

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری  
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه  
گاوزنگ - زنجان



# تحلیل عامل تفکیکی با استفاده از بهینه‌سازی آشوبناک جمعیت ذرات

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

سمیرا پیرامی سلطان

استاد راهنما: دکتر حمید عبداللهی

شهریور ۱۳۸۸

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

خیال روی تو در هر طریق همره ماست  
نسیم موی تو پیوند جان آگه ماست

دوسته دارم تلاش‌هایم را در قالب هدیه‌ای هر چند کوچک  
تقدیم کنم به:

نگاه نگران مادرم  
روح پاک پدرم  
عزم راسخ استاد گرانقدرم، جناب آقای دکتر عبداللهی

## تشکر و قدردانی

الهی!

ای نزدیک‌تر از ما به ما، مهربان‌تر از ما به ما، نوازنده‌ی ما بی‌ما، به کرم خویش نه به سزای ما، هر چه کردیم تاوان بر ما، هر چه تو کردی باقی بر ما، هر چه کردی به جای ما، به خود کردی نه به سزای ما.

آغاز می‌کنم کلامم را با نام مهربانی که هر آنچه دارم از لطف و رحمت اوست.

در ابتدا از استاد ارجمند و معلم بزرگوام جناب آقای دکتر حمید عبداللهی که در طی مراحل تحقیق و تدوین پایان‌نامه همواره همراه و راهنمای من بودند نهایت سپاس و قدردانی را دارم و برای ایشان از خداوند منان توفیق روز افزون و سعادت آروزمندم.

از اساتید گرانقدرم که در محضرشان کسب درس علم و زندگی کردم، آقایان دکتر حقیقی، دکتر کمپانی و دکتر رفیعی ممنون و سپاسگزارم. توفیق و سعادت‌مندی برای ایشان و تمام معلمانم در همه‌ی مقاطع تحصیلی‌ام آرزومندم.

از خانم دکتر زینلی و سایر اساتید مدعو که زحمت داوری پایان‌نامه مرا پذیرفتند سپاس بی‌پایان دارم. از استاد محترم خانم دکتر نظری به خاطر همه‌ی الطافشان صمیمانه متشکرم.

از همه‌ی دوستان و همکلاسی‌های خوبم که روزهای خوب تحصیل و کار را در کنار هم سپری کردیم و شادی آفرین لحظات تحصیلم بودند کمال تشکر را دارم و امیدوارم همواره مورد الطاف بی‌پایان حق باشند.

در نهایت از اولین معلمان زندگیم، مادرم که وجودم از وجود او آرام می‌گیرد و پدرم که ریشه‌ی درخت زندگیم بود سپاس بی‌پایان دارم و از خواهران و برداران عزیزم که همواره همراه و پشتیبان من در زندگی بودند و به من دلگرمی می‌دادند، صمیمانه تشکر می‌کنم و امیدوارم همواره شاد و خرم باشند.

امیدوارم یادگار دوران تحصیلم آغازی باشد برای دیگر راه‌های علمی.

## چکیده

روش تحلیل عامل تفکیکی یکی از روش‌های مدل‌سازی نرم است که به جستجوی ماتریس  $T$  بهینه‌ای می‌پردازد که توسط روابط زیر پروفایل‌های غلطی و طیفی را ایجاد کند،

$$A=UST^{-1} \quad B=TV$$

طوری که این پروفایل‌ها در معادله روبرو صدق کنند.

$$D=AB$$

در روش RFA، بردارهای ویژه چرخیده شده به‌طور تکرار پذیر اصلاح می‌شوند تا از قیدها تبعیت کنند و در نهایت تابع حداقل مربعات را در فرآیند بهینه‌سازی غیر خطی مینیمم کنند؛ الگوریتم نیوتن - گوس - لونبرگ/مارکوات وظیفه بهینه‌سازی غیرخطی در این روش را برعهده دارد.

الگوریتم بهینه‌سازی آشوبناک جمعیت ذرات، تلفیقی از دو الگوریتم تکراری روش بهینه‌سازی جمعیت ذرات (PSO) و الگوریتم جستجوی محلی آشوبناک با ویژگی‌های آشوبناک است.

در این تحقیق، روش RFA و CPSO برای نخستین بار تلفیق و حاصل آنها به عنوان روشی متفاوت با روش‌های موجود در متون کمومتریکس ارائه شده است. این روش به عنوان جایگزینی مناسب برای روش RFA در تفکیک داده‌هایی که حل منحصر به فرد ندارند، پیشنهاد می‌شود. چرا که روش RFA در این موارد واگرا می‌شود درحالی‌که روش پیشنهاد شده به دلیل مزایای CPSO قادر به حل این مسئله است. جهت بررسی این موضوع داده‌های کروماتوگرافی با همپوشانی و سطح نویزهای متفاوت تولید و توسط روش موردنظر تحلیل شدند.

