



دانشگاه گیلان
۱۳۵۳_۱۹۷۴

ریاضیات در شیمی

روش‌های عددی در شیمی فیزیک و شیمی تجزیه

تألیف:

پررنا بانسال

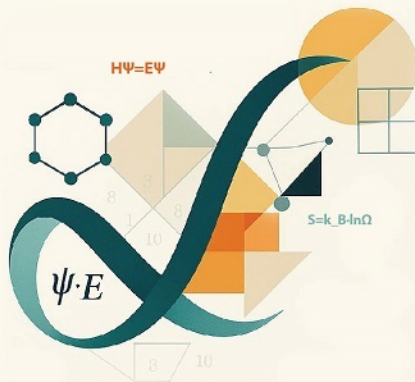
ترجمه:

دکتر محمد محمدپور مقدم

استادیار دانشکده شیمی دانشگاه گیلان

چاپ اول

مرکز نشر دانشگاه گیلان



تألیف: پررنا بانسال

ترجمه: دکتر محمد محمدپور مقدم



Maths in Chemistry

Numerical Methods for Physical and Analytical Chemistry

By:

Prerna Bansal

Translated by:

Mohammad Mohammad pour Moghadam, Ph. D

University of Guilan Press

در عصر شتابان پیشرفت علم و فناوری، ریاضیات به عنوان زبان مشترک علوم بیش از هر زمان اهمیت یافته و شیمی نیز از این قاعده مستثنی نیست. کتاب حاضر با هدف پر کردن خلأ منابع فارسی در زمینه کاربرد روش‌های عددی در شیمی و به ویژه پاسخ به نیاز جدید برای درس «ریاضی در شیمی» ترجمه شده است. این اثر دانشجویان شیمی را با مفاهیم مقدماتی و کاربردی روش‌های عددی (مانند انتگرال گیری، مشتق گیری، یافتن ریشه‌ها، برازش منحنی و روش‌های آماری) در حل مسائل شیمی فیزیک و شیمی تجزیه آشنا می‌سازد. مطالعه این کتاب نه تنها به درک عمیق‌تر مفاهیم شیمی و ارتقای دیدگاه علمی دانشجویان کمک می‌کند، بلکه آن‌ها را برای مواجهه عملی با مسائل پیچیده آماده کرده و پایه‌ای برای درس «کاربرد کامپیوتر در شیمی» فراهم می‌آورد.



ISBN 978-600-153-331-0



ریاضیات در شیمی

روش‌های عددی در شیمی فیزیک و شیمی تجزیه

تألیف:

پررنا بانسال

ترجمه:

دکتر محمد محمدپور مقدم

استادیار دانشکده شیمی دانشگاه گیلان

مرکز نشر دانشگاه گیلان

۱۴۰۳



دانشگاه گیلان
۱۳۵۳-۱۹۷۴

شابک: ۰-۳۳۱-۱۵۳-۶۰۰-۹۷۸

سرشناسه	: بانسال، پررنا
عنوان و نام پدیدآور	: ریاضیات در شیمی: روش‌های عددی در شیمی فیزیک و شیمی تجزیه/ تالیف پرنا بانسال؛ ترجمه محمد محمدپورمقدم؛ ویراستار علمی و ادبی حسین امینی‌خواه.
مشخصات نشر	: رشت: دانشگاه گیلان، انتشارات، ۱۴۰۳.
مشخصات ظاهری	: ۲۷۵ص: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: 978-600-153-331-0
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: عنوان اصلی: Maths in chemistry : numerical methods chemistry, [2020].for physical and analytical
عنوان دیگر	: روش‌های عددی در شیمی فیزیک و شیمی تجزیه.
موضوع	: شیمی -- ریاضیات Chemistry -- Mathematics شیمی فیزیک Chemistry, Physical and theoretical شیمی تجزیه Chemistry, Analytic
شناسه افزوده	: محمدپورمقدم، محمد، ۱۳۵۹-، مترجم
شناسه افزوده	: امینی‌خواه، حسین، ۱۳۵۷-، ویراستار
شناسه افزوده	: دانشگاه گیلان. انتشارات
رده بندی کنگره	: QD۳۹۳/۳: ۹
رده بندی دیویی	: ۵۴۰/۱۵۱
شماره کتابشناسی ملی	: ۱۰۰۰۰۶۹۶

مرکز نشر دانشگاه گیلان

عنوان کتاب	: ریاضیات در شیمی: روش‌های عددی در شیمی فیزیک و شیمی تجزیه
مؤلف	: پررنا بانسال
مترجم	: دکتر محمد محمدپورمقدم
ویراستار علمی و ادبی	: دکتر حسین امینی‌خواه
نوبت چاپ	: اول، ۱۴۰۳
ناشر	: مرکز نشر دانشگاه گیلان
شمارگان	: ۱۰۰۰ جلد

* هرگونه چاپ و تکثیر صرفاً در اختیار مرکز نشر دانشگاه گیلان است.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
تقدیر و تشکر مؤلف	چ
مقدمه مترجم	خ
فصل اول: واحدها و اندازه گیری ها	
۱-۱- مقدمه	۲
۱-۲- عملیات حسابی پایه	۲
۱-۳- سلسله مراتب عملیات حسابی	۳
۱-۴- دسته بندی دستگاه های واحد	۵
۱-۴-۱- دستگاه متریک واحدها	۵
۱-۴-۲- دسته بندی دستگاه متریک واحدها	۶
۱-۵- تعریف واحدهای پایه	۷
۱-۶- تبدیل بین واحدها	۱۲
۱-۷- ارقام بامعنی	۱۴
۱-۸- قواعد انجام عملیات حسابی	۱۵
۱-۸-۱- جمع و تفریق	۱۵
۱-۸-۲- ضرب و تقسیم	۱۶
۱-۸-۳- عملیات ریاضی ترکیبی	۱۸
۱-۹- گرد کردن ارقام بامعنی	۱۹
۱-۱۰- مسئله هایی برای تمرین	۲۱
فصل دوم: عدم قطعیت ها و خطاها	
۲-۱- مقدمه	۲۶
۲-۲- عدم قطعیت مطلق و نسبی	۳۰
۲-۳- انتشار عدم قطعیت	۳۱
۲-۴- عدم قطعیت های گرد کردن	۴۰
۲-۵- دسته بندی خطاها	۴۱
۲-۶- مسئله هایی برای تمرین	۴۳
فصل سوم: برخی توابع ریاضی	
۳-۱- مقدمه	۴۶

۴۶	۳-۲- طبقه‌بندی توابع.....
۴۶	۳-۲-۱- تابع خطی.....
۴۷	۳-۲-۲- تابع نمایی.....
۴۹	۳-۲-۳- تابع لگاریتمی.....
۵۲	۳-۲-۴- چندجمله‌ای‌ها.....
۵۳	۳-۲-۵- تابع توان.....
۵۴	۳-۲-۶- دایره.....
۵۵	۳-۲-۷- عدد گویا.....
۵۶	۳-۲-۸- کسرهای جزئی.....
۵۷	۳-۲-۹- توابع مثلثاتی.....
۶۰	۳-۲-۹-۱- توابع مثلثاتی وارون (معکوس).....
۶۰	۳-۲-۹-۲- توابع مثلثاتی هذلولوی.....
۶۱	۳-۲-۱۰- سری تیلور.....
۶۲	۳-۲-۱۰-۱- سری مک‌لورن.....
۶۲	۳-۲-۱۱- دستگاه‌های مختصات.....
۶۵	۳-۲-۱۲- دستگاه اعداد.....
۶۹	۳-۳- مسئله‌هایی برای تمرین.....

فصل چهارم: آمار توصیفی

۷۴	۴-۱- مقدمه.....
۷۵	۴-۲- میانگین.....
۷۶	۴-۲-۱- میانگین حسابی.....
۷۷	۴-۲-۲- میانگین وزنی.....
۷۷	۴-۲-۳- میانگین هندسی.....
۷۷	۴-۲-۴- میانگین موزون.....
۷۸	۴-۳- میانه.....
۷۹	۴-۴- مَد.....
۸۰	۴-۵- انحراف معیار.....
۸۰	۴-۶- واریانس.....
۸۱	۴-۷- ضریب تغییرات.....

۸۳	۴-۸- تحلیل داده‌ها.....
۸۴	۴-۸-۱- آزمون Q
۸۶	۴-۸-۲- حد اطمینان.....
۸۷	۴-۸-۳- آزمون t
۹۱	۴-۸-۴- آزمون F
۹۴	۴-۹- توزیع خطا.....
۹۴	۴-۹-۱- توزیع گاوسی.....
۹۵	۴-۹-۲- توزیع دو جمله‌ای.....
۹۶	۴-۹-۳- توزیع پواسون.....
۹۷	۴-۱۰- ابزارهای آماری با استفاده از نرم‌افزارهای صفحات گسترده.....
۱۰۱	۴-۱۱- مسئله‌هایی برای تمرین.....

فصل پنجم: برازش منحنی عددی

۱۰۴	۵-۱- مقدمه.....
۱۰۴	۵-۲- همبستگی.....
۱۰۵	۵-۲-۱- ضریب همبستگی پیرسون.....
۱۰۶	۵-۲-۲- ضریب همبستگی رتبه‌ای اسپیرمن.....
۱۰۶	۵-۳- رگرسیون.....
۱۰۸	۵-۴- درون‌یابی در مقابل برازش منحنی.....
۱۰۸	۵-۵- برازش منحنی حداقل مربعات.....
۱۱۰	۵-۵-۱- برازش خطی.....
۱۲۰	۵-۵-۲- برازش خطی چند متغیری.....
۱۲۳	۵-۵-۳- برازش چندجمله‌ای.....
۱۲۸	۵-۶- رگرسیون و همبستگی در اکسل.....
۱۳۳	۵-۷- مسئله‌هایی برای تمرین.....

فصل ششم: انتگرال گیری عددی

۱۳۶	۶-۱- مقدمه.....
۱۳۷	۶-۲- فرمول نیوتن- کاتس.....
۱۳۸	۶-۲-۱- مجموع ریمان.....
۱۴۱	۶-۲-۲- قاعده ذوزنقه‌ای.....

۱۴۸.....	۶-۲-۱- خطای قاعده دوزنقه‌ای
۱۴۸.....	۶-۲-۳- قاعده ۱۳ سیمپسون
۱۵۱.....	۶-۲-۳-۱- قاعده سیمپسون انتگرال مرکب
۱۵۳.....	۶-۲-۴- قاعده ۳۸ سیمپسون
۱۵۴.....	۶-۲-۵- قاعده بول
۱۶۰.....	۶-۳- مسئله‌هایی برای تمرین

فصل هفتم: معادلات دیفرانسیل

۱۶۴.....	۷-۱- مقدمه
۱۶۵.....	۷-۲- روش اویلر
۱۷۰.....	۷-۳- روش رونگه-کوتا
۱۷۱.....	۷-۳-۱- روش رونگه-کوتا-۲ یا روش پیشگو-تصحیح‌کننده
۱۷۴.....	۷-۳-۲- روش رونگه-کوتای مرتبه سه
۱۷۴.....	۷-۳-۳- روش رونگه-کوتای مرتبه چهار
۱۸۳.....	۷-۴- مسئله‌هایی برای تمرین

فصل هشتم: مشتق‌گیری عددی

۱۸۶.....	۸-۱- مقدمه
۱۹۱.....	۸-۲- مشتقات با کاربرد چندجمله‌ای درون‌یاب پیشرو نیوتن
۱۹۵.....	۸-۳- مشتقات با کاربرد چندجمله‌ای درون‌یاب پسرو نیوتن
۱۹۸.....	۸-۴- مشتقات با کاربرد چندجمله‌ای درون‌یاب استرلینگ
۲۰۲.....	۸-۵- چندجمله‌ای تفاضل تقسیم‌شده نیوتن
۲۰۴.....	۸-۶- چندجمله‌ای لاگرانژ
۲۰۹.....	۸-۷- برون‌یابی ریچاردسون
۲۱۲.....	۸-۸- مسئله‌هایی برای تمرین

فصل نهم: روش‌های ریشه‌یابی عددی

۲۱۶.....	۹-۱- مقدمه
۲۱۶.....	۹-۲- روش نیوتن-رافسون
۲۲۳.....	۹-۳- روش تکرار
۲۳۱.....	۹-۴- روش دوبخشی
۲۳۴.....	۹-۵- روش وتری

۲۳۹.....	۹-۶- روش نابجایی
۲۴۶.....	۹-۷- مسئله‌هایی برای تمرین
۲۴۷.....	پیوست‌ها
۲۵۵.....	نمایه

تقدیر و تشکر مؤلف

من این کتاب را به همه کسانی که به نحوی مرا تشویق کردند تا آن را بنویسم، مدیونم. منبع الهام بخش نوشتن این کتاب از دانشجویانم سرچشمه گرفت.

من این کتاب را تماماً به والدین عزیزم تقدیم می‌کنم که بی‌قید و شرط عاشق من هستند و بدون آنها اصلاً نمی‌توانستم شروع به نوشتن کتاب کنم. آنها منبعی ثابت از قدرت، حمایت و عشق در زمان‌های سخت بوده‌اند. من بسیار مدیون صبر همیشگی آنها برای تحمل من در هنگام نوشتن این کتاب هستم. من همچنین می‌خواهم از برادرم مایانک برای تحمل من وقتی که درخواست‌های عجیب و غریب می‌کردم، قدردانی کنم. از دو دوست، دوست‌داشتنی من دیویت و ایشانی به‌خاطر لبخندها و خنده‌های زیبایشان که در یک پلک‌زدن استرس مرا از بین می‌برد سپاسگزارم. این قدردانی بدون یادی از خواهرم سونیا به‌خاطر توصیه‌های عالی او در تمام مواقعی که مشغول دوره دکتری خود بود ناقص است.

از همه دانشجویانم که به من ایمان داشتند و مدام از من می‌خواستند کتابی بنویسم که بتواند همه موضوعات مرتبط را در قالب یک مجموعه ارائه دهد تشکر می‌کنم. همچنین صمیمانه تشکر می‌کنم از همه معلمانم که به من آموختند و به من انگیزه دادند تا یکی از آنها باشم.

همچنین از همسرم آنوپ گوئل صمیمانه تشکر می‌کنم. من واقعاً به‌خاطر حمایت و تشویق مداوم او در تمام طول روند نگارش کتاب و ضمن ویرایش آن، مدیون او هستم. من همچنین از خانواده جدیدم از جمله پدرشوهر، مادرشوهر و برادرشوهرم برای حمایتشان در طول ویرایش این کتاب سپاسگزارم.

من صمیمانه از ناشر دی‌گرویتز برای همکاری و پردازش این کتاب تشکر می‌کنم. همچنین می‌خواهم تشکر ویژه‌ای از اما سونسون، یوته اسکامبراکس و دیپتی دانگ برای کمک و حمایت همیشگی‌شان ابراز نمایم.

مهم‌تر از همه، می‌خواهم از پروردگار تشکر کنم که شجاعت، انگیزه، قدرت و مهم‌تر از همه فضل خود را برای نوشتن این کتاب به من اهدا نمود.

ژوئیه ۲۰۲۰

به نام خداوند جان و خرد

در عصری که علم و فناوری با سرعت فزاینده‌ای در حال پیشرفت است، نقش ریاضیات به عنوان زبان عمومی علوم بیش‌ازپیش مورد توجه قرار گرفته است. شیمی، به عنوان یکی از علوم پایه، از این قاعده مستثنی نیست. با به‌روزرسانی سرفصل مصوب و ارائه درسی تحت عنوان «ریاضی در شیمی» این اهمیت عینیت یافته و بخشی از چارچوب درسی دانشجویان شیمی در دوره کارشناسی گشته است. بااین‌حال نبود منابع فارسی و به‌ویژه عدم ارائه مباحث مرتبط با کاربرد روش‌های عددی در مسائل مرتبط انگیزه‌ای شد تا کتاب حاضر جهت آشنایی مقدماتی دانشجویان رشته شیمی با کاربرد روش‌های عددی در شیمی فیزیک و شیمی تجزیه ترجمه گردد.

این کتاب به دانشجویان رشته شیمی در دوره کارشناسی کمک می‌کند تا علاوه بر ارتقای دیدگاه علمی خود با استفاده از ریاضیات، مفاهیم پیچیده شیمی را بهتر درک کنند. همچنین آن‌ها را برای حل مسائل عملی شیمی فیزیک و شیمی تجزیه با استفاده از روش‌های عددی انتگرال‌گیری، مشتق‌گیری، یافتن ریشه‌ها، برازش منحنی و روش‌های آماری آماده می‌سازد. این کتاب علاوه بر مفاهیم مرتبط با درس ریاضی در شیمی می‌تواند مبنایی برای ارائه مفاهیم پایه مورد نیاز برای کاربرد در درس «کاربرد کامپیوتر در شیمی» باشد.

بی شک بدون همراهی معاونت پژوهشی دانشگاه گیلان انتشار این کتاب به سرانجام نمی‌رسید. از پیگیری و مساعدت کارشناس محترم مرکز نشر دانشگاه سرکارخانم سارا جعفری قدردانی می‌نمایم. همچنین از استاد ارجمند جناب آقای دکتر حسین امینی خواه ویراستار علمی و ادبی این اثر که با دقت نظر فراوان موجبات بهبود کیفیت این ترجمه را فراهم نمودند، بسیار سپاسگزارم.

ترجمه این کتاب به زبان فارسی، نیاز ضروری به دسترسی به منابع علمی در زبان مادری را برطرف می‌کند و پلی است بین دو دنیای شیمی و ریاضیات. با امید به پیشرفت علم و دانش در کشور عزیزمان، این کتاب را به دست شما می‌سپارم.

با احترام،

محمد محمدپور مقدم

۱۴۰۳

فصل اول

واحدها و اندازه گیری ها

۱-۱- مقدمه

در علوم، به‌ویژه در علم شیمی فیزیک، اندازه‌گیری‌های بسیار زیادی انجام می‌شوند. یک کمیت فیزیکی بسیار حائز اهمیت است. در عمل یک کمیت فیزیکی حاصل ضرب دو کمیت است که عبارت‌اند از یک واحد^۱ (بعد) و یک عدد. در اندازه‌گیری هر مؤلفه^۲ (پارامتر) در شیمی فیزیک، عدد به‌خودی‌خود بی‌معنی است مگر آنکه با واحدی همراه شود. به‌عنوان نمونه، ۶ متر یک عدد «۶» و یک واحد «متر» را در کنار هم دارد. همچنین، ضمن فرایند همبسته کردن (مرتبط ساختن) دو کمیت فیزیکی، مقادیر ثابت و متغیر به‌کاربرده می‌شوند. یک ثابت کمیتی فیزیکی است که مقدار ثابتی دارد، به‌عنوان مثال، ثابت پلانک ($h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$) و ثابت آووگادرو ($N_A = 6.023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$). یک متغیر، کمیتی است که می‌تواند هر مقدار قابل‌قبول (مُجاز) را بر مبنای مقادیر تعدادی از کمیت‌های دیگر اختیار کند که در واقع متغیر موردنظر تابعی از آن کمیت‌ها است، به‌عنوان مثال، p تابعی از V ، T ، n است، یعنی،

$$p = nRT/V$$

(۱-۱)

به‌طوری‌که p را می‌توان به شکل $p = f(V, T, n)$ نمایش داد.

به‌علاوه متغیرها به‌عنوان متغیرهای وابسته و مستقل دسته‌بندی می‌شوند. در مثال قبلی، از آنجاکه p تابعی از V ، T و n است، p متغیر وابسته است درحالی‌که سایر متغیرها مستقل هستند.

۱-۲- عملیات حسابی پایه

یک کمیت فیزیکی اغلب نتیجه ارتباط سایر کمیت‌های فیزیکی است که توسط عملگرهای ریاضی به هم مربوط می‌شوند. بدین منظور، عملیات حسابی پایه بر این متغیرها اعمال می‌شوند. ما همگی با عملیات ریاضی پایه آشنا هستیم: جمع، تفریق، ضرب و تقسیم. در این بخش، ما به‌سادگی اصول مقدماتی را که پیش‌از این آموخته‌شده، جمع‌بندی خواهیم کرد (جدول ۱-۱).

1. Unit

2. Parameter

جدول ۱-۱: عملیات ریاضی

عملیات	عبارت	ترتیب
جمع	$A + B$	$A + B = B + A$
تفریق	$A - B$	$A - B \neq B - A$
ضرب	$A \times B$ یا $A \cdot B$ یا AB	$A \times B = B \times A$
تقسیم	$A \div B$ یا $\frac{A}{B}$	$\frac{A}{B} \neq \frac{B}{A}$

تعدادی از معادله‌های مورد استفاده در شیمی فیزیک که شامل این عملیات هستند در زیر فهرست شده‌اند:

$$pV = nRT, \quad (۲-۱) \quad \text{معادله گاز ایده‌آل}$$

$$pH = pK_a + \log(\text{acid/salt}), \quad (۳-۱) \quad \text{معادله هندرسون-هسلبالخ}^۱$$

$$E = mc^2, \quad (۴-۱) \quad \text{معادله اینشتین}^۲$$

$$E = E^0 - (RT/nF) \log Q, \quad (۵-۱) \quad \text{معادله نرنست}^۳$$

$$\Lambda = \Lambda^0 - b\sqrt{c}, \quad (۶-۱) \quad \text{معادله اُنساگر}^۴$$

$$k = A \cdot \exp(-E_a/RT). \quad (۷-۱) \quad \text{معادله آرنیوس}^۵$$

۱-۳- سلسله مراتب عملیات حسابی

قبل از انجام عملیات حسابی، مجموعه‌ای از قواعد وجود دارند که باید رعایت شوند. در ریاضیات عمومی، قواعد BODMAS^۶ بکار برده می‌شوند. آن‌ها «قواعد تقدم عملگرها» یا «قواعد تقدم یا ترتیب عملیات» نیز نامیده می‌شوند. برای به خاطر سپردن آن‌ها در نقاط مختلف جهان یک روش عمومی بکار برده می‌شود. به عنوان نمونه، عبارت «PEMDAS»^۷ مخففی است که در ایالات متحده بکار برده می‌شود.

1. Henderson-Hasselbalch

2. Einstein

3. Nernst

4. Onsager

5. Arrhenius

6. Brackets, Orders, Division, Multiplication, Addition, Subtraction.

7. Parentheses, Exponential, Multiplication, Division, Addition, Subtraction

ترتیب عملیات به شکل زیر است:

۱- پرانتز،

۲- نما،

۳- ضرب،

۴- تقسیم،

۵- جمع،

۶- تفریق.

بر اساس این قواعد، پرانتزها بر نماها مقدم هستند که خود بر ضرب و تقسیم تقدم دارند. هنگام حل کردن پرانتزها، ابتدا توابع درون پرانتزها حل می‌شوند و سپس نتیجه به مراحل بعدی بسط داده می‌شود. به علاوه سایر عملگرها از چپ به راست اعمال می‌شوند. به عنوان نمونه،

$$\text{الف. } 2 \times (3 + 4) = 2 \times 7 = 14 \text{ در حالی که } 2 \times 3 + 4 = 6 + 4 = 10$$

$$\text{ب. } (5 + 4)^{72} = 9^{72} = 3 \text{ در حالی که } 5 + 4^{72} = 5 + 2 = 7$$

$$\text{پ. } (4 \times 8) \div 2 = 32 \div 2 = 16 \text{ در حالی که } 4 \times 6 \div 2 = 24 \div 2 = 12$$

– قاعده‌های توان (قاعده‌های شاخص)

بر اساس قاعده‌های توان، شاخص نشان‌دهنده تعداد دفعاتی است که یک عدد باید در خودش ضرب شود، به طوری که پایه عددی است که به توان رسانده می‌شود. این قاعده‌ها را می‌توان به صورت زیر نمایش داد.

$$\text{الف. } a^x \times a^y = a^{x+y} \text{ مثلاً } 2^3 \times 2^5 = 2^8$$

$$\text{ب. } \frac{a^x}{a^y} = a^{x-y} \text{ مثلاً } 2^5 / 2^3 = 2^2$$

$$\text{پ. } (a^x)^y = (a^y)^x = a^{xy} \text{ مثلاً } (2^3)^2 = 2^6 = 64$$

$$\text{ت. } a^{-x} = \frac{1}{a^x} \text{ مثلاً } 2^{-1} = 1/2 = 0.5$$

$$\text{ث. } (ab)^x = a^x \times b^x \text{ مثلاً } (2 \times 3)^4 = 2^4 \times 3^4 = 1296$$

$$\text{ج. } \left(\frac{a}{b}\right)^x = \frac{a^x}{b^x} \text{ مثلاً } \left(\frac{2}{3}\right)^4 = \frac{2^4}{3^4}$$

$$\text{چ. } (a + b)^n \neq a^n + b^n \text{ مثلاً } (2 + 3)^4 = 625 \text{ در حالی که } 2^4 + 3^4 = 97$$

۱-۴-۲- دسته‌بندی دستگاه‌های واحد

تاریخچه دستگاه‌های واحد^۱ با دستگاه واحدهای امپریال بریتانیایی^۲ و به دنبال آن دستگاه واحدهای مرسوم ایالات متحده^۳ و دستگاه واحدهای بین‌المللی (دستگاه متریک)^۴ آغاز می‌شود. از تمامی آن‌ها، دستگاه متریک واحدها یک دستگاه واحد منسجم‌تر بود زیرا کاربرد آن ساده بود و کاربر نیازی به استفاده از عامل‌های تبدیل^۵ خارج از محدوده آنچه در معادله موجود است، ندارد.

۱-۴-۱- دستگاه متریک واحدها

دستگاه متریک رایج‌ترین و پذیرفته‌شده‌ترین دستگاه اندازه‌گیری در سطح بین‌المللی است که به نام دستگاه واحدهای اس‌ای^۶ نیز شناخته می‌شود. این دستگاه برحسب واحدهای پایه (بنیادی) و واحدهای مشتق شده طبقه‌بندی می‌شود. این واحدها می‌توانند برای تعریف هر کمیت فیزیکی دیگری بکار برده شوند. استفاده از دستگاه واحدهای متریک با کمک مضرب‌ها و کسر‌ها آسان است. در واقع، دستگاه‌های پیش‌تر بکار برده شده واحدهای مرسوم ایالات متحده و واحدهای امپریال بریتانیایی با استفاده از دستگاه واحد متریک تعریف می‌شوند.

ایده اولیه معرفی دستگاه متریک آن بود که یک دستگاه واحد قابل استنتاج از یک پدیده تغییرناپذیر ایجاد شود اما محدودیت‌های تجربی استفاده از استانداردهای مصنوعی (نمونه اولیه برای متر و کیلوگرم) را اجتناب‌ناپذیر کردند. مضرب‌ها و زیرمضرب‌های (مضرب‌های فرعی) واحدهای متریک، برحسب توان‌های ده، با افزودن پیشوندهایی به نام واحدها به راحتی آن‌ها را کارآمدتر می‌سازند. دستگاه متریک در فرم‌های مختلفی با امکان انتخاب واحدهای پایه متفاوت وجود دارد. دستگاه‌های سی‌جی‌اس^۷ و ام‌کاس^۸ نیز به عنوان دستگاه متریک شناخته می‌شوند. دستگاه اف‌پی‌اس^۹ تحت عنوان دستگاه بریتانیایی شناخته می‌شود. دستگاه واحد اس‌ای صورت شکل دقیق‌تری از دستگاه ام‌کاس است. واحدهای متریک به‌طور گسترده استفاده می‌شوند و دستگاه واحدهای پذیرفته‌شده در علوم هستند.

-
1. Unit systems
 2. British Imperial System of units
 3. US Customary System of Units
 4. International System of Units (metric system)
 5. Conversion factors
 6. SI
 7. CGS (Centimeter-Gram-Second)
 8. MKS (Meter-kilogram-Second)
 9. FPS (Foot-Pound-Second)

واحدها عمدتاً به شکل زیر دسته‌بندی می‌شوند:

- واحدهای بنیادی: که تحت عنوان واحدهای پایه نیز شناخته می‌شوند، این واحدها کمیت‌های بنیادی هستند که به صورت مستقل قابل اندازه‌گیری هستند؛ به عنوان مثال، طول، جرم، زمان، جریان الکتریکی و کاندلا (شمع).
 - واحدهای مشتق شده (مستخرج): این واحدها با استفاده از دو یا تعداد بیشتری از واحدهای بنیادی استخراج می‌شوند. به عنوان مثال، مساحت، مستطیل، حجم، انرژی، نیرو، سرعت، فشار، لومن و وات.
- تمام کمیت‌های فیزیکی را می‌توان برحسب هفت کمیت بنیادی بیان نمود. جدول ۱-۲ هفت واحد پایه را همراه با تعریف معیار (استاندارد) آن‌ها فهرست می‌نماید و جدول ۱-۳ تعدادی از واحدهای مستخرج از واحدهای پایه را نمایش می‌دهد.

۱-۴-۲- دسته‌بندی دستگاه متریک واحدها

سه نوع دستگاه واحد بنیادی در دستگاه متریک وجود دارند.

۱. دستگاه واحد سی‌جی‌اس: همچنان که نام این دستگاه نشان می‌دهد، این دستگاه متریک سانتی‌متر، گرم و ثانیه را به عنوان واحدهای پایه طول، جرم و زمان بکار می‌برد.
۲. دستگاه واحد ام‌ک‌اس و ام‌تی‌اس: این دستگاه متر، کیلوگرم و ثانیه را به عنوان واحدهای پایه بکار می‌برد. این دستگاه در سال ۱۸۸۹ مورد پذیرش قرار گرفت و جایگزین دستگاه سی‌جی‌اس شد. این دستگاه ام‌ک‌اس مبنای دستگاه اس‌آی را شکل داد. دستگاه واحد دیگری به نام دستگاه ام‌تی‌اس مبتنی بر متر، تُن و ثانیه وجود دارد.
۳. دستگاه واحد اس‌آی: در ابتدا، دستگاه‌های واحد مختلفی برای اندازه‌گیری کمیت‌های فیزیکی مشابه بکار برده می‌شدند، اما بعد یک روش استاندارد برای همسان‌سازی اندازه‌گیری‌ها، تحت نام دستگاه واحد بین‌المللی (اس‌آی)^۱ توسعه یافت. این دستگاه توسط مجمع بین‌المللی شیمی محض و کاربردی (آیوپاک)^۲ و سازمان بین‌المللی استانداردسازی^۳ که به اس‌آی نیز معروف است، معرفی گردید. این دستگاه نوعی از دستگاه متریک است که در ۱۹۶۰ توسعه یافت، زمانی که تعداد دیگری از واحدها که پیش از آن در سایر دستگاه‌های

1. System de International (SI) unit system

2. International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)

3. International Organization for Standardization (SI)

متریک غایب بودند نیز در آن ادغام شدند. این دستگاه پذیرفته‌شده‌ترین دستگاه واحدهاست. دستگاه واحدهای اس‌آی از دستگاه ام‌ک‌اس مشتق شده است.

جدول ۱-۲: واحدهای پایه هفت کمیت فیزیکی به همراه واحدهای اس‌آی

کمیت فیزیکی	نماد	نام واحد اس‌آی	نماد واحد اس‌آی
طول	L	متر	m
جرم	M	کیلوگرم	kg
زمان	t	ثانیه	s
جریان الکتریکی	I	آمپر	A
دما	T	کلوین	K
مقدار ماده	N	مول	mol
شدت روشنایی	I_V	کاندلا (شمع)	cd

– دستگاه واحد امپریال بریتانیایی

دستگاه امپریال یا واحدهای امپریال یک دستگاه از واحدهاست که در قانون ۱۸۲۴ وزن و اندازه‌گیری‌های بریتانیایی تعریف شد. در دستگاه امپریال بریتانیایی، واحد پایه طول یارد و واحد پایه دما فارنهایت است. این دستگاه به‌صورت اتفاقی استخراج‌شده بود اما بعدتر در قرن بیستم اغلب کشورها دستگاه متریک را پذیرفتند (پیوست الف). اف‌پی‌اس که عبارت است از فوت-پوند-ثانیه واحد بنیادی دستگاه واحد بریتانیایی است.

– دستگاه واحدهای مرسوم ایالات‌متحده

نوع دیگری از دستگاه واحد سنتی که در ایالات‌متحده ایجاد شد دستگاه واحدهای مرسوم ایالات‌متحده بود که از دستگاه امپریال واحدها مشتق شد؛ به‌عنوان مثال، فوت، اینچ، مایل و یارد (پیوست الف ۱). ایالات‌متحده پس از استقلال از بریتانیا تصمیم گرفت تا تنها دستگاه واحدهای امپریال را بکاربرد، حتی زمانی که دستگاه متریک در اغلب کشورها رواج پیدا کرد.

۱-۵- تعریف واحدهای پایه

واحدهای پایه برحسب ثابت‌هایی مانند سرعت نور در خلأ (C)، بار الکترون و یا ثابت‌هایی که به‌دقت قابل‌اندازه‌گیری هستند، تعریف می‌شوند. واحدهای بازتعریف شده جدید، دستگاه واحدهای مصنوعی را با واحدهای اندازه‌گیری منسجم‌تر جایگزین کرده‌اند. نمونه اولیه‌ای که ابتدا برای وزن مورد استفاده

قرار می‌گرفت (آلیاژ پلاتین-ایریدیوم) همواره وزن یکسانی نداشت. حتی هنگامی که این قطعه درون سه جام زنگوله‌ای قرار داشت، آلوده می‌شد و زنگ می‌زد. تمییز کردن گردوغبار سبب تغییر جرم نمونه اولیه می‌شود؛ بنابراین، این نمونه دقیق نبود. دستگاه بازتعریف شده این امکان را فراهم می‌کند که جرم را به صورت مستقیم در هر مقیاسی (و اندازه‌ای) اندازه‌گیری نمود و این مزیت بزرگی برای دانشمندان خواهد بود.

ثابت‌های فیزیکی زیر در دستگاه واحد اس‌آی بازتعریف شده‌اند:

۱. ثابت پلانک^۱،
۲. ثابت آووگادرو^۲ (N_A)،
۳. ثابت بولتزمن^۳ (k)،
۴. بار الکتریکی پایه (e)،
۵. سرعت نور (c)،
۶. اثر روشنائی یک تابش مرئی مشخص (K_{cd})،
۷. فرکانس فوق ظریف^۴ سزیم ($\Delta\nu_{Cs}$)،

در نوامبر ۲۰۱۸، تغییرات در واحدهای چهار واحد پایه به تصویب اجلاس عمومی اوزان و معیارها^۵ رسید. در می ۲۰۱۹، چهار واحد از هفت واحد پایه اس‌آی که شامل کیلوگرم، آمپر، کلون و مول هستند به ترتیب با تعیین مقدار دقیق ثابت پلانک (h)؛ ثابت آووگادرو (N_A)، ثابت بولتزمن (k) و بار الکتریکی پایه (e) بازتعریف شدند. سه واحد دیگر که شامل ثانیه، متر و کاندلا هستند، پیش‌ازاین بر اساس ثابت‌های فیزیکی تعریف شده‌اند. تمام هفت واحد پایه که بازتعریف شده‌اند را می‌توان بیشتر موردبررسی قرار داد.

۱. طول: واحد پایه آن متر (m) است. پیش‌ازاین تعریف متر مبتنی بر طول موج خط طیفی کریپتون-۸۶ بود و به عنوان فاصله‌ای که نور در خلأ در بازه زمانی $299,792,458 \div 1$ ثانیه طی می‌کرد، تعریف می‌شد. تعریف فعلی مبتنی بر ثابت در نظر گرفتن مقدار عددی سرعت نور، c ، در خلأ معادل با $299,792,458$ متر بر ثانیه است.

۲. جرم: واحد پایه جرم کیلوگرم (kg) است. در ابتدا، این واحد به عنوان جرم یک قطعه براق از آلیاژ پلاتین-ایریدیوم نگهداری شده در دفتر بین‌المللی اوزان و معیارها^۶ در فرانسه تعریف

-
1. Planck's constant
 2. Avogadro's constant
 3. Boltzmann's constant
 4. Hyperfine frequency
 5. General Conference on Weights and Measures
 6. Krypton-86
 7. Bureau International des Poids et Mesures

شد. قبلاً این قطعه نمونه‌ی اولیه یا مصنوعی بین‌المللی برای کیلوگرم بود. تعریف جدید کیلوگرم شامل بکار بردن ماشین‌های توزین دقیقی به نام «ترازوی کیبل^۱» است که ثابت پلانک را برای اندازه‌گیری دقیق جرم با استفاده از نیروی الکترومغناطیسی، بکار می‌برد. ثابت پلانک که در سال‌های اخیر با دقت اندازه‌گیری شده برابر با $۶/۶۲۶۰۷۱۵ \times ۱۰^{-۳۴}$ کیلوگرم در مترمربع بر ثانیه است.

این دستگاه جدید اس‌آی دقت بیشتری را در بسیاری از زمینه‌ها از جمله فناوری زیستی، تولید، تجارت و سلامت انسان به ارمغان می‌آورد.

۳. زمان: واحد پایه زمان ثانیه است. یک ثانیه به صورت بازه زمانی $۹,۱۹۲,۶۳۱,۷۷۰$ دوره تناوب از تابش مربوط به گذار بین دو تراز فوق ظریف حالت پایه اتم سزیم- ۲۱۳۳ تعریف می‌شود. در تعریف بهینه‌شده، مقدار عددی فرکانس سزیم به عنوان یک مقدار ثابت در نظر گرفته می‌شود.

۴. جریان: واحد پایه جریان آمپر است. آمپر به صورت مقدار بار الکتریکی عبوری از یک مدار الکتریکی در واحد زمان تعریف می‌شود اما تعریف رایج آن را به صورت جریان $۱۰^{-۱۹}$ $۶۶۳۴۲۱۷/۶ \div$ واحد از بار پایه، e ، در ثانیه، تعریف می‌کند.

۵. دما: واحد پایه دما کلوین است. تعریف قبلی کلوین به صورت کسر $۱/۲۷۳/۱۶$ از دمای ترمودینامیکی نقطه سه‌گانه آب که $۰/۰۱$ درجه سانتی‌گراد یا $۲۷۳/۱۶$ کلوین معرفی می‌شد در حالی که تعریف فعلی شامل ثابت در نظر گرفتن مقدار عددی ثابت بولتزمن، k ، به مقدار $۱۰^{-۲۳} \times ۱/۳۸$ ژول بر کلوین است به نحوی که اطمینان حاصل شود که دمای نقطه سه‌گانه آب همان مقدار باقی می‌ماند. یک کلوین برابر است با تغییر در دمای T که منجر به تغییر انرژی گرمایی kT با مقدار $۱۰^{-۲۳} \times ۱/۳۸۰۶۴۹$ ژول بر کلوین می‌شود به طوری که $J \cdot K^{-1}$ $kg \cdot m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$ است که در آن کیلوگرم، متر و ثانیه بر اساس تعریف بهینه‌شده، تعریف می‌شوند. اکنون، چون کلوین به جای شرایط تجربی (نقطه سه‌گانه آب) از ثابت‌های فیزیکی استخراج شده است، بسیار قابل اطمینان‌تر و پایدارتر است.

۶. مقدار ماده: واحد پایه مقدار ماده مول است. این واحد به صورت تعداد اتم‌ها در ۱۲ گرم از کربن ^{۱۲}C (ایزوتوپ کربن با جرم اتمی ۱۲ دالتون^۲) تعریف شد. تعریف بازبینی‌شده مقدار

1. Kibble balance
2. Caesium-133
3. Dalton

ماده‌ای است که دقیقاً معادل با $۱۰^{۲۳} \times ۰.۷۶ \times ۰.۲۲۱۴$ ذره بنیادی (اتم‌ها، مولکول‌ها یا یون‌ها) است.

۷. شدت روشنایی: واحد پایه این کمیت کاندلا (cd) است. این کمیت به صورت شدت تابش یا میدان مغناطیسی با فرکانس ۵۴۰×۱۰^{۱۲} هرتز^۱ یا ۵۴۰ ترا هرتز^۲ نشر شده توسط یک منبع، در یک جهت مشخص با توان $۷/۶۸۳$ وات در هر استرادیان، تعریف می‌شود. شدت روشنایی، شدت بصری هر منبع نوری را اندازه‌گیری می‌نماید و تنها واحدی است که چشم انسان می‌تواند اندازه‌گیری کند. این واحد روشنایی یا شدت نور و جهت آن را تعیین می‌کند. از زمان‌های قدیم، شمع‌ها به عنوان منبع نور مورد استفاده قرار می‌گرفتند؛ بنابراین، این نام از شمع^۳ مشتق می‌شود، در نتیجه کاندلا واحد شدت روشنایی است.

-
1. Hertz
 2. Terahertz=1012 hertz
 3. Candle

جدول ۳-۱: عملیات ریاضی واحدهای مشتق شده اس آی

واحد اس آی	نماد	توصیف	نام	کمیت فیزیکی
s ⁻¹	Hz	رخدادها بر واحد زمان	هرتز	فرکانس
kg ms ⁻¹	F	جرم × شتاب	نیوتن	نیرو
N m ⁻¹	Pa	نیرو بر واحد سطح	پاسکال	فشار
N m	J	نیرو × جابجایی	ژول	انرژی، کار، گرما
J s ⁻¹	W	کار بر واحد زمان	وات	توان
A s	C	جریان × زمان	کولمب	بار الکتریکی
J C ⁻¹	V	کار بر واحد بار	ولت	پتانسیل الکتریکی
C V ⁻¹	F	بار بر واحد پتانسیل الکتریکی	فاراد	ظرفیت خازنی
V A ⁻¹	Ω	پتانسیل بر واحد جریان	اُهم	مقاومت الکتریکی
kg ⁻¹ m ⁻² s ³ A ²	S	جریان بر واحد پتانسیل	زیمنس	هدایت الکتریکی
J A ⁻¹	Wb	کار بر واحد جریان	وِبر	شار مغناطیسی
Wb m ⁻¹	T	شار مغناطیسی بر واحد سطح	تسلا	چگالی شار مغناطیسی
Wb A ⁻¹	H	شار مغناطیسی بر واحد جریان	هنری	القاء مغناطیسی
۱	rad	زاویه مقابل قوس واحد در مرکز دایره واحد	رادیان	زاویه مسطح ^۱
۱	Sr	زاویه مجسمه مقابل سطح واحد در مرکز کره واحد	استرادیان	زاویه مجسمه ^۱ فضایی

برخی کمیت‌های فیزیکی بدون بُعد^۱ هستند زیرا که شامل نسبت کمیت‌هایی با ابعاد مشابه هستند. به عنوان نمونه، کسر مولی، فشار نسبی، جرم نسبی و مانند آن‌ها. عملاً تعریف دقیق واحدها مبتنی بر ثابت‌های فیزیکی اثر قابل توجهی بر اندازه‌گیری در زندگی روزمره ندارد. این اثر تنها در اندازه‌گیری‌های زیر یک کیلوگرم یا ضمن اندازه‌گیری جرم‌های بسیار کم حائز اهمیت است. اکنون تنها مزیت آن است که دانشمندان حالا می‌توانند آن‌ها را در هر مکان، زمان یا مقیاسی اندازه‌گیری کنند؛ بنابراین، اندازه‌گیری‌های دقیق‌تری انجام می‌شوند.

۱-۶- تبدیل بین واحدها

آزمایش‌هایی وجود دارند که در آن‌ها اندازه‌گیری‌های کمیت فیزیکی برحسب یک نوع از واحدها نسبت به سایر واحدها برتری دارند. فرایند تبدیل به شرایط و هدف غایی که تبدیل برای رسیدن به آن لازم است، بستگی دارد. به عنوان نمونه، واحد اس‌آی برای اختلاف پتانسیل ولت است، درحالی‌که ضمن تیتراسیون پتانسیومتری، واحد ارجح، میلی ولت است زیرا که مقدار اختلاف پتانسیل بسیار کوچک است. در چنین مواردی، لازم است که تبدیل واحدها به شکل پذیرفته‌شده‌تر (ارجح‌تر) که واحد اس‌آی است، انجام شود. به صورت مشابه، اگر فرد بخواهد طول یک مداد را اندازه‌گیری کند، آنگاه اگر اندازه‌گیری‌هایی برحسب متر (واحد اس‌آی) انجام شود خطا و تقریب‌های بیشتری را ایجاد می‌نماید، درحالی‌که اگر اندازه‌گیری‌ها برحسب سانتی‌متر (واحد سی‌جی‌اس) انجام شود، آنگاه با تبدیل به متر نتایج بسیار دقیق‌تری حاصل می‌شود. ضرایب و زیرمضرب‌های^۲ متعددی از متر وجود دارند، برخی از آن‌ها میلی‌متر، میکرومتر، سانتی‌متر، کیلومتر و موارد مشابه هستند. آن‌ها شامل پیشوندهایی متصل به واحدهای اس‌آی هستند (پیوست الف). بر اساس کاربرد، ممکن است عامل تبدیل^۳ برای تبدیل واحد اندازه‌گیری شده به واحد پذیرفته‌شده‌تر (ارجح‌تر) استفاده شود. یک تبدیل همچنین به دقت^۴ و صحت^۵ اندازه‌گیری که به واسطه آن مقدار مشخصی از عدم قطعیت با اندازه‌گیری همراه می‌شود، بستگی دارد. تبدیل نه باید دقت اندازه‌گیری اولیه را افزایش دهد و نه کاهش. جدولی از روابط و عامل‌های تبدیل مختلف برای برخی واحدها در انتهای کتاب ارائه شده است (پیوست الف). تبدیل از یک واحد به واحد دیگر می‌تواند با روش ساده‌ای به نام شیوه برچسب عامل^۶ انجام شود.

-
1. Dimensionless
 2. Submultiples
 3. Conversion factor
 4. Precision
 5. Accuracy
 6. Factor label method

برچسب عامل شیوه‌ای ابتدایی است که برای تبدیل کمیت اندازه‌گیری شده در یک دستگاه واحد به دستگاه واحد دیگر؛ با انجام ضرب در یک عامل تبدیل؛ بکار برده می‌شود.

مثال ۱: مقدار ۰٫۷۹۱۲٪ متر (m) را به میلی‌متر (mm) تبدیل کنید.

راه‌حل: از عامل‌های تبدیل می‌دانیم که ۱ متر = ۱۰۰۰ میلی‌متر،

بنابراین،

$$۰٫۷۹۱۲/۰ = ۰٫۷۹۱۲/۰ \cdot m \times \frac{۱۰۰۰ \text{ mm}}{۱ \text{ m}},$$

$$۰٫۷۹۱۲/۰ \text{ m} = ۱۲/۷۹ \text{ mm}.$$

هنگامی که کمیت فیزیکی در نسبت عامل تبدیل ضرب می‌شود، آنگاه یک واحد در مخرج با یک

واحد در صورت حذف می‌شود و تنها یک واحد باقی می‌ماند.

مثال ۲: قطعه‌ای از فلز دارای طول ۷ اینچ است. طول آن را برحسب سانتی‌متر محاسبه کنید.

راه‌حل: از آنجاکه یک اینچ برابر ۲٫۵۴ سانتی‌متر است.

پس:

$$۷ \text{ in} = ۷ \text{ in} \times \left[\frac{۲٫۵۴ \text{ cm}}{۱ \text{ in}} \right] ۱۷٫۷۸ = \text{cm}.$$

مثال ۳: بشری حاوی ۵ لیتر از NaOH است. حجم NaOH برحسب مترمکعب را محاسبه کنید.

راه‌حل: هر لیتر برابر با ۱۰۰۰ سانتی‌مترمکعب است و هر متر برابر با ۱۰۰ سانتی‌متر است؛

بنابراین،

$$۵ \text{ L} = ۵ \times ۱۰۰۰ \text{ cm}^3 \times \left[\frac{۱ \text{ m}}{۱۰۰ \text{ cm}} \right]^3 = ۵ \times ۱۰^{-۳} \text{ m}^3.$$

مثال ۴: چه تعداد اتم در $۷/۵۰$ گرم ورقه آلومینیومی وجود دارد؟

راه حل: جرم اتمی آلومینیوم $۲۶/۹۸۱۵۳۹$ گرم بر مول است، بدین معنی که ۱ مول از آلومینیوم شامل عدد آووگادرو ($۶/۰۲۳ \times ۱۰^{۲۳}$) از اتم‌های آلومینیوم است یا $۲۶/۹۸۱۵۳۹$ گرم آلومینیوم شامل $۶/۰۲۳ \times ۱۰^{۲۳}$ اتم‌های آلومینیوم است؛ بنابراین با استفاده از روش برچسب عامل، داریم:

$$= \times ۷۶۷۱۰^{۲۳} \text{ atoms} \quad ۷ \text{ g} = ۵/۷ \text{ g} \times \frac{\text{mol}}{۹۸۱۵۳۹/۲۶ \text{ mol}^{-۱}} \times \frac{۶/۰۲۳ \times ۱۰^{۲۳} \text{ atoms}}{\text{mol}} = \frac{۵/۷ \times ۶/۰۲۳ \times ۱۰^{۲۳}}{۹۸۱۵۳۹/۲۶} \text{ atoms}$$

۱-۷- ارقام بامعنی

ضمن اندازه‌گیری‌ها، ابزارها کمیت‌های فیزیکی را تا حد دقت مشخصی، اندازه‌گیری می‌کنند. رقم‌های یک اندازه‌گیری تا به‌طوری که دقت اندازه‌گیری آن‌ها قطعی است، ارقام بامعنی نامیده میشوند. تعداد رقم‌ها بیانگر میزان قطعیت و اطمینان از اندازه‌گیری انجام‌شده است. رقم‌های بامعنی بیشتر، بیانگر دقت بیشتر هستند.

قواعد معینی که برای تعیین رقم‌های بامعنی در هر اندازه‌گیری باید رعایت شوند به شرح زیر هستند.

۱. تمام رقم‌های غیر-صفر بامعنی هستند.
- به‌عنوان نمونه، جرم قطعه فلزی $۳/۱۵$ گرم است. اینجا سه رقم بامعنی وجود دارد.
۲. تمام رقم‌های صفر بین دو رقم غیر-صفر بامعنی هستند.
- به‌عنوان نمونه، در عددهای $۰/۰۰۰۰۰۰۲۰۸$ ، $۰/۲۰۰۸$ و $۲۰۸/۰۰$ به ترتیب سه، چهار و پنج رقم بامعنی وجود دارد.
۳. در یک اندازه‌گیری با مقدار کوچکتر از یک، تمام صفرها در سمت راست ممیز اعشار و سمت چپ یک رقم غیر-صفر به‌هیچ‌وجه بامعنی نیستند.
- به‌عنوان نمونه، در $۰/۰۲۳۴$ گرم، صفرهای بعد از ممیز اعشار و قبل از ۲ بامعنی نیستند. سه رقم بامعنی وجود دارند: ۲، ۳ و ۴.
۴. (الف) تمام صفرها در سمت راست آخرین رقم غیر-صفر در عددی که دارای ممیز اعشار است، بامعنی هستند.
- به‌عنوان نمونه، در عدد " $۲۳۵/۰$ "، چهار رقم بامعنی وجود دارد. (به وجود ممیز اعشار دقت کنید)
- (ب) تمام صفرها در سمت راست آخرین رقم غیر-صفر در عددی که دارای ممیز اعشار نیست بی‌معنی هستند.

به‌عنوان نمونه، در عدد "۲۳۵۰"، سه رقم بامعنی وجود دارد.

(پ) صفرهای دنباله در سمت راست ممیز اعشار بامعنی هستند، حتی اگر در ادامه با یک رقم غیر-صفر دنبال نشوند.

به‌عنوان نمونه، در عدد ۵۳/۰۰ چهار رقم بامعنی وجود دارد (۵، ۳، ۰ و ۰).

۵. اعداد کامل تعداد بینهایت رقم‌های بامعنی دارند.

به‌عنوان نمونه، $3m = 3/000m = 3/000000000m$.

۶. هنگامی که عدد در نماد علمی به شکل $a \times b \times 10^n$ نوشته می‌شود، آنگاه تعداد ارقام بامعنی در a به حساب آورده می‌شوند.

به‌عنوان نمونه، عدد ۵۲۱/۰۰۰ را داریم که در نماد علمی می‌توانیم آن را به شکل 5.21×10^{-4} بنویسیم. در نتیجه اینجا تعداد ارقام بامعنی سه است (۵، ۲ و ۱). رقم‌های ۱۰ و ۴ هیچ جایگاهی در رقم‌های بامعنی ندارند. تغییر هر عدد به نماد علمی ممکن است تعداد رقم‌های بامعنی را تغییر دهد. به‌عنوان نمونه، ۳۶۰۰

۳۶۰۰، ۲ رقم بامعنی دارد.

۳۶۰۰/، ۴ رقم بامعنی دارد.

۳، ۳/۶۰۰×۱۰³، ۳ رقم بامعنی دارد.

قاعده اطلس-آرام (شرق-غرب، راست-چپ)

اگر عددی ممیز اعشاری داشته باشد، آنگاه صفرهای دنباله‌دار سمت چپ بی‌معنی هستند و اگر عدد ممیز اعشاری نداشته باشد، آنگاه صفرها در سمت راست بی‌معنی هستند (این نام‌گذاری بدان جهت است که اقیانوس آرام در سمت چپ و اقیانوس اطلس در سمت راست ایالات متحده هستند). به‌عنوان نمونه، ۸۳۷/۰۰ سه رقم بامعنی دارد (۸، ۳ و ۷) درحالی‌که ۳۵۰۰ دو رقم بامعنی دارد (۳ و ۵).

۸-۱- قواعد انجام عملیات حسابی

۸-۱-۱- جمع و تفریق

تعداد رقم‌های بامعنی ضمن انجام جمع و تفریق به تعداد ارقام اعشاری موجود در عدد با مقدار کمترین دقت بستگی دارند.

مثلاً، $63/152 + 5/6 = 68/752$

در عوض، شخص باید پاسخ را به صورت $۶۸/۷$ بنویسد، زیرا کم‌دقت‌ترین مقدار ($۵/۶$) تنها یک رقم اعشاری دارد.

مثال ۵: $x = ۳۱۲/۹۵۱ + ۰/۳۲$

راه‌حل: $x = ۳۱۳/۲۷$

از آنجا که کم‌دقت‌ترین عبارت در این جمع $۰/۳۲$ است که دو رقم اعشاری دارد؛ بنابراین، پاسخ هم باید دو رقم اعشاری را حفظ نماید؛ در نتیجه، این پاسخ تا دو رقم اعشاری که $۳۱۳/۲۷$ است، گرد می‌شود.

مثال ۶: ۲۴۱% گرم NaOH در $۱۴۲/۰$ گرم از آب حل می‌شود. جرم محلول چقدر است؟

راه‌حل: می‌توان جرم محلول را به صورت $۱۴۲/۲۴۱\text{g} = ۱۴۲\text{g} + ۰/۲۴۱\text{g}$ تعیین نمود.

از آنجا که کم‌دقت‌ترین اندازه‌گیری (یعنی $۱۴۲/۰$) یک رقم اعشاری دارد، آنگاه پاسخ (با گرد کردن) باید $۱۴۲/۲$ گرم باشد.

۱-۸-۲- ضرب و تقسیم

قاعده مشابهی ضمن انجام ضرب و تقسیم اعمال می‌شود، بدین شکل که تعداد رقم‌های بامعنی در نتیجه، مشابه تعداد رقم‌های بامعنی عددی با کمترین دقت در محاسبه خواهد بود.

مثال ۷: $۳/۶۹ = ۲/۴۶ \times ۱/۵$ (نتیجه دارای سه رقم بامعنی است).

راه‌حل: $۱/۵$ دو رقم بامعنی دارد و $۲/۴۶$ سه رقم بامعنی، بنابراین با توجه به قواعد، تعداد ارقام بامعنی پاسخ باید مشابه با کم‌دقت‌ترین عدد که $۱/۵$ است، باشد. بنابراین، نتیجه گرد کردن باید $۳/۷$ (با دو رقم بامعنی) باشد.

مثال ۸: $۲۵/۱۵۱۹۳۴ = ۳/۷ \times ۵/۰۷۳ \times ۱/۳۴$

راه‌حل: از آنجا که کم‌دقت‌ترین عدد $۳/۷$ است که دو رقم بامعنی دارد، نتیجه باید به ۲۵ که دو رقم بامعنی دارد، گرد شود.

مثال ۹: $۱/۵۰ \times ۶/۲۳۴$

راه حل: هر یک از اعداد بالا به ترتیب ۳ و ۴ رقم بامعنی دارند. پاسخ باید $۹/۳۵۱$ باشد. دوباره با اعمال قاعده، در نتیجه‌ی گرد کردن باید مقدار $۹/۳۵$ به دست آید.

مثال ۱۰: $۱۹/۳$ میلی‌لیتر از محلول ۰.۵۷۲۱% نرمال NaOH برای خنثی‌سازی ۲% میلی‌لیتر محلول HCl بکار برده شد. نرمالیت محلول HCl مورد استفاده را محاسبه کنید.

راه حل: در اینجا نرمالیت NaOH چهار رقم بامعنی دارد اما مقادیر حجم‌ها سه رقم بامعنی دارند، در نتیجه پاسخ نهایی باید کمترین تعداد ارقام بامعنی، یعنی ۳ عدد را داشته باشد. می‌دانیم که $N_1V_1 = N_2V_2$ پس:

$$N_{HCl} = ۳/۱۹ ,$$

$$N_{HCl} = ۰.۵۵۲\%.$$

ضمن محاسبه لگاریتم، بخش اعشاری لگاریتم (مانتیس) باید شامل تعداد ارقام بامعنی برابر با تعداد ارقام بامعنی موجود در عددی باشد که لگاریتم آن محاسبه می‌شود.

به عنوان مثال، $\log(۲/۰۰ \times ۱۰^۵) = ۵/۳۰۱۰۲۹۹۹۵۶$ است. از آنجا که عدد $۲/۰۰ \times ۱۰^۵$ دارای ۳ رقم بامعنی است، بخش اعشاری (مانتیس) نیز باید سه رقم بامعنی داشته باشد؛ بنابراین، پاسخ باید $۵/۳۰۱$ باشد.

به عنوان مثال، $\log(۲ \times ۱۰^۴) = ۴/۳۰۱۰۲۹۹۹۵۶$ است. اینجا، ۲×۱۰^۴ یک رقم بامعنی دارد بنابراین پاسخ باید $۴/۳$ باشد.

مثال ۱۱: ثابت‌های سرعت در دو دمای ۲۹۸ و ۳۳۳ کلوین به ترتیب $۵/۰۳ \times ۱۰^{-۲}$ و $۶/۷۱$ بر مول در دسی‌مترمکعب بر ثانیه هستند ($\text{mol}^{-۱}\text{dm}^۳\text{s}^{-۱}$). مقدار انرژی فعال‌سازی را با استفاده از عبارت زیر:

$$\ln \frac{k_{۳۳۳}}{k_{۲۹۸}} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{۱}{۲۹۸} - \frac{۱}{۳۳۳} \right), \quad (۸-۱)$$

محاسبه کنید.

راه حل: هر دو ثابت ۳ رقم بامعنی دارند، (از آنجا که $k_۲/k_۱ = ۱۳۳/۳۹$) در نتیجه نسبت $k_۲/k_۱$ نیز باید سه رقم بامعنی داشته باشد ($k_۲/k_۱ = ۱۳۳$). چون قاعده لگاریتم بیان می‌کند که بخش اعشاری (مانتیس) باید تعداد ارقام بامعنی مشابه با خود عددی که برای آن لگاریتم محاسبه

می‌شود، داشته باشد پس تعداد رقم‌های بامعنی در بخش اعشاری (مانتیس) باید ۳ باشد بدین شکل $\ln(k_2/k_1) = 983/4$ که مقدار $E_a = 88982/709 \text{ Jmol}^{-1}$ را نتیجه می‌دهد.

ضمن محاسبه لگاریتم معکوس^۱ (وارون لگاریتم) یک عدد، نتیجه باید تعداد رقم‌های بامعنی مشابه با بخش اعشاری (مانتیس) در لگاریتم داشته باشد. به‌عنوان مثال، $\text{antilog}(477/0) = 9991625/2$ که باید به ۳/۰۰ گرد شود. به‌عنوان مثال، $\text{antilog}(47/0) = 591209226/2$ که باید به ۳/۰ گرد شود.

مثال ۱۲: معادله آرنیوس^۲ بدین شکل ارائه می‌شود:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT} \quad (9-1)$$

با داشتن $A = 874/9$ و $E_a = 26/28 \text{ kJmol}^{-1}$ مقدار k در $298/15$ کلوین را محاسبه نمایید.

راه‌حل:

$$\ln k = 9991625/2 = 874/9 - (28/26 \times 10^3) / (9/314 \times 298/15) = 314/9 - 40/11 = -75266$$

بخش اعشاری (مانتیس) تنها یک رقم بامعنی دارد. پس با حل معادله برای k و به کار بردن قاعده ذکرشده در بالا، داریم،

$$k = e^{-75266} = 2/217 \text{ و یا تنها } 2/.$$

۱-۸-۳- عملیات ریاضی ترکیبی^۳

هنگامی که محاسبات شامل عملیات ترکیبی هستند، محاسبات باید با تعداد ارقام بامعنی بیشتر از آنچه برای رسیدن به یک مقدار، قابل توجه ضروری است، انجام شوند. بنا بر معیارهای قرارداد شده هر یک از مراحل پیشین مورد ارزیابی مجدد قرار می‌گیرند تا مشخص شود چه تعداد ارقام بامعنی باید در نتیجه‌ی نهایی باقی بمانند. گرد کردن‌های متوالی می‌تواند دقت نتایج را کاهش دهد. از این‌رو، همواره توصیه می‌شود تا برای پرهیز از خطا، هنگام انجام گرد کردن در هر مرحله از محاسبات یک

1. Anti-log
2. Arrhenius
3. Mixed mathematical operations

رقم بی معنی^۱ بیش تر از آنچه که قابل توجیه است، حفظ شود. سپس پاسخ نهایی به تعداد رقم های بامعنی مورد نظر گرد می شود. به عنوان نمونه،

$$x = (4/345 \pm 0.026) / 28/5 - 3/553 \times 10^{-3},$$

$$x = 0.14931016.$$

- ابتدا، $345/4 \pm 0.026 = 85.7/4$ (به جای $3566/4$ ، چون کم دقت ترین عدد سه رقم اعشاری دارد که باید در پاسخ باشد).

- دوم، $4/357 / 28/5 = 0.35$ (به جای $152877192/0$ زیرا کم دقت ترین عدد ۳ رقم بامعنی دارد).

- در انتها، $0.14931016 \pm 0.003553 = 0.153$ (به جای 0.149447 ، چون در تفریق، کم دقت ترین عدد که 0.153 است، سه رقم اعشاری دارد).

مقدار به دست آمده با حفظ همه رقم ها 0.14931016 است که اگر برای داشتن سه رقم بامعنی گرد شود برابر است با 0.15 یا $5/110^{-1} \times$ که جواب نهایی است.

۱-۹- گرد کردن ارقام بامعنی

گرد کردن اعداد برای حذف رقم های بی معنی با جایگزین کردن آن ها با صفرهای بی معنی انجام می شود. اگر رقم بی معنی ۰، ۱، ۲، ۳ و ۴ باشد آنگاه ضمن گرد کردن، شخص باید از مقدار آن صرف نظر کند. مقدار آخرین رقم بامعنی بدون تغییر باقی می ماند. اگر رقم بی معنی ۵، ۶، ۷، ۸ و ۹ باشد آنگاه مقدار آن بیشتر برآورد می گردد و ۱ واحد به آخرین رقم بامعنی اضافه می شود^۲.

مثال ۱۳: $2/568$ را تا ۳ رقم بامعنی گرد کنید.

راه حل: $2/568$ به $2/57$ گرد می شود. در این مورد، عدد بی معنی بزرگ تر از ۵ است پس راحت است که آن را به عدد بزرگ تر بعدی گرد کرد، اما اگر رقم بی معنی ۵ باشد، دو گزینه وجود دارد، به بالا یا پایین گرد کردن، زیرا در این صورت عدد بین دو دسته اعداد گرد شده قرار می گیرد.

1. Insignificant figure
2. Half up

مثال ۱۴: ۵۳۲۷۹۸ را تا ۲ رقم بامعنی گرد کنید.

راه حل: ۵۳۰۰، چون این عدد ممیز اعشاری ندارد، تعداد ارقام بامعنی ۲ است. اگر این عدد ۵۳۰۰ باشد (به محل ممیز اعشار دقت کنید) آنگاه ۴ رقم بامعنی خواهد داشت که صحیح نیست.

مثال ۱۵: اعداد زیر را گرد کنید:

(الف) ۲/۳۴۶۷ تا ۴ رقم بامعنی (ب) ۳/۶۵۴۱ تا ۴ رقم بامعنی

راه حل:

(الف) در ۲/۳۴۶۷ آخرین رقم بامعنی ۶ است و رقم بی‌معنی ۷ است. چون ۷ بزرگ‌تر از ۵ است، ۱ واحد به آخرین رقم بامعنی افزوده می‌شود و رقم بی‌معنی حذف می‌شود.
(ب) ۳/۶۵۴۱ به ۳/۶۵۴ گرد می‌شود. اینجا آخرین رقم بامعنی ۴ است درحالی‌که رقم بی‌معنی ۱ است که از ۵ کمتر است؛ بنابراین، باید آن را حذف کرد و تنها رقم‌های قبلی حفظ می‌شوند.
یک روش دیگر نیز برای گرد کردن وجود دارد. این به گرد کردن حول عدد ۵ می‌پردازد. این مقدار حد وسط بین مقدار تخمین کاهشی یا افزایشی است. در چنین مواردی، هنگامی که رقم بامعنی قبلی زوج است رقم ۵ به پایین گرد می‌شود و هنگامی که رقم بامعنی قبلی فرد است رقم ۵ به بالا گرد می‌شود.

مثال ۱۶: ۲/۶۳۷۵ را تا ۴ رقم بامعنی گرد کنید.

راه حل: اینجا، آخرین رقم بی‌معنی ۵ است درحالی‌که رقم بامعنی ۷ است که فرد است؛ بنابراین، گرد کردن ۲/۶۳۸ را نتیجه می‌دهد تا آخرین رقم بامعنی را زوج نماید (۷ به ۸).

مثال ۱۷: ۲/۳۱۴۵ باید تا ۴ رقم بامعنی گرد شود.

راه حل: اینجا آخرین رقم بی‌معنی ۵ است درحالی‌که رقم بامعنی در این حالت زوج (۴) است. از این‌رو، نباید آن را تغییر داد؛ بنابراین پاسخ باید مقدار ۲/۳۱۴ باشد.
** ارقام بی‌معنی اغلب به شکل یک حرف با اندازه کوچک نوشته می‌شوند مانند ۲/۳۴۵۷ که ۷ رقم بی‌معنی است و ۵ آخرین رقم بامعنی است.

۱-۱۰- مسئله هایی برای تمرین

۱. تعداد ارقام بامعنی را مشخص کنید:

(الف) $۲/۰۰۴۰$ ،

(ب) $۰/۰۸۳$ ،

(پ) $۵/۲۱ \times ۱۰^{-۵}$ ،

(ت) ۹۶۰۰ ،

(ث) $۷۵۰/۰۰$ ،

(ج) $۹/۸۰ \times ۱۰^۷$ ،

(چ) $۶/۰۲۳ \times ۱۰^{۲۳}$ ،

۲. اعداد زیر را گرد کنید:

(الف) $۶۵۰۹۲۱۳/۲۴۶$ تا ۳ رقم بامعنی،

(ب) $۰/۰۶۷۲۰۰۰$ تا ۱ رقم بامعنی،

(پ) $۹۲/۳۵۱۸$ تا ۳ رقم بامعنی،

(ت) $۰/۰۰۱۲۴۷۵$ تا ۳ رقم بامعنی،

(ث) $۰/۰۰۴۵۲۰$ تا ۲ رقم بامعنی،

(ج) $۵/۰۹۴۲$ تا ۲ رقم بامعنی،

(چ) ۳۲۳۹۱ تا (۱ رقم بامعنی تا ۶ رقم بامعنی)،

(ح) $۸۳/۸۱۰۴۸۲$ تا (۱ رقم بامعنی، ۲ رقم بامعنی و ۶ رقم بامعنی)،

(خ) $۰/۷۶۱۵$ تا ۲ رقم بامعنی،

(د) $۰/۹۵۶$ تا ۱ رقم بامعنی،

(ذ) $۸۹۴/۲$ تا ۱ رقم بامعنی،

(ر) $۸/۲۱۹۷$ تا ۱ رقم بامعنی،

(ز) $۳۹/۰۱۲۶$ تا ۱ رقم بامعنی،

(ژ) $۰/۰۲۴۷۷۷۹$ تا ۴ رقم بامعنی،

(س) $۸۵۱۶/۱۳۱$ تا ۲ رقم بامعنی،

(ش) $۰/۰۰۰۳۱۸۳۴۶۶۲$ تا ۲ رقم بامعنی.

۳. نتایج محاسبات زیر را به دست آورید:

(الف) $X = ۵۷۰/۱۹ + ۴/۶۲$ تا ۳ رقم بامعنی،

(ب) $Y = ۰۰۰۲۱۳۸/۰ - ۰۷۲۱۵/۰$ تا ۴ رقم بامعنی،

(پ) $Z = ۰۳/۰ \times ۰۸/۹۸$ تا ۱ رقم بامعنی،

(ت) $W = ۶۱۴۵۷/۴ \div ۵۶۸/۹$ تا ۴ رقم بامعنی،

(ث) $V = ۶۲/۰ \times ۸۶۲/۳$ تا ۲ رقم بامعنی،

(ج) $U = ۳۱۸۶/۲ \div ۵/۸۲$ تا ۳ رقم بامعنی،

(چ) $K = ۶۱۲۳۶۸ - ۷۱۲۳۶۸$ تا ۱ رقم بامعنی،

(ح) $A = (۱۲۶۷۳ \times ۱۰^۷) / (۳/۹۵ \times ۱۰^{-۴})$ ،

(خ) $F = (۱۴/۵ \times ۱۲) / (۳۵/۶ \div ۶/۰۹)$

(د) $L = ((۸/۳۲۵ \times ۱۰^۳) \times (۳/۱۷۲۹ \times ۱۰^{-۷})) / (۳/۹۶۴۱ \times (۷/۲۱۲۶ \times ۱۰^{-۵}))$ تا ۴ رقم بامعنی.

فصل دوم

عدم قطعیت‌ها و خطاها

۲-۱- مقدمه

اندازه‌گیری‌های کمیت‌های فیزیکی همواره با خطا همراه هستند زیرا هیچ چیزی را نمی‌توان با قطعیت اندازه‌گیری کرد. از این عدم قطعیت به عنوان خطا^۱ یاد می‌شود. خطا یک بیان ریاضی از عدم قطعیت است. خطا را نباید با اشتباه^۲ هم‌ارز دانست. اشتباه را می‌توان تصحیح کرد (مانند اشتباه ضمن محاسبات یا آماده‌سازی محلول یا خواندن نادرست مقدار و غیره). تجزیه و تحلیل خطا شناسایی، اندازه‌گیری و حذف خطا را تسهیل می‌نماید و روش‌های آزمایش تجربی را دقیق‌تر و توانمندتر می‌سازد. ضمن تقریب زدن‌ها و گرد کردن‌ها، مقادیر زیادی خطا در محاسبات وارد می‌شود. از این‌رو، آگاهی از ماهیت خطا و کمی ساختن خطا کمک می‌کند تا شیوه آزمایش موردنظر با اطمینان بیشتری تفسیر شود. به علاوه، اگر خطاها بیش از حدود مجاز باشند، آنگاه مشخص می‌شود که یک روش آزمایش یا مجموعه‌ای از مشاهدات خاص را باید حفظ کرد یا باید از آن‌ها صرف‌نظر کرد. تجزیه و تحلیل خطا هنگامی که درباره روش‌های عددی و محاسبات کامپیوتری؛ که صحت و دقت بیشتری نیاز دارند؛ صحبت می‌شود از اهمیت بیشتری برخوردار است.

