

مقدمه‌ای بر آمار

در شیمی تجزیه

www.ketab.ir

(عضو هیات علمی دانشگاه بوعلی سینا)

(عضو هیات علمی دانشگاه بوعلی سینا)

(عضو هیات علمی دانشگاه بوعلی سینا)

دکتر عباس افخمی

دکتر طیه مدرکیان

دکتر مظاهر احمدی

سرشناسه	:	افخمی، عباس، ۱۳۴۰ -
عنوان و نام پدیدآور	:	مقدمه‌ای بر آمار در شیمی تجزیه / عباس افخمی، طبیبه مدرکیان، مظاهر احمدی.
مشخصات نشر	:	همدان: دانشگاه بوعلی سینا، انتشارات، ۱۳۹۹.
مشخصات ظاهری	:	۲۲۶ ص: جدول، نمودار.
شابک	:	978-600-128-323-9
وضعیت فهرست نویسی	:	فیبا
یادداشت	:	کتابنامه: ص: ۲۱۳-۲۱۴.
موضوع	:	شیمی سنجی -- راهنمای آموزشی (عالی)
موضوع	:	(Chemometrics -- Study and teaching (Higher
شناسه افزوده	:	مدرکیان، طبیبه، ۱۳۴۵ -
شناسه افزوده	:	احمدی، مظاهر
شناسه افزوده	:	دانشگاه بوعلی سینا. انتشارات
رده بندی کنگره	:	۲/۷۵QD

عنوان:	مقدمه‌ای بر آمار در شیمی تجزیه
مولفان:	دکتر عباس افخمی، دکتر طبیبه مدرکیان، دکتر مظاهر احمدی
ناشر:	انتشارات دانشگاه بوعلی سینا
مدیر مرکز نشر:	دکتر محمدجواد یداله‌ای فر
چاپخانه:	روشن
صفحه و قطع:	۲۳۶ وزیری
نوبت چاپ:	اول
تیراژ:	۱۰۰۰
قیمت:	۵۵۰۰۰۰ ریال
تاریخ انتشار:	۱۳۹۹
شابک:	۹۷۸-۶۰۰-۱۲۸-۳۲۳-۹
شماره کتاب:	۴۸۶ - ش

کلیه حقوق برای مرکز نشر دانشگاه بوعلی سینا محفوظ است

- مراکز فروش در همدان: ۱. دانشگاه بوعلی سینا، مرکز نشر دانشگاه بوعلی سینا تلفکس: ۰۸۱-۳۸۲۹۱۲۷۶
۲. خیابان شهید حسین فهمیده، روبروی پارک مردم، فروشگاه اداره انتشارات
۳. خیابان مهدیه روبروی خانه معلم- انتشارات دانشجو
- نمایندگی فروش در تهران مرکز پخش کتابیران: تهران - میدان انقلاب - خیابان کارگر جنوبی - خیابان لبافی نژاد بین فروردین و اردیبهشت پلاک ۲۳۸ تلفن: ۶۶۴۱۴۴۷۴ - ۶۶۴۱۱۱۷۳ فروشگاه کتابیران: تهران - میدان انقلاب - روبروی درب اصلی دانشگاه تهران مجتمع فرهنگی فروزنده طبقه همکف پلاک ۳۱۶ تلفن: ۴-۶۶۹۵۲۹۳۳

