



دانشکده شیمی  
گروه شیمی تجزیه

پایان نامه

جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد رشته شیمی تجزیه

عنوان:

ارائه روش افزایش استاندارد بر مبنای سیگنال خالص آنالیت و کاربرد آن در اندازه گیری  
همزمان برخی از کاتیونها به روش ولتامتری عاری سازی آندی

**Presentation of NAS-standard addition method and its application for  
simultaneous determination of some heavy metals by DPASV**

اساتید راهنما:

آقای دکتر میر رضا مجیدی

آقای دکتر کریم اسدپورزینالی

استاد مشاور:

آقای عبدالحسین ناصری شکرلو

پژوهشگر:

سمیرا جعفری

مهر ۱۳۸۸

این پایان نامه را تقدیم می کنم به  
پدر و مادر عزیز و مهربانم

## با تشکر از

- جناب آقای دکتر میر رضا مجیدی و جناب آقای دکتر اسدپورزینالی که زحمت راهنمایی این پایان نامه را بر عهده داشتند.
- جناب آقای دکتر عبدالحسین ناصری که زحمت مشاوره این پایان نامه را به عهده داشته‌اند.
- جناب آقای دکتر علی پور که زحمت داوری این پایان نامه را به عهده داشتند.
- اساتید محترم گروه شیمی تجزیه و همچنین کلیه اساتید دانشکده شیمی ریاست، معاونت و مسئولین محترم دانشکده شیمی
- کارکنان بخش اداری دانشکده شیمی بویژه کارکنان محترم گروه شیمی تجزیه
- دانشجویان تحصیلات تکمیلی آزمایشگاه‌های الکتروشیمی پیشرفته و کمومتریکس

نام خانوادگی دانشجو: جعفری	نام: سمیرا
عنوان پایاننامه: ارائه روش افزایش استاندارد بر مبنای سیگنال خالص آنالیت و کاربرد آن در اندازه گیری همزمان برخی از کاتیونها به روش ولتامتری عاری سازی آندی	
استاد راهنما: آقای دکتر کریم اسدپور زینالی، آقای دکتر میر رضا مجیدی استاد مشاور: آقای دکتر عبدالحسین ناصری شکرلو	
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد رشته: شیمی گرایش: تجزیه دانشگاه: تبریز دانشکده: شیمی	
کلید واژه: کمومتریکس، افزایش استاندارد بر مبنای سیگنال خالص آنالیت، الکتروشیمی، چکیده:	
<p>عناصر در بدن انسان و موجودات به ویژه در ساختار هورمونی و آنزیمی نقش بسزایی را ایفا می کنند. از طرفی به دلیل حضور همزمان عناصر مختلف در محیط های گوناگون اندازه گیری همزمان آنها در کنار یکدیگر حائز اهمیت است. روش ولتامتری عاری سازی آندی یک روش حساس برای اندازه گیری مقادیر جزئی عناصر در محیط آبی و غیر آبی می باشد ولی در صورتی که دماغه ترکیبات دارای همپوشانی باشند، امکان اندازه گیری عناصر در کنار هم توسط این روش وجود ندارد، بنابراین برای رفع اثرات مزاحمت گونه های مختلف و همپوشانی ولتاموگرامهای آنها روشهای کمومتریکس به کار برده می شوند. روش افزایش استاندارد بر اساس مفهوم سیگنال خالص آنالیت به عنوان روش جدید کمومتریکس برای اندازه گیری همزمان ترکیبات و رفع مزاحمت ها ارائه می شود. در کار پژوهشی حاضر اندازه گیری همزمان کاتیونهای <math>Pb^{+2}</math> و <math>Sn^{+2}</math> که پلاروگرامهای آنها با یکدیگر همپوشانی شدیدی دارند، به روش DPASV بر پایه مفهوم سیگنال خالص آنالیت انجام گرفت. روش DPASV روش بسیار حساس، با انتخابگری بالا و با هزینه کم</p>	