کارایی روش توسط تحلیل داده‌های سه و چهار جزئی شبیه‌سازی شده و آزمایشگاهی بررسی شد. نتایج، توانایی این روش را در تحلیل داده‌های مختلف نشان می‌دهد. همچنین این روش بر خلاف سایر روش‌های مدل‌سازی نرم حتی با تخمین اولیه تصادفی نیز همگرا می‌شود و توانایی تحلیل داده‌های با کمتر از پنج جزء را دارا می‌باشد.

# فهرست

شماره صفحه	فهرست مطالب
۱	فصل اول
۱	مقدمه
۱	۱.۱ کمومتری کس
۲	۱.۲ روش‌های تفکیک منحنی چند متغیره
۳	۱.۲.۱ روش‌های غیر تکراری
۳	۱.۲.۲ روش‌های تکراری
۴	۱.۳ ابهام‌ها
۵	۱.۳.۱ ابهام چرخشی
۵	۱.۳.۲ ابهام شدتی
۵	۱.۴ قیدها
۷	۱.۵ تحلیل عاملی
۸	۱.۵.۱ تجزیه مقادیر منفرد (SVD)
۹	۱.۵.۲ تحلیل عامل تکاملی (EFA)
۱۰	۱.۵.۳ تفکیک منحنی چند متغیره - حداقل مربعات متناوب (MCR-ALS)
۱۱	۱.۵.۴ تحلیل عامل تفکیکی (RFA)
۱۳	۱.۵.۵ الگوریتم نیوتن - گوس (برای برازش پارامترهای غیر خطی)
۱۷	۱.۶ بهینه‌سازی جمعیت ذرات (PSO)
۲۱	۱.۶.۱ وزن اینرسی (w) و عامل وزن اینرسی توافقی (AIWF)
۲۲	۱.۷ تئوری آشوب
۲۴	۱.۷.۱ جستجوی محلی آشوبناک (CLS)
۲۵	۱.۸ بهینه‌سازی آشوبناک جمعیت ذرات (CPSO)
۲۷	فصل دوم
۲۷	مروری بر تحقیقات گذشته
۲۷	۱.۲ مطالعاتی پیرامون بهبود الگوریتم بهینه‌سازی جمعیت ذرات (PSO)
۲۸	۲.۲ تاریخچه‌ای از ورود الگوریتم بهینه‌سازی (PSO) به متون شیمی تجزیه
۲۹	۳.۲ تاریخچه‌ای از روش تحلیل عامل تفکیکی
۳۱	فصل سوم
۳۱	بحث و نتایج

۳۱	۱. مقدمه.....
۳۲	۱.۱. روش گرافیکی تعیین محدوده‌های چرخشی با استفاده از RFA.....
۳۴	۲.۳. بررسی عملکرد RFA.....
۳۴	۱.۲.۳. بررسی عملکرد RFA در سیستم‌های دارای ابهام چرخشی.....
۴۶	۲.۲.۳. بررسی عملکرد RFA در سیستم‌های دارای حل منحصر به فرد.....
۵۴	۳.۲.۳. نتیجه‌گیری.....
۵۳	۴.۲. دلیل ناتوانی الگوریتم نیوتن-گوس-لونبرگ/مارکوات.....
۵۷	۳.۳. راه حل پیشنهادی برای مسئله‌ی واگرایی در روش RFA.....
۵۸	۱.۳.۳. اصلاحاتی در الگوریتم CPSO.....
۶۰	۴. اجرای روش RFA با استفاده از CPSO برای داده‌های دارای ابهام چرخشی.....
۶۵	۵. تفکیک داده‌های مشابه‌سازی شده.....
۶۶	۱.۵.۳. تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی.....
۶۸	۱.۵.۳. تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی دارای نویز با انحراف استانداردهای متفاوت توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۶۹	۲.۱.۵.۳. نتایج تفکیک سیستم کروماتوگرافی سه جزئی دارای نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۱ توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۷۱	۳.۱.۵.۳. تفکیک سیستم کروماتوگرافی سه جزئی دارای نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۵ توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۷۳	۴.۱.۵.۳. تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی دارای نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱.....
۷۶	۵.۱.۵.۳. تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی دارای نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۵ توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۷۸	۶.۱.۵.۳. تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی دارای نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۱ توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۸۰	۷.۱.۵.۳. تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی دارای نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۵ توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۸۲	۲.۵.۳. تفکیک داده‌ی سه جزئی واکنش سینتیکی متوالی، $A \rightarrow B \rightarrow C$ .....
۸۴	۱.۲.۵.۳. تفکیک داده‌ی سه جزئی واکنش سینتیکی متوالی توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۸۴	۲.۲.۵.۳. تفکیک داده‌ی سه جزئی واکنش سینتیکی متوالی توسط روش MCR-ALS.....
۸۷	۳.۵.۳. تفکیک داده‌ی سر هم زده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی فرضی، حاوی نویزی با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱.....
۸۹	۱.۳.۵.۳. تفکیک داده‌ی سر هم زده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی فرضی، حاوی نویزی با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۸۹	۲.۳.۵.۳. تفکیک داده‌ی سر هم زده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی فرضی، حاوی نویزی با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ توسط روش MCR-ALS.....

