



کار با داده‌ها در علم و فن آوری جلد بیست و پنجم

طراحی آماری - کمومتریکس

آر. ای. برانز

مؤسسه شیمی، دانشگاه ایالتی کامپیناس، برزیل

آی. اس. اسکارمینو

گروه شیمی، دانشگاه ایالتی لاندیرنا، برزیل

بی. دباروس نتو

گروه شیمی بنیادی، دانشگاه فدرال پرنامبوچو، برزیل

ریچارد اسکارو

اس. روتان و بی. والچاک

زجی

زهرا طالب پور

عضو هیئت علمی دانشگاه الزهراء

غزاله عابدی

پژوهشگر پسا دکتری دانشگاه الزهراء

کار با داده‌ها در علم و فن آوری (جلد بیست و پنجم)
دانشگاه الزهراء

آر.ای. برانز (مؤسسه شیمی، دانشگاه ایالتی کامپیناس، برزیل)

آی.اس. اسکارمینو (گروه شیمی، دانشگاه ایالتی لاندیرینا، برزیل)

بی. دباروس نتو (گروه شیمی بنیادی، دانشگاه فدرال پرنامبوچو، برزیل)

ویراستاران مترجم: اس. روتان و بی. والچاک

مترجم: زهرا طالبپور (عضو هیئت علمی دانشگاه الزهراء (س))

غزاله عابدی (پژوهشگر پسادکتری دانشگاه الزهراء (س))

ناشر: دانشگاه الزهراء (س)

طراح جلد: احسان پارسا

طراح صفحات: مؤسسه فنی چکاد

کارگاه چاپ و صحافی: هنگام

نوبت چاپ: اول / تابستان ۱۳۹۹

شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه

قیمت: ۸۴۰۰۰ تومان

شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۶۱۱۴-۵۷-۸

مراکز پخش:

ونک، دانشگاه الزهراء (س) // تلفن: ۸۵۶۹۲۷۶۹-۸۸۰۴۸۹۳۳

میدان انقلاب، پاساژ ایران، طبقه اول، پلاک ۶۱، نشر دانا

تلفن: ۰۹۱۲۱۶۲۶۲۷۷-۶۶۵۷۴۷۸۱

وبگاه فروش اینترنتی: <http://research.alzahra.ac.ir>

سرشناسه: برنز، آر.ای. Burns, R. E.
عنوان و نام‌پدیدآور: طراحی آماری - کمومتریکس / آر.ای. برانز، آی.اس. اسکارمینو، بی. دباروس نتو؛ ویراستاران مشاور اس. روتان و بی. والچاک؛ ترجمه زهرا طالبپور، غزاله عابدی؛ ویراستار سپیده جواهری.
مشخصات نشر: تهران: دانشگاه الزهراء (س)، ۱۳۹۹.
فروست: کار با داده‌ها در علم و فن آوری؛ ج. ۲۵. شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۶۱۱۴-۵۷-۸. ۸۴۰۰۰ ریال. وضعیت فهرست‌نویسی: فیبا
یادداشت: عنوان اصلی: Statistical design—chemometrics, 2006 یادداشت: واژه‌نامه یادداشت: نمایه
موضوع: شیمی‌سنجی موضوع: Chemometrics موضوع: شیمی—روش‌های آماری موضوع: Chemistry—Statistical methods
موضوع: طرح‌های آزمایشی موضوع: Experimental design شناسه افزوده: اسکارمینو، آی.اس. شناسه افزوده: Scarminio, I.S.
شناسه افزوده: باروش نتو، بی. د شناسه افزوده: Barros Neto, B.de شناسه افزوده: والچاک، بی. ویراستار شناسه افزوده: Walczak, B.
شناسه افزوده: روتان، اس. ویراستار شناسه افزوده: Rutan, S.
شناسه افزوده: طالبپور، زهرا، ۱۳۵۲- مترجم شناسه افزوده: عابدی، غزاله، ۱۳۵۹- مترجم شناسه افزوده: دانشگاه الزهراء (س)
شناسه افزوده: Alzahra University رده‌بندی کنگره: QD۷۵/۴ رده‌بندی دیویی: ۵۴۳/۰۷۲ شماره کتابشناسی ملی: ۶۲۲۱۸۸۴

سودمند بودن باید اساسی‌ترین انگیزه برای هر ناشر باشد. اگر این انگیزه قوی نباشد، نویسندگان نمی‌توانند کوچک‌ترین انتظاری از مردم برای پذیرفتن آثارشان داشته باشند. ویلیام اسملی در پیش‌گفتار چاپ اول دایرةالمعارف بریتانیکا، منتشر شده در سال ۱۷۶۸ این مطلب را نوشته است.