خطاها به طور کلی در دو دسته خطاهای سیستماتیک (معین) و خطاهای تصادفی (نامعین) طبقه‌بندی می‌شوند. خطاهای معین را می‌توان تشخیص داد و تصحیح کرد درحالی‌که خطاهای تصادفی را نمی‌توان حذف کرد.

عدم قطعیت به ابهام در مورد اندازه‌گیری اشاره دارد. حتی با ابزارهایی که به درستی کالیبره شده‌اند (دماسنج، خط کش، ساعت‌ها و غیره)، هنگامی که اندازه‌گیری‌ها انجام می‌شوند، همواره یک حاشیه‌ای از ابهام وجود دارد. عدم قطعیت بازه مقادیر احتمالی است که یک کمیت فیزیکی می‌تواند ضمن اندازه‌گیری داشته باشد. هنگامی که نتایج تجربی گزارش می‌شوند، مقدار واقعی کمیت گزارش نمی‌شود بلکه بازه‌ای از مقادیر گزارش می‌شوند و سپس شخص باید مشخص کند که آیا مقادیر موردقبول در بازه مقادیر عدم قطعیت هستند یا خیر.

عوامل متعددی شامل دما، فشار، رطوبت و کالیبراسیون^۳ هستند که بر اندازه‌گیری‌ها اثرگذارند. هنگامی که اندازه‌گیری‌های متعددی برای یک کمیت فیزیکی یکسان انجام می‌شود، آنگاه در هر بار مقدار اندازه‌گیری اندکی متفاوت نسبت به سایر اندازه‌گیری‌ها به دست می‌آید. در واقع، عدم قطعیت به نتایج در یک محدوده مشخصی قابلیت اطمینان می‌بخشد (عدم قطعیت بازه قابل اطمینان نتایج را مشخص می‌نماید). برای کمی سازی ابهام موجود در اندازه‌گیری، باید دو اصطلاح، یعنی بازه^۴ و حد

-
1. Error
 2. Mistake
 3. Calibration
 4. Interval

اطمینان^۱ تعریف شوند. بازه، عرض حاشیه یا پهنای عدم اطمینان در اندازه‌گیری را نشان می‌دهد، درحالی‌که سطح اطمینان نشان می‌دهد که چقدر می‌توان مطمئن بود که مقدار واقعی در آن بازه یا حاشیه قرار دارد.

اندازه‌گیری = بهترین تقریب $\pm$ عدم قطعیت

به‌عنوان نمونه، یک سیم مسی ۳ متر طول با یک عدم قطعیت ۱۵ سانتی‌متری دارد (۱۵ m / %). که می‌تواند به‌صورت زیر نمایش داده شود

$$3 \text{ m} \pm 0.15 \text{ m} = \text{طول}$$

در اینجا طول سیم مسی به شکل $3 \text{ m} \pm 0.15 \text{ m}$ با میزان اطمینان ۹۵٪ گزارش می‌شود. این بدان معنی است که با قطعیت ۹۵٪ طول سیم مسی بین ۲/۸۵ و ۳/۱۵ متر است. در واقع هنگامی که در آزمایشگاه، دانشجویان داده‌ها را می‌خوانند، آن‌ها درصد خطا را محاسبه نمی‌کنند، بلکه درصد عدم قطعیت را محاسبه می‌کنند. خطا هنگامی محاسبه می‌شود که مقدار واقعی مشخص باشد و تقریباً دانستن مقدار واقعی حقیقی غیرممکن است.

عدم قطعیت از آنجاکه فرد می‌خواهد کیفیت اندازه‌گیری را بهبود ببخشد حائز اهمیت است. به همین دلیل است که هنگام کالیبراسیون یا انجام آزمایش، عدم قطعیت به‌عنوان معیاری از موفقیت و یا شکست باید ذکر شود. برای پرهیز از عدم اطمینان در اندازه‌گیری‌ها، اندازه‌گیری باید حداقل سه بار انجام شود. در نتیجه، خطایی که در اندازه‌گیری اول مورد توجه قرار نگرفته است ممکن است در دو اندازه‌گیری بعدی مشخص شود.

برای تأیید بیشتر اعتبار اندازه‌گیری‌ها ممکن است محاسبات آماری روی اندازه‌گیری‌ها انجام شود تا خطا و عدم قطعیت در داده‌ها به دست آیند. بر این اساس، اگر مجموعه‌ای از اندازه‌گیری‌ها انجام شوند، آنگاه میانگین^۲ همه اندازه‌گیری‌ها برآوردی از مقدار واقعی را به دست می‌دهد. تعداد بیشتر اندازه‌گیری‌ها ثبت‌شده (خوانش‌ها^۳)، میانگین بهتری که به مقدار حقیقی نزدیک‌تر خواهد بود، به دست می‌دهد. هنگامی که اندازه‌گیری‌های تکرار شده متفاوت‌اند، عدم قطعیت زیادی برای آن کمیت فیزیکی وجود دارد، (پراکندگی زیاد است) اما این احتمال نیز وجود دارد که میانگین تمام اندازه‌گیری‌ها بهترین برآورد مقدار واقعی را ارائه نماید. پراکندگی زیاد بیانگر آن است که تفاوت بسیاری میان مجموعه اندازه‌گیری‌ها ثبت‌شده برای یک آزمایش یکسان وجود دارد. روش متعارف کمی‌سازی میزان پراکندگی اندازه‌گیری‌ها انحراف معیار^۴ است. انحراف معیار نشان می‌دهد که چگونه

-
1. Confidence limit
 2. Average
 3. Readings
 4. Standard deviation

یک مشاهده از مقدار متوسط یا میانگین^۱ منحرف می‌شود. انحراف معیار عموماً از انحراف میانگین^۲ بزرگ‌تر است و بیشتر توسط متخصصین آمار و دانشمندان بکار برده می‌شود.

توزین یک قطعه آلیاژ مس را در نظر بگیرید که توزین آن سه بار تکرار شده است و هر بار مقدار جرم متفاوتی به دست آمده است به عنوان نمونه به ترتیب مقادیر، ۷/۲۱۳، ۷/۲۷۵ و ۷/۱۶۵ گرم. میانگین اندازه‌گیری‌های بالا ۷/۲۱۷ است:

$$(۱-۲) \quad \text{میانگین} = \frac{۷/۲۱۳ + ۷/۲۷۵ + ۷/۱۶۵}{۳} = ۷/۲۱۷.$$

انحراف میانگین معمولاً برای نمایش نتایج بدین شکل محاسبه می‌شود.

$$(۲-۲) \quad |۲۱۳/۱ - ۲۱۷/۱| = ۰۰۴/۰,$$

$$(۳-۲) \quad |۲۷۵/۱ - ۲۱۷/۱| = ۰۵۸/۰,$$

$$(۴-۲) \quad |۱۶۵/۱ - ۲۱۷/۱| = ۰۵۲/۰.$$

بر این اساس انحراف میانگین ۰/۳۸ محاسبه می‌شود.

$$(۵-۲) \quad \text{انحراف میانگین} = \frac{۰۵۲/۰ + ۰۵۸/۰ + ۰۰۴/۰}{۳} = ۰/۳۸,$$

بنابراین،

$$(۶-۲) \quad \text{درصد انحراف میانگین} = \frac{۰/۳۸}{۰/۳۸} \times ۱۰۰ = ۱۰۰\%$$

از این جهت، درصد انحراف میانگین ۱۰۰٪ است اما اغلب، انحراف معیار برای نمایش عدم قطعیت‌ها بکار برده می‌شود. همچنان که انحراف معیار عبارت است از:

$$(۷-۲) \quad s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}},$$

$$(۸-۲) \quad s = \sqrt{\frac{(۰۰۴/۰)^2 + (۰۵۸/۰)^2 + (۰۵۲/۰)^2}{۳ - ۱}},$$

$$s = ۰/۵۵/۰.$$

در نتیجه، درصد انحراف معیار ۵/۵٪ است که یک روش استاندارد و متداول‌تر برای نمایش انحرافات است.

1. Mean

2. Average deviation

- خطاهای سیستماتیک

خطاهای سیستماتیک خطاهایی هستند که منابع آن‌ها را می‌توان شناسایی نمود و از این‌رو قابل حذف هستند. خطاهای سیستماتیک اغلب منجر به مقادیر اندازه‌گیری شده‌ای می‌شوند که یا خیلی بالا و یا خیلی پایین هستند. این خطاها «خطاهای صفر» نیز نامیده می‌شوند که می‌توانند مثبت یا منفی باشند. به علاوه، می‌توان آن‌ها را در چهار نوع طبقه‌بندی کرد:

(۱) **خطاهای دستگاهی:** این نوع از خطا از کالیبراسیون ضعیف، قطعه معیوب دستگاه یا نوسان جریان برق سرچشمه می‌گیرد. یک دستگاه که به‌درستی کالیبره نشده، ممکن است به‌واسطه عوامل محیطی خطای صفر نمایش دهد که می‌تواند با کالیبره کردن دستگاه تصحیح شود. به‌عنوان نمونه، یک دماسنج که به‌درستی کالیبره نشده هنگام غوطه‌وری در آب جوش، دمای ۱۰۳ درجه سانتی‌گراد را نشان می‌دهد. پیت‌ها و بالن‌های حجمی، حجم‌های متفاوتی را در خود جای می‌دهند. از این‌رو، این نوع خطاها فقط خطا را در قرائت‌های بعدی بزرگ‌تر می‌کنند.

(۲) **خطای مشاهده‌ای یا خطای شخص:** این انواع خطاها به دلیل خطای شخص در جریان مشاهدات ایجاد می‌شوند. این خطاها ممکن است شامل موارد ذیل باشند: استفاده نادرست از دستگاه‌های آزمایشگاهی، توزین نامناسب و بی‌دقت، ابهام در قرائت مقادیر، قضاوت ضعیف یا پیش‌داوری یا ابهام رنگ از جمله اختلاف‌منظر در خواندن مقیاس متر، بالا و یا پایین خواندن سطح انحنای سیال^۱. این خطاها را می‌توان با آموزش و تجربه مناسب اصلاح نمود.

(۳) **خطای نظری:** اگر شخص به‌منظور ساده‌سازی در سامانه الگو (سیستم مدل^۲) برای یکی از شرایط تقریبی در نظر بگیرد، آنگاه خطای نظری ایجاد می‌شود. به‌عنوان نمونه، اگر فرد فرض کند که فشار جو مقدار قرائت‌شده دما را تغییر نمی‌دهد، آنگاه به‌طورقطع این خطای نظری را در قرائت‌ها وارد می‌نماید.

(۴) **خطای روش:** این نوع خطا زمانی روی می‌دهد که سامانه موردبررسی، اعم از شیمیایی یا فیزیکی، رفتار نامنظم و متغیر داشته باشد. برای نمونه، وقوع واکنش جانبی (مانند هم-رسوبی)، فرآیند، عدم انحلال رسوبات، تجزیه گونه‌ها، ثابت سرعت غیرمنتظره (آرام یا سریع)، بی‌ثباتی گونه‌های واکنش و غیره. این خطا از جدی‌ترین انواع خطاهاست که با توسعه روش‌های مناسب می‌توان آن را اصلاح کرد.

1. Meniscus

2. Model system

تمام خطاهای سیستماتیک بالا را به محض آنکه شناسایی شوند، می توان حذف نمود و به دنبال آن نتایج بهبود خواهند یافت.

- خطاهای تصادفی

خطاهای تصادفی، خطاهای نامعین نیز نامیده می شوند. این خطاها ممکن است در نتیجه تغییر ناگهانی در شرایط تجربی مانند تغییر در دما، رطوبت، جریان و موارد دیگر روی دهند. منابع چنین خطاهایی نامشخص هستند و از این رو، حذف آن ها دشوار یا غیرممکن است. این خطاها همچنین ممکن است در نتیجه ناتوانی شخص تحلیلگر (آزمایشگر) در بازآفرینی (بازخوانی) قرائت های مشابه روی دهد. خطاهای تصادفی از توزیع گاوسی تبعیت می کنند. برای نمونه، اگر وزن توپی چهار بار با استفاده از ترازوی اندازه گیری یکسانی، اندازه گیری شده باشد و نتایج به صورت ۲۰/۲۳، ۲۰/۲۵، ۲۰/۲۷ و ۲۰/۲۶ گرم به دست می آیند؛ بنابراین، برای اجتناب از این خطا، می توان تعداد قرائت های بیشتری انجام داد و سپس میانگینی از تمام مشاهدات محاسبه می شود.

۲-۲- عدم قطعیت مطلق و نسبی

عدم قطعیت را می توان مشابه خطای مطلق و نسبی به صورت عدم قطعیت مطلق و نسبی طبقه بندی کرد. عدم قطعیت مطلق پهنای نوار عدم قطعیت در یک اندازه گیری را منعکس می کند در حالی که عدم قطعیت نسبی، نسبت عدم قطعیت مطلق و مقدار اندازه گیری مربوط به آن است. عدم قطعیت نسبی مانند خطای نسبی بدون بُعد است.

مقدار اندازه گیری/عدم قطعیت مطلق = عدم قطعیت نسبی

عدم قطعیت نسبی $\times 100 =$ درصد عدم قطعیت نسبی

اینجا، باید اشاره شود که صحت همانند قطعیت نیست. در حالی که صحت کیفی است، عدم قطعیت کمی است. علامت مثبت-منفی ($\pm$) هنگام بحث در مورد خطاها و عدم قطعیت ها استفاده می شود.

-صحت^۱ و دقت^۲

صحت (درستی) نشان می‌دهد که مقدار مشاهده‌شده چه مقدار به مقدار حقیقی نزدیک است، درحالی‌که دقت نشان می‌دهد که مقادیر مشاهده‌شده متفاوت چه مقدار با یکدیگر هم‌خوانی دارند. دقت به‌عنوان تکرارپذیری^۳ نیز شناخته می‌شود. یک اندازه‌گیری ممکن است دقیق و ناصحیح (نادرست) باشد و برعکس. در علوم، صحت و دقت جزء جدایی‌ناپذیر اندازه‌گیری‌ها و محاسبات هستند. ضمن اندازه‌گیری، همیشه خطایی در ارتباط با هر مقدار وجود دارد، دقت حد یا پراکندگی خطا از مقدار واقعی را اندازه‌گیری می‌کند. این مستقل از مقدار صحیح حقیقی است. دقت (برای اندازه‌گیری) برحسب تعداد رقم‌ها بیان می‌شود ولی می‌تواند برحسب انحراف خطاها نیز بیان شود. یک اندازه‌گیری سه‌رقمی دقیق‌تر از یک اندازه‌گیری دورقمی است.

به‌عنوان نمونه، فرض کنید شش قرائت نمره‌های کسب‌شده توسط دانشجویان در یک آزمون عبارت‌اند از ۸/۱، ۸/۲، ۸/۵، ۸/۲، ۸/۵ و ۸/۵، اگر آن‌ها به‌اشتباه به‌صورت ۳/۱، ۳/۲، ۳/۵، ۳/۲، ۳/۲، ۳/۲ و ۳/۵ در فضای وب بارگذاری شوند.

آنگاه، نمراتی که ثبت‌شده‌اند همچنان دقیق هستند اما صحیح (درست) نیستند. اینجا صحت به‌شدت کاهش می‌یابد زیرا که نمرات واقعی و نمرات بارگذاری شده تفاوت‌های عمده‌ای دارند.

به‌صورت مشابه، خطا را نباید با عدم قطعیت اشتباه گرفت. درحالی‌که خطا تفاوت میان مقدار حقیقی و مقدار اندازه‌گیری شده است، عدم قطعیت کمی‌سازی ابهام (عدم اطمینان) در مورد مقدار اندازه‌گیری است. هر خطایی حاصل از یک منبع مشخص قابل تصحیح است اما وقتی منبع خطا نامشخص است، به چنین خطاهایی عدم قطعیت گفته می‌شود. ممکن است هرگز اندازه‌گیری کاملی که مقدار واقعی یک مقدار فیزیکی را نشان دهد، انجام نشود، ازاین‌رو اغلب اندازه‌گیری‌ها تقریب‌هایی از مقدار حقیقی هستند. درنتیجه، آنچه دانشمندان در آزمایش‌ها به آن علاقه‌مندند عدم قطعیت است.

۲-۳- انتشار عدم قطعیت^۴

خطاهای سیستماتیک را اگر منبع آن مشخص باشد می‌توان اصلاح کرد درحالی‌که خطاهای تصادفی را نمی‌توان اصلاح کرد. ازآنجا‌که محاسبات شامل اعدادی (از کمیت‌های فیزیکی) هستند که درجه

-
1. Accuracy
 2. Precision
 3. Reproducibility
 4. Propagation of uncertainty

مشخصی از عدم قطعیت (خطای تصادفی) با آن‌ها همراه است، عدم قطعیت‌ها هم در صورت داشتن واحدهای یکسان، می‌توانند ترکیب شوند. برای نمونه، هنگام اندازه‌گیری جرم عدم قطعیت نیز باید برحسب واحدهای جرم ذکر شود. این روند محاسبه‌ی یک کمیت با استفاده از کمیت‌های متعدد کاهش داده‌ها^۱ نیز نامیده می‌شود. این محاسبات شامل عملیات پایه ریاضی مانند جمع، تفریق، تقسیم و ضرب هستند. سپس ممکن است این عدم قطعیت به نتیجه نهایی محاسبات منتقل شود و از این‌رو انتشار عدم قطعیت نامیده می‌شود. به این فرایندها ترکیب عدم قطعیت‌ها نیز گفته می‌شود. انتشار عدم قطعیت‌ها در عملیات محاسباتی از قواعد ساده زیر تبعیت می‌کنند.

(۱) جمع و تفریق

هرگاه ضمن انجام جمع و تفریق، اگر e_1 ، e_2 و e_3 عدم قطعیت‌های مربوط به سه اندازه‌گیری به صورت $x + e_1$ ، $y + e_2$ و $z + e_3$ باشند، آنگاه عدم قطعیت مطلق (e) حاصل بدین شکل به دست می‌آید:

$$e = \sqrt{e_1^2 + e_2^2 + e_3^2}. \quad (9-2)$$

مثال ۱: سه مقدار a ، b و c به ترتیب به صورت $۱۶/۲ \pm ۰۲/۰$ ، $۴۶/۱ \pm ۱۵/۰$ و $۶۷/۴ \pm ۰۴/۰$ داده شده‌اند. مقدار متغیر d را که شکل معادله ۲-۱۰ برآورد می‌شود، تعیین کنید

$$d = a - b + c. \quad (10-2)$$

$$\text{راه حل: } d = ۱۶/۲ - ۴۶/۱ + ۳۷/۴ \pm e = ۰۷/۵ \pm e$$

۵/۰۷ پاسخ حسابی است و e عدم قطعیت مربوط به نتیجه است که با استفاده از معادله ۲-۹ قابل حصول است.

$$e = \sqrt{(۰۲/۰)^2 + (۱۵/۰)^2 + (۰۴/۰)^2} = ۱۵/۰, \quad (11-2)$$

این مقدار به عنوان عدم قطعیت مطلق شناخته می‌شود؛ بنابراین، نتیجه نهایی $d = ۰۷/۵ \pm ۱۵/۰$ خواهد بود.

به صورت مشابه، درصد عدم قطعیت به این صورت قابل محاسبه است.

$$\text{درصد عدم قطعیت} = \frac{۱۵/۰}{۰۷/۵} \times ۱۰۰ = ۰/۳\%, \quad (12-2)$$

بنابراین، نتیجه برحسب درصد عدم قطعیت برابر با $(\pm 0.7/5) (3\%)$ است.
 ** به جز ارقام بامعنی، یک رقم بی‌معنی اضافی (به صورت زیروند) در مقدار عدم قطعیت به منظور پرهیز از خطای گرد کردن بعدی در محاسبات، حفظ می‌شود.

مثال ۲: قرائت اولیه و نهایی یک بورت ضمن یک تیتراسیون به ترتیب $(\pm 0.3/0) 85/16$ میلی لیتر و $(\pm 0.3/0) 0.3/0$ میلی لیتر هستند. عدم قطعیت در حجم منتقل شده از بورت چقدر است؟
راه حل: از آنجاکه حجم منتقل شده تفاوت بین حجم اولیه و نهایی است، حجم جابجا شده عبارت است از:

$$85/16(\pm 0.3/0) - 0.3/0(\pm 0.3/0) = 82/16(\pm e), \quad (13-2)$$

به طوری که،

$$e = \sqrt{(0.3/0)^2 + (0.3/0)^2} = 0.42/0. \quad (14-2)$$

اینجا، اگرچه عدم قطعیت مربوط به هر قرائت $0.3/0$ است، عدم قطعیت برآیند ضمن انتقال حجم $0.4/0$ است.

برای گزارش عدم قطعیت چند رقم باید حفظ شود؟

(الف) عدم قطعیت‌ها اغلب تا یک رقم بامعنی ارائه می‌شوند. برای مثال، $0.2/0$ به جای $0.23/0$. تنها اگر عدم قطعیت با ۱ شروع شود، آنگاه در چنین مواردی عدم قطعیت تا دو رقم بامعنی بیان می‌شود. برای نمونه،

درست	$5/23 \pm 2/0$	نادرست	$5/23 \pm 23/0$
درست	$7/13 \pm 15/0$	نادرست	$7/13 \pm 1/0$
درست	$7/98 \pm 3$	نادرست	$7/98 \pm 2/3$

(ب) همچنین، اندازه‌گیری‌های تجربی به تعداد ارقام اعشاری مشابه با عدم قطعیت گرد می‌شوند. برای مثال،

درست	$3/45 \pm 1/0$	نادرست	$378/45 \pm 1/0$
------	----------------	--------	------------------

(پ) عدم قطعیت اندازه‌گیری‌ها باید هم‌پوشانی داشته باشند. تنها در صورتی که تفاوت‌ها خیلی بزرگ نباشند، اندازه‌گیری‌ها واقعی در نظر گرفته می‌شوند؛ در غیر این صورت، آن‌ها مشاهدات بی‌دقت و پراکنده در نظر گرفته می‌شوند.

برای نمونه، اندازه‌گیری‌های $۵۶/۰ \pm ۰۲/۰$ و $۶۸/۰ \pm ۰۲/۰$ در توافق با هم نیستند زیرا پراکندگی آن‌ها به هیچ وجه هم‌پوشانی نمی‌کند (مقادیر کمینه و بیشینه دو اندازه‌گیری به ترتیب $۵۸/۰$ و $۵۴/۰$) و ($۷/۰$ و $۶۶/۰$) هستند، درحالی‌که اندازه‌گیری‌های $۵۶/۰ \pm ۰۶/۰$ و $۶۸/۰ \pm ۰۷/۰$ هم‌پوشانی می‌کنند. اینجا دومین مجموعه از اندازه‌گیری‌ها واقعی و قابل قبول است. (ت) نتیجه باید تعداد ارقام بامعنی مشابه با کمیتی داشته باشد که کم‌دقت‌تر است. به عنوان نمونه، مساحت دایره با $A = \pi r^2$ محاسبه می‌شود که π به علت آنکه مقدار آن تا $۱۴۱۵۹۲۷۰۰/۳$ مشخص است، تعداد زیادی رقم بامعنی دارد، درحالی‌که r برابر با $۲/۵$ سانتی‌متر است؛ بنابراین نتیجه به کمیت کم‌دقت‌تر که r با تنها ۲ رقم بامعنی است، وابسته خواهد بود.

(۲) ضرب و تقسیم

ضمن عملیات حسابی مانند ضرب و تقسیم، ابتدا باید عدم قطعیت مطلق به درصد عدم قطعیت تبدیل شود و سپس عدم قطعیت بر حسب درصد عدم قطعیت بدین شکل تعریف می‌شود.

$$e = \sqrt{(\%e_r)^2 + (\%e_l)^2} \quad (۱۵-۲)$$

مثال ۳: عبارت زیر را ارزیابی کنید.

$$d = \frac{۳۶/۳ \pm ۰۴/۰}{۰۷/۱ \pm ۰۲/۰}, \quad (۱۶-۲)$$

راه حل: می‌توان عملیات بالا را برحسب درصد عدم قطعیت به صورت زیر نوشت:

$$d = \frac{۳۶/۳ \pm ۲/۱\%}{۰۷/۱ \pm ۸/۱\%}, \quad (۱۷-۲)$$

$$d = (۰۷/۱ \div ۳۶/۳) \pm e, \quad (۱۸-۲)$$

$$d = (۱۴/۳) \pm e, \quad (۱۹-۲)$$

که در آن،

$$e\% = \sqrt{(\%e_l)^2 + (\%e_r)^2}, \quad (۲۰-۲)$$

یا

$$\frac{\Delta e}{e} = \sqrt{\left(\frac{\Delta e_l}{e_l}\right)^2 + \left(\frac{\Delta e_r}{e_r}\right)^2}, \quad (۲۱-۲)$$

$$e\% = \sqrt{(2/1)^2 + (1/1)^2} = 1.41\%, \quad (22-2)$$

بنابراین،

$$d = (14/3) \pm 1.41\% \text{ (برحسب درصد عدم قطعیت).}$$

برای تبدیل معکوس به عدم قطعیت مطلق (و محاسبه Δe)، باید درصد عدم قطعیت در نتیجه ضرب شود بدین شکل که $0.7\% \approx 0.65\% = 14/3 \times 1.41\%$

$$d = 14/3 \pm 0.7\% \text{ (برحسب عدم قطعیت مطلق).}$$

(۳) عملیات ترکیبی

هنگامی که ترکیبی از عملیات حسابی مانند جمع و ضرب ارائه شود، در چنین مواردی، در صورت وجود عملگرهای جمع و تفریق ابتدا عملیات جمع و تفریق و سپس ضرب و تقسیم انجام می‌شوند.

مثال ۴: فرض کنید $a = 76/3 \pm 0.2\%$ ، $b = 42/1 \pm 0.7\%$ و $c = 3/2 \pm 0.4\%$ مقدار d را محاسبه کنید.

$$d = \frac{a - b}{c} \quad (23-2)$$

راه‌حل: بر این اساس d باید به صورت زیر باشد:

$$d = \frac{(76/3 \pm 0.2\%) - (42/1 \pm 0.7\%)}{3/2 \pm 0.4\%} \quad (24-2)$$

ابتدا، صورت کسر ارزیابی می‌گردد که چنین تعیین می‌شود:

$$(76/3 - 42/1) \pm e = 34/2 \pm e,$$

که،

$$e = \sqrt{(0.2\%)^2 + (0.7\%)^2} = 0.72\%. \quad (25-2)$$

بنابراین، مخرج کسر برابر است با:

$$34/2 \pm 0.2\% \text{ (برحسب عدم قطعیت مطلق)},$$

$$34/2 \pm 9\% \text{ (برحسب درصد عدم قطعیت).}$$

در نتیجه،

$$d = \frac{34/2 \pm 0.2\%}{34/2 \pm 9\%}, \quad (26-2)$$

$$d = \frac{34/2 \pm 0.2\%}{34/2 \pm 9\%} = 1.0 \pm 0.2\%, \quad (27-2)$$

که،

$$e = \sqrt{(9/0)^2 + (0/2)^2} = 19/2, \quad (28-2)$$

$$d = 115 \pm 19/2\%,$$

$$d = 15/1 \pm 0.25/0.$$

از آنجا که عدم قطعیت اولیه از مرتبه ۰/۰۱ جایگاه اعشاری است، نتیجه نیز باید تا ۰/۰۱ جایگاه اعشاری گرد شود.

(۴) حاصل ضرب توان‌ها^۱

اگر متغیرها شامل نماها^۲ مانند تابع زیر باشند:

$$z = x^m y^n. \quad (29-2)$$

در یک عبارت جمع ساده، عدم قطعیت در z به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\frac{\Delta z}{z} = |m| \frac{\Delta x}{x} + |n| \frac{\Delta y}{y}. \quad (30-2)$$

اگر از مربعات یا مربع سازی^۳ (ریشه مجموع مربع‌ها) استفاده شود، آنگاه می‌توان چنین نوشت:

$$\frac{\Delta z}{z} = \sqrt{\left(\frac{m\Delta x}{x}\right)^2 + \left(\frac{n\Delta y}{y}\right)^2}, \quad (31-2)$$

مثال ۵: فرض کنید $a = 672 \pm 2/0$ ، $b = 7/3 \pm 36/0$ و $c = 8/1 \pm 65/0$ مقدار d را ارزیابی کنید، اگر:

$$d = \frac{ab^2}{\sqrt{c}}. \quad (32-2)$$

راه حل: از عملیات حسابی نتیجه می‌شود:

$$d = 539/98 \pm e,$$

که e عبارت است از:

$$\begin{aligned} \frac{e}{539/98} &= \left(\frac{2/0}{672}\right) + 2\left(\frac{36/0}{7/3}\right) + 5/0\left(\frac{65/0}{8/1}\right) \\ &= 105/54, \end{aligned} \quad (33-2)$$

بنابراین،

$$d = 98 \pm 0.54.$$

1. Products of powers
2. Exponents
3. Quadrature

چون عدم قطعیت بسیار بزرگ است، تنها دو رقم بامعنی حفظ می‌شود و از عبارات بعد از ممیز اعشاری صرف‌نظر می‌شود.

اگر عدم قطعیت در X^2 مدنظر باشد، آنگاه ممکن است این کمیت به شکل $X \times X$ ارزیابی شود و باید قاعده ضرب مورد استفاده قرار گیرد اما در عوض قاعده توان‌ها برای نماها استفاده می‌شود؛ زیرا برای قاعده ضرب، متغیرها ضمن اندازه‌گیری‌ها باید مستقل از یکدیگر باشند مانند X و Y ، اما در مورد X^2 ، هر دو یکی هستند.

(۵) ضرب در یک مقدار ثابت

اگر هر نوع عدم قطعیتی در هر کمیت قابل‌اندازه‌گیری وجود داشته باشد و لازم است که کمیت در یک مقدار ثابت ضرب شود، آنگاه عدم قطعیت نیز در همان ثابت ضرب می‌شود.

مثال ۶: در صورتی که عدم قطعیت در اضلاع مربع 3.0 ± 0.4 cm باشد عدم قطعیت مرتبط با محیط مربع را محاسبه کنید.

راه‌حل: چون محیط $= 4 \times$ طول ضلع و با در نظر گرفتن قاعده ذکر شده در بالا، محیط باید 12 ± 1.6 cm باشد.

مثال ۷: فرض کنید $a = 3.0 \pm 0.3$ ، $b = 1.3 \pm 0.5$ و $c = 5.2 \pm 0.2$ مقدار z را بیابید

$$z = ab + c^3. \quad (2-34)$$

راه‌حل: در این مورد، ابتدا کمیت ab با خطاها محاسبه می‌شود و سپس c^3 . سپس این دو کمیت به صورت جداگانه با خطاهای مربوط آن‌ها جمع می‌شوند.

ab و c^3 ابتدا به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$ab = 3.9 \pm 0.9,$$

$$c^3 = 140.6 \pm 93.0,$$

بنابراین،

$$z = 144.5 \pm 8.1.$$

(۶) توابع نمایی و لگاریتمی

برای تابع $y = X^a$ ، درصد عدم قطعیت به این صورت به دست می‌آید.

$$\%e_y = a \cdot \%e_x. \quad (2-35)$$

به طور مشابه برای تابع $y = \log x$ ، عدم قطعیت در y به این صورت به دست می‌آید.

$$e_y = \frac{1}{\ln(10)} \frac{e_x}{x} \approx 4342/0 \frac{e_x}{x}. \quad (36-2)$$

به صورت مشابه، سایر توابع و عدم قطعیت‌های مربوط به آن‌ها جدول‌بندی می‌شوند (جدول ۱-۲).

جدول ۱-۲: توابع و عدم قطعیت مربوط به آن‌ها

تابع	عدم قطعیت	
$y = \ln x$	$e_y = \frac{e_x}{x}$	(۳۷-۲)
$y = 10^x$	$\frac{e_y}{y} = \ln(10) e_x \approx 3026/2 e_x$	(۳۸-۲)
$y = e^x$	$\frac{e_y}{y} = e_x$	(۳۹-۲)

مثال ۸: در تابع $y = \sqrt[3]{x}$ ، در صورتی که عدم قطعیت x برابر ۳٪ باشد، عدم قطعیت y چقدر است.
راه‌حل: با استفاده از معادله (۳۵-۲) عدم قطعیت y به صورت زیر خواهد بود

$$\%e_y = \frac{1}{3} (3\%) = 1\%.$$

مثال ۹: با استفاده از مقدار pH برابر با $0.3 \pm 0.18/4$ ، مقدار عدم قطعیت در $[H^+]$ را محاسبه کنید اگر،

$$pH = -\log[H^+]. \quad (40-2)$$

راه‌حل: می‌توان معادله (۴۰-۲) را به این شکل نوشت:

$$10^{-pH} = [H^+]. \quad (41-2)$$

قرار می‌دهیم $y = [H^+]$ به طوری که $x = -pH$

$$y = 10^{-4/18} = 6/6 \times 10^{-5},$$

$$\frac{e_y}{y} = \ln(10) e_x \approx 3026/2 e_x, \quad (38-2)$$

$$\frac{e_y}{6/6 \times 10^{-5}} = 3026/2 \times (0.3/0),$$

$$e_y = 4/0 \times 10^{-5}.$$

بنابراین عدم قطعیت در $[H^+]$ عبارت است از $[H^+] = 6/6(45/0) \times 10^{-5} M$.

مجموع مربعات^۱

به‌منظور ترکیب عدم قطعیت‌ها با استفاده از انحراف معیار، می‌توان f را که تابعی از $x, y, z, \dots$ است به‌صورت $f(x, y, z, \dots)$ بیان نمود، سپس عدم قطعیت f را با مشتق‌گیری جزئی از f نسبت به هر یک از متغیرها نوشت. پس دیفرانسیل کل عبارت است از:

$$df(x, y, z, \dots) = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) dy + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right) dz + \dots$$

ممکن است $dx, dy, dz, \dots$ را به‌صورت خطا در $x, y, z, \dots$ نوشت که عبارت‌اند از $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \dots$.

$$\Delta f(x, y, z, \dots) = \left|\frac{df}{dx}\right| \Delta x + \left|\frac{df}{dy}\right| \Delta y + \left|\frac{df}{dz}\right| \Delta z + \dots$$

اگر متغیرها فقط به x و y محدود شوند، آنگاه می‌توان نوشت:

$$\Delta f^2 = \left(\frac{df}{dx}\right)^2 \Delta x^2 + \left(\frac{df}{dy}\right)^2 \Delta y^2 + 2\Delta x \Delta y \frac{df}{dx} \frac{df}{dy}.$$

از آنجا که $\Delta x \Delta y$ بسیار کوچک است، خواهیم داشت:

$$\Delta f^2 = \left(\frac{df}{dx}\right)^2 \Delta x^2 + \left(\frac{df}{dy}\right)^2 \Delta y^2.$$

اگر انحراف معیارها تغییرات اندک در x و y باشند، آنگاه می‌توانیم معادله بالا را به صورت زیر

بنویسیم (روش انحراف معیار):

$$\sigma_f^2 = \left(\frac{df}{dx}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{df}{dy}\right)^2 \sigma_y^2,$$

$$\sigma_f = \sqrt{\left(\frac{df}{dx}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{df}{dy}\right)^2 \sigma_y^2}.$$

از این‌رو، در مجموع، عدم قطعیت‌ها برحسب انحراف معیارها چنین تعریف می‌شوند.

(۱) ضمن انجام جمع و تفریق، عدم قطعیت برآیند σ_r را می‌توان چنین نوشت:

$$\sigma_r = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2},$$

که در آن σ_x, σ_y و σ_z انحراف معیار مربوط به متغیرها هستند.

1. Summation of quadrature

(۲) به صورت مشابه، هنگامی که محاسبات شامل ضرب و تقسیم هستند، می توان عدم قطعیت را چنین نوشت:

$$\frac{\sigma_r}{r} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_z}{z}\right)^2}.$$

(۳) تابع نمایی $r = x^y$ به صورت

$$\frac{\sigma_r}{r} = y \left(\frac{\sigma_x}{x}\right).$$

(۴) تابع لگاریتمی $r = \log(x)$ به صورت

$$\sigma_r = 434/0 \left(\frac{\sigma_x}{x}\right).$$

(۵) لگاریتم معکوس $r = \text{anilog}(x)$ به صورت

$$\frac{\sigma_r}{r} = 303/2 \sigma_x.$$

۲-۴- عدم قطعیت های گرد کردن

ماشین حساب ها و نرم افزارهای صفحه گسترده مختلف ممکن است پاسخ محاسبات را با تعداد ارقام اعشار زیادی ارائه کنند. گاهی محاسبات با گرد کردن عدد تا چند رقم اعشار ساده تر می شوند. اگر عدم قطعیت در اولین رقم اعشار باشد، آنگاه اندازه گیری نیز باید در اولین رقم اعشار گزارش شود. به عنوان نمونه،

$$\text{نادرست } 0.2/3 \text{ m} \pm 15/0 \text{ m} \quad \text{درست } 0.3 \text{ m} \pm 15/0 \text{ m}$$

همواره توصیه می شود تا محاسبات حداقل تا یک رقم بامعنی بیشتر از آنچه مورد نیاز است انجام شوند. برای جلوگیری خطای گرد کردن، گرد کردن باید در انتهای محاسبات انجام شود. اگر گرد کردن در هر مرحله انجام می شود، آنگاه خطاهای گرد کردن در انتهای محاسبات تشدید می شوند. همچنان که پیش تر ذکر شد، طیف وسیعی از مقادیر برای یک کمیت فیزیکی ضمن اندازه گیری به واسطه عدم قطعیت وجود دارد. غالباً، مقادیر اندازه گیری شده حول مقدار میانگین در منحنی معروف زنگوله ای^۱؛ که توزیع نرمال^۲ (گاوسی^۳) نیز نامیده می شود؛ توزیع می شوند که در آن احتمال آنکه مقدار اندازه گیری شده نزدیک به متوسط (میانگین) قرار گیرد از احتمال آنکه در بخش های انتهایی منحنی باشد، بیشتر است.

1. Bell-shaped
2. Normal distribution
3. Gaussian

این توزیع را می‌توان با مفهوم انحراف معیار در آمار اثبات نمود.

مثال ۱۰: مقدار $۱۵۲/۰ \pm ۲۳۴۹/۶$ را گرد کنید.

راه‌حل: از آنجاکه عدم قطعیت با ۱ شروع می‌شود، ارقام بامعنی ۲ خواهد بود. همچنین، مقدار کمیت و عدم قطعیت باید تعداد ارقام اعشار یکسانی داشته باشند، بنابراین، پاسخ باید $۱۵/۰ \pm ۲۳/۶$ باشد.

مثال ۱۱: کمیت $t = ۴۲/۵ \times ۱۰^۶$ s که عدم قطعیت آن $\Delta t = ۳ \times ۱۰^۴$ s را گرد کنید.

راه‌حل: از آنجاکه کمیت و نیز عدم قطعیت آن به شکل نماد علمی ارائه شده‌اند، می‌توان آن را چنین نوشت که $۵/۴۲ \pm ۰۳/۰ \times ۱۰^۶$ s. نمایش کمیت و عدم قطعیت باید توان یکسانی از ۱۰ داشته باشند.

۲-۵- دسته‌بندی خطاها

اگرچه عدم قطعیت روش متداول‌تر در علوم است، هنوز گاهی اوقات دانشمندان درباره خطاها نیز صحبت می‌کنند، بنابراین هنگام کمی‌سازی خطاها بدین شکل طبقه‌بندی می‌شوند:

(۱) خطای مطلق و (۲) خطای نسبی

(۱) خطای مطلق

خطای مطلق (E_{abs}) به تفاوت بین مقدار حقیقی x و مقدار مشاهده‌شده a اشاره می‌کند.

$$E_{abs} = |x - a|.$$

(۲) خطای نسبی

خطای نسبی (E_{rel}) به صورت نسبت بین خطای مطلق و مقدار مطلق حاصل از مشاهده تعریف می‌شود. این کمیت بدون بُعد است:

$$E_{rel} = \frac{|x - a|}{a}.$$

این خطاها معمولاً به صورت درصد ($\times ۱۰\%$) یا کسرها، قسمت در هزار ($\times ۱۰۰۰$) یا قسمت در میلیون ($\times ۱۰^۶$) بیان می‌شوند.

مثال ۱۲: خطاهای مطلق و نسبی در تقریب ثابت عددی e ($e = ۷۱۸۲۸/۲$) را نشان دهید.

راه‌حل:

$$E_{abs} = |۷۷۲ - e| = ۰۰۸۲۸\%,$$

$$E_{rel} = \frac{|۲/۷۱ - e|}{e} = ۰۰۳\%.$$

نکته: هنگامی که خطاهای مطلق نامعین هستند، پس از آن‌ها « $\pm$ » قرار داده می‌شود و اگر معین باشند، آنگاه علامت اصلی پس از آن‌ها قرار می‌گیرد.

۲-۶- مسئله‌هایی برای تمرین

۱. کمیت‌های زیر را در شکل استاندارد عدم قطعیت به صورت $x + \Delta x$ بیان کنید.

(الف) $X = ۰.۵۶۷/۲۳$ و $\Delta X = ۳۲۷۹/۰$

(ب) $m = ۰.۱۳۶۲/۰ \text{ kg}$ و $\Delta m = ۴۱۸/۲ \times ۱۰^{-۳} \text{ kg}$

(پ) $a = ۲۷/۱۱ \times ۱۰^{۳۲}$ و $\Delta a = ۶۱۴۲/۳ \times ۱۰^{۳۰}$

(ت) $Y = ۱۷/۹ \times ۱۰^{-۳۳}$ و $\Delta Y = ۲۱۴۵/۳ \times ۱۰^{-۳۳}$

۲. کدام یک از موارد زیر دقیق‌تر هستند و چرا؟

(الف) π ، $۳/۱۳۹۲۸۴۲$ یا $۳/۱۴۱۷$

(ب) $۲/۷۱۸۲۸۲۰۱۳۵۴۲۳$ یا $۲/۷۱۸۲۸۱۸۲۸$ (به عنوان تقریبی از e).

فصل سوم
برخی توابع ریاضی

۳-۱- مقدمه

یک تابع ریاضی یک رابطه یا نمایشی از وضعیت موجود بین مجموعه‌ای از متغیرها (ی وابسته و مستقل) است. توابع برای ایجاد روابط در علوم، ضروری هستند. یک تابع ریاضی ممکن است به سادگی یک تابع خطی و یا به پیچیدگی یک تابع چندجمله‌ای باشد. این تابع ریاضی ممکن است به عنوان ابزاری برای تبدیل یک مقدار به مقدار دیگر در نظر گرفته شود. متغیر مستقل یک تابع اغلب آرگومان^۱ نامیده می‌شود؛ به‌ویژه در شیمی فیزیک که توابع ریاضی برای مدل‌سازی پارامترهای فیزیکی و استنتاج از مدل استفاده می‌شوند. تابع اغلب به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$y = f(x), \quad (1-3)$$

که بدین معنی است که y (متغیر وابسته) تابعی از x (متغیر مستقل) است.

۳-۲- طبقه‌بندی توابع

اگرچه انواع متعدد طبقه‌بندی وجود دارد، اینجا، تنها به طبقه‌بندی مقدماتی توابع اشاره می‌شود.

۳-۲-۱- تابع خطی

تابع خطی ساده‌ترین تابع در میان تمام توابع ریاضی است. این تابع بدین صورت نمایش داده می‌شود:

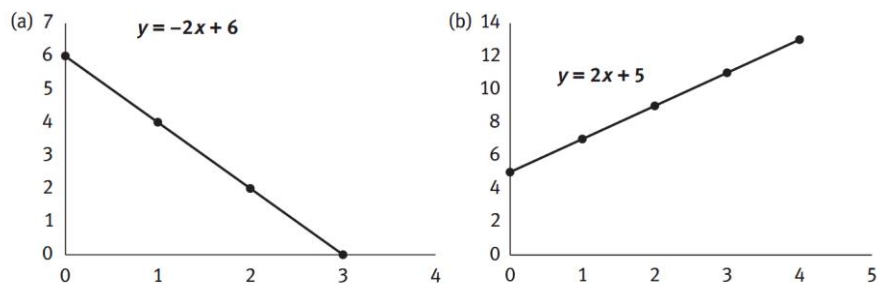
$$y = mx + c, \quad (2-3)$$

هنگامی که این تابع رسم شود، خط مستقیمی به دست می‌آید که در آن مقادیر c عرض از مبدأ و m شیب خط (شکل ۱-۳) هستند. اگر عرض از مبدأ صفر باشد (بدون عرض از مبدأ)، آنگاه خط از مبدأ مختصات می‌گذرد و اگر شیب صفر باشد، یعنی $y = c$ ، آنگاه خط افقی است.

شیب می‌تواند مثبت یا منفی باشد. شکل ۱-۳ (a) و (b) به ترتیب شیب‌های مثبت و منفی را نمایش می‌دهند. از آنجا که تابع به صورت خطی با x ، تغییر می‌کند این توابع چندجمله‌ای مرتبه اول نیز نامیده می‌شوند. شیب هر خط مستقیم را می‌توان با انتخاب دو نقطه تصادفی روی آن تعیین کرد. به عنوان نمونه، اگر دو نقطه (x_1, y_1) و (x_2, y_2) در نظر گرفته شوند وقتی که به صورت ریاضی نوشته شوند عبارت‌اند از:

$$y_1 = mx_1 + c, \quad (3-3)$$

1. Argument



شکل ۳-۱: معادله خط نشان‌دهنده شیب منفی (a) و شیب مثبت (b).

$$y_r = mx_r + c,$$

(۴-۳)

آنگاه

$$\Delta y = y_r - y_1 = m(x_r - x_1),$$

(۵-۳)

$$m = \frac{(y_r - y_1)}{(x_r - x_1)},$$

(۶-۳)

که m شیب خط واصل (وصل‌کننده) نقاط (x_1, y_1) و (x_r, y_r) است.

۳-۲-۲- تابع نمایی

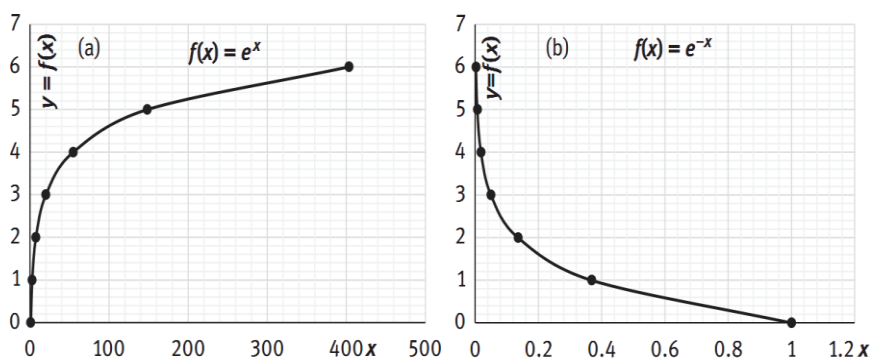
اغلب عبارت نمایی برای نشان دادن سرعت بالای افزایش یا کاهش استفاده می‌شود. در تابع نمایی، متغیر مستقل به صورت نمای یک مقدار ثابت دیگر یا مبنا (در این مورد b) ارائه می‌شود. این تابع می‌تواند چنین نمایش داده شود

$$y = b^x, \quad (۷-۳)$$

$$y = e^x,$$

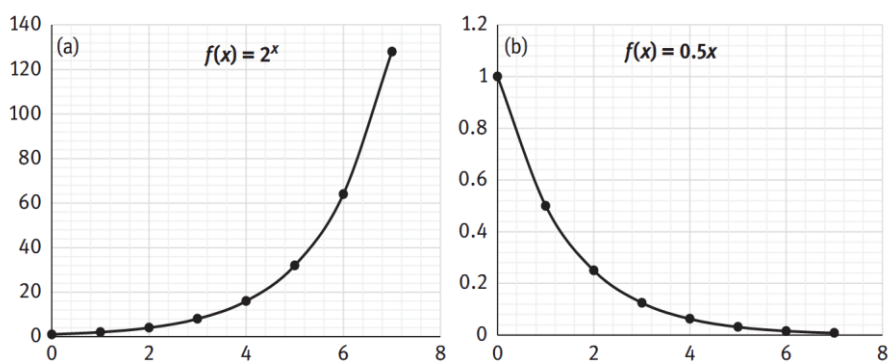
(۸-۳)

اگر $x = 0$ باشد، $y = 1$ ؛ اگر $x \rightarrow \infty$ آنگاه $y = \infty$ و اگر $x \rightarrow -\infty$ آنگاه $y = 0$ خواهد بود به طوری که x یک متغیر مستقل است (که می‌تواند در تمام بازه اعداد حقیقی تغییر کند) و y یک متغیر وابسته (به x) است. شکل ۳-۲ نمودار نمایی برای $y = e^x$ (a) و $y = e^{-x}$ (b) را نمایش می‌دهد.



شکل ۲-۳: تابع نمایی $f(x) = e^x$ (a) و $f(x) = e^{-x}$ (b).

اگر $b = 2$ باشد، آنگاه تابع به صورت $f(x) = y = 2^x$ است (شکل ۳-۳ (a)) و اگر $b = 1/5$ باشد، آنگاه تابع به صورت $f(x) = y = (1/5)^x$ است (شکل ۳-۳ (b)).



شکل ۳-۳: تابع نمایی $f(x) = 2^x$ (a) و $f(x) = (1/5)^x$ (b).

مثال 10^x را در نظر بگیرید که برای نمایش اعداد ده‌دهی (مبنای ده) بکار می‌رود که در آن x یک عدد صحیح است. با استفاده از حسابان^۱ (حسب دیفرانسیل و انتگرال)، می‌توان دریافت که در علوم، انتخاب طبیعی برای پایه b یک عدد گنگ^۲ به صورت:

-
1. Calculus
 2. Irrational number

شکل عمومی تر $y = e^{kx}$ نوشت. این عدد به نام عدد اویلر^۱ (e) نیز شناخته می‌شود که در قالب یک سری نامتناهی به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$e = 1 + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \dots, \quad (9-3)$$

$$e = ۲۷۱۸۲۸۱۸۲۸۴۵۹۰۴۵/. \quad (۱۰-۳)$$

برخی از نمونه‌های معادلات شامل تابع ریاضی نمایی عبارت‌اند از معادله بولتزمن^۲ برای توزیع جمعیت^۳ (تابع توزیع بولتزمن) (۱۱-۳)، معادله آرنیوس^۴ (۳-۱۲) و معادله فروپاشی رادیواکتیو نمایی (۳-۱۳):

$$N = N_0 \exp(-\Delta E/RT), \quad (۱۱-۳)$$

$$k = A \exp(-E_a/RT), \quad (۱۲-۳)$$

$$\lambda = \lambda_0 \exp(-k/T). \quad (۱۳-۳)$$

۳-۲-۳- تابع لگاریتمی

لگاریتم^۵ وارون تابع نمایی است. این تابع بیان می‌کند که یک عدد چند بار باید در خودش ضرب شود تا یک پاسخ بخصوص به دست آید. پایه‌ی لگاریتم مبنای اصلی طبقه‌بندی است. می‌توان پایه را بر اساس مبنای ۱۰ یا e نوشت.

(الف) لگاریتم پایه ۱۰

اگر پایه لگاریتم ۱۰ باشد آنگاه این توابع لگاریتم‌های معمولی^۶ (متعارفی) نامیده می‌شوند (شکل ۳-۴). برای مثال، $10^x = y$ ، آنگاه y لگاریتم معمولی x نامیده و با $\log_{10}(x)$ نمایش داده می‌شود. زیروند ۱۰ اغلب به‌منظور ساده‌سازی نوشته نمی‌شود. به‌عنوان نمونه، در شیمی، معادله pH عبارت است از:

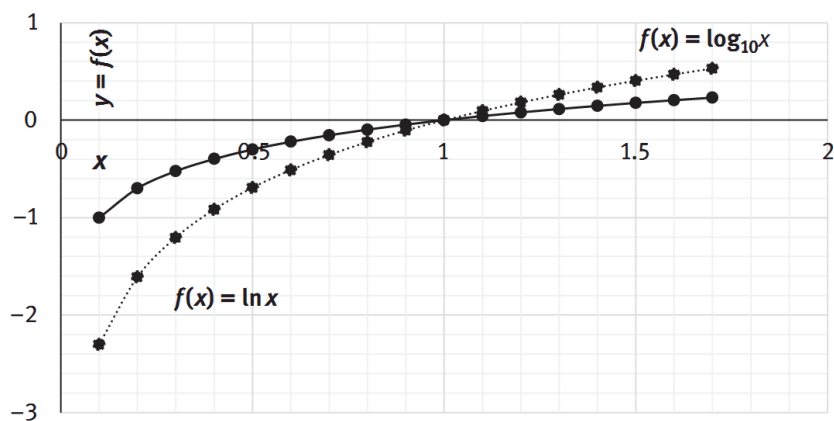
-
1. Euler's number
 2. Boltzmann's equation
 3. Population distribution
 4. Arrhenius's equation
 5. Logarithm
 6. Common logarithm

$$\text{pH} = -\log_{10} [\text{H}^+], \quad (14-3)$$

که برای سادگی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\text{pH} = -\log [\text{H}^+]. \quad (15-3)$$

هنگامی که پایه‌ای ذکر نشده است، آنگاه معمولاً چنین برداشت می‌شود که پایه 10 (a) است.



شکل ۳-۴: $f(x) = \ln x$ (خط نقطه‌چین) و $f(x) = \log_{10} x$ (خط توپر)

(ب) لگاریتم پایه e

اگر پایه لگاریتم e باشد آنگاه این تابع به‌عنوان لگاریتم طبیعی^۱ شناخته می‌شود.

$$\ln(x) = \log_e(x), \quad (16-3)$$

لگاریتم طبیعی وارون تابع نمایی زیر است:

$$y = e^x \quad (17-3)$$

بنابراین،

$$x = \ln(y), \quad (18-3)$$

$$\ln(e^x) = x. \quad (19-3)$$

یا

$$e^{\ln(x)} = x. \quad (20-3)$$

1. Natural logarithms

به عنوان نمونه، $\log_2 16 = 4$ بدین معنی است که ۲ (مقدار پایه) باید ۴ مرتبه در خود ضرب شود تا ۱۶ حاصل شود. شکل عمومی تر بدین صورت است

$$x = a^y \text{ یا } \log_a(x) = y, \quad (21-3)$$

که در آن a پایه لگاریتم است. لگاریتم وارون تابع نمایی است، بنابراین اگر پایه یکسان باشد می توان از هر دو صرف نظر کرد.

مثال ۱: تابع زیر را ساده کنید.

$$f(x) = \log_{10}(10^{2x+5}). \quad (22-3)$$

راه حل: چون نما و لگاریتم هر دو پایه یکسان ۱۰ دارند، یکدیگر را حذف می کنند.

بنابراین،

$$f(x) = 2x + 5. \quad (23-3)$$

مثال ۲: تابع زیر را ساده کنید.

$$f(x) = \log_3(3^x \times 9x^{100}). \quad (24-3)$$

راه حل: عبارت بالا را می توان بدین صورت ساده کرد.

$$f(x) = \log_3(3^x) + \log_3(9) + \log_3(x^{100}), \quad (25-3)$$

$$f(x) = x + 2 + 100 \log_3(x). \quad (26-3)$$

مثال ۳: تابع زیر را حل کنید.

$$f(x) = a^{\log_a(2x^2)+6}. \quad (27-3)$$

راه حل: تابع بالا را می توان چنین نوشت

$$f(x) = a^{\log_a(2x^2)} \times a^{6x}, \quad (28-3)$$

$$f(x) = 2x^2 \times a^{6x}. \quad (29-3)$$

* اگر پایه لگاریتم و نما متفاوت باشند، آنگاه هیچ کدام یکدیگر را حذف نمی کنند.

۳-۲-۴- چند جمله ای ها

چند جمله ای ها^۱ را می توان چنین نمایش داد.

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n, \quad (30-3)$$

و در شکل عمومی،

$$f(x) = \sum_{i=1}^n a_i x^n. \quad (31-3)$$

که در آن a_i یک مقدار ثابت و n یک عدد صحیح مثبت است. اگر $n = 1$ ، آنگاه این چند جمله ای یک تابع خطی (خط مستقیم) نامیده می شود:

$$(x) = a_0 + a_1x, \quad (32-3)$$

که شکل آن مشابه معادله زیر است.

$$y = mx + c. \quad (33-3)$$

اگر $n = 2$ ، آنگاه یک تابع مربعی^۲ (درجه دوم) نامیده می شود به صورت،

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2, \quad (34-3)$$

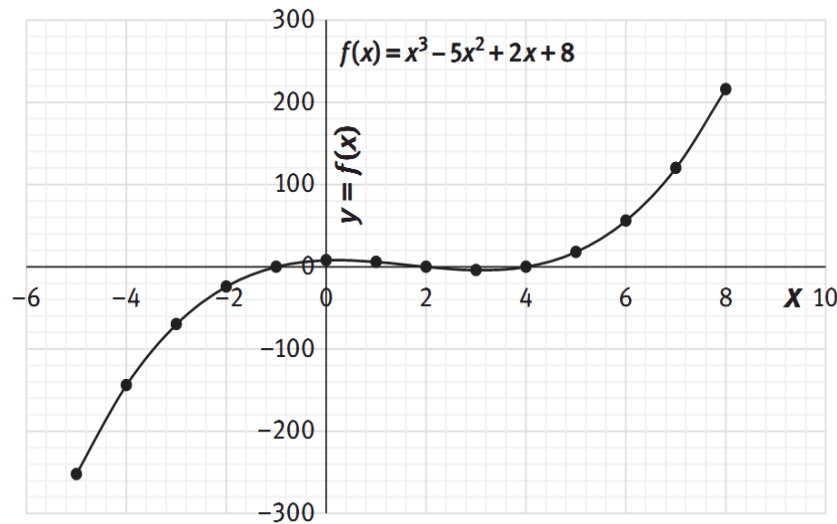
که به راحتی می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$f(x) = ax^2 + bx + c, \quad (35-3)$$

$$f(x) = x^2 + 5x + 6. \quad (36-3)$$

-
1. Polynomial
 2. Quadratic function

معادله درجه دو را می‌توان برای مقدار x به صورت $x = ((-b \pm \sqrt{D})/2a)$ حل نمود که در آن $D = b^2 - 4ac$ است. اگر $n = 3$ و $n = 4$ باشد، آنگاه چندجمله‌ای به ترتیب تابع مکعبی^۱ (درجه سه) و تابع درجه چهار^۲ نامیده می‌شود. یک تابع مکعبی ممکن است به صورت ترسیمی^۳ (شکل ۳-۵) و ریاضی به صورت زیر نمایش داده شود.



شکل ۳-۵: $f(x) = x^3 - 5x^2 + 2x + 8$

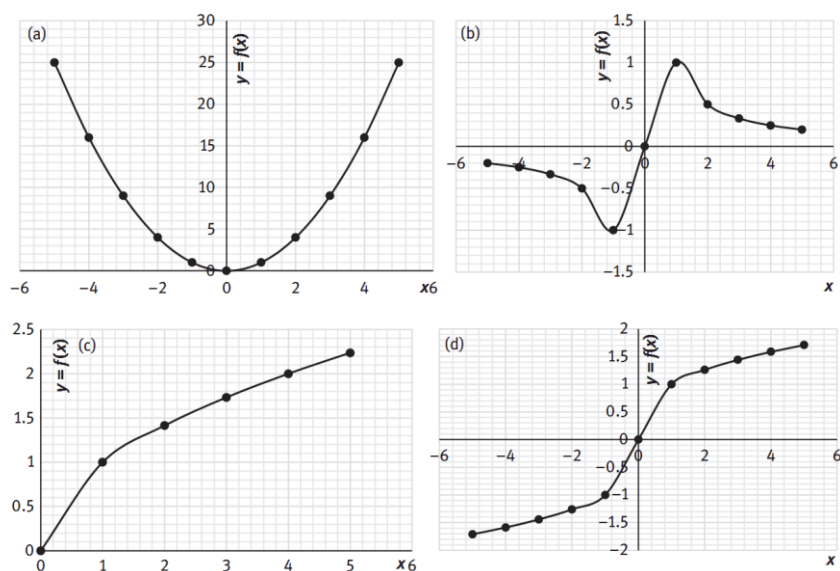
$$f(x) = x^3 - 5x^2 + 2x + 8 = (x - 2)(x + 1)(x - 4) \quad (3-37)$$

۳-۲-۵- تابع توان

امکان نمایش تابع توان^۴ به صورت $y = x^n$ وجود دارد که در آن n یک مقدار ثابت است. توابع خطی، مربعی، مکعبی و درجه چهار نمونه‌هایی از تابع‌های توان هستند. توابع معکوس^۵ و توابع ریشه^۶ (جذر) گاهی اوقات به عنوان دسته جداگانه‌ای در نظر گرفته می‌شوند، اما می‌توان آن‌ها را در رده

-
1. Cubic function
 2. Quartic function
 3. Graphically
 4. Power function
 5. Reciprocal function
 6. Root function

توابع توان نیز دسته‌بندی نمود همچنان که $y = \frac{1}{x}$ ، چون $y = x^{-1}$ ، $y = \sqrt{x}$ ، چون $y = x^{1/2}$ ، $y = \sqrt[3]{x}$ و به همین ترتیب. این توابع به صورت ترسیمی در شکل ۳-۶ نشان داده شده‌اند.



شکل ۳-۶: نمایش ترسیمی (a) $y = x^2$ ؛ (b) $y = \frac{1}{x}$ ؛ (c) $y = \sqrt{x}$ ؛ (d) $y = \sqrt[3]{x}$.

۳-۲-۶- دایره

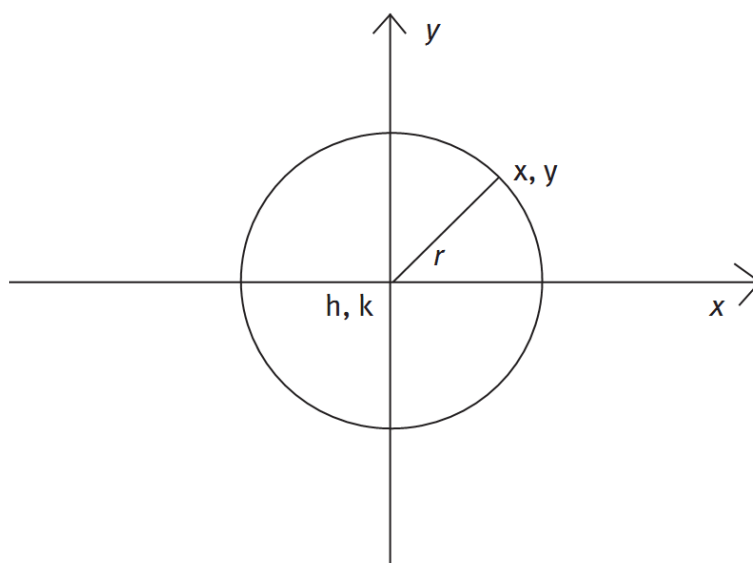
معادله یک دایره را می‌توان در شکل عمومی به صورت زیر نمایش داد:

$$(x - h)^2 + (y - k)^2 = r^2, \quad (3-38)$$

که در آن (h, k) مرکز و r شعاع دایره هستند (شکل ۳-۷).

اگر مرکز در مبدأ مختصات $(0, 0)$ باشد، آنگاه معادله به شکل زیر تبدیل می‌شود:

$$x^2 + y^2 = r^2. \quad (3-39)$$



شکل ۳-۷: معادله دایره $f(x) = x^2 + y^2 = r^2$

۳-۲-۷- عدد گویا

یک عدد گویا^۱ عددی است که از تقسیم یک عدد صحیح بر یک عدد صحیح دیگر (غیر صفر) به دست می‌آید. اگر دو تابع $A(x)$ و $B(x)$ به صورت زیر باشند:

$$A(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n, \quad (40-3)$$

$$B(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \cdots + b_mx^m, \quad (41-3)$$

در نتیجه $f(x)$ عبارت است از:

$$y = f(x) = \frac{A(x)}{B(x)} = \frac{a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n}{b_0 + b_1x + b_2x^2 + \cdots + b_mx^m}. \quad (42-3)$$

به عنوان مثال،

$$(43-3)$$

$$\frac{x-2}{x^2+2x-3}, \frac{1}{x}, \frac{x^2+2x-10}{x+1}, \frac{2x-3}{x-5}. \quad (44-3)$$

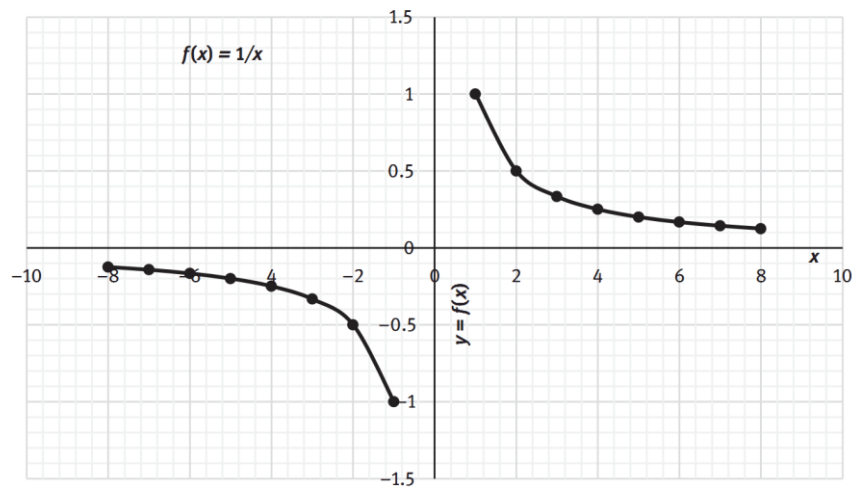
$$(45-3)$$

(۳-۴۶)

اگر $f(x) = y = \frac{1}{x}$ را در نظر گرفته شود، همچنان که از نمودار (شکل ۳-۸) می‌توان دید هنگامی که $x \rightarrow \infty$ ، آنگاه $y \rightarrow 0$ میل می‌کند.

به صورت مشابه، هنگامی که از سمت منفی $x \rightarrow 0$ ، $y \rightarrow \infty$ میل می‌کند. این نقطه $x = 0$ نقطه تکینگی^۱ نامیده می‌شود، به طوری که منحنی به محور y نزدیک می‌شود. محور y ، یعنی $x = 0$ ، مجانب^۲ منحنی نامیده می‌شود یا ممکن است بتوان گفت که منحنی به صورت مجانبی به خط $x = 0$ نزدیک می‌شود. تمام توابع گویا حداقل یک نقطه تکینگی دارند. به علاوه می‌توان گفت همچنان که از هر سمت $x \rightarrow \infty$ میل می‌کند، منحنی به محور y نزدیک می‌شود اما با آن تلاقی نمی‌کند؛ بنابراین اینجا $x = 0$ یک مجانب برای منحنی است.

و نیز، اگر درجه چندجمله‌ای در صورت کسر بزرگتر از مخرج کسر باشد، آن را تابع گویای ناسره^۳ می‌نامند و اگر درجه چندجمله‌ای در صورت کسر کوچکتر از مخرج کسر باشد آن را تابع گویای سره^۴ می‌نامند.



شکل ۳-۸: عدد گویای $y = \frac{1}{x}$.

۳-۲-۸- کسرهای جزئی

1. Point of singularity
2. Asymptote
3. Improper rational function
4. Proper rational function

گاهی اوقات خارج قسمت‌ها و معادلات مربعی (درجه دوم) در مخرج را می‌توان به بیش از یک شکل در قالب مجموعه‌ای از چندین کسر جزئی نمایش داد. این شیوه بیان خارج قسمت‌ها به صورت کسرهای جزئی در انتگرال‌گیری و حل معادلات دیفرانسیل کاربرد دارد. یک تابع گویا به شکل $A(x)/B(x)$ را می‌توان به ضرب عامل‌هایی از کسرهای جزئی ساده تجزیه کرد^۱ به طوری که

$$\frac{x+5}{(x-2)(x+3)} = \frac{A}{x-2} + \frac{B}{x+3} \quad (47-3)$$

$$\frac{x+5}{(x-2)(x+3)} = \frac{A(x+3) + B(x-2)}{(x-2)(x+3)}, \quad (48-3)$$

$$x+5 = A(x+3) + B(x-2), \quad (49-3)$$

اگر $x = -3$, $B = -2/5$ و اگر $x = 2$, $A = 7/5$ به دست می‌آید.

۳-۲-۹- توابع مثلثاتی

سه تابع مثلثاتی^۲ پایه به نام‌های سینوس^۳ ($\sin$), کسینوس^۴ ($\cos$) و تانژانت^۵ ($\tan$) وجود دارند. سایر توابع مثلثاتی عبارت‌اند از سکانت^۶ ($\sec$), کوسِکانت^۷ ($\csc$) و کُوتانژانت^۸ ($\cot$) که توابع مشتق شده هستند، به طوری که

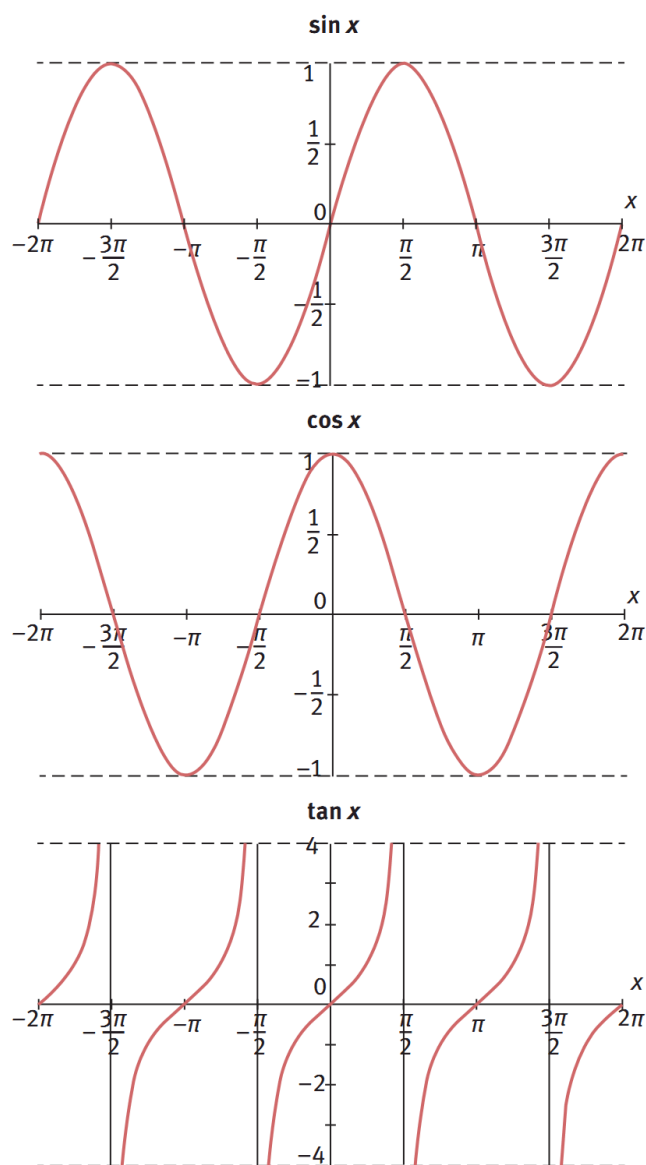
$$\csc \theta = \frac{1}{\sin \theta}, \quad (50-3)$$

$$\sec \theta = \frac{1}{\cos \theta}, \quad (51-3)$$

$$\cot \theta = \frac{1}{\tan \theta}, \quad (52-3)$$

نمودار این توابع به صورت زیر است (شکل ۳-۹).