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل ۱: آشنایی با مفاهیم اولیه	۱
۱-۱- مقدمه‌ای بر علم آمار	۱-۱
۱-۲- کاربرد آمار در زمینه‌های مختلف علم و دانش	۳
۱-۳- شیمی تجزیه	۵
۱-۴- کاربرد آمار در شیمی	۷
۱-۵- داده	۹
۱-۶- خطا در اندازه‌گیری	۱۱
۱-۷- انواع خطای سیستماتیک یا معین	۱۴
۱-۸- تشخیص و حذف خطای سیستماتیک	۱۶
۱-۹- کاهش خطای تصادفی	۱۸
۱-۱۰- صحت و دقت	۱۹
۱-۱۱- جمعیت و نمونه	۲۳
۱-۱۲- متغیر	۲۵
۱-۱۳- ارقام بامعنی	۲۶
۱-۱۴- گرد کردن اعداد	۲۸
۱-۱۵- عملیات ریاضی با ارقام بامعنی	۲۹
سوالات و مسائل	۳۱
فصل ۲: توزیع داده‌ها	۳۳
۲-۱- مفهوم توزیع داده‌ها	۳۳
۲-۲- توزیع نرمال	۳۴
۲-۳- منحنی توزیع نرمال استاندارد	۳۷
۲-۴- توزیع لگاریتمی نرمال	۴۰

۴۲.....	۵-۲- توزیع نمونه‌گیری از میانگین.....
۴۴.....	۶-۲- تشخیص نرمال بودن توزیع.....
۴۶.....	۷-۲- توزیع دارای چولگی (کجی).....
۴۷.....	۸-۲- فاصله اطمینان و حدود اطمینان میانگین.....
۴۸.....	۸-۲-۱- فاصله اطمینان برای میانگین نمونه‌های بزرگ.....
۴۹.....	۸-۲-۲- فاصله اطمینان از میانگین برای نمونه‌های کوچک.....
۵۲.....	۹-۲- گزارش نتایج اندازه‌گیری.....
۵۳.....	۱۰-۲- انتشار خطا.....
۵۴.....	۱۰-۲-۱- انتشار خطای تصادفی.....
۵۶.....	۱۰-۲-۲- انتشار خطای سیستماتیک.....
۵۷.....	۱۱-۲- پراکندگی داده‌ها و نمودارهای کنترل.....
۵۸.....	۱۲-۲- نمودار شوارت برای میانگین.....
۶۵.....	۱۳-۲- نمودارهای کنترل گستره.....
۶۶.....	سؤالات و مسائل.....
۶۹.....	فصل ۳: آزمون‌های معنی‌داری.....
۶۹.....	۳-۱- مقدمه.....
۷۰.....	۳-۲- خطاهای نوع I و II.....
۷۱.....	۳-۳- آزمون‌های معنی‌داری یک‌سویه و دوسویه.....
۷۲.....	۳-۴- مقایسه میانگین تجربی با مقدار واقعی.....
۷۵.....	۳-۵- مقایسه دو میانگین تجربی به‌دست‌آمده از داده‌های جفتی.....
۷۸.....	۳-۶- مقایسه دو میانگین تجربی.....
۸۲.....	۳-۷- مقایسه انحراف معیارها.....
۸۵.....	۳-۸- تعیین تکلیف داده‌های پرت.....

۳-۸-۱- آزمون گرایز	۸۶
۳-۸-۲- آزمون دیکسون یا آزمون Q	۸۷
۳-۸-۳- نمونه با دو یا بیشتر داده مشکوک	۸۹
۳-۹- آزمون معنی‌داری مربع کای (خی)	۹۰
۳-۱۰- تحلیل واریانس	۹۳
۳-۱۱- تحلیل واریانس یک‌طرفه	۹۴
۳-۱۲- محاسبات ANOVA یک‌طرفه برای مقایسه چند میانگین	۹۵
۳-۱۳- تفکیک منابع تغییرات	۱۰۰
سؤالات و مسائل	۱۰۴
فصل ۴: تحلیل واریانس دوطرفه و برهم‌کنش عامل‌ها	۱۰۹
۴-۱- مقدمه	۱۰۹
۴-۲- تحلیل واریانس دوطرفه	۱۱۰
۴-۳- برهم‌کنش عامل‌ها	۱۱۶
۴-۴- ANOVA دوطرفه با تکرار	۱۲۱
سؤالات و مسائل	۱۲۸
فصل ۵: روش‌های معیارگیری در تجزیه‌دستگاهی	۱۳۱
۵-۱- مقدمه	۱۳۱
۵-۲- معیارگیری	۱۳۳
۵-۳- نمودارهای معیارگیری	۱۳۳
۵-۴- رگرسیون خطی	۱۳۵
۵-۵- اساس رگرسیون خطی	۱۳۶
۵-۶- محاسبه شیب و عرض از مبدأ y	۱۳۸
۵-۷- ارزیابی مدل خطی	۱۴۰