امیدواریم این کتاب برای خواننده‌هایی مفید واقع شود که درخواست یا نیاز به انجام یک سری آزمایش‌ها را دارند. نسخه‌ی ویراسته‌ای که اکنون در دست شماست، ترجمه‌ای است از متن اصلی مان، *Como Fazer Experimentos* که به زبان پرتغالی منتشر شده و بارها ویرایش و تصحیح شده است. برای ویرایش این نسخه، همه‌ی جمله‌ها، با هدف تفهیم و توضیح بیشتر، دوباره بررسی شدند. همه‌ی خطاها تصحیح شدند، هم خطاهایی که خودمان به آن‌ها پی بردیم و هم خطاهایی که برخی خواننده‌های محترم به آن‌ها اشاره کردند.

طی بیست سال گذشته و یا بیشتر، زمان زیادی کمومتریکس - استفاده از روش‌های آماری، ریاضی و گرافیکی برای حل مسائل شیمی - را به صدها دانشجو در دانشگاه‌ها و نیز در بیش از سی صنعت مختلف تدریس کرده‌ایم. این دانشجویان به‌طور عمده از رشته‌های علوم و مهندسی بودند، اما برخی دیگر، از رشته‌هایی نظیر مدیریت، پزشکی، زیست‌شناسی، داروسازی و صنایع غذایی نیز آمده بودند. این تنوع به ما کمک کرد تا باور کنیم که روش‌هایی که اینجا مورد بحث و بررسی قرار گرفته‌اند، می‌توانند توسط هر متخصصی، با توانایی‌ها و پشتکار مختلف که نیاز به انجام برخی آزمایش‌ها دارد، آموخته و به‌کار برده شوند.

آمار معجزه نمی‌کند و به‌هیچ وجه نمی‌تواند جایگزین تخصصی در علوم فنی باشد. امیدواریم بتوانیم نشان دهیم که متخصصانی که دانش طراحی آزمایش آماری و تحلیل داده‌ها را با مهارت‌های علمی و فنی محض در حوزه‌ی کاری خودشان ترکیب می‌کنند، دارای صلاحیت بیشتری هستند و در نتیجه رقیب‌های قوی‌تری خواهند شد. ما شیمی‌دان هستیم، نه متخصص آمار، و شاید همین، کتاب ما را از کتاب‌های مشابه دیگر متمایز می‌کند. اگرچه به‌نظر می‌آید یادگیری روش‌های طراحی آزمایش و تحلیل داده‌ها بدون دانش پایه‌ای آمار امکان‌پذیر نیست، در این کتاب سعی کردیم به کمترین توضیحات اکتفا کنیم و بلافاصله به آنچه در واقع مدنظر آزمایشگر است (همان مشکلات تحقیق و توسعه) بپردازیم.

از طرف دیگر با تشخیص اینکه آمار، موضوع مورد علاقه‌ی بسیاری از دانشمندان و مهندسان نیست، فرض کردیم خواننده هیچ اطلاعاتی از آن ندارد. با این حال، خیلی زودتر از متون قدیمی توانستیم به موضوع پردازش مشکلات تجربی همراه با متغیرهای چندگانه وارد شویم.

افراد زیادی کمک کردند تا رؤیای نوشتن این کتاب به واقعیت بپیوندد. زمانی که ویرایش اول آن منتشر شد، فهرست اسامی افراد قابل استناد بسیار طولانی بود. و بسیار خرسندیم که با گذشت زمان و افزایش حس قدردانی ما نسبت به همه‌ی آن‌ها، اکنون این فهرست طولانی‌تر شده است. به هر حال، مایلیم از تمام کسانی که با ارائه‌ی کارشان به ما اجازه دادند این ویرایش شامل کاربردهای بسیار زیادی باشد، به‌طور ویژه تشکر کنیم. نام این افراد زمانی که نتایج آن‌ها مورد بررسی قرار گرفته است با شماره مرجع معین ذکر شده است. همچنین از سازمان‌های اعطاکنده‌ی کمک‌هزینه‌ی پژوهشی نظیر Fapesp، CNPq و Faep-Unicamp به‌خاطر تأمین بخشی از مخارج، قدردانی می‌کنیم.