-
1. Factorize into
 2. Trigonometric function
 3. Sine
 4. Cosine
 5. Tangent
 6. Secant
 7. Cosecant
 8. Cotangent



شکل ۳-۹: برخی توابع مثلثاتی (توابع سینوس، کسینوس و تانژانت).

برخی از اتحادهای مثلثاتی^۱ که اغلب مورد استفاده قرار می گیرند عبارتند از

$$\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1, \quad (۵۳-۳)$$

$$\operatorname{cosec}^2 \theta = 1 + \cot^2 \theta, \quad (۵۴-۳)$$

$$\sec^2 \theta = 1 + \tan^2 \theta, \quad (۵۵-۳)$$

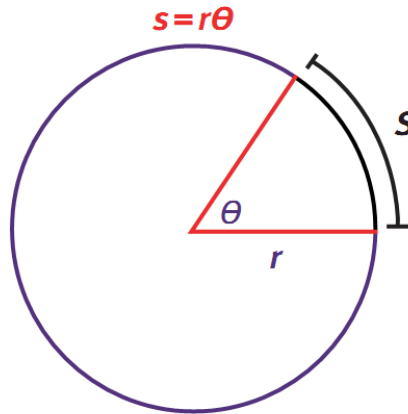
$$\sin a + \sin b = 2 \sin \frac{a+b}{2} \cos \frac{a-b}{2}, \quad (۵۶-۳)$$

$$\sin a - \sin b = 2 \cos \frac{a+b}{2} \sin \frac{a-b}{2}, \quad (۵۷-۳)$$

$$\cos a + \cos b = 2 \cos \frac{a+b}{2} \cos \frac{a-b}{2}, \quad (۵۸-۳)$$

$$\cos a - \cos b = -2 \sin \frac{a+b}{2} \sin \frac{a-b}{2}. \quad (۵۹-۳)$$

اغلب هر دو واحد درجه^۲ و رادیان^۳ به عنوان واحد زاویه بکار برده می شوند. رادیان واحدِ اس‌آی زاویه است (با نمادِ اس‌آی: rad). با مرجع قرار دادن دایره، یک رادیان برابر با زاویه (θ) مقابل به کمانی (با طول s) است که طول آن برابر با شعاع (r) دایره است (شکل ۳-۱۰). به بیانی دقیق تر، رادیان برابر است با نسبت طول کمان به شعاع دایره، یعنی:



شکل ۳-۱۰: زاویه متقابل به طول قوس

-
1. Trigonometric identities
 2. Degree
 3. Radian

$$\theta = \frac{s}{r} \quad (۳-۶۰)$$

از آنجاکه کمان با زاویه متناسب است، کل کمان محیطی دایره که برابر با $2\pi r$ است، زاویه 360° درجه را شامل می‌شود. بنابراین 360° درجه با 2π رادیان برابر است. در نتیجه،

$$1 \text{ رادیان} = \frac{360^\circ}{2\pi}, \quad (۳-۶۱)$$

$$1 \text{ رادیان} = \frac{180^\circ}{\pi} \text{ درجه}. \quad (۳-۶۲)$$

برای نمونه، زاویه 270° درجه برابر با $\frac{3\pi}{2}$ رادیان است.

۳-۲-۹-۱- توابع مثلثاتی وارون (معکوس)

توابع مثلثاتی وارون عیناً وارون توابع مثلثاتی هستند، یعنی، $\sin^{-1} x$, $\cos^{-1} x$, $\tan^{-1} x$, $\csc^{-1} x$, $\sec^{-1} x$ و $\tan^{-1} x$. این توابع که توابع ضد مثلثاتی نیز نامیده می‌شوند، برای یافتن زاویه مربوط به نسبت مثلثاتی موردنظر استفاده می‌شوند. پیشوند «آرک^۱» برای نمایش وارون تابع بکار می‌رود، مثلاً،

$$\sin^{-1} x = \arcsin(x), \quad (۳-۶۳)$$

$$\sin^{-1}\left(\frac{1}{6}\right) = \frac{\pi}{6}. \quad (۳-۶۴)$$

۳-۲-۹-۲- توابع مثلثاتی هذلولوی

توابع مثلثاتی هذلولوی^۲ شبیه^۳ توابع مثلثاتی هستند که برحسب توابع نمایی تعریف می‌شوند. شش تابع هذلولوی، به نام‌های، $\sinh x$, $\cosh x$, $\tanh x$, $\operatorname{sech} x$, $\operatorname{csch} x$ و $\coth x$ وجود دارند. همان‌طور که توابع مثلثاتی یک دایره را پارامتری‌سازی می‌کنند^۴، توابع مثلثاتی هذلولوی نیز هذلولوی را پارامتری‌سازی می‌کنند. توابع سینوس و کسینوس هذلولوی چنین نوشته می‌شوند.

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad (۳-۶۵)$$

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}. \quad (۳-۶۶)$$

-
1. Arc
 2. Hyperbolic trigonometric functions
 3. Analogous
 4. Parametrize

۳-۲-۱۰- سری تیلور

سری تیلور^۱ نمایشی از یک تابع حول نقطه (a) برحسب مشتقات آن است که می‌تواند به صورت جمع نامتناهی جملات چنین نوشته شود:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f^n(a) \frac{(x-a)^n}{n!} = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{1}{2!} f''(a)(x-a)^2 + \frac{1}{3!} f'''(a)(x-a)^3 + \dots \quad (۳-۶۷)$$

به طوری که $f'(x)$ و $f''(x)$ مشتقات اول و دوم $f(a)$ نسبت به x و $h = x - a$ هستند. به منظور نمایش تابع $f(x)$ برحسب یک چندجمله‌ای، باید آن را در نواحی نزدیک به $x = a$ تعریف کرد و هنگامی که تابع $f(x)$ به دفعات قابل مشتق‌گیری (مشتق‌پذیر) باشد، این چندجمله‌ای تقریب خوبی از تابع در ناحیه نزدیک به $x = a$ به دست می‌دهد.

طبق قضیه^۲ تیلور، اگر تابع برخی از شرایط از پیش تعریف شده را داشته باشد، این امکان وجود دارد که به صورت سری تیلور بیان شود. اگر $a = 0$ باشد، آنگاه بسط^۳ تیلور به سری مک‌لورن تبدیل می‌شود.

-
1. Taylor's series
 2. Theorem
 3. Expansion

۳-۲-۱۰-۱- سری مک‌لورن

سری مک‌لورن^۱ حالت ویژه‌ای از سری تیلور است که در آن تابع حول نقطه صفر ($a = 0$) بسط داده می‌شود:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(0) \frac{(x)^n}{n!} \quad (68-3)$$

$$= f(0) + f'(0)(x) + \frac{1}{2!} f''(0)(x)^2 + \frac{1}{3!} f'''(0)(x)^3 + \dots,$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}, \quad (69-3)$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n}, \quad (70-3)$$

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}. \quad (71-3)$$

توابع جبری^۲ و توابع متعالی (غیر جبری، فرا جبری)^۳

توابع جبری توابعی هستند که عملیات ساده جمع، تفریق، تقسیم و ضرب در مورد آن‌ها قابل استفاده‌اند، درحالی‌که توابع متعالی (متعالی به معنی فراتر از جبر) توابعی متفاوت از توابع جبری هستند. توابع متعالی را نمی‌توان به‌صورت پاسخ یک معادله چندجمله‌ای بیان نمود. توابع متعالی شامل توابع مثلثاتی، توابع معکوس، توابع هذلولوی، توابع لگاریتمی و نمایی هستند. این توابع را می‌توان به‌صورت جبری تنها برحسب سری‌های نامتناهی بیان نمود. به‌عنوان نمونه، e^x و π^x توابع متعالی هستند که می‌توانند برحسب سری‌های نامتناهی بیان شوند.

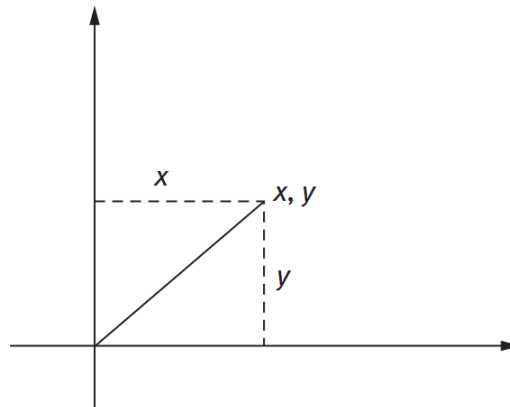
۳-۲-۱۱- دستگاه‌های مختصات

دستگاه مختصات از اعداد حقیقی برای توصیف موقعیت نقاط یا سایر عناصر هندسی در فضا (دو بُعدی یا سه بُعدی) استفاده می‌کند.

1. Maclaurin series
2. Algebraic function
3. Transcendental function (beyond algebra)

(الف) دستگاه مختصات دکارتی^۱

در دستگاه مختصات دکارتی، هر نقطه در صفحه؛ به صورت منحصر به فرد؛ با مجموعه‌ای از مختصات عددی بر حسب فاصله از دو خط عمود ثابت مشخص می‌شود. اگر سه خط دوجه دو متعامد در فضای سه بُعدی وجود داشته باشند، آنگاه می‌توان تعداد n مختصات در چنین فضای n -بُعدی به نام فضای اقلیدسی^۲ مشخص نمود. نقطه‌ای که این خطوط در آن تلاقی می‌کنند به عنوان مبدأ مختصات شناخته می‌شود (شکل ۳-۱۱).



شکل ۳-۱۱: مختصات دکارتی

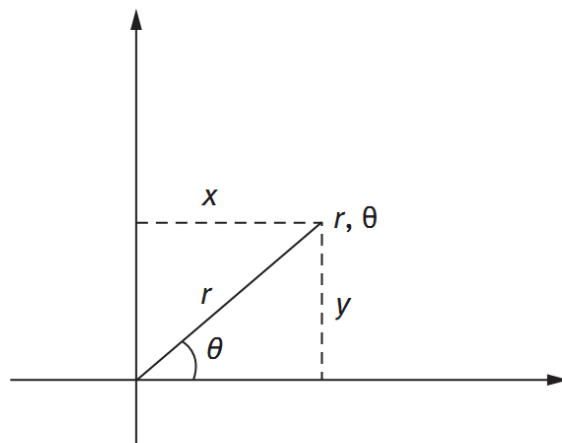
(ب) دستگاه مختصات قطبی^۳

دستگاه مختصات قطبی به یک دستگاه دو بُعدی مختصات اشاره می‌کند که در آن، یک نقطه به ترتیب با فاصله شعاعی^۴ و زاویه نقطه مورد نظر از نقطه و جهت مرجع مشخص می‌گردد (شکل ۳-۱۲):

$$x = r \cos \theta, \quad (۷۲-۳)$$

$$y = r \sin \theta. \quad (۷۳-۳)$$

-
1. Cartesian coordinate system
 2. Euclidean space
 3. Polar coordinate system
 4. Radial distance



شکل ۳-۱۲: مختصات قطبی

(پ) دستگاه مختصات کروی^۱

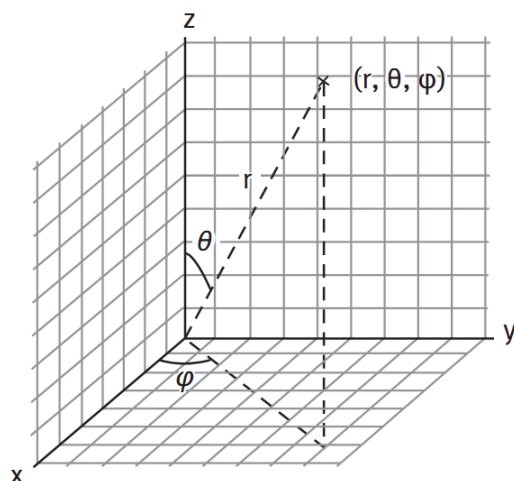
دستگاه مختصات کروی، دستگاه مختصاتی برای فضای سه بُعدی است که در آن یک نقطه از طریق سه عدد به نام‌های، فاصله شعاعی^۲ نقطه موردنظر از مبدأ مختصات (r)، زاویه قطبی^۳ (θ) اندازه‌گیری شده از یک جهت اوج^۴ (محور z) و زاویه سمت^۵ (φ) از تصویر متعامد^۶ آن روی صفحه مرجع صفحه xy مشخص می‌شود (شکل ۳-۱۳):

$$z = r \cos \theta \quad (۷۴-۳)$$

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad (۷۵-۳)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi. \quad (۷۶-۳)$$

-
1. Spherical coordinate system
 2. Radial distance
 3. Polar angle
 4. Zenith direction
 5. Azimuthal angle
 6. Orthogonal projection



شکل ۳-۱۳: مختصات کروی

۳-۲-۱۲- دستگاه اعداد

راه‌های متعددی برای نمایش یک عدد مانند اعداد صحیح و اعداد حقیقی وجود دارد. در حیطه علوم کامپیوتر، نوع متفاوتی از دسته‌بندی اعداد وجود دارد که عبارت است از

(الف) مبنای ده (ده‌دهی)^۱،

(ب) مبنای دو (دودویی)^۲،

(پ) مبنای هشت (هشت‌هستی)^۳،

(ت) مبنای شانزده (شانزده‌شانزدهی)^۴.

این مبناها را می‌توان به راحتی و بدون هیچ گونه از دست دادن مقدار عددی به یکدیگر تبدیل کرد.

-
1. Decimal
 2. Binary
 3. Octal
 4. Hexadecimal

(الف) دستگاه اعداد دهدهی

دستگاه اعداد دهدهی برای نمایش اعداد، ارقام ۰ تا ۹ را بکار می‌برد. چون این دستگاه ۱۰ عدد (۰-۹) را بکار می‌برد، دستگاه اعداد مبنای ۱۰ نامیده می‌شود. هر رقم بر اساس موقعیت آن ارزشی دارد که به آن ارزش مکانی^۱ گفته می‌شود. به‌عنوان نمونه،

$$\begin{aligned} ۸۹۵ &= ۸ \times ۱۰^۲ + ۹ \times ۱۰^۱ + ۵ \times ۱۰^۰ \\ &= ۸۰۰ + ۹۰ + ۵ \\ &= ۸۹۵. \end{aligned}$$

(ب) دستگاه اعداد دودویی (باینری)^۲

دستگاه اعداد دودویی یک دستگاه نوشتن اعداد برحسب دو نماد صفر و یک (باینری به معنی دو) است و اعداد در این دستگاه مبنای دو دارند. این دستگاه اعداد در دستگاه‌های الکترونیک، رقومی (دیجیتال) و کامپیوتر به‌عنوان زبان محاوره (واسط تبادل داده‌ها) استفاده می‌شود. تمام اطلاعات یا اعداد ابتدا به‌صورت دودویی تبدیل می‌شوند و سپس در حافظه کامپیوتر وارد می‌شوند. این دستگاه اعداد از نمادگذاری موقعیت مکانی^۳ استفاده می‌کند. به‌عنوان نمونه، عدد دودویی $(۱۰۰۰۱۰۱)_۲$ به عدد دهدهی تبدیل می‌شود.

در جدول ۱-۳، هر یک از بیت‌ها (ارقام دودویی) ارزش مکانی و وزن‌هایی مربوط به خود دارند که از مرتبه توان‌های ۲ است. این وزن‌ها شامل عدد ۲ به توان‌های متوالی موقعیت مکانی هر بیت هستند.

جدول ۱-۳: موقعیت و بیت‌ها برای تبدیل دودویی به دهدهی

موقعیت	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶
بیت	۱	۰	۱	۰	۰	۰	۱

عدد دودویی بدین‌صورت تبدیل می‌شود.

$$\begin{aligned} &= ۱ \times ۲^۶ + ۰ \times ۲^۵ + ۰ \times ۲^۴ + ۰ \times ۲^۳ + ۱ \times ۲^۲ + ۰ \times ۲^۱ + ۱ \times ۲^۰ \\ &= ۶۴ + ۴ + ۱ \\ &= (۶۹)_{۱۰}. \end{aligned}$$

به همین ترتیب یک عدد دهدهی را نیز می‌توان با تقسیم‌های متوالی بر ۲ تا زمانی که خارج‌قسمت^۴ صفر گردد به دستگاه اعداد دودویی تبدیل کرد. باقیمانده در هر بار تقسیم یادداشت می‌شود و به ترتیب معکوس در موقعیت‌های مکانی در مبنای دو ثبت می‌شود.

-
1. Place value
 2. Binary
 3. Positional notation
 4. Quotient

باقیمانده	مقسوم / خارج قسمت	مقسوم علیه
	۶۹	۲
۱	۳۴	۲
۰	۱۷	۲
۱	۸	۲
۰	۴	۲
۰	۲	۲
۱	۱	۲
	۰	

$$۶۹ = (۱۰۰۰۱۰۱)_۲$$

به طور مشابه، یک کسر اعشاری با ضرب های متوالی در ۲ تا صفر شدن جزء اعشاری به کسر دودویی تبدیل می شود.

	$۰/۸۷۵ \times ۲$
۱	$۰/۷۵۰ \times ۲$
۱	$۰/۵۰۰ \times ۲$
۱	$۰/۰۰۰$

(پ) دستگاه اعداد هشت هشتی (اُکتال)

دستگاه اعداد هشت هشتی برای نمایش مدارهای الکتریکی بکار می رود و در مقایسه با دستگاه اعداد دودویی فشرده تر (کم حجم تر و خلاصه تر) است. در دستگاه هشت هشتی، مبنای ۸ است. برای تبدیل یک عدد ده دهی به دستگاه هشت هشتی، این عدد، مشابه دستگاه دودویی تا زمان صفر شدن باقیمانده بر ۸ تقسیم می شود.

باقیمانده	مقسوم / خارج قسمت	مقسوم علیه
	۲۰۶۵	۸
۱	۲۵۸	۸
۲	۳۲	۸
۰	۴	۸

$(۲۰۶۵)_{۱۰}$ برابر با $(۴۰۲۱)_۸$ است.

به صورتی مشابه، می‌توان آن را در مسیر عکس به دستگاه دهدهی بازگرداند

$$\begin{aligned}
 &= 4 \times 8^3 + 0 \times 8^2 + 2 \times 8^1 + 1 \times 8^0 \\
 &= 2048 + 16 + 1 \\
 &= 2065.
 \end{aligned}$$

(ت) دستگاه شانزده‌شانزدهی (هگزادسیمال)^۱

دستگاه شانزده‌شانزدهی در مقایسه با دستگاه هشت‌هشتی و دودویی حتی فشرده‌تر است. مبنای اعداد ۱۶ است که به معنی کاربرد ۱۶ رقم یا نماد تک حرف است. ۱۰ رقم اول رقم‌های دستگاه دهدهی هستند (۰ تا ۹) و شش رقم باقیمانده (۱۰ تا ۱۵)؛ همچنان که نشان داده شده‌اند (جدول ۳-۲)؛ با A، B، C، D، E و F نشان داده می‌شوند. تبدیل اعداد دهدهی به شانزده‌شانزدهی مشابه روش‌هایی است که پیش‌تر برای دستگاه‌های دودویی و هشت‌هشتی ارائه شد.

به‌عنوان نمونه، ۵DB نمایش داده‌شده به‌صورت $(5DB)_{16}$ با عدد دهدهی $(720)_{10}$ برابر است.

جدول ۳-۲: مقایسه چهار دستگاه اعداد

دهدهی	شانزده‌شانزدهی	هشت‌هشتی	دودویی
۰	۰	۰	۰
۱	۱	۱	۱
۲	۲	۲	۱۰
۳	۳	۳	۱۱
۴	۴	۴	۱۰۰
۵	۵	۵	۱۰۱
۶	۶	۶	۱۱۰
۷	۷	۷	۱۱۱
۸	۸	۱۰	۱۰۰۰
۹	۹	۱۱	۱۰۰۱

ادامه جدول ۳-۲: مقایسه چهار دستگاه اعداد

دهدهی	شانزده‌شانزدهی	هشت‌هشتی	دودویی
۱۰	A	۱۲	۱۰۱۰
۱۱	B	۱۳	۱۰۱۱
۱۲	C	۱۴	۱۱۰۰
۱۳	D	۱۵	۱۱۰۱
۱۴	E	۱۶	۱۱۱۰
۱۵	F	۱۷	۱۱۱۱
۱۶	۱۰	۲۰	۱۰۰۰۰

۳-۳- مسئله‌هایی برای تمرین

۱. موارد زیر را ارزیابی کنید

(الف) $y = \log_2 5 + \log_2 6$,

(ب) $y = \log_2 \pi$

(پ) $y = \log_3(5^{-4})$.

۲. معادلات هم‌زمان زیر را برای x و y حل کنید.

$$2x + 7y = 23 \text{ و } 5x - 8y = -19$$

۳. معادله‌ای برای دایره‌ای که مرکز آن در $(2, 3)$ قرار می‌گیرد و شعاع آن ۵ سانتی‌متر است، بسازید.

۴. معادله حالت واندروالس^۱ را به صورت معادله مکعبی (درجه سه) برحسب V مرتب کنید.

$$\left(p + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

۵. مقدار c را به عنوان تابع صریحی از Λ_m بیان کنید، در صورتی که قانون کولراش^۲ برای رسانایی

مولار Λ_m یک الکترولیت قوی در غلظت‌های پایین (c) چنین بیان شود (به طوری که Λ_m^∞

رسانایی مولار در رقت بی‌نهایت است و b یک مقدار ثابت است).

$$\Lambda_m = \Lambda_m^\infty - b\sqrt{c}$$

1. Van der Waal's equation of state

2. Kohlrausch's law

فصل چہارم

آمار توصیفی

۴-۱- مقدمه

آمار توصیفی^۱ ابزارهایی در آمار است که داده‌ها را در برخی ضرایب تعریف شده خلاصه می‌کنند که می‌توانند نمایشی از مدل یا نتایج یک آزمایش باشند. آمار توصیفی به معیارهای گرایش مرکزی^۲ (توزیع حول یک نقطه میانی) و معیارهای تغییرپذیری (پراکندگی)^۳ تقسیم‌بندی می‌شود. این معیارها برای پیش‌بینی یا استنتاج خروجی‌های یک سیستم بکار می‌روند. این ابزار سیستم را با استفاده از داده‌ها توصیف می‌نماید. گاهی اوقات اصطلاح «جویدن و خرد کردن اعداد»^۴ برای توصیف این ویژگی‌ها بکار برده می‌شود. در علوم حجم عظیمی از داده‌ها تولید می‌شود که لازم است تا به صورت منطقی سازمان‌دهی و تفسیر شوند، در چنین مواردی آمار توصیفی با کمی سازی داده‌ها به ضرایب مفید به کمک می‌آید.

یک معیار گرایش مرکزی در آمار نشانگر تلاش برای یافتن یک موقعیت مرکزی در مجموعه داده‌ها یا در توزیع مقادیر است. گاهی اوقات آن‌ها را معیارهای موقعیت مرکزی یا آمار خلاصه^۵ نیز می‌نامند. این معیارها نشان می‌دهند که اغلب مقادیر مجموعه داده‌ها یا توزیع، یا آنچه که موقعیت مرکزی توزیع نامیده می‌شود، کجا قرار می‌گیرد. این مقدار مرکزی نماینده کل توزیع است. از این جهت، طبق تعریف، میانگین یا متوسط باید معرف میزان گرایش مرکزی باشد اما معرف‌های دیگری، به نام‌های، میانه^۶ و مُد^۷ نیز وجود دارند، زیرا میانگین اغلب کافی نیست و حتی گاهی اوقات همراه‌کننده است؛ بنابراین، تحت شرایط مختلف و انواع داده‌های متفاوت، انواع متفاوتی از معیارهای گرایش مرکزی استفاده می‌شوند. مقدار مرکزی یک مقدار منفرد است که ایده تقریب نرمال بودن را ارائه می‌دهد. معیارهای پراکندگی داده‌ها توسط انحراف معیار^۸ و واریانس^۹ کمی‌سازی می‌شوند، درحالی‌که مقادیر کمینه و بیشینه داده‌ها با استفاده چولگی^{۱۰} (معیاری از تقارن توزیع داده‌ها) و کشیدگی^{۱۱} تشریح می‌شوند.

-
1. Descriptive statistics
 2. Central tendency
 3. Variability (spread)
 4. Number crunching
 5. Summary statistics
 6. Median
 7. Mode
 8. Standard deviation
 9. Variance
 10. Skewness
 11. Kurtosis

این توصیف گرها به‌ویژه در تحقیقات مفیدند، به‌طوری‌که می‌توانند به شکل معناداری آزمایش را تفسیر کنند. همچنین، آن‌ها حجم داده‌ها را کاهش می‌دهند و داده‌ها را بهتر سازمان‌دهی می‌کنند. معمولاً فرد محقق ترجیح می‌دهد داده‌ها را تحلیل کند و خطا را کاهش دهد، اما کاهش داده‌ها و سپس تحلیل خطا راه هوشمندانه‌تری به نظر می‌رسد. نمی‌توان خطا را برای همیشه حذف کرد، ولی می‌توان آن را با آشکارسازی منابع خطا کاهش داد؛ اما گاهی اوقات خطا با تفسیر داده‌ها با شیوه‌ای متفاوت، کاهش می‌یابد.

به‌جای در نظر گرفتن ده مقدار اندازه‌گیری شده برای یک آزمایش، میانگین آن مقادیر (با داشتن رقم‌های بامعنی بیشتر)، ارجحیت دارد که به سبب آن داده‌ها کاهش می‌یابد و در نتیجه خطا نیز به کمترین مقدار می‌رسد. از این جهت، این پارامترهای آماری راهی برای کاهش داده‌ها هستند. برخی از توصیف گرهای متداول آماری در اینجا توضیح داده می‌شوند.

۴-۲- میانگین

میانگین یا متوسط رایج‌ترین معیار گرایش مرکزی است. میانگین برابر است با جمع تمام مقادیر در مجموعه داده‌ها تقسیم بر تعداد مشاهدات؛ بنابراین میانگین را می‌توان چنین نوشت

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_n}{n}, \quad (1-4)$$

یا

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}. \quad (2-4)$$

که در آن $\bar{x}$ میانگین است، $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ مشاهدات یا نقاط داده‌ها هستند و n تعداد کل نقاط داده‌ها است و Σ (حرف یونانی سیگما) بر مجموع مقادیر دلالت دارد. مجموع را می‌توان برای هر دو نوع داده‌های پیوسته و گسسته^۲ محاسبه نمود. میانگین بالا میانگین نمونه^۳ ($\bar{x}$) نامیده می‌شود در حالی که میانگین جمعیت^۴ با μ چنین نمایش داده می‌شود

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}. \quad (3-4)$$

در آمار، نمونه (داده‌های تصادفی انتخابی از جمعیت) و جمعیت (کل داده‌ها در جمعیت) معانی متفاوتی دارند هر چند هر دو به شیوه مشابهی محاسبه می‌شوند. میانگین شامل همه مقادیر موجود

-
1. Data reduction
 2. Continuous and discrete data
 3. Sample mean
 4. Population mean

در مجموعه داده‌ها است که ممکن است داده‌های خارج از محدوده (پرت، برون‌هسته)^۱ باشند یا نباشند؛ از این رو، احتمال خطا اغلب وجود دارد.

در جدول ۱-۴، وزن ۱۰ نفر (الف تا د) با وزن‌های متفاوت در نظر گرفته شده است. میانگین ۶۰ کیلوگرم به دست می‌آید که تفسیر درستی از تمامی وزن‌ها نیست زیرا در داده‌های خام کمترین وزن به کوچکی ۲۵ کیلوگرم است، در حالی که بیشترین وزن به بزرگی ۹۴ کیلوگرم است؛ بنابراین در این مورد میانگین تنها یک مقدار حد وسط^۲ است که انعکاس واقعی داده‌ها نیست و از این رو، روش مناسبی برای نمایش وزن متعارف نیست. در نتیجه، در این مورد، داده‌ها به یک سو منحرف شده است؛ بنابراین، معیارهای توانمندتر گرایش مرکزی مانند میانه استفاده می‌شوند. این معیار خطا در پیش‌بینی هر یک از مقادیر در مجموعه داده‌ها را به حداقل می‌رساند زیرا تمام نقاط داده را در محاسبات بکار می‌برد. دو نوع دیگر از میانگین هم وجود دارند.

جدول ۱-۴: نمونه وزن ۱۰ نفر.

شخص	الف	ب	پ	ت	ث	ج	چ	ح	خ	د
وزن (کیلوگرم)	۷۶	۶۳	۵۴	۹۴	۳۱	۴۰	۸۵	۷۳	۲۵	۵۹

۴-۲-۱- میانگین حسابی

میانگین حسابی^۳ به سادگی میانگین متوسط است. این کمیت با جمع کردن تمام مقادیر نقاط داده‌ها تقسیم بر تعداد مشاهدات به دست می‌آید. اگر داده‌های خام n اندازه‌گیری در اختیار قرار داده شوند، آنگاه

$$\bar{X} = \frac{\sum X}{n}. \quad (۴-۴)$$

گاهی اوقات داده‌ها با فراوانی^۴، یعنی تعداد دفعاتی که یک نقطه داده در مجموعه داده‌ها تکرار می‌شود، داده می‌شوند. میانگین در چنین مواردی بدین شکل محاسبه می‌شود.

$$\bar{X} = \frac{\sum f \cdot X}{n}. \quad (۵-۴)$$

به طوری که f فراوانی، X نقطه میانی بازه در هر دسته از نقاط و n تعداد مشاهدات هستند. میانگین محاسبه شده از داده‌های خام متفاوت از میانگین محاسبه شده از داده‌های پیوسته به همراه

1. Outliers
2. Mediocore
3. Arithmetic mean
4. Frequency

فراوانی است. میانگین زمانی که داده‌ها به یک سو منحرف شده‌اند یا هنگامی که مجموعه داده‌ها کوچک است مناسب نیست زیرا میانگین در برابر افت‌وخیزهای^۱ (نوسانات یا تغییرات) بین نمونه‌های مختلف مقاومت می‌کند.

۴-۲-۲- میانگین وزنی

میانگین وزنی^۲ زمانی محاسبه می‌شود که برخی نقاط داده وزن (اهمیت) بیشتری نسبت به بقیه نقاط داشته باشند. بدین جهت عبارت w_i به مقدار داده x_i نسبت داده می‌شود. در این صورت میانگین وزنی چنین محاسبه می‌شود

$$\text{میانگین وزنی} = \frac{\sum w_i x_i}{\sum w_i}. \quad (۴-۶)$$

۴-۲-۳- میانگین هندسی

میانگین هندسی^۳ به صورت میانگین حسابی نقاط داده برحسب یک مقیاس لگاریتمی تعریف می‌شود. این کمیت برای داده‌هایی که با تفسیر به صورت حاصل ضرب اعداد؛ و نه حاصل جمع (برخلاف میانگین حسابی)؛ کاربرد بیشتری دارند، مفید است. این کمیت به صورت ریشه n ام حاصل ضرب n مشاهده نیز تعریف می‌شود.

$$GM = \sqrt[n]{(x_1)(x_2)(x_3) \cdots (x_n)}, \quad (۴-۷)$$

$$\log(GM) = \frac{\sum \log x_i}{n}. \quad (۴-۸)$$

* اگر نقاط داده شامل صفر یا مقادیر منفی باشند، نمی‌توان میانگین هندسی را بکار بُرد.

۴-۲-۴- میانگین موزون

میانگین موزون (همساز)^۴ به صورت عکس میانگین حسابی مقادیر معکوس تعریف می‌شود.

$$HM = \frac{1}{AM} = \frac{1}{\frac{\sum (\frac{1}{x})}{n}} = \frac{n}{\sum (\frac{1}{x})}. \quad (۴-۹)$$

-
1. Fluctuation
 2. Weighted mean
 3. Geometric mean
 4. Harmonic mean

میانگین موزون زمانی استفاده می‌شود که عکس مقادیر مشاهدات اهمیت بیشتری از مشاهدات مستقیم داشته باشند. این معیار به‌ویژه برای تخمین متوسط اندازه نمونه در گروه‌ها که هر یک اندازه نمونه متفاوتی دارند، مفید است.

۳-۴- میانه

میانه^۱ مقدار مرکزی یا میانی در داده‌های توزیع است هنگامی که به ترتیب صعودی یا نزولی اندازه آن‌ها مرتب شوند. این کمیت داده‌های توزیع را به دو نیم تقسیم می‌کند. در صورت فرد بودن تعداد مشاهدات، مقدار میانی همان کمیت میانه است، درحالی که در صورت زوج بودن تعداد مشاهدات، میانگین دو مقدار میانی به‌عنوان میانه در نظر گرفته می‌شود. برخلاف میانگین، میانه به داده‌های خارج از محدوده (پرت) و منحرف‌شده به یک سو کمتر حساس است. این کمیت، بخصوص زمانی که داده‌ها متقارن نیستند، معیار برتر (ارجح) ارزیابی گرایش مرکزی است. داده‌های دمایی زیر (برحسب درجه سانتی‌گراد °C) برای مجموعه‌ای از یک آزمایش که به ترتیب نزولی مرتب شده‌اند را در نظر بگیرید.

$$۱۰۵, ۹۶, ۸۶, ۷۹, ۷۶, ۶۸, ۶۷, ۶۳, ۵۷, ۵۰,$$

در این حالت، تعداد کل مشاهدات فرد است، بنابراین میانه چنین تعریف می‌شود:

$$(۱۰-۴) \quad \left(\frac{N}{2}\right), \text{ اُمین مشاهده} = \text{میانه}$$

که در مورد بالا ۷۱ درجه سانتی‌گراد است ($N = ۱۱$ و $(N/2)$ اُمین مشاهده، داده ششم است). اگر تعداد مشاهدات به‌صورت زیر و زوج باشد:

$$۱۰۵, ۹۶, ۸۶, ۷۹, ۷۶, ۶۸, ۶۷, ۶۳, ۵۷, ۵۰,$$

آنگاه میانه را چنین تعریف می‌شود:

$$(۱۱-۴) \quad \left(\frac{N}{2}\right), \text{ اُمین مشاهده} + \left(\frac{N+1}{2}\right), \text{ اُمین مشاهده} \\ \text{میانه} = \frac{\quad}{2},$$

یعنی، میانگین دو مشاهده میانی در نظر گرفته می‌شود، به‌طوری که $N/2$ اُم و $N + 1/2$ اُم، موقعیت داده‌های مشاهدات هستند؛ بنابراین در مورد نمونه بالا میانه عبارت است از:

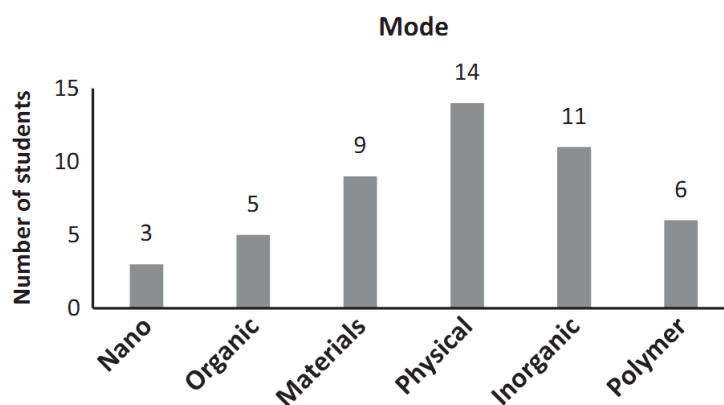
$$\text{میانه} = \frac{۷۶ + ۷۱}{2},$$

$$\text{میانه} = ۷۳/۵^{\circ}\text{C}.$$

۴-۴-۴-۴-۴

مُد^۱ فراوان‌ترین مشاهده انجام‌شده در مجموعه داده‌ها است. مزیت استفاده از مُد به‌عنوان معیار گرایش مرکزی آن است که می‌توان آن را برای هر دو نوع داده‌های عددی و غیر-عددی (رسته‌ای^۲) بکار بُرد. این معیار اغلب برای داده‌های رسته‌ای بکار می‌رود. به‌صورت ترسیمی، یک بافت‌نگار (هیستوگرام)^۳ برای نمایش مجموعه داده‌ها استفاده می‌شود که در آن بلندترین نوار نشانگر مُد است؛ اما گاهی اوقات، ممکن است دو مقدار/متغیر که فراوانی یکسانی دارند (به تعداد دفعات واحد تکرار می‌شوند) وجود داشته باشند؛ در چنین مواردی، مُد مفید نیست. گاهی اوقات، مُد بسیار فراتر از گرایش یا ناحیه مرکزی قرار می‌گیرد و از این‌رو ایده و تصویر دقیقی از مجموعه داده‌ها ارائه نمی‌دهد.

شکل ۴-۱، تعداد دانشجویانی که به موضوع مورد علاقه خود رأی داده‌اند را نمایش می‌دهد. می‌توان به‌روشنی دید که انتخاب عمومی دانشجویان شیمی فیزیک است تا شیمی معدنی (زیرا اغلب دانشجویان به آن رأی داده‌اند). کمترین تمایل مربوط به انتخاب نانوشیمی است.



شکل ۴-۱: هیستوگرام نشان‌دهنده مُد

-
1. Mode
 2. Categorical data
 3. Histogram

۴-۵- انحراف معیار

هنگامی که مجموعه‌ای از مشاهدات برای اندازه‌گیری یکسانی انجام می‌شوند آنگاه مقادیر اندازه‌گیری شده حول مقدار مرکزی (به نام میانگین) جمع می‌شوند. انحراف معیار^۱، انحراف مشاهدات از مقدار میانگین یا چگونگی پراکندگی مشاهدات در هر یک از دو سوی میانگین را توصیف می‌کند. انحراف معیار بزرگ‌تر بیانگر داده‌هایی با پراکندگی وسیع‌تر است. معمولاً جمعیتی از N نقطه داده وجود دارد که در آن اطلاعات هر نقطه داده مشخص است و برای آن‌ها انحراف معیار (σ) چنین تعریف می‌شود

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2}{N}}, \quad (12-4)$$

به‌طوری‌که N به تعداد کل نقاط داده یا مشاهدات در جمعیت موردنظر اشاره دارد، x_i مشاهده i ام است و μ میانگین جمعیت از N مشاهده است؛ اما گاهی اوقات دسترسی به داده‌های کل جمعیت دشوار است؛ ازاین‌رو یک نمونه از جمعیت (بخش یا زیرمجموعه‌ای از جمعیت) انتخاب می‌شود که به‌عنوان تقریبی از پارامتر جمعیت در نظر گرفته می‌شود. در مقام مقایسه تفاوتی بین انحراف معیار نمونه و جمعیت وجود دارد. برای نمونه، انحراف معیار (ها) چنین تعریف می‌شوند

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}, \quad (13-4)$$

به‌طوری‌که $\bar{x}$ به میانگین نمونه برای n مشاهده اشاره دارد. همچنان که $n \rightarrow N$ میل می‌کند، انحراف معیار نمونه به انحراف معیار جمعیت نزدیک می‌شود، یعنی، $s \rightarrow \sigma$.

۴-۶- واریانس

واریانس^۲ (وردایی) پراکندگی حول میانگین را ارزیابی می‌کند. این کمیت مربع انحراف از میانگین است. ممکن است این کمیت به‌صورت توان دوم انحراف استاندارد تعریف شود. برای یک جمعیت معین دارای N نقطه داده، واریانس عبارت است از

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2}{N}. \quad (14-4)$$

-
1. Standard deviation (Std dev.)
 2. Variance

پارامتر دیگری همانند واریانس به نام کوواریانس^۱ (هم‌وردایی) وجود دارد. کوواریانس بیان می‌کند که چگونه دو متغیر با هم تغییر می‌کنند. این کمیت میزان همبستگی بین دو متغیر را می‌سنجد که در آن

$$\text{Cov}(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{N - 1} \quad (15-4)$$

۴-۷- ضریب تغییرات

ضریب تغییرات^۲ به صورت نسبت انحراف استاندارد به میانگین تعریف می‌شود. این کمیت نمایانگر میزان تغییرپذیری^۳ نسبت به میانگین جمعیت یا نمونه است. این کمیت؛ که تحت عنوان انحراف معیار نسبی نیز شناخته می‌شود؛ برای مقایسه پراکندگی یک توزیع مفید است. ضریب تغییرات اغلب در شیمی تجزیه کاربرد پیدا می‌کند.

$$CV = \frac{\sigma}{\mu} \quad (16-4)$$

هر قدر مقدار ضریب تغییرات (CV) بزرگ‌تر باشد، پراکندگی داده‌ها حول میانگین بیشتر است. هر چقدر ضریب تغییرات (CV) کوچک‌تر باشد، توزیع همسان‌تر (یکدست‌تر) است. به عنوان مثال، دو مجموعه داده (الف و ب) به صورت زیر ارائه شده‌اند:

جدول ۴-۲: تحلیل ضریب تغییرات

ضریب تغییرات (CV)		انحراف معیار (Std dev.)	
مجموعه الف	۱	۲	۳
مجموعه ب	۲۳	۲۴	۲۵
	۲۶	۲۷	۲۸
	۲۹	۳۰	۳۱
	۳۲	۳۳	۳۴
	۳۵	۳۶	۳۷
	۳۸	۳۹	۴۰
	۴۱	۴۲	۴۳
	۴۴	۴۵	۴۶
	۴۷	۴۸	۴۹
	۵۰	۵۱	۵۲
	۵۳	۵۴	۵۵
	۵۶	۵۷	۵۸
	۵۹	۶۰	۶۱
	۶۲	۶۳	۶۴
	۶۵	۶۶	۶۷
	۶۸	۶۹	۷۰
	۷۱	۷۲	۷۳
	۷۴	۷۵	۷۶
	۷۷	۷۸	۷۹
	۸۰	۸۱	۸۲
	۸۳	۸۴	۸۵
	۸۶	۸۷	۸۸
	۸۹	۹۰	۹۱
	۹۲	۹۳	۹۴
	۹۵	۹۶	۹۷
	۹۸	۹۹	۱۰۰

همچنان که از جدول ۴-۲ مشهود است، اگرچه هر دو مجموعه انحراف معیار یکسانی از مقدار میانگین خود دارند، ضریب تغییرات مربوط به آن‌ها (به ترتیب ۵۳٪ و ۶٪) متفاوت است زیرا میانگین‌های مختص هر یک از آن‌ها متفاوت هستند.

مثال ۱: نمونه‌ای از هماتیت برای تعیین درصد آهن در نمونه بررسی شد. اندازه‌گیری‌ها به طور مکرر انجام شد تا از مقدار واقعی اطمینان حاصل شود، مقادیر عبارت‌اند از:

۹۴/۴۲، ۹۲/۴۲، ۸۷/۴۲، ۸۴/۴۲، ۸۳/۴۲، ۷۹/۴۲، ۷۸/۴۲، ۷۵/۴۲، ۷۳/۴۲، ۶۲/۴۲،

1. Covariance
2. Coefficient of variation
3. Variability

مقدار میانگین، پراکندگی، میانه، انحراف میانگین، انحراف استاندارد و ضریب تغییرات را محاسبه کنید.

راه حل: ابتدا داده‌ها به صورت صعودی مرتب می‌شوند.

۶۲/۴۲، ۷۳/۴۲، ۷۵/۴۲، ۷۸/۴۲، ۷۹/۴۲، ۸۳/۴۲، ۸۴/۴۲، ۸۷/۴۲، ۹۲/۴۲، ۹۴/۴۲

برای محاسبه میانگین:

$$\text{میانگین} = \frac{۹۴/۴۲ + ۹۲/۴۲ + ۸۷/۴۲ + ۸۴/۴۲ + ۸۳/۴۲ + ۷۹/۴۲ + ۷۸/۴۲ + ۷۵/۴۲ + ۷۳/۴۲ + ۶۲/۴۲}{۱۰}$$

$$= ۴۲/۸۰.$$

پراکندگی (پخش، پراکنش) تفاوت بین بالاترین و پایین‌ترین مقادیر مشاهدات است.

$$\text{پراکندگی} = ۴۲/۹۴ - ۴۲/۶۲ = ۰/۳۲.$$

چون تعداد زوجی ($N = ۱۰$) از مشاهدات وجود دارد،

$$\text{میان} = \frac{\text{اُمین مشاهده} \left(\frac{N}{2}\right) + \text{اُمین مشاهده} \left(\frac{N+1}{2}\right)}{۲}$$

$$= \frac{\text{ششمین داده} + \text{پنجمین داده}}{۲}$$

$$\text{میان} = ۴۲/۸۱.$$

به منظور محاسبه انحراف میانگین، نتایج جدول بندی شده‌اند (جدول ۴-۳).

جدول ۴-۳: محاسبه میانگین و انحراف معیار

x_i	$x_i - \bar{x}$	$(x_i - \bar{x})^2$
۴۲/۶۲	-۰/۱۸	۰/۰۳۲۴
۴۲/۷۳	-۰/۰۷	۰/۰۰۴۹
۴۲/۷۵	-۰/۰۵	۰/۰۰۲۵
۴۲/۷۸	-۰/۰۲	۰/۰۰۰۴
۴۲/۷۹	-۰/۰۱	۱E-۰۴
۴۲/۸۳	۰/۰۳	۰/۰۰۰۹
۴۲/۸۴	۰/۰۴	۰/۰۰۱۶
۴۲/۸۷	۰/۰۷	۰/۰۰۴۹
۴۲/۹۲	۰/۱۲	۰/۰۱۴۴
۴۲/۹۴	۰/۱۴	۰/۰۱۹۶
$\bar{x}_i = ۴۲/۸۰$	$\Sigma x_i - \bar{x} = ۰/۷۳$	$\Sigma (x_i - \bar{x})^2 = ۰/۰۸۱۷$

بنابراین،

$$\text{انحراف میانگین} = \frac{۰/۷۳}{۱۰} = ۰/۰۷۳,$$

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}},$$

$$s = \sqrt{\frac{0.817}{0.9}} = 0.95,$$

$$s^2 = 0.9$$

$$CV = \frac{0.95}{42/8} = 0.021 = 2.1\%.$$

کج‌شدگی

چولگی^۱ (کج‌شدگی) نشانگر توزیع نامتقارن است. این کمیت با نماد g به صورت زیر ارائه می‌شود

$$g = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3}{(n-1)s^3}. \quad (\text{الف-۱})$$

اگر توزیع گاوسی (متقارن) باشد، آنگاه $g = 0$. اگر g منفی باشد، آنگاه دنباله سمت چپ توزیع بزرگ‌تر از دنباله سمت راست است و بالعکس.

کشیدگی^۲

کشیدگی نشان‌دهنده تیز بودن توزیع داده‌ها^۳ است. این کمیت با نماد k به صورت زیر ارائه می‌شود

$$k = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^4}{(n-1)s^4}. \quad (\text{الف-۲})$$

مقادیر بالای k بیانگر آن است که بخش عمده انحراف معیار توسط انحراف‌های شدید از میانگین ایجاد می‌شود درحالی‌که مقادیر کوچک k بیانگر آن است که انحرافات نزدیک‌تر به میانگین هستند و توزیع محدود شده است.

۴-۸- تحلیل داده‌ها

همه توصیفگرهای^۴ مورد اشاره پیشین متداول‌ترین پارامترهای مورد استفاده برای تحلیل داده‌ها هستند. همچنین، نمونه‌گیری از داده‌ها یکی از مهم‌ترین اقدامات است. مجموعه‌ای از آزمون‌ها وجود دارند که به شناسایی ناهنجاری در داده‌ها کمک می‌کنند. این آزمون‌ها کمک می‌کنند که بدانید آیا

1. Skewness
2. Kurtosis
3. Pointedness
4. Descriptors

یک مقدار داده را حفظ کنید یا داده ناسازگار را حذف کنید. آزمون‌های پُرکاربرد در نمونه‌گیری داده‌ها در زیر مورد بحث قرار می‌گیرند.

۴-۸-۱-آزمون Q

آزمون Q که به نام آزمون دیکسون^۱ نیز شناخته می‌شود، یک ابزار ساده و پُرکاربرد آماری برای تعیین این است که آیا یک نقطه داده مشخص یا نتیجه باید حفظ شود یا حذف شود. این ابزار شامل بررسی تمام داده‌های پراکنده و یافتن مقادیر خارج از محدوده (پَرت) یا ناسازگار است. یک داده خارج از محدوده (پَرت) یک مقدار منحرف شده است که ممکن است از مجموعه نمونه یا توزیع متفاوتی حاصل شده باشد.

حفظ یک داده خارج از محدوده در مجموعه داده‌ها بر محاسبات میانگین و انحراف معیار اثر می‌گذارد. از این رو، لازم است داده‌های خارج از محدوده حذف شوند. برای انجام آزمون Q ، داده‌ها باید به صورت یکنواخت (به ترتیب صعودی) توزیع و مرتب‌شده باشند، در این حالت کمیت Q بدین صورت ارائه می‌شود

$$Q = \frac{|x_q - x_n|}{w} \quad (۴-۱۷)$$

به طوری که w پراکندگی مشاهدات، یعنی، تفاوت بین کوچک‌ترین و بزرگ‌ترین مقدار در داده‌ها، است، در حالی که x_q مقدار مشکوک و x_n نزدیک‌ترین مقدار به مقدار مشکوک است زمانی که داده‌ها به ترتیب صعودی یا نزولی مرتب می‌شوند.

سپس این نسبت با مقادیر بحرانی Q_c (مقدار بحرانی Q) که با یک مقدار حد اطمینان مشخص (معمولاً حد اطمینان ۹۵٪؛ $CL = ۹۵\%$) مطابقت دارد، مقایسه می‌شود. اگر Q از Q_c بزرگ‌تر باشد، می‌توان از نتیجه سؤال برانگیز (مشکوک)، با درجه اطمینان مشخص شده (در Q_c) صرف‌نظر کرد. جدول ۴-۴ مقادیر Q در بازه‌های اطمینان مختلف را در بر دارد.

آزمون Q نتایج رضایت بخشی برای مجموعه داده‌های دارای بیش از ۱۰ نقطه ($N > ۱۰$) ارائه نمی‌دهد. بر اساس نتایج Q ، می‌توان بیش از یک نقطه داده را برای رفتار نامنظم آزمود اما تنها از یک مقدار صرف‌نظر می‌شود؛ بنابراین، نقاط مشکوک (خارج از محدوده یا پَرت) توسط این آزمون به صورت قانونمند حذف می‌شوند.

1. Dixon's test

جدول ۴-۴: مقادیر بحرانی Q_c *

N	Q_c (CL ۹۰%)	Q_c (CL ۹۵%)	Q_c (CL ۹۹%)
۳	۰/۹۴۱	۰/۹۷۰	۰/۹۹۴
۴	۰/۷۶۵	۰/۸۲۹	۰/۹۲۶
۵	۰/۶۴۲	۰/۷۱۰	۰/۸۲۱
۶	۰/۵۶۰	۰/۶۲۵	۰/۷۴۰
۷	۰/۵۰۷	۰/۵۶۸	۰/۶۸۰
۸	۰/۴۶۸	۰/۵۲۶	۰/۶۳۴
۹	۰/۴۳۷	۰/۴۹۳	۰/۵۹۸
۱۰	۰/۴۱۲	۰/۴۶۶	۰/۵۶۸

* D.B. Rorabacher, Anal. Chem. 63 (1991) 139.

مثال ۲: چگالی فلز آلومینیوم با اندازه‌گیری‌های مکرر با مقادیر ۲/۶۱، ۲/۷۳، ۲/۹۱، ۲/۲۱ گرم بر سانتی‌مترمکعب، اندازه‌گیری شد. بر اساس آزمون Q ، آیا باید از هیچ یک از نقاط داده صرف‌نظر شود؟

راه‌حل: اولین گام در شناسایی یک مقدار خارج از محدوده (پرت) با آزمون Q مرتب کردن داده‌ها به‌صورت صعودی است

$$۱۲/۲، ۶۷/۲، ۷۴/۲، ۹۷/۲، ۴/۳.$$

نقطه ۳/۴ هنگامی که با سایر مقادیر مقایسه می‌شود ناسازگار به نظر می‌رسد بنابراین این مقدار مشکوک است. از این‌رو، با نگاه به مقادیر، ۲/۲۱ کمترین مقدار و ۳/۴ بیشترین مقدار هستند. نزدیک‌ترین مقدار به مقدار مشکوک ۲/۹۱ است که چنین نتیجه می‌دهد

$$Q = \frac{|۹۷/۲ - ۴/۳|}{۲۷۲ - ۴/۳} = ۳/۰.$$

اکنون، باید به Q_{crit} یا Q_c نگاه کرد که آیا مقدار محاسبه‌شده از آن بالاتر است یا به‌درستی زیر مقدار Q_c است. از آنجاکه در این مورد $N = ۵$ و در حد اطمینان ۹۵٪ مقدار $Q_c = ۰/۷۱$ است (جدول ۴-۴)، بر اساس آزمون Q این نقطه داده می‌تواند در داده‌ها گنجانده شود.

اگر بیش از یک نقطه داده مشکوک یکسان در داده‌ها وجود داشته باشد نمی‌توان آزمون Q را انجام داد.

مثال ۳: آنالیز نمونه کلسیت درصدهای ۵۵/۹۵، ۵۶/۰۰، ۵۶/۰۴، ۵۶/۰۸ و ۵۶/۲۳ را نتیجه داده است. آخرین مقدار غیرعادی به نظر می‌رسد؛ آیا در حد اطمینان ۹۵٪ باید آن را حفظ کرد یا رد کرد؟ راه‌حل: مرتب کردن داده‌ها به صورت صعودی عبارت است از ۵۵/۹۵، ۵۶/۰۰، ۵۶/۰۴، ۵۶/۰۸، ۵۶/۲۳. در اینجا، تفاوت بین بالاترین مقدار (۵۶/۲۳) و کمترین مقدار (۵۵/۹۵) برابر با ۰/۲۸ است که پراکندگی داده‌ها است. مقدار مشکوک و نزدیک‌ترین مقدار به ترتیب ۵۶/۲۳ و ۵۶/۰۸ هستند که نتیجه می‌دهد:

$$Q = \frac{|56.23 - 56.08|}{0.28} = 53\%.$$

برای $N = 5$ در حد اطمینان ۹۵٪ مقدار $Q_c = 77\%$ است. چون $54\% < 77\%$ است، این نقطه داده باید حفظ شود.

۴-۸-۲- حد اطمینان

میانگین تجربی $\bar{x}$ ممکن است به مقدار میانگین حقیقی μ نزدیک باشد یا نباشد. یک محدوده کامل وجود دارد که میانگین حقیقی در آن قرار می‌گیرد که با میانگین تجربی و انحراف معیار تعریف می‌شود. این بازه حدها اطمینان^۱ نامیده می‌شود و حدود آن حد اطمینان^۲ نامیده می‌شوند. احتمال آنکه مقدار حقیقی در این بازه قرار داشته باشد سطح اطمینان^۳ نامیده می‌شود و معمولاً با رابطه زیر به دست می‌آید

$$\text{حد اطمینان} = \bar{x} \pm \frac{ts}{\sqrt{N}} \quad (4-18)$$

به طوری که t یک فاکتور آماری وابسته به تعداد درجات آزادی و سطح اطمینان مورد نظر است و s انحراف معیار است. تعداد درجات آزادی (ν) یک واحد کمتر از تعداد اندازه‌گیری‌ها (N) است.

-
1. Confidence interval
 2. Confidence limit
 3. Confidence level

مثال ۴: نمونه‌ای برای درصد وزنی ($wt\%$) آن سه بار با نتایج ۸۲/۵، ۸۲/۵۶ و ۸۲/۴۱ درصد وزنی X بررسی شده است. با اطمینان ۹۵٪ می‌توان گفت که مقدار حقیقی در یک بازه مشخص قرار می‌گیرد. این بازه کدام است؟

راه‌حل: میانگین و انحراف استاندارد برای سه مقدار داده‌شده به ترتیب ۸۲/۴۹ و ۰/۷۵ هستند. در اینجا $N = 3$ است، بنابراین درجات آزادی $2 = N - 1 = \nu$ است. با استفاده از معادله (۴-۱۸)

$$\text{حد اطمینان} = \bar{x} \pm \frac{ts}{\sqrt{N}} = 82/49 \pm \frac{4/303 \times 0/75}{\sqrt{3}} = 82/49 \pm 0/18.$$

بنابراین، می‌توان گفت که در غیاب خطای معین با اطمینان ۹۵٪ مقدار حقیقی بین ۸۲/۶۷ و ۸۲/۳۱ قرار می‌گیرد ($t = 303/4$ از جدول ۴-۷).

۴-۸-۳-آزمون t

این آزمون که آزمون t دانشجویی^۱ نیز نامیده می‌شود، اغلب توسط تحلیلگر برای تحلیل آماری بین نتایج دو شیوه متفاوت بکار برده می‌شود. آزمون t کمک می‌کند تا مشخص شود که آیا تفاوت اساسی بین این دو روش وجود دارد یا اینکه آن‌ها یک چیز را اندازه‌گیری می‌کنند. سه نوع آزمون t بر اساس کاربرد وجود دارد که توضیح داده می‌شوند.

(الف) هنگامی که یک مقدار مورد قبول از داده‌ها در دسترس است، مجموعه‌ای از داده‌ها وجود دارد که نیازمند مقایسه هستند. در چنین مواردی آزمون t چنین بیان می‌شود

$$\mu = \bar{x} \pm \frac{ts}{\sqrt{N}} \quad (۴-۱۹)$$

یا می‌توان چنین نوشت

$$\pm t = (\bar{x} - \mu) \frac{\sqrt{N}}{s}. \quad (۴-۲۰)$$

مثال ۵: روشی برای تعیین مقدار آلومینیوم در دارو با استفاده از تجزیه وزن‌سنجی حرارتی^۲ مورد بررسی قرار گرفت. با غلظت مشابه اندازه‌گیری‌ها پنج بار تکرار شدند و میانگین نتایج $6/9 \text{ ppm}$

1. Student's t-test
2. Thermogravimetry

با انحراف معیار $\pm 7/0$ به دست آمد. مقدار مرجع در نوشتارهای علمی $10/5 ppm$ است. آیا این روش از نظر آماری با ارجاع به مقدار حقیقی در سطح اطمینان ۹۵٪ صحیح است؟
راه حل: با استفاده از آزمون t معادله (۴-۲)

$$t = (9/6 - 10/5) \frac{\sqrt{5}}{7/0},$$

$$t = 2/9.$$

در $N = 5$ مقدار t جدول بندی شده (جدول ۴-۷) در سطح اطمینان ۹۵٪ برابر با ۲/۷۷ است. از آنجاکه $t_{calc} > t_{table}$ است، ۹۵٪ اطمینان وجود دارد که این فرایند از لحاظ آماری نتایج متفاوتی از مقدار حقیقی (مقدار مرجع) در اختیار قرار می دهد.

(ب) نوع دیگری از آزمون t وجود دارد که در آن دو مجموعه داده با واریانس های متفاوت مقایسه می شوند. چنین مجموعه داده هایی ممکن است درجات آزادی متفاوتی نیز داشته باشند. آن ها نیز از همان فرمول بالا استفاده می کنند به جز آنکه برای آن ها، $\frac{\sqrt{N}}{s}$ با $\sqrt{\frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2}} / s_p$ جایگزین می شود که در آن

$$s_p = \sqrt{\frac{\sum (x_{i1} - \bar{x}_1)^2 + \sum (x_{i2} - \bar{x}_2)^2 + \sum (x_{i3} - \bar{x}_3)^2 + \dots + \sum (x_{ik} - \bar{x}_k)^2}{N - k}} \quad (۴-۲۱)$$

بنابراین،

$$\pm t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{s_p} \sqrt{\frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2}} \quad (۴-۲۲)$$

مثال ۶: تجزیه نمونه آهن به دو روش تجزیه ای متفاوت با اندازه گیری های مکرر برای هر یک از روش ها (الف و ب) انجام شد و داده های اندازه گیری ها چنین به دست آمد:

روش الف	۲۰/۱۰	۲۰/۵۰	۱۸/۶۵	۱۹/۲۵	۱۹/۴۰	۱۹/۹۹
روش ب	۱۸/۸۹	۱۹/۲۰	۱۹/۰۰	۱۹/۷۰	۱۹/۴۰	-

دو روش را بر اساس مقادیر میانگین آن ها مقایسه کنید.

راه حل: هنگامی که دو روش که مقادیر میانگین متفاوتی دارند باید مقایسه شوند، هر دو آزمون F و آزمون t قابل استفاده اند. نتایج در جدول ۴-۵ جدول بندی شده اند.

جدول ۴-۵: آزمون t برای مقادیر میانگین متفاوت دو روش الف و ب

x_{i1}	$x_{i1} - \bar{x}_1$	$(x_{i1} - \bar{x}_1)^2$	x_{i2}	$x_{i2} - \bar{x}_2$	$(x_{i2} - \bar{x}_2)^2$
۲۰/۱۰	۰/۴۵	۰/۲۰۲	۱۸/۸۹	۰/۳۵	۰/۱۲۲
۲۰/۵۰	۰/۸۵	۰/۷۲۲	۱۹/۲۰	۰/۰۴	۰/۰۰۲
۱۸/۶۵	۱/۰۰	۱/۰۰۰	۱۹/۰۰	۰/۲۴	۰/۰۵۸
۱۹/۲۵	۰/۴۰	۰/۱۶۰	۱۹/۷۰	۰/۴۶	۰/۲۱۲
۱۹/۴۰	۰/۲۵	۰/۰۶۲	۱۹/۴۰	۰/۱۶	۰/۰۲۶
۱۹/۹۹	۰/۳۴	۰/۱۱۶			
$\bar{x}_1 = ۱۹/۶۵/$		$\Sigma = ۲/۲۶۲$	$\bar{x}_2 = ۱۹/۲۴/$		$\Sigma = ۰/۴۲۰$

با استفاده از معادله (۴-۲۱) و (۴-۲۲):

$$s_p = \sqrt{\frac{\sum(x_{i1} - \bar{x}_1)^2 + \sum(x_{i2} - \bar{x}_2)^2}{N_1 + N_2 - 2}}$$

$$s_p = \sqrt{\frac{۲/۲۶۲ + ۰/۴۲۰}{۶ + ۵ - 2}} = ۰/۵۴۶$$

$$t = \frac{۱۹/۶۵ - ۱۹/۲۴}{۰/۵۴۶} \sqrt{\frac{۶ \times ۵}{۶ + ۵}} = ۱/۲۳$$

مقدار t جدول بندی شده برای ۹ درجه آزادی ($N_1 + N_2 - 2$) در حد اطمینان ۹۵٪ برابر با ۲/۲۶۲ است؛ بنابراین $t_{calc} < t_{table}$ است. در نتیجه، از آنجاکه t_{calc} به حد کافی کمتر از مقدار t_{table} است تفاوت چندانی بین دو روش تجزیه وجود ندارد.

(پ) آزمون t جفت شده^۱ (زوج): مجموعه‌هایی از داده‌ها وجود دارند که باید به منظور اثبات اصالت^۲ آنها، با مجموعه‌هایی از داده‌های مورد قبول مقایسه شوند. در چنین مواردی، هر نقطه داده به صورت متقاطع با نقطه داده مورد قبول برای ارزیابی میزان انحراف مقایسه می‌شود و مقدار t چنین به دست می‌آید.

1. Paired t-Test
2. Genuineness

$$t = \frac{\bar{D}}{s_d} \sqrt{N}, \quad (۲۳-۴)$$

به طوری که

$$s_d = \sqrt{\frac{\sum (D_i - \bar{D})^2}{N - 1}}. \quad (۲۴-۴)$$

مثال ۷: داده‌های ارائه‌شده دو دسته از داده‌های جمع‌آوری‌شده برای یک مجموعه از نمونه‌ها با دو روش متفاوت هستند. تعیین کنید که آیا تفاوت قابل‌توجهی بین دو روش وجود دارد.

نمونه	الف	ب	پ	ت	ث	ج
روش اول	۱۰/۲	۱۲/۷	۸/۶	۱۷/۵	۱۷/۲	۱۷/۵
روش دوم	۱۰/۵	۱۷/۹	۸/۷	۱۶/۹	۱۰/۹	۱۷/۱

راه‌حل: با استفاده از معادله (۲۳-۴) برای آزمون t زوج، امکان جدول‌بندی نتایج برای پارامترهای مختلف به صورت جدول ۴-۶ وجود دارد:

جدول ۴-۶: آزمون t جفت

نمونه	روش اول	روش دوم	D_i	$D_i - \bar{D}$	$(D_i - \bar{D})^2$
الف	۱۰/۲	۱۰/۵	-۰/۳	-۰/۶	۰/۳۶
ب	۱۲/۷	۱۷/۹	۰/۸	۰/۵	۰/۲۵
پ	۸/۶	۸/۷	-۰/۱	۰/۴	۰/۱۶
ت	۱۷/۵	۱۶/۹	۰/۶	۰/۳	۰/۰۹
ث	۱۷/۲	۱۰/۹	۰/۳	۰/۰	۰/۰
ج	۱۷/۵	۱۷/۱	۰/۴	۰/۱	۰/۰۱
			$\sum D_i = ۷/۷$	$\sum (D_i - \bar{D})^2 = ۰/۸۷$	

$$\bar{D} = \frac{۷/۷}{۶} = ۲۸/۰,$$

$$s_d = \sqrt{\frac{۸۷/۰}{۶ - ۱}} = ۴۲/۰,$$

$$t = \frac{28}{42} \times \sqrt{6} = 63/1.$$

مقدار t جدول‌بندی شده در حد اطمینان ۹۵٪ برابر با ۲/۵۷۱ است و چون $t_{caci} < t_{table}$ است، تفاوت قابل‌توجهی بین دو روش وجود ندارد.

۴-۸-۴-آزمون F

اغلب مطلوب است که نتیجه یک روش با روش‌های موردقبول (روش استاندارد) مقایسه شود تا روش تجزیه قدرتمندتری طراحی شود. تعیین اینکه آیا یک مجموعه از نتایج به‌طور قابل‌توجهی با نتایج روشی دیگر متفاوت است نه تنها به تفاوت میانگین‌ها بلکه به تعداد داده‌های در دسترس و پراکندگی (گسترش)^۱ آن‌ها نیز بستگی دارد.

آزمون F ^۲ تفاوت بین پراکندگی نتایج را ارزیابی می‌کند. از این‌رو، این آزمون طراحی شده است تا نشان دهد که آیا بر اساس انحراف معیار تفاوت معناداری بین دو روش وجود دارد. از این آزمون برای مقایسه دو واریانس استفاده می‌شود.

کمیت F برحسب واریانس‌های دو روش (واریانس مربع انحراف معیار است) تعریف می‌شود:

$$F = \frac{S_1^2}{S_2^2}, \quad (۲۵-۴)$$

به‌طوری‌که $S_1 > S_2$.

دو درجه آزادی متفاوت v_1 و v_2 وجود دارند که در آن‌ها درجات آزادی هر روش به‌صورت $N - 1$ تعریف می‌شوند.

اگر مقدار F محاسبه‌شده از معادله از مقدار جدول‌بندی شده در یک سطح اطمینان انتخابی بیشتر باشد، آنگاه تفاوت قابل‌توجهی بین واریانس‌های دو روش وجود دارد. برای انجام یک آزمون F ، یک فرض صفر^۳ و مقابل^۴ برای تعیین سطح معناداری^۵ (سطح اهمیت آزمون) ایجاد می‌شود.

1. Spread
2. F-test
3. Null
4. Alternate
5. Significance level

جدول ۴-۷: مقادیر t برای $N - 1 = \nu$ درجه آزادی برای سطوح اطمینان مختلف.*

ν	سطح اطمینان			
	۹۰٪	۹۵٪	۹۹٪	۹۹/۵٪
۱	۶/۳۱۴	۱۲/۷۰۶	۶۳/۶۵۷	۱۲۷/۳۲
۲	۲/۹۲	۴/۳۰۳	۹/۹۲۵	۱۴/۰۸۹
۳	۲/۳۵۳	۳/۱۸۲	۵/۸۴۱	۷/۴۵۳
۴	۲/۱۳۲	۲/۷۷۶	۴/۶۰۴	۵/۵۹۸
۵	۲/۰۱۵	۲/۵۷۱	۴/۰۳۲	۴/۷۷۳
۶	۱/۹۴۳	۲/۴۴۷	۳/۷۰۷	۴/۳۱۷
۷	۱/۸۹۵	۲/۳۶۵	۳/۵	۴/۰۲۹
۸	۱/۸۶	۲/۳۰۶	۳/۳۵۵	۳/۸۳۲
۹	۱/۸۳۳	۲/۲۶۲	۳/۲۵	۳/۶۹
۱۰	۱/۸۱۲	۲/۲۲۸	۳/۱۶۹	۳/۵۸۱
۱۵	۱/۷۵۳	۲/۱۳۱	۲/۹۴۷	۳/۴۵۲
۲۰	۱/۷۲۵	۲/۰۸۶	۲/۸۴۵	۳/۱۵۳
۲۵	۱/۷۰۸	۲/۰۶	۲/۷۸۷	۳/۰۷۸
∞	۱/۶۴۵	۱/۹۶	۲/۵۷۶	۲/۸۰۷

* Analytical Chemistry ۷e by Gary D. Christian et al., John Wiley & Sons.

همچنین درجات آزادی در صورت و در مخرج کسر مشخص می‌شوند. مقدار محاسبه‌شده برای یک حد اطمینان معین ارزیابی می‌شود تا فرض صفر رد و یا تأیید شود. در حین ارزیابی مقدار کمیت آزمون F ، مقدار واریانس بزرگ‌تر باید در صورت کسر حفظ شود.

فرض صفر فرض می‌کند $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ است، درحالی‌که با توجه به فرضیه بدیل $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$ است. اگر $F_{calc} > F_{crit}$ باشد؛ که در آن مقدار F_{crit} در حدود اطمینان یا معناداری موردنیاز آزمون است؛ فرض صفر رد می‌شود. جدول ۴-۸ مقادیر F برای حد اطمینان ۹۵٪ با درجات آزادی مختلف را فهرست می‌نماید.