۱۴۳	۵-۸- عدم برآزش
۱۴۵	۵-۹- نایقینی در شیب و عرض از مبدأ
۱۴۹	۵-۱۰- خطا در تعیین غلظت از خط رگرسیون
۱۵۰	۵-۱۱- حد تشخیص و حد کمی سازی
۱۵۳	۵-۱۲- افزایش استاندارد
۱۵۸	۵-۱۳- روش استاندارد داخلی
۱۶۰	۵-۱۴- خط رگرسیون وزنی
۱۶۳	سؤالات و مسائل
۱۶۷	فصل ۶: رگرسیون خطی چندگانه
۱۶۷	۶-۱- مقدمه
۱۶۸	۶-۲- مقدمه‌ای بر جبر خطی
۱۶۹	۶-۳- بردارها
۱۷۰	۶-۳-۱- بزرگی و جهت بردار
۱۷۱	۶-۳-۲- جمع و تفریق بردارها
۱۷۲	۶-۳-۳- بردارهای غیر وابسته خطی
۱۷۳	۶-۳-۴- ضرب بردارها
۱۷۴	۶-۴- ماتریس‌ها
۱۷۵	۶-۴-۱- ماتریس سطری و ستونی
۱۷۶	۶-۴-۲- ماتریس‌های مساوی
۱۷۶	۶-۴-۳- ماتریس صفر
۱۷۶	۶-۴-۴- ماتریس مربعی
۱۷۶	۶-۴-۵- عناصر قطری و خارج از قطر
۱۷۷	۶-۴-۶- ماتریس قطری

۶-۴-۷- ماتریس همانی.....	۱۷۷
۶-۴-۸- ماتریس ترانهاده.....	۱۷۸
۶-۴-۹- ماتریس متقارن و پادمتقارن.....	۱۷۸
۶-۴-۱۰- ماتریس معکوس.....	۱۷۹
۶-۴-۱۱- ماتریس متعامد.....	۱۷۹
۶-۵- معادله رگرسیون خطی چندگانه.....	۱۸۱
۶-۶- تخمین پارامترهای مدل.....	۱۸۳
۶-۷- معادله رگرسیون به شکل ماتریس.....	۱۸۹
۶-۸- معادلات نرمال به شکل ماتریس.....	۱۹۰
سؤالات و مسائل.....	۱۹۳
فصل ۷: هم‌مقیاس کردن داده‌ها.....	۱۹۵
۷-۱- مقدمه.....	۱۹۵
۷-۲- مفهوم هم‌مقیاس کردن.....	۱۹۶
۷-۳- نرمال‌سازی.....	۱۹۷
۷-۳-۱- نرمال‌سازی با طول بردار.....	۱۹۸
۷-۳-۲- نرمال‌سازی به‌روش کمینه- بیشینه.....	۱۹۸
۷-۴- استانداردسازی یا نرمال‌سازی با استفاده از امتیاز z	۱۹۹
۷-۵- مرکزوار کردن داده‌ها.....	۲۰۰
سؤالات و مسائل.....	۲۰۲
ضمیمه‌ها.....	۲۰۳
الف) پاسخ مسائل.....	۲۰۳
ب) جدول‌ها.....	۲۰۶
جدول ب-۱ توزیع تجمعی نرمال استانداردشده.....	۲۰۶

پیشگفتار

شیمی تجزیه مدرن با استفاده از روش‌های دستگاهی موجود و توسعه یا کاربرد روش‌ها و دستگاه‌های جدید آشکارسازی، شناسایی و اندازه‌گیری ترکیب شیمیایی مواد ناشناخته را ممکن می‌سازد. این یک علم کمی است، به این معنی که نتیجه موردنظر تقریباً همیشه عددی است. مثلاً با اندازه‌گیری درمی‌یابیم که ۵۵ میکروگرم جیوه در یک نمونه آب یا ۲۰ میلی مولار گلوکز در یک نمونه خون وجود دارد.

