

## به نام خدا

### "فرم طرح درس"

رشته: شیمی	گرایش: تجزیه	مقطع: دکتری	دانشکده: فیزیک و شیمی
نام درس: کاربرد روش‌های آماری در شیمی تجزیه	تعداد واحد نظری: ۳	تعداد واحد عملی: -	عنوان درس پیشنهادی: -
نام مدرس: زهرا طالب پور	تمام وقت <input checked="" type="checkbox"/> نیمه وقت <input type="checkbox"/> مدعو <input type="checkbox"/>	نوع واحد: اصلی	محل برگزاری: کلاس <input checked="" type="checkbox"/> آزمایشگاه <input type="checkbox"/>

هدف کلی درس: آشنایی با کاربرد روش‌های آماری در شیمی تجزیه

#### برنامه‌ی درسی

هفته	رئوس مطالب	فعالیت کلاسی
اول	جایگاه و اهمیت آمار در شیمی تجزیه، کنترل کیفیت و صنعت، توضیح طرح درس، ارزیابی سطح علمی دانشجویان در این موضوع، معرفی مراجع و بررسی سرفصل‌های ذکر شده در هر کدام، ارتباط آمار و طراحی آزمایش، ارتباط آمار و کمومتریکیس	
دوم	راه‌های مختلف نمایش گرافیکی داده‌ها (دات‌پلات، بافت‌نما، نمودارهای تجمعی، باکس پلات، انواع توزیع‌ها (پویسون، نرمال، لوگ نرمال، مثلثی و ...))، تئوری حد مرکزی، توزیع نرمال، پارامترهای مرتبط مانند اسکینس، کورتوسیس و نحوه‌ی بررسی نرمال‌بودن توزیع‌ها (منحنی احتمال نرمال، کای دو و کولموگرام)، توزیع‌های برگرفته از توزیع نرمال، آمار توصیفی، سطح، حدود و فواصل اطمینان	استفاده از نرم‌افزار برای رسم نمودارهای ذکر شده، آزمون‌های تکمیلی برای بررسی نرمال-بودن توزیع داده‌ها
سوم	مقایسه‌ی داده‌ها با استفاده از توزیع‌ها و آزمون‌های مختلف، اصل صفر، p-value، خطای نوع I و II، تفکیک داده‌های جفت شده و جفت نشده، مقایسه‌ی چند سری، توضیح حدتشخیص از دیدگاه توزیع نرمال	انتشار خطا در نتایج محاسباتی، تعاریف مختلف حد تشخیص در ICH، FDA، ... و راه‌های مختلف به دست آوردن آن
چهارم	روش‌های کنترل کیفیت، پارامترهای قابل محاسبه، روش شیهارت، آر چارت، کیوسام، متوسط متحرک، EWAM، j-Chart، قانون‌های استفاده از منحنی‌های کنترل، کاربرد آن در استانداردسازی و کنترل کیفیت محصولات	استفاده از نرم‌افزار برای رسم انواع نمودارهای کنترلی، آزمون‌های مختلف بررسی داده‌های مشکوک
پنجم	آزمون ANOVA یک جهته، دو جهته، همراه با برهمکنش، نحوه محاسبه‌ی میزان اثرات و بررسی معنی‌دار بودن آن‌ها، مدل اتفاقی و اثر ثابت، تفاوت معنی‌دار حداقل، ANOVA نستد و بیان کاربرد آن در مقایسه‌ی داده‌ها و نمونه برداری	استفاده از نرم‌افزار برای انجام آزمون‌های ANOVA، جایگاه آمار در نمونه‌برداری
ششم	رگرسیون و همبستگی، مراحل انجام رگرسیون، ارزیابی مدل، آنالیز باقیمانده‌ها، ضریب همبستگی، استفاده از آزمون ANOVA برای بررسی معنی‌دار بودن رگرسیون و بی معنی بودن نقص مدل در سطح اطمینان مشخص	مدل‌سازی خطی و غیر خطی یک سری داده و ارزیابی نتایج آن با روش‌های مختلف