به‌طور قطع، فقط ما مسئول کاستی‌هایی هستیم که قادر به رفع آن‌ها نبوده‌ایم. امیدواریم خوانندگان نیز ما را در مسیر رسیدن به مطلوب‌ترین نقطه یاری رسانند. آدرس‌های پست الکترونیکی ما در ذیل آمده است. علاقه‌مند به دریافت پیشنهادهای سازنده‌ی شما هستیم.

بی. دباروس نتو

گروه شیمی پایه دانشگاه فدرال پرنامبوچو

نشانی پست الکترونیکی: bbn@ufpe.br

آی. اس. اسکارمینو

گروه شیمی دانشگاه ایالتی لاندیرنا

نشانی پست الکترونیکی: ieda@qui.uel.br

آر. ای. برانز

مؤسسه شیمی دانشگاه ایالتی کامپیناس

نشانی پست الکترونیکی: bruns@iqm.unicamp.br

پیشگفتار مترجم

کتابی که در پیش‌رو دارید برگردان فارسی Experimental Design-Chemometrics نوشته‌ی برانز و همکاران و از مجموعه کتب انتشارات الزویر در مورد داده‌پردازی در علم و تکنولوژی است که به ارائه‌ی تخصصی و کاربردی موضوع برای افرادی می‌پردازد که قصد دارند با صرف کمترین وقت و هزینه، بیشترین اطلاعات را از سیستم تحت کنترل خود دریافت کنند. مثال‌های متنوع و متعددی که در کتاب آمده است، امکان استفاده از موضوعات مطرح‌شده را در زمینه‌های مختلف از شیمی تا بیوتکنولوژی و از آزمایشگاه تا صنعت فراهم می‌کند. مطالب پایه‌ای عنوان‌شده در کتاب نیز بسیار جامع است و در میان کتاب‌های مشابه، یکی از کامل‌ترین مجموعه‌ها در مورد روش‌های مختلف طراحی آزمایش است. با اینکه سبک متفاوت نگارش کتاب هنوز بین کتاب‌های علمی/فنی رایج نیست، کتاب از انسجام و پیوستگی چشم‌گیری در طول بحث برخوردار است. از این کتاب می‌توان برای تدریس روش‌های طراحی آزمایش در رشته‌های گوناگون علوم پایه و مهندسی در مقاطع تحصیلات تکمیلی استفاده کرد. همچنین مطالب کتاب برای بهبود فرایندها در اندازه‌ی نیمه‌صنعتی و صنعتی بسیار مفید است و می‌تواند در آزمایشگاه‌های تحقیق و توسعه‌ی صنایع مختلف به کار رود. در برگردان فارسی کتاب سعی شده تا بیشترین وفاداری به متن اصلی حفظ شود، ولی سلاست و روانی خواندن مطالب نیز مدنظر بوده است. در اینجا لازم است از همکاران محترم خانم دکتر ناهید مشکوری، خانم شقایق باژدان‌زاده و خانم فریده حقیقی که در ترجمه‌ی این کتاب به اینجانب مشاوره‌های بسیار مفیدی دادند، تشکر و سپاسگزاری نمایم. امیدوارم از نظرات استادان گرامی، همکاران ارجمند و دانشجویان عزیز برخوردار باشم تا در چاپ‌های بعد کاستی‌ها برطرف شود.