برای اندازه‌گیری مقادیر جزئی عناصر در محیط می‌باشد بنابراین اندازه‌گیری همزمان قلع و سرب توسط روش NAS-SAM تحت شرایط بهینه شامل محیط با قدرت اسیدی ۱، پتانسیل جمع‌آوری  $700\text{ mV}$ ، زمان جمع‌آوری  $60\text{ s}$ ، دامنه پالس  $100\text{ mV}$ ، سرعت روبش  $20\text{ mV/s}$  و سرعت هم‌زدن  $2000\text{ rpm}$  انجام گرفت و در نهایت جمع‌پذیری ولتاموگرامها حاصل شد که این جمع‌پذیری مهمترین فاکتور برای روش NAS-SAM می‌باشد. اندازه‌گیری همزمان کاتیونها توسط روشهای مختلف چند متغیره انجام داده شد و نتیجه اینکه بین روشهای چند متغیره PCR، PLS، HLA، HLA-XS و NAS-SAM خطای مربوط به روش اخیر خیلی کمتر از بقیه روشها بوده و نتایج بهتری در ارتباط با اندازه‌گیری همزمان عناصر مورد نظر در اختیار ما قرار می‌دهد. روش جذب اتمی نیز بعنوان روش استاندارد برای اندازه‌گیری نمونه حقیقی (آب رودخانه آجی‌چای) به کار برده شد و نتیجه اینکه تفاوت خیلی معنی داری بین داده‌ها وجود نداشت. اسپایک بر روی نمونه حقیقی نیز بیانگر این بود که روش ارائه شده روش بسیار خوبی برای اندازه‌گیری همزمان کاتیونها با خطای حداقل می‌باشد.

در نهایت بدین نتیجه می‌توان رسید که با توجه به نتایج بدست آمده روش NAS-SAM یک روش خوب برای اندازه‌گیری همزمان کاتیونها در حضور همدیگر با کمترین خطا می‌باشد.

## فصل اول: بررسی منابع

۱	۱-۱) روشهای کمومتریکس
۲	۲-۱) انواع روشهای کالیبراسیون
۲	۱-۲-۱) کالیبراسیون کلاسیک (تک متغیره)
۳	۲-۲-۱) روش های کالیبراسیون چند متغیره
۶	۱-۲-۲-۱) آنالیز اجزا اصلی و مجموع مربعات جزئی
۸	۲-۲-۲-۱) سیگنال خالص آنالیت
۱۱	۳-۲-۲-۱) کاربردهای سیگنال خالص آنالیت
۱۱	۳-۲-۱) روش افزایش استاندارد نقطه H (HPSAM)
۱۴	۴-۲-۱) روشهای مبتنی بر سیگنال خالص آنالیت
۱۴	۱-۴-۲-۱) روش آنالیز خطی هیبرید
۱۵	۲-۴-۲-۱) روش HLA/GO
۱۵	۳-۴-۲-۱) روش افزایش استاندارد براساس NAS
۱۶	۵-۲-۱) تعریف زیر فضا
۱۸	۶-۲-۱) الگوریتم کالیبراسون و پیش بینی

۲۱	۷-۲-۱) محاسبه کمیتهای اساسی (ارقام شایستگی) به کمک NAS
۲۱	انتخابگری (۱-۷-۲-۱)
۲۲	نسبت سیگنال به نویز (۲-۷-۲-۱)
۲۱	حساسیت (۳-۷-۲-۱)
۲۲	حد تشخیص (۴-۷-۲-۱)
۲۳	۳-۱) سرب و روشهای اندازه گیری آن
۲۳	۱-۳-۱) شیمی سرب
۲۳	۴-۱) قلع و روشهای اندازه گیری آن
۲۳	۱-۴-۱) تاریخچه قلع
۲۳	۲-۴-۱) شیمی قلع
۲۴	۳-۴-۱) اهمیت اندازه گیری قلع
۲۵.	۴-۴-۱) روشهای اندازه گیری قلع
۲۵	۱-۴-۴-۱) روشهای اسپکتروسکوپی
۲۵	۲-۴-۴-۱) روشهای الکتروشیمیایی
۳۲	۵-۱) هدف از کار پژوهشی حاضر

## فصل دوم: مواد و روشها

- ۳۳ (۱-۲) وسایل و ابزار
- ۳۳ (۲-۲) طرز تهیه محلولهای شیمیایی مورد نظر
- ۳۳ (۱-۲-۲) محلول مادر سرب
- ۳۵ (۲-۲-۲) محلول مادر قلع
- ۳۵ (۳-۲-۲) محلول بافر اسید کلریدریک
- ۳۵ (۴-۲-۲) محلول بافر بریتون رایبسون
- ۳۶ (۵-۲-۲) محلول بافر فسفات
- ۳۷ (۳-۲) محلولهای استاندارد
- ۳۷ (۴-۲) نرم افزارهای مورد استفاده
- ۳۷ (۵-۲) تهیه محلولهای سری کالیبراسیون و پیش بینی