جدول ۹-۴: مقادیر F در سطح اطمینان ۹۵٪.*

	$v_1 = 2$	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰	۱۵	۲۰	۳۰
$v_2 = 2$	۱۹	۱۹/۲	۱۹/۲	۱۹/۳	۱۹/۳	۱۹/۴	۱۹/۴	۱۹/۴	۱۹/۴	۱۹/۴	۱۹/۴	۱۹/۵
۳	۹/۵۵	۹/۲۸	۹/۱۲	۹/۰۱	۸/۹۴	۸/۸۹	۸/۸۵	۸/۸۱	۸/۷۹	۸/۷	۸/۶۶	۸/۶۲
۴	۶/۹۴	۶/۵۹	۶/۳۹	۶/۲۶	۶/۱۶	۶/۰۹	۶/۰۴	۶	۵/۶۹	۵/۸۶	۵/۸	۵/۷۵
۵	۵/۷۹	۵/۴۱	۵/۱۹	۵/۰۵	۴/۹۵	۴/۸۸	۴/۸۲	۴/۷۷	۴/۷۴	۴/۶۲	۴/۵۶	۴/۵
۶	۵/۱۴	۴/۷۶	۴/۵۳	۴/۳۹	۴/۲۸	۴/۲۱	۴/۱۵	۴/۱	۴/۰۶	۳/۹۴	۳/۸۷	۳/۸۱
۷	۴/۷۴	۴/۳۵	۴/۱۲	۳/۹۷	۳/۸۷	۳/۷۹	۳/۷۳	۳/۶۸	۳/۶۴	۳/۵۱	۳/۴۴	۳/۳۸
۸	۴/۴۶	۴/۰۷	۳/۸۴	۳/۶۹	۳/۵۸	۳/۵	۳/۴۴	۳/۳۹	۳/۳۵	۳/۲۲	۳/۱۵	۳/۰۸
۹	۴/۲۶	۳/۸۶	۳/۶۳	۳/۴۸	۳/۳۷	۳/۲۹	۳/۲۳	۳/۱۸	۳/۱۴	۳/۰۱	۲/۹۴	۲/۸۶
۱۰	۴/۱	۳/۷۱	۳/۴۸	۳/۳۳	۳/۲۲	۳/۱۴	۳/۰۷	۳/۰۲	۲/۹۸	۲/۸۵	۲/۷۷	۲/۷
۱۵	۳/۶۸	۳/۲۹	۳/۰۶	۲/۹	۲/۷۹	۲/۷۱	۲/۶۴	۲/۵۹	۲/۵۴	۲/۴	۲/۳۳	۲/۲۵
۲۰	۳/۴۹	۳/۱	۲/۸۷	۲/۷۱	۲/۶	۲/۵۱	۲/۴۵	۲/۳۹	۲/۳۵	۲/۲	۲/۱۲	۲/۰۴
۳۰	۳/۳۲	۲/۹۲	۲/۶۹	۲/۵۳	۲/۴۲	۲/۳۳	۲/۲۷	۲/۲۱	۲/۱۶	۲/۰۱	۱/۹۳	۱/۸۴

* Analytical Chemistry by Gary D. Christian et al., John Wiley & Sons.

مثال ۸: نمونه‌ای با دو روش متفاوت بررسی شد و نتایج اندازه‌گیری‌های مکرر از این دو روش ثبت شد. بر مبنای آزمون F ، نتایج ارائه‌شده دو روش (جدول ۹-۴) را مقایسه کنید.

راه‌حل: برای مقایسه دو روش، اغلب آزمون F با مقایسه واریانس دو روش بکار برده می‌شود. واریانس دو روش چنین محاسبه می‌شود.

جدول ۹-۴: نتایج دو روش الف و ب.

روش الف	۱۳۸	۱۳۱	۱۳۶	۱۳۹	۱۳۱
روش ب	۱۳۴	۱۳۲	۱۳۸	۱۳۳	۱۳۷

$$s_1^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x})^2}{N_1 - 1} = \frac{58}{5 - 1} = 14/5,$$

$$s_2^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{i2} - \bar{x})^2}{N_2 - 1} = \frac{26/8}{5 - 1} = 6/7,$$

$$F = \frac{s_1^2}{s_2^2} = \frac{14/5}{6/7} = 2/164.$$

نتیجه جدول‌بندی شده (برای $v_1 = 4$ و $v_2 = 4$) برابر با $6/39$ است؛ بنابراین، مقادیر F برای روش‌هایی که مقایسه می‌شوند خیلی کمتر از نتایج مجاز جدول‌بندی شده هستند؛ از این‌رو، دو روش الف و ب بر اساس واریانس آن‌ها دو رویه با اعتبار برابر هستند.

۴-۹- توزیع خطا

اغلب در آزمایش‌های تجربی رخدادها و خطاها از یک روند^۱ پیروی می‌کنند. انواع مختلف توزیع مشاهده‌شده را می‌توان چنین خلاصه نمود

(۱) توزیع گاوسی^۲،

(۲) توزیع دوجمله‌ای^۳،

(۳) توزیع پواسون^۴.

۴-۹-۱- توزیع گاوسی

در آمار، توزیع گاوسی (که توزیع نرمال نیز نامیده می‌شود) توزیع پیوسته‌ای است که تابع چگالی احتمال^۵ آن برابر است با:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}. \quad (۴-۲۶)$$

برای تمام مقادیر x که در آن μ و σ به ترتیب میانگین و انحراف معیار هستند. این توزیع توسط گاوس^۶ معرفی شد و پدیده‌های متنوعی از این توزیع تبعیت می‌کنند. توزیع گاوسی را می‌توان در فرم نرمال (بهنجار)^۷ چنین نوشت:

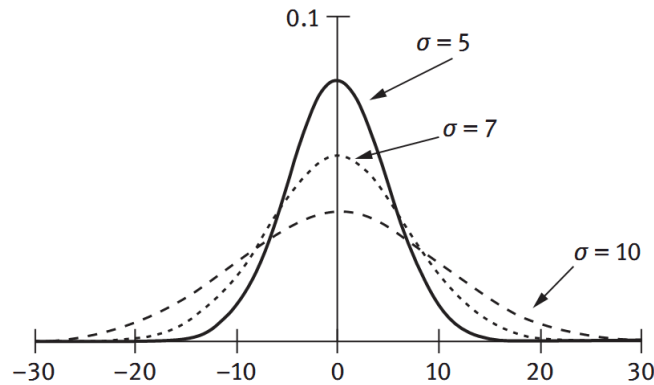
$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx = 1. \quad (۴-۲۷)$$

هنگامی که $\sigma = 1$ است این توزیع، توزیع استاندارد^۸ نامیده می‌شود. این توزیع، پراکندگی متغیر تصادفی حول مقدار میانگین آن را (متقارن حول میانگین) توصیف می‌نماید. این توزیع متداول‌ترین توزیع در آمار است؛ از این‌رو، اگر مشخص باشد که نوع توزیع نرمال (گاوسی) است، آنگاه توزیع آن

1. Trend
2. Gaussian distribution
3. Binomial distribution
4. Poisson distribution
5. Probability density function
6. Carl Friedrich Gauss
7. Normal
8. Standard distribution

متغیر را می‌توان با تحلیل میانگین و انحراف معیار آن توصیف نمود. در توزیع گاوسی، واریانس و میانگین لزوماً برابر نیستند. این توزیع به شکل یک منحنی زنگوله‌ای متقارن است (شکل ۴-۲). این توزیع داده‌های پیوسته دارای توزیع متقارن را توصیف می‌نماید. توزیع گاوسی، پراکندگی خطاها در یک توالی از آزمایش‌های تصادفی را تشریح می‌نماید. همانگونه که پیش از این بحث شد این خطاها می‌توانند سیستماتیک یا تصادفی باشند. توزیع گاوسی حول مقدار میانگین آن متقارن است و این میانگین منحنی متقارن را به دو نیم تقسیم می‌کند. کل سطح زیر منحنی محصور بین $x = a$ و $x = b$ برابر با یک است. اغلب منحنی به منظور ساده سازی آن استاندارد (همگون) می‌شود و این منحنی زمانی استاندارد می‌شود که $\mu = 0$ و $\sigma = 1$ باشند؛ بنابراین، معادله به شکل زیر خواهد بود.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\frac{x^2}{2}} dx. \quad (4-28)$$



شکل ۴-۲: توزیع گاوسی خطاها.

۴-۹-۲- توزیع دو جمله‌ای

این توزیع پراکندگی داده‌های دوتایی گسسته تصادفی از یک نمونه محدود، اعم از موفقیت یا شکست را توصیف می‌نماید، از این رو توزیع دوتایی نامیده می‌شود. با توجه به فرمول، این توزیع احتمال روی دادن x رویداد در n آزمایش را نشان می‌دهد. مناسب‌ترین حالت کاربرد این توزیع زمانی است که تعداد خروجی‌ها کم، معمولاً یک موفقیت و یک شکست، باشد:

$$P(x) = {}^nC_x p^x q^{n-x} = \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x}, \quad (29-4)$$

که در آن n تعداد آزمایش‌هاست، x تعداد موفقیت‌ها از n آزمایش است، p احتمال موفقیت و q احتمال شکست ($q = 1 - p$) است و $(n - x)$ به تعداد شکست‌ها اشاره می‌کند:

$$\sigma = \sqrt{np(1-p)} = \sqrt{npq}, \quad (30-4)$$

به‌طوری‌که،

$$\mu = np. \quad (31-4)$$

اگر یک تاس ۳۰ بار ریخته شود، احتمال آنکه ۸ بار روی تاس عدد ۳ ظاهر شود چقدر است؟ اینجا $n = 30$ ، $p = 1/6$ و $x = 8$ هستند. برای مقادیر بزرگ n ، توزیع دوجمله‌ای تقریباً معادل توزیع گاوسی است.

۳-۹-۴- توزیع پواسون

این توزیع، یک توزیع احتمال گسسته است که احتمال روی دادن تعداد مشخصی از رویدادها در یک محدوده ثابت از زمان، فاصله، سطح، حجم، فضا و غیره را بیان می‌کند. این توزیع رویدادهای تصادفی و مستقل را مدل‌سازی می‌کند. این توزیع برای فرایندهای تصادفی که احتمال وقوع نادری دارند مناسب است. این توزیع برای توصیف رویدادهایی با احتمال وقوع کم مفید است. فروپاشی رادیواکتیو هسته را در نظر بگیرید. اگر طول عمر هسته چند سال باشد و اندازه‌گیری انجام‌شده حدود یک دقیقه انجام شود، آنگاه احتمال آنکه هسته در طی اندازه‌گیری فروپاشی نماید بسیار کوچک است؛ از این‌رو، اینجا توزیع پواسون بکار می‌آید:

$$p(x) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^x}{x!}. \quad (32-4)$$

که در آن $x = 0, 1, 2, 3, \dots$

رابطه بالا معادل احتمال مشاهده دقیقاً x رویداد (موفقیت) است و λ متوسط تعداد رویدادها یا موفقیت‌هاست. این یک شکل محدود از توزیع دوجمله‌ای است هنگامی که n به بی‌نهایت میل می‌کند. در یک فرایند پواسون، میانگین با واریانس برابر است ($\sigma = \sqrt{\mu}$).

به‌عنوان نمونه، متوسط تعداد رویدادی در یک سال در یک محل ۵ است. احتمال وقوع ۳ رویداد

در همان محل چقدر است؟

اینجا، متوسط $\lambda = 5$ و $x = 3$ است:

$$P(x = 3) = \frac{e^{-5} 5^3}{3!} = 14.04\%$$

در نتیجه ۱۴.۰۴٪.

بنابراین، احتمال آنکه رویداد در همان محل روی دهد ۱۴٪ است. بر اساس توزیع پواسون، یک رویداد ممکن است در هر نقطه‌ای از زمان روی دهد و یک رویداد مستقل از وقوع رویداد دیگر است. این توزیع پراکندگی داده‌های دوتایی از یک نمونه نامتناهی را توصیف می‌نماید. این توزیع احتمال مشاهده ۲ رویداد از یک جمعیت (نمونه نامتناهی) را نشان می‌دهد.

۴-۱۰- ابزارهای آماری با استفاده از نرم‌افزارهای صفحات گسترده

(۱) میانگین

برای یافتن میانگین یک نمونه یا جمعیت، تابع AVERAGE استفاده می‌شود. ابتدا داده‌ها در ستون‌ها وارد می‌شوند و سپس تابع AVERAGE به صورتی که نشان داده‌شده، بکار برده می‌شود. ساختار دستوری^۱ آن به صورت AVERAGE(Array) است.

(۲) مُد

برای یافتن مُد برای داده‌های مشخص، تابع MODE استفاده می‌شود. الگوی دستوری آن همچنان که در شکل ۴-۳ نشان داده‌شده، به صورت MODE(Array) است.

	A	B
1	x values	
2	2.1	
3	2.5	
4	2.3	
5	2.5	
6	=AVERAGE(A1:A5)	=MODE(A1:A5)
7		

شکل ۴-۳: میانگین و مُد در نرم‌افزار صفحه گسترده.

انواع مختلف پارامترهای توزیع را نیز می‌توان با استفاده از نرم‌افزار صفحه گسترده محاسبه نمود. این پارامترها به شرح زیر توضیح داده می‌شوند.

1. Syntax

(۳) توزیع نرمال

الگوی دستوری عبارت است از:

=NORMDIST(Number, Number, Arithmetic mean, Standard deviation, returns the Normal Probability distribution function)

که در آن پارامترها به ترتیب مقداری که توزیع آن مدنظر است، میانگین، انحراف معیار و یک پارامتر منطقی جهت تعیین نوع مقدار بازگشتی تابع توزیع احتمال هستند. اگر پارامتر آخر True باشد مقدار تابع توزیع انباشته (تجمعی)^۱ محاسبه می‌شود و اگر False باشد مقدار تابع جرم احتمال^۲ محاسبه می‌شود. (شکل ۴-۴)

	A	B
1	Number	40
2	Mean	45
3	Std dev	47.609
4		=NORMDIST(B1,B2,B3,FALSE)
5		
6		
7		

شکل ۴-۴: توزیع نرمال در نرم‌افزار صفحه گسترده.

این مثال پاسخ ۰/۰۰۸۳۳ را مطابق با توزیع نرمال به دست می‌دهد. به صورت مشابهی می‌توان توزیع دوجمله‌ای و توزیع پواسون را بکار بُرد. الگوهای دستوری عبارت‌اند از:

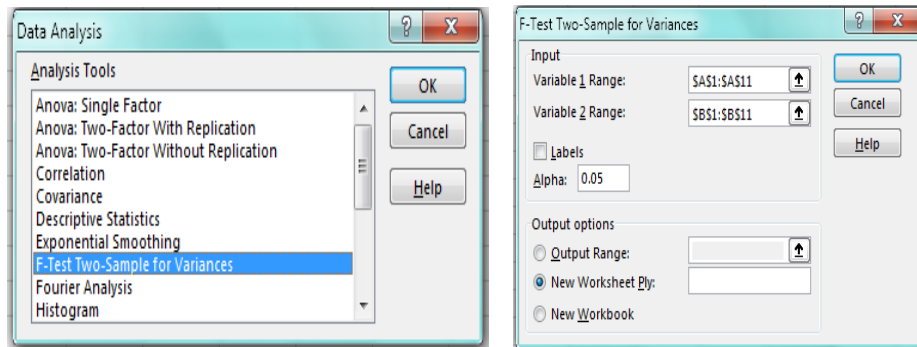
=BINOMDIST(number's, trials, probability's, returns the cumulative distribution function)

=POISSON(number, arithmetic mean, returns the cumulative distribution function).

-
1. Cumulative distribution function
 2. Probability mass function

(۴) آزمون F

در اکسل آزمون F را می‌توان با استفاده از زبانه Data analysis و انتخاب ابزار F-test two-sample for variances (شکل ۴-۵) انجام داد. آرایه‌های داده‌ها و سلول‌های خروجی که نتایج در آن نمایش داده خواهند شد را انتخاب کنید.



شکل ۴-۵: آزمون F با ابزار تحلیل داده‌ها در نرم‌افزار صفحه گسترده.

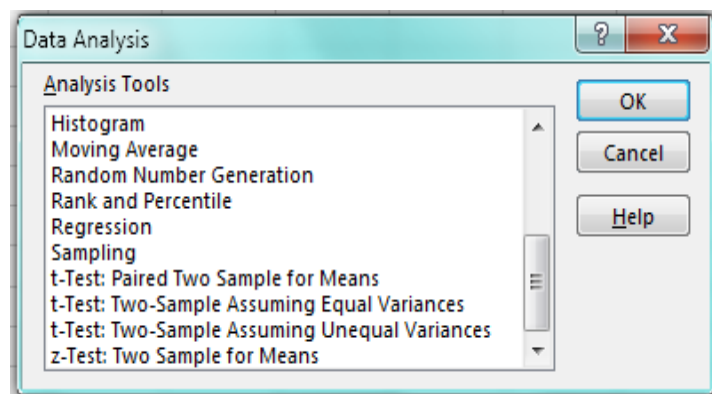
نتایج به‌دست‌آمده در شکل ۴-۶ نشان داده شده‌اند. در تصویر، df به تعداد درجات آزادی که برابر با $N - 1$ است، اشاره می‌کند، درحالی‌که F مقدار آزمون F است.

F-Test Two-Sample for Variances		
	Variable 1	Variable 2
Mean	10.41666667	10.3875
Variance	0.333666667	0.932678571
Observations	6	8
df	5	7
F	0.357750973	
$P(F \leq f)$ one-tail	0.137760942	
F Critical one-tail	0.205091533	

شکل ۴-۶: نتایج آزمون F با ابزار تحلیل داده‌ها در نرم‌افزار صفحه گسترده.

(۵) آزمون t

آزمون t که پیش‌ازاین مورد اشاره قرار گرفت را می‌توان در صفحات گسترده برای سه گزینه مختلف؛ همان‌طور که نشان داده شده است؛ انجام داد که با سه نوع آزمون مطرح‌شده؛ در بخش‌های قبل؛ تحت عنوان آزمون t مطابقت دارد (شکل ۴-۷).



شکل ۴-۷: آزمون t با ابزار تحلیل داده‌ها در نرم‌افزار صفحه گسترده.

۴-۱۱- مسئله‌هایی برای تمرین

۱. برای داده‌های ارائه‌شده میانگین، انحراف متوسط، انحراف معیار و پراکندگی توزیع را محاسبه کنید:
 $۶/۵۹۳, ۷/۲۵۶, ۷/۰۹۸, ۷/۱۴۶$.

۲. اندازه‌گیری‌های زیر از یک متغیر مشخص حاصل شده‌اند: $۲۳/۵, ۲۳/۹, ۲۳/۲, ۲۳/۸, ۲۴/۵, ۲۳/۲$.
و $۲۴/۰$ آزمون Q را بکار ببرید و تعیین کنید که آیا در سطح اطمینان ۹۵% نقطه داده $۲۳/۹$ مقداری خارج از محدوده است.

۳. برای مجموعه داده‌هایی با میانگین $۵۶/۰۶$ ، انحراف معیار $۲/۰\%$ و مقدار t (در حد اطمینان ۹۰%) برابر با $۱/۸۳۳$ ، حد اطمینان را محاسبه کنید.

۴. تجزیه نمونه‌ای برای تعیین ترکیب درصد اجزا نمونه به‌صورت مکرر انجام شد و نتایج $۳/۱۶, ۲/۹۸, ۳/۰۲, ۲/۹۹$ و $۳/۰۷$ حاصل شدند. اگر مقدار حقیقی $۳/۰۳$ باشد آیا این روش از منظر آماری در مقایسه با مقدار حقیقی در سطح اطمینان ۹۰% صحیح است؟

۵. اندازه‌گیری‌های تکراری زیر روی یک نمونه با استفاده از طیف‌سنجی نشری شعله (FES) و یک روش نورسنجی^۲ جدید انجام و نتایج در جدول زیر گزارش شدند. آیا تفاوت معناداری در دقت دو روش وجود دارد؟

FES (mg dL ⁻¹)	Colorimetric (mg dL ⁻¹)
۱۰/۹	۹/۲
۱۰/۱	۱۰/۵
۱۰/۶	۹/۷
۱۷۲	۱۷۵
۹/۷	۱۷/۶
۱۰	۹/۳
	۱۰/۱
	۱۷۲
۱۰/۴ = میانگین	۱۰/۴ = میانگین

1. Flame Emission Spectrometry
2. Colorimetric method

فصل پنجم
برازش منحنی عددی

۵-۱- مقدمه

برازش منحنی به یک فن^۱ آماری می‌پردازد که یک منحنی یا تابع ریاضی را به صورت ترسیمی ایجاد می‌کند تا به بهترین شکل وضعیت مجموعه‌ای از نقاط داده را توصیف نماید. این فن برای مجموعه‌ای از نقاط داده، بین متغیرهای وابسته و مستقل به عنوان تابعی از هم؛ در شکل یک تابع ریاضی یا یک معادله ریاضی؛ رابطه ایجاد می‌کند. برازش منحنی به صورت گسترده برای مدل‌سازی فرایندهای مختلف استفاده می‌شود؛ اما قبل از درک این فن‌های برازش منحنی داده‌ها، باید دو عبارت بسیار مهم که همبستگی^۲ و رگرسیون^۳ هستند را درک کنید.

در آمار، همبستگی و رگرسیون اغلب برای تعیین میزان شدت وابستگی یا برقراری رابطه‌ای بین متغیرها بکار می‌رود. پیش از آنکه داده‌ها بر یک تابع ریاضی منطبق شوند، یک نمودار پراکندگی بین دو متغیر رسم می‌شود. از نمودار پراکندگی می‌توان استنباط کرد که آیا رابطه‌ای بین دو متغیر وجود دارد، همچنین می‌توان به نوع رابطه ریاضی بین متغیرها پی بُرد.

۵-۲- همبستگی

این کمیت یک معیار آماری است که بین دو متغیر رابطه (اغلب رابطه خطی) برقرار می‌کند و از این رو عبارت همبستگی (هم + بستگی^۴) برای آن بکار می‌رود. این کمیت می‌تواند مثبت یا منفی باشد. هنگامی که دو متغیر موردنظر در یک جهت حرکت می‌کنند (افزایش یکی منجر به افزایش دیگری می‌شود)، آنگاه این وضعیت همبستگی مثبت نامیده می‌شود و بالعکس. در اینجا دو متغیر می‌توانند مشابه یا متفاوت باشند. همبستگی معیاری از وابستگی بین دو متغیر است. اینجا دو متغیری که به هم همبسته می‌شوند می‌توانند دو متغیر تصادفی باشند. آن‌ها ممکن است به یکدیگر وابسته نباشند. ضریب همبستگی صفر عدم وجود هرگونه ارتباطی را نشان می‌دهد، درحالی که یک مقدار مثبت نشان می‌دهد که هر دو متغیر وابسته (Y) و مستقل (X) در یک جهت حرکت می‌کنند یعنی با هم افزایش یا کاهش می‌یابند (مثلاً $r = 0/9$) و ضریب منفی بیانگر آن است که متغیر وابسته و مستقل در جهت مخالف هم حرکت می‌کنند یعنی افزایش و کاهش آن‌ها عکس یکدیگر است (مثلاً $r = 0/5$). مقدار همبستگی -1 و $+1$ نشانگر یک رابطه کاملاً خطی است. اگر ضریب همبستگی صفر باشد، آنگاه هیچ نوع رابطه‌ای وجود ندارد. مربع ضریب همبستگی، برابر با ضریب تشخیص^۵ در تحلیل

-
1. Techniques
 2. Correlation
 3. Regression
 4. Co + relation
 5. Coefficient of determination

رگرسیون^۱ است. انواع متعددی از روابط همبستگی می‌توانند وجود داشته باشند اما اینجا تنها دو نوع همبستگی مورد بحث قرار می‌گیرد.

۵-۲-۱- ضریب همبستگی پیرسون

ضریب همبستگی پیرسون^۲، همبستگی بین دو متغیر پیوسته را ارزیابی می‌کند به صورتی که تغییر یک متغیر، تغییر متناسبی در متغیر دیگر ایجاد می‌نماید. در آمار، فرمول عمومی برای همبستگی چنین ارائه می‌شود

$$r = \frac{n(\sum_{i=1}^n xy) - (\sum_{i=1}^n x)(\sum_{i=1}^n y)}{\sqrt{(n \sum_{i=1}^n x^2 - (\sum_{i=1}^n x)^2)(n \sum_{i=1}^n y^2 - (\sum_{i=1}^n y)^2)}}. \quad (۱-۵)$$

معمولاً یک نمودار پراکندگی برای بررسی خطی بودن رسم می‌شود. برای تعیین ضریب پیرسون، متغیرها جدا از داشتن رابطه خطی بین آنها، باید به صورت نرمال توزیع شوند. این یک پارامتر آماری پُرکاربرد در زمانی است که داده‌ها خطی هستند.

اصولاً دو نوع ضریب همبستگی به نام‌های ضریب همبستگی جمعیت^۳ (ρ_{xy}) و ضریب همبستگی نمونه^۴ (r_{xy}) وجود دارند که می‌توانند چنین نشان داده شوند

$$r_{xy} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}, \quad (۲-۵)$$

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}, \quad (۳-۵)$$

به‌طوری‌که (s_x, s_y) و s_{xy} به انحراف معیار و کوواریانس نمونه اشاره دارند درحالی‌که (σ_x, σ_y) و σ_{xy} انحراف معیار و کوواریانس جمعیت هستند.

-
1. Regression analysis
 2. Pearson correlation coefficient
 3. Population correlation coefficient
 4. Sample correlation coefficient

۵-۲-۲- ضریب همبستگی رتبه‌ای اسپیرمن

ضریب همبستگی رتبه‌ای اسپیرمن^۱، رابطه یکنوا^۲ بین متغیرهای ترتیبی^۳ را ارزیابی می‌کند (رابطه یکنوا بدین معنی است که تغییر ثابتی در یک متغیر در ارتباط با متغیر دیگر روی نمی‌دهد، اگرچه آن‌ها با هم تغییر می‌کنند). در همبستگی نوع اسپیرمن، تغییر یک متغیر با متغیر دیگر سازگار (هم‌ساز) و یا همیشه متناسب نیست. مشابه ضریب همبستگی پیرسون، این ضریب نیز می‌تواند مثبت یا منفی باشد. مقدار همبستگی ۱- یا ۱+ چه مربوط به همبستگی پیرسون باشد و چه اسپیرمن، رابطه خطی را نشان می‌دهد. این ضریب با نماد ρ چنین نمایش داده می‌شود

$$\rho = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n(n^2 - 1)} \quad (۴-۵)$$

این یک آزمون غیرپارامتری است و زمانی انجام می‌شود که داده‌های ترتیبی وجود داشته باشد (داده‌ها به ترتیب رتبه‌بندی یا اولویت مرتب شده‌اند) یا زمانی که به جای هر نوع داده خطی، رابطه یکنوا بین داده‌ها وجود داشته باشد.

ضریب پیرسون استحکام (قوام) و جهت رابطه خطی بین متغیرها را نشان می‌دهد درحالی‌که ضریب اسپیرمن همان مشخصه‌ها را برای رابطه وابستگی یکنوا نشان می‌دهد.

۵-۳- رگرسیون

رگرسیون مقدار متغیر وابسته (y) را بر اساس مقدار مشخص متغیر مستقل (x) با استفاده از رابطه ریاضی بین آن‌ها پیش‌بینی می‌کند. مقدار y به مقدار x وابسته است؛ از این‌رو؛ y یک متغیر وابسته است درحالی‌که x مستقل است. اگر آن‌ها به صورت زیر به هم مرتبط باشند:

$$y = a + bx \quad (۵-۵)$$

آنگاه a و b پارامترهای رگرسیون هستند و b ضریب رگرسیون است. این رابطه مقدار متغیر تصادفی را بر اساس مقدار متغیر ثابت تخمین می‌زند. این رابطه همچنین شامل برقراری ارتباط ریاضی بین دو متغیر (وابسته و مستقل) است. یک مدل یا رابطه ساخته می‌شود و سپس کارایی آن آزموده می‌شود. اگر کارایی به اندازه‌ی کافی خوب باشد، آنگاه می‌توان از این مدل به منظور پیش‌بینی مقدار متغیر وابسته برای یک متغیر مستقل مشخص استفاده کرد. هنگامی‌که یک نمودار از مقدار مورد انتظار متغیر وابسته برحسب متغیر مستقل رسم می‌شود، خط به دست آمده، خط رگرسیون نامیده می‌شود (شکل ۵-۱). این فرایند برازش منحنی با حداقل مربعات نامیده می‌شود زیرا این روش

-
1. Spearman rank correlation coefficient
 2. Monotonic relationship
 3. Ordinal variables

داده‌های موردنظر را با حداقل نمودن مربع خطا برازش می‌نماید. رابطه ریاضی برای رگرسیون (R^2) یا r^2 چنین ارائه می‌شود:

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{total}}. \quad (6-5)$$

این کمیت به‌عنوان ضریب تشخیص نیز شناخته می‌شود که در آن SS_{res} به مجموع مربعات باقیمانده (تفاوت بین مقدار مورد انتظار و مقدار محاسبه‌شده) اشاره دارد، درحالی‌که SS_{total} به مجموع مربعات (متناسب با واریانس) اشاره دارد که در آن y_i و $f(x_i)$ توابع مورد انتظار و محاسبه‌شده هستند:

$$SS_{res} = e_i^2 = (y_i - f(x_i))^2, \quad (7-5)$$

و

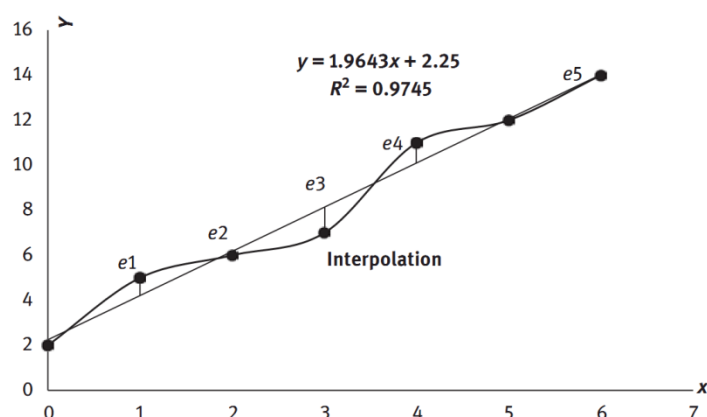
$$SS_{total} = (y_i - \bar{y})^2. \quad (8-5)$$

اغلب آزمون t و آزمون F برای آزمودن اعتبار مدل‌های رگرسیون بکار می‌روند.

در اینجا R^2 نشان می‌دهد که منحنی تا چه حد با نقاط داده منطبق می‌شود، چیزی که به‌عنوان کارایی برازش^۱ هم شناخته می‌شود. مقدار این کمیت بین ۰ تا ۱ تغییر می‌کند. مقداری نزدیک به یک بیانگر یک مدل خوب است و بنابراین منحنی (تابع ریاضی) به‌خوبی بر نقاط داده منطبق می‌شود و بالعکس. همچنان که مقدار R^2 از یک فاصله می‌گیرد، کیفیت مدل اُفت می‌کند. از این‌رو هنگامی که مقدار R^2 یک منحنی به ۱ نزدیک می‌شود، گفته می‌شود که انطباق خوبی دارد. هر چه R^2 بیشتر از یک فاصله بگیرد، کوواریانس بین دو متغیر کمتر است.

۵-۴- درونیابی در مقابل برازش منحنی

درونیابی فنی برای یافتن مقدار متغیرها بین نقاط داده موجود است. در درونیابی، یک منحنی از میان نقاط داده ارائه شده، با فرض دقیق بودن داده‌ها، ساخته می‌شود. هدف درونیابی یافتن تابعی است که داده‌های ارائه شده را تقریب می‌زند و نقاط داده جدید را در حفاصل بین داده‌های ارائه شده تعیین می‌کند. برازش منحنی بر داده‌های پراکنده اعمال می‌شود که ممکن است دقیق نباشند. از این رو در برازش منحنی به یک منحنی هموار^۱ نیاز است که نقاط داده را تقریب می‌زند که ممکن است از میان تمام نقاط داده عبور کند یا نکند درحالی‌که در مورد درونیابی تابع از میان نقاط داده اصلی عبور می‌کند. این تفاوت را می‌توان در شکل ۵-۱ نمایش داد.



شکل ۵-۱: درونیابی (منحنی) و برازش منحنی (خط راست)

درونیابی نقاط چیزی به جز اتصال نقاط داده به یکدیگر نیست درحالی‌که خط راست، برازش منحنی است که در آن یک خط یا یک منحنی به صورتی ترسیم شده است که به بهترین شکل با نقاط داده مطابقت دارد به نحوی که از بیشترین تعداد نقاط عبور می‌کند و تابعی ریاضی (نمایش داده شده توسط معادله) را به تصویر می‌کشد.

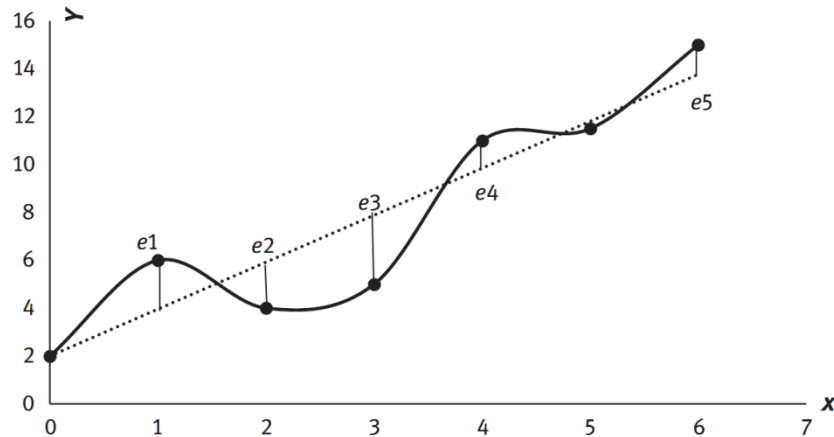
۵-۵- برازش منحنی حداقل مربعات

روش برازش منحنی حداقل مربعات^۲ بیانگر ساختن یک خط یا یک منحنی است که از بیشترین تعداد نقاط داده عبور می‌کند و یک رابطه ریاضی که به بهترین شکل نقاط داده را توصیف می‌نماید. خطاهای اجتناب‌ناپذیری در هر آزمایش یا مجموعه مشاهدات وجود دارند. بهترین کاری که می‌توان

1. Smooth

2. Least square curve fitting (LSC fitting)

انجام داد آن است که با استفاده از منحنی کمترین مربعات خطا را حداقل نمود. این روش برای یک منحنی منفرد که روند عمومی داده را نشان می‌دهد، قابل استفاده است.



شکل ۵-۲: برازش منحنی کمترین مربعات با استفاده از کمینه کردن خطاها

(۱) همان‌طور که در شکل ۵-۲ قابل مشاهده است، نقطه‌های توپُر نشانگر داده‌های واقعی هستند درحالی‌که خط‌چین بهترین منحنی ممکن است که با کمینه کردن خطاها، برای انطباق با داده‌های تجربی ارائه شده رسم می‌شود. اینجا خطا فاصله بین نقطه داده و بهترین خط است. برای یک منحنی با بهترین تطابق، خطاها (که انحراف‌های افقی و عمودی نیز نامیده می‌شوند) باید کمینه شوند. این روش همچنین روش منحنی کمترین مربعات نامیده می‌شود زیرا هدف آن کمینه کردن مجموع خطاها (به اصطلاح باقیمانده‌ها) است. در شکل، داده‌ها با یک رابطه خطی منطبق هستند، اما رگرسیون را می‌توان همچنین در مورد سایر توابع از جمله تابع سهموی، چندجمله‌ای مرتبه n ، نمایی و لگاریتمی نیز بکار برد.

ضرایب a و b در معادله‌های پیشین مقادیری هستند که به نحوی تعیین می‌شوند که به بهترین شکل داده‌های ارائه شده را بر مدل ریاضی منطبق نمایند. منحنی کمترین مربعات یک منحنی یا تابعی ریاضی را که به شکلی مناسب رفتار داده‌ها را توصیف می‌کند، مشخص می‌نماید. معادله $f(x)$ نوشته شده تحت عنوان y را در نظر بگیرید:

$$y = f(x). \quad (۵-۹)$$

اگر نقطه x_1 موجود باشد، آنگاه مقدار مورد انتظار y ، به جای آنکه y_1 باشد، برابر با $f(x_1)$ است. پس می‌توان خطای مقدار y (که باقیمانده نیز نامیده می‌شود) چنین تعریف می‌شود

$$e_1 = y_1 - f(x_1). \quad (۵-۱۰)$$

به صورت مشابه خطا در نقطه دیگر از x_1 تا x_n را می توان چنین نوشت:

$$e_2 = y_2 - f(x_2), \quad (11-5)$$

$$e_3 = y_3 - f(x_3), \quad (12-5)$$

$$e_n = y_n - f(x_n). \quad (13-5)$$

بهترین منحنی برازش آن است که کمترین مجموع مربعات انحرافات (باقیمانده ها) را داشته باشد. این باقیمانده ها می توانند مثبت یا منفی باشند، از این رو به منظور کمینه کردن خطا در هر نقطه x_i مربع e_i ها بدین صورت در نظر گرفته می شود.

$$E = \sum_{i=1}^n e_i^2. \quad (14-5)$$

مقدار E باید به نحوی کمینه شود که مجموع مربعات باقیمانده ها با حداقل کردن مربع خطاها، کمترین یا حداقل (از این جهت روش منحنی حداقل مربعات نامیده می شود) باشد. بهترین خط باید کمترین خطا بین خط و نقاط داده را داشته باشد.

۵-۵-۱- برازش خطی

یک خط راست ساده ترین راه برازش داده ها با استفاده از روش منحنی حداقل مربعات با معادله ساده $y = a + bx$ است که در آن a و b مقادیر ثابت هستند. تعداد مقادیر ثابت برابر است با تعداد معادلاتی که باید حل شوند. این معادله ها، معادله های نرمال نامیده می شوند. با شروع از تابع

$$y = a + bx. \quad (5-5)$$

e_i مقدار خطا یا باقیمانده بین مقدار مورد انتظار و مقدار اندازه گیری شده است.

$$e_i = y_{\text{مورد انتظار}} - y_{\text{اندازه گیری شده}} = y_i - (a + bx_i). \quad (15-5)$$

در اینجا ممکن است برخی از اختلاف ها مثبت یا منفی باشند. از این رو خطا مربع می شود که مقدار آن کمینه می شود.

$$\min S_r = \min e_i^2 = \min [y_i - (a + bx_i)]^2. \quad (16-5)$$

برای کمینه کردن خطا، از مربع خطاها نسبت به a و b مشتق (دیفرانسیل^۱) گرفته می شود و برابر با صفر قرار داده می شود. در رگرسیون، مجموع مربعات باقیمانده ها (S_r) کمینه می شود

$$\frac{dS_r}{da} = \frac{dS_r}{db} = 0, \quad (17-5)$$

1. Differentiate

$$\frac{dS_r}{da} = \sum_{i=1}^n [-r(y_i - (a + bx_i))] = 0, \quad (18-5)$$

$$\frac{dS_r}{db} = \sum_{i=1}^n [-r(y_i - (a + bx_i))] = 0, \quad (19-5)$$

که نتیجه می‌دهد،

$$na + \sum_{i=1}^n bx_i = \sum_{i=1}^n y_i, \quad (20-5)$$

$$\sum_{i=1}^n ax_i + \sum_{i=1}^n bx_i^r = \sum_{i=1}^n x_i y_i. \quad (21-5)$$

معادله پیشین معادله نرمال نیز نامیده می‌شود. این معادلات هم‌زمان اغلب با کاربرد آن‌ها در شکل ماتریسی؛ به شکل زیر حل می‌شوند.

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{bmatrix}, \quad (22-5)$$

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^r \end{bmatrix}^{-1}. \quad (23-5)$$

با حل معادله (۲۳-۵) برای a خواهیم داشت:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - (\sum_{i=1}^n x_i)^2}, \quad (24-5)$$

$$a = \frac{\bar{y} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \bar{x} \sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n(\bar{x})^2}, \quad (25-5)$$

که

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad (26-5)$$

و

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i. \quad (27-5)$$

با حل معادله (23-5) برای b خواهیم داشت،

$$b = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - (\sum_{i=1}^n x_i)^2}, \quad (28-5)$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - n \bar{x} \bar{y}}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - n(\bar{x})^2}, \quad (29-5)$$

می‌توان b را چنین نیز نوشت:

$$b = \frac{SS_{xy}}{SS_{xx}}, \quad (30-5)$$

این عبارات را می‌توان در شکل مجموع مربعات بازنویسی کرد. مجموع مربعات یا مجموع مربع انحرافات، معیاری از تغییرات مجموعه داده‌ها است. آن‌ها تفاوت مقدار پیش‌بینی‌شده و میانگین یک متغیر را توصیف می‌کنند:

$$SS_{xx} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad (31-5)$$

$$SS_{xx} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) - n\bar{x}^2, \quad (32-5)$$

$$SS_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n}, \quad (33-5)$$

$$SS_{yy} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2, \quad (34-5)$$

$$SS_{yy} = \left(\sum_{i=1}^n y_i^2 \right) - n\bar{y}^2, \quad (35-5)$$

$$SS_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}), \quad (36-5)$$

$$SS_{xy} = \sum_{i=1}^n x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n}, \quad (37-5)$$

$$SS_{xy} = n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i. \quad (38-5)$$

واریانس، مربع انحراف معیار است که می‌تواند چنین نیز نوشته شود:

$$\sigma_x^2 = \frac{SS_{xx}}{n}, \quad (39-5)$$

$$\sigma_y^2 = \frac{SS_{yy}}{n}, \quad (40-5)$$

$$\text{cov}(x, y) = \frac{SS_{xy}}{n}, \quad (41-5)$$

به طوری که σ_x^2 و σ_y^2 واریانس‌ها و $cov(x, y)$ کوواریانس هستند.

از آنجاکه ضریب همبستگی برابر با کوواریانس تقسیم بر انحراف معیار دو متغیر است، در نتیجه انطباق در قالب پارامترهای ضریب همبستگی توصیف می‌شود (در قالب ضریب همبستگی به صورت زیر پارامتری می‌شود).

$$r^2 = \frac{SS_{xy}}{SS_{xx}SS_{yy}} = \frac{cov(x, y)}{SS_{xx}SS_{yy}}, \quad (42-5)$$

مجموع مربعات، تغییر y ضمن تغییر x را بازتاب می‌دهد.

ضریب تشخیص بیان می‌کند که تا چه میزان متغیرهای y را می‌توان برحسب مقادیر x توصیف نمود. برای مثال اگر $R^2 = 0.86$ ، آنگاه این مقدار بیانگر آن است که ۸۶٪ از متغیرهای وابسته توسط متغیرهای مستقل توصیف می‌شوند.

مثال ۱: با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات، معادله خط مستقیمی ($y = a + bx$) برای داده‌های ارائه شده بیابید.

x	y
۰	۱
۱	۱۰
۲	۱۵
۳	۳۰
۴	۳۵

راه حل: برای یافتن معادله برای داده‌های ارائه شده، نتایج ایجاد معادله‌های نرمال در جدول ۱-۵ جدول بندی شده‌اند.

جدول ۱-۵: برازش منحنی برای یک خط مستقیم

x	y	x^2	xy
۰	۱	۰	۰
۱	۱۰	۱	۱۰
۲	۱۵	۴	۳۰
۳	۳۰	۹	۹۰
۴	۳۵	۱۶	۱۴۰
$\Sigma x = ۱۰$	$\Sigma y = ۹۱$	$\Sigma x^2 = ۳۰$	$\Sigma xy = ۲۷۰$

اینجا $n = ۵$ است، استفاده از معادلات نرمال به شکل زیر:

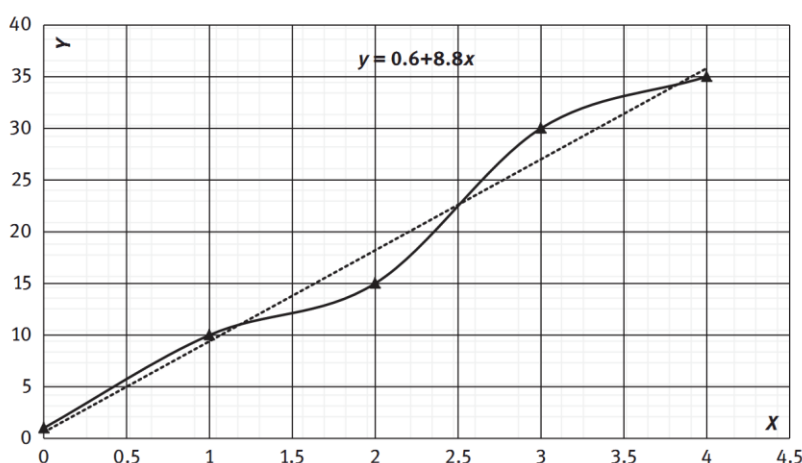
$$۵a + ۱۰b = ۹۱, \quad (۴۳-۵)$$

$$۱۰a + ۳۰b = ۲۷۰, \quad (۴۴-۵)$$

نتیجه می‌دهد $a = ۳ \div ۵$ و $b = ۴۴ \div ۵$. در نتیجه معادله چنین خواهد بود:

$$y = ۶/۰ + ۸/۸x. \quad (۴۵-۵)$$

در شکل ۵-۳، خط توپُر درونیابی نقاط داده ارائه شده را نشان می‌دهد درحالی که خط چین بهترین خط برازش به دست آمده از روش برازش منحنی حداقل مربعات را نشان می‌دهد.



شکل ۵-۳: x بر حسب y

برای برازش حداقل مربعات غیرخطی به تعدادی از پارامترهای نامشخص، ممکن است برازش حداقل مربعات خطی به صورت تکراری^۱ بر یک شکل خطی از تابع تا زمانی که همگرایی حاصل گردد، اعمال شود؛ بنابراین اگر قرار است داده‌های ارائه شده بر هر تابع غیرخطی مانند نمونه زیر منطبق شوند

$$y = ax^b \text{ یا } y = ae^{bx}, \quad (۴۶-۵)$$

آنگاه در ابتدا تابع خطی می‌شود همچنان که در نمونه پیشین با لگاریتم گیری از دو طرف معادله نتیجه می‌شود

$$\log_{10} y = \log_{10} a + b \log_{10} x, \quad (47-5)$$

اکنون تابع به شکل زیر خطی به نظر می‌رسد

$$Y = A + bX, \quad (48-5)$$

به‌طوری‌که $\log_{10} y = Y$, $\log_{10} a = A$ و $\log_{10} x = X$. به‌صورتی مشابه

$$y = ae^{bx}. \quad (49-5)$$

$$\ln y = \ln a + bx, \quad (50-5)$$

$$Y = A + bx. \quad (51-5)$$

به‌طوری‌که $\ln y = Y$ و $\ln a = A$.

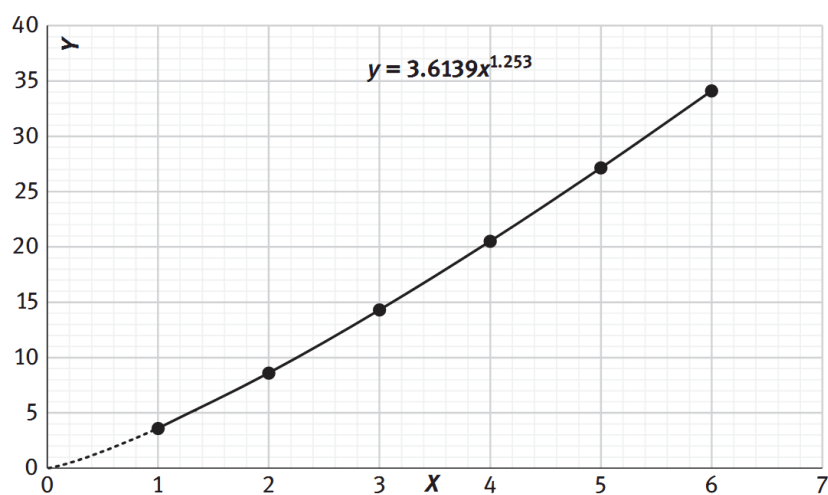
مثال ۲: با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات، داده‌های زیر را در شکل رابطه $y = ax^b$ منطبق کنید.

x	y
۱	۳/۶۱۴
۲	۸/۶۱۳
۳	۱۴/۳۱۵
۴	۲۰/۵۲۹
۵	۲۷/۱۵۱
۶	۳۴/۱۲۱

راه‌حل: داده‌های پیشین ($n = 6$) در جدول ۲-۵ جدول‌بندی شده‌اند و به‌صورت ترسیمی در شکل ۴-۵ نمایش داده شده‌اند.

جدول ۲-۵: برازش منحنی برای $y = ax^b$

x	y	Y	X	XY	X^2
۱	۳/۶۱۴	۰/۵۵۸	۰/۰۰۰	۰/۰۰۰	۰/۰۰۰
۲	۸/۶۱۳	۰/۹۳۵	۰/۳۰۱	۰/۲۸۲	۰/۰۹۱
۳	۱۴/۳۱۵	۱/۱۵۶	۰/۴۷۷	۰/۵۵۱	۰/۲۲۸
۴	۲۰/۵۲۹	۱/۳۱۲	۰/۶۰۲	۰/۷۹۰	۰/۳۶۲
۵	۲۷/۱۵۱	۱/۴۳۴	۰/۶۹۹	۱/۰۰۲	۰/۴۸۹
۶	۳۴/۱۲۱	۱/۵۳۳	۰/۷۷۸	۱/۱۹۳	۰/۶۰۶
		$\Sigma Y = 6/928$	$\Sigma X = 2/857$	$\Sigma XY = 3/818$	$\Sigma X^2 = 1/775$

شکل ۵-۴: X بر حسب Y

این نتیجه می‌دهد که:

$$۶A + ۸۵۷/۲ = ۹۲۸/۶,$$

(۵۲-۵)

$$۸۵۷/۲ + ۷۷۵/۱B = ۸۱۸/۳,$$

(۵۳-۵)

در نتیجه

$$A = ۵۵۸/۶,$$

$$B = ۲۵۳/۱ = b,$$

$$a = \text{ani log } A = ۶۱۴/۳,$$

در نتیجه

$$y = ۶۱۴/۳x^{۲۵۳/۱}.$$

(۵۴-۵)

مثال ۳: فشار بخار یک هیدروکربن با دما به صورت زیر تغییر می کند.

t (°C)	۵۰	۶۰	۷۰	۸۰
p (kPa)	۱۷۷	۱۹/۵	۳۷۷	۵۰/۱۳۴

با استفاده از رگرسیون خطی برای یک خط مستقیم

$$\ln(p/\text{kPa}) = -\frac{\Delta_{\text{vap}}H_m}{R} \frac{1}{T} + I. \quad (55-5)$$

مقدار تغییر در آنتالپی که $\Delta_{\text{vap}}H_m$ است را مشخص کنید.

راه حل: چون در داده ها، دما t بر حسب °C داده شده است، باید آن را به کلین، $T = (t^\circ\text{C} + ۲۷۳)K$ تبدیل و $\frac{1}{T}$ را محاسبه کرد. با استفاده از رابطه خطی $Y = A + BX$ نتایج در جدول ۳-۵ جدول بندی شده اند که در آن I نشانگر عرض از مبدأ a است.

جدول ۳-۵: برازش منحنی حداقل مربعات برای یافتن آنتالپی

t (°C)=x	p (kPa)=y	$\sqrt{T}=X$	$\ln p=Y$	X^2	XY
۵۰	۱۷۷	۰/۰۰۳۰۹۵۹۷۵	۲/۴۵۹۵۸۸۸۴۲	۹/۵۸۵۰۶E-۶	۰/۰۰۷۶۱۴۸۲۶
۶۰	۱۹/۵	۰/۰۰۳۰۰۳۰۰۳	۲/۹۷۰۴۱۴۴۶۶	۹/۰۱۸۰۳E-۶	۰/۰۰۸۹۲۰۱۶۴
۷۰	۳۷۷	۰/۰۰۲۹۱۵۴۵۲	۳/۴۵۶۳۱۶۶۸۱	۸/۴۹۹۸۶E-۶	۰/۰۱۰۰۷۶۷۲۵
۸۰	۵۰/۱۳۴	۰/۰۰۲۸۳۲۸۶۱	۳/۹۱۴۶۹۹۴۲۱	۸/۰۲۵۱E-۶	۰/۰۱۱۰۸۹۸
		ΣX_i	ΣY_i	ΣX_i^2	ΣXY
		=۰/۰۱۱۸۴۷۲۹۱	=۱۲/۸۰۱۰۹۴۱	=۳/۵۱۲۸۱E-۵	=۰/۰۳۷۷۰۱۵۱۵

با کاربرد معادله های نرمال برای رگرسیون خطی ($n = 4$)

$$4 \times a + ۰/۱۱۸۴۷۲۹۱/۱ \times b = ۸۰۴۸۵۰۰۶/۱۲, \quad (56-5)$$

$$۰/۱۱۸۴۷۲۹۱/۰ \times a + ۰۰۰۰۳۵۱۲۸/۰ \times b = ۰/۳۷۷۱۱۹۹۴/۰ \quad (57-5)$$

که حل آن برای a و b نتیجه می دهد که $a = ۱۹/۵۸۵$ و $b = -۵۵۳۲$.

$$\Delta_{\text{vap}}H_m = ۹۹۳/۴۵ \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \text{ دهد } b = -\frac{\Delta_{\text{vap}}H_m}{R}$$

مثال ۴: داده‌های زیر برای تجزیه پراکسید دی-ترسیوبوتیل در حجم ثابت به دست آمده‌اند:

t (min)	۰	۳	۶	۹	۱۲	۱۵	۱۸	۲۱
p (torr)	۱۶۹/۳	۱۸۹/۲	۲۰۷/۱	۲۲۴/۴	۲۴۰/۲	۲۵۶/۰	۲۶۵/۷	۲۸۲/۶

با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات برای معادله $y = a + bx$ که در آن $y = \log(p_t/\text{Torr})$ برای $p_t = \frac{p_0 - p}{p_0}$ و $x = t(\text{min})$ هستند؛ در صورتی که $b = -k/30.3/2$ باشد ثابت سرعت را تعیین کنید.

راه حل: برای کاربرد معادلات نرمال برای رگرسیون خطی نتایج به شرح زیر هستند (جدول ۴-۵).

جدول ۴-۵: برازش منحنی حداقل مربعات برای یافتن آنتالپی

t (min)=x	p (torr)=y	p _t (torr)	y	xy	x ²
۰	۱۶۹/۳	۱۶۹/۳	۲/۲۲۸۶۵۶۹۵۸	۰	۰
۳	۱۸۹/۲	۱۵۹/۳۵	۲/۲۰۲۳۵۲۰۶۸	۶/۶۰۷۰۵۶۲۰۳	۹
۶	۲۰۷/۱	۱۵۰/۴	۲/۱۷۷۲۴۷۸۳۶	۱۳/۰۶۳۴۸۷۰۲	۳۶
۹	۲۲۴/۴	۱۴۱/۷۵	۲/۱۵۱۵۲۳۰۶۸	۱۹/۳۶۳۷۰۷۶۱	۸۱
۱۲	۲۴۰/۲	۱۳۳/۸۵	۲/۱۲۶۶۱۸۳۷۶	۲۵/۵۱۹۴۲۰۵۱	۱۴۴
۱۵	۲۵۶	۱۲۵/۹۵	۲/۱۰۰۹۸۱۷۲	۳۷/۵۰۲۹۷۲۵۸	۲۲۵
۱۸	۲۶۵/۷	۱۲۷/۱	۲/۰۸۳۱۴۴۱۴۳	۳۷/۴۹۶۵۹۴۵۸	۳۲۴
۲۱	۲۸۲/۶	۱۱۲/۶۵	۲/۰۵۱۷۳۱۱۹۶	۴۳/۰۸۶۳۵۵۱۲	۴۴۱
$\Sigma x = ۸۴$			$\Sigma y = ۱۷/۱۲۱۴۷۱$	$\Sigma xy = ۱۷۶/۶۳۹۵۹$	$\Sigma x^2 = ۱۲۶۰$

که نتیجه می‌دهد:

$$۸ \times a + ۸۴ \times b = ۱۲۱۴۷۷/۱۷, \quad (۵۸-۵)$$

$$۸۴ \times a + ۱۲۶۰ \times b = ۶۳۹۵۹/۱۷۶, \quad (۵۹-۵)$$

از حل معادلات بالا خواهیم داشت:

$$a = ۲۲۷۳/۲,$$

و

$$b = -۰.۰۸۳/۰,$$

و چون $b = -k/30.3/2$ است، $k = ۰.۰۸۳/۰ \times 30.3/2 = ۰.۱۹۷ \cdot \text{min}^{-1}$ خواهد بود.

مثال ۵: مقدار پتانسیل استاندارد، E^0 ، نیم الکترود $\text{Ag}|\text{AgCl}$ را با استفاده از معادله و داده‌های زیر (جدول ۵-۵) بیابید:

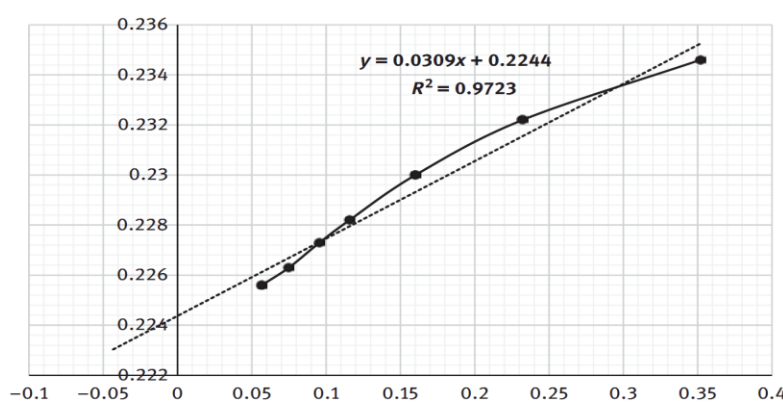
$$E + \frac{2RT}{F} \ln m = E^0 + \frac{30.3/2RT}{F} \sqrt{m}. \quad (۵-۶۰)$$

جدول ۵-۵: برازش منحنی حداقل مربعات برای یافتن آنالپی

$\sqrt{m}$	۰/۰۵۶۷۰	۰/۰۷۴۹۶	۰/۰۹۵۵۹	۰/۱۱۵۸	۰/۱۶۰۱	۰/۲۳۲۲	۰/۳۵۱۹
$E + \frac{2RT}{F} \ln m$	۰/۲۲۵۶	۰/۲۲۶۳	۰/۲۲۷۳	۰/۲۲۸۲	۰/۲۳۰۰	۰/۲۳۲۲	۰/۲۳۴۶

راه‌حل: معادله ارائه شده را می‌توان چنین تفسیر نمود

$$y = a + bx.$$



شکل ۵-۵: تغییرات $E + \frac{2RT}{F} \ln m$ بر حسب $\sqrt{m}$.

به‌طوری‌که عرض از مبدأ $a = E^0$ است، $b = \frac{30.3/2RT}{F}$ است و داده‌ها در شکل ۵-۵ رسم شده‌اند. برون‌یابی تا محور y مقدار $E_{\text{Cl}^-|\text{AgCl}|\text{Ag}}^0 = ۲۲۴۴/۰ \text{ V}$ را به دست می‌دهد.

۵-۵-۲- برازش خطی چند متغیری

روش برازش خطی چندگانه (رگرسیون خطی چند متغیری)^۱ هنگامی به‌کاربرده می‌شود که بیش از یک متغیر در اثرگذاری بر متغیر وابسته دخالت دارند. این حالت ممکن است چنین نمایش داده شود

1. Multivariate (Multiple) linear regression

$$y = a + bx_1 + cx_2, \quad (61-5)$$

که در آن x_1 و x_2 دو متغیر مستقل هستند درحالی که y یک متغیر وابسته است، b و c شیب‌ها یا ضرایب مرتبط با x_1 و x_2 هستند و a یک مقدار ثابت است. مثال‌های بعدی به روشنی برازش خطی چندگانه را نشان می‌دهند.

مثال ۶: با روش برازش خطی چندگانه، مرتبه و سرعت واکنش را با استفاده از داده‌های ارائه شده بیابید:

$$\text{Rate}(r) = k[\text{CO}]^m[\text{Cl}_2]^n. \quad (62-5)$$

Rate (mol L ⁻¹ s ⁻¹)	[CO] (mol L ⁻¹)	[Cl ₂] (mol L ⁻¹)
۰/۰۱۲	۰/۱	۰/۱
۰/۰۰۴۲۶	۰/۱	۰/۰۵
۰/۰۰۶	۰/۰۵	۰/۱
۰/۰۰۲۱۳	۰/۰۵	۰/۰۵

راه حل: چون معادله خطی نشده است، لازم است با لگاریتم گیری از طرفین معادله، به شکل زیر خطی شود (جدول ۵-۶)

$$\log r = \log k + m \log [\text{CO}] + n \log [\text{Cl}_2], \quad (63-5)$$

$$\log y = \log k + mX_1 + nX_2, \quad (64-5)$$

$$Y = K + mX_1 + nX_2, \quad (65-5)$$

به طوری که $Y = \log r$, $K = \log k$, $X_1 = \log [\text{CO}]$ و $X_2 = \log [\text{Cl}_2]$ هستند.

جدول ۵-۶: برازش خطی چندگانه برای داده‌های سینتیکی

N	Rate(y)	[CO] = x_1	[Cl ₂] = x_2	X_1	X_2	$Y = \log y$
۱	۰/۰۱۲	۰/۱	۰/۱	-۱	-۱	-۱/۹۲۰۸۲
۲	۰/۰۰۴۲۶	۰/۰۵	۰/۱	-۱/۳۰۱۰۳	-۱	-۲/۳۷۰۵۹
۳	۰/۰۰۶	۰/۱	۰/۰۵	-۱	-۱/۳۰۱۰۳	-۲/۲۲۱۸۵
۴	۰/۰۰۲۱۳	۰/۰۵	۰/۰۵	-۱/۳۰۱۰۳	-۱/۳۰۱۰۳	-۲/۶۷۱۶۲

در اینجا به جای محاسبات دستی، می‌توان از نرم‌افزار صفحه گسترده از تابع LINEST جهت سهولت محاسبات (که در بخش بعد توضیح داده شده است) استفاده نمود. پس از حل مسئله چنین نتیجه می‌شود که

$$K = \log k = 57329\%, \\ \text{antilog}(57329\%) = k = 743/3 (\text{mol L}^{-1})^{-3/2} \text{s}^{-1},$$

و به صورت مشابه

$$n = 494/1 \text{ و } m = 1.$$

بدین جهت به عنوان نمونه $0.12\% \text{ mol L}^{-1} \text{s}^{-1}$ و 290 نانومتر به ترتیب 732% و 5888% تعیین شدند. با استفاده مشابه داده ارائه شده در جدول است؛ از این رو، محاسبات صحیح هستند.

مثال ۷: مقادیر جذب مخلوطی با غلظت نامشخص از KMnO_4 و $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ با روش رنگ سنجی در دو طول موج متفاوت 372 و 290 نانومتر به ترتیب 732% و 5888% تعیین شدند. با استفاده از روش برازش خطی چندگانه غلظت مجهول دو نمونه را بیابید.

راه حل: بر اساس قانون بیر-لامبرت می‌دانیم که $A = \varepsilon \cdot c \cdot l$. از آنجاکه دو ترکیب با یکدیگر برهم‌کنش ندارند، جذب آن‌ها جمع‌پذیر هستند. همچنین اگر طول مسیر سل طیف‌سنجی برابر با یک در نظر گرفته شود، آنگاه در 372 نانومتر،

$$732\% = \varepsilon_{\text{KMnO}_4}^{372} C_{\text{KMnO}_4} + \varepsilon_{\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7}^{372} C_{\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7}, \quad (5-66)$$

در 290 نانومتر،

$$5888\% = \varepsilon_{\text{KMnO}_4}^{290} C_{\text{KMnO}_4} + \varepsilon_{\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7}^{290} C_{\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7}, \quad (5-67)$$

که پس از جایگزینی ضرایب جذب مولی به شکل زیر تبدیل می‌شوند:

$$732\% = 805 C_{\text{KMnO}_4} + 1652 C_{\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7}, \quad (5-68)$$

$$5888\% = 1030 C_{\text{KMnO}_4} + 853 C_{\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7}. \quad (5-69)$$

این دو معادله به شکل $y = ax_1 + bx_2 + c$ هستند. در نمونه بالا، $c = 0$ است که به صورت تحلیلی قابل حل است. (جدول ۵-۷)

جدول ۵-۷: برازش خطی چندگانه برای داده‌های جذب

Absorbance(Y)	X _۱	X _۲
۰/۵۸۸	۸۰۵	۱۶۵۲
۰/۷۳۲	۱۰۳۰	۸۵۳

و حل کردن آن‌ها توسط تابع LINEST نتیجه می‌دهد که،

$$C_{K_2Cr_2O_7} = ۷۶/۲ \times ۱۰^{-۴} \text{ M},$$

$$C_{KMnO_4} = ۴۷/۳ \times ۱۰^{-۴} \text{ M}.$$

۵-۵-۳- برازش چندجمله‌ای

انطباق منحنی چندجمله‌ای مرتبه دو (مثلاً معادله یک سهمی) مانند حل سه معادله خطی هم‌زمان است. به‌عنوان نمونه، یک چندجمله‌ای مرتبه دوم به‌صورت زیر ارائه می‌شود

$$y = a + bx + cx^2, \quad (۷۰-۵)$$

به‌طوری‌که خطاها چنین محاسبه می‌شوند:

$$e_i = y_{\text{measured}} - y_{\text{expected}} = y_i - (a + bx + cx^2), \quad (۷۱-۵)$$

$$\min S_r = \min e_i^2 = \min [y_i - (a + bx + cx^2)]^2. \quad (۷۲-۵)$$

برای کمینه کردن خطا، از مربع خطا نسبت به a ، b و c مشتق (دیفرانسیل) گرفته و نتیجه برابر با صفر قرار داده می‌شود:

$$\frac{dS_r}{da} = \frac{dS_r}{db} = \frac{dS_r}{dc} = 0, \quad (۷۳-۵)$$

$$\frac{dS_r}{da} = \sum_{i=1}^n [-2(y_i - (a + bx + cx^2))] = 0, \quad (۷۴-۵)$$

$$\frac{dS_r}{db} = \sum_{i=1}^n [-2x(y_i - (a + bx + cx^2))] = 0, \quad (۷۵-۵)$$

$$\frac{dS_r}{dc} = \sum_{i=1}^n [-2x^2(y_i - (a + bx + cx^2))] = 0, \quad (۷۶-۵)$$

در نتیجه

$$na + \sum_{i=1}^n x_i b + \sum_{i=1}^n x_i^{\vee} c = \sum_{i=1}^n y_i, \quad (77-5)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i a + \sum_{i=1}^n x_i^{\vee} b + \sum_{i=1}^n x_i c = \sum_{i=1}^n x_i y_i, \quad (78-5)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i^{\vee} a + \sum_{i=1}^n x_i^{\vee} b + \sum_{i=1}^n x_i^{\vee} c = \sum_{i=1}^n x_i^{\vee} y_i, \quad (79-5)$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^{\vee} \\ \sum x_i & \sum x_i^{\vee} & \sum x_i^{\vee} \\ \sum x_i^{\vee} & \sum x_i^{\vee} & \sum x_i^{\vee} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^{\vee} y_i \end{bmatrix} \quad (80-5)$$

اکنون می‌توان این معادله‌های نرمال را با استفاده از حساب ماتریس‌ها برای ضرایب a ، b و c حل کرد. به صورت مشابه چندجمله‌ای‌های مرتبه بالاتر نیز می‌توانند برای برازش نقاط داده ارائه شده بر معادله متناسب بکار برده شوند.

مثال ۸: مقادیر فشار اسمزی یک پلیمر در غلظت‌های مختلف در محلولی در دمای ۲۹۸ کلوین به صورت زیر هستند:

$\rho \text{ (g cm}^{-3}\text{)}$	۰/۰۲۰۰	۰/۰۱۵۰	۰/۰۱۰۰	۰/۰۰۷۵	۰/۰۰۵۰	۰/۰۰۲۵
$\Pi \text{ (atm)}$	۰/۰۱۱۷	۰/۰۰۶۶	۰/۰۰۳۰	۰/۰۰۱۷۳	۰/۰۰۰۹	۰/۰۰۰۳۵

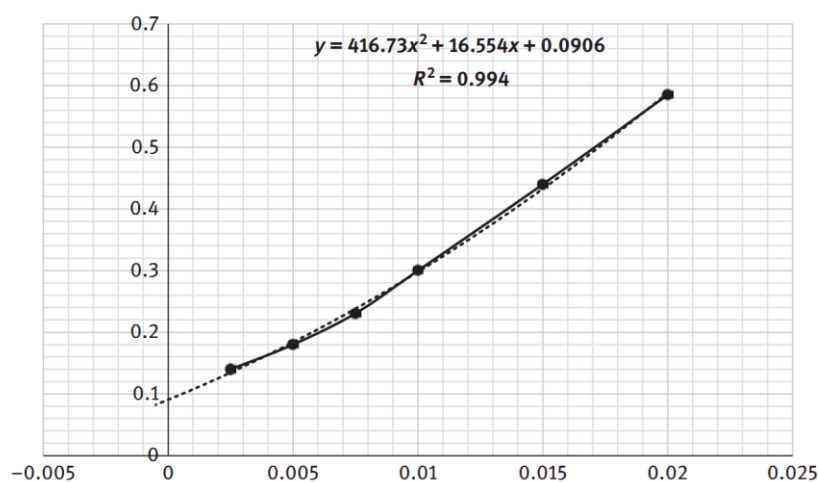
با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات طبق معادله $y = a + bx + cx^2$ که در آن $y = \frac{\Pi}{\rho}$ ، $x = \rho$ و $a = \frac{RT}{M}$ مقدار M را محاسبه کنید.

راه حل: معادله ارائه شده، معادله وانت هوف^۱ برای یک پلیمر است که برای آن معادلات نرمال ۵-۷۷ تا ۵-۷۹ را می توان نوشت

$$na + \sum_{i=1}^n x_i b + \sum_{i=1}^n x_i^2 c = \sum_{i=1}^n y_i, \quad (5-77)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i a + \sum_{i=1}^n x_i^2 b + \sum_{i=1}^n x_i^3 c = \sum_{i=1}^n x_i y_i, \quad (5-78)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i^2 a + \sum_{i=1}^n x_i^3 b + \sum_{i=1}^n x_i^4 c = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i. \quad (5-79)$$



شکل ۵-۶: معادله وانت هوف برای یک پلیمر

مقدار حدی کمیت $\frac{\Pi}{\rho}$ در غلظت بی نهایت را می توان با ترسیم نمودار $\frac{\Pi}{\rho}$ بر حسب ρ و تعیین عرض از مبدأ هنگامی که $\rho \rightarrow 0$ (شکل ۵-۶) به دست آورد. در نتیجه، $M = \frac{RT}{\left(\frac{\Pi}{\rho}\right)_{\rho \rightarrow 0}}$ خواهد بود. جدول بندی داده های مورد نیاز در جدول ۵-۸ ارائه شده اند.