زهرا طالب‌پور

دانشیار شیمی تجزیه گروه شیمی، دانشگاه الزهرا (س)

نشانی پست الکترونیکی: ztalebpour@alzahra.ac.ir

فهرست

۱۱.....	فصل اول: چگونه آمار می‌تواند کمک کند؟.....
۱۳.....	۱-۱ آمار می‌تواند کمک کند.....
۱۴.....	۲-۱ مدل‌های تجربی.....
۱۶.....	۳-۱ طراحی آزمایش و بهینه‌سازی.....
۱۹.....	فصل دوم: وقتی وضعیت نرمال است.....
۲۱.....	۱-۲ خطاها.....
۲۱.....	۱-۱-۲ انواع خطا.....
۲۵.....	۲-۲ جامعه‌های آماری، نمونه‌ها و توزیع‌ها.....
۲۸.....	۱-۲-۲ ویژگی‌های نمونه چگونه شرح داده می‌شود؟.....
۳۵.....	۳-۲ توزیع نرمال.....
۳۶.....	۱-۳-۲ محاسبه‌ی احتمال وقوع.....
۴۱.....	۲-۳-۲ استفاده از دنباله‌های توزیع نرمال استاندارد.....
۴۴.....	۳-۳-۲ چرا توزیع نرمال این قدر مهم است؟.....
۴۶.....	۴-۳-۲ محاسبه‌ی فاصله‌های اطمینان برای میانگین.....
۴۷.....	۵-۳-۲ تفسیر فاصله‌های اطمینان.....
۴۹.....	۴-۲ کوواریانس و همبستگی.....
۵۴.....	۵-۲ ترکیب‌های خطی متغیرهای تصادفی.....
۵۸.....	۶-۲ نمونه‌برداری تصادفی در جامعه‌های نرمال.....
۶۸.....	۷-۲ به‌کارگیری توزیع نرمال.....
۶۸.....	۱-۷-۲ مقایسه با یک مقدار مرجع.....
۷۳.....	۲-۷-۲ تعیین اندازه‌ی نمونه.....
۷۵.....	۳-۷-۲ کنترل آماری فرایندها.....
۷۹.....	۴-۷-۲ مقایسه‌ی دو رفتار.....
۸۵.....	الف کاربردها.....
۸۵.....	الف-۱ از خانه تا محل کار.....
۹۳.....	الف-۲ هم‌ارزی زیستی داروهای تجاری و ژنریک.....
۹۵.....	الف-۳ بازهم لوبیاهای بیشتر؟.....
۹۷.....	الف-۴ تولید خزه‌های دریایی.....
۹۹.....	فصل سوم: تغییر همه چیز در یک زمان.....
۱۰۱.....	۱-۳ طراحی فاکتوریال ۲ ^۲
۱۰۳.....	۱-۱-۳ محاسبه‌ی اثرها.....
۱۰۶.....	۲-۱-۳ تفسیر هندسی اثرها.....
۱۰۷.....	۳-۱-۳ تخمین خطای یک اثر.....
۱۱۰.....	۴-۱-۳ تفسیر نتایج.....
۱۱۲.....	۵-۱-۳ یک الگوریتم برای محاسبه‌ی اثرها.....
۱۱۶.....	۶-۱-۳ مدل آماری.....
۱۲۱.....	۲-۳ طراحی فاکتوریال ۲ ^۳