۹۲	۳.۵. ۴ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی چهار جزئی فرضی.....
۹۴	۳.۵. ۴. ۱ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی چهار جزئی فرضی توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۹۴	۳.۵. ۴. ۲ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی چهار جزئی فرضی توسط روش MCR-ALS.....
۹۷	۳.۶. ۶ تفکیک داده‌های آزمایشگاهی.....
۹۷	۳.۶. ۱. ۱ تفکیک داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی.....
۹۹	۳.۶. ۱. ۱. ۱ تفکیک داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۱۰۱	۳.۶. ۱. ۲ تفکیک داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش MCR-ALS.....
۱۰۳	۳.۶. ۲ تفکیک داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی.....
۱۰۳	۳.۶. ۲. ۱ تفکیک داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۱۰۵	۳.۶. ۲. ۲ تفکیک داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش MCR-ALS.....
۱۰۷	۳.۶. ۳ تفکیک داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه‌ی فلورستین سه جزئی.....
۱۰۹	۳.۶. ۳. ۱ تفکیک داده‌ی آزمایشگاهی چهار جزئی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه‌ی فلورستین سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO.....
۱۱۰	۳.۶. ۳. ۲ تفکیک داده‌ی آزمایشگاهی چهار جزئی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه‌ی فلورستین سه جزئی توسط روش MCR-ALS.....
۱۱۳	۳. نتیجه‌گیری.....
۱۱۴	مراجع.....



## فهرست شکل

شماره صفحه

- شکل ۱-۱: نمودار الگوریتم نیوتن-گوس ..... ۱۶
- شکل ۱-۲: نمایش شماتیکی از فضای جستجوی دو بعدی برای روش PSO که ذرات با دایره نمایش داده شده‌اند، فلش‌ها بردارهای سرعت و مکان ذره و همچنین بردارهای جابجایی تا فاکتورهای  $p_{best}$  و  $g_{best}$  نشان می‌دهند. ۱۹
- شکل ۱-۳: نمودار الگوریتم روش بهینه‌سازی جمعیت ذرات ..... ۲۰
- شکل ۱-۴: رفتار آشوبناک متغیر آشوبناک ( $X = 0/1$ ) در ۳۰۰ تکرار ..... ۲۳
- شکل ۱-۴: رفتار آشوبناک، دو متغیر آشوبناک در ۵۰ تکرار مقایسه شده ( $X = 0/1$ ،  $X = 0/10001$ ،  $X = -$ ) ..... این شکل نمایشی از وابستگی به شرایط اولیه رفتار آشوبناک است، دو متغیر آشوبناک بعد از تکرار دهم رفتار متفاوتی پیدا کرده اند. ۲۳
- شکل ۱-۳: نمایش پروفایل‌های غلطی مشابه‌سازی شده برای داده‌ی فرضی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_) ..... ۳۴
- شکل ۲-۳: نمایش پروفایل‌های طیفی مشابه‌سازی شده برای داده‌ی فرضی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_) ..... ۳۵
- شکل ۳-۳: داده‌ی جذبی ساختگی برای سیستم فرضی کروماتوگرافی دو جزئی که برای آن حل منحصر به فرد وجود ندارد. ۳۵
- شکل ۳-۴: نمایش (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز مربوط به داده‌ی فرضی کروماتوگرافی دو جزئی که برای آن حل منحصر به فرد وجود ندارد. ۳۶
- شکل ۳-۵: منحنی تغییرات  $\log(ssq)$  در مراحل تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA برحسب مراحل روش RFA ..... ۳۸
- شکل ۳-۶: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۱ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=1$ ,  $mp=0$ ,  $ssq=149983$ ) ..... ۳۹
- شکل ۳-۷: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۲ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/786$ ,  $mp=0$ ,  $ssq=31949$ ) ..... ۳۹
- شکل ۳-۸: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۳ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/811$ ,  $mp=0$ ,  $ssq=6013$ ) ..... ۳۹
- شکل ۳-۹: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۴ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/855$ ,  $mp=0$ ,  $ssq=867$ ) ..... ۴۰
- شکل ۳-۱۰: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۵ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/949$ ,  $mp=0$ ,  $ssq=44$ ) ..... ۴۰
- شکل ۳-۱۱: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۶ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز، نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/570$ ,  $mp=0$ ,  $ssq=18$ ) ..... ۴۰

شکل ۳-۱۲: نمایش گرافیکی مرحله ی ۷ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز، نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/222$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=14$ ..... ۴۱

شکل ۳-۱۳: نمایش گرافیکی مرحله ی ۸ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز، نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/338$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=9/71$ ..... ۴۱