1. Van't Hoff equation

جدول ۵-۸: داده‌های برازش خطی چندگانه

$\rho = x$	Π	$\frac{\Pi}{\rho} = y$	x^r	x^r	x^r	xy	x^2y
$\rho/0.2$	$\rho/0.117$	$\rho/0.585$	$\rho/0.004$	$\rho/0.00008$	$\rho/0.0000016$	$\rho/0.117$	$\rho/0.00234$
$\rho/0.15$	$\rho/0.066$	$\rho/44$	$\rho/0.00225$	$\rho/0.00003375$	$\rho/0.625E-08$	$\rho/0.066$	$\rho/0.00099$
$\rho/0.1$	$\rho/0.3$	$\rho/3$	$\rho/0.001$	$\rho/0.00001$	$\rho/0.0000001$	$\rho/0.3$	$\rho/0.0003$
$\rho/0.075$	$\rho/0.173$	$\rho/23.666667$	$\rho/0.0005625$	$\rho/21875E-07$	$\rho/16406E-09$	$\rho/0.173$	$\rho/0.0012975$
$\rho/0.05$	$\rho/0.009$	$\rho/18$	$\rho/0.00025$	$\rho/0.0000125$	$\rho/25E-10$	$\rho/0.009$	$\rho/0.000045$
$\rho/0.025$	$\rho/0.0035$	$\rho/14$	$\rho/0.0000625$	$\rho/5625E-08$	$\rho/9.625E-11$	$\rho/0.0035$	$\rho/0.00000875$
$\Sigma x = \rho/0.6$	$\Sigma x = \sqrt{1756666}$	$\Sigma x^r = \rho/0.0081$	$\Sigma x^r = \sqrt{293E-05}$	$\Sigma x^r = \sqrt{244E-07}$	$\Sigma x^r = \sqrt{244E-07}$	$\Sigma xy = \rho/0.242$	$\Sigma x^2y = \rho/0.003213$

در نتیجه

$$\times 6a + 0.6 \times b + 0.008125 \times c = 875666667/1, \quad (81-5)$$

$$0.6 \times a + 0.008125 \times b + 29375/1E-05 \times c = 0.2428/0, \quad (82-5)$$

$$0.008125 \times a + 29375/1E-05 \times b + 2445/2E-07 \times c = 0.003813/0. \quad (83-5)$$

از حل معادلات بالا خواهیم داشت

$$a = 0.906/0, b = 554/16 \text{ و } c = 73/416$$

$$\text{و چون } a = \frac{RT}{M}$$

$$\text{پس } M = \frac{RT}{a} = 27346/26 \text{ g mol}^{-1} \text{ به دست می آید.}$$

روش برازش منحنی حداقل مربعات به تجزیه و تحلیل روند^۱ کمک می کند بدین صورت که اگر منحنی برون یابی شود می توان رفتار یا مقدار کمیت قابل مشاهده در هر نقطه تصادفی مورد نظر را پیش بینی کرد. این روش داده های اندازه گیری شده موجود را با مدل های ریاضی معیار (معادله ها) مقایسه می کند. این یک ابزار معیار متعارف در نرم افزارهای صفحات گسترده تحت عنوان خط روند^۲ است که خود از روش برازش منحنی حداقل مربعات مشتق شده است.

1. Trend Analysis
2. Trendline

۵-۶- رگرسیون و همبستگی در اکسل

نرم افزارهای صفحات گسترده مجموعه‌ای از مدل‌های آماری و پارامترها تحت عنوان تحلیل واریانس^۱ را، با استفاده از کلمات کلیدی ذخیره شده در نرم افزارهای صفحات گسترده، برای محاسبه پارامترهای آماری شامل همبستگی و برازش (رگرسیون) بکار می‌برند.

(۱) برای یافتن همبستگی می‌توان داده‌ها را در دو جدول؛ که رابطه بین آن‌ها باید تعیین شود؛ وارد نمود، سپس در یک سلول خالی عبارت $\text{CORREL}(\text{Array}_1, \text{Array}_2)$ را تایپ نمود و کلید Enter را فشرد (جدول ۵-۹).

جدول ۵-۹: داده‌های برازش خطی چندگانه

	A	B
1	Concentration	Absorbance
2	0.01	0.29
3	0.02	0.35
4	0.03	0.48
5	0.04	0.6
6	0.05	0.71
	= CORREL(A2:A6,B2:B6)	

نتیجه حاصل ۹۹۴۵٪ است که مشابه نتیجه‌ای است که هنگام استفاده از فرمول همبستگی پیرسون^۲؛ که کلمه کلیدی آن $\text{PEARSON}(\text{Array}_1, \text{Array}_2)$ است؛ حاصل می‌شود. مربع ضریب همبستگی چیزی جز ضریب برازش (رگرسیون) نیست که این موضوع به صورت ترسیمی یا با استفاده از برازش منحنی حداقل مربعات قابل تأیید و تحقیق است. از آنجا که $A = \epsilon \cdot b \cdot l$ است، رابطه‌ای خطی بین جذب و غلظت؛ با شیب $\epsilon \cdot l$ و بدون عرض از مبدأ؛ وجود دارد.

-
1. Analysis of variance (ANOVA)
 2. Pearson correlation formula

(۲) برای یافتن شیب و عرض از مبدأ بین نقاط داده‌ای که رابطه خطی دارند، تابع LINEST؛ که تنها از روش برازش منحنی حداقل مربعات استفاده می‌کند؛ بکار برده می‌شود.

برای عرض از مبدأ، ساختار نوشتاری دستورها عبارت است از (جدول ۵-۱۰):

=INTERCEPT(known y's, known x's)

=INDEX(LINEST(known y's, known x's), ۲)

=INDEX(LINEST(B۲:B۶, A۲:A۶), ۲)

جدول ۵-۱۰: کاربرد تابع LINEST برای یافتن شیب و عرض از مبدأ در نرم‌افزار صفحات گسترده اکسل

	A	B
1	Concentration	Absorbance
2	0.01	0.29
3	0.02	0.35
4	0.03	0.48
5	0.04	0.6
6	0.05	0.71
	=INTERCEPT(B2:B6,A2:A6)	=SLOPE(B2:B6,A2:A6)

به صورت مشابه برای شیب، ساختار نوشتاری دستور عبارت است از

=SLOPE(B۲:B۶,A۲:A۶)

=INDEX(LINEST(B۲:B۶,A۲:A۶),۱)

حالت ۱ و ۲ در ساختار نوشتاری دستور به شیب و عرض از مبدأ اشاره دارد. تابع LINEST پارامترهای آماری یک خط را با استفاده از برازش منحنی حداقل مربعات باز می‌گرداند. این تابع مقادیر شیب و عرض از مبدأ را که به بهترین شکل بر داده‌های ارائه شده منطبق می‌شوند، محاسبه می‌کند. نه تنها تابع LINEST بلکه تابع SLOPE و INTERCEPT را نیز می‌توان به ترتیب برای ارزیابی شیب و عرض از مبدأ بکار بُرد. نتایج به دست آمده مشابه نتایج به دست آمده با حل معادلاتی هستند که پیش از این بکار برده شدند.

تابع LINEST زمانی بسیار مفید است که دو یا تعداد بیشتری متغیر مستقل موجودند که پیش از این تحت عنوان برازش خطی چندگانه نیز معرفی شد (جدول ۵-۱۱). در چنین مواردی، داده‌ها به ترتیب معکوس نسبت به متغیر مستقل در کاربرگ^۱ وارد می‌شوند. به عنوان نمونه، دو متغیر مستقل x_1 و x_2 و یک متغیر وابسته (y) موجودند، آنگاه پس از وارد کردن داده‌ها، سه سلول پیوسته کنار هم در یک سطر انتخاب می‌شوند ($A8, B8, C8$) و فرمول در نوار فرمول بالای کاربرگ وارد می‌شود و کلیدهای $\text{Ctrl}+\text{Shift}+\text{Enter}$ فشرده می‌شوند.

ساختار نوشتاری این دستور عبارت است از $\text{LINEST}(y's, x's \text{ (reverse order)})$.

بنابراین با جایگذاری مقادیر شیب و عرض از مبدأ، امکان نوشتن معادله به صورت زیر فراهم می‌شود

$$y = 3x_2 + 2x_1 + 5, \quad (5-84)$$

که با قرار دادن مقادیر معلوم x_1 و x_2 می‌توان صحت آن را تأیید و تحقیق نمود

$$y = (2 \times 5) + (3 \times 9) + 5 = 42.$$

که نتیجه آن درست است؛ بنابراین برای هر مقدار داده شده از x_1 و x_2 مقدار y را می‌توان محاسبه نمود.

تابع LINEST را نه تنها برای محاسبه پارامترهای آماری توابع خطی بلکه برای توابع چندجمله‌ای، نمایی و لگاریتمی هم می‌توان بکار بُرد. تابع LOGEST برای محاسبه مشخصه‌های بهترین منحنی نمایی برای داده‌ها استفاده می‌شود درحالی که تابع GROWTH برای پیش‌بینی مقادیر منحنی نمایی بکار برده می‌شود.

جدول ۵-۱۱: کاربرد تابع LINEST برای برازش خطی چندگانه

$f(x)$	=LINEST(C2:C6, A2:B6)		
	A	B	C
1	x_1	x_2	y
2	2	3	18
3	3	5	26
4	4	7	34
5	5	9	42
6	6	13	56
7	Slope2	Slope 1	Intercept
8	3	2	5

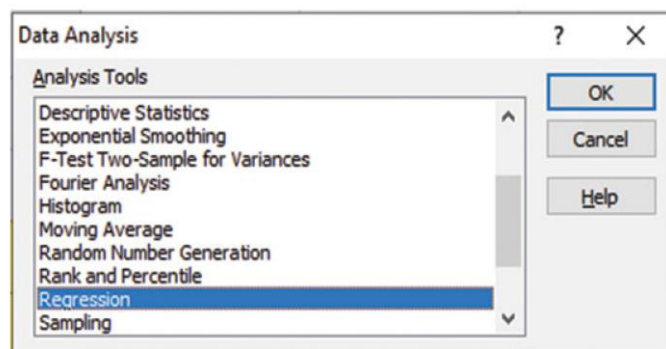
تابع **TREND** نیز مشابه LINEST برازش منحنی خطی را انجام می‌دهد اما مقادیر شیب و عرض از مبدأ را در صفحه گسترده باز نمی‌گرداند ولی بر اساس نتایج برازش، این تابع نتایج (مقادیر y) مربوط به مقادیر جدید x را پیش‌بینی می‌کند. ساختار نوشتاری این تابع عبارت است از:

=TREND(known_y's,known_x's) or

=TREND(known_y's,known_x's, unknown x 's value

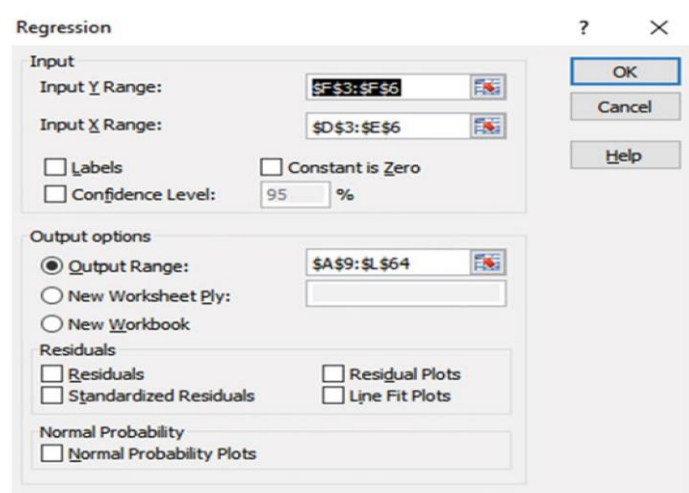
تابع FORECAST مشابه تابع TREND است به‌جز آنکه ساختار نوشتار دستوری آن اندکی متفاوت است. تابع FORECAST تنها یک عامل پیش‌بینی را می‌پذیرد درحالی‌که TREND می‌تواند چند عامل پیش‌بینی را دریافت کند. این توابع از طریق برگه افزونه تحلیل داده‌ها^۱ نیز در دسترس هستند.

(۳) برای برازش منحنی، می‌توان از تحلیل داده‌ها و انتخاب گزینه برازش (Regression) استفاده کرد (شکل ۵-۷).



شکل ۵-۷: برگه تحلیل داده‌ها

پنجره جدیدی ظاهر می‌شود و از کاربر خواسته می‌شود تا محدوده داده‌ها را انتخاب نماید (شکل ۵-۸).



شکل ۵-۸: انتخاب داده‌ها در برگه رگرسیون

هنگامی که محدوده داده‌ها و محدوده نتایج خروجی در سربرج صفحه گسترده انتخاب شوند، خروجی به صورت نشان داده شده در شکل ۵-۹ نمایش داده خواهد شد.

SUMMARY OUTPUT								
Regression statistics								
Multiple R	1							
R square	1							
Adjusted R square	1							
Standard error	2.77556E-16							
Observations	4							
ANOVA								
	df	ss	Ms	F	Significance F			
Regression	2	0.292913593	0.146457	1.9E+30	5.1284E-16			
Residual	1	7.70372E-32	7.7E-32					
Total	3	0.292913593						
	Coefficients	Standard error	t stat	P-value	Lower 95%	Upper 95%	Lower 95.0%	Upper 95.0%
Intercept	0.573290316	1.5066E-15	3.81E+14	1.67E-15	0.57329032	0.5732903	0.57329032	0.57329032
X Variable 1	1.49410907	9.2202E-16	1.62E+15	3.93E-16	1.49410907	1.4941091	1.49410907	1.49410907
X Variable 2	1	9.2202E-16	1.08E+15	5.87E-16	1	1	1	1

شکل ۵-۹: ANOVA در صفحه گسترده

این تحلیل مبتنی بر ANOVA است که ابزار بسیار قدرتمندی است که ممکن است اطلاعات زیادی را در مورد پارامترهای آماری ارائه دهد و در صورت صحیح بودن دامنه داده‌ها به ساخت مدل آماری مفید کمک می‌کند.

۵-۷- مسئله‌هایی برای تمرین

۱. گرانیروی یک هیدروکربن با دما به صورت زیر تغییر می‌کند.

t (°C)	۰	۲۰	۴۰
η (mP)	۲/۸۴	۲/۳۳	۱/۹۷

انرژی فعال‌سازی را با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات مطابق معادله زیر تعیین کنید

$$\ln(\eta/\eta_0) = \ln(A/\eta_0) + \frac{E}{RT}$$

۲. با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات، ظرفیت گرمایی مولی اکسیژن ارائه شده در جدول زیر را بر معادله $y = a + b(T/K) + c(T/K)^2$ برازش دهید.

T (K)	۲۹۸	۳۹۸	۴۹۸	۵۹۸	۶۹۸
C _p (J K ⁻¹ mol ⁻¹)	۲۹/۳۸	۳۰/۲۴	۳۱/۰۷	۳۱/۸۸	۳۲/۶۷

۳. با کاربرد داده‌های ارائه‌شده برای تجزیه $N_2O(g)$ ، داده‌ها را با روش برازش منحنی حداقل مربعات $y = a + bx$ برازش دهید به‌طوری‌که $y = \log \{[NO_2]/\text{mol dm}^{-3}\}$ و $x = t$ (s). اگر $b = -k/2/303$ باشد، ثابت سرعت k را بیابید.

t (s)	۰	۲۰۰	۴۰۰	۶۰۰	۸۰۰	۱۰۰۰	۱۲۰۰
$\frac{[NO_2]}{(\text{mol dm}^{-3})}$	۰/۲۵۰	۰/۲۲۳	۰/۱۹۸	۰/۱۷۴	۰/۱۵۲	۰/۱۳۴	۰/۱۲۰

۴. داده‌های زیر برای فعالیت نوری یک محلول به دست آمده‌اند.

t (min)	۰	۷/۲	۳۶/۸	۴۶/۸	۶۸/۰	α
θ (degree)	۲۴/۱	۲۷/۴	۱۲/۴	۱۰/۰	۵/۵	-۱۰/۷

با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات به شکل $y = a + bx$ ، ثابت سرعت k را بیابید، به‌طوری‌که،

$$x = t(\text{min}) \text{ و } y = \log \{(\theta_\alpha - \theta_t)/(\theta_\alpha - \theta_0)\} \text{ که در آن } b = -k/303/2$$

۵. با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات داده‌های زیر را بر یک چندجمله‌ای مرتبه دو منطبق کنید.

x	۰	۰/۱	۰/۳	۰/۴۵	۰/۶	۰/۷۸	۰/۸۳	۰/۹۲
y	۰	۰/۰۱	۰/۰۹	۰/۲۰۲۵	۰/۳۶	۰/۶۰۸۴	۰/۶۸۸۹	۰/۸۴۶۴

۶. ثابت تعادل توزیع، K_d ، گونه I_2 بین CCl_4 و آب را برای داده‌های ارائه‌شده (با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات) محاسبه کنید.

$C_{\text{org}} (\text{mol}^{-1}\text{dm}^{-3})$	1.8×10^{-3}	1.2×10^{-2}	1.75×10^{-2}	2×10^{-2}	2.5×10^{-2}
$C_{\text{aq}} (\text{mol}^{-1}\text{dm}^{-3})$	1×10^{-4}	1.5×10^{-4}	2×10^{-4}	2.4×10^{-4}	3×10^{-4}

فصل ششم
انتگرال گیری عددی

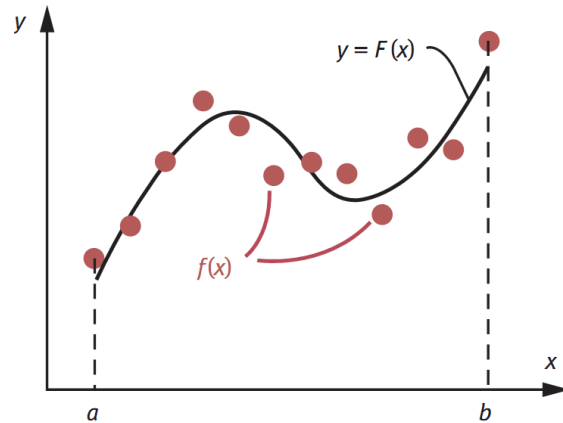
۶-۱- مقدمه

انتگرال گیری عددی^۱ به روش های انتگرال گیری تقریبی اشاره دارد که برای ارزیابی انتگرال در جایی- که تابع صریح^۲ نامشخص است، استفاده می شوند. در حساب دیفرانسیل و انتگرال (حسابان)^۳ راه های زیادی برای تقریب انتگرال وجود دارد، اما انتگرال گیری عددی شامل انتگرال گیری با استفاده از فن های عددی است. ایده پشت این روش عددی، تقریب زدن تابع پیوسته^۴ با نقاط گسسته^۵ است. به بیان ساده تر، این روش شامل یافتن سطح زیر منحنی است که در آن منحنی مورد نظر شکل تابع را بازنمایی می کند (شکل ۶-۱).

دو روش برای انتگرال گیری عددی وجود دارد که عبارت اند از فرمول نیوتن-کاتس^۶ (که برای بازه های انتگرال گیری مساوی بکار برده می شود) و کوادراتور گاوس^۷ (که برای بازه های انتگرال گیری نامساوی بکار برده می شود). برازش منحنی نیز روشی برای انتگرال گیری عددی است که شامل برازش یک تابع به نقاط گسسته و سپس انتگرال گیری تحلیلی از تابع است.

هنگامی که تابع نامشخص است، نقاط داده گسسته با فواصل مساوی برای تقریب زدن تابع با استفاده از انطباق آن نقاط با یک چندجمله ای مرتبه n ام در فرمول نیوتن-کاتس بکار برده می شوند. هنگامی که توابع به صورت تحلیلی مشخص هستند یا هنگامی که زیر بازه شامل های با فاصله گذاری نامساوی وجود دارند، آنگاه به منظور به دست آوردن تقریب های دقیق، فرمول کوادراتور گاوسی برای محاسبه کوادراتور گاوسی در نقاط انتخاب شده روی محور افقی^۸ بکار برده می شود.

-
1. Numerical integration
 2. Explicit function
 3. Calculus
 4. Continuous function
 5. Discrete points
 6. Newton-Cotes formula
 7. Gauss quadrature
 8. Selected abscissa



شکل ۶-۱: انتگرال معین یک تابع مساحت زیر منحنی است.

کوادراتور گاوس شامل سه نوع فرمول به نام‌های فرمول گاوس-لژاندر^۱، فرمول گاوس-چبیشف^۲ و فرمول گاوس-هرمیت^۳ است. در حیطه انتگرال‌گیری عددی، این بخش با فرض آنکه داده‌ها با فاصله مساوی توزیع شوند، تنها به پُرکاربردترین فرمول نیوتن-کاتس می‌پردازد.

۶-۲- فرمول نیوتن-کاتس

فرمول‌های نیوتن-کاتس بسته یا فرمول‌های کوادراتور نیوتن-کاتس (نام‌گذاری شده به نام اسحاق نیوتن و راجر کاتس) به مجموعه فرمول‌هایی برای انتگرال‌گیری عددی بر اساس محاسبه انتگرال با فواصل مساوی اشاره دارد. این فرمول‌ها پُرکاربردترین روش‌های عددی برای انتگرال‌گیری هستند. زمانی به فرمول‌های نیوتن بسته اشاره می‌شود که نقاط داده از ابتدا تا انتهای بازه مشخص باشند درحالی‌که فرمول‌های نیوتن-کاتس باز زمانی استفاده می‌شوند که حدود انتگرال فراتر از حدود بازه داده‌ها باشند. از آنجایی که اکثر انتگرال‌های معین در علوم شامل فواصل بسته هستند، از فرمول‌های نیوتن-کاتس بسته استفاده می‌شود. فرمول‌های نیوتن-کاتس بسته عبارت‌اند از:

(۱) قاعده دوزنقه‌ای،

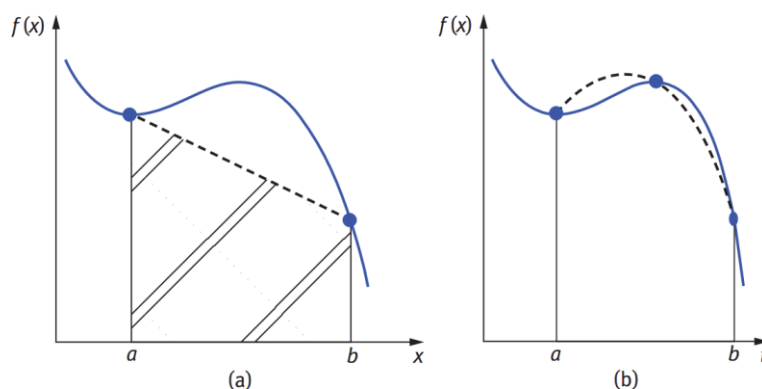
(۲) قاعده $\frac{1}{3}$ سیمپسون،

-
1. Gauss-Legendre formula
 2. Gauss-Chebyshev formula
 3. Gauss-Hermite formula

(۳) قاعده $\frac{3}{8}$ سیمپسون،

(۴) قاعده بول.

درحالی که قاعده دوزنقه‌ای انتگرال را با استفاده از یک خط راست تقریب می‌زند، قاعده سیمپسون از یک منحنی یا چندجمله‌ای استفاده می‌کند (شکل ۶-۲). هر روش با کاربرد تقریب‌های بهتر از چندجمله‌ای درجه بالاتر، کارآمدتر می‌شود.



شکل ۶-۲: تقریب انتگرال با یک خط راست (a) و با منحنی (چندجمله‌ای) (b).

۶-۲-۱- مجموع ریمان^۱

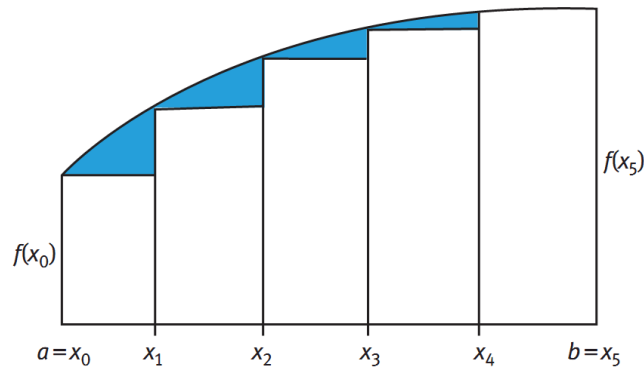
این روش بخشی از فرمول نیوتن-کاتس نیست، اما هنوز هنگامی که در مورد انتگرال‌گیری بحث می‌شود همچنان یک جزء حائز اهمیت است. روش مجموع ریمان روش تقسیم‌بندی سطح زیر منحنی به اشکال مختلف هندسی مانند مستطیل، دوزنقه و غیره و سپس تجمیع مساحت هر یک از اجزاء است که در نهایت مساحت زیر منحنی را به دست می‌دهد. مجموع مستطیل روشی است که در آن مساحت زیر منحنی به قطعه‌های مستطیلی تقسیم می‌شود که مساحت هر ناحیه از آن محاسبه و با سایر مقادیر جمع می‌شود.

1. Riemann sum

به منظور محاسبه سطح زیر منحنی در بازه بین a و b (شکل ۶-۳)، بازه $[a, b]$ به n زیر-بازه^۱ با پهنای h به صورت زیر تقسیم می شود:

$$h = \frac{b - a}{n}, \quad (۶-۱)$$

که به ایجاد مجموعه‌ای از مستطیل‌ها با عرض h و طول $f(x)$ می انجامد. زیر-بازه‌ها به صورت $x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5$ و $x_5 = b$ (در اینجا $n = 5$) نام گذاری می شوند.



شکل ۶-۳: مجموع ریمان (تخمین کمتر از مقدار واقعی سطح زیر منحنی)

می توان سطح زیر منحنی را با تجميع سطح تمام مستطیل‌های درون منحنی به صورت زیر تخمین زد:

$$\begin{aligned} \text{مساحت} = & f(x_0)(x_1 - x_0) + f(x_1)(x_2 - x_1) + f(x_2)(x_3 - x_2) \\ & + f(x_3)(x_4 - x_3) + f(x_4)(x_5 - x_4), \end{aligned} \quad (۶-۲)$$

$$\text{مساحت} = \{f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + f(x_3) + f(x_4)\} \Delta x, \quad (۶-۳)$$

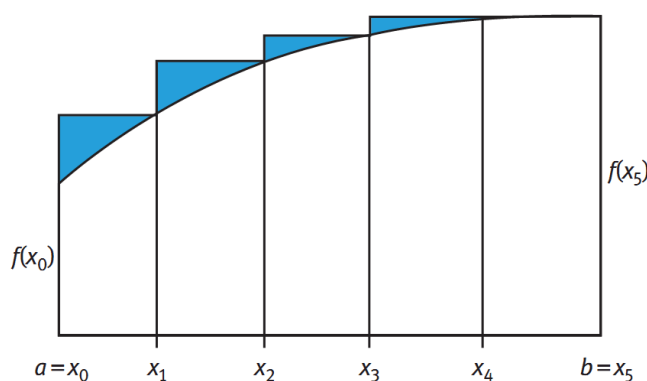
1. Sub-interval

$$\text{مساحت} = \sum_{i=0}^4 f(x_i) \Delta x, \quad (4-6)$$

$$\text{مساحت} = \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \Delta x, \quad (5-6)$$

$$\text{مساحت} = \int_{i=0}^{n-1} f(x) dx. \quad (6-6)$$

اینجا برای یافتن سطح زیر منحنی، Δx با dx جایگزین می‌شود و Σ با $\int$ (انتگرال ده) جایگزین می‌شود. روش پیشین سطح زیر منحنی را کم‌تر تخمین می‌زند. شاید بتوان سطح زیر منحنی را از زاویه دید دیگری نیز ارزیابی نمود (شکل ۴-۶).



شکل ۴-۶: مجموع ریمان (تخمین بیش از مقدار واقعی سطح زیر منحنی)

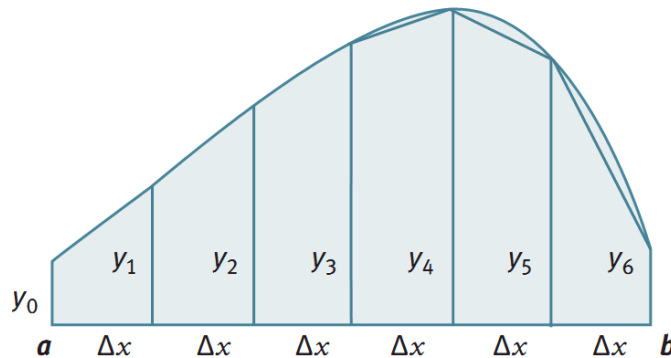
فرمول و روش مشابه هستند اما در این حالت سطح زیر منحنی بیشتر از مقدار حقیقی برآورد می‌شود. از این‌رو، مجموع ریمان روشی بسیار مبهم برای یافتن انتگرال است. به‌وضوح به نظر می‌رسد

این روش انتگرال را کمتر یا بیشتر از مقدار حقیقی تخمین می‌زند؛ بنابراین، برای محاسبه بهتر مساحت، قاعده دوزنقه‌ای معرفی شد.

۶-۲-۲- قاعده دوزنقه‌ای^۱

در ریاضیات و به‌صورت خاص‌تر محاسبات عددی، قاعده دوزنقه‌ای روشی برای محاسبه تقریبی انتگرال معین $I = \int_a^b f(x)$ است. این روش ساده‌ترین روش برای انتگرال گیری عددی است که در آن نقاط حدفاصل توسط یک وتر^۲ متصل می‌شوند تا دوزنقه‌ای را شکل دهند که بعد اغلب به چندین دوزنقه تقسیم می‌شود که مساحت مجموع آن‌ها تقریب انتگرال مورد نظر است. این قاعده اساساً مبتنی بر فرمول نیوتن-کاتس مرتبه اول است که بیان می‌کند که می‌توان مقدار دقیق یک انتگرال را به‌صورت یک چندجمله‌ای تعیین نمود. تابع $f(x)$ ممکن است لزوماً یک چندجمله‌ای نباشد؛ بلکه می‌تواند یک تابع خطی نیز باشد. قاعده دوزنقه‌ای بر اساس تقریب زدن منطقه زیر نمودار تابع $f(x)$ به‌صورت دوزنقه و محاسبه مساحت آن عمل می‌کند. این فرمول همچنین فرمول نیوتن-کاتس دو نقطه‌ای نیز نامیده می‌شود. مشابه مجموع‌های ریمان، سطح زیر منحنی در قاعده دوزنقه‌ای به چندین قطعه دوزنقه‌ای شکل مفروض؛ تقسیم‌بندی می‌شود و سطح هر دوزنقه محاسبه و تجمیع می‌گردد. با توجه به اینکه مساحت دوزنقه به‌صورت زیر به دست می‌آید.

فاصله بین اضلاع موازی $\times$ (مجموع اضلاع موازی) $\times \frac{1}{2}$ = مساحت دوزنقه



شکل ۶-۵: قاعده دوزنقه‌ای

-
1. Trapezoidal rule
 2. Chord

اگر سطح زیر منحنی به n ذوزنقه تقسیم شود (تعداد بازه‌ها) آنگاه با توجه به مساحت شکل (شکل ۵-۶) نتیجه می‌شود:

$$\begin{aligned} \text{مساحت} = & \frac{1}{r} (y_0 + y_1) \Delta x + \frac{1}{r} (y_1 + y_2) \Delta x + \frac{1}{r} (y_2 + y_3) \Delta x + \dots \\ & + \frac{1}{r} (y_{n-1} + y_n) \Delta x, \end{aligned} \quad (7-6)$$

اینجا فاصله اضلاع موازی Δx است.

$$\text{مساحت} = \left(\frac{y_0}{r} + y_1 + y_2 + y_3 + \dots + y_{n-1} + \frac{y_n}{r} \right) \Delta x, \quad (8-6)$$

به‌طوری‌که $\Delta x = \frac{b-a}{n} = h$ است.

اگر تابع $f(x)$ که در بازه a تا b پیوسته است، ارائه شود، آنگاه این بازه به n زیر-بازه تقسیم می‌شود، بنابراین می‌توان چنین نوشت:

$$y_0 = f(a), \quad (9-6)$$

$$y_1 = f(a + \Delta x), \quad (10-6)$$

$$y_2 = f(a + 2\Delta x), \quad (11-6)$$

$$y_{n-1} = f(a + i\Delta x), \quad (12-6)$$

$$y_n = f(b). \quad (13-6)$$

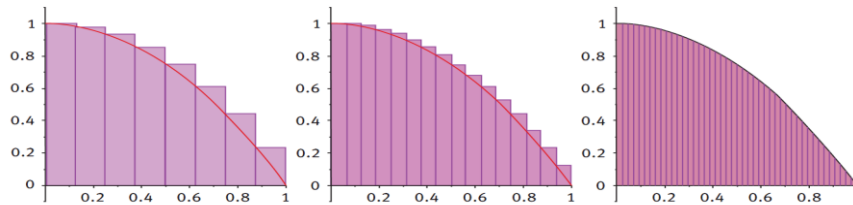
اینجا $i = n - 1$ است (n به تعداد بازه‌ها اشاره دارد)

$$\text{مساحت} = \int_a^b f(x) \approx \Delta x \left(\frac{y_0}{r} + y_1 + \dots + y_{n-1} + \frac{y_n}{r} \right), \quad (14-6)$$

$$\text{مساحت} = \int_a^b f(x) \approx \Delta x \left\{ \left(\frac{y_0 + y_n}{r} \right) + (y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1}) \right\}, \quad (15-6)$$

$$\text{مساحت} = I = \int_a^b f(x) \approx h \left\{ \left(\frac{f(a) + f(b)}{r} \right) + \left(\sum_{i=1}^{n-1} f(a + ih) \right) \right\}. \quad (16-6)$$

آشکار است که هر چه تعداد بازه‌ها (n) اضافه شود، عرض بازه کاهش می‌یابد (شکل ۶-۶). این عمل دقت تقریب را افزایش می‌دهد. می‌توان نتایج قاعده دوزنقه‌ای را با افزایش تعداد بازه‌ها و کاهش اندازه گام (h) بهبود بخشید اما این کار خطای گرد کردن کل را می‌افزاید. برای پرهیز از این وضع، قاعده سیمپسون با کاربرد چندجمله‌ای مرتبه بالاتر جهت تخمین تابع ابداع شد.

شکل ۶-۶: افزایش زیربازه‌ها (کاهش h)

مثال ۱: با استفاده از قاعده دوزنقه‌ای (جدول ۶-۱)، مقدار $\int_0^1 (\Delta x - 2x^2) dx$ را با تعداد ۱۰ بازه بیابید.

راه‌حل: اینجا حدود انتگرال a و b به ترتیب برابر با ۰ و ۱ داده شده‌اند، $n = 10$ است پس:

$$h = \frac{b - a}{n} = \frac{1 - 0}{10} = 0.1.$$

جدول ۶-۱: قاعده دوزنقه‌ای برای تخمین انتگرال.

	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}
x	۰	۰/۱	۰/۲	۰/۳	۰/۴	۰/۵	۰/۶	۰/۷	۰/۸	۰/۹	۱/۰
$f(x)$	۰	۰/۴۸	۰/۹۲	۱/۳۲	۱/۶۸	۲/۰	۲/۲۸	۲/۵۲	۲/۷۲	۲/۸۸	۳/۰

بر این اساس با کاربرد فرمول به شکل بالا نتیجه زیر حاصل می‌شود:

$$I = \frac{1}{10} \left\{ \frac{(3+0)}{2} + 48/0 + 92/0 + 32/1 + 68/1 + 2/2 + 28/2 + 52/2 + 72/2 + 88/2 \right\} = 83/1. \quad (6-17)$$

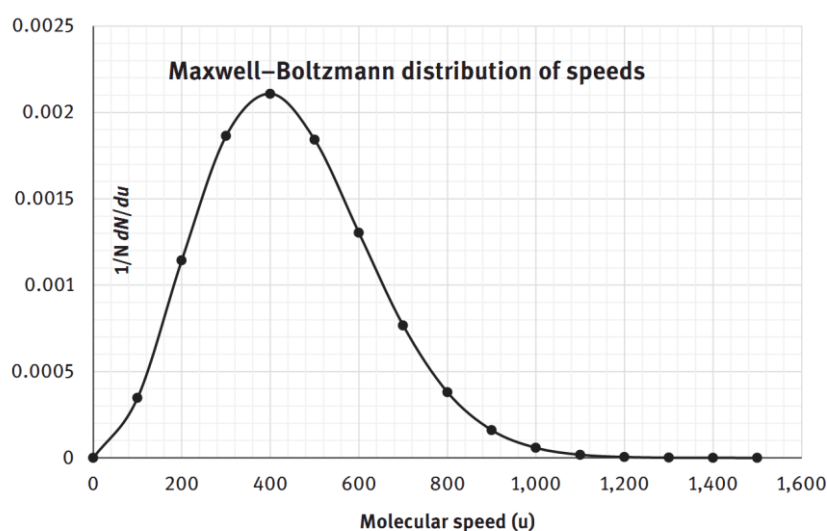
روش معمول انتگرال گیری مقدار $I = 1/8333$ را به دست می‌دهد، بنابراین این روش پاسخ کاملاً دقیقی ارائه می‌دهد.

مثال ۲: انتگرال گیری معادله زیر برای گاز O_2 را با هر سه روش انجام دهید.

$$\frac{1}{N} \frac{dN}{du} = \int_a^b 4\pi \left(\frac{M}{2\pi RT} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-Mu^2}{2RT} \right) u^2 du. \quad (۱۸-۶)$$

در این رابطه $du = \frac{(b-a)}{N}$ است که در آن مقادیر $a = 0$ ، $b = 1500$ و $N = 15$ هستند.

راه حل: معادله ارائه شده، معادله ماکسول-بولتزمن^۱ برای توزیع سرعت هاست (شکل ۶-۷) که برای آن سطح زیر منحنی احتمال^۲ یافتن کسری از مولکول های دارای محدوده سرعت های ذکر شده را نشان می دهد که این احتمال کل همواره برابر ۱ است. همین موضوع را می توان با استفاده از قاعده دوزنقه ای نیز به خوبی تأیید نمود. برای هر محدوده سرعت مولکولی، نسبت $\frac{1}{N} \frac{dN}{du}$ در جدول ۶-۲ ارائه شده است و سپس انتگرال گیری سطح زیر منحنی احتمال یافتن مولکول در آن حدود سرعت را به دست می دهد.



شکل ۶-۷: توزیع ماکسول سرعت های مولکولی برای مولکول اکسیژن.

1. Maxwell-Boltzmann's equation
2. Probability

جدول ۶-۲: قاعده دوزنقه‌ای برای تخمین انتگرال.

U (m/s)	dN/du (1/N)	U (m/s)	dN/du (1/N)
۰	۰	۸۰۰	۰/۰۰۰۳۸۰۰۴۳
۱۰۰	۰/۰۰۰۳۴۷۲	۹۰۰	۰/۰۰۰۱۶۰۴۵۳
۲۰۰	۰/۰۰۱۱۴۴۱۹۴	۱۰۰۰	۵/۸۰۷۳۸E-۰۵
۳۰۰	۰/۰۰۱۸۶۴۰۱۸	۱۱۰۰	۱/۸۱۰۴۶E-۰۵
۴۰۰	۰/۰۰۲۱۰۸۶۳۹	۱۲۰۰	۴/۸۷۸۶۳E-۰۶
۵۰۰	۰/۰۰۱۸۴۲۴۸۶	۱۳۰۰	۱/۱۳۹۳۶E-۰۶
۶۰۰	۰/۰۰۱۳۰۳۹۳۴	۱۴۰۰	۲/۳۱۰۸۷E-۰۷
۷۰۰	۰/۰۰۰۷۶۶۵۵۸	۱۵۰۰	۴/۰۷۷۱۴E-۰۸

$$I = \frac{h}{\gamma} [f(a) + f(b) + 2(f(a + (n-1)h))], \quad (۱۹-۶)$$

$$\text{چون } h = \frac{(۱۵۰۰-۰)}{۱۵} \text{ بنابراین}$$

$$I = ۱۰۰ \times [۰.۳۸/۲ \times ۱۰^{-۸} + ۹۹۹۹۵۲/۹ \times ۱۰^{-۳}], \quad (۲۰-۶)$$

$$I = ۹۹۹۹۹۷۲۴/۰ \approx ۱.$$

درحالی‌که با کاربرد قاعده دوزنقه‌ای برای سرعت‌های بین ۰ تا ۱۵۰۰ متر بر ثانیه، مساحت برابر با ۹۹۹۹۹۷۲٪ تعیین شد؛ احتمال یافتن مولکول‌ها در محدوده خاصی از سرعت‌ها را نیز می‌توان برآورد کرد مثلاً از ۴۰۰ تا ۱۰۰۰ متر بر ثانیه، این مقدار برابر با ۵۵۳٪ یا ۵۵/۳٪ تعیین می‌شود.

مثال ۳: تغییر آنتروپی نیتروژن گرم شده در فشار ثابت از ۲۹۸ تا ۳۷۳ درجه کلوین را محاسبه کنید در صورتی‌که تغییرات دمایی $C_{p,m}$ بر اساس عبارت زیر توصیف شود.

$$C_{p,m}/\text{JK}^{-1}\text{mol}^{-1} = ۲۹۶/۲۷ + ۲۳/۵ \times ۱۰^{-۳}(T/K) - ۰.۴۲/۰ \times ۱۰^{-۷}(T/K)^۲. \quad (۲۱-۶)$$

راه‌حل: از آنجا که

$$\left(\frac{dS}{dT}\right) = \frac{C_{p,m}}{T}, \quad (۲۲-۶)$$

بنابراین تغییر آنتروپی توسط رابطه زیر به دست می‌آید (جدول ۶-۳):

$$\Delta S = \int \frac{C_p}{T} dT. \quad (۲۳-۶)$$

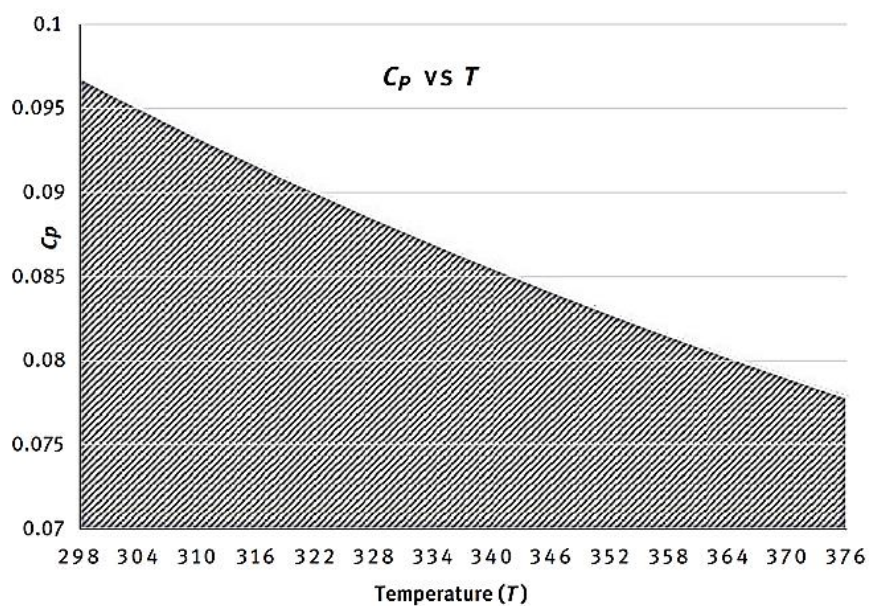
بنابراین، با جایگذاری تابع ارائه شده برای ظرفیت گرمایی C_p و انتگرال گیری تغییرات آنتروپی حاصل می شود.

$$\Delta S = \int \frac{C_{p,m}}{T} dT = \int \left(\frac{296}{T} + 5/23 \times 10^{-3}/K - 0.42/0 \times 10^{-7}(T/K^2) \right) dT. \quad (24-6)$$

تغییرات آنتروپی را می توان با انتگرال گیری از سطح زیر منحنی C_p/T بر حسب T به دست آورد (شکل ۶-۸).

جدول ۶-۳: قاعده دوزنقه ای برای تعیین آنتروپی.

T (K)	$C_{p,m}/K$ ($JK^{-1}mol^{-1}$)	T (K)	$C_{p,m}/K$ ($JK^{-1}mol^{-1}$)	T (K)	$C_{p,m}/K$ ($JK^{-1}mol^{-1}$)	T (K)	$C_{p,m}/K$ ($JK^{-1}mol^{-1}$)
۲۹۸	۰/۰۹۶۸	۳۱۹	۰/۰۹۰۸	۳۴۰	۰/۰۸۵۵	۳۶۱	۰/۰۸۰۸
۳۰۱	۰/۰۹۵۹	۳۲۲	۰/۰۹۰۰	۳۴۳	۰/۰۸۴۸	۳۶۴	۰/۰۸۰۲
۳۰۴	۰/۰۹۵۰	۳۲۵	۰/۰۸۹۲	۳۴۶	۰/۰۸۴۱	۳۶۷	۰/۰۷۹۶
۳۰۷	۰/۰۹۴۱	۳۲۸	۰/۰۸۸۴	۳۴۹	۰/۰۸۳۴	۳۷۰	۰/۰۷۹۰
۳۱۰	۰/۰۹۳۳	۳۳۱	۰/۰۹۷۷	۳۵۲	۰/۰۸۲۸	۳۷۳	۰/۰۷۸۴
۳۱۳	۰/۰۹۲۴	۳۳۴	۰/۰۸۷۰	۳۵۵	۰/۰۸۲۱	۳۷۶	۰/۰۷۷۸
۳۱۶	۰/۰۹۱۶	۳۳۷	۰/۰۸۶۲	۳۵۸	۰/۰۸۱۵		



شکل ۶-۸: C_p بر حسب T (تغییرات ظرفیت گرمایی با دما)

با کاربرد قاعده دوزنقه‌ای نتیجه می‌شود که:

$$\text{مساحت} = \frac{376 - 298}{26} \left[0.87325/0 + 1640.47/2 \right] = 754/6 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}.$$

ضمن حل انتگرال با روش‌های معمول استفاده از حدود^۱ (روش‌های حدی)، تغییر آنتروپی $6/75 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ تعیین می‌شود. از این‌رو نتایج حاصل از قاعده دوزنقه‌ای کاملاً رضایت‌بخش هستند زیرا تعداد بازه‌ها زیاد هستند.

۶-۲-۱- خطای قاعده دوزنقه‌ای

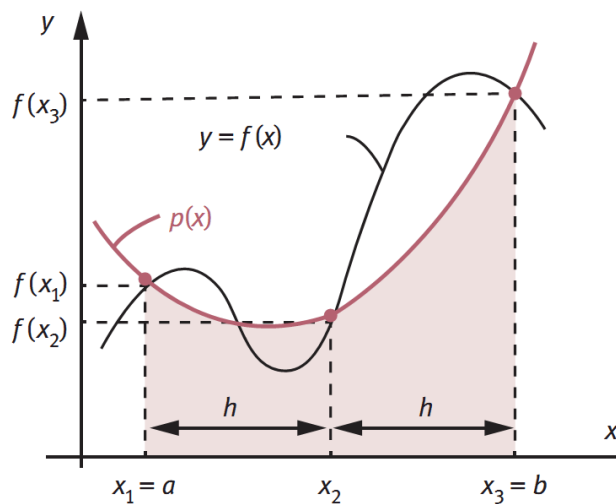
خطا در قاعده دوزنقه از بسط تیلور برای $f(x)$ به دست می‌آید و به صورت زیر ارائه می‌شود

$$E = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(x), \quad (۶-۲۵)$$

که در آن $a < x < b$ و $f''(x)$ مشتق دوم $f(x)$ در بازه $[a, b]$ است؛ بنابراین، E با h^3 متناسب است.

۶-۲-۳- قاعده $\frac{1}{3}$ سیمپسون^۱

قاعده سیمپسون دومین نوع از روش نیوتن-کاتس مرتبه دو برای تخمین انتگرال تابع $f(x)$ با کاربرد چندجمله‌ای‌ها (کاربرد کمان‌های سهمی‌وار^۲ به جای خط مستقیم مورد استفاده در قاعده دوزنقه‌ای) است. قاعده سیمپسون به نام توماس سیمپسون برای محاسبه تقریبی سطح زیر منحنی و برای محاسبه عدم دقت (خطا) در قاعده دوزنقه‌ای نام‌گذاری شد. درحالی‌که قاعده دوزنقه‌ای برای توابع خطی بهتر عمل می‌کند، قاعده سیمپسون برای منحنی‌ها و چندجمله‌ای‌ها بسیار بهتر عمل می‌کند. این شیوه از سایر روش‌های عددی انتگرال‌گیری دقیق‌تر است (شکل ۶-۹).



شکل ۶-۹: تقریب زدن نقاط داده توسط تابع سهمی‌وار

1. Simpson's 3/1rd rule
2. Parabolic arcs

در قاعده $\frac{1}{p}$ سیمپسون، یک سهمی برای محاسبه تقریبی هر بخش از منحنی بکار برده می‌شود. سطح به n قطعه با عرض Δx تقسیم می‌شود. قاعده سیمپسون را می‌توان با تقریب چندجمله‌ای لاگرانژ^۱ به دست آورد. اینجا $P_i(x)$ یک چندجمله‌ای از درجه کوچک‌تر یا مساوی با $n-1$ است که از n نقطه $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ می‌گذرد و به صورت زیر نمایش داده می‌شود.

$$P(x) = \sum_{i=1}^n P_i(x), \quad (26-6)$$

$$P_i(x) = y_i \prod_{k=1}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}, \quad (27-6)$$

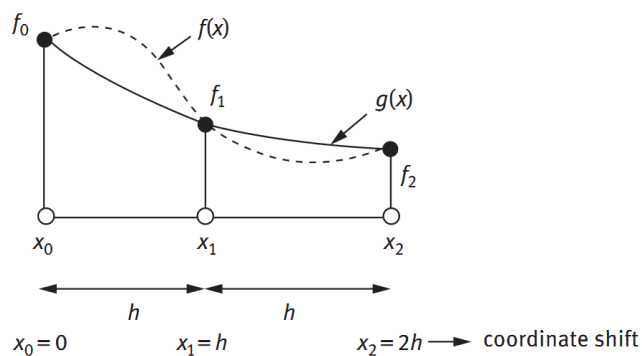
$$l_i(x) = \prod_{k=1}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}, \quad (28-6)$$

به طوری که،

$$l_i(x) = \left(\frac{x - x_0}{x_i - x_0} \right) \cdot \left(\frac{x - x_1}{x_i - x_1} \right) \cdots \left(\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right) \cdot \left(\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \right) \cdots \left(\frac{x - x_n}{x_i - x_n} \right). \quad (29-6)$$

در اینجا این فرض اساسی بکار برده می‌شود که سطح زیر منحنی به سه قسمت مساوی مطابق شکل تقسیم می‌شود (شکل ۶-۱). این روش شامل تقریب چندجمله‌ای مرتبه دو لاگرانژ است که در آن بازه انتگرال بین x_0 و x_2 تقسیم می‌شود که بر اساس آن عرض فاصله بین دو بازه به صورت ذیل به دست می‌آید.

1. Lagrange's polynomial



شکل ۶-۱۰: تقریب زدن مساحت با استفاده از چندجمله‌ای لاگرانژ مرتبه دو $P(x)$

$$h = \frac{x_r - x_s}{2}, \quad (۳۰-۶)$$

$$P(x) = f_s L_s(x) + f_1 L_1(x) + f_r L_r(x), \quad (۳۱-۶)$$

به‌طوری‌که،

$$L_s(x) = \left(\frac{x - x_1}{x_s - x_1} \right) \cdot \left(\frac{x - x_r}{x_s - x_r} \right). \quad (۳۲-۶)$$

با جایگزین کردن مقادیر متغیرها ($x_s = 0$ ، $x_1 = h$ و $x_r = 2h$) داریم:

$$L_s(x) = \frac{x^2 - 2hx + h^2}{2h^2}, \quad (۳۳-۶)$$

$$L_1(x) = \left(\frac{x - x_s}{x_1 - x_s} \right) \cdot \left(\frac{x - x_r}{x_1 - x_r} \right), \quad (۳۴-۶)$$

$$L_1(x) = \frac{2hx + 2x^2}{2h^2}, \quad (۳۵-۶)$$

$$L_r(x) = \left(\frac{x - x_s}{x_r - x_s} \right) \cdot \left(\frac{x - x_1}{x_r - x_1} \right), \quad (۳۶-۶)$$

$$L_r(x) = \frac{x^r - hx}{rh^r}, \quad (37-6)$$

اکنون می توان انتگرال تابع $f(x)$ را به صورت زیر محاسبه نمود.

$$I = \int_{x_0}^{x_r} f(x) dx, \quad (38-6)$$

بنابراین

$$I = \int_{x_0}^{x_r} \left\{ f_0 \left[\frac{x^r - rhx + rh^r}{rh^r} \right] + f_1 \left[\frac{rhx + rx^r}{rh^r} \right] + f_r \left[\frac{x^2 - hx}{rh^r} \right] \right\} dx, \quad (39-6)$$

$$I = \frac{1}{rh^r} \left[f_0 \left(\frac{x^r}{r} - \frac{rhx^r}{r} + rxh^r \right) + f_1 \left(\frac{rhx^r}{r} - \frac{rx^r}{r} \right) + f_r \left(\frac{x^r}{r} - \frac{hx^r}{r} \right) \right]_{x_0}^{x_r} + E, \quad (40-6)$$

$$I = \frac{1}{rh^r} \left[f_0 \left(\frac{\lambda h^r}{r} - \frac{12h^r}{r} + rh^r - 0 \right) + f_1 \left(\lambda h^r - \frac{16h^r}{r} \right) + f_r \left(\frac{\lambda h^r}{r} - \frac{rh^r}{r} \right) \right] + E, \quad (41-6)$$

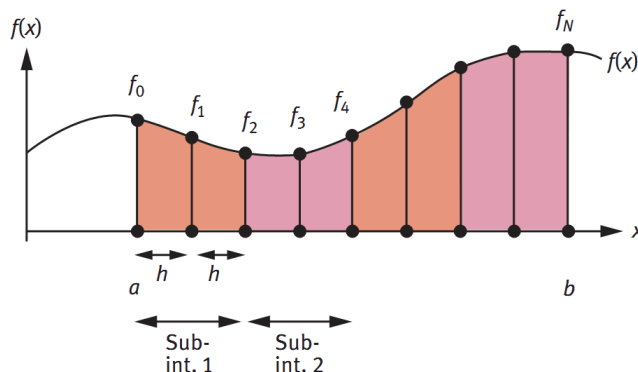
$$I = \frac{h}{r} [f_0 + rf_1 + f_r] + E. \quad (42-6)$$

از آنجا که عبارت نهایی دارای ضریب $\frac{1}{r}$ است، این روش قاعده $\frac{1}{r}$ سیمپسون نیز نامیده می شود.

۶-۲-۳-۱- قاعده سیمپسون انتگرال مرکب

اگر بازه انتگرال گیری کوچک و هموار^۱ باشد (یعنی تغییرات عمده در تابع وجود نداشته باشد) آنگاه تنها دو بازه؛ مانند آنچه در روش های پیش از این بکار برده شد؛ برای تقریب مقدار دقیق انتگرال کافی است؛ اما اگر این گونه نباشد آنگاه در چنین مواردی، بازه ها به تعداد بیشتری زیر-بازه های کوچک تقسیم می شوند تا تابع در چنین بازه های کوچکی هموار شود (شکل ۶-۱۱).

1. Smooth



شکل ۶-۱۱: تقسیم‌بندی زیر-بازه‌ها (قاعده سیمپسون مرکب)

قاعده سیمپسون به هر زیر-بازه اعمال می‌شود و نتایج تجميع می‌شوند تا انتگرالی که کل بازه را تقریب می‌زند، به دست آید. این فرایند قاعده سیمپسون انتگرال مرکب (قاعده سیمپسون بسط داده شده) نامیده می‌شود که می‌تواند به صورت زیر استخراج شود.

$$I = \frac{h}{3} [(f_0 + 4f_1 + f_2) + (f_2 + 4f_3 + f_4) + (f_4 + 4f_5 + f_6) + \dots + (f_{N-4} + 4f_{N-3} + f_{N-2}) + (f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N)] + E, \quad (43-6)$$

$$I = \frac{h}{3} [(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + 4f_5 + \dots + 2f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N)] + E, \quad (44-6)$$

$$I = \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 4 \sum_{i=1,3}^{N-1} f(a + ih) + 2 \sum_{i=2,4}^{N-2} f(a + ih) \right] + E. \quad (45-6)$$

$i = 1, 2$ به شروع از $i = 1$ با گام‌های دو واحدی (مقادیر فرد) اشاره دارد و $i = 2, 3$ به شروع از $i = 2$ با گام‌های دو واحدی (مقادیر زوج) اشاره دارد. ذکر این نکته ضروری است که تعداد بازه‌های N زوج هستند درحالی‌که $N + 1$ نقطه انتگرال‌گیری وجود دارد که فرد هستند. قاعده سیمپسون نتایج بسیار دقیق‌تری از قاعده ذوزنقه‌ای به دست می‌دهد. قاعده سیمپسون از تابع سهمی برای تقریب تابع در بازه موردنظر استفاده می‌کند. قاعده سیمپسون مشروط به آن است که N باید ترجیحاً زوج باشد و مقدار h باید ثابت باشد. حتی اگر N زوج نباشد، مقدار h باید همچنان ثابت باشد.

خطاهای برشی^۱ برای قاعده سیمپسون و قاعده سیمپسون مرکب با روابط زیر محاسبه می‌شوند:

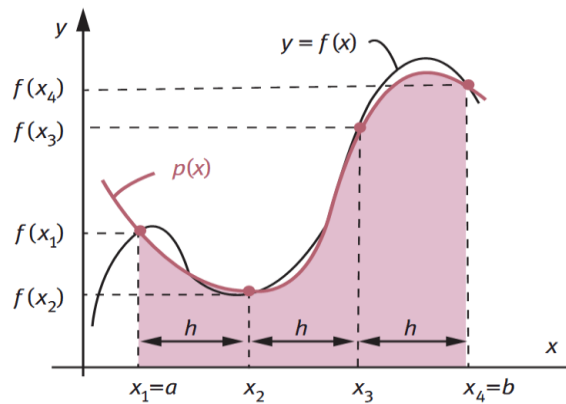
$$E = \frac{-h^5}{90} f''''(x), \quad (۴۶-۶)$$

$$E = \frac{-h^5 N}{90} f''''(x) = \frac{-h^5(b-a)}{180} f''''(x). \quad (۴۷-۶)$$

که $f^{(4)} = f''''(x)$ مشتق چهارم تابع در یک نقطه بین $[a, b]$ است.

۶-۲-۴-۳ سیمپسون

درست مانند قاعده $\frac{1}{3}$ سیمپسون که مبتنی بر تقریب درجه دوم چندجمله‌ای است، هنگامی که چندجمله‌ای با درونیابی مکعبی (درجه سه) تقریب می‌شود، این روش به‌عنوان قانون $\frac{3}{8}$ سیمپسون شناخته می‌شود (شکل ۶-۱۲).



شکل ۶-۱۲: قاعده $\frac{3}{8}$ سیمپسون

در این روش، معادله مکعبی یا چندجمله‌ای مرتبه بالاتر برای تقریب نقاط داده بکار برده می‌شود. این روش چندجمله‌ای لاگرانژ مرتبه سه را بکار می‌برد که ضمن انتگرال گیری چنین نتیجه می‌دهد.

$$I = \int_{x_1}^{x_4} f(x) dx = \frac{3h}{8} [f(x_1) + 3f(x_2) + 3f(x_3) + f(x_4)] + E, \quad (۴۸-۶)$$

به‌طوری‌که خطای برشی با رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$E = \frac{-3h^5}{80} f^{(4)}(\xi). \quad (۴۹-۶)$$

1. Truncation error

۶-۲-۵-قاعده بول^۱

هنگامی که انتگرال گیری با محاسبه انتگرال بازه موردنظر روی پنج زیر-بازه با فاصله مساوی انجام شود، این روش قاعده بول نامیده می شود که به صورت زیر قابل محاسبه است.

$$\int_{x_0}^{x_5} f(x) dx = \frac{2}{45} h (7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) + E, \quad (50-6)$$

که در آن خطای برشی با رابطه زیر محاسبه می شود:

$$E = -\frac{8}{945} h^5 f^{(6)}(\xi). \quad (51-6)$$

مثال ۴: با استفاده از همان داده های استفاده شده در مثال ۲ برای توزیع ماکسول برای سرعت ها، سطح زیر منحنی را با استفاده از قاعده سیمپسون محاسبه نمایید.

راه حل: برای نتایج دقیق تر از قاعده سیمپسون مرکب استفاده می شود زیرا تعداد بازه های زیادی وجود دارند و همچنین تفاوت قابل توجهی بین مقادیر $f(x)$ وجود دارد، بنابراین

$$I = \frac{h}{3} [f(0) + f(1500) + 4 \sum f(\text{odd int}) + 2 \sum f(\text{even int})], \quad (52-6)$$

$$h = \frac{(1500 - 0)}{15} = 100.$$

$$I = \frac{100}{3} [0.7774 + 0.10^{-8} + 4(0.004999958) + 2(0.004999994)], \quad (53-6)$$

$$I = 9999953/0 \approx 1.$$

مثال ۵: با استفاده از رابطه

$$\Delta S = S(T_f) - S(T_i) = \int_{T_i}^{T_f} \frac{C_p}{T} dT, \quad (54-6)$$

بر اساس داده‌های ارائه شده برای گرم کردن ۱۰۰ مول روی جامد؛ Zn(s)؛ از ۲۰٪ تا ۳۰۰٪ درجه کلون، مقدار ΔS را با کاربرد هر دو قاعده ذوزنقه‌ای و قاعده سیمپسون محاسبه و نتایج را مقایسه کنید.

Temperature (K)	$C_{p,m} \text{ (JK}^{-1}\text{mol}^{-1}\text{)}$	Temperature (K)	$C_{p,m} \text{ (JK}^{-1}\text{mol}^{-1}\text{)}$
۲۰	۱۸	۱۸۰	۱۶۲/۸
۴۰	۴۴/۵۶	۲۰۰	۱۸۱/۵
۶۰	۶۴/۴۳	۲۲۰	۲۰۰/۹
۸۰	۸۰/۸۸	۲۴۰	۲۲۱
۱۰۰	۹۶/۱۵	۲۶۰	۲۴۱/۸
۱۲۰	۱۱۱/۶	۲۸۰	۲۶۳/۱
۱۴۰	۱۲۷/۸	۳۰۰	۲۸۴/۷
۱۶۰	۱۴۴/۹		

راه حل: در این مسئله، داده‌های دما و ظرفیت گرمایی در هر دما ارائه شده‌اند. با توجه به معادله انتگرال ΔS لازم است C_p/T به عنوان تابع y محاسبه شود که نتایج حاصل در جدول ۶-۴ و شکل ۶-۱۳ ارائه شده‌اند. می‌توان هر دو قاعده ذوزنقه‌ای و سیمپسون را به کار برد. با استفاده از قاعده ذوزنقه‌ای:

$$\text{مساحت} = \frac{1}{2} \left[\frac{300 - 20}{14} (849/1 + 42335/12) \right], \quad (55-6)$$

$$I = 266/95652 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

با استفاده از قاعده سیمپسون:

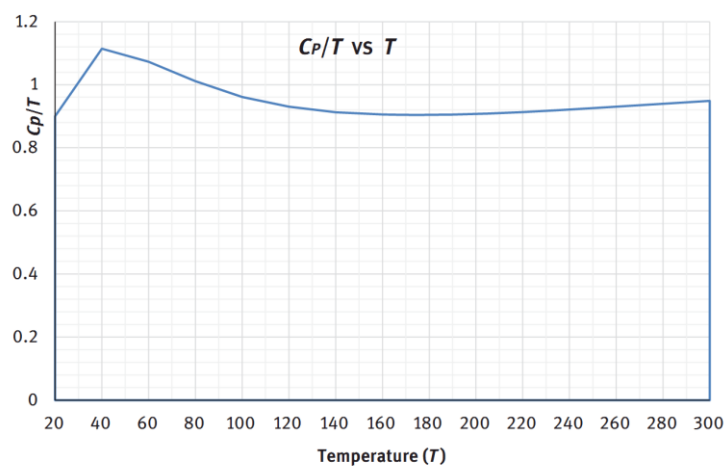
$$I = \frac{300 - 20}{14 \times 3} [f(20) + f(300) + 4(728525/6) + 2(6948/5)], \quad (56-6)$$

$$I = 70025/267 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

ضمن حل معادله به صورت تحلیلی، مقدار ΔS برابر با $253/9297 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ تعیین می‌شود.

جدول ۶-۴: قاعده سیمپسون برای تعیین تغییر آنتروپی

N	Temperature (K)	$C_{p,m}$ (JK ⁻¹ mol ⁻¹)	$f(x)=C_{p,m}/T$
۱	۲۰	۱۸	۰/۹
۲	۴۰	۴۴/۵۶	۱/۱۱۴
۳	۶۰	۶۴/۴۳	۱/۰۷۳
۴	۸۰	۸۰/۸۸	۱/۰۱۱
۵	۱۰۰	۹۶/۱۵	۰/۹۶۱۵
۶	۱۲۰	۱۱۱/۶	۰/۹۳
۷	۱۴۰	۱۲۷/۸	۰/۹۱۲۸
۸	۱۶۰	۱۴۴/۹	۰/۹۰۵۶۲۵
۹	۱۸۰	۱۶۲/۸	۰/۹۰۴۴
۱۰	۲۰۰	۱۸۱/۵	۰/۹۰۷۵
۱۱	۲۲۰	۲۰۰/۹	۰/۹۱۳۱
۱۲	۲۴۰	۲۲۱	۰/۹۲۰۸
۱۳	۲۶۰	۲۴۱/۸	۰/۹۳
۱۴	۲۸۰	۲۶۳/۱	۰/۹۳۹۶
۱۵	۳۰۰	۲۸۴/۷	۰/۹۴۹

شکل ۶-۱۳: تغییرات C_p/T بر حسب T (سطح زیر منحنی آنتروپی را به دست می‌دهد).

مثال ۶: اگر ۱۰۰ مول از Cl_2 به صورت برگشت پذیر^۱ از ۱ دسی متر مکعب به ۴۹ دسی متر مکعب در ۲۷۳ کلوین منبسط شود کار انجام شده برای این گاز حقیقی چقدر است به طوری که ضرایب معادله واندروالس عبارت اند از:

$$a = ۶۵۵/۰ \text{ MPa} \cdot \text{dm}^۶ \cdot \text{mol}^{-۲} \text{ و } b = ۰.۵۵/۰ \text{ dm}^۳ \cdot \text{mol}^{-۱} \text{ و } R = ۳۱۴/۸ \text{ J} \cdot \text{K}^{-۱} \cdot \text{mol}^{-۱}.$$

راه حل: برای گازهای حقیقی، معادله حالت واندروالس برای یک مول از گاز به صورت زیر ارائه می شود.

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}, \quad (۵۷-۶)$$

و کار انجام شده به صورت زیر محاسبه می شود

$$w = - \int p dV = - \int \left(\frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2} \right) dV. \quad (۵۸-۶)$$

که با انتگرال گیری رابطه زیر حاصل می شود

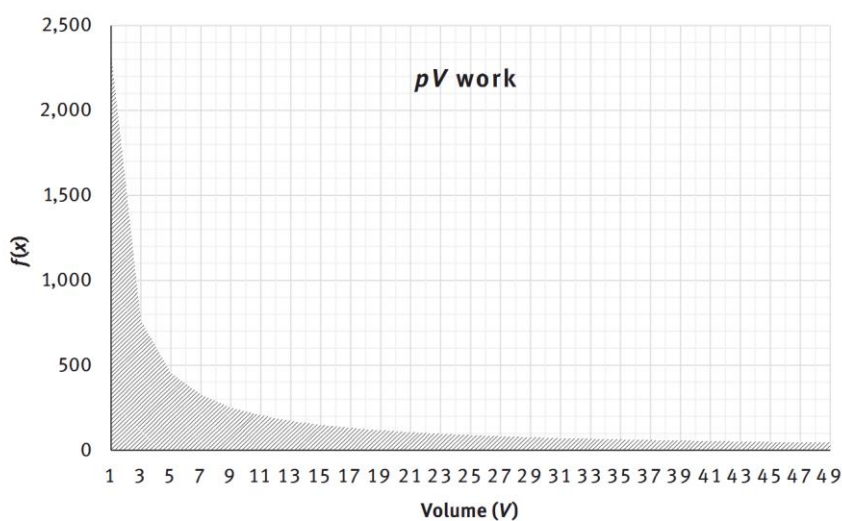
$$w = -RT \cdot \ln \frac{V_2-b}{V_1-b} - a \left(\frac{1}{V_2} - \frac{1}{V_1} \right). \quad (۵۹-۶)$$

برای حجم داده شده، فشار با استفاده از معادله حالت واندروالس محاسبه می شود. نتایج در جدول ۴-۶ جدول بندی شده اند و به صورت تصویری در شکل ۶-۱۳ نمایش داده شده اند.

جدول ۶-۵: قاعده سیمپسون برای تعیین تغییر آنتروپی

V (dm ^۳)	P (kPa)	V (dm ^۳)	P (kPa)	V (dm ^۳)	P (kPa)
۱	۱/۷۴۷	۱۹	۰/۱۱۸	۳۷	۰/۰۶۱
۳	۰/۶۹۸	۲۱	۰/۱۰۷	۳۹	۰/۰۵۸
۵	۰/۴۳۳	۲۳	۰/۰۹۸	۴۱	۰/۰۵۵
۷	۰/۳۱۳	۲۵	۰/۰۹۰	۴۳	۰/۰۵۲
۹	۰/۲۴۶	۲۷	۰/۰۸۳	۴۵	۰/۰۵۰
۱۱	۰/۲۰۲	۲۹	۰/۰۷۸	۴۷	۰/۰۴۸
۱۳	۰/۱۷۱	۳۱	۰/۰۷۳	۴۹	۰/۰۴۶
۱۷	۰/۱۴۹	۳۵	۰/۰۶۸		

1. Reversibly



شکل ۶-۱۴: سطح زیر منحنی pV کار انجام شده را به دست می‌دهد.

با استفاده از قاعده ذوزنقه‌ای،

$$w = \frac{1}{2} \times \left(\frac{49 - 1}{24} \right) [7929/1 + 2(4473/3)], \quad (6-60)$$

$$w = -687/8 \text{ kJ mol}^{-1}.$$

با استفاده از قاعده سیمپسون مرکب،

$$w = \frac{1}{3} \times \left(\frac{49 - 1}{24} \right) [7929/1 + 4(9567/1) + 2(4905/1)], \quad (6-61)$$

$$w = -400/8 \text{ kJ mol}^{-1}.$$

هنگامی که معادله به صورت تحلیلی حل شود، کار انجام شده $-319/8 \text{ kJ mol}^{-1}$ است.

در برخی از مثال‌های پیشین، ممکن است تفاوت قابل توجهی بین انتگرال محاسبه شده به صورت تحلیلی و عددی وجود داشته باشد، زیرا روش‌های عددی روش‌هایی تقریبی هستند و تنها نقاط داده گسسته را به عنوان مبنای انتگرال‌گیری بکار می‌برند که ممکن است به اندازه کافی دقیق باشند یا نباشند و یا در مورد داده‌های تجربی اندکی از تابع اصلی منحرف شوند. همچنین روش‌های عددی چندجمله‌ای‌های مرتبه n ام را بکار می‌برند که ممکن است دقیقاً بر نقاط داده منطبق شوند یا نشوند.

با این حال، مشاهده می شود که انتگرال گیری عددی می تواند نتایج رضایت بخشی را در به طوری که تابع اصلی در دسترس نیست یا انتگرال گیری آن دشوار است، ارائه دهد.