## فصل سوم: نتایج و بحث

- ۴۰ (۱-۳) مطالعه رفتار الکتروشیمیایی قلع و سرب بر روی الکتروود قطره جیوه آویزان
- ۴۱ (۲-۳) تاثیر پارامترهای مختلف در اندازه گیری همزمان قلع و سرب
- ۴۱ (۱-۲-۳) بررسی اثر بافر
- ۴۲ (۲-۲-۳) اثر پتانسیل ترسیب بر روی پیک



- ۴۴ اثر سرعت روبش و ارتفاع پالس (۳-۲-۳)
- ۴۶ اثر سرعت روبش (۴-۲-۳)
- ۴۷ محدوده خطی غلظت قلع و سرب (۵-۲-۳)
- ۵۰ بررسی جمع‌پذیری ولتاموگرامهای قلع و سرب (۶-۲-۳)
- ۵۲ (۳-۳) اندازه‌گیری همزمان قلع و سرب به روش کالیبراسیون چند متغیره PCR و PLS
- ۱-۳-۳ ترکیبات غلظتی نمونه‌های کالیبراسیون و پیش‌بینی در اندازه‌گیری همزمان قلع و سرب
- ۲-۳-۳ کاربرد تکنیکهای PCR و PLS در اندازه‌گیری همزمان قلع و سرب در نمونه‌های سنتزی و حقیقی با روش ASV
- ۳-۳-۳ معایب روش PCR و PLS و انتخاب تعداد PC ها در مرحله کالیبراسیون و پیش‌بینی و تعداد زیاد سری کالیبراسیون
- ۴-۳ ارائه روش NAS-SAM برای اندازه‌گیری همزمان
- ۱-۴-۳ مدلسازی با مزاحمت یک گونه
- ۲-۴-۳ ایجاد زیرفضای فاقد سهم A
- ۵-۳ ارائه روش افزایش استاندارد بر مبنای سیگنال خالص آنالیت و کاربرد آن بر روی داده‌های شبیه‌سازی شده در MATLAB

۳-۶) اندازه‌گیری نمونه حقیقی توسط روش استاندارد اسپکتروسکوپی جذب اتم (AAS) و

۷۹

روش ASV

۸۳

نتیجه‌گیری

۸۴

پیشنهادات برای کارهای بعدی

## فهرست شکل‌ها

- شکل (۱-۱) مشکل انتخابگری در اسپکتروسکوپی NIR (a) طیف NIR... ۴
- شکل (۲-۱) دو ولتاموگرام (a) دارای عدم همپوشانی (b) دارای... ۸
- شکل (۳-۱) سیگنال خالص آنالیت ۹
- شکل (۴-۱) نمودار جذب بر حسب طول موج برای گونه X و Y ۱۲
- شکل (۵-۱) توصیف گرافیکی روش تعریف فضای گونه های مزاحم ... ۱۷
- شکل (۱-۲) ترکیب غلظتی نمونه‌ها ۳۸
- شکل (۱-۳) ASV پلاروگرام حاصل از: (a) قلع به غلظت ۱۰۰ppm (b) سرب... ۴۱
- شکل (۲-۳) ولتاموگرام Asdpv بدست آمده از (a) ۱۰۰ ppm قلع ... ۴۳
- شکل (۳-۳) (a) پلاروگرام مربوط به بررسی ارتفاع پالس Sn (b) پلاروگرام ... ۴۵
- شکل (۴-۳) نمودار تغییرات شدت جریان ولتاموگرام ASV نسبت به سرعت روبش... ۴۶
- شکل (۵-۳) ASV حاصل از افزایش استاندارد سرب ... ۴۸
- شکل (۶-۳) نمودار کالیبراسیون مربوط به جریانهای سرب ۴۸
- شکل (۷-۳) ASV گرام‌های حاصل از افزایش استاندارد قلع ۴۹
- شکل (۸-۳) نمودار کالیبراسیون مربوط به جریانهای قلع ۵۰
- شکل (۹-۳) پلاروگرام قلع و سزب و مجموع آنها ۵۱
- شکل (۱۰-۳) ترکیب غلظتی نمونه های سری کالیبراسیون (♦) و پیش بینی (.) ۵۲

