014; 21:1180-1187
- [12] Pulverer B. When things go wrong: correcting the scientific record. *EMBO J*. 2015; 34(20): 2483-2485