شکل ۳-۱۴: نمایش گرافیکی مرحله ی ۹ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/709$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=2/82$ ..... ۴۱

شکل ۳-۱۵: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۰ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/795$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=0/577$ ..... ۴۲

شکل ۳-۱۶: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۱ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/769$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=0/133$ ..... ۴۲

شکل ۳-۱۷: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۲ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/660$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=0/45$ ..... ۴۲

شکل ۳-۱۸: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۳ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/33$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=0/302$ ..... ۴۳

شکل ۳-۱۹: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۴ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/83$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=0/276$ ..... ۴۳

شکل ۳-۲۰: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۵ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/13$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=0/273$ ..... ۴۳

شکل ۳-۲۱: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۶ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=0/4$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=0/271$ ..... ۴۴

شکل ۳-۲۲: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۷ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=-61/104$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=1/687$ ..... ۴۴

شکل ۳-۲۳: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۸ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=1/054$ ،  $mp=1$ ،  $ssq=0/271$ ..... ۴۴

شکل ۳-۲۴: نمایش گرافیکی مرحله ی ۱۹ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=-61/104$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=1/687$ ..... ۴۵

شکل ۳-۲۵: نمایش گرافیکی مرحله ی ۲۰ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=1/056$ ،  $mp=1$ ،  $ssq=0/271$ ..... ۴۵

شکل ۳-۲۶: نمایش گرافیکی مرحله ی ۲۱ تفکیک داده ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نداشت خطای این داده  $conv\_crit=-61/104$ ،  $mp=0$ ،  $ssq=1/687$ ..... ۴۵

شکل ۳-۲۷: پروفایل های غلظتی ساختگی برای داده ی فرضی کروماتوگرافی دو جزئی که دارای حل منحصر به فرد است (گونه ی اول \_\_، گونه ی دوم \_\_)..... ۴۶

شکل ۳-۲۸: پروفایل‌های طیفی ساختگی برای داده‌ی فرضی کروماتوگرافی دو جزئی که دارای حل منحصر به فرد است. (گونه‌ی اول \_\_، گونه‌ی دوم \_\_)..... ۴۷

شکل ۳-۲۹: داده‌ی جذبی ساختگی برای داده‌ی فرضی کروماتوگرافی دو جزئی که دارای حل منحصر به فرد است..... ۴۷

شکل ۳-۳۰: نمایش (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز مربوط به داده‌ی فرضی کروماتوگرافی دو جزئی که برای آن حل به فرد وجود دارد..... ۴۸

شکل ۳-۳۱: منحنی تغییرات  $\log(ssq)$  در تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA برحسب مراحل روش RFA..... ۴۹

شکل ۳-۳۲: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۱ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=1$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=11998$ )..... ۵۰

شکل ۳-۳۳: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۲ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/785$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=2574$ )..... ۵۰

شکل ۳-۳۴: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۳ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/81$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=478$ )..... ۵۰

شکل ۳-۳۵: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۴ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/86$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=64/03$ )..... ۵۱

شکل ۳-۳۶: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۵ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/94$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=3/45$ )..... ۵۱

شکل ۳-۳۷: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۶ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/97$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=0/0806$ )..... ۵۱

شکل ۳-۳۸: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۷ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/63$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=0/0293$ )..... ۵۲

شکل ۳-۳۹: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۸ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=0/046$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=0/028$ )..... ۵۲

شکل ۳-۴۰: نمایش گرافیکی مرحله‌ی ۹ تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز، نگاشت خطای این داده ( $conv\_crit=2/78 \times 10^{-6}$ ,  $amp=0$ ,  $ssq=0/028$ )..... ۵۲

شکل ۳-۴۱: پروفایل‌های نرمال غلظتی داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد، \_\_ پروفایل‌های حاصل از تفکیک این داده توسط روش RFA، ..... پروفایل‌های مشابه‌سازی شده..... ۵۳

شکل ۳-۴۲: پروفایل‌های نرمال طیفی داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد، \_\_ پروفایل‌های حاصل از تفکیک این داده توسط روش RFA، ..... پروفایل‌های مشابه‌سازی شده..... ۵۳

شکل ۳-۴۳: نمایش گرافیکی اولین مرحله‌ی الگوریتم CPSO (مرحله‌ی ۱ از تکرار الگوریتم PSO) در تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA با استفاده از CPSO روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده..... ۶۲

شکل ۳-۴۴: نمایش گرافیکی اولین مرحله‌ی الگوریتم CPSO (مرحله‌ی ۲ از تکرار الگوریتم PSO) در تفکیک داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA با استفاده از CPSO روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ..... ۶۲

شکل ۳-۴۵: نمایش گرافیکی اولین مرحله‌ی الگوریتم CPSO (مرحله‌ی ۳ از تکرار الگوریتم PSO) در تفکیک سیستم کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA با استفاده از CPSO روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ..... ۶۲