نتایج کمی با استفاده از پاسخ به‌دست آمده از دستگاه‌ها غلظت ماده شیمیایی را در یک نمونه از یک پاسخ قابل مشاهده تعیین کنیم. همیشه به دلیل نوفه دستگاه، در طول زمان نوعی تغییر در پاسخ وجود دارد. همچنین برای دستیابی به داده‌های کمی معنی‌دار، باید پاسخ را به عنوان تابعی از غلظت آنالیز معیاربندی کنیم. در نتیجه، به دلیل وجود خطا، همواره مقدار اندازه‌گیری شده از مقدار واقعی انحراف دارد. بنابراین یکی از کاربردهای آمار در شیمی تجزیه ارائه تخمینی از مقدار خطای احتمالی و به عبارتی دیگر، میزان نایقینی مرتبط با اندازه‌گیری است. ناگفته نماند که نایقینی منحصر به روش‌های مدرن نیست و در روش‌های کلاسیک نیز وجود دارد. تحلیل داده‌ها با رگرسیون، تشخیص داده‌های پرت، دآوری در خصوص دقت و صحت روش‌ها، مقایسه مقادیر به دست آمده با همدیگر یا با مقادیر مرجع، چگونگی پایش فرآیندها، بررسی نوع اثر متغیرها بر همدیگر و مدل سازی از دیگر کاربردهای علم آمار در شیمی تجزیه می‌باشد.

بنابر این ضرورت آشنایی با علم آمار و کاربردهای آن در شیمی تجزیه بر کسی پوشیده نیست. خوشبختانه در آخرین تجدید نظر صورت گرفته در برنامه دوره کارشناسی شیمی درس کاربرد آمار در شیمی تجزیه به منظور آشنایی دانشجویان با این مبحث گنجانده شده است. به منظور رفع نیاز دانشجویان این درس و همچنین سایر علاقمندان کتاب حاضر بر اساس سرفصل مصوب وزارت علوم، تحقیقات و فناوری تنظیم و نگارش شده است.

کتاب شامل هفت فصل است. در فصل اول به تعریف واژه‌ها و مفاهیم پایه، ضرورت کاربرد آمار در شیمی تجزیه پرداخته شده است. در فصل دوم به روش‌های پرکاربرد توزیع داده‌ها شامل توزیع نرمال، توزیع لگاریتمی نرمال، توزیع دارای چولگی و همچنین پراکندگی داده‌ها و نمودارهای کنترل پرداخته شده است. آزمون‌های معنی‌داری در فصل سوم مورد بحث قرار گرفته اند. فصل چهارم تحلیل واریانس دوطرفه و برهم‌کنش متغیرها را شامل می‌شود. فصل پنجم رگرسیون خطی معمولی و انواع روش‌های معیارگیری را توضیح می‌دهد. مقدمه‌ای بر جبر خطی و معیارگیری خطی چندگانه در فصل ششم آمده است. فصل هفتم روش‌های مقیاس سازی شامل

نرمال سازی، استاندارد سازی و مرکزوار کردن را توضیح می‌دهد. در هر موضوع توضیحات با مثال و شکل همراه شده‌است تا فهم مطلب آسان‌تر شود.

امید است این نوشته بتواند در آموزش آمار به دانشجویان سهمی داشته باشد. در پایان لازم می‌دانیم از زحمات دکتر مرتضی بهرام، همکار محترممان در دانشگاه ارومیه، دکتر آرش قورچیان پژوهشگر پسادکتری در دانشگاه بوعلی سینا و خانم الهه مدرکیان همکار محترم در دانشگاه بوعلی سینا سپاسگزاری نماییم.

عباس افخمی طیبه مدرکیان مظاهر احمدی

پاییز ۱۳۹۹

www.ketab.ir