- ۵۳ شکل (۱۱-۳) نمودار PRESS برای Pb بر حسب تعداد فاکتورهای انتخابی
- ۵۴ شکل (۱۲-۳) نمودار PRESS برای Sn بر حسب تعداد فاکتورهای انتخابی
- ۵۴ شکل (۱۳-۳) نمودار PRESS برای Pb با روشهای متفاوت
- ۵۵ شکل (۱۴-۳) نمودار PRESS برای Sn با روشهای متفاوت
- ۵۶ شکل (۱۵-۳) نمودار Score برای مخلوطهای دوتایی قلع و سرب به روش ولتامتری
- ۶۵ شکل (۱۶-۳) a) ولتاموگرام مدلسازی شده گونه A و B در Matlab
- ۶۶ شکل (۱۷-۳) a) ولتاموگرام مدلسازی شده حاصل از مخلوط A و B
- ۶۷ شکل (۱۸-۳) a) ولتاموگرام مدلسازی شده گونه A و B و C
- ۶۸ شکل (۱۹-۳) a) زیر فضای حاصل از حذف سهم گونه A از ماتریس داده ها
- ۶۹ شکل (۲۰-۳) a) زیر فضای حاصل از حذف سهم گونه A از ماتریس داده ها
- ۷۱ شکل (۲۱-۳) طیف و بردار NAS با افزایش استاندارد
- ۷۲ شکل (۲۲-۳) طیف و بردار NAS مزاحم
- ۷۳ شکل (۲۳-۳) بردار مجموع طیف‌ها ی مربوط به تک تک گونه‌ها A و B
- ۷۴ شکل (۲۴-۳) تغییرات زاویه بین تک تک بردارها و مجموع آنها
- ۷۵ شکل (۲۵-۳) نمودار مربوط به طول بردار NAS بعد از افزایش استاندارد
- ۷۷ شکل (۲۶-۳) نمودار برای اندازه‌گیری سرب (Pb) در حضور قلع (Sn)
- ۷۸ شکل (۲۷-۳) نمودار برای اندازه‌گیری همزمان قلع (Sn) در حضور سرب (Pb)
- ۸۰ شکل (۲۸-۳) نمودار اندازه‌گیری توسط روش استاندارد جذباتمی

۸۱ شکل (۳-۲۹) اسپایک جهت اندازه گیری نمونه حقیقی توسط روش ASV

۸۲ شکل (۳-۳۰) اسپایک نمونه حقیقی توسط روش ASV بدون حضور نمونه حقیقی

## فهرست جداول

- جدول ۱-۳ مشخصات ترکیبات غلظتی نمونه‌های سنتزی ۵۸
- جدول ۲-۳ خطای استاندارد نسبی در اندازه‌گیری داده‌های پیش‌بینی و سنتزی ۵۸
- جدول ۳-۳ مقادیر پتانسیل ماگزیمم (M)، پهنا (W) و ارتفاع (H) ولتاموگرامهای شبیه‌سازی شده A و B ۶۱
- جدول ۴-۳ درایه‌های ماتریس داده‌های ایجاد شده در مرحله گوسین ۶۳
- جدول ۵-۳ ترکیب و آنالیز داده‌های مدل‌سازی شده توسط روش NAS-SAM ۷۶
- جدول ۶-۳ جدول مربوط به برای اندازه‌گیری سرب (Pb) در حضور قلع (Sn) ۷۸
- جدول ۷-۳ جدول مربوط به خطای بدست آمده برای اندازه‌گیری Sn در حضور سرب (Pb) ۷۹

## ۱-۱) روشهای کموتریکس

کموتریکس ارتباط بین علم آمار و شیمی را برقرار می‌نماید و جهت تفسیر نتایج آزمایشی بکار برده می‌شود و کموتریکس از جمله روشهای مفید برای تفسیر نتایج و سنجش میزان صحت و دقت آزمایشات محسوب می‌شود. کموتریکس در واقع استفاده از روشهای ریاضی و آمار برای جمع آوری، تفسیر و پیش بینی داده های شیمیایی می‌باشد مجموعه روشها در واقع یک دورنمای جدیدی به شیمیدان می‌دهد که بواسطه آنها بتوانند برای بسیاری از مسائل پیچیده خود راه حل ارائه نمایند [۱].