فرمول های نیوتن-کاتس باز^۱

این روش ها از نقاط انتهایی^۲ یا حدود^۳ استفاده نمی کنند. سه نوع فرمول باز وجود دارند:

(۱) فرمول نقطه میانی^۴،

(۲) فرمول دو نقطه ای^۵،

(۳) فرمول سه نقطه ای^۶.

فرمول نقطه میانی

این قاعده از نقاط انتهایی استفاده نمی نماید بلکه از نقاط میانی بازه استفاده می کند. این فرمول شامل محاسبه تابع در یک نقطه یعنی نقطه میانی بازه است. از این رو انتگرال عبارت است از

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(x_m),$$

به طوری که x_m نقطه میانی است

$$x_m = \frac{a+b}{2}.$$

فرمول دو نقطه ای

فرمول دو نقطه ای دو زیر-بازه را به جای بازه های اصلی بکار می برد. هنگامی که تابع $f(x)$ بین $[a, b]$ پیوسته است آنگاه از فرمول دو نقطه ای استفاده می شود، بنابراین انتگرال عبارت است از

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}(f(x_1) + f(x_2)).$$

فرمول سه نقطه ای

در این روش، بازه انتگرال گیری به چهار زیر-بازه تقسیم می شود به نحوی که

1. Newton-Cotes open formulas
2. End points
3. Limits
4. Mid-point formula
5. Two-point formula
6. Three-point formula

$$h = \frac{b-a}{4},$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{4h}{3} (2f(x_1) - f(x_2) + 2f(x_3)),$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{3} (2f(x_1) - f(x_2) + 2f(x_3)),$$

که در آن

$$x_1 = \frac{3a+b}{4}, x_2 = \frac{a+b}{2}, x_3 = \frac{3b+a}{4}.$$

۶-۳- مسئله‌هایی برای تمرین

۱. با استفاده از قاعده دوزنقه‌ای انتگرال $\int_0^{\sqrt{e}} x^3 dx$ را محاسبه کنید.

۲. با استفاده از قاعده دوزنقه‌ای انتگرال $\int_0^3 e^{2x^2} dx$ را محاسبه کنید.

۳. اگر ۱ مول گاز حقیقی به صورت برگشت‌پذیر و هم‌دما^۱ از $10^{-3} m^3$ تا $0.01 \times 10^{-3} m^3$ منبسط شود آنگاه کار انجام‌شده با استفاده از قاعده دوزنقه‌ای و سیمپسون چه مقدار است به‌طوری‌که ضرایب معادله واندروالس عبارت‌اند از:

$$a = 364/0 \text{ Pa} \cdot m^6 \cdot \text{mol}^{-2} \text{ و } b = 367/4 \times 10^{-5} m^3 \cdot \text{mol}^{-1}.$$

۴. با استفاده از قاعده سیمپسون، تغییر در آنتروپی نیتروژن گرم شده در فشار ثابت از ۲۹۸ تا ۳۷۶ کلوین را محاسبه کنید:

$$C_{p,m}(J K^{-1} mol^{-1}) = 296/27 + 23/5 \times 10^{-3}(T/K) - 0.42/0 \times 10^{-7}(T/K)^2$$

۵. با استفاده از انتگرال‌گیری عددی و داده‌های ارائه‌شده زیر افزایش آنتالپی از ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ کلوین را محاسبه کنید

T (K)	۳۰۰	۵۰۰	۷۰۰	۹۰۰	۱۱۰۰
$C_p (J K^{-1} mol^{-1})$	۳۹/۹	۴۹/۵	۵۰/۸	۵۳/۴	۵۴/۹

فصل هفتم
معادلات دیفرانسیل

۷-۱- مقدمه

معادله دیفرانسیل معادله‌ای شامل مشتقات است. ممکن است معادلات دیفرانسیل مرتبه اول، مرتبه دو و مرتبه‌های بالاتر وجود داشته باشند. مرتبه بر بالاترین مرتبه مشتق در معادله دلالت می‌کند. به عنوان نمونه، معادله $\frac{dy}{dx} = x \cos x$ معادله دیفرانسیل مرتبه اول است و معادله $\frac{d^2y}{dx^2} = 2 \sin x + 5 \cos x$ یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم است. معادلات دیفرانسیل معمولی^۱ معادلاتی هستند که شامل توابعی از یک یا تعداد بیشتری متغیر مستقل (معمولاً x) و مشتقات آن‌ها هستند. درواقع طیف وسیعی از معادلات دیفرانسیل مرتبه اول قابل حل نیستند، بنابراین در چنین مواردی روش‌های عددی برای حل معادلات دیفرانسیل به کمک می‌آیند. از این جهت، در این بحث تنها به معادلات دیفرانسیل خطی، قابل تفکیک^۲ و کامل^۳ با مجموعه شرایط^۴ پرداخته می‌شود. حتی معادلات دیفرانسیلی که قابل تفکیک هستند را نمی‌توان به‌طور صریح حل کرد. روش‌های عددی مورد استفاده برای حل معادلات دیفرانسیل حداقل می‌توانند جهتی را که تغییر در آن رخ می‌دهد، با رسم نموداری بین x و y نشان دهند.

روش‌های عددی برای معادلات دیفرانسیل، تقریب‌های عددی حل معادلات دیفرانسیل هستند، اما این به معنای محاسبه انتگرال نیست. برخی از معادلات دیفرانسیل که با استفاده از روش‌های مرسوم جبری، جداسازی متغیرها، عامل‌های انتگرال‌ساز یا هر روش مشابه قابل حل نیستند، با استفاده از روش‌های عددی حل می‌شوند. حتی اگر راه‌حل از ابزارها یا روش‌های جبری مورد اشاره قبلی به دست آمده باشد، جواب ممکن است پیچیده به نظر برسد. در چنین مواردی روش‌های عددی یک جواب تقریبی ارائه می‌دهند. متعارف‌ترین روش برای حل عددی معادله دیفرانسیل معمولی، روش اوایلر^۵ است. روش دیگری که مورد استفاده قرار می‌گیرد، روش‌های رونگه-کوتا^۶ است. در این بخش آنچه به آن پرداخته می‌شود، معادلات دیفرانسیل معمولی (ODE) است.

معادلات دیفرانسیل به صورت $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ نوشته می‌شوند که $y(0) = y_0$ ، یعنی، شرایط اولیه‌ای برای حل معادله مشخص شده است: در $x = 0$ و $y = 0$ که می‌توان آن را به صورت x و y نیز نوشت.

-
1. Ordinary differential equation (ODE)
 2. Separable
 3. Exact
 4. Set of conditions
 5. Euler's method
 6. Runge-Kutta (RK)

معادلات دیفرانسیل کوشی-اویلر^۱ چه هستند؟

معادلات دیفرانسیل کوشی-اویلر، معادلات دیفرانسیل همگن خطی با ضرایب متغیر هستند که می‌توانند به‌طور صریح حل شوند. به‌صورت عمومی می‌توان آن‌ها را به‌صورت زیر نمایش داد

$$a_n x^n y^{(n)}(x) + a_{n-1} x^{n-1} y^{(n-1)}(x) + \dots + a_1 y(x) = 0, \quad (1-7)$$

که در آن a_n ثابت است و $y^{(n)}$ مشتق مرتبه n ام y نسبت به x است.

۷-۲- روش اویلر

تمام معادلات دیفرانسیل را نمی‌توان به‌طور ضمنی حل کرد. روش اویلر یک جواب عددی برای معادلات دیفرانسیل مرتبه اول است. خطا در هر گام^۲ مستقیماً متناسب با مربع اندازه گام است. در این روش از بسط سری تیلور برای بیان معادله دیفرانسیل استفاده می‌شود. بسط تیلور برای یک تابع به‌صورت زیر ارائه می‌شود.

$$f(x+h) = f(x) + \frac{h}{1!} \frac{dy}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3y}{dx^3} + \dots, \quad (2-7)$$

یا

$$y(x+h) = y(x) + \frac{h}{1!} y'(x) + \frac{h^2}{2!} y''(x) + \frac{h^3}{3!} y'''(x) + \dots, \quad (3-7)$$

که در آن h اختلاف بین دو نقطه متوالی مانند x و $x+h$ است. اگر بازه بین مقادیر x های مختلف کوچک باشد، یعنی h کوچک باشد، آنگاه روش اویلر عبارت بسط سری تیلور را صورت تقریبی محاسبه می‌کند به‌نحوی که بسط قبلی را می‌توان به‌تقریب (با صرف‌نظر از عبارات مرتبه بالاتر به دلیل آنکه بسیار کوچک هستند) به‌صورت زیر برآورد کرد:

$$y(x+h) = y(x) + hf(x,y), \quad (4-7)$$

که $f(x,y)$ مشتق y در (x,y) است، x مقدار اولیه x و y مقدار y در $x = x_0$ (یعنی شرایط اولیه) است. بنابراین به‌طور کلی می‌توان نوشت:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad (5-7)$$

1. Cauchy-Euler differential equations
2. Step

y_{n+1} مقدار تخمین زده شده مربوط به گام بعدی است، y_n مقدار گام کنونی است، h اندازه بازه است و $f(x_n, y_n)$ مشتق در $[x_n, y_n]$ است. از آنجا که روش اوایلر فقط عبارات مشتق مرتبه اول را از بسط سری تیلور مربوط به تابع حفظ می کند، به آن روش رونگه-کوتا مرتبه اول^۱ نیز می گویند. یک معادله دیفرانسیل مرتبه اول را می توان به صورت یک مشتق یا شیب یک تابع در نظر گرفت:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad (۶-۷)$$

روش اوایلر از اصول مسئله مقدار اولیه^۲ استفاده می کند که پیشنهاد می دهد که وقتی مقدار کمیت در گام بعدی y_1 از مقدار اولیه y_0 محاسبه می شود، این مقدار محاسبه شده، خود به مقدار اولیه برای مقدار کمیت در گام بالاتر بعدی y_2 تبدیل می شود به عبارتی می توان مقدار محاسبه شده در هر گام خود به عنوان مقدار اولیه برای محاسبه مقدار گام بالاتر بعدی y_2 بکار برد.

مثال ۱: با استفاده از روش اوایلر، معادله دیفرانسیل زیر را حل کنید.

$$\frac{dy}{dx} = 5 - 3\frac{y}{x}, \quad (۷-۷)$$

به طوری که $y(3) = 1$ و $h = 1.0$ داده شده باشند.

راه حل: شرایط اولیه به صورت $y(3) = 1$ ، یعنی در $x = 3$ $y = 1$ ارائه شده اند. با استفاده از معادله $(۷-۷)$ ، dy/dx به صورت زیر محاسبه می شود:

$$f(x, y) = \frac{dy}{dx} = 5 - 3\left(\frac{1}{3}\right) = 4. \quad (۸-۷)$$

از آنجا که،

$$x_{n+1} = x_n + h = 3.0,$$

و

$$y_{n+1} = y_n + hf(x, y),$$

در این صورت،

$$y_{n+1} = 1 + (1.0)(4) = 4.0.$$

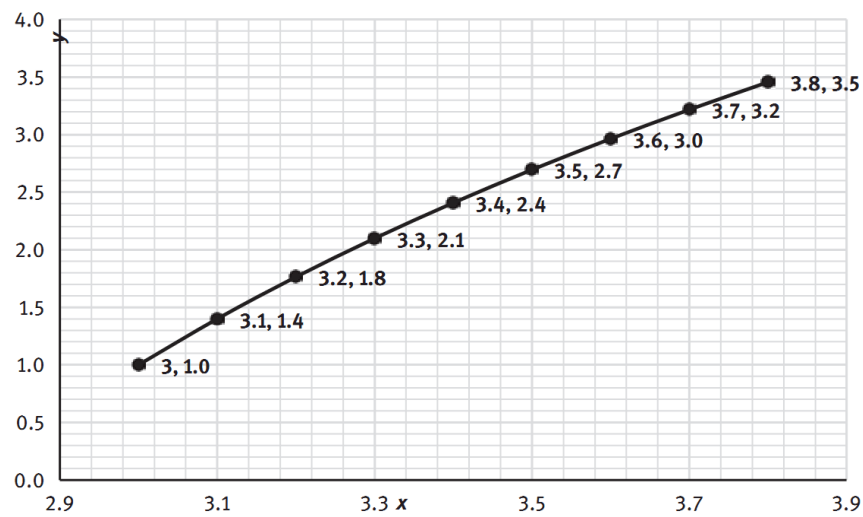
سایر نتایج در جدول ۷-۱، جدول بندی شده و به صورت ترسیمی در شکل ۷-۱ نمایش داده

شده اند. می توان سایر نقاط داده را با استفاده از همان معادله دیفرانسیل اولیه محاسبه نمود.

1. Runge-Kutta of first order (RK-1)
2. Initial value problem

جدول ۷-۱: روش اویلر برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی مرتبه اول

x	y	dy/dx
۳	۱	۴
۳/۱	۱/۴	۳/۶۴۵۱۶۱۲۹
۳/۲	۱/۷۶۴۵۱۶۱۲۹	۳/۳۴۵۷۶۶۱۲۹
۳/۳	۲/۰۹۹۰۹۲۷۴۲	۳/۰۹۱۷۳۳۸۷۱
۳/۴	۲/۴۰۸۲۶۶۱۲۹	۲/۸۷۵۰۵۹۲۹۸
۳/۵	۲/۶۹۵۷۷۲۰۵۹	۲/۶۸۹۳۳۸۲۳۵
۳/۶	۲/۹۶۴۷۰۵۸۸۲	۲/۵۲۹۴۱۱۷۶۵
۳/۷	۳/۲۱۷۶۴۷۰۵۹	۲/۳۹۱۰۹۶۹۷۹
۳/۸	۳/۴۵۶۷۵۶۷۵۷	۲/۲۷۰۹۸۱۵۰۸



شکل ۷-۱: معادله دیفرانسیل معمولی حل شده با روش اویلر.

مثال ۲: با استفاده از حل معادله دیفرانسیل برای رابطه سینتیک مرتبه اول $y' = -ky$ (یعنی $[A_t] = -k[A]$) با شرایط اولیه $[A_0] = 0.25 \text{ mol dm}^{-3}$ ، غلظت $[A]$ را در زمان‌های $t = 0, 200, 400, 600, 800, 1000$ و 1200 ثانیه به دست آورید در صورتی که $k = 0.00622 \text{ s}^{-1}$ باشد.

راه حل: در مورد یک معادله دیفرانسیل مرتبه اول، روش اویلر به صورت زیر بکار برده می‌شود.

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A], \quad (9-7)$$

به طوری که شرایط اولیه عبارت‌اند از $[A_0] = 0.25$ ، $[A](t=0) = [A_0]$ ، $h = \Delta t = 200 \text{ s}$.

$$y_1 = A_{200} = A_0 + \Delta t \cdot (d[A]/dt), \quad (10-7)$$

$$A_{200} = 0.25 + \left(200 \times \frac{dy}{dx} \right). \quad (11-7)$$

نتایج در ادامه در جدول ۲-۷، جدول‌بندی و به صورت ترسیمی در شکل ۲-۷ نمایش داده شده‌اند. جواب این معادله به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$\ln y = -kx + C. \quad (12-7)$$

به طوری که $C = \ln 0.25$ است که نتایج مشابهی با آنچه توسط روش اویلر حاصل شد، به دست می‌دهد در حالی که جواب عمومی عبارت است از:

$$[A] = [A_0] \cdot e^{-kt}, \quad (13-7)$$

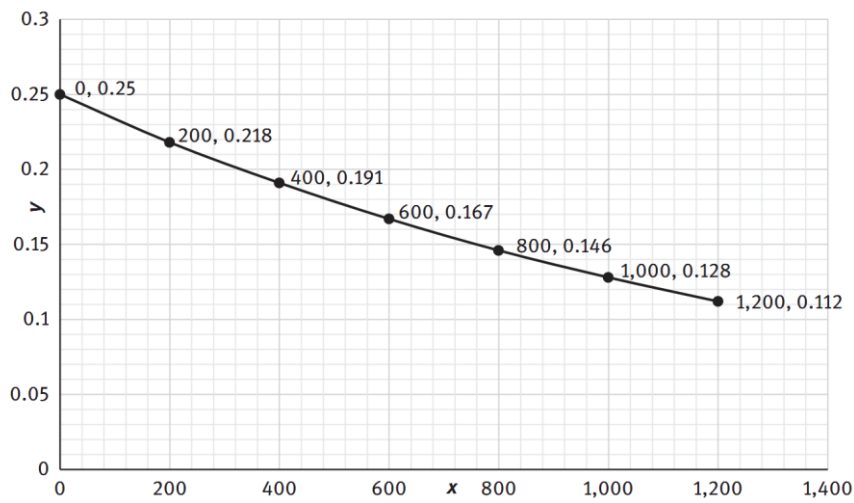
یا

$$\ln[A] = \ln[A_0] - kt, \quad (14-7)$$

$$\ln[A] = C - kt. \quad (15-7)$$

جدول ۷-۲: روش اویلر برای حل داده‌های سینتیکی

x	y	dy/dx
۰	۰/۲۵	-۰/۰۰۰۱۵۵۵
۲۰۰	۰/۲۱۸	-۰/۰۰۰۱۳۶۱۵۶
۴۰۰	۰/۱۹۱	-۰/۰۰۰۱۱۹۲۱۸
۶۰۰	۰/۱۶۷	-۰/۰۰۰۱۰۴۳۸۷
۸۰۰	۰/۱۴۶	-۹/۱۴۰۱۵E-۰۵
۱۰۰۰	۰/۱۲۸	-۸/۰۰۳۱۲E-۰۵
۱۲۰۰	۰/۱۱۲	-۷/۰۰۱۵۵E-۰۵



شکل ۷-۲: روش اویلر برای حل داده‌های سینتیکی مرتبه اول.

۷-۳- روش رونگه-کوتا

در مقایسه با روش اویلر که برای ارائه نتایج دقیق نیازمند بازه‌های بسیار کوچک است، روش رونگه-کوتا در تعداد گام‌های کمتری نتایج بهتری ارائه می‌کند. این یک روش عددی برای انتگرال‌گیری معادله دیفرانسیل است. روش‌های رونگه-کوتا روش‌هایی توانمند هستند که اگر اندازه گام در آن‌ها هوشمندانه انتخاب شود، جواب عددی خوبی برای معادلات دیفرانسیل ارائه می‌دهند. الگوریتم مرتبه چهارم رونگه-کوتا به دلیل دقت در نتایج پرکاربردتر است.

هدف روش رونگه-کوتا همانند روش اویلر است، یعنی یافتن مقدار y به ازای هر مقدار متفاوت دیگری از x در شرایطی که مقادیر اولیه (شرایط اولیه مسئله) ارائه شوند. روش اویلر زمانی دقیق و کامل خواهد بود که جواب یک خط باشد در حالی که روش‌های رونگه-کوتا اگر جواب یک چندجمله‌ای از مرتبه‌های بالاتر باشد، دقیق خواهند بود. (روش اویلر مانند روش رونگه-کوتا مرتبه اول است.) روش‌های رونگه-کوتا برای چندجمله‌ای‌های مرتبه بالاتر دقیق‌تر هستند و مستلزم محاسبات چندمرحله‌ای شامل محاسبات در مقادیر شیب‌های مختلف (مانند روش‌های رونگه-کوتا مرتبه سوم^۱ $RK3$ و رونگه-کوتا مرتبه چهارم^۲ $RK4$) می‌شوند.

روش رونگه-کوتا، بر خلاف سری تیلور (که تنها اگر نقطه موردنظر به اندازه کافی نزدیک باشد جواب مناسبی ارائه می‌کند)، تقریب خوبی برای یک تابع، بدون نیاز به مشتق‌گیری معادله ارائه می‌نماید. روش تیلور برای هر عبارت یا جمله جدیدی که باید محاسبه شود، مشتق تابع را محاسبه می‌کند. هدف روش رونگه-کوتا شبیه‌سازی همان تعداد از گام‌های سری تیلور در حین ارزیابی تابع اصلی است. فرمول روش رونگه-کوتا مرتبه ۴ که رونگه-کوتا-۴ ($RK4$) نیز نامیده می‌شود، به‌طور گسترده در زمینه‌های مکانیک، مدل‌های آب‌وهوا، آترودینامیک، مدل‌های مطالعات محیطی، دارورسانی^۳، مطالعه اکوسیستم و بسیاری دیگر از زیرشاخه‌های فیزیک، شیمی و زیست‌شناسی استفاده می‌شود.

-
1. Runge-Kutta of third order (RK3)
 2. Runge-Kutta of fourth order (RK4)
 3. Drug delivery

۷-۳-۱- روش رونگه-کوتا-۲ یا روش پیشگو-تصحیح کننده

روش رونگه-کوتا مرتبه ۲، روش هیون^۱ یا روش اوپلر بهبودیافته نیز نامیده می شود. این روش عددی تنها برای حل معادلات دیفرانسیل مرتبه اول به شکل زیر بکار برده می شود.

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \quad (۷-۶)$$

این روش شامل محاسبه مقدار میانی^۲ و سپس استفاده از این مقدار برای محاسبه مقدار نهایی است. از روش اوپلر می دانیم که،

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad (۱۶-۷)$$

که نمادها، همان طور که در روش های قبلی توضیح داده شد، معنای متداول خود را دارند. سری تیلور به صورت زیر ارائه می شود:

$$y(x+h) = y(x) + \frac{h}{1!}y'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \frac{h^3}{3!}y'''(x) + \dots \quad (۱۷-۷)$$

اگر دو عبارت اول سری تیلور حفظ شوند و از سایر عبارات صرف نظر شود آنگاه این مجموع چیزی جز روش اوپلر یا روش رونگه-کوتای مرتبه اول نیست اما اگر سه عبارت اول حفظ شوند، آنگاه تقریب معادله چنین شکلی خواهد داشت.

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}f'(x_n, y_n), \quad (۱۸-۷)$$

و روش رونگه-کوتا مرتبه دوم نامیده می شود به طوری که $f'(x_n, y_n)$ مشتق دوگانه تابع (مشتق دوم) در نقطه x_n, y_n است. این بدان معنی است که مشتق مرتبه دوم که محاسبه آن با استفاده از معادله دیفرانسیل بسیار دشوار است، باید محاسبه شود. در عوض روش رونگه-کوتا مرتبه دوم به صورت زیر نوشته می شود:

$$y_{n+1} = y_n + \left(\frac{k_1}{2} + \frac{k_2}{2}\right)h, \quad (۱۹-۷)$$

که در آن $k_1 = f(x_n, y_n)$ و $k_2 = f(x_n + h, y_n + k_1h)$ هستند.

اینجا y_{n+1} مقدار نهایی است در حالی که $y_n + k_1h$ مقدار حدواسط است. خطای واقعی در تقریب با رابطه زیر به دست می آید.

$$E = \frac{h^3}{3!}f''(x_n, y_n) + \frac{h^4}{4!}f'''(x_n, y_n) + \dots, \quad (۲۰-۷)$$

که چیزی جز عبارت های باقیمانده از سری بسط تیلور نیست.

-
1. Heun's method
 2. Intermediate value

مثال ۳: از روش رونگه-کوتا مرتبه دوم برای حل معادله دیفرانسیل سینتیک فرایند به صورت $dy/dx = -ky^2$ با شرایط اولیه $y(t=0) = 632 \text{ mol dm}^{-3}$ در زمان‌های $t = 0, 3, 6, 9, 12, 15, 18, 21$ دقیقه استفاده کنید به طوری که $k = 78/1 \times 10^{-5} \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$ باشد. **راه حل:** اینجا شرایط اولیه به صورت $x = 0$ و $y = 632$ ارائه شده است.

$$\frac{dy}{dx} = -ky^2, \quad (21-7)$$

با استفاده از روش مرتبه دوم رونگه-کوتا برای معادله دیفرانسیل داریم:

$$y_{n+1} = y_n + \left(\frac{k_1}{2} + \frac{k_2}{2} \right) h, \quad (22-7)$$

به طوری که $k_1 = f(x_n, y_n)$ و $k_2 = f(x_n + h, y_n + k_1 h)$ (با توجه به اینکه $\frac{dy}{dx} = -ky^2$)

$$k_1 = f(x, y) = \frac{dy}{dx} = -78/1 \times 10^{-5} (632)^2 = -109/7, \quad (23-7)$$

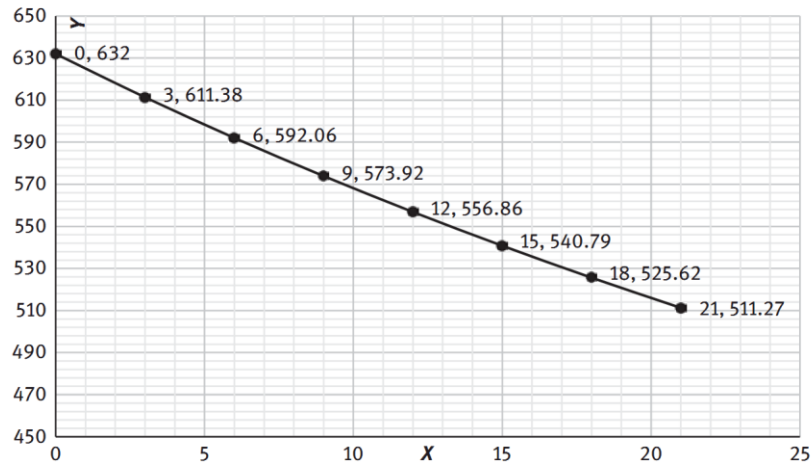
به صورت مشابه $x_n + h = 0 + 3 = 3$ و $y_n + k_1 h = 632 + (-109/7) \times 3 = 67/610$

$$k_2 = f(3, 67/610) = -78/1 \times 10^{-5} (67/610)^2 = -637/6. \quad (24-7)$$

بر این اساس، نتایج در ادامه در جدول ۷-۳ جدول بندی شده‌اند.

جدول ۷-۳: روش رونگه-کوتا مرتبه دو برای حل داده‌های سینتیکی

x	y	k ₁	k ₂	x+h	y+ k ₂ h
0	632	-7/1094772	-6/6379541	3	610/670
3	617/38	-6/6523481	-6/2260079	6	597/418
6	592/06	-6/2395114	-5/8512118	9	573/340
9	573/92	-5/8631061	-5/1963557	12	556/334
12	556/86	-5/5197519	-5/1963557	15	540/305
15	540/79	-5/2056907	-4/9093698	18	525/173
18	525/62	-4/9176834	-4/6454985	21	510/865
21	5172	-4/6529267	-4/4023266	24	497/314



شکل ۷-۳: روش رونگه-کوتا مرتبه دو برای حل معادله دیفرانسیل معمولی

جواب تحلیلی معادله دیفرانسیل ارائه شده اولیه عبارت است از (شکل ۷-۳)

$$y = \frac{1}{kt + C}, \quad (۷-۲۴)$$

که بر اساس بر شرایط اولیه $y(t = 0) = ۶۳۲$ مقدار $C = ۶۳۲/۱$ است، بنابراین:

$$y = \frac{1}{kt + (۶۳۲/۱)}, \quad (۷-۲۵)$$

که نتایج مشابهی به دست می دهد.

۷-۳-۲- روش رونگه- کوتای مرتبه سه

رونگه- کوتا- ۳ تحت عنوان روش رونگه- کوتا مرتبه سه نیز شناخته می‌شود. در روش رونگه- کوتا- ۳، در مقایسه با روش رونگه- کوتا- ۲، یک عبارت بیشتر از سری تیلور در محاسبات گنجانده شده است. در مقایسه روش رونگه- کوتا- ۳ دقیق‌تر از رونگه- کوتا- ۲ اما کم‌دقت‌تر از رونگه- کوتای مرتبه چهار است.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + k_3)h \quad (26-7)$$

که در آن $k_1 = f(x_n, y_n)$ ، $k_2 = f(x_n + h/2, y_n + k_1 h/2)$ و $k_3 = f(x_n + h, y_n + k_2 h)$ هستند.

۷-۳-۳- روش رونگه- کوتای مرتبه چهار

این روش که به نام روش رونگه- کوتای مرتبه چهار نیز شناخته می‌شود، متداول‌ترین روش حل معادلات دیفرانسیل مرتبه اول است. صرف‌نظر از اینکه این شیوه دقیق‌ترین روش است، به زمان محاسباتی کمتری نیاز دارد. به‌طور کلی، می‌توان فرمول رونگه- کوتا مرتبه چهار را برای هر نقطه $y(x+h)$ چنین نوشت:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{24}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (27-7)$$

که در آن $k_1 = hf(x, y)$ ، $k_2 = hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2})$ ، $k_3 = hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2})$ و $k_4 = hf(x + h, y + k_3)$ هستند.

در اصل روش رونگه- کوتا به‌صورت تحلیلی به دست آمده است نه از منظر میانگین هندسی؛ چون از شکل فرمول شاید به نظر برسد که وزن هندسی k_i را در محاسبات مدنظر قرار می‌دهد.

مثال ۴: با کاربرد روش رونگه- کوتا مرتبه ۴ معادله دیفرانسیل زیر را با اندازه گام $h = 0.1$ حل کنید:

$$(1+x^2) \frac{dy}{dx} + xy = 0, \quad (28-7)$$

در شرایطی که $y(0) = 2$ باشد.

راه‌حل: ضمن بازنویسی، نتیجه می‌شود:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{-xy}{1+x^2}, \quad (29-7)$$

با استفاده از مسئله مقدار اولیه، $y(0) = 2$ نتیجه می‌شود، یعنی در $x = 0$ مقدار $y = 2$ است.

$$k_1 = hf(x, y) = \sqrt{f(0, 2)} = 0,$$

برای k_2 مقدار $0.5/0 = 0 + \frac{1}{2} = 0.5/0$ است و مقدار $2 + \frac{1}{2} = 2.5$ است. در نتیجه،

$$k_2 = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}\right) = \sqrt{f(0.5/0, 2)} = -0.1/0,$$

برای k_3 مقدار $0.5/0 = 0 + \frac{1}{2} = 0.5/0$ است و مقدار $2 + \frac{-0.1/0}{2} = 1.95/1$ است و

در نتیجه،

$$k_3 = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2}\right) = \sqrt{f(0.5/0, 1.95/1)} = -0.1/0,$$

برای k_4 مقدار $1/0 = 0 + \frac{1}{2} = 0.5/0$ است و مقدار $2 + (-0.1/0) = 1.9/0$ است. در نتیجه،

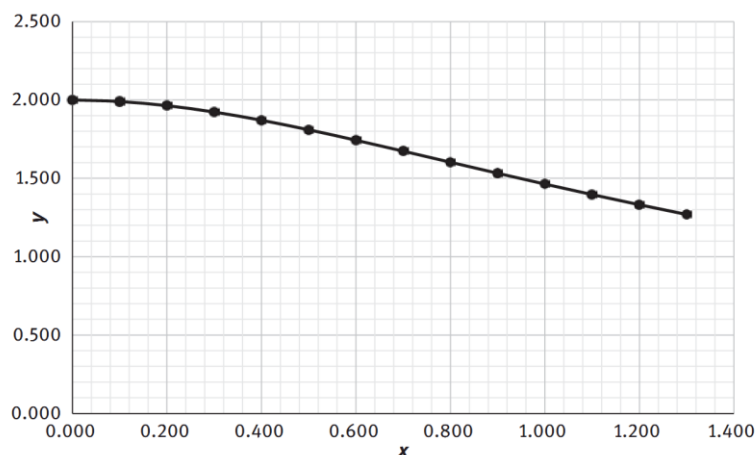
$$k_4 = hf(x + h, y + k_3) = \sqrt{f(1/0, 1.9/0)} = -0.2/0.$$

سایر نتایج در جدول ۴-۷ جدول‌بندی شده‌اند و در شکل ۴-۷ به صورت ترسیمی نمایش داده

شده‌اند.

جدول ۴-۷: روش رونگه-کوتا مرتبه چهار برای حل داده‌های سینتیکی

x	y	dy/dx	k _۱	x(k _r)=x(k _r)	y(k _r)	k _r	y(k _r)	x(k _r)	y(k _r)	k _r
۰/۰	۲/۰۰۰	۰/۰۰۰	۰/۰۰۰	۰/۰۵۰	۲/۰۰۰	-۰/۰۱۰	۱/۹۹۵	۰/۱۰۰	۱/۹۹۰	-۰/۰۲۰
۰/۱	۱/۹۹۰	-۰/۰۴۰	-۰/۰۰۴	۰/۱۵۰	۱/۹۸۸	-۰/۰۲۹	۱/۹۷۵	۰/۲۰۰	۱/۹۶۱	-۰/۰۳۸
۰/۲	۱/۹۶۴	-۰/۰۸۱	-۰/۰۰۸	۰/۲۵۰	۱/۹۶۰	-۰/۰۴۶	۱/۹۴۱	۰/۳۰۰	۱/۹۱۸	-۰/۰۵۳
۰/۳	۱/۹۲۳	-۰/۱۲۳	-۰/۰۱۲	۰/۳۵۰	۱/۹۱۷	-۰/۰۶۰	۱/۸۹۳	۰/۴۰۰	۱/۸۶۴	-۰/۰۶۴
۰/۴	۱/۸۷۱	-۰/۱۶۶	-۰/۰۱۷	۰/۴۵۰	۱/۸۶۲	-۰/۰۷۰	۱/۸۲۶	۰/۵۰۰	۱/۸۰۲	-۰/۰۷۲
۰/۵	۱/۸۱۰	-۰/۲۱۲	-۰/۰۲۱	۰/۵۵۰	۱/۷۹۹	-۰/۰۷۶	۱/۷۷۲	۰/۶۰۰	۱/۷۳۵	-۰/۰۷۷
۰/۶	۱/۷۴۳	-۰/۲۵۹	-۰/۰۲۶	۰/۶۵۰	۱/۷۳۰	-۰/۰۷۹	۱/۷۰۴	۰/۷۰۰	۱/۶۶۵	-۰/۰۷۸
۰/۷	۱/۶۷۴	-۰/۳۰۸	-۰/۰۳۱	۰/۷۵۰	۱/۶۵۸	-۰/۰۸۰	۱/۶۳۴	۰/۸۰۰	۱/۵۹۵	-۰/۰۷۸
۰/۸	۱/۶۰۳	-۰/۳۵۹	-۰/۰۳۶	۰/۸۵۰	۱/۵۸۵	-۰/۰۷۸	۱/۵۶۴	۰/۹۰۰	۱/۵۲۶	-۰/۰۷۶
۰/۹	۱/۵۳۲	-۰/۴۱۲	-۰/۰۴۱	۰/۹۵۰	۱/۵۱۲	-۰/۰۷۵	۱/۴۹۵	۱/۰۰۰	۱/۴۵۸	-۰/۰۷۳
۱/۰	۱/۴۶۳	-۰/۴۶۶	-۰/۰۴۷	۱/۰۵۰	۱/۴۴۰	-۰/۰۷۲	۱/۴۲۷	۱/۱۰۰	۱/۳۹۲	-۰/۰۶۹



شکل ۷-۴: روش رونگه-کوتا مرتبه دو برای حل معادله دیفرانسیل معمولی

معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم را نیز می‌توان با استفاده از روش‌های عددی حل معادلات دیفرانسیل که پیش‌ازاین ارائه شدند، حل کرد. یک نمونه از چنین معادله‌هایی، معادله فنر ارتعاش‌کننده ای است که در آن جسمی با جرم مشخص به انتهای فنر متصل می‌شود (قانون هوک^۱). با توجه به توضیح اخیر، نیروی بازگرداننده به صورت $F = -kx$ بیان می‌شود که در آن k ثابت فنر است. همچنین با استفاده از قانون نیوتن، $F = ma$ است که در آن m جرم جسم متصل شده به فنر است و در آن می‌توان شتاب را برحسب مشتق جابجایی فنر از موقعیت تعادل نوشت. این روند یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم را نتیجه می‌دهد

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx, \quad (۷-۳۰)$$

و جواب عمومی توسط رابطه زیر ارائه می‌شود:

$$x(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t, \quad (۷-۳۱)$$

که در آن

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

1. Hooke's law

برای چنین معادلات دیفرانسیل مرتبه دومی،

$$m \frac{d^2 y}{dx^2} + n \frac{dy}{dx} + ky = 0, \quad (32-7)$$

می‌توان با تعریف یک متغیر جدید z ، معادلات را به صورت دو معادله مرتبه اول جفت شده هم‌زمان^۱ به شکل زیر نوشت:

$$\frac{dy}{dx} = z = f(x, y, z), \quad (33-7)$$

$$\frac{dz}{dx} = g(x, y, z), \quad (34-7)$$

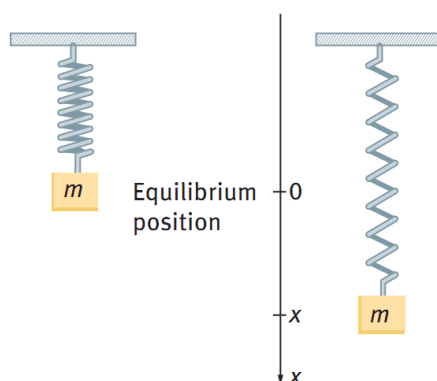
در نتیجه معادله پیشین را می‌توان چنین بازنویسی نمود:

$$m \frac{dz}{dx} + nz + ky = 0. \quad (35-7)$$

این معادله را می‌توان با روش اوایلر یا روش رونگه-کوتا-۴ حل نمود. برای روش رونگه-کوتا-۴، ضرایب مختلف به صورت زیر ارائه می‌شوند:

$$\begin{aligned} k_0 &= hf(x_0, y_0, z_0), \quad l_0 = hg(x_0, y_0, z_0), \\ k_1 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{4}, y_0 + \frac{k_0}{4}, z_0 + \frac{l_0}{4}\right), \quad l_1 = hg\left(x_0 + \frac{h}{4}, y_0 + \frac{k_0}{4}, z_0 + \frac{l_0}{4}\right), \\ k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}, z_0 + \frac{l_1}{2}\right), \quad l_2 = hg\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}, z_0 + \frac{l_1}{2}\right), \\ k_3 &= hf\left(x_0 + \frac{3h}{4}, y_0 + \frac{3k_2}{4}, z_0 + \frac{3l_2}{4}\right), \quad l_3 = hg\left(x_0 + \frac{3h}{4}, y_0 + \frac{3k_2}{4}, z_0 + \frac{3l_2}{4}\right), \\ y_1 &= y_0 + \frac{h}{4}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3), \quad z_1 = z_0 + \frac{h}{4}(l_0 + 2l_1 + 2l_2 + l_3). \end{aligned}$$

مثال ۵: فنری متصل به یک جرم ۲ کیلوگرمی؛ که طول تعادلی معادل ۵٪ متر دارد؛ در طول تا اندازه ۷٪ متر با یک نیروی ۲۵/۶ نیوتنی کشیده می‌شود و سپس با سرعت اولیه صفر رها می‌شود. موقعیت جرم متصل را در ۷٪ ثانیه بیابید.



شکل ۷-۵: قانون هوک برای یک فنر.

راه حل: همچنان که بیان شده، جواب معادله دیفرانسیل مرتبه دوم از نوع فوق به صورت زیر به دست می‌آید:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx. \quad (۷-۳۰)$$

با توجه به قانون هوک،

$$k \times (۲/۰) = ۶/۲۵, \\ k = ۱۲۸.$$

با جایگذاری مقادیر جرم و ثابت فنر نتیجه می‌شود:

$$۲ \frac{d^2 x}{dt^2} + ۱۲۸x = ۰, \quad (۷-۳۶)$$

هنگامی که این معادله به صورت تحلیلی حل شود، جواب عمومی عبارت است از:

$$x(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t, \quad (۷-۳۱)$$

که در آن،

$$\omega = \sqrt{\frac{128}{2}} = 8.$$

شرایط اولیه برای $x(t=0) = 2/0$ است، همچنین سرعت اولیه صفر داده شده است، یعنی

$x'(t=0) = 0$ یا $dx/dt = 0$ است. با جایگذاری شرایط اولیه در معادله ۳۱-۷،

$$x(0) = c_1 \cos 0 + c_2 \sin 0 = 2/0. \quad (37-7)$$

بنابراین $c_1 = 0/2$ است. همچنین،

$$x'(t) = 8 \times c_1 \sin 8t + 8 \times c_2 \cos 8t. \quad (38-7)$$

در $t = 0$ ،

$$x'(t=0) = 8 \times c_1 \sin 0 + 8 \times c_2 \cos 0 = 0, \quad (39-7)$$

که مقدار $c_2 = 0$ را نتیجه می‌دهد؛ بنابراین جوابی که حاصل می‌شود عبارت است از:

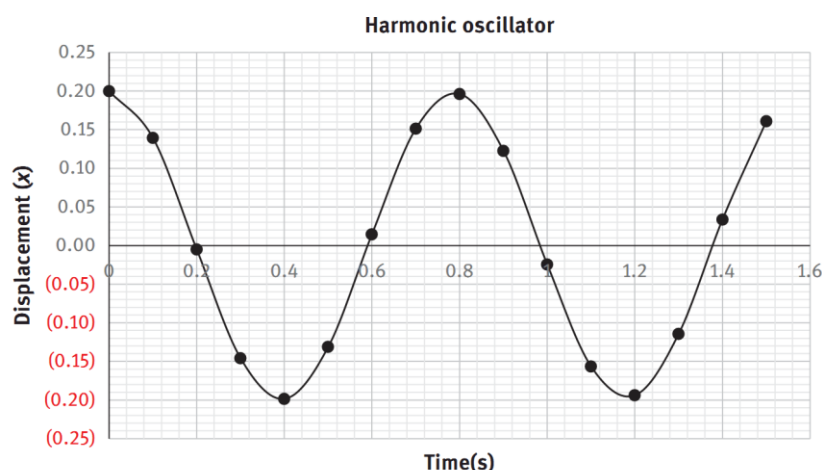
$$x(t) = 0/2 \cos 8t. \quad (40-7)$$

جدول ۵-۷: روش رونگه-کوتا-۴ برای حل معادله دیفرانسیل مرتبه دوم

x	y	z	k.	k _۱	k _۲	k _۳	l.	l _۱	l _۲	l _۳
۰/۰	۰/۲۰۰۰	۰/۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰	-۰/۰۶۴۰	-۰/۰۶۴۰	-۰/۱۰۷۵	-۱/۲۸۰۰	-۱/۲۸۰۰	-۱/۰۷۵۲	-۰/۸۷۰۴
۰/۱	۰/۱۳۹۴	-۱/۴۳۵	-۰/۱۴۳	-۰/۱۵۹۰	-۰/۱۴۰۷	-۰/۱۵۲۷	-۰/۸۹۲۲	-۰/۵۲۶۳	-۰/۳۸۳۶	۰/۰۰۸۰
۰/۲	-۰/۰۰۵۰	-۱/۵۹۴۱	-۰/۱۵۹۴	-۰/۱۵۷۸	-۰/۱۳۲۳	-۰/۱۰۵۷	۰/۰۳۱۸	۰/۵۴۱۹	۰/۵۳۶۸	۰/۸۷۸۶
۰/۳	-۰/۱۴۵۹	-۱/۰۸۲۸	-۰/۱۰۸۳	-۰/۰۶۱۶	-۰/۰۴۴۳	۰/۰۰۴۸	۰/۹۳۳۶	۱/۲۸۰۱	۱/۳۰۷	۱/۲۱۷۰
۰/۴	-۰/۱۹۸۴	۰/۰۷۹۲	۰/۰۰۷۹	۰/۰۷۱۴	۰/۰۷۰۱	۰/۱۱۲۱	۱/۲۶۹۹	۱/۲۴۴۵	۱/۰۴۱۳	۰/۸۲۰۹
۰/۵	-۰/۱۳۱۲	۱/۸۹۶	۰/۱۱۹۰	۰/۱۶۱۰	۰/۱۴۱۹	۰/۱۵۱۴	۰/۸۳۹۹	۰/۴۵۹۲	۰/۳۲۴۸	-۰/۰۶۸۴
۰/۶	۰/۰۱۴۸	۱/۵۷۹۵	۰/۱۵۸۰	۰/۱۵۳۲	۰/۱۲۷۹	۰/۰۹۹۵	-۰/۰۹۴۷	-۰/۰۶۰۱	-۰/۰۵۸۵۰	-۰/۰۹۱۳۶
۰/۷	۰/۱۵۱۴	۱/۰۱۶۵	۰/۱۰۱۶	۰/۰۵۳۲	۰/۰۳۶۹	-۰/۰۱۲۳	-۰/۰۹۶۹۱	-۱/۲۹۴۴	-۱/۱۳۹۳	-۱/۲۰۵۴
۰/۸	۰/۱۹۶۴	-۰/۱۵۷۲	-۰/۰۱۵۷	-۰/۰۷۸۶	-۰/۰۷۶۰	-۰/۱۱۶۳	-۱/۲۵۶۷	-۱/۲۰۶۴	-۱/۰۰۵۳	-۰/۷۷۰۰

به منظور یافتن جابجایی در $t = ۷/۰$ ثانیه، $x(۷/۰) = ۲/۰ \cos(۸ \times ۷/۰) = ۱۵۵۷/۰$ محاسبه می‌شود. به صورت مشابه، می‌توان این معادله را با کاربرد روش رونگه-کوتا معرفی شده برای حل معادلات دیفرانسیل (شکل ۶-۷) حل کرد همچنان که در جدول ۵-۷ کاربرد روش فوق نمایش داده شده است.

با استفاده از روش رونگه-کوتا، نتیجه تقریباً مشابهی برابر با ۱۵۱۴٪ به دست می‌آید. از آنجاکه این روش‌ها تقریبی هستند، ممکن است همواره جواب دقیق مشابه با روش تحلیلی حاصل نشود اما برای یک مسئله مشخص جواب کاملاً نزدیک به مقدار حقیقی بر اساس پایداری الگوریتم قابل حصول است.



شکل ۶-۷: حرکت هماهنگ فنر (نوسانگر هماهنگ) حل شده با روش رونگه-کوتا مرتبه چهار

۴-۷- مسئله‌هایی برای تمرین

$$۱. \frac{dy}{dx} = y \ln \frac{y}{x}, \quad y(3) = e, h = 10.$$

$$۲. \frac{dy}{dx} = 3x^2 - \frac{4y}{x}, \quad y(0) = 0, h = 10.$$

$$۳. \frac{dy}{dx} = \sin(x+y) - e^x, \quad y(0) = 3, h = 10.$$

$$۴. \frac{d^2y}{dx^2} + \frac{dy}{dx} - 6y = 0, \quad y(0) = 3, y'(0) = 1.$$

$$۵. \frac{d^2y}{dx^2} + 2\frac{dy}{dx} + 6y = 0, \quad y(0) = 0, y'(0) = 6/0.$$

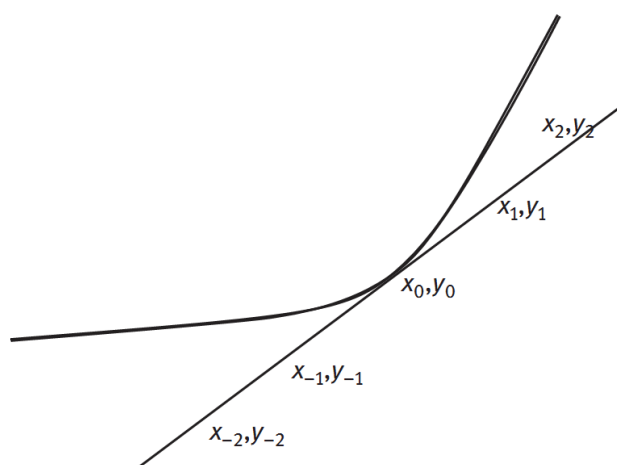
فصل هشتم
مشتق گیری عددی

۸-۱- مقدمه

برای یک نقطه معین روی منحنی، شیب مماس بر منحنی مشتق آن تابع (منحنی) را به دست می‌دهد. مشتق‌گیری عددی به محاسبه مشتقات یک تابع مجهول در نقطه‌ای مشخص اشاره دارد زمانی که نقاط داده گسسته ارائه شده‌اند. اگر مجموعه‌ای از نقاط داده ارائه شوند که تابع برای آن‌ها مشخص نیست، بلکه فقط داده‌ها معین هستند، آنگاه می‌توان از آن نقاط برای تعیین مشتقات در هر یک از آن نقاط استفاده نمود. مشتق‌گیری عددی روشی برای یافتن مقدار عددی مشتق یک تابع معین در یک نقطه مشخص است. به‌طور کلی، مشتق را می‌توان به‌صورت زیر بیان نمود

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad (1-8)$$

که در آن h اختلاف بین دو مقدار x (مانند x و $x+h$) است.



شکل ۸-۱: مماس بر منحنی.

مشتق شیب خطی است که از اتصال نقاط داده ایجاد می‌شود (شکل ۸-۱).

$$\frac{dy}{dx} = f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}, \quad (2-8)$$

به‌طور کلی،

$$\frac{dy}{dx} = f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}. \quad (3-8)$$

این روش فرمول تفاضل پیشرو^۱ نیز نامیده می شود. به صورت مشابه، اگر دو نقطه x_0, y_0 و x_{-1}, y_{-1} باشند، یعنی نقاط پسرو در نظر گرفته شوند، آنگاه:

$$\frac{dy}{dx} = f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{x_0 - x_{-1}} = \frac{y_0 - y_{-1}}{x_0 - x_{-1}}, \quad (4-8)$$

که می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\frac{dy}{dx} = f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}. \quad (5-8)$$

این روش به فرمول تفاضل پسرو^۲ معروف است. اگر رویکرد متوازن تری برای تعیین مشتق در x_0 اتخاذ شود، می توان یک نقطه پسرو و یک نقطه پیشرو را انتخاب نمود به طوری که،

$$\frac{dy}{dx} = f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}, \quad (6-8)$$

این روش فرمول تفاضل مرکزی^۳ نامیده می شود. این فرمول را همچنین می توان با استفاده از بسط سری تیلور استخراج کرد. این فرمول های تفاضل پیشرو، پسرو و مرکزی ساده ترین شیوه های تعیین مشتق در مورد حالت خط مستقیم هستند؛ اما همواره خطوط مستقیم نیستند، در چنین مواردی چند جمله ای درونیاب^۴ برای تعیین مشتق بکار برده می شود.

مشتق گیری با استفاده از سری تیلور

الف. تقریب یک مشتق بر حسب یک متغیر

بر مبنای مفاهیم حسابان (حساب دیفرانسیل و انتگرال) مشتق اول را می توان به سادگی چنین نوشت:

$$\frac{dy}{dx} = f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(h + x) - f(x)}{h}, \quad (1-الف 8)$$

برای یک مقدار محدود و متناهی از h ، تقریب مشتق را می توان چنین نوشت:

$$f'(x) = \frac{f(h + x) - f(x)}{h} + \Delta E, \quad (2-الف 8)$$

ΔE مقدار خطا است. این فرمول «فرمول تفاضل متناهی»^۵ عمومی برای مشتق اول است. برای تخمین خطا ΔE باید بسط سری تیلور مربوط به $x + h$ در مجاورت x را به صورت زیر در نظر گرفت.

1. Forward difference formula (FDF)
2. Backward difference formula (BDF)
3. Central difference formula (CDF)
4. Interpolating polynomial
5. Finite difference formula

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \dots, \quad (۸الف-۳)$$

که می‌تواند به صورت زیر نیز نوشته شود:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2!}f''(x) - \frac{h^2}{3!}f'''(x) - \frac{h^3}{4!}f^{(4)}(x) - \dots, \quad (۸الف-۴)$$

معادله (الف-۲) با حذف تمام عبارت‌ها به جز دو عبارت اول در معادله (الف-۴) به دست آمده است.

از آنجایی که تقریب مشتق x در بالا مبتنی بر مقادیر x و $x+h$ است، این معادله فرمول تفاضل پیشرو نامیده می‌شود. در اینجا ΔE که می‌توان آن را تابعی از h در نظر گرفت، با حذف (برش) جمله ΔE به معادله (الف-۱) کاهش می‌یابد. از این رو ΔE را خطای برش نیز می‌نامند.

$$\Delta E = \frac{h}{2}f''(x). \quad (۸الف-۵)$$

به صورت مشابه اگر بسط سری تیلور (معادله الف-۳) در مجاورت $x-h$ نوشته شود آنگاه نتیجه می‌شود:

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \dots, \quad (۸الف-۶)$$

که می‌توان آن را چنین نوشت:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{h}{2!}f''(x) - \frac{h^2}{3!}f'''(x) + \frac{h^3}{4!}f^{(4)}(x) - \dots, \quad (۸الف-۷)$$

دوباره تنها با حفظ دو جمله اول نتیجه زیر حاصل می‌شود:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{h}{2!}f''(x), \quad (۸الف-۸)$$

که به شکل زیر قابل نمایش است:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \Delta E, \quad (۸الف-۹)$$

که ΔE خطای برشی است.

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \quad (۸الف-۱۰)$$

معادله الف-۱۰ تحت عنوان فرمول تفاضل پسرو (BDF) شناخته می شود و ΔE خطای برش آن است که مشابه معادله الف-۵ است. تا اینجا فرض شد که $f'(x)$ پیوسته است، اکنون فرض می شود که $f''(x)$ نیز پیوسته باشد. یک بسط سه جمله ای سری تیلور برای $f(x)$ حول نقاط $x+h$ و $x-h$ ، به ترتیب، به صورت زیر است

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_r), \quad (\text{الف-۱۱})$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_r), \quad (\text{الف-۱۲})$$

با تفریق معادله الف-۱۲ از الف-۱۱ نتیجه می شود

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{3!}[f'''(\xi_r) + f'''(\xi_r)], \quad (\text{الف-۱۳})$$

که ضمن نوآرایی نتیجه می دهد

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}[f'''(\xi_r) + f'''(\xi_r)]. \quad (\text{الف-۱۴})$$

بنابراین خطای برشی در معادله الف-۱۴ برابر است با

$$\Delta E = -\frac{h^2}{12}[f'''(\xi_r) + f'''(\xi_r)], \quad (\text{الف-۱۵})$$

با توجه به پیوستگی مفروض $f'''(x)$ مقدار $\frac{1}{\eta}[f'''(\xi_r) + f'''(\xi_r)]$ بین $f'''(\xi_r)$ و $f'''(\xi_r)$ قرار دارد و با توجه به اینکه اگر f بر بازه $[a, b]$ پیوسته و $x_1, x_2, \dots, x_n$ و نقاط متمایزی در $[a, b]$ باشند، آنگاه نقطه ای مانند $\eta \in [a, b]$ وجود دارد به طوری که،

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) = f(\eta).$$

بر این اساس بر مبنای قضیه مقدار میانی یک مقدار ξ بین ξ_r و ξ_r وجود دارد که برای آن،

$$f'''(\xi) = \frac{1}{\eta}[f'''(\xi_r) + f'''(\xi_r)], \quad (\text{الف-۱۶})$$

در نتیجه،

$$\Delta E = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi). \quad (\text{الف-۱۷})$$

ΔE خطای برش برای فرمول تفاضل مرکزی (CDF) دو نقطه ای است؛ بنابراین، معادله الف-۱۴

به صورت زیر تبدیل می شود:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \quad (۱۸-الف)$$

از این جهت، معادله الف-۱۸ تقریب مرتبه دوم مشتق اول است. به صورت مشابه، سایر تقریب‌های مراتب بالاتر مشتق را می‌توان با استفاده از بسط سری تیلور استخراج نمود:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \quad (۱۹-الف)$$

فرمول الف-۱۹ تحت عنوان فرمول تفاضل مرکزی (CDF) شناخته می‌شود.

چند جمله‌ای‌های درونیاب نمایش عمومی برای چند جمله‌ای‌هایی هستند که برای تقریب تابع $f(x)$ استفاده می‌شوند و سپس از آن‌ها برای یافتن مشتق تابع $f(x)$ ، با مشتق‌گیری مستقیم از چند جمله‌ای، استفاده می‌شود. راه‌های زیادی برای تخمین مشتق با استفاده از چند جمله‌ای درونیاب وجود دارد. به همین شکل می‌توان از درونیابی برای تخمین مقادیر بین مجموعه‌ای از داده‌ها نیز استفاده کرد. برای این منظور، ابتدا چند جمله‌ای درونیاب مناسب برای داده‌های ارائه‌شده تعیین می‌شود. برای انجام مشتق‌گیری عددی، سه نوع چند جمله‌ای درونیاب، به نام‌های، چند جمله‌ای درونیاب نیوتن^۱، چند جمله‌ای درونیاب استرلینگ^۲ و چند جمله‌ای درونیاب لاگرانژ^۳ بکار برده می‌شوند.

(الف) هنگامی که نقاط داده هم‌فاصله هستند آنگاه

(۱) فرمول درونیابی پیشرو نیوتن برای یافتن مشتق بکار برده می‌شود (نزدیک به داده‌های ابتدای جدول).

(۲) فرمول درونیابی پسرو نیوتن برای یافتن مشتق بکار برده می‌شود (نزدیک به داده‌های انتهای جدول).

(۳) فرمول استرلینگ برای یافتن مشتق بکار برده می‌شود (نزدیک به داده‌های مرکز جدول).

(ب) هنگامی که نقاط داده هم‌فاصله نیستند آنگاه

(۱) فرمول درونیابی تفاضل تقسیم‌شده نیوتن^۴ بکار برده می‌شود.

(۲) فرمول درونیابی لاگرانژ برای یافتن مشتق بکار برده می‌شود.

1. Newton's interpolating polynomial
2. Stirling's polynomial
3. Lagrange's polynomial
4. Newton's divided difference interpolation formula

درحالی که اگر نقاط داده از یکدیگر بسیار دور باشند، برای یافتن مشتق از برون یابی ریچاردسون^۱ استفاده می شود.

۸-۲- مشتقات با کاربرد چندجمله ای درون یاب پیشرو نیوتن

فرمول درون یابی پیشرو نیوتن برای درون یابی مقادیر $[x, y(x)]$ نزدیک به بخش ابتدایی مجموعه مقادیر داده ها $(x_i, y(x_i))$ بکار برده می شود. فرمول درون یابی نیوتن (که فرمول نیوتن-گریگوری^۲ نیز نامیده می شود) به صورت زیر ارائه می شود:

$$y \equiv y_0 + p\Delta y_0 + \frac{p(p-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{p(p-1)(p-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{p(p-1)(p-2)(p-3)}{4!}\Delta^4 y_0 + \dots, \quad (7-8)$$

که در آن $p = \frac{x-x_0}{h}$ است، y_0 اولین مقدار مجموعه داده ها است. Δy_0 تفاوت بین دو مقدار y متوالی است درحالی که $\Delta^2 y_0$ تفاوت بین دو مقدار Δy_0 است و به همین ترتیب برای سایر جملات مقادیر از تفاضل مقادیر گام قبل محاسبه می شوند.

برای یافتن مشتق، از تابع y نسبت به p مشتق گرفته می شود:

$$\frac{dy}{dp} \equiv \Delta y_0 + \frac{2p-1}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{3p^2-6p+2}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{4p^3-18p^2+22p-6}{4!}\Delta^4 y_0 + \dots, \quad (8-8)$$

همچنین می توان نوشت:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dp} \frac{dp}{dx}, \quad (9-8)$$

و از آنجا که $\frac{dp}{dx} = \frac{1}{h}$ ،

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 + \frac{2p-1}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{3p^2-6p+2}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{4p^3-18p^2+22p-6}{4!}\Delta^4 y_0 + \dots \right]. \quad (10-8)$$

در $x = x_0$ مقدار $p = 0$ است درنتیجه

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \dots \right], \quad (11-8)$$

-
1. Richardson extrapolation
 2. Newton-Gregory formula

به طور مشابه

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{dy}{dx} \right) = \frac{d}{dp} \left(\frac{dy}{dx} \right) \cdot \frac{dp}{dx}, \quad (۱۲-۸)$$

$$\left. \frac{d^2 y}{dx^2} \right|_{x=x_0} = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12} \Delta^4 y_0 - \frac{5}{6} \Delta^5 y_0 + \dots \right]. \quad (۱۳-۸)$$

برای یافتن مقدار بیشینه و کمینه یک تابع، مقدار مشتق برابر با صفر قرار داده می‌شود ($\frac{dy}{dx} = 0$).

مقدار $0 \neq 1/h$ است، از این رو با صرف نظر از جملات مرتبه بالاتر در معادله (۸-۱)، یک معادله درجه دو به شکل زیر به دست می‌آید:

$$a + bp + cp^2 = 0, \quad (۱۴-۸)$$

حل این معادله برای p کمینه‌ها/بیشینه‌های تابع $y = f(x)$ را در $x = x_0 + h$ به دست می‌دهد.

مثال ۱: مشتق dy/dx را در $x = 1$ با استفاده از داده‌های ارائه شده به دست آورید.

x	۱	۲	۳	۴	۵	۶
y	-۲	۵	۱۴	۲۵	۳۸	۵۳

راه حل: چون داده‌ها هم‌فاصله هستند (مقادیر x ها فاصله یکسان از هم دارند) و مشتق باید در داده‌های ابتدای جدول یافته تعیین شود (در $x = 1$), چند جمله‌ای درون‌یاب پیشرو نیوتن بکار برده می‌شود. نقاط داده ارائه شده را می‌توان در ادامه در جدول ۸-۱ جدول بندی نمود.

جدول ۸-۱: فرمول درون یاب تفاضل پیشرو نیوتن

x	y	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$	$\Delta^4 y_0$
۰	-۷				
		۵			
۱	-۲		۲		
		۷		۰	
۲	۵		۲		۰
		۹		۰	
۳	۱۴		۲		۰
		۱۱		۰	
۴	۲۵		۲		۰
		۱۳		۰	
۵	۳۸		۲		
		۱۵			
۶	۵۳				

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \dots \right], \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=1} = \frac{1}{1} \left[7 - \frac{2}{2} + \frac{0}{3} \right], \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=1} = 6.$$

می توان داده های ارائه شده را با استفاده از روش برازش منحنی درونیابی نمود و معادله چندجمله ای عمومی برای این داده ها را به شکل $y = x^2 + 4x - 7$ به دست آورد که مشتق آن به شکل $y' = 2x + 4$ است، یعنی همان جواب به دست آمده است ($y'(1) = 2 \times 1 + 4 = 6$).

مثال ۲: داده های یک واکنش مرتبه اول به شرح زیر ارائه شده اند:

t/s	۰	۲۰۰	۴۰۰	۶۰۰	۸۰۰	۱۰۰۰	۱۲۰۰
ln[A]	-۰/۲۵	-۰/۲۲۳	-۰/۱۹۸	-۰/۱۷۴	-۰/۱۵۲	-۰/۱۳۴	-۰/۱۲

شیب dy/dx را که ثابت سرعت در $t = ۲۰۰$ s را به دست می دهد، بیابید.

راه حل: برای واکنش مرتبه اول، رابطه سرعت انتگرال گیری شده به صورت زیر است

$$\ln \frac{[A_t]}{[A_0]} = -kt, \quad (۸-۱۵)$$

شیب هنگامی می تواند ثابت سرعت را به دست دهد که نموداری بین $\ln[A]$ و t ترسیم شود. از آنجا که مشتق باید در ابتدای جدول مشاهدات ($t = ۲۰۰$ s) تعیین شود، فرمول درونیابی پیشرو نیوتن برای مشتق بکار برده می شود و جدول ایجاد تفاضل پیشرو نیوتن ساخته می شود (جدول ۸-۲).

جدول ۸-۲: فرمول تفاضل پیشرو نیوتن برای داده‌های سینتیکی

x	[A]	y=ln[A]	$\Delta y.$	$\Delta^2 y.$	$\Delta^3 y.$	$\Delta^4 y.$	$\Delta^5 y.$
۰	۰/۲۵	-۱/۳۸۶					
			-۰/۱۱۴				
۲۰۰	۰/۲۲۳	-۱/۵۰۰		-۰/۰۰۴			
			-۰/۱۱۸		-۰/۰۰۵		
۴۰۰	۰/۱۹۸	-۱/۶۱۹		-۰/۰۱۰		۰/۰۱۰	
			-۰/۱۲۹		۰/۰۰۴		-۰/۰۰۰۷
۶۰۰	۰/۱۷۴	-۱/۷۴۸		-۰/۰۰۵		۰/۰۱۰	
			-۰/۱۳۵		۰/۰۱۵		-۰/۰۱۹۲
۸۰۰	۰/۱۵۲	-۱/۸۸۳		۰/۰۰۹		-۰/۰۰۸	
			-۰/۱۲۶		۰/۰۰۶		
۱۰۰۰	۰/۱۳۴	-۲/۰۰۹		۰/۰۱۵			
			-۰/۱۱۰				
۱۲۰۰	۰/۱۲	-۲/۱۲۰					

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{t=۲۰۰} = \frac{۱}{۲۰۰} \left[-۰/۱۱۸ - \frac{(-۰/۰۱۰)}{۲} + \frac{۰/۰۰۴}{۳} - \frac{۰/۰۱۰}{۴} + \frac{(-۰/۰۱۹۲۹)}{۵} \right],$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{t=۲۰۰} = -۰/۰۰۰۵۸۲۵.$$

بنابراین، $k_{۲۰۰} = ۰/۰۰۰۵۸۲۵ \text{ s}^{-۱}$ است.

با جواب تحلیلی بر اساس داده‌های ارائه‌شده، ثابت سرعت $k_{۲۰۰} = ۰/۰۰۰۶۵۰ \text{ s}^{-۱}$ به دست می‌آید که تقریباً مشابه نتیجه‌ای است که از مشتق‌گیری عددی به دست آمده است. همواره مقداری تفاوت بین پاسخ تحلیلی و پاسخ به دست از روش‌های عددی وجود دارد زیرا روش‌های عددی، روش‌هایی تقریبی هستند.

۸-۳- مشتقات با کاربرد چندجمله‌ای درون‌یاب پسر نیوتن

اگر مشتق نقطه داده‌ای که باید تخمین زده شود نزدیک به انتهای جدول داده‌ها باشد، آنگاه چندجمله‌ای درون‌یاب پسر نیوتن بکار برده می‌شود که عبارت است از:

$$y \equiv y_n + p \nabla y_n + \frac{p(p+1)}{2!} \nabla^2 y_n + \frac{p(p+1)(p+2)}{3!} \nabla^3 y_n + \frac{p(p+1)(p+2)(p+3)}{4!} \nabla^4 y_n + \dots, \quad (۱۶-۸)$$

که $p = \frac{x-x_n}{h}$ است، y_n آخرین مقدار مجموعه داده‌ها است. ∇y_n تفاوت بین دو مقدار y متوالی است درحالی که $\nabla^2 y_n$ تفاوت بین دو مقدار ∇y_n است و به همین ترتیب برای سایر جملات مقادیر از تفاضل مقادیر گام قبل محاسبه می‌شوند.

برای یافتن مشتق، از تابع y نسبت به p مشتق گرفته می‌شود

$$\frac{d}{dp} \equiv \nabla y_n + \frac{2p+1}{2!} \nabla^2 y_n + \frac{3p^2+6p+2}{3!} \nabla^3 y_n + \frac{4p^3+18p^2+22p+6}{4!} \nabla^4 y_n + \dots$$

همچنین می‌توان نوشت

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dp} \frac{dp}{dx}, \quad (۹-۸)$$

و از آنجا که $\frac{dp}{dx} = \frac{1}{h}$ بنابراین

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{h} \left[\nabla y_n + \frac{2p+1}{2!} \nabla^2 y_n + \frac{3p^2+6p+2}{3!} \nabla^3 y_n + \frac{4p^3+18p^2+22p+6}{4!} \nabla^4 y_n + \dots \right]. \quad (۱۷-۸)$$

در $x = x_n$ مقدار $p = 0$ است در نتیجه

$$\left[\frac{dy}{dx} \right]_{x=x_n} = \frac{1}{h} \left[\nabla y_n + \frac{\nabla^2 y_n}{2} + \frac{\nabla^3 y_n}{3} + \frac{\nabla^4 y_n}{4} + \dots \right], \quad (۱۸-۸)$$

و

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{dy}{dx} \right) = \frac{d}{dp} \left(\frac{dy}{dx} \right) \cdot \frac{dp}{dx}. \quad (۱۲-۸)$$

به‌طور مشابه،

$$\left[\frac{d^2 y}{dx^2} \right]_{x=x_n} = \frac{1}{h^2} \left[\nabla^2 y_n + \nabla^3 y_n + \frac{11}{12} \nabla^4 y_n + \frac{5}{6} \nabla^5 y_n + \dots \right]. \quad (۱۹-۸)$$

برای یافتن مقدار بیشینه و کمینه یک تابع، مقدار مشتق برابر با صفر قرار داده می‌شود ($\frac{dy}{dx} = 0$).

مثال ۳: مشتق dy/dx در $x = ۱/۵$ را از داده‌های زیر محاسبه کنید:

x	۱	۱/۱	۱/۲	۱/۳	۱/۴	۱/۵	۱/۶
y	۷/۹۸۹	۸/۴۰۳	۸/۷۸۱	۹/۱۲۹	۹/۴۵۱	۹/۷۵۰	۱۰/۰۳۱

راه حل: چون لازم است مشتق در انتهای جدول داده‌ها محاسبه شود، چند جمله‌ای تفاضل پسرو نیوتن (جدول ۸-۳) برای محاسبه مشتق بکار برده می‌شود (معادله ۸-۱۸).

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dx}\bigg|_{x=x_n} &= \frac{1}{h} \left[\nabla y_n + \frac{\nabla^2 y_n}{2} + \frac{\nabla^3 y_n}{3} + \frac{\nabla^4 y_n}{4} + \dots \right], \\ \frac{dy}{dx}\bigg|_{x=۱/۵} &= \frac{1}{۰/۱} \left[۰/۲۹۹ + \frac{(-۰/۰۲۳)}{2} + \frac{۰/۰۳}{3} + \frac{(-۰/۰۰۱)}{4} + \frac{۰/۰۰۱}{5} \right], \\ \frac{dy}{dx}\bigg|_{x=۱/۵} &= ۲/۸۸۴.\end{aligned}$$

جدول ۸-۳: فرمول درون یابی تفاضل پسرو نیوتن برای محاسبه مشتق

x	y	∇y_n	$\nabla^2 y_n$	$\nabla^3 y_n$	$\nabla^4 y_n$	$\nabla^5 y_n$	$\nabla^6 y_n$
۱	۷/۹۸۹	۰/۴۱۴					
۱/۱	۸/۴۰۳		-۰/۰۳۶				
		۰/۳۷۸		۰/۰۰۶			
۱/۲	۸/۷۸۱		-۰/۰۳		-۰/۰۰۲		
		۰/۳۴۸		۰/۰۰۴		۰/۰۰۱	
۱/۳	۹/۱۲۹		-۰/۰۲۶		-۰/۰۰۱		۰/۰۰۲
		۰/۳۲۲		۰/۰۰۳		۰/۰۰۳	
۱/۴	۹/۴۵۱		-۰/۰۲۳		۰/۰۰۲		
		۰/۲۹۹		۰/۰۰۵			
۱/۵	۹/۷۵۰		-۰/۰۱۸				
		۰/۲۸۱					
۱/۶	۱۰/۰۳۱						

مثال ۴: با استفاده از داده های مثال ۲ مشتق در $t = ۱۰۰۰s$ را محاسبه کنید.

راه حل: چون مشتق باید در انتهای جدول ۸-۴ محاسبه شود، از چند جمله ای تفاضل پسرو نیوتن استفاده می شود.