شکل ۳-۴۶: نمایش گرافیکی اولین مرحله‌ی الگوریتم CPSO (مرحله‌ی ۴ از تکرار الگوریتم PSO) تفکیک داده کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA با استفاده از CPSO روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ..... ۶۳

شکل ۳-۴۷: نمایش گرافیکی اولین مرحله‌ی الگوریتم CPSO (مرحله‌ی ۵ از تکرار الگوریتم PSO) تفکیک داده کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA با استفاده از CPSO روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ..... ۶۳

شکل ۳-۴۸: نمایش گرافیکی اولین مرحله‌ی الگوریتم CPSO (مرحله‌ی ۶ از تکرار الگوریتم PSO) تفکیک داده کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA با استفاده از CPSO روی (۱) - سطح، (۲) - سطح تراز نگاشت خطای این داده ..... ۶۳

شکل ۳-۴۹: پروفایل‌های نرمال غلظتی داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی، \_\_\_ پروفایل‌های حاصل از تفکیک این داده توسط روش RFA با استفاده از CPSO، ..... پروفایل‌های مشابه‌سازی شده ..... ۶۴

شکل ۳-۵۰: پروفایل‌های نرمال طیفی داده‌ی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی، \_\_\_ پروفایل‌های حاصل از تفکیک این داده توسط روش RFA با استفاده از CPSO، ..... پروفایل‌های مشابه‌سازی شده ..... ۶۴

شکل ۳-۵۱: نمایش پروفایل‌های غلظتی مشابه‌سازی شده برای داده‌ی فرضی کروماتوگرافی سه جزئی، (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۶۷

شکل ۳-۵۲: نمایش پروفایل‌های طیفی مشابه‌سازی شده برای داده‌ی فرضی کروماتوگرافی سه جزئی، (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۶۷

شکل ۳-۵۳: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی سیستم کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۱ ..... ۶۹

شکل ۳-۵۴: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۱ توسط روش RFA با استفاده از CPSO (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۷۰

شکل ۳-۵۵: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۱ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO، \_\_\_ پروفایل‌های مشابه‌سازی شده ..... ۷۰

شکل ۳-۵۶: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی سیستم کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۵ ..... ۷۱

- شکل ۳-۵۷: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۵ توسط روش RFA با استفاده از CPSO (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_ \_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۷۲
- شکل ۳-۵۸: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۰۵ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO \_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده ..... ۷۲
- شکل ۳-۵۹: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی سیستم کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ ..... ۷۳
- شکل ۳-۶۰: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ توسط روش RFA با استفاده از CPSO (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_ \_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۷۴
- شکل ۳-۶۱: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO \_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده ..... ۷۴
- شکل ۳-۶۲: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ توسط روش MCR-ALS (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_ \_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۷۵
- شکل ۳-۶۳: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش MCR-ALS \_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده ..... ۷۵
- شکل ۳-۶۴: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی سیستم کروماتوگرافی سه جزئی حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۵ ..... ۷۶
- شکل ۳-۶۵: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۵ توسط روش RFA با استفاده از CPSO (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_ \_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۷۷
- شکل ۳-۶۶: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۵ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO \_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده ..... ۷۷
- شکل ۳-۶۷: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی سیستم کروماتوگرافی سه جزئی حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ ..... ۷۸
- شکل ۳-۶۸: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ توسط روش RFA با استفاده از CPSO (گونه‌ی اول \_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_ \_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_) ..... ۷۹

- شکل ۳-۶۹: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۱ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO \_\_\_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده .....). ۷۹
- شکل ۳-۷۰: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی سیستم کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۵ ..... ۸۰
- شکل ۳-۷۱: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۵ توسط روش RFA با استفاده از CPSO ..... ۸۱
- شکل ۳-۷۲: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۵ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO \_\_\_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده .....). ۸۱
- شکل ۳-۷۳: پروفایل‌های غلظتی مدل شده برای واکنش سینتیکی متوالی،  $A \rightarrow B \rightarrow C$ ، (A) \_\_\_\_\_، B \_\_\_\_\_، C \_\_\_\_\_ ..... ۸۲
- شکل ۳-۷۴: پروفایل‌های طیفی مدل شده برای واکنش سینتیکی متوالی،  $A \rightarrow B \rightarrow C$ ، (A) \_\_\_\_\_، B \_\_\_\_\_، C \_\_\_\_\_ ..... ۸۳
- شکل ۳-۷۵: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی برای واکنش سینتیکی متوالی،  $A \rightarrow B \rightarrow C$ ، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ ..... ۸۳
- شکل ۳-۷۶: (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سینتیکی متوالی،  $A \rightarrow B \rightarrow C$  توسط روش RFA با استفاده از CPSO (A) \_\_\_\_\_، B \_\_\_\_\_، C \_\_\_\_\_ ..... ۸۵
- شکل ۳-۷۷: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی سینتیکی متوالی،  $A \rightarrow B \rightarrow C$  (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO \_\_\_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده .....). ۸۵
- شکل ۳-۷۸: (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سینتیکی متوالی،  $A \rightarrow B \rightarrow C$  توسط روش MCR-ALS (A) \_\_\_\_\_، B \_\_\_\_\_، C \_\_\_\_\_ ..... ۸۶
- شکل ۳-۷۹: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی سینتیکی متوالی،  $A \rightarrow B \rightarrow C$  (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش MCR-ALS \_\_\_\_\_، پروفایل‌های مشابه‌سازی شده .....). ۸۶
- شکل ۳-۸۰: نمایش پروفایل‌های غلظتی سر هم زده شده‌ی داده‌های فرضی کروماتوگرافی سه جزئی، (گونه‌ی اول \_\_\_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_\_\_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_\_\_). ۸۷
- شکل ۳-۸۱: نمایش دومین داده‌ی جذبی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ ..... ۸۸
- شکل ۳-۸۲: نمایش داده‌ی سر هم زده شده‌ی داده‌های فرضی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ ..... ۸۸
- شکل ۳-۸۳: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سر هم زده‌ی کروماتوگرافی دارای سه جز، با نویزی با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ توسط روش RFA با استفاده از CPSO (گونه‌ی اول \_\_\_\_\_، گونه‌ی دوم \_\_\_\_\_، گونه‌ی سوم \_\_\_\_\_). ۹۰