در طی سالهای گذشته روشهای کموتریکس را به دو دسته کلی تقسیم بندی کرده اند که در زیر به توضیح مختصری از هر کدام از آنها می‌پردازیم.

روشهای مدل سخت<sup>۱</sup>: به این روشها، روشهای مدل سازی<sup>۲</sup> هم گفته می‌شود. در این روشها، با استفاده از شناخت و اطلاعاتی که از سیستم های شیمیایی داریم، مدل ریاضی برای آنها طراحی می‌کنیم و سپس با استفاده از داده‌های سیستم مورد نظر و **برازش**<sup>۳</sup> آن داده‌ها، پارامترهای معادله را یافته و با استفاده از این پارامترها اطلاعاتی را راجع به سیستم مورد مطالعه بدست می‌آوریم [۲].

عیب اصلی این روشها این است که پیش بینی رفتار فیزیکوشیمیایی سیستم‌های شیمیایی، کار ساده‌ای نیست به همین خاطر شاید اطلاعات برای ساختن یک مدل ریاضی صحیح، کافی نبوده و در نتیجه اطلاعاتی که بدست می‌آوریم کافی و صحیح نخواهد بود، بنابراین از حجم استفاده از روشهای مدل سازی روز بروز کاسته می‌شود [۳ و ۴].

---

1. hard modeling methods  
2. modelling  
3. fitting

روشهای مدل نرم<sup>۱</sup>: که به این روشها، روشهای خود مدلساز<sup>۲</sup> هم گفته می شود. در این روشها به هیچ گونه مدل ریاضی احتیاج نیست. به همین خاطر نیاز به اینکه اطلاعاتی راجع به رفتار فیزیکوشیمیایی سیستم داشته باشیم، نیست. اما یک فرض اصلی در مدل های نرم وجود دارد و آن وجود یک ارتباط خطی یا غیر خطی بین سیگنال مورد اندازه گیری و غلظت می باشد [۵].

یک سری از روشهای تلفیقی هم وجود دارند که در آنها از هر دو روش سخت و نرم استفاده می شود [۷۶].

## ۱-۲) انواع روشهای کالیبراسیون

### ۱-۲-۱) کالیبراسیون کلاسیک (تک متغیره)

کالیبراسیون تک متغیره ارتباط بین دو متغیر با هم را در بر می گیرد که اغلب آن را با نام رگرسیون خطی می شناسیم. از ساده ترین مشکلات موجود در روش کلاسیک تعیین غلظت یک گونه ی واحد به صورت جواب اشکارساز بطور منفرد می باشد، برای مثال طول موج اسپکترومتری یک واحد یا ناحیه ی پیک کروماتوگرافی .

مدل کالیبراسیون تک مرتبه از فرمول زیر تبعیت می نماید:

$$r = Cs + d + e \quad (1)$$

$r$  برابر با پاسخ آنالیزور،  $C$  برابر با غلظت گونه ی مورد نظر،  $s$  حساسیت آنالیزور با حضور آنالیت،  $d$  مشارکت ثابت برای پاسخ های اندازه گیری شده و  $e$  خطای اندازه گیری شده می باشد. روشهای تک متغیره برای سیگنال یک گونه انتخابگری بالایی دارند ولی هنگامی که سیگنالهایی علاوه