با استفاده از چند جمله ای درون یاب پسرو نیوتن به صورت زیر:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{t=۱۰۰۰} = \frac{۱}{۲۰۰} \left[-۰/۱۲۶ + \frac{۰/۰۰۹}{۲} + \frac{۰/۰۱۵}{۳} + \frac{۰/۰۱۰}{۴} + \frac{۰/۰۰۷}{۵} \right]$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{t=۱۰۰۰} = -۰/۰۰۰۵۶۸۰$$

در نتیجه $k_{۱۰۰۰} = ۰/۰۰۰۵۶۸۰ s^{-۱}$ است.

جدول ۸-۴: فرمول درونیابی تفاضل پسرو نیوتن.

$t=x$	$[A]$	$y=\ln[A]$	∇y_n	$\nabla^2 y_n$	$\nabla^3 y_n$	$\nabla^4 y_n$	$\nabla^5 y_n$
۰	۰/۲۵	-۱/۳۸۶					
			-۰/۱۱۴				
۲۰۰	۰/۲۲۳	-۱/۵۰۰		-۰/۰۰۴			
			-۰/۱۱۸		-۰/۰۰۵		
۴۰۰	۰/۱۹۸	-۱/۶۱۹		-۰/۰۱۰		۰/۰۱۰	
			-۰/۱۲۹		۰/۰۰۴		۰/۰۰۰۷
۶۰۰	۰/۱۷۴	-۱/۷۴۸		-۰/۰۰۵		۰/۰۱۰	-۰/۰۲۰۰
			-۰/۱۳۵		۰/۰۱۵		-۰/۰۱۹۲
۸۰۰	۰/۱۵۲	-۱/۸۸۳		۰/۰۰۹		-۰/۰۰۸	
			-۰/۱۲۶		۰/۰۰۶		
۱۰۰۰	۰/۱۳۴	-۲/۰۰۹		۰/۰۱۵			
			-۰/۱۱۰				
۱۲۰۰	۰/۱۲	-۲/۱۲۰					

۸-۴- مشتقات با کاربرد چندجمله‌ای درونیاب استرلینگ

فرمول استرلینگ میانگین مقادیر به‌دست‌آمده توسط درونیابی پیشرو و پسرو گاوس را محاسبه می‌نماید. شرط استفاده از فرمول استرلینگ $1/2 < p < 1/2 -$ است. فرمول استرلینگ به‌صورت زیر ارائه می‌شود.

$$\begin{aligned}
 y = y_0 + p \left(\frac{\Delta y_0 + \Delta y_{-1}}{2} \right) + \frac{p^2}{2!} \Delta^2 y_{-1} + \frac{p(p^2 - 1)}{3!} \left(\frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_{-2}}{2} \right) \\
 + \frac{p^2(p^2 - 1)}{4!} \Delta^4 y_{-2} \\
 + \frac{p(p^2 - 1)(p^2 - 2^2)}{5!} \left(\frac{\Delta^4 y_{-2} + \Delta^4 y_{-3}}{2} \right) + \dots,
 \end{aligned}
 \quad (8-20)$$

که در آن $p = \frac{x - x_0}{h}$ است.

با مشتق‌گیری از معادله بالا نسبت به p داریم،

$$\frac{dy}{dp} = \left(\frac{\Delta y_0 + \Delta y_{-1}}{2} \right) + p \Delta^2 y_{-1} + \frac{p^2 - 1}{2!} \left(\frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_{-2}}{2} \right) + \frac{p^3 - 3p}{4!} \Delta^4 y_{-2} + \dots \quad (21-8)$$

از آنجا که،

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dp} \frac{dp}{dx} \quad (9-8)$$

و $\frac{dp}{dx} = \frac{1}{h}$ داریم،

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{h} \left[\left(\frac{\Delta y_0 + \Delta y_{-1}}{2} \right) + p \Delta^2 y_{-1} + \frac{p^2 - 1}{2!} \left(\frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_{-2}}{2} \right) + \frac{p^3 - 3p}{4!} \Delta^4 y_{-2} + \dots \right] \quad (22-8)$$

در $x = x_0$ مقدار $p = 0$ است.

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{1}{h} \left[\left(\frac{\Delta y_0 + \Delta y_{-1}}{2} \right) - \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_{-2}}{2} \right) + \frac{1}{30} \left(\frac{\Delta^4 y_{-2} + \Delta^4 y_{-3}}{2} \right) - \dots \right] \quad (23-8)$$

و به طور مشابه

$$\left. \frac{d^2 y}{dx^2} \right|_{x=x_0} = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_{-1} - \frac{1}{12} \Delta^4 y_{-2} + \frac{1}{90} \Delta^6 y_{-3} - \dots \right] \quad (24-8)$$

مثال ۵: مشتق dy/dx در $x = 3/0$ را بیابید.

راه حل: چون در این مثال، لازم است مشتق در بخش میانی داده های جدول تعیین شود، چند جمله ای درونیابی استرلینگ (جدول ۸-۵) استفاده خواهد شد (معادله (۲۳-۸)).

x	۰	۰/۱	۰/۲	۰/۳	۰/۴	۰/۵	۰/۶
y	۴	۴/۰۴۴	۴/۰۱۶	۳/۹۱۶	۳/۷۴۴	۳/۵	۳/۱۸۴

در این جدول مقادیر $\Delta^n y$ مربوط به $x = 3/0$ توسط خط چین نشان داده شده اند.

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{1}{h} \left[\left(\frac{\Delta y_0 + \Delta y_{-1}}{2} \right) - \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_{-2}}{2} \right) + \frac{1}{30} \left(\frac{\Delta^4 y_{-2} + \Delta^4 y_{-3}}{2} \right) - \dots \right],$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=0.3} = \frac{1}{0.1} \left[\left(\frac{-172/0 + (-170)}{2} \right) - \frac{1}{6} \left(\frac{44/4 \times 10^{-16} + 44/4 \times 10^{-16}}{2} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{30} \left(\frac{-111/1 \times 10^{-16} + (-177/1 \times 10^{-15})}{2} \right) \right] \\ \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=0.3} = -36/1.$$

جدول ۸-۵: فرمول درونیابی استرلینگ برای تعیین مشتق

x	y	$\Delta^1 y.$	$\Delta^2 y.$	$\Delta^3 y.$	$\Delta^4 y.$	$\Delta^5 y.$	$\Delta^6 y.$
۰	۴						
		۰/۰۴۴					
۰/۱	۴/۰۴۴		-۰/۰۷۲				
		-۰/۰۲۸		-۷۳۳۲E-۱۵			
۰/۲	۴/۰۱۶		-۰/۰۷۲		۷۷۷۶E-۱۵		
		-۰/۱		۴/۴۴E-۱۶		-۷۷۷E-۱۵	
۰/۳	۳/۹۱۶		-۰/۰۷۲		۰		۸/۸۸E-۱۶
		-۰/۱۷۲		۴/۴۴E-۱۶		-۸/۸۸E-۱۶	
۰/۴	۳/۷۴۴		-۰/۰۷۲		-۸/۸۸E-۱۶		
		-۰/۲۴۴		-۴/۴۴E-۱۶			
۰/۵	۳/۵		-۰/۰۷۲				
		-۰/۳۱۶					
۰/۶	۳/۱۸۴						

مثال ۶: برای واکنش برگشت پذیر



سرعت تغییر A به صورت زیر است:

Time (h)	۰	۱	۲	۳	۴	∞
%A	۱۰۰	۷۲/۵	۵۶/۸	۴۵/۶	۳۹/۵	۳۰

واکنش از سینتیک مرتبه اول با رابطه $\ln \left(\frac{A-A_{eq}}{A_0-A_{eq}} \right) = -(k_1 + k_{-1}) \cdot t$ پیروی می کند که در آن A_{eq} و A غلظت های تعادلی و غلظت در هر زمان t هستند. ثابت سرعت هر دو واکنش رفت و برگشت و ثابت تعادل را محاسبه کنید.

راه حل: چون در این مثال، داده‌ها برای غلظت A داده شده‌اند و به عبارت لگاریتمی به صورت $\ln\left(\frac{A-A_{eq}}{A_0-A_{eq}}\right)$ نیاز است، قبل از اعمال روش مشتق گیری عددی، داده‌ها برحسب این عبارت در جدول ۸-۶ محاسبه می‌شوند.

جدول ۸-۶: فرمول درون‌یابی استرلینگ برای تعیین مشتق

زمان (h)	۰	۱	۲	۳	۴	∞
%A	۱۰۰	۷۲/۵	۵۶/۸	۴۵/۶	۳۹/۵	۳۰
$\ln\left(\frac{A-A_{eq}}{A_0-A_{eq}}\right)$	۰	-۰/۴۹۹۲	-۰/۹۵۹۷	-۱/۵۰۰۵	-۱/۹۹۵۱	-

چون هیچ نقطه مشخصی برای محاسبه مشتق ارائه نشده است، مشتق در بازه میانی محاسبه می‌شود. با محاسبه مشتق در بازه‌های ۲ ساعت $t = 2h$ با استفاده از روش چندجمله‌ای استرلینگ (جدول ۸-۷)، می‌توان همان فاصله نقاط را به صورت $h = 1h$ مجسم نمود:

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{t=2h} = \frac{1}{h} \left[\left(\frac{\Delta y_0 + \Delta y_{-1}}{2} \right) - \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_{-2}}{2} \right) + \dots \right],$$

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{t=2h} = \frac{1}{1} \left[\left(\frac{-۰/۴۶۰۵/۰ + (-۰/۵۴۰۹/۰)}{2} \right) - \frac{1}{6} \left(\frac{-۱۱۹۷/۰ + ۱۲۶۷/۰}{2} \right) \right],$$

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{t=2h} = -۰/۵۰۱۳/۰.$$

جدول ۸-۷: فرمول درون‌یابی استرلینگ برای داده‌های سینتیکی

x_i	y_i	$\Delta^1 y$	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
۰	۰/۰۰۰۰				
		-۰/۴۹۹۲			
۱	-۰/۴۹۹۲		۰/۰۳۸۷		
		-۰/۴۶۰۵		-۰/۱۱۹۱	
۲	-۰/۹۵۹۷		-۰/۰۸۰۴		۰/۲۴۵۸
		-۰/۵۴۰۹		۰/۱۲۶۷	
۳	-۱/۵۰۰۶		۰/۰۴۶۳		
		-۰/۴۹۴۵			
۴	-۱/۹۹۵۱				

که مقدار شیب به صورت ترسیمی برابر با $-۰/۴۹۹۱$ به دست می‌آید.

همچنین با توجه به اینکه غلظت تعادلی پس از رسیدن به تعادل، در زمان بی‌نهایت قابل حصول است

$$K = \frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{[Beq]}{[Aeq]} = \frac{V_0}{V_\infty} = 333/2,$$

بنابراین با جایگذاری مقادیر معلوم در رابطه، نتیجه می‌شود.

$$.k_1 = 3506 h^{-1}, \quad k_{-1} = 1502 h^{-1}$$

مشتق‌های مرتبه‌های بالاتر را می‌توان با مشتق‌گیری متوالی از مشتقات قبلی تعیین نمود. مشتق‌گیری عددی با استفاده از چندجمله‌ای استرلینگ در مقایسه با چندجمله‌ای نیوتن دقیق‌تر است. هنگامی که نقاط عموماً با فاصله‌های نامساوی توزیع شده‌اند، چندجمله‌ای تفاضل تقسیم‌شده نیوتن^۱ و چندجمله‌ای لاگرانژ^۲ بکار برده می‌شود.

۸-۵- چندجمله‌ای تفاضل تقسیم‌شده نیوتن

هنگامی که فاصله بین نقاط داده با هم برابر نیستند (نقاط در بازه‌های یکسان توزیع نشده‌اند)، آنگاه فرمول درونیابی تفاضل تقسیم‌شده نیوتن^۳ استفاده می‌شود که عبارت است از

$$\begin{aligned} f(x) = & f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] \\ & + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)f[x_0, x_1, x_2, x_3] + \dots \end{aligned} \quad (8-25)$$

$$\text{که } f[x_0, x_1] = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$$

و به صورت مشابه

سپس برای یافتن مشتق در یک نقطه معین از معادله اخیر نسبت به x مشتق گرفته می‌شود. به جز چندجمله‌ای تفاضل تقسیم‌شده نیوتن، چندجمله‌ای لاگرانژ نیز برای درونیابی نقاط داده‌ای که در فاصله‌های نابرابر قرار دارند، استفاده می‌شود.

1. Newton's divided difference polynomial
2. Lagrange's polynomial
3. Newton's divided difference interpolation formula

مثال ۷: با استفاده از داده های ارائه شده، dy/dx را در $x = ۶$ برآورد نمایید.

x	۰	۲	۳	۴	۷	۹
y	۴	۲۶	۵۸	۱۱۲	۴۶۶	۹۲۲

راه حل: چون نقاط داده با فاصله های نامساوی توزیع شده اند، جدول تفاضل تقسیم شده نیوتن (جدول ۸-۸) برای درون یابی ایجاد می شود.

با استفاده از رابطه (۸-۲۵) داریم:

$$f(x) = ۴ + (x - ۰) \times ۱۱ + x(x - ۲) \times ۷ + x(x - ۲)(x - ۳) \times ۱,$$

$$f(x) = x^3 + ۲x^2 + ۳x + ۴,$$

$$f'(x) = ۳x^2 + ۴x + ۳,$$

$$f'(x)|_{x=۶} = ۱۰۸ + ۲۴ + ۳ = ۱۳۵.$$

جدول ۸-۸: فرمول تفاضل تقسیم شده نیوتن برای درون یابی

x	y	$f[x_0, x_1]$	$f[x_0, x_2, x_1]$	$f[x_0, x_2, x_3, x_1]$	$f[x_0, x_2, x_3, x_4, x_1]$
۰	۴				
		$\frac{۲۶ - ۴}{۲ - ۰} = ۱۱$			
۲	۲۶		$\frac{۳۲ - ۱۱}{۳ - ۰} = ۱۱$		
		$\frac{۵۸ - ۲۶}{۳ - ۲} = ۳۲$		$\frac{۱۱ - ۷}{۴ - ۰} = ۱$	
۳	۵۸		$\frac{۵۴ - ۳۲}{۴ - ۲} = ۱۱$		۰
		$\frac{۱۱۲ - ۵۸}{۴ - ۳} = ۵۴$		$\frac{۱۶ - ۱۱}{۷ - ۲} = ۱$	
۴	۱۱۲		$\frac{۱۱۸ - ۵۴}{۷ - ۳} = ۱۶$		۰
		$\frac{۴۶۶ - ۱۱۲}{۷ - ۴} = ۱۱۸$		$\frac{۲۲ - ۱۶}{۹ - ۳} = ۱$	
۷	۴۶۶		$\frac{۳۷۸ - ۱۱۸}{۹ - ۴} = ۲۲$		
		$\frac{۹۲۲ - ۴۶۶}{۹ - ۷} = ۲۸$			
۹	۹۲۲				

۸-۶- چندجمله‌ای لاگرانژ

برای مجموعه‌ای از نقاط داده ارائه شده $x_0, x_1, \dots, x_n$ که هم‌فاصله نیستند، چندجمله‌ای درون‌یاب لاگرانژ برای نقاط $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ به صورت زیر ارائه می‌شود

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{i=n} L_i(x)f(x_i) \quad (۸-۲۶)$$

$$= L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2) + \dots + L_n(x)f(x_n).$$

که $P_n(x)$ بر چندجمله‌ای مرتبه n ام که تابع $f(x)$ را تقریب می‌زند، دلالت می‌نماید به طوری که

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

$L_i(x)$ یک تابع وزنی شامل $n - 1$ جمله است که در آن جمله $i = j$ حذف شده است. به عنوان

نمونه چند جمله‌ای لاگرانژ مرتبه دوم که از نقاط $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ و (x_2, y_2) عبور می‌کند عبارتست از

$$P_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2). \quad (۲۷-۸)$$

مشتق تابع، همان مشتق چندجمله‌ای لاگرانژ است؛ از این رو، می‌توان نوشت

$$f'(x) = P_2'(x) = L_0'(x)f(x_0) + L_1'(x)f(x_1) + L_2'(x)f(x_2), \quad (۲۸-۸)$$

$$f'(x) \approx \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{2x - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{2x - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2), \quad (۲۹-۸)$$

بنابراین برای یافتن مشتق در x_0 ،

$$f'(x) \approx \frac{2x_0 - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2). \quad (۳۰-۸)$$

اگر نقاط تفاضل پیشرو در نظر گرفته شوند به نحوی که $x_0 = x$ ، $x_1 = x + h$ و $x_2 = x + 2h$ ،

$$f'(x) \approx \frac{-3}{2h} f(x_0) + \frac{4}{2h} f(x_1) - \frac{1}{2h} f(x_2), \quad (۳۱-۸)$$

که می توان آن را چنین نیز نوشت.

$$f'(x) \approx \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h}. \quad (32-8)$$

این رابطه به نام فرمول تفاضل پیشرو سه نقطه ای^۱ شناخته می شود.

مشتق دوم را نیز می توان با مشتق گیری مجدد از معادله نوشت که در نتیجه فرمول کلی زیر به دست می آید:

$$f''(x_i) \approx \frac{1}{h^2} [f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))]. \quad (33-8)$$

رابطه بالا فرمول تفاضل پیشرو سه نقطه ای برای یافتن مشتق در موقعیت i ام است. اگر چهار نقطه x_0, x_1, x_2, x_3 انتخاب شوند، آنگاه به طور مشابه، مشتق دوم نیز می تواند به شکل زیر تعیین شود.

$$\begin{aligned} f''(x) \approx P_3''(x) = & \frac{2[(x-x_1) + (x-x_2) + (x-x_3)]}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} f(x_0) \\ & + \frac{2[(x-x_0) + (x-x_2) + (x-x_3)]}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f(x_1) \\ & + \frac{2[(x-x_0) + (x-x_1) + (x-x_3)]}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f(x_2) \\ & + \frac{2[(x-x_0) + (x-x_1) + (x-x_2)]}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f(x_3), \end{aligned} \quad (34-8)$$

با در نظر گرفتن تفاضل های پیشرو به صورت زیر:

$$x_3 = x + 3h, x_2 = x + 2h, x_1 = x + h, x_0 = x$$

$$f''(x) \approx \frac{2f(x) - 5f(x+h) + 4f(x+2h) - f(x+3h)}{h^2}. \quad (35-8)$$

فرمول اخیر فرمول تفاضل پیشرو چهار نقطه ای برای مشتق دوم نامیده می شود.

مثال ۸: بر اساس داده های ارائه شده (جدول ۸-۹)، مشتق را در $x = 5$ با استفاده از چندجمله ای لاگرانژ بیابید.

1. Three-point forward difference formula (FDF)

جدول ۸-۹: چندجمله‌ای لاگرانژ برای درونیابی نقاط داده غیر هم‌فاصله

N	۰	۱	۲	۳
x_n	-۱	۱	۴	۷
$y_n=f(x_n)$	-۲	۰	۶۳	۳۴۲

راه حل: چند جمله ای لاگرانژ برای دورنیابی را می توان چنین نوشت

$$P_r(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2) + L_3(x)f(x_3), \quad (۸-۳۶)$$

که،

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} = \frac{-1}{\lambda_0}(x^3 - 12x^2 + 39x - 28),$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} = \frac{1}{36}(x^3 - 10x^2 + 17x + 28),$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} = \frac{-1}{45}(x^3 - 7x^2 - x + 7),$$

$$L_3(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} = \frac{1}{144}(x^3 - 4x^2 - x + 4).$$

با جایگذاری مقادیر (x_n, y_n) می توان نوشت:

$$\begin{aligned} P_r(x) &= \frac{-1}{\lambda_0}(x^3 - 12x^2 + 39x - 28)(-2) \\ &\quad + \frac{1}{36}(x^3 - 10x^2 + 17x + 28)(0) \\ &\quad + \frac{-1}{45}(x^3 - 7x^2 - x + 7)(63) \\ &\quad + \frac{1}{144}(x^3 - 4x^2 - x + 4)(342), \end{aligned} \quad (۸-۳۷)$$

$$P_r(x) = x^3 - 1, \quad (۸-۳۸)$$

$$P_r'(x) = 3x^2, \quad (۸-۳۹)$$

$$P_r'(\Delta) = 3 \times \Delta^2 = 7\Delta.$$

مثال ۹: با استفاده از داده های ارائه شده برای گاز واندروالس مشتق dP/dV را بیابید.

	x_0	x_1	x_2	x_3
x	۱	۲	۴	۵
$y=f(x_n)$	۲۲۲۴/۲۴۲	۱۱۷۴/۸۵۱	۶۰۳/۳۳۶	۴۸۵/۲۲۹

راه حل: در اینجا نقاط هم فاصله نیستند؛ از این رو مشتق را می توان با فرمول تفاضل تقسیم شده نیوتن یا چند جمله ای لاگرانژ تعیین نمود. از این رو، با استفاده از فرمول تفاضل تقسیم شده نیوتن به صورت (جدول ۸-۱۰)

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)f[x_0, x_1, x_2, x_3] + \dots$$

جدول ۸-۱۰: داده های چند جمله ای درون یاب تفاضل تقسیم شده نیوتن.

x_i	y_i	$\Delta^1 y$	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
۱	۲۲۲۴/۲۴۲۰۴۷			
		-۱۰۴۹/۳۹۰۳۸۲		
۲	۱۱۷۴/۸۵۱۶۶۵		۲۵۴/۵۴۴۸۶۳	
		-۲۸۵/۷۵۷۵۲۳		-۴۹/۶۶۵۲۳۶۳۸
۴	۶۰۳/۳۳۶۶۱۹		۵۵/۸۸۳۳۴۰۸	
		-۱۱۸/۱۰۷۵۰۰۶		
۵	۴۸۵/۲۲۹۱۱۸۴			

با جای گذاری مقادیر مورد نیاز

$$P = f(V) = f(V_0) + (V - V_0)f[V_0, V_1] + (V - V_0)(V - V_1)f[V_0, V_1, V_2],$$

$$P = ۲۲۲۴/۲۴ - (V - ۱) \times ۱۰۴۹/۳۹ + (V - ۱)(V - ۲) \times ۲۵۴/۵۴ - (V - ۱)(V - ۲) \times ۴۹/۶۶,$$

و با مشتق گیری نسبت به V و جای گذاری $V = ۱$ ، نتیجه می شود:

$$dP/dV = -۱۴۵۲/۹۳۰۳.$$

این بدان معنی است که فشار با افزایش حجم کاهش می یابد که چیزی جز همان مفهوم قانون بویل نیست.

به صورت مشابه با استفاده از چند جمله ای لاگرانژ برای درون یابی چهار نقطه داده ($N = ۴$) در فاصله های نابرابر از درون یابی چند جمله ای درجه ۳ ($N - ۱ = ۳$) به صورت زیر استفاده می شود:

$$\begin{aligned}
 L(x) = & \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} f(x_0) \\
 & + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f(x_1) \\
 & + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f(x_2) \\
 & + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f(x_3)
 \end{aligned}$$

اینجا، با استفاده از x_0, x_1, x_2 و x_3 که به ترتیب برابر با ۱، ۲، ۴ و ۵ هستند، نتیجه می‌شود:

$$\begin{aligned}
 L_0(x) &= \frac{(x-2)(x-4)(x-5)}{-12} & L_1(x) &= \frac{(x-1)(x-4)(x-5)}{6} \\
 L_2(x) &= \frac{(x-1)(x-2)(x-5)}{-6} & L_3(x) &= \frac{(x-1)(x-2)(x-4)}{12}
 \end{aligned}$$

با جایگذاری در فرمول قبل برای $L(x)$ و مشتق‌گیری نسبت به x و جایگذاری مقادیر مورد نیاز

تابع در $x = 1$ ، نتیجه می‌شود که $dP/dV = -1452/93.3$ است.

هر دو روش جواب مشابهی بدست می‌دهند. هنگامی که این مسئله به صورت تحلیلی و با

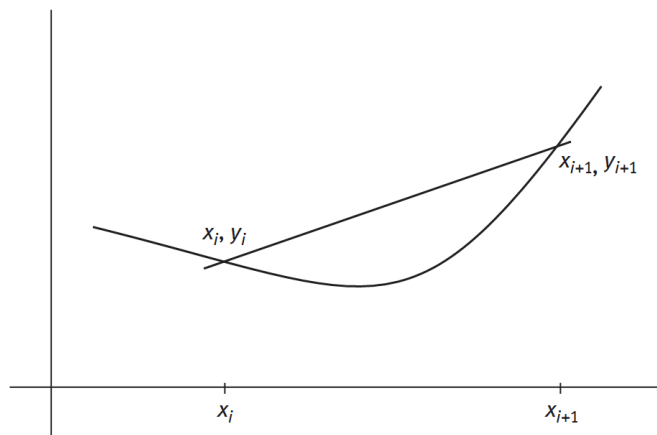
استفاده از مشتق معادله واندروالس حل شود، پاسخ $dP/dV = -1975/83$ است.

از آنجا که این روش‌ها تقریبی هستند، باز هم پاسخی که به صورت عددی به دست می‌آید، اغلب

با پاسخ متعارف متفاوت است.

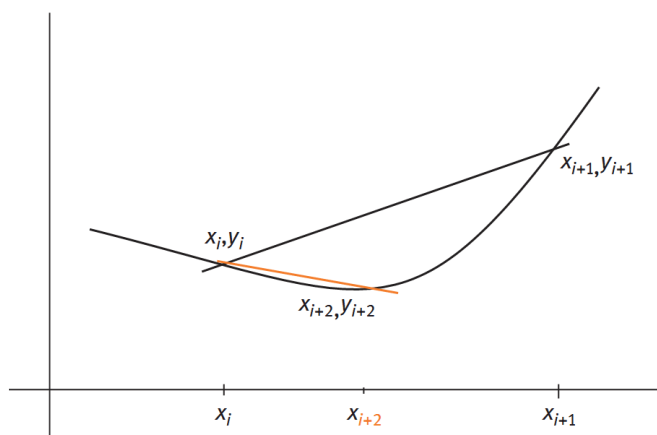
۸-۷- برون یابی ریچاردسون

گاهی وقت‌ها هنگامی که از نقاط داده که زیاد نزدیک به هم نیستند؛ برای مثال x_i و x_{i+1} (شکل ۸-۳)؛ استفاده و سعی می‌شود تا مقدار مشتق یا شیب تعیین شود خطای بزرگی حاصل می‌شود. این بدان علت است که تفاوت بین بازه‌های x (یعنی h) بسیار بزرگ است.



شکل ۸-۲: برون یابی ریچاردسون هنگامی که نقاط داده بسیار دور از هم هستند.

اگر مقدار h کاهش داده شود، مقدار شیب مانند شکل ۸-۳ بهتر خواهد شد.



شکل ۸-۳: کاهش اندازه بازه‌ها (h).

مشاهده می‌شود هنگامی که پهنای بازه کاهش می‌یابد شیب خط بهبود می‌یابد و خطای کمتری ایجاد می‌شود. از این رو می‌توان چنین گفت که دقت یک روش برای تخمین مشتق یا انتگرال از تابع $f(x)$ به فاصله‌گذاری بین نقاطی که در آن‌ها مشتق یا انتگرال ارزیابی می‌شود، بستگی دارد. همچنان که فاصله به صفر میل می‌کند تقریب به سمت بهتر شدن متمایل می‌گردد. در حالتی که فاصله‌گذاری h یکسان و مشابه باشد، امکان تخمین نقاط داده توسط عبارت زیر وجود دارد.

$$D(h) = f'(x_i) = \left[\frac{f(x_{i+h}) - f(x_{i-h})}{2h} \right] - \frac{h^2}{6} f''(x) + O(h^4), \quad (40-8)$$

$D(h)$ مقدار تقریب زده‌شده توسط فرمول تفاضل مرکزی (CFD) با اندازه گام h است. به صورت مشابه می‌توان این معادله را برای زمانی که اندازه گام $h/2$ است به صورت زیر نوشت:

$$D(h/2) = f'(x_i) = \left[\frac{f(x_{i+h/2}) - f(x_{i-h/2})}{2(h/2)} \right] - \frac{h^2}{24} f''(x) + O(h^4), \quad (41-8)$$

$D(h/2)$ مقدار تقریب زده‌شده توسط فرمول تفاضل مرکزی (CFD) با اندازه گام $h/2$ است. با حل دو معادله قبلی نتیجه می‌شود.

$$D = f'(x_i) = \frac{4D(h/2) - D(h)}{3}. \quad (42-8)$$

D تقریب بهبودیافته یا مقدار حقیقی است. این فرایند برون‌یابی از $D(h)$ و $D(h/2)$ برای تقریب D با دقت بالاتر، برون‌یابی ریچاردسون نامیده می‌شود. فرمول پیشین محاسبه یک روش تقریبی را تشریح می‌کند که دقت آن از مرتبه چهار است. این روش در ادامه به منظور دستیابی به دقت‌های بالاتر تا مرتبه $O(h^6)$ ، $O(h^8)$ و به همین ترتیب برای مراتب بالاتر بسط داده می‌شود.

$$D^k(h) = \frac{4^k D^{k-1}(h/2) - D^{k-1}(h)}{4^k - 1}. \quad (43-8)$$

مثال ۱۰: با استفاده از داده‌های زیر (جدول ۸-۱۱)، برای $h = 2$ ، مشتق $f'(x_2)$ را محاسبه کنید.

جدول ۸-۱۱: فرمول برون‌یابی ریچاردسون

n	۰	۱	۲	۳	۴
x_n	۱	۲	۳	۴	۵
y_n	۲	۴	۸	۱۶	۳۲

راه حل: با استفاده از برون‌یابی ریچاردسون

$$D(h) = f'(x) = \frac{1}{2h} [f(x_\gamma + h) - f(x_\gamma - h)],$$

$$D(h) = f'(x) = \frac{1}{4} [f(5) - f(1)],$$

$$D(h) = f'(x) = \frac{1}{4} [32 - 2] = 7/5.$$

به طور مشابه با محاسبه

$$D(h/2) = f'(x_\gamma) = \frac{1}{2 \cdot \frac{h}{2}} \left[f\left(x_\gamma + \frac{h}{2}\right) - f\left(x_\gamma - \frac{h}{2}\right) \right],$$

$$D(h/2) = f'(x_\gamma) = \frac{1}{2} [f(4) - f(2)],$$

$$D(h/2) = f'(x_\gamma) = \frac{1}{2} [16 - 4] = 6.$$

در نتیجه با استفاده از معادله (۸-۴۱)، نتیجه می‌شود که،

$$D = \frac{4D(h/2) - D(h)}{3},$$

$$D = \frac{4 \times 6 - 7/5}{3} = \frac{16/5}{3} \approx 5/5.$$

تابع اصلی $y = 2^x$ است، که مشتق آن برابر با $5/54518 \approx y' = 2^x \ln|2|$ است.

این فرمول برای دستیابی به دقت از مرتبه چهارم بود. همچنین امکان دستیابی به دقت از مرتبه‌های بالاتر نیز وجود دارد.

۸-۸- مسئله‌هایی برای تمرین

۱. مشتق $\frac{dy}{dx}$ و $\frac{d^2y}{dx^2}$ را در $x = 5$ با استفاده از نقاط داده ارائه شده بیابید.

x	۱	۲	۳	۴	۵	۶
y	-۲	۵	۱۴	۲۵	۳۸	۵۳

۲. با استفاده از تقریب چندجمله‌ای استرلینگ برای درونیابی مشتقات، محتمل‌ترین سرعت در منحنی توزیع ماکسول را در این نمونه بیابید:

$$\frac{1}{N} \frac{dN}{du} = \int_0^{1200} 4\pi u^2 \left(\frac{m}{2\pi RT} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-Mu^2}{2RT} \right) du$$

x	۰	۲۰۰	۴۰۰	۶۰۰	۸۰۰	۱۰۰۰	۱۲۰۰	۱۴۰۰
$\frac{1}{N} \frac{dN}{du} = y$	۰	۰/۰۰۱۱۴۴	۰/۰۰۲۱۰۹	۰/۰۰۱۳۰۴	۰/۰۰۰۳۸۰	۰/۰۰۰۰۵۸	۰/۰۰۰۰۰۵	۰

۳. با استفاده از داده‌های ارائه‌شده، مقدار x را در نقطه‌ای که y بیشینه است، بیابید.

x	۳	۴	۵	۶	۷	۸
y	۰/۲۰۵	۰/۲۴۰	۰/۲۵۹	۰/۲۶۲	۰/۲۵۰	۰/۲۲۴

۴. مقدار dy/dx را در $x = 1$ با استفاده از داده‌های زیر بیابید.

x	۰	۲	۴	۶	۸
y	۴	۸	۱۵	۷	۶

فصل نهم
روش‌های ریشه‌یابی عددی

۹-۱- مقدمه

در شیمی، اغلب با معادلات چندجمله‌ای طولانی و پیچیده‌ای مواجه می‌شویم که حل آن‌ها به صورت تحلیلی دشوار است. با توجه به مفاهیم جبری، ریشه، مقدار صفر کننده یک تابع است، یعنی، جایی که تابع $f(x)$ صفر است. سه راه برای حل معادلات وجود دارند که عبارت‌اند از حل تحلیلی، حل ترسیمی و حل عددی. روش‌های حل عددی توانمندترین شیوه برای یافتن ریشه‌های معادلات، حتی برای معادله‌های بسیار پیچیده، به آسان‌ترین شکل هستند. مهم‌ترین شیوه در هر روش عددی تکرار است. به‌طور کلی، تقریبی از یک مقدار مورد انتظار انتخاب می‌شود و الگوریتمی بکار برده می‌شود که تقریب را بیشتر بهبود می‌بخشد. این گام تا زمانی تکرار می‌شود که تقریب به مقدار تقریباً یکسانی در تکرارهای متوالی منتهی شود. روش‌های عددی به‌ویژه در حل چندجمله‌ای‌های درجه بالا برای یافتن ریشه‌های آن‌ها مفید هستند.

روش‌های عددی زیر برای یافتن ریشه‌های یک معادله موجودند:

۱. روش نیوتن-رافسون^۱،

۲. روش تکرار^۲،

۳. روش دوبخشی^۳،

۴. روش وتری (سکانت)^۴،

۵. روش نابجایی^۵.

هر یک از روش‌های مورد اشاره در بالا به تفصیل به همراه ضعف‌ها و برتری‌ها در بخش‌های بعدی مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرند.

۹-۲- روش نیوتن-رافسون

روش نیوتن-رافسون (که تکرار نیوتن یا روش نیوتن نیز نامیده می‌شود) پُر کاربردترین الگوریتم ریشه‌یابی معادلات غیرخطی یا توابع تک متغیره با مقادیر حقیقی ($f(x) = 0$) است. این روش یک شیوه تکراری^۶ را برای رسیدن به ریشه معادله بکار می‌برد که در آن به صورت قراردادی هر ریشه‌ای که به مقدار ریشه حقیقی نزدیک باشد انتخاب می‌شود.

-
1. Newton-Raphson method
 2. Iteration method
 3. Binary bisection method
 4. Secant method
 5. Regula-Falsi method
 6. Iterative

با نزدیک شدن به ریشه، روش نیوتن-رافسون به صورت مربعی به ریشه معادله همگرا^۱ می‌شود. این روش تنها به یک مقدار حدس اولیه^۲ برای ریشه نیاز دارد. این روش شامل بسط سری تیلور از یک تابع $f(x)$ در مجاورت ریشه مورد انتظار است و فقط چند عبارت اول (معمولاً تا جمله دوم) سری تیلور برای یافتن ریشه واقعی حفظ می‌شوند؛ بنابراین، برش^۳ در جمله دوم تخمین ریشه را به دست می‌دهد.

برای روش نیوتن-رافسون، تابع $f(x)$ را می‌توان با استفاده از بسط تیلور چنین نوشت:

$$f(x_* + h) = f(x_*) + hf'(x_*) + \frac{h^2}{2!}f''(x_*) + \dots = 0, \quad (۱-۹)$$

که $f'(x_*)$ و $f''(x_*)$ مشتقات اول و دوم $f(x)$ نسبت به x و $h = x - x_*$ هستند. چون $h \ll 1$ است، می‌توان از h^2 صرف‌نظر کرد؛ از این رو می‌توان نوشت:

$$f(x_*) + hf'(x_*) = 0, \quad (۲-۹)$$

که نتیجه می‌دهد،

$$h = -\frac{f(x_*)}{f'(x_*)}, \quad (۳-۹)$$

بنابراین،

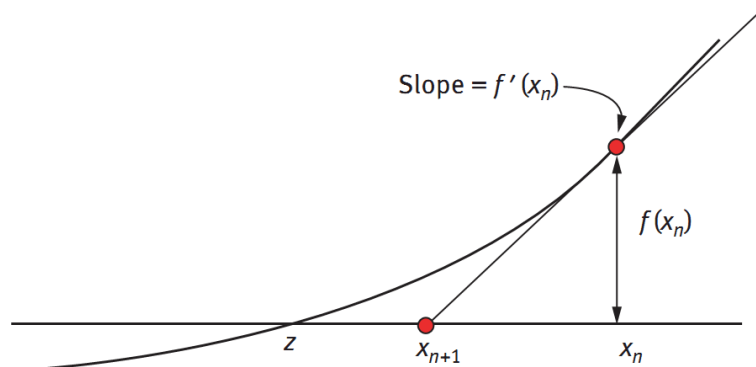
$$x = x_* - \frac{f(x_*)}{f'(x_*)}. \quad (۴-۹)$$

از این رو، تقریب‌های متوالی برای روش نیوتن-رافسون را می‌توان به صورت فرمول کلی زیر نوشت:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (۵-۹)$$

این معادله چیزی نیست جز همان معادله مماس تابع $f(x)$ در $x = x_n$ که با محور x قطع داده شده تا x_{n+1} (اولین ریشه تقریبی) بدست آید. فرض می‌شود که تابع $f(x)$ به نحوی پیوسته است که $f'(x) \neq 0$ است.

-
1. Converge
 2. Initial guess
 3. Truncation



شکل ۹-۱: مماس منحنی در تقریب زدن ریشه.

این روش فرض می‌کند که توابعی که مشتقات پیوسته دارند و در صورت مشاهده از نزدیک شبیه خطوط مستقیم هستند، می‌توانند با مماس بر آن تقریب زده شوند. با فرض آنکه $f(x)$ یک مشتق پیوسته دارد، $f'(x)$ را می‌توان محاسبه نمود.

چون $f'(x) \neq 0$ است، این بدان معنی است که هر نقطه روی منحنی $f(x)$ یک خط مستقیم خواهد بود. تابع در $(x_n, f(x_n))$ را می‌توان با یک خط مستقیم که مماس بر منحنی در آن نقطه است تقریب زد (شکل ۹-۱). شیب خط $f'(x)$ است که از $(x_n, f(x_n))$ می‌گذرد. در نتیجه، معادله خط مماس عبارت است از

$$y - y_1 = m(x - x_1), \quad (۹-۶)$$

$$y - f(x_n) = f'(x_n)(x - x_1). \quad (۹-۷)$$

مماس با محور x در $x = x_{n+1}$ برخورد می‌کند که در آن $y = 0$ است؛ بنابراین

$$0 - f(x_n) = f'(x_n)(x_{n+1} - x_1). \quad (۹-۸)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (۹-۵)$$

که مشابه چیزی است که پیش‌تر به دست آمد. بدین‌سان، اولین تقریب x_n به x_{n+1} بهبود یافته است که بسیار نزدیک‌تر به ریشه Z است. سپس این تقریب را می‌توان برای یافتن تقریب دیگری بکار

بُرد تا به‌طوری‌که ریشه حقیقی (Z) حاصل شود. روش نیوتن-رافسون تا حد زیادی به مقدار حدس اولیه وابسته است، بنابراین مقدار حدس اولیه باید به‌دقت انتخاب شود به شکلی که x_0 به ریشه اصلی Z نزدیک باشد.

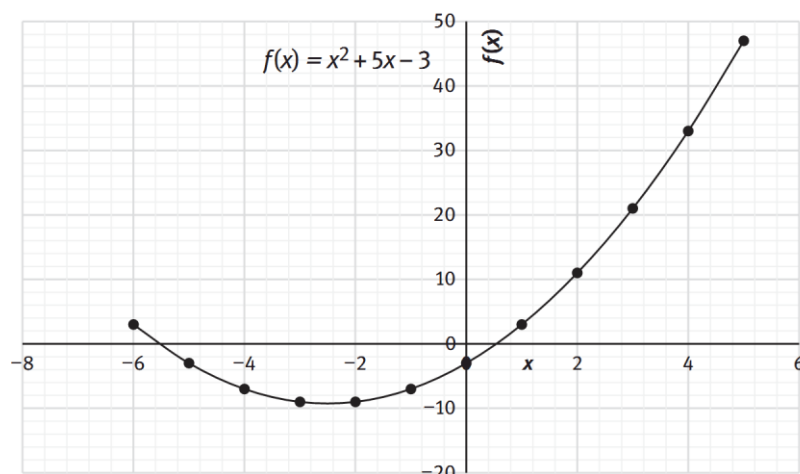
هنگامی که تفاوت بین تکرارهای متوالی به حد کافی کوچک است که رابطه $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon_{abs}$ برقرار باشد، آنگاه x_{n+1} ریشه تقریبی معادله است. همچنین اگر $f(x_{n+1})$ به اندازه کافی کوچک باشد که $|f(x_{n+1})| \approx 0$ باشد، آنگاه x_{n+1} تقریبی از ریشه تابع است.

مثال ۱: با استفاده از روش نیوتن-رافسون، ریشه تقریبی تابع $f(x)$ را بیابید:

$$f(x) = x^2 + 5x - 3 = 0. \quad (9-9)$$

راه‌حل: تابع فوق را می‌توان به‌صورت ترسیمی (شکل ۹-۲) و همچنین به‌صورت عددی حل نمود. ریشه‌ها آن‌هایی هستند که محور x را قطع می‌کنند، به‌طوری‌که $f(x) = 0$ است. مرتبه چندجمله‌ای به تعداد ریشه‌های تابع که اینجا دو است، اشاره می‌کند. به‌صورت ترسیمی، می‌توان نشان داد که یک ریشه در بازه بین $[0, 2]$ و ریشه دیگر در بازه بین $[-6, -4]$ قرار دارد. برای تابع $f(x)$ فوق، مشتق عبارت است از $f'(x) = 2x + 5$.

می‌توان هر دو ریشه را با استفاده از روش نیوتن-رافسون با دو حدس اولیه متفاوت یافت. با انتخاب حدس اولیه $x_0 = 2$ ، نتایج در جدول ۹-۱ جدول‌بندی شده‌اند.



شکل ۹-۲: حل $f(x)$ به صورت ترسیمی.

جدول ۹-۱: روش نیوتن-رافسون برای حل $f(x) = x^2 + 5x - 3 = 0$.

N	x_n	x_{n+1}	$f(x)$	$f'(x)$	ϵ_{abs}
۱	۲	۰/۷۷۷۷۷۷۷۷۸	۱۱	۹	۱/۲۲۲۲۲۲۲۲۲
۲	۰/۷۷۷۷۷۷۷۷۸	۰/۵۴۹۹۰۵۸۳۸	۱/۴۹۳۸۲۷۱۶	۶/۵۵۵۵۵۵۵۵۶	۰/۲۲۷۸۷۱۹۴
۳	۰/۵۴۹۹۰۵۸۳۸	۰/۵۴۱۳۹۳۱۷۸	۰/۵۱۹۲۵۶۲۱	۶/۰۹۹۸۱۱۶۷۶	۰/۰۰۸۵۱۲۶۶
۴	۰/۵۴۱۳۹۳۱۷۸	۰/۵۴۱۳۸۱۲۶۵	۷/۲۴۶۵۴E-۰۵	۶/۰۸۲۷۸۶۳۵۷	۱/۱۹۱۳E-۰۵
۵	۰/۵۴۱۳۸۱۲۶۵	۰/۵۴۱۳۸۱۲۶۵	۱/۴۱۹۲۴E-۱۰	۶/۰۸۲۷۶۲۵۳	۰

همچنانکه از جدول فوق مشخص است $f(x)$ در پنجمین تکرار صفر می‌شود. همچنین در پنجمین تکرار، تفاوت بین $(x_{n+1} - x_n) = 0$ است، در نتیجه یکی از ریشه‌ها مقدار $۰/۵۴۱۳۸۱۲۶۵۱$ است. تفاوت بین دو ریشه کمتر از $۰/۰۰۰۰۰۱$ (ϵ_{abs}) است یا حتی در تکرارهای متوالی صفر می‌شود. به صورت مشابه، هنگامی که حدس دیگری که نزدیک به ریشه دیگر است انتخاب شود ($x_0 = -3$)، ریشه دیگر برابر با $-۵/۵۴۱۳۸۱۲۶۵$ تعیین می‌شود (جدول ۹-۲).

جدول ۹-۲: روش نیوتن-رافسون برای یافتن دومین ریشه با استفاده از مقدار حدس دیگر برای تابع

$$f(x) = x^2 + 5x - 3 = 0$$

N	x _n	x _{n+1}	f(x)	f'(x)	ε _{abs}
۱	-۳	-۱۲	-۹	-۱	۹
۲	-۱۲	-۷/۷۳۶۸۴۲۱۰۵	۸۱	-۱۹	۴/۲۶۳۱۵۷۸۹۵
۳	-۷/۷۳۶۸۴۲۱۰۵	-۶/۰۰۱۵۸۶۸۸۲	۱۸/۱۷۴۵۱۵۲۴	-۱۰/۴۷۳۶۸۴۲۱	۱/۷۳۵۲۵۵۲۲۳
۴	-۶/۰۰۱۵۸۶۸۸۲	-۵/۵۷۱۶۲۳۱۵۵	۳/۰۱۱۱۰۶۹۱	-۷/۰۰۳۱۷۳۷۶۴	۰/۴۲۹۹۶۳۷۲۷
۵	-۵/۵۷۱۶۲۳۱۵۵	-۵/۵۴۱۵۳۰۱۴	۰/۱۸۴۸۶۸۸۰۶	-۶/۱۴۳۲۴۶۳۱	۰/۰۳۰۰۹۳۰۱۵
۶	-۵/۵۴۱۵۳۰۱۴	-۵/۵۴۱۳۸۱۲۶۹	۰/۰۰۰۹۰۵۵۹	-۶/۰۰۸۳۰۶۰۲۷۹	۰/۰۰۰۱۴۸۸۷۱
۷	-۵/۵۴۱۳۸۱۲۶۹	-۵/۵۴۱۳۸۱۲۶۵	۲/۲۱۶۲۵E-۰۸	-۶/۰۰۸۲۷۶۲۵۳۸	۳/۶۴۳۴۹E-۰۹

اگرچه روش نیوتن-رافسون شیوه بسیار خوبی برای تقریب ریشه‌هاست، با این حال محدودیت‌هایی نیز وجود دارند. کاربرد روش نیوتن-رافسون با شکست مواجه می‌شود اگر:

(۱) مقدار (حدس) اولیه تقریب بسیار دور از ریشه حقیقی باشد.

(۲) مشتق تابع اندکی پیچیده باشد. به‌عنوان نمونه

$$f'(x) = -e^x \sin(e^x) \cos(\cos(e^x)) \text{ و } (x) = \sin(\cos(e^x)).$$

در چنین مواردی، روش وتر (سکانت) به‌عنوان یک راهکار نجات‌بخش عمل می‌کند به‌طوری‌که به‌جای یک خط مماس یک وتر استفاده می‌شود.

(۳) همچنین اگر مشتق دوم بسیار بزرگ باشد یا اگر مشتق در x_n نزدیک به صفر باشد ممکن است این روش همگرا نگردد.

(۴) نقاط بیشینه و کمینه محلی یا نقطه عطف حول ریشه وجود داشته باشد.

مثال ۲: تقریبی از $\sqrt{7}$ با ۱۰ رقم اعشار بیابید.

روش حل: $\sqrt{7}$ عددی گنگ است، از این رو توالی ارقام اعشاری هیچ گاه متوقف نخواهد شد. $x = \sqrt{7}$ پاسخ صفر برای معادله $f(x) = x^2 - 7$ در بازه $[2, 3]$ است.

بنابراین، اینجا، با کاربرد روش نیوتن-رافسون با n تقریب، فرمول مورد استفاده عبارتست از

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

با مقدار حدس اولیه $x_0 = 2$ ، نتایج تقریب در جدول ۹-۳ جدول بندی شده اند.

جدول ۹-۳: روش نیوتن-رافسون برای تقریب زدن ریشه ها

N	x_n	x_{n+1}	$f(x)$	$f'(x)$
۱	۲	۲/۷۵	-۳	۴
۲	۲/۷۵	۲/۶۴۷۷۲۷۲۷۳	-۰/۵۶۲۵	۵/۵
۳	۲/۶۴۷۷۲۷۲۷۳	۲/۶۴۵۷۵۲۰۴۸	-۰/۰۴۵۹۷۱۱	۵/۲۹۵۴۵۴۵۴۵
۴	۲/۶۴۵۷۵۲۰۴۸	۲/۶۴۵۷۵۱۳۱۱	۳/۹۰۱۵۱E-۰۶	۵/۲۹۱۵۰۴۰۹۷
۵	۲/۶۴۵۷۵۱۳۱۱	۲/۶۴۵۷۵۱۳۱۱	۵/۵۳۴۶۵E-۱۳	۵/۲۹۱۵۰۲۶۲۲

تقریب درست مقدار $\sqrt{7}$ هنگامی که به صورت تحلیلی به دست آید، نیز مشابه است.

مثال ۳: می توان دمای وارونگی^۱ گاز واندروالس را با استفاده از معادله نشان داده شده بر حسب ضریب ژول-تامسون^۲ به صورت زیر محاسبه نمود

$$\frac{2a}{RT_i} - \frac{3abP}{R^2T_i^2} - b = 0. \quad (10-9)$$

در فشار $P = 10/133 \text{ MPa}$ دمای وارونگی گاز نیتروژن را؛ که برای آن مقادیر $a = 1470 \text{ MPa dm}^6 \text{ mol}^{-2}$ ، $b = 0.392/0 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$ و $R = 0.08314/0 \text{ dm}^3 \text{ MPa K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ هستند؛ محاسبه کنید.

راه حل: بعد از بازنویسی معادله بالا معادله زیر حاصل می شود

$$(bR^2)T_i^2 - (2aR)T_i + 3abP = 0. \quad (11-9)$$

1. Inversion temperature
2. Joule-Thomson coefficient

در نتیجه اینجا، معادله بالا شبیه یک معادله درجه دو است که می‌توان برای آن روش نیوتن-رافسون را به راحتی به کار بُرد جایی که T_i متغیری مانند x است و سایر متغیرها ضرایب هستند (جدول ۹-۴).

جدول ۹-۴: روش نیوتن-رافسون به منظور حل معادله برای دمای وارونگی

N	T_n	T_{n+1}	$f(T)$	$f'(T)$	ϵ_{abs}
۱	۴۰۰	-۱۵۰۷۲۴۶	۰/۳۳۶۲۲۰۹	۰/۰۰۰۱۷۶۸	۱۹۰۷/۲۴۶
۲	-۱۵۰۷۲۴۶	-۵۶۶/۶۶۶	-۹/۷۹۴۵۱۷۰	۰/۰۱۰۴۸۰۱	۹۳۴/۵۸
۳	-۵۶۶/۶۶۶	-۱۲۹/۶۴۰	-۲/۳۶۶۶۸۰۱	۰/۰۰۵۴۱۵۴	۴۳۷/۰۲۶
۴	-۱۲۹/۶۴۰	۴۰/۱۹۶	-۰/۵۱۷۵۱۰۴	۰/۰۰۳۰۴۷۱	۱۶۹/۸۳۶
۵	۴۰/۱۹۶	۷۶/۹۴۶	-۰/۰۷۸۱۵۷۵	۰/۰۰۲۱۲۶۷	۳۶/۷۵
۶	۷۶/۹۴۶	۷۸/۸۴۵	-۰/۰۰۳۶۵۹۵	۰/۰۰۱۹۲۷۵	۱/۸۹۹
۷	۷۸/۸۴۵	۷۸/۸۵۰	-۹/۷۶۶۷۲E-۰۶	۰/۰۰۱۹۱۷۲	۰/۰۰۵

در نتیجه، دمای وارونگی ۷۸/۸ کلین است. به صورت مشابه با انتخاب حدس مقدار اولیه دیگر مقدار دمای وارونگی ۷۸۶/۴ کلین به دست می‌آید زیرا برای هر مقدار P دو مقدار T وجود دارد.

۹-۳- روش تکرار

روش تکرار به نام روش تکرار نقطه ثابت^۱ نیز شناخته می‌شود. این روش یکی از متداول‌ترین و عمومی‌ترین روش‌ها برای یافتن ریشه‌های حقیقی معادله‌های غیرخطی یا توابع است. این روش یک نوع فرآیند باز، ساده و چرخه‌ای برای یافتن ریشه‌های معادلات غیرخطی با تقریب‌های متوالی است. این روش برای یافتن جواب سری‌های حسابی، سری‌های هندسی، سری تیلور و بسیاری از سری‌های نامحدود دیگر استفاده می‌شود.

این روش که با نام روش براکت (کروشه) باز^۲ یا روش محفظه ساده^۳ نیز شناخته می‌شود تا حدودی کندتر است و مانند روش دوبخشی به صورت خطی همگرا می‌شود؛ اما دقت بسیار خوبی ارائه

1. Fixed point iteration method
2. Bracket method
3. Simple enclosure method

می‌دهد. این روش گُند است و در دسته روش‌های باز^۱ قرار می‌گیرد زیرا همگرایی آن قطعی نیست. الگوریتم آن تنها یک مقدار حدس اولیه نیاز دارد و معادله با تقریب مفروض حل می‌شود. این یک روش ریاضی است که راه‌حل‌هایی تقریبی را برای یک مسئله معین ایجاد می‌کند که در آن یک راه‌حل تقریبی از راه‌حل قبلی مشتق می‌شود. تکرارها در هر توالی بر مبنای سطح قبلی اصلاح می‌شوند. روش تکراری در مقایسه با روش‌های دیگر تقریب‌های کاملاً دقیقی ارائه می‌دهد.

به منظور یافتن ریشه معادله غیرخطی $f(x) = 0$ با روش تکرار نقطه ثابت، معادله $f(x) = 0$ در شکل $x = \varphi(x)$ بازنویسی می‌شود. ممکن است این بازنویسی به شکل‌های مختلفی امکان‌پذیر باشد، به هر حال شکل ساده‌تر که به پاسخ مناسب منتهی شود ارجحیت دارد، یعنی، با بازنویسی تابع اصلی تابع جدیدی طراحی می‌شود که در آن متغیرهای بالاترین مرتبه به شکل متغیر وابسته به x تبدیل می‌شوند که در آن شرایط زیر صادق باشند

$$f(a) \cdot f(b) < 0$$

$$\forall x \in (a, b) \quad |\varphi'(x)| < 1 \quad (9-12)$$

به‌طوری‌که a و b نقاط انتهایی بازه‌هایی هستند که ممکن است ریشه معادله در آن قرار گیرد. بدین معنی که x نیز در بازه $[a, b]$ که ریشه معادله در آن متصور است، قرار گیرد و قدر مطلق مشتق تابع جدید کوچک‌تر از یک باشد.

روش تکرار، حول ریشه در بازه‌ای که ممکن است کوچک‌تر از بازه‌ای باشد که در آن $|\varphi'(x)| < 1$ است معتبر می‌باشد و همگرا می‌شود. همگرایی تنها برای یک محدوده خاص از x روی می‌دهد. اگر مقدار حدس اولیه خارج از این محدوده باشد، ریشه همگرا نخواهد شد. وقتی تفاوت بین دو تکرار متوالی به اندازه کافی کم باشد، تکرارها متوقف می‌شوند، یعنی، هنگامی که $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon_{abs}$ گردد یا تا وقتی که $|f(x_{n+1}) - f(x_n)| \approx 0$ گردد.

مثال ۴: ریشه‌ای برای معادله $f(x)$ با استفاده از روش تکرار بیابید:

$$f(x) = x^3 - x - 1 = 0. \quad (9-13)$$

راه‌حل: چون هیچ حدس اولیه‌ای ارائه نشده است، اعداد تصادفی در تابع $f(x)$ قرار داده می‌شود به طریقی که $f(a) \cdot f(b) < 0$ باشد،

$$f(x) = x^3 - x - 1,$$

$$f(0) = (0)^3 - 0 - 1 = -1,$$

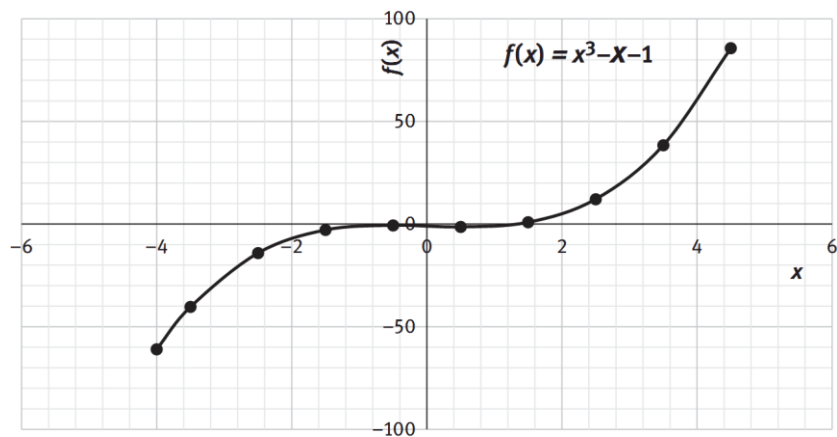
$$f(2) = (2)^3 - 2 - 1 = 5,$$

$$f(0) \cdot f(2) = -1 < 0.$$

در نتیجه ریشه بین ۰ تا ۲ قرار می‌گیرد (شکل ۹-۳). اینجا x^3 بازنویسی می‌شود تا تابع جدیدی در شکل $x = \varphi(x)$ به صورت زیر به دست آید.

$$x^3 = 1 + x,$$

$$\varphi(x) = x = (1 + x)^{1/3}. \quad (9-14)$$



شکل ۹-۳: روش تکرار برای $f(x) = x^3 - x - 1$.

برای روش تکرار تنها یک حدس منفرد مورد نیاز است که به ریشه اصلی نزدیک باشد. هر یک از مقادیر حدس را می‌توان از بازه‌ای که ریشه در آن قرار دارد انتخاب کرد. نتایج تا وقتی که تابع صفر می‌شود (در حد خطای قابل قبول به صفر نزدیک می‌شود) در (جدول ۹-۵) جدول‌بندی شده‌اند.

جدول ۹-۵: روش تکرار برای $f(x) = x^2 - x - 1$.

N	x_n	x_{n+1}	ϵ_{abs}
۱	۱	۱/۲۵۹۹۲۱۰۵	۰/۲۵۹۹۲۱۰۵
۲	۱/۲۵۹۹۲۱۰۵	۱/۳۱۲۲۹۳۸۳۷	۰/۰۵۲۳۷۲۷۸۷
۳	۱/۳۱۲۲۹۳۸۳۷	۱/۳۲۲۳۵۳۸۱۹	۰/۰۱۰۰۵۹۹۸۲
۴	۱/۳۲۲۳۵۳۸۱۹	۱/۳۲۴۲۶۸۷۴۵	۰/۰۰۱۹۱۴۹۲۵
۵	۱/۳۲۴۲۶۸۷۴۵	۱/۳۲۴۶۳۲۶۲۵	۰/۰۰۰۳۶۳۸۸۱
۶	۱/۳۲۴۶۳۲۶۲۵	۱/۳۲۴۷۰۱۷۴۹	۶/۹۱۲۳۳E-۰۵
۷	۱/۳۲۴۷۰۱۷۴۹	۱/۳۲۴۷۱۴۸۷۸	۷۳۱۲۹۹E-۰۵
۸	۱/۳۲۴۷۱۴۸۷۸	۱/۳۲۴۷۱۷۳۷۲	۲/۴۹۳۹۹E-۰۶

همچنان که از جدول قابل ملاحظه است، مقدار ریشه برابر با ۱/۳۲۴۷۱ تعیین می‌شود که تا رقم پنجم اعشار در ۸ تکرار دقیق است.

مثال ۵: با استفاده از معادله (۹-۱۰) مورد استفاده در مثال ۳، دمای وارونگی را با استفاده از روش تکرار در $P = ۲۰۰ \text{ atm}$ برای گاز نیتروژن که برای آن $a = ۱۴۱ \text{ kPa dm}^6 \text{ mol}^{-1}$ و $b = ۰.۰۳۹۲ \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$ هستند، محاسبه کنید.

راه حل: با بازنویسی معادله (۹-۱۰)، نتیجه می‌شود

$$(bR^3)T_i^2 - (RaR)T_i + 3abP = 0. \quad (۹-۱۱)$$

با استفاده از روش تکرار و حدس مقدار اولیه ۲۰۰ کلوین نتیجه می‌شود (جدول ۹-۶).

جدول ۹-۶: روش تکرار برای یافتن دمای وارونگی.

N	T_n	T_{n+1}	$\Delta T = T_{n+1} - T_n$
۱	۲۰۰	۴۱۴/۵۲	۲۱۳/۵۲
۲	۴۱۴/۵۲	۵۹۷/۸۷	۱۸۳/۳۴
۳	۵۹۷/۸۷	۷۱۸/۴۰	۱۲۰/۵۲
۴	۷۱۸/۴۰	۷۸۷/۶۴	۶۹/۲۴
۵	۷۸۷/۶۴	۸۲۴/۸۰	۳۷/۱۵
۶	۸۲۴/۸۰	۸۴۴/۰۷	۱۹/۲۶
۷	۸۴۴/۰۷	۸۵۳/۸۹	۹/۸۱
۸	۸۵۳/۸۹	۸۵۸/۸۵	۴/۹۵

N	T _n	T _{n+1}	ΔT=T _{n+1} -T _n
۹	۸۵۸/۸۵	۸۶۱/۳۴	۲/۴۹
۱۰	۸۶۱/۳۴	۸۶۲/۵۹	۱/۲۵۲
۱۱	۸۶۲/۵۹	۸۶۳/۲۲	۰/۶۲۷۸
۱۲	۸۶۳/۲۲	۸۶۳/۵۴	۰/۳۱۴۶
۱۳	۸۶۳/۵۴	۸۶۳/۶۹	۰/۱۵۷۶
۱۴	۸۶۳/۶۹	۸۶۳/۷۷	۰/۰۷۸۹۴
۱۵	۸۶۳/۷۷	۸۶۳/۸۱	۰/۰۳۹۵۳
۱۶	۸۶۳/۸۱	۸۶۳/۸۳	۰/۰۱۹۸۰

اینجا با ۱۶ تکرار، همگرایی نتایج تا یک رقم اعشار به دست آمده است و دمای وارونگی ۸۶۳/۸ کلوین تعیین شده است.

مثال ۶: با استفاده از روش تکرار، دمایی را که در آن اورتو-تولوئیدین فشار بخاری برابر با ۴۰۰ میلی‌متر جیوه دارد را تعیین کنید در صورتی که رابطه تجربی بین فشار (P) و دما (T) به صورت زیر ارائه شود

$$\log P = ۸۲۹۶/۲۳ - \frac{۳/۳۴۸۰}{T} - ۰.۸۷۵ \times \log T. \quad (۱۵-۹)$$

راه حل: در ۴۰۰ میلی‌متر جیوه، معادله فوق تنها تابعی از دما خواهد بود ($\log ۴۰۰ = ۲/۶۰۲۰۵۹۹۹$).

$$۲۱/۲۲۷۵۴ - \frac{3/3480}{T} - 5/۰.۸۱ \times \log T = ۰, \quad (۱۶-۹)$$

اگر معادله (۹-۱۶) به صورت تابعی از T بازنویسی شود آنگاه

$$F(T) = \frac{3480/3}{۲۲۷۵۴/۲۱ - ۰.۸۱/۵ \times \log T} = ۰. \quad (۱۷-۹)$$

همچنان که از جدول ۹-۷ مشهود است، ریشه در هشتمین تکرار برای دستیابی به مقدار $T = ۴۵۶/۹K$ همگرا می‌گردد.

جدول ۹-۷: روش تکرار برای یافتن دما.

N	T	F
۱	۲۰۰	۳۶۴/۹۶
۲	۳۶۴/۹۶	۴۲۹/۰۴
۳	۴۲۹/۰۴	۴۴۸/۷۸
۴	۴۴۸/۷۸	۴۵۴/۶۰
۵	۴۵۴/۶۰	۴۵۶/۳۰
۶	۴۵۶/۳۰	۴۵۶/۷۹
۷	۴۵۶/۷۹	۴۵۶/۹۳
۸	۴۵۶/۹۳	۴۵۶/۹۸

بنابراین در ۴۵۶/۹ کلوین، اورتو-تولوئیدین فشار بخاری برابر با ۴۰۰ میلی‌متر جیوه دارد.

مثال ۷: با فرض آنکه یک هسته (A) دچار واپاشی رادیواکتیو می‌شود و یک هسته دختر تشکیل می‌دهد (B) که آن هم به‌صورت زیر شروع به واپاشی می‌کند:



که در آن λ_A و λ_B به ترتیب ثابت‌های فروپاشی هسته‌های A و B هستند. نیمه‌عمر A و B به ترتیب ۸ روز و ۲ روز تعیین شده‌اند. تعداد ذرات آغازین $A(N_A^0)$ و $B(N_B^0)$ به ترتیب 10^7 و صفر هستند. تغییرات B با زمان توسط رابطه زیر ارائه می‌شود:

$$N_B = \left(\frac{\lambda_A N_A^0}{\lambda_B - \lambda_A} \right) (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}). \quad (۹-۱۹)$$

زمانی را که طی آن تعداد ذرات B برابر با 10^9 است با استفاده از روش نیوتن-رافسون بیابید.

راه‌حل: چون نیمه‌عمر و ثابت فروپاشی توسط رابطه زیر با هم مربوط‌اند. (شکل ۹-۴)

$$\tau = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (۹-۲۰)$$

مقادیر λ_A و λ_B به ترتیب $0.866434 \text{ day}^{-1}$ و 346574 day^{-1} محاسبه می‌شوند. جایگذاری همه مقادیر در رابطه داده‌شده،

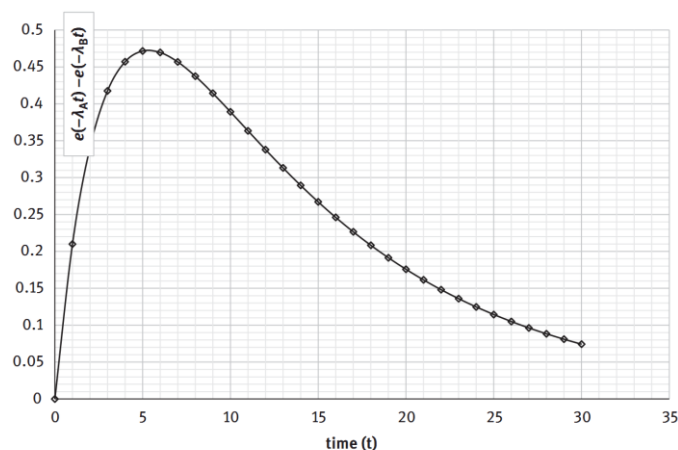
$$10^{19} = \left(\frac{0.866434 / 0 \times 10^{20}}{346574 / 0 - 0.866434 / 0} \right) (e^{-\lambda_A \cdot t} - e^{-\lambda_B \cdot t}), \quad (21-9)$$

و بازنویسی نتیجه می‌دهد،

$$e^{-\lambda_A \cdot t} - e^{-\lambda_B \cdot t} = 30000, \quad (22-9)$$

که ضمن بازنویسی تابعی برحسب t به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$f(t) = e^{-\lambda_A \cdot t} - e^{-\lambda_B \cdot t} - 30000 = 0. \quad (23-9)$$



شکل ۹-۴: فروپاشی رادیواکتیو.

جواب معادله بالا را می‌توان با استفاده از روش نیوتن-رافسون یافت که در آن مشتق توسط رابطه

زیر محاسبه می‌شود:

$$f'(t) = -\lambda_A e^{-\lambda_A \cdot t} + \lambda_B e^{-\lambda_B \cdot t} = 0. \quad (24-9)$$

ترسیم تابع $e^{-\lambda_A \cdot t} - e^{-\lambda_B \cdot t}$ برحسب زمان (t) نشان می‌دهد که دو مقدار زمان t وجود دارد که در آن تابع $e^{-\lambda_A \cdot t} - e^{-\lambda_B \cdot t}$ مقداری برابر با ۳۰۰۰۰ دارد که این جواب‌ها ۱۳/۵ و ۱۷/۶ روز هستند (شکل ۹-۴) که این نتایج با روش نیوتن-رافسون نیز تأیید می‌شوند (جدول ۹-۸ و جدول ۹-۹).

جدول ۹-۸: روش نیوتن-رافسون با استفاده از یک مقدار حدس اولیه ($t = 17$).

N	t	t'	f(t)	f'(t)
۱	۱۷	۱۳/۱۱	-۰/۰۷۳۵۱۱۱۱۵	-۰/۰۱۸۹۰۵۸۰۸
۲	۱۳/۱۱	۱۳/۵۴	۰/۰۱۰۴۵۷۹۰۹	-۰/۰۲۴۱۳۶۶۵۸
۳	۱۳/۵۴	۱۳/۵۴	۰/۰۰۰۱۰۹۳۹۸	-۰/۰۲۳۶۲۴۹۵۲

جدول ۹-۹: روش نیوتن-رافسون با استفاده از یک مقدار حدس اولیه ($t = 3$).

N	t	t'	f(t)	f'(t)
۱	۳	۰/۸۹۰	۰/۱۱۷۵۵۲۴۵۱	۰/۰۵۵۷۲۱۰۶۸
۲	۰/۸۹	۱/۵۱۴	-۰/۱۰۸۷۳۹۰۰۷	۰/۱۷۴۳۴۶۸۰۴
۳	۱/۵۱	۱/۶۲۷	-۰/۰۱۴۶۲۹۱۰۹	۰/۱۲۹۰۸۲۷۱۴
۴	۱/۶۲	۱/۶۳	-۰/۰۰۰۴۱۰۰۳۴	۰/۱۲۱۹۱۲۱۹۱
۵	۱/۶۳	۱/۶۳	-۳/۴۹۴۶E-۰۷	۰/۱۲۱۷۰۴۴۳

۹-۴- روش دوبخشی

روش دوبخشی (که روش نصف کردن بازه^۱ یا تصنیف نیز نامیده می‌شود) یک الگوریتم ساده و توانمند ریشه‌یابی است که یک بازه را؛ که انتظار می‌رود ریشه‌ای در آن قرار داشته باشد؛ به صورت مکرر به دو بخش تقسیم می‌کند تا با تقریب قابل‌قبولی به ریشه نزدیک شود؛ بنابراین، این روش همچنین محدودسازی (محاصره)^۲ هم نامیده می‌شود. این روش مستلزم داشتن آگاهی اولیه از یک بازه تقریبی است که ریشه حقیقی در آن بازه قرار می‌گیرد. این روش بر اساس قضیه مقدار میانی^۳ (که قضیه بولزانو^۴ نیز نامیده می‌شود) بنا نهاده شده است که بر اساس آن اگر $f(x)$ یک تابع پیوسته در بازه a و b باشد $f(a)f(b) < 0$ به نحوی که $f(a)f(b) < 0$ گردد، آنگاه قطعاً ریشه‌ای وجود دارد که در بازه بین a و b قرار می‌گیرد.