شکل ۳-۸۴: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی سر هم زده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO) پروفایل‌های مشابه‌سازی شده (.....) ۹۰.....

شکل ۳-۸۵: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سر هم زده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ توسط روش MCR-ALS (گونه‌ی اول) ، گونه‌ی دوم - - ، گونه‌ی سوم - - . ۹۱.....

شکل ۳-۸۶: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی سر هم زده‌ی کروماتوگرافی سه جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش MCR-ALS) پروفایل‌های مشابه‌سازی شده (.....) ۹۱.....

شکل ۳-۸۷: نمایش پروفایل‌های غلظتی مشابه‌سازی شده برای سیستم فرضی کروماتوگرافی چهار جزئی، (گونه‌ی اول - - ، گونه‌ی دوم - - ، گونه‌ی سوم - - ، گونه‌ی چهارم .....). ۹۲.....

شکل ۳-۸۸: نمایش پروفایل‌های طیفی مشابه‌سازی شده برای سیستم فرضی کروماتوگرافی چهار جزئی، (گونه‌ی اول - - ، گونه‌ی دوم - - ، گونه‌ی سوم - - ، گونه‌ی چهارم .....). ۹۳.....

شکل ۳-۸۹: نمایش داده‌ی جذبی ساختگی سیستم کروماتوگرافی چهار جزئی، حاوی نویز با انحراف استاندارد ۰/۰۰۱ ۹۳.....

شکل ۳-۹۰: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی چهار جزئی، توسط روش RFA با استفاده از CPSO (گونه‌ی اول - - ، گونه‌ی دوم - - ، گونه‌ی سوم - - ، گونه‌ی چهارم .....). ۹۵.....

شکل ۳-۹۱: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی چهار جزئی، (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش RFA با استفاده از CPSO) پروفایل‌های مشابه‌سازی شده (.....) ۹۵.....

شکل ۳-۹۲: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی کروماتوگرافی چهار جزئی توسط روش MCR-ALS (گونه‌ی اول - - ، گونه‌ی دوم - - ، گونه‌ی سوم - - ، گونه‌ی چهارم .....). ۹۶.....

شکل ۳-۹۳: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی کروماتوگرافی چهار جزئی، (پروفایل‌های تفکیک شده توسط روش MCR-ALS) پروفایل‌های مشابه‌سازی شده (.....) ۹۶.....

شکل ۳-۹۴: ترسیم داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی (فنیتروتیون، آزینوفوس-اتیل و مزاحم) ۹۸.....

شکل ۳-۹۵: طیف‌های دو گونه‌ی معلوم در داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی، (فنیتروتیون - - ، آزینوفوس-اتیل - - ) ۹۸.....

شکل ۳-۹۶: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی متناظر تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO (فنیتروتیون - - ، آزینوفوس-اتیل - - ، مزاحم - - ) ۱۰۰.....

شکل ۳-۹۷: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO (فنیتروتیون - - ، آزینوفوس-اتیل - - ، مزاحم - - ) ۱۰۰.....