---

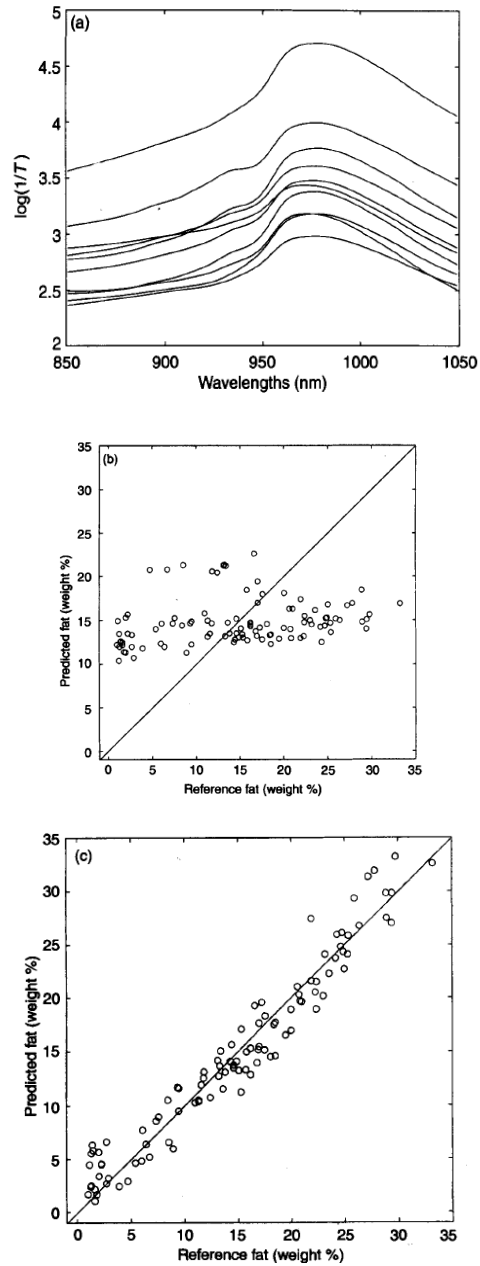
1. soft modeling methods  
2. self modeling method



بر سیگنال آنالیت داشته باشیم و به نحوی باشد که نتوانیم با روش‌های اصلاح زمینه آن را حذف نماییم، این انتخابگری از بین می‌رود و در نتیجه نیاز به روش‌هایی که به جای یک متغیر از چند متغیر استفاده کنند ضرورت پیدا می‌کند [۸].

### ۱-۲-۲) روش‌های کالیبراسیون چند متغیره

در روش‌های کالیبراسیون چند متغیره بجای استفاده از یک متغیر (یک طول موج یا پتانسیل) چند متغیر (کل طیف یا ولتاموگرام) استفاده می‌شود. دلیل استفاده از روش کالیبراسیون چند متغیره اینست که زمانیکه پیکها در طیف یا ولتاموگرام دارای همپوشانی هستند امکان استفاده از جذب در یک طول موج جهت پیش‌بینی غلظت آن جذب مربوطه وجود ندارد که همان مشکل انتخابگری نامیده می‌شود. مثالی در این رابطه مربوط به اندازه‌گیری چربی یک نمونه گوشتی در شکل (۱a-۱) نشان داده شده است. این مثال بر اساس اندازه‌گیری ۱۰۳ نمونه گوشتی هموزنیزه شده می‌باشد. طیف در حالت عبور انتشاری از ۸۵۰ تا ۱۰۵۰ nm با فاصله ۲ nm روبش داده شده است. ۱۰ طیف در شکل (۱a-۱) ارائه شده است. نتایج اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده در شکل (۱b,c-۱) ارائه شده است، همانطور که دیده می‌شود بهترین نتایج پیش‌بینی با متد تک متغیره خیلی ضعیف خواهد بود. در چنین مواردی تلفیق اطلاعات بعضی یا حتی همه متغیرهای طیفی مفید است که این روش‌های چند متغیره دارای مزایایی می‌باشند که در ادامه بدان اشاره خواهد شد [۹].



شکل ۱-۱ مشکل انتخابگری در اسپکتروسکوپی NIR (a) طیف NIR ۱۰ نمونه گوشتی (b) چربی متد مرجع در مقابل چربی پیش‌بینی شده با کمک تک متغیر  $940\text{nm}$  بعنوان پیشگو (ضریب همبستگی ۰/۲۳) چربی متد مرجع در مقابل چربی پیش‌بینی شده با کمک کالیبراسیون چند متغیره (PLS) بر اساس همه متغیرها از داده طیفی (ضریب همبستگی ۰/۹۷)

هنگامی که از این روشها برای کالیبراسیون استفاده می‌شود مثل اینست که تعدادی آزمایش را انجام داده و با میانگین گیری از آنها دقت افزایش می‌یابد و به این وسیله اثر سیگنالها از هم جدا می‌شود [۱۰، ۱۱]. این روشها می‌توانند ارتباط بین متغیرهای وابسته را با مستقل برقرار کنند و از طریق این ارتباط اطلاعات مربوط به نمونه‌های مجهول را بدست می‌دهند. ولی زمانیکه بیش از یک متغیر داریم از روش کالیبراسیون چند متغیره که در زیر به اختصار توضیح داده شده است استفاده می‌نماییم. البته استفاده از کل طیف در روشهای کالیبراسیون چند متغیره با مشکلاتی روبرو است که عبارتند از:

۱. از کل طیف انتخاب شده قسمتی از آن زاید بوده و هیچ گونه اطلاعاتی از آن نمی‌توان بدست آورد.