هفته	رئوس مطالب	فعالیت کلاسی
هفتم	ادامه‌ی آزمون ANOVA، روش حداقل مربعات وزن داده شده، تخمین خطای متغیر وابسته و متغیر مستقل مدل، ارزیابی مدل‌های خطی و درجه‌ی دو، نحوه‌ی محاسبه‌ی خطای ضرایب مدل	
هشتم	کالیبراسیون، مقایسه‌ی معادله‌های کالیبراسیون، داده‌های پرت در کالیبراسیون، کالیبراسیون کلاسیک و معکوس، کالیبراسیون چند متغیره	طراحی نقاط آزمایشی در منحنی کالیبراسیون، مراحل ارزیابی روش در ICH های مختلف و تفاوت آن‌ها
نهم	طراحی آزمایش، آشنایی با اصول اولیه‌ی طراحی آزمایش، تعاریف مرسوم در روش‌های طراحی آزمایش، بلوک‌بندی و اتفاقی‌سازی آزمایش‌ها، منحنی‌های استخوان ماهی	
دهم	غربالگری با طراحی فاکتوریل کامل، نحوه‌ی محاسبه اثرات و بررسی معنی‌دار بودن آن‌ها، استفاده از نمودار احتمال نرمال	انجام یک مثال از غربالگری به روش فاکتوریل کامل
یازدهم	غربالگری با طراحی فاکتوریل جزئی، معرفی ژنراتورها و الیاس، نحوه انتخاب آزمایش‌ها از آزمایش‌های طراحی فاکتوریل کامل، موارد کاربرد طراحی فاکتوریل جزئی، چگونگی تبدیل نتایج یک طراحی فاکتوریل جزئی به یک طراحی فاکتوریل کامل، طراحی‌های اشباع شده	طراحی پلاکت برمن
دوازدهم	روش‌های طراحی آزمایش برای بهینه‌سازی (طراحی فاکتوریل سه سطحی، انواع طراحی مختلط مرکزی، دوهرت و ...)، بهینه‌سازی شرایط آزمایش به روش بررسی سطح پاسخ، تابع مطلوبیت	
سیزدهم	ادامه‌ی بهینه‌سازی به روش سطح پاسخ، بهینه‌سازی شرایط آزمایش به روش سیمپلکس، بهینه‌سازی به روش یکی در یک زمان همزمان و پی در پی، موارد استفاده از هر یک از روش‌های بهینه	طراحی باکس بنکن
چهاردهم	آزمون‌های غیر پارامتری، مقایسه آمار پارامتری و غیر پارامتری، آزمون علامت، آنالیز واریانس با رنگ، رگرسیون غیر پارامتری، آشنایی اولیه با آنالیز فاکتوری، روش کاهش بعد داده و تحلیل مولفه‌ی اصلی (PCA)	بررسی یک مقاله در مورد استفاده از PCA
پانزدهم	نحوه‌ی تضمین کیفیت داده‌ها و در نتیجه محصولات در صنعت با استفاده از آمار، محاسبه عدم قطعیت یک داده‌ی محاسباتی با استفاده از نمودار استخوان ماهی و انتشار خطا و استفاده از آن در استاندارد سازی های ملی و بین‌المللی	مثال برای محاسبه عدم قطعیت یک آزمایش در GC و یک آزمایش در HPLC با روش استخوان ماهی
شانزدهم	به کارگیری نرم‌افزارهای آماری مانند اکسل، مینی تب، دیزاین اکسپرت و ...	انجام آزمون‌های معرفی شده با استفاده از این نرم‌افزارهای پیشنهادی

### نحوه ارزشیابی دانشجویان در طی دوره:

حضور مستمر و فعال در کلاس، نمره متوسط از انجام فعالیت‌های هفتگی، نمره پایان ترم، نمره تحقیق کلاسی (که آخر ترم در ساعات اضافی ارائه می‌شود) شامل کیفیت بحث علمی جمع‌آوری شده، مدیریت داده‌ها و آشنایی با نرم‌افزارهای به کار برده شده

نحوه تخصیص نمره به فعالیت‌های دانشجویی در طی دوره:

۱۴ نمره پایان ترم، ۳ نمره پاسخ‌گویی به سوالات هفتگی و مشارکت در فعالیت‌های جانبی، ۳ نمره تحقیق‌انتهای ترم و یادگیری نرم‌افزارهای معرفی شده

#### منابع مطالعاتی:

- 1- Mssart, Bernart, "Chemometrics: a textbook, Part A", 1997.
- 2- Barwick, Duguid Farrant, "Practical Statistics for the Analytical Scientist, A Bench Guide", 2th Edition, Ellison, 2009.
- 3- J.N. Miller, J.C. Miller, "Statistics and Chemometrics, for Analytical Chemistry", 6<sup>th</sup> Edition, Person Education Limited, 2010.
- 4- A.L. Pomerantsev, "*Chemometrics, In Excel*", John Wiley & Sons, 2014.
- 5- D.C. Montgomery, "Design and Analysis of Experiments", 8th Edition, John Wiely & Sons, 2013.
- 6- D.C. Montgomery, "Introduction to Statistical Quality Control", 6<sup>th</sup> Edition, John Wiely & Sons, 2009.
- 7- P.G. Mathews, "Design of Experiments with MINITAB", ASQ Quality Press, 2005.