شکل ۳-۹۸: نمایش پروفایل‌های (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO با اعمال طیف معلوم (فنیتروتیون \_\_\_، آزیئوفوس-اتیل \_\_\_، مزاحم \_\_\_) ..... ۱۰۱

شکل ۳-۹۹: نمایش پروفایل‌های (۱) غلظتی، (۲) طیفی داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش MCR-ALS (فنیتروتیون \_\_\_، آزیئوفوس-اتیل \_\_\_، مزاحم \_\_\_) ..... ۱۰۲

شکل ۳-۱۰۰: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش MCR-ALS (فنیتروتیون \_\_\_، آزیئوفوس-اتیل \_\_\_، مزاحم \_\_\_) ..... ۱۰۲

شکل ۳-۱۰۱: ترسیم اولین داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی (دی آزیئون، پاراتیون-اتیل و مزاحم) ..... ۱۰۳

شکل ۳-۱۰۲: ترسیم دومین داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی (دی آزیئون، پاراتیون-اتیل و مزاحم) ..... ۱۰۴

شکل ۳-۱۰۳: طیف‌های دو گونه‌ی معلوم در داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم کروماتوگرافی سه جزئی، (دی آزیئون \_\_\_، پاراتیون-اتیل - - -) ..... ۱۰۴

شکل ۳-۱۰۴: ترسیم داده‌ی جذبی حاصل از سر هم زدن دو داده‌ی آزمایشگاهی مربوط به سیستم کروماتوگرافی سه جزئی موجود در شکل‌های (۳-۱۰۱) و (۳-۱۰۲) که تفاوت آنها در نسبت‌های غلظتی است. .... ۱۰۵

شکل ۳-۱۰۵: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی متناظر تفکیک شده از داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO (دی آزیئون \_\_\_، پاراتیون-اتیل - - -، مزاحم ..... ۱۰۶

شکل ۳-۱۰۶: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO (دی آزیئون \_\_\_، پاراتیون-اتیل - - -، مزاحم ..... ۱۰۶

شکل ۳-۱۰۷: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش RFA با استفاده از CPSO با اعمال طیف معلوم (دی آزیئون \_\_\_، پاراتیون-اتیل - - -، مزاحم ..... ۱۰۷

شکل ۳-۱۰۸: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش MCR-ALS (دی آزیئون \_\_\_، پاراتیون-اتیل - - -، مزاحم ..... ۱۰۸

شکل ۳-۱۰۹: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی سر هم زده‌ی آزمایشگاهی کروماتوگرافی سه جزئی توسط روش MCR-ALS (دی آزیئون \_\_\_، پاراتیون-اتیل - - -، مزاحم ..... ۱۰۸

شکل ۳-۱۱۰: ترسیم داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه‌ی فلورستین شامل چهار جز (F<sup>+</sup>, FH<sup>+</sup>, FH<sub>2</sub><sup>+</sup>, FH<sub>3</sub><sup>+</sup>) ..... ۱۰۹

شکل ۳-۱۱۱: نمایش (۱) پروفایل‌های غلظتی، (۲) طیفی متناظر تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه توسط روش RFA با استفاده از CPSO (FH<sub>3</sub><sup>+</sup> \_\_\_، FH<sub>2</sub><sup>+</sup> o o o، FH<sup>-</sup> × × ×، F<sup>+</sup> ..... ۱۱۱



شکل ۳-۱۱۲: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه توسط روش RFA با استفاده از CPSO ( $FH_3^+$ ،  $FH_2$ ،  $FH^-$ ،  $F^-$ )..... ۱۱۱

شکل ۳-۱۱۳: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه توسط روش MCR-ALS ( $FH_3^+$ ،  $FH_2$ ،  $FH^-$ ،  $F^-$ )..... ۱۱۲

شکل ۳-۱۱۴: نمایش پروفایل‌های نرمال (۱) غلظتی، (۲) طیفی تفکیک شده از داده‌ی آزمایشگاهی حاصل از سیستم تعادلی اسید سه پروتونه توسط روش MCR-ALS ( $FH_3^+$ ،  $FH_2$ ،  $FH^-$ ،  $F^-$ )..... ۱۱۲

## فهرست جدول

## شماره صفحه

جدول ۱-۳: نتایج و پارامترهای مراحل تفکیک سیستم فرضی کروماتوگرافی دو جزئی دارای ابهام چرخشی توسط روش RFA .....	۵۶
جدول ۲-۳: نتایج و پارامترهای مراحل تفکیک سیستم فرضی کروماتوگرافی دو جزئی دارای حل منحصر به فرد توسط روش RFA .....	۵۷
جدول (۳-۳): نتایج و شرایط تفکیک داده‌های کروماتوگرافی سه جزئی، با انحراف استاندارد نویز متفاوت توسط روش RFA با استفاده از CPSO .....	۶۸