۲. سیگنال اندازه‌گیری شده در بعضی از متغیرهای مستقل ممکن است مربوط به نویز<sup>۱</sup> باشد و این امر انتخاب متغیر را ضروری می‌سازد.

از مزیت‌های عمده کالیبراسیون چند متغیره امکان جداسازی اطلاعات مفید از اطلاعات نامناسب مانند نویز می‌باشد. این عمل با انتخاب تعداد مولفه‌های اصلی مناسب از میان تعداد مولفه‌های اصلی که ممکن است برخی از آنها حاوی اطلاعات مفید نبوده باشند صورت می‌گیرد. مدل‌های رگرسیون که در کالیبراسیون چند متغیره کاربرد دارند عبارتند از: مدل‌های خطی مانند رگرسیون مولفه‌های اصلی<sup>۲</sup> (PCR) [۱۲]، حداقل مربعات جزئی<sup>۳</sup> (PLS) [۱۳] و مدل‌های غیر خطی مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی<sup>۴</sup> (ANN) [۱۴].

---

1. Noise  
2. Principle Component Regression  
3. Partial Least Square  
4. Artificial Neural networks

### ۱-۲-۲-۱) آنالیز مولفه‌های اصلی و مجموع مربعات جزئی

این دو متد از پرکاربردترین و مهمترین روش‌های کمومتریکس می‌باشد که ارتباط بین داده‌های متفاوت را جهت اندازه‌گیری آنها برقرار می‌کنند و امکان تعیین و اندازه‌گیری آنها را فراهم می‌نماید.  $PCA^1$  یک متد همه‌گیر که تلاش در توضیح ترکیب خطی داده‌ها با کمک تعداد کمی از اجزا را دارد می‌باشد. این ترکیبات ترکیب خطی متغیرهای اصلی می‌باشند و اغلب اجازه تفسیر و فهم بهتری از منابع مختلف داده‌ها را می‌دهند. بدلیل اینکه  $PCA$  با کاهش داده‌ها مرتبط می‌باشد برای آنالیز داده‌های با ابعاد وسیع بکار برده می‌شود.  $PCA$  مرحله اول آنالیز داده‌ها می‌باشد که با طبقه‌بندی، آنالیز مجموعی یا دیگر تکنیک‌های چندمتغیره دنبال می‌شود. بنابراین یافت  $PC$  های دارای ارزش اهمیت فراوانی دارد [۹].

$PLS$  مشابه  $PCR$  می‌باشد و اولین بار توسط ولد<sup>۲</sup> در سال ۱۹۶۰ مورد توجه واقع شد. دو روش متفاوت از  $PLS$ ،  $PLS^1$  و  $PLS^2$  می‌باشند که در  $PLS^1$  مدل کالیبراسیون برای هر ستون از ماتریس  $Y$  ساخته می‌شود در حالیکه در  $PLS^2$  مدل کالیبراسیون برای همه ستون‌های  $Y$  بطور همزمان ساخته می‌شوند. از طرفی با توجه به این امر که نیازی به انتخاب طول موج در این دو روش نیست پارامترهایی برای کاهش بعد فضای رگرسیون بکار برده می‌شود.

جبر خطی<sup>۳</sup> زبان کمومتریکس است و بدون آشنایی با مفاهیم اولیه آن نمیتوانیم درک درستی از کمومتریکس داشته باشیم. اصولاً در جبر خطی بردارها نقش اساسی دارند و آن عبارت است از یک رشته اعداد که در فضای چند بعدی مکان هندسی نقطه ای را مشخص می‌کنند [۱۵]. شناسایی بردار با بزرگی و

---

1. principle component analysis  
2. H. Wold  
3. Linear Algebra