- ۱۲۳..... ۱-۲-۳ محاسبه‌ی اثرها.....
- ۱۲۴..... ۲-۲-۳ تخمین خطای یک اثر.....
- ۱۲۵..... ۳-۲-۳ تفسیر نتایج.....
- ۱۲۸..... ۴-۲-۳ مدل آماری.....
- ۱۲۹..... ۳-۳ طراحی فاکتوریال 2^4
- ۱۳۰..... ۱-۳-۳ محاسبه‌ی اثرها.....
- ۱۳۲..... ۲-۳-۳ تخمین خطای یک اثر.....
- ۱۳۳..... ۴-۳ نمودارهای احتمال نرمال.....
- ۱۳۹..... ۵-۳ تکامل اتفاق افتاده با استفاده از طراحی دوسطحی.....
- ۱۴۲..... ۶-۳ طراحی های فاکتوریال بلوک شده.....
- ۱۴۵..... ۱۳الف کاربردها.....
- ۱۴۵..... ۱۳الف-۱ هیدرولیز رزین.....
- ۱۴۷..... ۱۳الف-۲ ولتامتری چرخشی برای آبی متیلن.....
- ۱۴۹..... ۱۳الف-۳ زمان بازداری در کروماتوگرافی مایع.....
- ۱۵۱..... ۱۳الف-۴ جداسازی گاز به روش جذب سطحی.....
- ۱۵۳..... ۱۳الف-۵ بهبود توابع موج.....
- ۱۵۵..... ۱۳الف-۶ کارایی الکترودهای Ti/TiO_2
- ۱۵۸..... ۱۳الف-۷ کنترل کف شوینده.....
- ۱۶۱..... ۱۳الف-۸ اصلاح یک شوینده.....
- ۱۶۳..... ۱۳الف-۹ یک طراحی بلوک شده برای تولید محافظ گوش.....
- ۱۶۷..... **فصل چهارم: وقتی چندین متغیر وجود دارد.....**
- ۱۶۸..... ۱-۴ طراحی های فاکتوریال کسری یک دوم.....
- ۱۷۳..... ۱-۱-۴ چگونه یک طراحی کسری یک دوم بسازیم؟.....
- ۱۷۵..... ۲-۱-۴ تولیدکننده‌ها در طراحی فاکتوریال کسری.....
- ۱۷۷..... ۲-۴ مفهوم درجه‌ی تفکیک.....
- ۱۷۷..... ۱-۲-۴ طراحی فاکتوریال کسری با درجه‌ی تفکیک IV.....
- ۱۷۹..... ۲-۲-۴ طراحی فاکتوریال کسری با درجه تفکیک V.....
- ۱۸۱..... ۳-۲-۴ فاکتورهای بی اثر و فاکتوریال‌های نهفته در کسرها.....
- ۱۸۵..... ۴-۲-۴ بیشترین درجه‌ی تفکیک طراحی فاکتوریال کسری یک دوم.....
- ۱۸۵..... ۳-۴ غربالگری متغیرها.....
- ۱۸۵..... ۱-۳-۴ طراحی های فاکتوریال کسری با درجه‌ی تفکیک III.....
- ۱۸۸..... ۲-۳-۴ طراحی های اشباع شده.....
- ۱۹۶..... ۳-۳-۴ چگونه طراحی فاکتوریال کسری با درجه‌ی تفکیک III ساخته می‌شود.....
- ۱۹۶..... ۴-۳-۴ چگونه یک طراحی فاکتوریال کسری 2^{IV} از یک طراحی فاکتوریال کسری 2^{VII} ساخته می‌شود.....
- ۱۹۸..... ۵-۳-۴ طراحی های پلاکت-برمن اشباع شده.....
- ۲۰۰..... ۶-۳-۴ روش های ناگوچی برای مهندسی کیفیت.....
- ۲۰۴..... ۱۴الف کاربردها.....
- ۲۰۴..... ۱۳الف-۱ جذب سطحی بر روی سطح سیلیکای دارای گروه عاملی آلی.....
- ۲۰۶..... ۱۴الف-۲ وزن سنجی گرمایی کلسیم اگزالات.....
- ۲۰۸..... ۱۴الف-۳ آنالیز گازها به روش کروماتوگرافی.....