# فصل اول

## مقدمه

### ۱.۱ کمومتریکس [۱]

واژه‌ی کمومتریکس<sup>۱</sup> اولین بار در سال ۱۹۷۱ ابداع شد که بیانگر رشد استفاده از مدل‌های ریاضی، اصول آماری و سایر روش‌های بر پایه منطق در شاخه‌ی شیمی به ویژه شیمی تجزیه است. یک نظام بین رشته‌ای که آمار چند متغیره، مدل کردن ریاضی، علم کامپیوتر و شیمی تجزیه را در بر می‌گیرد. در سال‌های اخیر، رشد کمومتریکس حاصل رشد عموم آمار، کامپیوتر و افزایش حجم اطلاعات است. پیشرفت سریع فناوری به‌طور خاص در سطح دستگاه‌های کامپیوتری برای شیمی تجزیه باعث رشد چشمگیر شاخه‌ی کموتریس طی ۴ دهه‌ی اخیر شده است. وجود جهان چند متغیره الهام بخشی برای اندازه‌گیری‌های چند متغیره به‌طور همزمان در فرآیندهای تحلیلی است، طوری که در این دوره بیشتر توجه روی روش‌های چند متغیره<sup>۲</sup> تمرکز داشته است. ملاحظه‌ی مناسب پخش پارامترهای چند متغیره اطلاعات بیشتری نسبت به مشاهده‌ی یک متغیر تنها ایجاد می‌کند. مزایا استفاده از روش‌های چند متغیره:

- ۱- کاهش نویز وقتی متغیرهای وابسته به‌طور همزمان بررسی می‌شوند.
  - ۲- اندازه‌گیری‌های گزینش‌پذیر انجام می‌شوند و نتایج می‌تواند بی‌تأثیر از اثرات سیگنال‌های مزاحم باشد.
  - ۳- نمونه‌های غلط<sup>۳</sup> به راحتی تشخیص داده می‌شوند، چرا که رفتاری متفاوت با بقیه‌ی نمونه‌ها خواهند داشت.
- در ادامه روش‌هایی را که به تفکیک داده‌های چند متغیره می‌پردازند، شرح خواهیم داد.

---

<sup>۱</sup> Multivariate methods

<sup>۲</sup> Chemometrics

<sup>۳</sup> False samples

## ۲.۱ روش‌های تفکیک منحنی چند متغیره<sup>۱</sup> [۱]

اولین بار روش‌های تفکیک منحنی [۲ و ۳] در پاسخ نیاز به ابزاری برای تحلیل ماتریس داده چند متغیره [۴ و ۵] حاصل از کار آزمایشگاهی در سیستم‌های دینامیکی چند جزئی به وجود آمدند. همه‌ی روش‌های تفکیک با استفاده از سیگنال کل مخلوط‌ها، تعداد اجزا و سهم‌های مربوط به اجزای خالص در سیستم مورد بررسی را تعیین می‌کنند [۶-۱۴]. سیگنال دستگاهی به صورت یک ماتریس سازمان‌دهی می‌شود که هر سطر ماتریس اندازه‌گیری همه‌ی اجزای حاضر در مخلوط را در بر می‌گیرد. اساس این روش‌ها تفکیک ماتریس داده به دو یا چند ماتریس دیگر است که با رابطه‌ی زیر نمایش داده می‌شود.

(۱-۱)

$$\mathbf{D} = \mathbf{A}\mathbf{B}^t + \mathbf{R}$$

$$ns \begin{matrix} n\lambda \\ \mathbf{D} \end{matrix} = \begin{matrix} nc \\ \mathbf{A} \end{matrix} \times \begin{matrix} n\lambda \\ \mathbf{B} \end{matrix} + ns \begin{matrix} n\lambda \\ \mathbf{R} \end{matrix}$$

$ns$  و  $n\lambda$  به ترتیب تعداد متغیرهای سطر و ستون،  $nc$  تعداد اجزای شیمیایی موجود در سیستم هستند.

$\mathbf{D}$  ماتریس داده حاصل از سیگنال دستگاهی (ماتریس داده) و  $\mathbf{A}$  و  $\mathbf{B}^t$  شامل سیگنال‌های خالص اجزای مخلوط در جهات ستون و سطرها‌ی ماتریس داده‌ی اولیه می‌باشد.  $\mathbf{R}$  ماتریس هم اندازه با ماتریس داده است که ماتریس باقیمانده نام دارد و تغییرات آن مربوط به سهم شیمیایی نمی‌شود و معمولاً مربوط به نویز دستگاهی است. در مسائل جذبی ماتریس‌های  $\mathbf{A}$  و  $\mathbf{B}^t$  اغلب نمایانگر پروفایل‌های غلظتی و طیفی هستند.

این روش‌ها از ارزش زیادی برای تفکیک سیستم‌های پیچیده برخوردارند، به ویژه وقتی که سیگنال‌های انتخابی برای گونه‌های مجزا از نظر آزمایشگاهی ممکن نیست یا خیلی پیچیده و زمان‌بر است.

چندین روش هدف بالا را میسر می‌کنند که به عنوان روش‌های مدل‌سازی نرم<sup>۲</sup> یا روش‌های مستقل از مدل<sup>۳</sup> یا خود مدل‌سازی<sup>۱</sup> شناخته می‌شوند. مشخصه‌ی بارز آنها عدم نیاز به مدل شیمیایی جهت تحلیل و تفکیک ماتریس داده‌هاست.

<sup>۱</sup> Multivariate curve resolution methods

<sup>۲</sup> Soft modeling

<sup>۳</sup> Model-free analysis