با فرض آنکه یک تابع $f(x)$ وجود دارد ($f(x)$ یک معادله جبری یا متعالی (غیر جبری) است) که پیوسته است و در بازه a و b ریشه‌ای حقیقی دارد، به طوری که $f(a)f(b) < 0$ ، آنگاه در محل ریشه، $f(x) = 0$ است (که در آن x ریشه معادله است)؛ که به آن صفر تابع $f(x)$ نیز می‌گویند. در این الگوریتم بازه $[a, b]$ به دو نیم تقسیم می‌شود (دوبخشی) و سپس زیر بازه شامل c ؛ که ریشه در آن قرار دارد؛ انتخاب می‌شود. این بازه به منظور یافتن زیر بازه شامل c به صورت زیر نصف می‌شود

$$c = \frac{a+b}{2}. \quad (۹-۲۵)$$

به طوری که $c \in [a, b]$ است.

اکنون مقدار $f(c)$ محاسبه می‌شود:

(۱) اگر $f(c) = 0$ ، آنگاه c ریشه معادله است، در غیر این صورت

(۲) اگر $f(a)f(c) < 0$ ، آنگاه ریشه بین a و c قرار دارد، بنابراین a و c به بازه جدید تبدیل می‌شوند، بنابراین $b = c$ و $a = a$ خواهد بود. دوباره، زیر بازه شامل c با استفاده از بازه‌های جدید تعیین می‌گردد.

(۳) اگر $f(b)f(c) < 0$ ، آنگاه ریشه بین b و c قرار دارد، بنابراین b و c به بازه جدید تبدیل می‌شوند، $b = b$ و $a = c$ ، و c مجدد محاسبه می‌گردد.

این روش به طور مکرر بازه‌های جدید را بر اساس علائم تابع $f(x)$ نصف می‌کند. این روش تا زمانی ادامه می‌یابد که مقدار تابع صفر شود یا بازه‌ها به اندازه کافی کوچک شوند. معیارهای همگرایی

-
1. Interval halving method
 2. Bracketing
 3. Intermediate value theorem
 4. Bolzano's theorem

این روش مانند روش نیوتن رافسون و روش تکرار است یعنی هنگامی که $f(a)$ یا $f(b)$ یا $f(c)$ تقریباً برابر صفر شوند یا $|a - b| < \varepsilon$ باشد، تکرارها متوقف می‌شوند.

مزیت روش دوبخشی آن است که همیشه هرچقدر هم که طول بکشد همگرا می‌شود، اما ممکن است نتواند هر بار بیش از یک ریشه را در یک بازه مشخص بیابد. همچنین این روش در مقایسه با سایر الگوریتم‌ها به کندی همگرا می‌شود. علاوه بر این، بازه‌ای که مفروض است ریشه در آن وجود دارد باید معین و قطعی باشد، در غیر این صورت حتی اگر بازه درست نباشد، روش همگرا می‌شود تا مقداری از ریشه را ارائه دهد که ممکن است نادرست باشد.

مثال ۸: ریشه معادله $f(x)$ را با استفاده از روش دوبخشی با شرط $\varepsilon_{abs} = 0.01$ در بازه $[1, 2]$ بیابید.

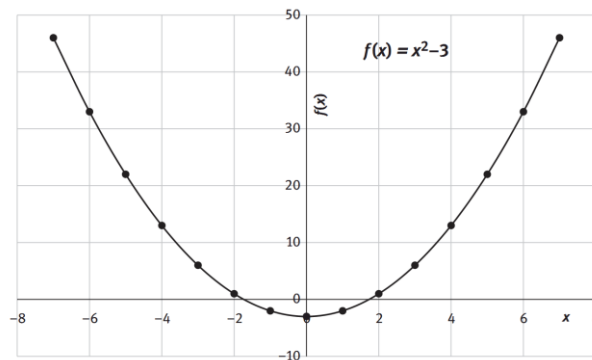
$$f(x) = x^2 - 3. \quad (9-26)$$

راه‌حل: در اینجا، بازه تعیین شده $[1, 2]$ است، یعنی $a = 1, b = 2$. به صورت ترسیمی امکان نمایش تابع به صورت شکل ۹-۵ وجود دارد

$$f(1) = -2, \quad f(2) = 1$$

$$c = (1 + 2)/2 = 1.5$$

$f(2) = 1$ است، چون $f(a)f(c) < 0$ حالا مقدار $a = c$ است درحالی که $b = c$ خواهد بود.



شکل ۹-۵: روش دوبخشی برای $f(x) = x^2 - 3$

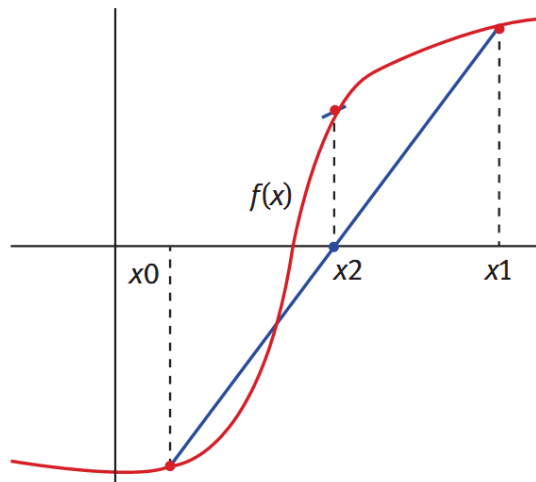
در نتیجه، با جدول‌بندی محاسبات در جدول ۹-۱۰ بنابراین، در شانزدهمین تکرار، مقدار ریشه به 1.7320 ؛ که تا چهار رقم اعشار دقیق است؛ همگرا می‌شود.

جدول ۹-۱۰: روش دوششی.

N	a	b	f(a)	f(b)	c=(a+b)/۲	f(c)	Update
۱	۱	۲	-۲	۱	۱.۵	-۰.۷۵	a = c
۲	۱.۵	۲	-۰.۷۵	۱	۱.۷۵	۰.۰۶۲	b = c
۳	۱.۵	۱.۷۵	-۰.۷۵	۰.۰۶۲۵	۱.۶۲۵	-۰.۳۵۹	a = c
۴	۱.۶۲۵	۱.۷۵	-۰.۳۵۹۴	۰.۰۶۲۵	۱.۶۸۷۵	-۰.۱۵۲۳	a = c
۵	۱.۶۸۷۵	۱.۷۵	-۰.۱۵۲۳	۰.۰۶۲۵	۱.۷۱۸۸	-۰.۰۴۵۷	a = c
۶	۱.۷۱۸۸	۱.۷۵	-۰.۰۴۵۷	۰.۰۶۲۵	۱.۷۳۴۴	۰.۰۰۸۱	b = c
۷	۱.۷۱۸۸	۱.۷۳۴۴	-۰.۰۴۵۷	۰.۰۰۸۱	۱.۷۲۶۶	-۰.۰۱۸۹	a = c
۸	۱.۷۲۶۶	۱.۷۳۴۴	-۰.۰۱۸۸۵۲۴۴	۰.۰۰۸۱۴۳۲۶	۱.۷۳۰۵	-۰.۰۰۵۳۶۹۷۵	a = c
۹	۱.۷۳۰۵	۱.۷۳۴۴	-۰.۰۰۵۳۶۹۷۵	۰.۰۰۸۱۴۳۲۶	۱.۷۳۲۴۵	۰.۰۰۱۳۸۳۰۰۳	a = c
۱۰	۱.۷۳۰۵	۱.۷۳۲۴۵	-۰.۰۰۵۳۶۹۷۵	۰.۰۰۱۳۸۳۰۰۳	۱.۷۳۱۴۱۵	-۰.۰۰۱۹۹۴۳۲۴	b = c
۱۱	۱.۷۳۱۴۱۵	۱.۷۳۲۴۵	-۰.۰۰۱۹۹۴۳۲۴	۰.۰۰۱۳۸۳۰۰۳	۱.۷۳۱۹۶۲۵	-۰.۰۰۰۳۰۵۸۹۹	a = c
۱۲	۱.۷۳۱۹۶۲۵	۱.۷۳۲۴۵	-۰.۰۰۰۳۰۵۸۹۹	۰.۰۰۱۳۸۳۰۰۳	۱.۷۳۲۲۰۶۲۵	۰.۰۰۰۵۳۸۴۹۳	a = c
۱۳	۱.۷۳۱۹۶۲۵	۱.۷۳۲۲۰۶۲۵	-۰.۰۰۰۳۰۵۸۹۹	۰.۰۰۰۵۳۸۴۹۳	۱.۷۳۲۰۸۴۳۷۵	۰.۰۰۰۱۱۶۲۸۲	b = c
۱۴	۱.۷۳۱۹۶۲۵	۱.۷۳۲۰۸۴۳۸	-۰.۰۰۰۳۰۵۸۹۹	۰.۰۰۰۱۱۶۲۹۹	۱.۷۳۲۰۲۳۴۴	-۹/۴۸۰۳۳E-۰۵	a = c
۱۵	۱.۷۳۲۰۲۳۴۴	۱.۷۳۲۰۸۴۳۸	-۹/۴۸۰۳۳E-۰۵	۰.۰۰۰۱۱۶۲۹۹	۱.۷۳۲۰۵۳۹۱	۱/۰۷۴۷E-۰۵	b = c
۱۶	۱.۷۳۲۰۲۳۴۴	۱.۷۳۲۰۵۳۹۱	-۹/۴۸۰۳۳E-۰۵	۱/۰۷۴۷E-۰۵	۱.۷۳۲۰۲۸۶۷۵	-۴/۲۰۲۸۳E-۰۵	b = c

۹-۵- روش وتر

همانطور که از نام این روش پیداست، وتر به خطی اشاره می‌کند که از دو نقطه منحنی می‌گذرد. این روش الگوریتمی برای یافتن ریشه‌های یک تابع با مقادیر اسکالر از یک متغیر منفرد x است وقتی که هیچ اطلاعاتی از مشتق در دسترس نیست. روش وتر الگوریتمی است که برای یافتن ریشه‌های توابع غیرخطی استفاده می‌شود. فرض کنید x_1 و x_2 دو مقدار حدس اولیه برای ریشه تابع $f(x) = 0$ باشند، آنگاه $f(x_1)$ و $f(x_2)$ به ترتیب مقادیر تابع مربوط به آن‌ها هستند. یک خط بین دو مقدار حدس اولیه تقریبی ترسیم می‌شود و نقطه‌ای که با محور x تلاقی می‌کند (شکل ۹-۶) ریشه تقریبی تابع $f(x)$ بر اساس مقدار حدس‌های اولیه تقریبی $(x_1$ و $x_2)$ خواهد بود. روش وتر فرض می‌کند که معادله یا تابع در ناحیه مورد نظر تقریباً خطی است.



شکل ۹-۶: روش وتر (سکانت).

بنابراین، شیب m را می‌توان چنین نوشت

$$m = \frac{y - f(x_1)}{x - x_1} = \frac{f(x_1) - f(x_2)}{x_1 - x_2}, \quad (9-27)$$

بنابراین، در شکل بالا، می‌توان دید که خط بین دو مقدار حدس اولیه $(x_1$ و $x_2)$ ، محور x را در x_3 قطع می‌کند، بنابراین در اینجا، مقدار $0 = f(x_3) = y$ (ریشه مقدار متغیری است که در آن تابع صفر می‌شود)؛ در نتیجه،

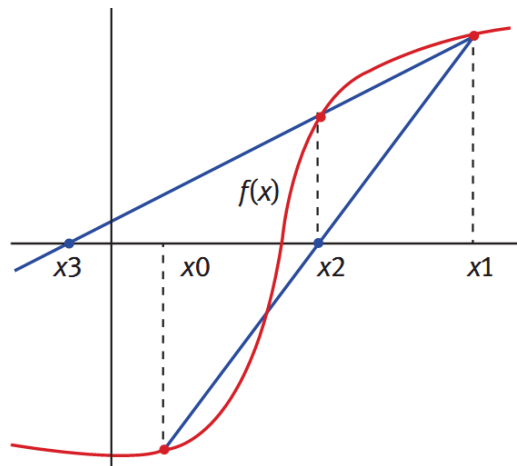
$$m = \frac{0 - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \quad (28-9)$$

$$-f(x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x_2 - x_1), \quad (29-9)$$

که پس از بازنویسی نتیجه می‌دهد،

$$x_2 = x_1 - f(x_1) \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)}, \quad (30-9)$$

بنابراین، x_2 ریشه تقریبی است ولی ریشه اصلی نیست. ریشه‌ای برای تابع $f(x)$ تقریب زده می‌شود که در واقع یک ریشه نیست ولی کاملاً به ریشه اصلی نزدیک است.



شکل ۹-۷: روش وتر (سکانت).

برای تکرار همین فرایند، وتر جدیدی رسم می‌گردد (شکل ۹-۷). چون x_2 از x_0 به ریشه اصلی نزدیک‌تر است (و نیز چون $f(x_1)f(x_2) < 0$ است)، وتر جدید در بازه‌های جدید که $[x_1, f(x_1)]$ و $[x_2, f(x_2)]$ هستند، ترسیم می‌گردد به‌طوری که x_3 نقطه جدید تقاطع با محور x است. با استفاده از فرایند مشابه نمونه بالا، می‌توان نوشت.

$$x_3 = x_2 - f(x_2) \frac{x_2 - x_1}{f(x_2) - f(x_1)}, \quad (31-9)$$

این چرخه تا به‌طوری که تفاوت بین مقادیر متوالی در رابطه $|x_{n-1} - x_{n-2}| < \varepsilon_{abs}$ صدق کند، ادامه خواهد یافت.

بنابراین، عبارت عمومی برای روش وتری (سکانت) را می‌توان چنین نوشت:

$$x_n = x_{n-1} - f(x_{n-1}) \frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}, \quad (32-9)$$

در روش فوق، از تکرارها برای نزدیک کردن دو مقدار حدس اولیه به ریشه اصلی استفاده می‌شود. مهم‌ترین نکته‌ای که باید به خاطر سپرد این است که مقدار حدس اولیه باید نزدیک به ریشه اصلی باشد، در غیر این صورت روش وتری همگرا نخواهد شد. ممکن است راه مناسبی برای فهمیدن اینکه مقدار حدس اولیه به چه میزان به ریشه اصلی نزدیک است وجود نداشته باشد، اما اگر تابع $f(x)$ قابل مشتق‌گیری باشد و در آن بازه $f'(x) = 0$ باشد، آنگاه روش وتری همگرا خواهد شد. هر چند ممکن است این روش سریع‌تر باشد ولی در مقابل به دلیل عدم محدودسازی جستجو در بازه مقادیری که ریشه در آن قرار ندارد، همگرا نشدن را نیز به همراه دارد.

در مقایسه با روش نیوتن-رافسون و روش تکرار، روش دوبخشی و روش وتری دو مقدار حدس اولیه (بازه‌ای که ریشه در آن قرار می‌گیرد) را استفاده می‌کنند. در مقایسه با روش نیوتن-رافسون که در آن $f(x)$ و $f'(x)$ هر دو محاسبه می‌شوند، روش وتری باید سریع‌تر باشد زیرا تنها یک مقدار $f(x)$ را محاسبه می‌کند، اما در واقعیت روش نیوتن-رافسون در مقایسه با روش وتری (سکانت) سریع‌تر است زیرا همچنان که هر مرحله تکرار می‌شود $f(x)$ و $f'(x)$ به‌صورت هم‌زمان محاسبه می‌شوند. روش وتری (سکانت) ممکن است لزوماً همیشه همگرا نگردد.

مثال ۹: با استفاده از روش وتری (سکانت)، ریشه معادله زیر را تا سه رقم اعشار محاسبه کنید

$$f(x) = x^3 + x - 1 = 0, \quad (13-9)$$

راه‌حل: با استفاده از روش تعیین بازه مثال ۴، ریشه بین ۰ و ۱ قرار می‌گیرد، بنابراین با استفاده از فرمول (۳۲-۹)، اولین تکرار با $N = 1$ عبارت است از

$$x_n = x_{n-1} - f(x_{n-1}) \frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}, \quad (32-9)$$

$$x_1 = 1 - \left(1 \times \frac{1-0}{1-(-1)} \right) = 0.5.$$

سایر نتایج باقیمانده در جدول ۹-۱۱ جدول‌بندی شده‌اند.

جدول ۹-۱۱: روش وتری برای حل $f(x) = x^3 + x - 1$.

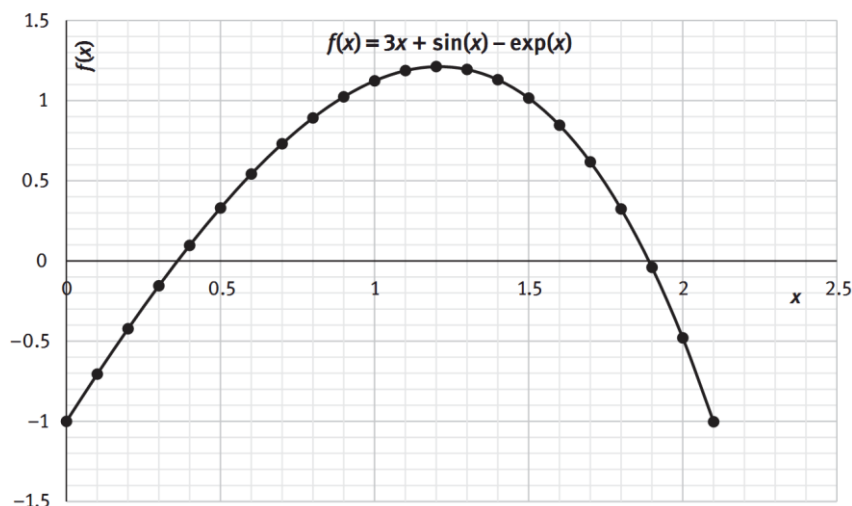
N	x_{n-2}	x_{n-1}	$f(x_{n-2})$	$f(x_{n-1})$	x_n
۱	۰	۱	-۱	۱	۰/۵
۲	۱	۰/۵	۱	-۰/۳۷۵	۰/۶۳۶۳۶۳۶۳۶
۳	۰/۵	۰/۶۳۶۳۶۳۶۳۶	-۰/۳۷۵	-۰/۱۰۵۹۳۵۳۸۷	۰/۶۹۰۰۵۲۳۵۶
۴	۰/۶۳۶۳۶۳۶۳۶	۰/۶۹۰۰۵۲۳۵۶	-۰/۱۰۵۹۳۵۳۸۷	۰/۰۱۸۶۳۶۱۴۲	۰/۶۸۲۰۲۰۴۲۰
۵	۰/۶۹۰۰۵۲۳۵۶	۰/۶۸۲۰۲۰۴۲۰	۰/۰۱۸۶۳۶۱۴۲	-۰/۰۰۰۷۳۶۵۱۸	۰/۶۸۲۳۲۵۷۸۱
۶	۰/۶۸۲۰۲۰۴۲۰	۰/۶۸۲۳۲۵۷۸۱	-۰/۰۰۰۷۳۶۵۱۸	-۴/۸۴۷۱۵E-۰۶	۰/۶۸۲۳۲۷۸۰۴
۷	۰/۶۸۲۳۲۵۷۸۱	۰/۶۸۲۳۲۷۸۰۴	-۴/۸۴۷۱۵E-۰۶	۷۲۷۲۶۷E-۰۹	۰/۶۸۲۳۲۷۸۰۴

مقدار ریشه $۰/۶۸۲۳۲۷۸$ تعیین می‌شود که نه تنها تا سه رقم بلکه تا پنج رقم اعشار دقیق است. در هفتمین تکرار، مشاهده می‌شود که $|x_n - x_{n-1}| < 10^{-6}$ که کم‌تر از حد آستانه خطای از پیش تعریف شده است.

مثال ۱۰: ریشه معادله غیرخطی $e^x = 3x + \sin x$ را بیابید.

راه حل: ضمن بررسی ترسیمی (شکل ۹-۸)، هر دو ریشه بین $[۰, ۲]$ قرار می‌گیرند. پس با استفاده از فرمول وتری به شکل زیر

$$x_n = x_{n-1} - f(x_{n-1}) \frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}. \quad (۹-۳۲)$$



شکل ۹-۸: روش وتری (سکانت).

نتایج در جدول ۹-۱۲ جدول بندی می شوند:

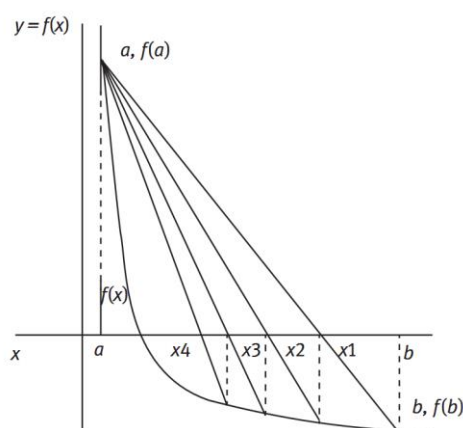
جدول ۹-۱۲: روش وتری برای حل $f(x) = 3x + \sin(x) - \exp(x)$.

N	x_{n-2}	x_{n-1}	$f(x_{n-2})$	$f(x_{n-1})$	x_n
۱	۰	۱	-۱	۱/۱۲۳۱۸۹۱۵۶	۰/۴۷۰۹۸۹۵۹۵
۲	۱	۰/۴۷۰۹۸۹۵۹۵	۱/۱۲۳۱۸۹۱۵۶	۰/۲۶۵۱۵۸۸۱۶	۰/۳۰۷۵۰۸۴۶۱
۳	۰/۴۷۰۹۸۹۵۹۵	۰/۳۰۷۵۰۸۴۶۱	۰/۲۶۵۱۵۸۸۱۶	-۰/۱۳۴۸۲۲۰۱۷	۰/۳۶۲۶۱۳۲۴۲
۴	۰/۳۰۷۵۰۸۴۶۱	۰/۳۶۲۶۱۳۲۴۲	-۰/۱۳۴۸۲۲۰۱۷	۰/۰۰۵۴۷۸۵۲۹	۰/۳۶۰۴۶۱۴۸۲
۵	۰/۳۶۲۶۱۳۲۴۲	۰/۳۶۰۴۶۱۴۸۲	۰/۰۰۵۴۷۸۵۲۹	۹/۹۵۱۷۷E-۰۵	۰/۳۶۰۴۲۱۶۷۲
۶	۰/۳۶۰۴۶۱۴۸۲	۰/۳۶۰۴۲۱۶۷۲	۹/۹۵۱۷۷E-۰۵	-۷/۸۰۱۴۲E-۰۸	۰/۳۶۰۴۲۱۷۰۳

بنابراین در اینجا، پس از شش تکرار، مقدار ریشه ۰/۳۶۰۴ تعیین می شود که تا چهار رقم اعشار دقیق است. تکرارها را می توان تا رسیدن به معیار همگرایی که $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon_{step}$ است، ادامه داد، بدین معنی که تفاوت بین تکرارهای متوالی به اندازه کافی کوچک باشد. اگر مخرج کسر در معادله بالا صفر باشد، تقسیم بر صفر تکرار را با شکست مواجه می کند. از این رو لازم است تقریب بازه اولیه جدیدی بکار برده شود. اگر پس از تعداد معینی از تکرار، همگرایی حاصل نشود، آنگاه ممکن است که پاسخی (ریشه ای) در بازه تعیین شده وجود نداشته باشد.

۹-۶- روش نابجایی

روش نابجایی^۱ نیز یک روش عددی برای یافتن ریشه‌های معادله است. همان‌طور که از نام آن پیداست به معنای روش موقعیت نادرست است که یک ریشه واقعی را با تقریب یک ریشه تخمینی در فاصله‌ای نزدیک به ریشه اصلی، تقریب می‌زند. همچنین این شیوه مانند روش دوبخشی یک روش محدودسازی برای یافتن ریشه‌های معادله است و از این‌رو همیشه مقید به همگرا شدن است. اگر تابع $f(x)$ پیوسته باشد و بازه‌ای وجود داشته باشد که ریشه تابع در آن قرار دارد، می‌توان ریشه تابع را با استفاده از روش نابجایی پیدا کرد. این روش بسیار شبیه به روش دوبخشی است به‌جز آنکه روند یافتن بازه‌های جدید در آن متفاوت است. همچنین، در سرعت همگرایی با روش دوتایی تفاوت دارد، روش نابجایی سریع‌تر از روش دوبخشی همگرا می‌شود.



شکل ۹-۹: روش نابجایی.

این روش نیز مانند سایر روش‌ها فرض می‌کند که تابع $f(x)$ پیوسته است. روش نابجایی با تعیین بازه a و b شروع می‌شود (به‌نحوی که $a < z < b$ باشد، به‌طوری که z ریشه $f(x)$ است) به‌نحوی که $f(a)f(b) < 0$ باشد، سپس برای یافتن ریشه یک ریشه تقریبی جدید x_1 محاسبه می‌شود که یک ریشه واقعی نیست بلکه همان‌طور که از نام این روش پیداست یک ریشه نادرست است. این فرایند به دنبال یافتن ریشه‌ای تقریبی در بازه انتخاب‌شده و سپس انتخاب دقیق ریشه‌هایی که باید برای تکرار بعدی بکار برده شوند (یا a یا x_1 و b) بر اساس علامت $f(a)$ ، $f(x_1)$ ، $f(b)$ ادامه می‌یابد. این فرایند محدودسازی ریشه نامیده می‌شود که به معنای یافتن ریشه درون بازه انتخاب شده است.

1. Regula-Falsi method

بدین منظور، خطی بین نقاط $[a, f(a)]$ و $[b, f(b)]$ ترسیم می‌شود که به خط درونیابی معروف است.

ریشه نادرست جدید از نظر مقدار تابع، یعنی $f(x_1)$ ، مورد ارزیابی قرار می‌گیرد.

سه امکان محتمل است:

(۱) اگر $f(x_1) = 0$ باشد، آنگاه x_1 ریشه است اما این حالت معمولاً روی نمی‌دهد.

(۲) اگر $f(a)f(x_1) < 0$ باشد، آنگاه x_1 مقدار جدید b در نظر گرفته می‌شود، یعنی $b = x_1$ ، بنابراین اکنون یک خط درونیابی جدید بین نقاط $[a, f(a)]$ و $[x_1, f(x_1)]$ ترسیم می‌شود.

(۳) اگر $f(b)f(x_1) < 0$ باشد، آنگاه x_1 مقدار جدید c در نظر گرفته می‌شود، یعنی $c = x_1$ ، بنابراین اکنون یک خط درونیابی جدید بین نقاط $[x_1, f(x_1)]$ و $[b, f(b)]$ ترسیم می‌شود (شکل ۹-۹).

هنگامی که یک وتر^۱ بین نقاط $[a, f(a)]$ و $[b, f(b)]$ ترسیم می‌شود، فرمول عمومی خط ایجاد شده عبارت است از:

$$\frac{y - y_1}{x - x_1} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}, \quad (۳۳-۹)$$

$$\frac{y - f(a)}{x - a} = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}. \quad (۳۴-۹)$$

اگر محل تلاقی خط با محور x_1 باشد، آنگاه در $x = x_2$ ، $y = 0$

$$\frac{0 - f(a)}{x_2 - a} = \frac{f(x_1) - f(a)}{x_1 - a}, \quad (۳۵-۹)$$

$$x_2 = \frac{a \cdot f(x_1) - x_1 \cdot f(a)}{f(x_1) - f(a)}. \quad (۳۶-۹)$$

اینجا x_1 اولین ریشه تخمینی است، زیرا هنوز ریشه اصلی نیست. بررسی می‌شود که اگر $f(a)f(x_1) < 0$ آنگاه $b = x_1$ در غیر این صورت $a = x_1$ (زیرا $f(b)f(x_1) < 0$ خواهد بود). اینجا، در شکل ۹-۹، $f(a)f(x_1) < 0$ است، بنابراین وتر جدیدی بین $[a, f(a)]$ و $[x_1, f(x_1)]$ ترسیم می‌شود و معادله مشابهی برای این خط به صورت زیر نوشته می‌شود

1. Chord

$$\frac{y - f(a)}{x - a} = \frac{f(x_1) - f(a)}{x_1 - a}. \quad (۳۷-۹)$$

اگر محل تلاقی خط با محور x_2 باشد، آنگاه در $x = 0$ ، $y = 0$

$$\frac{0 - f(a)}{x_2 - a} = \frac{f(x_1) - f(a)}{x_1 - a}, \quad (۳۸-۹)$$

$$x_2 = \frac{a \cdot f(x_1) - x_1 \cdot f(a)}{f(x_1) - f(a)}. \quad (۳۹-۹)$$

این فرایند با مقادیر $(x_2, x_3, x_4, \dots, x_n)$ تا دستیابی به $f(x_n) = 0$ یا مقدار تقریبی $f(x_n) \approx \varepsilon_{abs}$ (که حد تolerانس یا میزان دقت نیز نامیده می‌شود) تکرار می‌شود. روش نابجایی در فرمول مورد استفاده و دو تقریب اولیه آغازین شبیه روش وتری است، به جز اینکه ممکن است روش وتری ریشه تخمینی را لزوماً در بازه آغازین $(x_1$ و $x_2)$ نیابد. چون در روش وتری محدوده ریشه‌ها تعیین نشده است در نتیجه ممکن است این روش همیشه همگرا نشود اما روش نابجایی همیشه همگرا می‌گردد.

مثال ۱۱: ریشه‌های تابع $f(x)$ را با استفاده از روش نابجایی در بازه $[0, 2]$ بیابید، در صورتی که $\varepsilon_{abs} = 0.0001$ تعیین شده باشد

$$f(x) = x^3 + 3x - 5. \quad (۴۰-۹)$$

راه‌حل: تابع $f(x)$ به صورت ترسیمی در شکل ۹-۱۰ نمایش داده شده است. برای تخمین مرتبه اول، از معادله (۹-۳۶) استفاده می‌شود

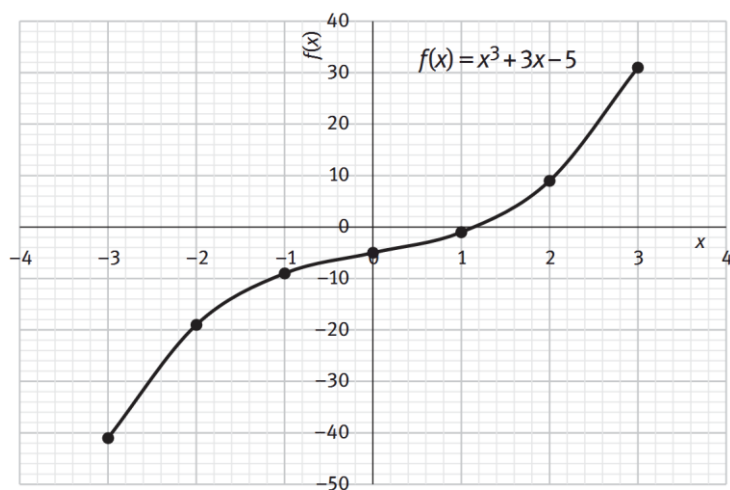
$$x_1 = \frac{a \cdot f(b) - b \cdot f(a)}{f(b) - f(a)}, \quad (۳۶-۹)$$

$$f(a) = f(0) = -5, \quad f(b) = f(2) = 9.$$

$$x_1 = \frac{0 \times f(2) - 2 \times f(0)}{f(2) - f(0)},$$

$$x_1 = \frac{5}{7} = 0.7142 \quad (9-36)$$

اکنون، $f(x_1) = -2/492$ است، چون $f(b)f(x_1) < 0$ ، بنابراین $a = x_1$ ، نتایج بیشتر در جدول ۹-۱۳ جدول بندی شده‌اند.



شکل ۹-۱۰: روش نابجایی برای $f(x) = x^3 + 3x - 5$.

جدول ۹-۱۳: روش نابجایی برای $f(x) = x^2 + 3x - 5$.

N	a	b	f(a)	f(b)	x_n	f(x_n)	Update
۱	۰	۲	-۵	۹	۰/۷۱۴۲۸۵۷۱۴	-۲/۴۹۲۷۱۱۳۷	$a = x$
۲	۰/۷۱۴۲۸۵۷۱۴	۲	-۲/۴۹۲۷۱۱۳۷	۹	۰/۹۹۳۱۵۰۶۸۵	-۷/۰۴۰۹۵۵۴۷۲	$a = x$
۳	۰/۹۹۳۱۵۰۶۸۵	۲	-۷/۰۴۰۹۵۵۴۷۲	۹	۷/۰۹۷۵۳۱۷۱۸	-۰/۳۸۵۳۴۴۶۲	$a = x$
۴	۷/۰۹۷۵۳۱۷۱۸	۲	-۰/۳۸۵۳۴۴۶۲	۹	۷/۱۳۴۵۸۵۳۷	-۰/۱۳۵۷۱۰۳۳۸	$a = x$
۵	۷/۱۳۴۵۸۵۳۷	۲	-۰/۱۳۵۷۱۰۳۳۸	۹	۷/۱۴۷۴۴۱۰۴۴	-۰/۰۴۶۹۳۱۹۵۱	$a = x$
۶	۷/۱۴۷۴۴۱۰۴۴	۲	-۰/۰۴۶۹۳۱۹۵۱	۹	۷/۱۵۱۸۶۳۷۸۷	-۰/۰۱۶۱۲۷۰۷۳	$a = x$
۷	۷/۱۵۱۸۶۳۷۸۷	۲	-۰/۰۱۶۱۲۷۰۷۳	۹	۷/۱۵۳۳۸۰۸۴۱	-۰/۰۰۵۵۲۹۵۱۵	$a = x$
۸	۷/۱۵۳۳۸۰۸۴۱	۲	-۰/۰۰۵۵۲۹۵۱۵	۹	۷/۱۵۳۹۰۰۶۷۷	-۰/۰۰۱۸۹۴۴۸۲	$a = x$
۹	۷/۱۵۳۹۰۰۶۷۷	۲	-۰/۰۰۱۸۹۴۴۸۲	۹	۷/۱۵۴۰۷۸۷۴۲	-۰/۰۰۰۶۴۸۹۰۶	$a = x$
۱۰	۷/۱۵۴۰۷۸۷۴۲	۲	-۰/۰۰۰۶۴۸۹۰۶	۹	۷/۱۵۴۱۳۹۷۲۹	-۰/۰۰۰۲۲۲۲۴۶	$a = x$
۱۱	۷/۱۵۴۱۳۹۷۲۹	۲	-۰/۰۰۰۲۲۲۲۴۶	۹	۷/۱۵۴۱۶۰۶۱۶	-۷/۶۱۱۵۵E-۰۵	$a = x$
۱۲	۷/۱۵۴۱۶۰۶۱۶	۲	-۷/۶۱۱۵۵E-۰۵	۹	۷/۱۵۴۱۶۷۷۶۹	-۲/۶۰۶۸E-۰۵	$a = x$

از نتایج جدول‌بندی شده آشکار است که در دوازدهمین تکرار، ریشه (با مقدار $1/15416$) تا ۵ رقم اعشار ثابت است. همچنین در دوازدهمین تکرار $f(x_1) \approx 10^{-5}$ است.

مثال ۱۲: حجم ۵٪ مول گاز واندروالس CO_2 را در ۲۲۲۶ کیلو پاسکال و ۲۹۸ کلین تعیین کنید. مقادیر $a = 363/76 \text{ kPa dm}^6 \text{ mol}^{-2}$ و $b = 42/67 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ ارائه شده‌اند. راه‌حل: مقدار حدس اولیه از معادله گاز ایده‌آل برای حجم به‌صورت $V = nRT/P$ در نظر گرفته می‌شود.

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT. \quad (41-9)$$

که ضمن بازنویسی نتیجه می‌دهد،

$$f(V) = V^3 - \left(nb + \frac{nRT}{P}\right)V^2 + \frac{n^2 a}{P}V - \frac{n^2 ab}{P} = 0, \quad (42-9)$$

برای اعمال روش نیوتن-رافسون، مشتق تابع به‌صورت زیر مورد نیاز است:

$$f'(V) = 3V^{2-2} \left(nb + \frac{nRT}{P} \right) V + \frac{n^2 a}{P}. \quad (۴۳-۹)$$

بر این اساس، نتایج در جدول ۹-۱۴ جدول بندی می‌شوند.

جدول ۹-۱۴: روش نیوتن-رافسون برای حل معادله واندروالس.

N	V.	f(V)	f'(V)	V _n
۱	۰/۵۵	۰/۰۱۳۱۷۵۴۴۴	۰/۳۱۲۷۲۶۶۴۸	۰/۵۰۷۸۶۹۱۳۶
۲	۰/۵۰۷۸۶۹۱۳۶	۰/۰۰۱۸۲۸۳۰۷	۰/۲۲۷۷۰۹۸۴۶	۰/۴۹۹۸۴۰۰۲۸
۳	۰/۴۹۹۸۴۰۰۲۸	۶/۰۴۵۲۶E-۰۵	۰/۲۱۲۷۱۵۹۵	۰/۴۹۹۵۵۵۸۳۴

مقدار $۴۹۹۸/۰ \text{ dm}^3$ حجم CO_2 برای شرایط ارائه شده است. توجه به این نکته ضروری است که مرتبه چندجمله‌ای همواره برابر با تعداد ریشه‌های آن چندجمله‌ای است. اینجا، چون V از مرتبه ۳ است، بدین معنی است که سه ریشه باید موجود باشند ولی این غیرممکن است که در یک فشار منحصربه‌فرد، یعنی ۲۲۲۶ kPa ، سه مقدار حجم محاسبه شوند، بنابراین تنها یکی از آن‌ها درست است. در این مورد، ممکن است دو مقدار حجم دیگر (با استفاده از مقادیر حدس اولیه متفاوت) به دست آیند که جواب صحیح معادله نخواهند بود.

مثال ۱۳: غلظت $[\text{H}^+]$ در یک محلول رقیق HCl با غلظت $۱۰^{-۶} \text{ M}$ توسط رابطه زیر به دست می‌آید.

$$[\text{H}^+]^2 - [\text{HCl}][\text{H}^+] - k_w = 0. \quad (۴۴-۹)$$

مقدار pH محلول $۱۰^{-۷} \text{ M}$ از HCl در ۲۵ درجه سانتی‌گراد را محاسبه کنید.

راه حل: معادله ارائه شده در بالا یک معادله درجه دو از نوع $ax^2 + bx + c = 0$ است. معادله فوق را می‌توان با استفاده از روش تکرار، با نوآرایی معادله به شکل زیر حل نمود:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{[\text{HCl}][\text{H}^+] + k_w}. \quad (۴۵-۹)$$

با انتخاب مقدار حدس اولیه غلظت اسید برابر با $۱۰^{-۷}$ مولار، نتایج در جدول ۹-۱۵ جدول بندی می‌شوند.

$$\text{pH} = -\log_{10}[\text{H}^+], \quad (۹-۴۶)$$

$$\text{pH} = -\log_{10}[\frac{9}{9} \times 10^{-7}], \quad (۴۷-۹)$$

$$\text{pH} = ۰/۶.$$

جدول ۹-۱۵: روش تکرار حل معادله برای pH

N	$x_n: [H^+]_n$	$x_{n+1}: [H^+]_{n+1}$	ε_{abs}	pH
۱	۰/۰۰۰۰۰۰۱	۳/۳۱۶۶۲E-۰۷	۲/۳۱۶۶۲E-۰۷	۷/۰۰
۲	۳/۳۱۶۶۲E-۰۷	۵/۸۴۵۱۹E-۰۷	۲/۵۲۸۵۷E-۰۷	۶/۴۸
۳	۵/۸۴۵۱۹E-۰۷	۷/۷۱۰۵۱E-۰۷	۷/۸۶۵۳۲E-۰۷	۶/۲۳
۴	۷/۷۱۰۵۱E-۰۷	۸/۸۳۷۷۱E-۰۷	۷/۱۲۷۲۰E-۰۷	۶/۱۱
۵	۸/۸۳۷۷۱E-۰۷	۹/۴۵۳۹۴E-۰۷	۶/۱۶۲۳۸E-۰۸	۶/۰۵
۶	۹/۴۵۳۹۴E-۰۷	۹/۷۷۴۴۳E-۰۷	۳/۲۰۴۸۴E-۰۸	۶/۰۲
۷	۹/۷۷۴۴۳E-۰۷	۹/۹۳۷۰۲E-۰۷	۷/۶۲۵۸۸E-۰۸	۶/۰۱
۸	۹/۹۳۷۰۲E-۰۷	۱/۰۰۱۸۵E-۰۶	۸/۱۴۷۵۱E-۰۹	۶/۰۰
۹	۱/۰۰۱۸۵E-۰۶	۱/۰۰۵۹۱E-۰۶	۴/۰۵۸۰۲E-۰۹	۶/۰۰

۹-۷- مسئله‌هایی برای تمرین

۱. با استفاده از روش نیوتن-رافسون، ریشه معادله زیر را با دقت در حدود 10^{-7} بیابید

$$\text{الف) } 5 \sin x^2 - 8 \cos^5 x = 0 \text{ در بازه } [-1, 2],$$

$$\text{ب) } x^4 - x - 10 = 0 \text{ در بازه } [1, 2].$$

۲. ریشه معادله $x^2 - 4x - 7 = 0$ را نزدیک $x = 5$ تا حد دقت یک‌هزارم بیابید.

۳. ریشه‌های توابع زیر را با استفاده از روش تکرار بیابید

$$\text{الف) } f(x) = x^2 - 2 \text{ با شروع از } x_0 = 1,$$

$$\text{ب) } f(x) = e^{-x} \cos(x) \text{ با شروع از } x_0 = 3/1 \text{ که در آن } \varepsilon_{abs} = 10^{-5} \text{ باشد.}$$

۴. با استفاده از روش تکرار، غلظت $[H^+]$ در محلول 10^{-4} مولار یک اسید ضعیف با $k_a =$

$7/1 \times 10^{-10} M$ در $25^\circ C$ در نظر گرفتن معادله زیر، محاسبه کنید

$$[H^+]^3 + [H^+]^2 k_a - [H^+]\{k_w + k_a[HA]\} - k_a k_w = 0.$$

۵. ریشه معادله $x^3 - 3$ را با استفاده از روش دوبخشی در بازه $[1, 2]$ در نظر گرفتن $\varepsilon_{step} = 1/10$

و $\varepsilon_{abs} = 1/10$ بیابید.

۶. با استفاده از روش دوبخشی، ریشه‌های توابع زیر را بیابید.

$$\text{الف) } \cos(x) - x e^x = 0,$$

$$\text{ب) } x^4 - x - 10 = 0,$$

$$\text{پ) } x - e^{-x} = 0.$$

۷. ریشه تابع $f(x) = x \cos[(x)/(x-2)] = 0$ را با استفاده از روش نابجایی بیابید.

۸. ریشه تابع $f(x) = 5 \sin^2 x - 8 \cos^5 x = 0$ را در بازه $[5/10, 5/1]$ بیابید.

۹. ریشه معادله $x^4 - x - 10 = 0$ را با استفاده از روش وتری در بازه $[1, 2]$ بیابید.

۱۰. ریشه معادله‌های زیر را با استفاده از روش وتری بیابید

$$\text{الف) } \exp(-x) = 3 \log(x),$$

$$\text{ب) } x \sin(x) - 72 = 0.$$

پیوست‌ها

پیوست الف

ضرایب تبدیل بین سیستم واحدهای متریک، مرسوم ایالات متحده و امپریال بریتانیایی.

جدول الف. ۱: واحدهای حجم

متریک	آمریکایی یا امپریال
۱۶/۳۸۷ سانتی متر مکعب	یک اینچ مکعب (in ³)
۰/۰۲۸۳۲ متر مکعب	یک فوت مکعب (ft ³)
۲۹/۵۷۴ میلی لیتر	یک اونس سیال
۰/۴۷۳۲ لیتر	یک پینت (۱۶ اونس سیال)
۳/۷۸۵۴ لیتر	یک گالن (۲۳۱ اینچ مکعب)
	۷/۰۴۰۸ اونس سیال بریتانیایی
	۸/۳۲۷ پینت بریتانیایی
	۸/۳۲۷ گالن بریتانیایی

جدول الف. ۲: واحدهای طول

متریک	آمریکایی یا امپریال
۲/۵۴ سانتی متر	یک اینچ (in)
۰/۳۰۴۸ متر	یک فوت (ft)
۰/۹۱۴۴ متر	یک یارد (yd)
۱/۶۰۹۳ کیلومتر	یک مایل
۱/۸۵۳ کیلومتر	یک مایل بین المللی دریایی
	۱۲ اینچ
	۳ فوت
	۱۷۶۰ یارد
	۱۲ اینچ
	۲۰۲۵/۴ یارد

جدول الف. ۳: واحدهای جرم

متریک	آمریکایی یا امپریال
۲۸/۳۵ گرم	یک اونس (oz)
۰/۴۵۳۶ کیلوگرم	یک پوند (lb)
۶/۳۵۰۳ کیلوگرم	یک سنگ
۵/۸۰۲ کیلوگرم	یک صدوزن (cwt)
۰/۹۰۷۲ تُن	یک تُن کوتاه (آمریکایی)
۱/۰۱۶۰ تُن	یک تُن بلند (بریتانیایی)
	۱۶ اونس
	۱۴ پوند
	۱۱۲ پوند

جدول الف. ۴: واحدهای سطح

متریک	آمریکایی یا امپریال
۶/۴۵۱۶ سانتی مترمربع	یک اینچ مربع (in ²)
۰/۰۹۲۹ مترمربع	یک فوت مربع (ft ²)
۰/۸۳۶۱ مترمربع	یک یارد مربع (yd ²)
۴۰۴۶/۹ مترمربع	یک جریب (acre)
۲/۵۹ کیلومترمربع	یک مایل مربع (mile ²)
	۱۴۴ اینچ مربع
	۹ فوت مربع
	۴۸۴۰ یارد مربع
	۶۴۰ جریب

جدول الف.۵: پیشوندهای مضارب و کسرهای واحدها

مضرب	پیشوند	مخفف	کسر	پیشوند	مخفف
۱۰ ^۱	دکا	da	۱۰ ^{-۱}	دسی	d
۱۰ ^۲	هکتو	h	۱۰ ^{-۲}	سانتی	c
۱۰ ^۳	کیلو	k	۱۰ ^{-۳}	میلی	m
۱۰ ^۶	مگا	M	۱۰ ^{-۶}	میکرو	μ
۱۰ ^۹	گیگا	G	۱۰ ^{-۹}	نانو	n
۱۰ ^{۱۲}	ترا	T	۱۰ ^{-۱۲}	پیکو	p
۱۰ ^{۱۵}	پتا	P	۱۰ ^{-۱۵}	فمتو	f
۱۰ ^{۱۸}	اگزا	E	۱۰ ^{-۱۸}	آتو	a
۱۰ ^{۲۱}	زتا	Z	۱۰ ^{-۲۱}	زپتو	z
۱۰ ^{۲۴}	یوتا	Y	۱۰ ^{-۲۴}	یوکتو	y

جدول الف.۶: تبدیل واحدهای حجم

یک میلی لیتر (mL)	۱/۱۰۰۰ لیتر
یک سانتی لیتر (cL)	۱/۱۰ لیتر
یک دسی لیتر (dL)	۱ لیتر
یک اینچ مکعب (in ^۳)	۱۰ ^{-۲} × ۱۶۳۹ لیتر
یک گالن (gal)	۳/۷۸۷ لیتر
یک فوت مکعب (ft ^۳)	۲۸/۳۱۶ لیتر

جدول الف.۷: تبدیل واحدهای طول در سیستم متریک

یک میلی متر (mm)	۱/۱۰۰۰ متر
یک سانتی متر (cm)	۱/۱۰ متر
یک دسی متر (dm)	۱/۱ متر
یک دکا متر (dam)	۱۰ متر
یک کیلومتر (km)	۱۰۰۰ متر
یک آنگستروم (Å)	۱۰ ^{-۱۰} متر
یک فرمی	۱۰ ^{-۱۵} متر
یک سال نوری	۱۰ ^{-۱۶} × ۹۴۶ لیتر
یک مایل	۱/۶۰۹۳۷ متر

جدول الف. ۸: تبدیل واحدهای جرم در سیستم متریک

یک میلی گرم (mg)	۰/۰۰۱ گرم
یک سانتی گرم (cg)	۰/۰۱ گرم
یک دسی گرم (dg)	۰/۱ گرم
یک دکا گرم (dag)	۱۰ گرم
یک هکتو گرم (hg)	۱۰۰ گرم
یک کیلو متر (kg)	۱۰۰۰ گرم
یک سنگ	۶۳۵/۲۹ گرم
یک پوند	۴۵۳/۵۹۲ گرم
یک اونس	۲۸/۳۴۹۵ گرم

جدول الف. ۹: واحدهای زمان

یک دقیقه (min)	۶۰ ثانیه (s)
یک ساعت (h)	۶۰ دقیقه / ۳۶۰۰ ثانیه
یک روز (d)	۲۴ ساعت
یک هفته	۷ روز
یک سال	۳۶۵ روز

جدول الف. ۱۰: تبدیل واحدهای انرژی

یک واحد حرارتی بریتانیایی (BTU)	۱۰۵۵ ژول
یک ارگ (erg)	۱۰ ^{-۷} ژول
یک فوت-پوند (ft-lb)	۱۳۵۶ ژول
یک کالری (cal)	۴/۱۸۶ ژول
یک کیلووات ساعت (kWh)	۳/۶×۱۰ ^۶ ژول
یک الکترون ولت (eV)	۱۰ ^{-۱۹} ×۱۶۰۲ ژول
یک لیتر-اتم سفر	۱۰/۷۱۳ ژول

جدول الف. ۱۱: تبدیل واحدهای سطح

یک اینچ مربع (in ^۲)	۶/۵۴×۴-۱۰ مترمربع (m ^۲)
یک فوت مربع (ft ^۲)	۹/۲۹۰۳×۲-۱۰ مترمربع (m ^۲)
یک جریب (acre)	۴/۰۴۶۵×۱۰ ^۳ مترمربع (m ^۲)
یک هکتار (hectare)	۱۰ ^۴ مترمربع (m ^۲)
یک مایل مربع (mile ^۲)	۲/۵۸۸۸×۱۰ ^۶ مترمربع (m ^۲)

یک بارن (barn)

 10^{-28} مترمربع (m^2)

پیوست ب

پاسخ‌های مسائل تمرینی

فصل اول

۱. (الف) ۵؛ (ب) ۲؛ (پ) ۳؛ (ت) ۴؛ (ث) ۶؛ (ج) ۳؛ (چ) ۴
۲. (الف) ۶۵۱۰۰۰۰؛ (ب) ۰/۰۷؛ (پ) ۹۲/۴؛ (ت) ۰/۰۰۱۲۵؛ (ث) ۰/۰۰۵۰؛ (ج) ۵/۱؛ (چ) ۳۰۰۰۰، ۳۲۰۰۰، ۳۲۴۰۰، ۳۲۳۹۱، ۳۲۳۹۰؛ (ح) ۸۰، ۸۳/۸، ۸۳/۸۱۰۵؛ (خ) ۰/۷۶؛ (د) ۱؛ (ذ) ۹۰۰؛ (ر) ۸؛ (ز) ۴۰؛ (ژ) ۰/۰۲۴۷۸؛ (س) ۸۵۰۰؛ (ش) ۰/۰۰۰۳۲
۳. (الف) ۸۱/۹؛ (ب) ۰/۰۷۱۹۴؛ (پ) ۳؛ (ت) ۲/۰۷۳؛ (ث) ۲/۴؛ (ج) ۳۵/۶؛ (چ) ۱/۰۵؛ (ح) ۰/۰۹۱۷۷؛ (خ) ۱۷۰؛ (د) ۳۲۰؛ (ذ) ۰/۰۱۱

فصل دوم

۱. (الف) ۰/۰۳ $\pm$ ۰/۰۶؛ (ب) ۰/۰۰۲۴ $\pm$ ۰/۰۱۳۷؛ (پ) ۱۰^{۳۲} $\times$ ۰/۰۴ $\pm$ ۱۱/۲۷؛ (ت) ۰/۰۳ $\times$ ۱۰^{-۳۳} $\pm$ ۳
- (۹)
۲. (الف) مقدار ۳/۱۴۱۷ دقیق‌تر است در حالیکه مقدار π صحیح‌تر است.
- (ب) ۲/۷۱۸۲۸۲۰۱۳۵۴۲۳ دقیق‌تر است در حالیکه ۲/۷۱۸۲۸۱۸۲۸ صحیح‌تر است.

فصل سوم

۱. (الف) $\log_6 6$ ؛ (ب) $\frac{\log \pi}{\log 2}$ ؛ (پ) $-\log_3 5$
۲. $y = 3 \quad x = 1$
۳. $(x - 2)^2 + (y - 3)^2 = 25$
۴. $f(V) = V^2 - (nb + \frac{nRT}{p})V^2 + \frac{n^2a}{p}V - \frac{n^2ab}{p} = 0$
۵. $f(\Lambda_m) = c = \frac{1}{b^2}(\Lambda_m^\infty - \Lambda_m)^2 = 0$

فصل چهارم

۱. ۰/۰۷، ۰/۱۹۱، ۰/۲۵۷، ۰/۶۶۳
۲. $Q_c < 0/07 = Q$ ؛ بنابراین می‌تواند شامل شود.

$$۳. \quad ۵/۶ \pm ۱۲\%$$

$$۴. \quad t = ۰/۴۲۴ < t_c \text{؛ بنابراین، از منظر آماری صحیح است}$$

$$۵. \quad \text{بر اساس تست } F = ۰/۳۷۵, F \text{ (با مقدار } F_{tab} \text{ برای } ۵ \text{ و } ۷ \text{ مقایسه کنید).}$$

فصل پنجم

$$۱. \quad ۶/۵ \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$۲. \quad a = ۲۶/۶۹۴, b = ۰/۰۰۹۴, c = -۱۰^{-۶}$$

$$۳. \quad ۶/۹۰ \times ۱۰^{-۴}$$

$$۴. \quad ۰/۰۱۱۲ \text{ min}^{-1}$$

$$۵. \quad y = x^۲$$

$$۶. \quad ۰/۰۱۱۱$$

فصل ششم

$$۱. \quad \text{با تعداد } ۱۰ \text{ بازه، } ۳۷۵۷۵ \text{؛ پاسخ صحیح } ۳۷۵۰۰ \text{ است.}$$

$$۲. \quad \text{مقدار پاسخ } ۱۴۴۴/۲ \text{ با تعداد } ۲۰ \text{ بازه است؛ پاسخ صحیح } ۱۴۴۳/۱ \text{ است.}$$

$$۳. \quad ۱۱/۱۶۳ \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$۴. \quad ۶/۷۵۴ \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$۵. \quad ۴۰/۵۳ \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

فصل هشتم

$$۱. \quad \frac{d^2y}{dx^2} = ۱۰ \text{ و } \frac{dy}{dx} = ۱۴$$

$$۲. \quad ۴۰۰ \text{ m} \cdot \text{s}^{-۱}$$

$$۳. \quad ۵/۶۸۷$$

$$۴. \quad ۳/۲۰۸$$

فصل نهم

$$۱. \quad \text{(الف) } ۷۰۱۳۶۷ \text{، (ب) } ۷/۸۵۵$$

$$۲. \quad ۵/۳۱۷$$

$$۳. \quad \text{(الف) } ۷/۱۴۱۴۲۱۵۶ \text{، (ب) } ۷/۵۷۰۷۹۶۳$$

۴. $M^{-۷} \times ۱۰^{-۷} / ۶۴۹۲۱۸$.

۵. $۱/۴۳۷۵$.

۶. (الف) $۵۱۷/۰$ ، (ب) $۱۸۶/۰$ ، (پ) $۵۶۵/۰$.

۷. $۱/۲۲۲$.

۸. $۵/۰$ و $۷۰۱۳۶/۰$.

۹. $۱/۸۵۵۵۸$.

۱۰. (الف) $۷۲۴۶۸۲/۰$ ، (ب) $۱/۴۹۷۳$.

نمایه

آ	آزمون، ۸۷	آزمون جفت شده، ۸۹	آزمون دانشجویی، ۸۷	آزمون دیکسون، ۸۴	آمار توصیفی، ۷۴	آمار خلاصه، ۷۴	آمپر، ۹	آوگادرو، ۲، ۸، ۱۴	آیوپاک، ۶
ا	ابزارهای آماری، ۹۷	اثر روشنایی، ۸	احتمال، ۹۶	ارزش مکانی، ۶۶	ارقام بامعنی، ۱۴	اس آی، ۵	اف پی اس، ۵	اکسل، ۱۲۸	ام تی اس، ۶
	ام کاس، ۵	انتشار عدم قطعیت، ۳۱	انحراف معیار، ۲۷، ۲۸، ۳۹، ۴۱، ۷۴، ۸۰، ۸۱، ۸۲، ۸۳، ۸۴، ۸۶، ۹۱، ۹۴، ۹۵، ۹۸، ۱۰۱، ۱۰۵، ۱۱۳، ۱۱۴	انحراف معیار جمعیت، ۸۰	انحراف معیار نمونه، ۸۰	اوایلر بهبود یافته، ۱۷۱	ب	بار الکتریکی پایه، ۸	بار پایه، ۹
پ	پراکندگی، ۸۲	ت	تابع FORECAST، ۱۳۱	تابع GROWTH، ۱۳۰	تابع LINEST، ۱۲۲	تابع LOGEST، ۱۳۰	تابع TREND، ۱۳۱	تابع توان، ۵۳	تابع خطی، ۴۶
	تابع درجه چهار، ۵۳	تابع ریاضی، ۴۶	تابع گویای سره، ۵۶	تابع گویای ناسره، ۵۶	تابع لگاریتمی، ۴۹	تابع مکعبی، ۵۳	تابع هذلولی، ۶۰	تانژانت، ۵۷	تبدیل بین واحدها، ۱۲
	تحلیل خطا، ۲۶	تحلیل داده ها، ۸۳	تحلیل واریانس، ۱۲۸						

بافت نگار، ۷۹

باقیمانده، ۶۶

باقیمانده ها، ۱۰۹

برازش (رگرسیون) خطی چند متغیری

(چندگانه)، ۱۲۰

برازش چندجمله ای، ۱۲۳

برازش منحنی، ۱۰۸

برونیایی ریچاردسون، ۱۹۱

بسط تیلور، ۶۱

پ

پراکندگی، ۸۲

ت

تابع FORECAST، ۱۳۱

تابع GROWTH، ۱۳۰

تابع LINEST، ۱۲۲

تابع LOGEST، ۱۳۰

تابع TREND، ۱۳۱

تابع توان، ۵۳

تابع خطی، ۴۶

تابع درجه چهار، ۵۳

تابع ریاضی، ۴۶

تابع گویای سره، ۵۶

تابع گویای ناسره، ۵۶

تابع لگاریتمی، ۴۹

تابع مکعبی، ۵۳

تابع هذلولی، ۶۰

تانژانت، ۵۷

تبدیل بین واحدها، ۱۲

تحلیل خطا، ۲۶

تحلیل داده ها، ۸۳

تحلیل واریانس، ۱۲۸

جریان، ۹	ترازوی کیل، ۹
چ	ترکیب عدم قطعیت ها، ۳۲
چند جمله ای درونیاب، ۱۸۷	تعداد اندازه گیری ها، ۸۶
چند جمله ای درونیاب استرلینگ، ۱۹۰	تعداد درجات آزادی، ۸۶، ۹۹
چند جمله ای درونیاب لاگرانژ، ۱۹۰	تغییرپذیری، ۷۴
چند جمله ای لاگرانژ، ۱۴۹، ۱۵۳، ۲۰۲، ۲۰۴، ۲۰۵	تکرار نیوتن، ۲۱۶
۲۰۶، ۲۰۷	تکنیک های انتگرالگیری، ۱۳۶
چند جمله ای مرتبه اول، ۴۶	تکنیک های عددی، ۱۳۶
چند جمله ای مرتبه دو، ۱۲۳	توابع جبری، ۶۲
چند جمله ای ها، ۵۲	توابع ریشه، ۵۳
ح	توابع ضد مثلثاتی، ۶۰
حاصلضرب توان ها، ۳۶	توابع گویا، ۵۶
حد اطمینان، ۲۷	توابع متعالی، ۶۲
خ	توابع مثلثاتی، ۵۷
خارج از محدوده، ۷۶	توابع مثلثاتی هذلولی، ۶۰
خارج قسمت، ۶۶	توابع معکوس، ۵۳، ۶۲
خطا، ۲۶	توزیع، ۴۰
خطاهای دستگاهی، ۲۹	توزیع پواسون، ۹۴، ۹۶، ۹۷، ۹۸
خطاهای نامعین، ۲۶	توزیع خطا، ۹۴
خطای تصادفی، ۳۲	توزیع دو جمله ای، ۹۴
خطای روش، ۲۹	توزیع گاوسی، ۳۰، ۹۴، ۹۵، ۹۶
خطای مطلق، ۴۱	توزیع نامتقارن، ۸۳
خطای نسبی، ۴۱	توزیع نرمال، ۴۰، ۹۴، ۹۸
خطای نظری، ۲۹	تیز بودن توزیع داده ها، ۸۳
د	ث
داده ناسازگار، ۸۴	ثابت، ۲
دایره، ۵۴	ثابت بولتزمن، ۸
درجه، ۵۹	ثابت پلانک، ۸
درجه اطمینان، ۸۴	ثابت های فیزیکی، ۸
درجه چند جمله ای، ۵۶	ثانیه، ۹
درصد انحراف میانگین، ۲۸	ج
درصد خطا، ۲۷	جرم، ۸

زاویه سمت، ۶۴	درصد عدم قطعیت، ۳۲
زاویه قطبی، ۶۴	درصد عدم قطعیت نسبی، ۳۰
زمان، ۹	درونیابی، ۱۰۸
س	درونیابی پیشرو و پسرو گاوس، ۱۹۸
ساختار دستوری، ۹۷	دقت، ۳۱
سرعت نور، ۷	دما، ۹
سری تیلور، ۶۱	ده‌دهی، ۶۵
سزیم، ۸	دودویی، ۶۵
سطح اطمینان، ۸۶	دیجیتال، ۶۶
سطح زیر منحنی، ۹۵، ۱۳۶، ۱۳۸، ۱۳۹، ۱۴۰، ۱۴۱، ۱۴۲	ر
۱۵۸، ۱۵۶، ۱۵۴، ۱۴۹، ۱۴۶، ۱۴۴، ۱۴۲	رادیان، ۵۹
سکانت، ۵۷	رگرسیون، ۱۰۴، ۱۰۵، ۱۰۶، ۱۰۷، ۱۰۹، ۱۱۰، ۱۱۸، ۱۱۹، ۱۲۸
سلسله مراتب عملیات حسابی، ۳	رگولا-فالسی، ۲۳۹
سی جی اس، ۵	روش برجسب عامل، ۱۴
سیستم اعداد، ۶۵	روش پیش بینی کننده-تصحیح کننده، ۱۷۱
سیستم اعداد ده‌دهی، ۶۶	روش تکرار، ۲۱۶
سیستم اعداد دودویی، ۶۶	روش تکرار نقطه ثابت، ۲۲۳
سیستم اعداد هشت‌هشتی، ۶۷	روش دوبخشی دوتایی، ۲۲۳
سیستم شانزده‌شانزدهی، ۶۸	روش رونگه-کوتا مرتبه ۳، ۱۷۴
سیستم متریک، ۵	روش نابجایی، ۲۳۹
سیستم مختصات، ۶۲	روش نصف کردن بازه، ۲۳۱
سیستم مختصات قطبی، ۶۳	روش نیوتن-رافسون، ۲۱۶
سیستم مختصات کارتزین، ۶۳	روش های رونگه-کوتا، ۱۶۴، ۱۷۰
سیستم مختصات کروی، ۶۴	روش های عددی، ۲۱۶
سیستم واحد، ۵	روش هیون، ۱۷۱
سیستم واحد اس‌آی، ۶	روش وتری، ۲۱۶، ۲۲۱، ۲۳۴، ۲۳۵، ۲۳۶، ۲۳۷
سیستم واحد بین المللی، ۶	۲۴۱، ۲۴۶
سیستم واحدهای امپریال بریتانیایی، ۵	رونگه-کوتا-۳، ۱۷۴
سیستم واحدهای بین المللی، ۵	رونگه-کوتا-۴، ۱۷۴
سیستم واحدهای مرسوم ایالات متحده، ۵	ز
سیستماتیک، ۲۶، ۲۹، ۳۰، ۳۱، ۹۵	زاویه، ۵۹
سینوس، ۵۷	

ش

شانزده‌شانزدهی، ۶۵

شدت روشنایی، ۱۰

شمع، ۷

ص

صحت، ۳۱

صفحه گسترده، ۴۰

صفحه مرجع، ۶۴

ض

ضریب پیرسون، ۱۰۵

ضریب تشخیص، ۱۰۴، ۱۰۷

ضریب تغییرات، ۸۱

ضریب همبستگی پیرسون، ۱۰۵

ضریب همبستگی جمعیت، ۱۰۵

ضریب همبستگی رتبه‌ای اسپیرمن، ۱۰۶

ضریب همبستگی نمونه، ۱۰۵

ط

طول، ۸

طول از مبدأ، ۱۳۶

طول کمان، ۵۹

ع

عبارت «PEMDAS»، ۳

عدد اولر، ۴۹

عدد گویا، ۵۵

عدم قطعیت، ۳۰

عدم قطعیت نسبی، ۳۰

عدم محدودسازی، ۲۳۶

عرض از مبدأ، ۴۶

عملیات ریاضی ترکیبی، ۱۸

عملیات های ترکیبی، ۳۵

عملیات های حسابی، ۳۵

ف

فاصله شعاعی، ۶۳

فرضیه صفر، ۹۱

فرکانس، ۷۶

فرکانس فوق ظریف، ۸

فرمول استرلینگ، ۱۹۰

فرمول تفاضل پسرو، ۱۸۷

فرمول تفاضل پیشرو، ۱۸۷

فرمول تفاضل پیشرو چهار نقطه‌ای، ۲۰۵

فرمول تفاضل پیشرو سه نقطه‌ای، ۲۰۵

فرمول تفاضل محدود، ۱۸۷

فرمول تفاضل مرکزی، ۱۸۹

فرمول درونیایی پیشرو نیوتن، ۱۹۱

فرمول درونیایی تفاضل تقسیم‌شده نیوتن، ۱۹۰

فرمول درونیایی لاگرانژ، ۱۹۰

فرمول دو نقطه‌ای، ۱۵۹

فرمول گاوس چیشیف، ۱۳۷

فرمول گاوس-لژاندر، ۱۳۷

فرمول گاوس-هرمیت، ۱۳۷

فرمول نقطه میانی، ۱۵۹

فرمول نیوتن-کوتس، ۱۳۶

فرمول نیوتن-کوتس دو نقطه ای، ۱۴۱

فرمول نیوتن-گریگوری، ۱۹۱

فرمول های باز نیوتن-کوتس، ۱۳۷، ۱۵۹

فرمول های بسته نیوتن-کوتس، ۱۳۷

فرمول های مربعات نیوتن-کوتس، ۱۳۷

فروپاشی رادیواکتیو نمایی، ۴۹

فضای اقلیدسی، ۶۳

ق

قاعده ۷/۳ سیمپسون، ۱۴۸

قاعده ۳/۸ سیمپسون، ۱۵۳

قاعده اطلس- آرام، ۱۵

لگاریتم معمولی، ۴۹	قاعده بول، ۱۵۴
م	قاعده ذورنقه ای، ۱۴۱
مانتیس، ۱۷	قاعده سیمپسون انتگرال مرکب، ۱۵۲
مبدأ مختصات، ۶۳	قاعده های توان، ۴
مینای ۱۰، ۴۹	قاعده های شاخص، ۴
متر، ۸	قضیه بولزانو، ۲۳۱
متغیر مستقل، ۴۶	قضیه تیلور، ۶۱
متغیر وابسته، ۱۰۴	قضیه مقدار میانی، ۲۳۱
متغیرها، ۲	قواعد BODMAS، ۳
مجانِب، ۵۶	قواعد انجام عملیات حسابی، ۱۵
مجموع ریمان، ۱۳۸	قواعد تقدم، ۳
مجموع مربعات، ۳۹، ۱۰۷	ک
محدودسازی، ۲۳۱	کارایی، ۱۰۶
محدودسازی ریشه، ۲۳۹	کارایی برازش، ۱۰۷
محیط، ۶۰	کامپیوتر، ۶۶
مُد، ۷۴، ۷۹، ۹۷	کاهش داده ها، ۳۲
مربعات، ۳۶	کج شدگی، ۷۴
مربعات گاوس، ۱۳۶	کسر جزئی، ۵۷
مستطیل، ۱۳۸	کُسنوس، ۵۷
مسئله مقدار اولیه، ۱۶۶	کشیدگی، ۷۴
مشتق پیوسته، ۲۱۸	کلوین، ۹
معادلات دیفرانسیل کاوچی-اویلر، ۱۶۵	کمان، ۵۹
معادلات دیفرانسیل معمولی، ۱۶۴	کوتانژانت، ۵۷
معادله آرنیوس، ۳، ۱۸، ۴۹	کُوسِکانت، ۵۷
معادله اُنساگر، ۳	کووارِانس، ۸۱
معادله اینشتین، ۳	کیلوگرم، ۸
معادله خطی همزمان، ۱۲۳	گ
معادله دیفرانسیل، ۱۶۴	گاوسی، ۸۳
معادله گاز ایده آل، ۳	گرایش مرکزی، ۷۴
معادله نرنست، ۳	گرد کردن، ۱۶، ۱۷، ۳۳، ۴۰
معادله های نرمال، ۱۱۴، ۱۱۸، ۱۲۴	ل
معادله هِندرسون-هَشلباخ، ۳	لگاریتم طبیعی، ۵۰

ن	معیارهای گرایش مرکزی، ۷۴
نقطه سه گانه، ۹	مقادیر بحرانی، ۸۴
نمایی، ۴۷	مقدار مشکوک، ۸۴
نمودار پراکندگی، ۱۰۴	مقدار ماده، ۹
نوسانگر هماهنگ، ۱۸۲	منحنی زنگوله ای، ۹۵
ه	مول، ۹
هشت هشتی، ۶۵	میانگین، ۲۷، ۲۸، ۴۰، ۷۴، ۷۵، ۷۶، ۷۷، ۷۸،
همارزی های مثلثاتی، ۵۹	۸۰، ۸۱، ۸۲، ۸۳، ۸۴، ۸۶، ۸۷، ۸۸، ۸۹، ۹۴،
همبستگی، ۱۰۴	۹۵، ۹۶، ۹۷، ۹۸، ۱۰۱، ۱۱۲، ۱۹۸
و	میانگین جمعیت، ۷۵
واحد، ۲	میانگین حسابی، ۷۶
واحدهای بنیادی، ۶	میانگین موزون، ۷۷
واحدهای پایه، ۵	میانگین نمونه، ۷۵
واحدهای مشتق شده، ۵	میانگین هندسی، ۷۷
واریانس، ۷۴، ۸۰، ۸۱، ۹۱، ۹۳، ۹۴، ۹۵، ۹۶، ۱۰۷،	میانگین وزنی، ۷۷
۱۱۳	میانه، ۷۴