۲۱۰	۴-الف-۴ پاسخ کاتالیزوری منگنز-پورفیرین.....
۲۱۱	۴-الف-۵ خروج اکسید در صنعت استیل.....
۲۱۴	۴-الف-۶ تولید ویولاسین با استفاده از باکتری.....
۲۱۶	۴-الف-۷ عمل آوردن رزین پلی استر.....
۲۱۹	۴-الف-۸ طراحی غربالگری برای تولید محافظ گوش.....
۲۲۱	۴-الف-۹ طراحی های پلاکت-برمن برای غربالگری فاکتورها.....
۲۲۵	فصل پنجم: ساخت مدل های تجربی.....
۲۲۶	۵-۱ یک مدل برای $y = f(X)$
۲۳۶	۵-۲ آنالیز واریانس.....
۲۴۰	۵-۳ فاصله های اطمینان.....
۲۴۵	۵-۴ معنی دار بودن آماری مدل رگرسیون.....
۲۴۶	۵-۵ یک مدل جدید برای $y = f(X)$
۲۵۰	۵-۶ نقص انطباق مدل و خطای خالص.....
۲۵۱	۵-۷ همبستگی و رگرسیون.....
۲۶۰	۵-الف کاربردها.....
۲۶۰	۵-الف-۱ spring of air.....
۲۶۴	۵-الف-۲ کالیبراسیون کروماتوگرافی.....
۲۶۷	۵-الف-۳ کالیبراسیون چندمتغیره.....
۲۶۸	۵-الف-۴ فاصله های انرژی ممنوع در نیمه هادی ها.....
۲۶۹	۵-الف-۵ اندازه گیری گرمای تبخیر.....
۲۷۱	۵-الف-۶ یک کالیبراسیون دیگر.....
۲۷۵	فصل ششم: یافتن سطح پاسخ.....
۲۷۵	۶-۱ روش شناسی سطح پاسخ.....
۲۷۶	۶-۱-۱ مدل سازی اولیه.....
۲۸۰	۶-۱-۲ به دست آوردن مسیر بزرگ ترین شیب صعودی.....
۲۸۵	۶-۱-۳ یافتن نقطه ی بهینه.....
۲۸۹	۶-۲ اهمیت طراحی اولیه.....
۲۹۰	۶-۳ یک آزمایش با سه فاکتور و دو پاسخ.....
۲۹۱	۶-۴ حل مسئله هایی با متغیرهای بسیار.....
۳۰۴	۶-۵ طراحی های مختلط مرکزی (CCD).....
۳۰۸	۶-۶ طراحی های باکس-بنکن.....
۳۱۳	۶-۷ طراحی های دوهرلرت.....
۳۱۹	۶-۸ طراحی های بهینه.....
۳۲۲	۶-الف کاربردها.....
۳۲۲	۶-الف-۱ پاسخ کاتالیزوری Mo(VI).....
۳۲۵	۶-الف-۲ آب زدایی اسمزی آناناس.....
۳۲۸	۶-الف-۳ کاهش سطح کلسترول.....
۳۳۱	۶-الف-۴ تولید لاکاز.....
۳۳۲	۶-الف-۵ افزایش اکسیژن در هوا.....

۳۳۷	الف-۶ مطالعه‌ی بهینه‌سازی محافظ گوش- فاز نتیجه‌گیری.....
۳۴۱	الف-۷ تخریب‌پذیری نوری حشره‌کش‌ها.....
۳۴۷	فصل هفتم: مدل‌سازی مخلوط
۳۵۰	۱-۷ مخلوط‌های دو جزئی.....
۳۵۵	۲-۷ مخلوط‌های سه جزئی.....
۳۵۹	۳-۷ مثالی برای مخلوط سه جزئی.....
۳۶۲	۴-۷ مدل‌های مکعبی برای مخلوط‌های سه جزئی.....
۳۶۵	۵-۷ ارزیابی مدل.....
۳۶۸	۶-۷ اجزاء غیرواقعی.....
۳۷۰	۷-۷ طراحی‌های مخلوط دیگر.....
۳۷۴	۸-۷ مخلوطی با بیشتر از سه جزء.....
۳۷۶	الف کاربردها.....
۳۷۶	الف-۱ اثر حلال بر تشکیل کمپلکس یون آهن (III).....
۳۷۹	الف-۲ قدرت کشش مواد پلیمری.....
۳۸۲	الف-۳ تعیین خصلت کاتالیزوری Cr(VI).....
۳۸۵	الف-۴ هدایت مخلوط پلیمر.....
۳۸۷	الف-۵ اثبات دسر پودینگ‌بودن، به خوردن آن نیست.....
۳۸۹	الف-۶ طراحی مواد یک سرامیک جدید.....
۳۹۴	الف-۷ بهبود انتخاب‌پذیری کروماتوگرافی مایع با کارایی بالا.....
۴۰۱	فصل هشتم: بهینه‌سازی سیمپلکس
۴۰۳	۱-۸ سیمپلکس پایه.....
۴۰۸	۲-۸ سیمپلکس اصلاح‌شده.....
۴۱۸	۳-۸ سیمپلکس فوق اصلاح‌شده.....
۴۲۳	مراجع
۴۲۳	مراجع ذکر نشده.....
۴۲۳	مراجع.....
۴۲۹	پاسخ تمرین‌ها
۴۲۹	فصل دوم.....
۴۳۱	فصل سوم.....
۴۳۶	فصل چهارم.....
۴۳۸	فصل پنجم.....
۴۴۱	فصل ششم.....
۴۴۳	فصل هفتم.....
۴۴۵	فصل هشتم.....
۴۴۷	نمایه‌ی موضوعی
۴۵۵	واژه‌نامه فارسی به انگلیسی.....
۴۶۱	واژه‌نامه انگلیسی به فارسی.....