

کاربرد کامپیوتر در شیمی

کاربرد EXCEL، MINITAB، SPSS و MATLAB

در داده‌های شیمیایی

دکتر علی نیازی

ندا خورشیدی

فاطمه باغبان‌شهری، سروه قادری، محمد اکرمی

بهار ۱۳۹۳



عنوان و نام پدیدآور: کاربرد کامپیوتر در شیمی: کاربرد MATLAB, SPSS, MINITAB, EXCEL در داده‌های شیمی / [مولفین] علی نیازی... [و دیگران].

مشخصات نشر: گرگان: مختومقلی فراغی، ۱۳۹۳.

مشخصات ظاهری: ۴۷۳ ص.: مصور، جدول، نمودار.

شابک: ۲۰۰۰۰۰ ریال - ۶۶۰-۵۰۸-۹۶۴-۹۷۸.

وضعیت فهرست نویسی: فیا

یادداشت: [مولفین] علی نیازی، ندا خورشیدی، فاطمه باغبان‌شهری،

سروه قادری، احمد اکرمی.

موضوع: شیمی — داده‌پردازی

شناسه افزوده: نیازی، علی، ۱۳۵۴ -

رده بندی کنگره: ۱۳۹۳ / ۵۲۱۶ / ۳۹۳ QD۳۹۳

رده بندی دیویی: ۵۴۲/۸۵۵۳

شماره کتابشناسی ملی: ۳۴۷۳۴۱۷

کاربرد کامپیوتر در شیمی (کار: MATLAB و SPSS, MINITAB, EXCEL)

در داده های شیمیایی

تألیف: دکتر علی نیازی، ندا خورشیدی، فاطمه باغبان‌شهری، سروه قادری، احمد اکرمی



ناشر: انتشارات مختومقلی فراغی

آدرس: گرگان، خ شهید بهشتی، بهشت ۱۷

چاپ و صحافی: چاپ افست مختومقلی ۰۱۷۱-۲۲۴۳۵۵۰

نوبت چاپ: اول / ۹۳

قطع: وزیری

شمارگان: ۳۰۰ نسخه

قیمت: ۲۰۰۰۰۰ ریال

شابک: ۹۷۸-۹۶۴-۵۰۸-۶۶۰-۰

تعداد صفحه: ۴۷۳ ص

به نام خدا

پیشگفتار

با توجه به پیشرفت بسیار سریع تکنولوژی و تکامل روز افزون دستگاه های شیمی و ثبت داده های بسیار فراوان، استفاده از کامپیوتر و نرم افزار های محاسباتی امروزه امری اجتناب ناپذیر می باشد. کاربرد کامپیوتر به همراه روش های ریاضی، آماری و گرافیکی برای درک بهتر ماهی های شیمیایی باعث ایجاد و توسعه علمی جدیدی با عنوان کموتریکس گردیده است. آشنایی با کامپیوتر و نرم افزارهای کاربردی در شیمی، امروزه در تمامی مقاطع تحصیلی بویژه تحصیلات تکمیلی الزامی می باشد. در نوشتن این کتاب، با توجه به تجربه چندین سال تدریس در مقاطع مختلف تحصیلی و نیاز دانشجویان به یادگیری نرم افزارهای کاربردی در شیمی، این کتاب به چندین فصل تقسیم شده است. در فصل اول مبانی کامپیوتر از لحاظ سخت افزار و نرم افزاری معرفی شده است، در فصل های دوم الی ششم نرم افزارهای EXCEL، MINITAB، MATLAB و SPSS معرفی گردیده است. انتخاب این نرم افزارها بر اساس کارهای آنها در پردازش داده های مختلف شیمی می باشد و در تمامی این فصل ها سعی شده است خوانندگان گرامی با ساختار کلی و دستورات مورد نیاز با ذکر مثال آشنا گردند. امیدواریم این کتاب بتواند مقدمه ای برای آشنایی دانشجویان و محققین با نرم افزارهای مورد نیاز شیمی باشد.

خداوند متعال را سپاس می گوئیم که به ما توفیق داد تا این کتاب را تالیف نماییم و از تمامی استادان محترم و دانشجویان گرامی که این کتاب را تدریس و مطالعه می نمایند، سپاسگزاریم. بی گمان مطالب آن عاری از اشکال نیست، بنابراین، خواهشمندیم که ایرادهای کتاب و همچنین پیشنهاد و انتقادهای خویش را جهت لحاظ نمودن در نگارش

های بعدی به نویسندگان ارائه نمایید و در نهایت از انتشارات مختومقلی فراغی و خانم سونا سارلی به خاطر همکاری و حمایت از چاپ کتاب نهایت تقدیر و تشکر به عمل می آید و تالیف این کتاب را تقدیم می کنیم به همه آنان که:

تلاش بی وقفه را بر روزمرگی ترجیح داده و می دهند

علی نیازی

ندا خورشیدی

فاطمه باغبان شهری

سروه قادری

احمد اکرمی

بهار ۱۳۹۳

ali.niazi@gmail.com

www.ketab.ir

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مبانی کامپیوتر (سخت افزار و نرم افزار).....	۱
۱-۱ کامپیوتر (رایانه).....	۳
۲-۱ تاریخچه.....	۵
۱-۱ مدل های مختلف رایانه.....	۵
۲-۱ رایانه های نسل اول.....	۵
۲-۱ رایانه های نسل دوم.....	۷
۳-۳-۱ رایانه های نسل سوم.....	۷
۴-۳-۱ رایانه های نسل چهارم.....	۸
۵-۳-۱ رایانه های نسل پنجم.....	۹
۴-۱ انواع کامپیوتر.....	۱۰
۱-۴-۱ سوپر کامپیوتر یا ابر کامپیوتر.....	۱۰
۲-۴-۱ کامپیوترهای بزرگ.....	۱۰
۳-۴-۱ مینی کامپیوتر.....	۱۱
۵-۱ نرم افزار.....	۱۱
۱-۵-۱ نرم افزار کاربردی.....	۱۲
۲-۵-۱ نرم افزار سیستمی.....	۱۲
۶-۱ سیستم عامل.....	۱۳
۱-۶-۱ سیستم عامل DOS.....	۱۴
۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز.....	۱۵
۱-۶-۲-۱ سیستم عامل ویندوز ۱,۰.....	۱۵
۱-۶-۲-۲ سیستم عامل ویندوز ۲,۰, ۱,۱, ۲.....	۱۶
۱-۶-۲-۳ سیستم عامل ویندوز ۳,۰.....	۱۶
۱-۶-۲-۴ سیستم عامل ویندوز ۳,۱.....	۱۷
۱-۶-۲-۵ سیستم عامل ویندوز ۹۵.....	۱۷

۱۸	۶-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز ۹۸
۱۹	۷-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز ۲۰۰۰
۲۰	۸-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز Me
۲۰	۹-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز XP
۲۱	۱۰-۲-۶-۱ سیستم عامل Windows NT
۲۲	۱۱-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز ویستا
۲۴	۱۲-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز ۷
۲۵	۱-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز ۸
۲۵	۳-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز ۱۰
۲۵	۴-۲-۶-۱ سیستم عامل ویندوز ۱۱
۲۶	۷-۱ سخت افزار
۲۷	۱-۷-۱ واحد کنترل
۲۷	۲-۷-۱ واحد پردازش مرکزی (CPU)
۲۸	۳-۷-۱ حافظه
۲۹	۲-۱-۳-۷-۱ حافظه با دسترسی تصادفی (RAM)
۲۹	۲-۳-۷-۱ مفهوم واحدهای حافظه
۲۹	۱-۲-۳-۷-۱ مفهوم بیت
۳۰	۲-۲-۳-۷-۱ مفهوم بایت
۳۱	۳-۳-۷-۱ واحدهای حافظه
۳۲	۸-۱ انواع سخت افزار
۳۲	۱-۸-۱ دیسک مغناطیسی
۳۳	۲-۸-۱ صفحه کلیدها و موسهای بی سیم
۳۴	۱-۲-۸-۱ صفحه کلیدهای طبی
۳۴	۲-۲-۸-۱ صفحه کلیدهای نورانی
۳۵	۳-۸-۱ برد هوشمند
۳۶	۴-۸-۱ قلم نوری

۳۶	۱-۴-۸-۱ مزایای قلم نوری نسبت به موس
۳۷	۵-۸-۱ ویدیو پروژکتور
۳۷	۶-۸-۱ هارد اکسترنال
۳۸	USB ۷-۸-۱
۴۰	۸-۸-۱ هارد دیسک
۴۱	۹-۸-۱ ورین دیجیتالی (دوربین وب)
۴۲	۱۰-۸-۱ چاپگر
۴۳	۱۱-۸-۱ فایل مموری
۴۳	۹-۱ زبان برنامه نویسی
۴۴	۱-۹-۱ نسل های برنامه نویسی
۴۴	۱-۱-۹-۱ زبان برنامه نویسی نسل اول
۴۵	۲-۱-۹-۱ زبان برنامه نویسی نسل دوم
۴۵	۳-۱-۹-۱ زبان برنامه نویسی نسل سوم
۴۶	۴-۱-۹-۱ زبان های برنامه نویسی نسل چهارم
۴۶	۲-۹-۱ انواع زبانهای برنامه نویسی
۴۷	۱-۲-۹-۱ زبان پاسکال
۴۸	۱-۱-۲-۹-۱ ساختار پاسکال
۴۹	۲-۲-۹-۱ زبان C
۵۴	۱۰-۱ الگوریتم
۵۴	۱-۱۰-۱ الگوریتم نویسی
۵۴	۲-۱۰-۱ تعریف الگوریتم
۵۵	۳-۱۰-۱ شرایط الگوریتم
۵۶	۴-۱۰-۱ انواع دستورالعملها در الگوریتم
۵۸	۱۱-۱ فلوچارت
۵۹	۱-۱۱-۱ علائم و اشکال در فلوچارت
۶۰	۱۲-۱ کاربرد کامپیوتر در شیمی

۶۱	۱۳-۱ کامپیوترهای رقمی جدید
۶۲	۱۴-۱ مدل سازی، بهینه سازی، شبیه سازی
۶۲	۱۵-۱ مدیریت و کنترل آزمایشها
۶۳	۱۶-۱ خطا و آمار
۶۵	فصل دوم: کاربرد اکسل در شیمی
۶۷	مقدمه
۶۸	۲-۱ آشنایی با محیط اکسل
۷۱	۱-۱ معرفی تب‌ها و نوارهای موجود در اکسل
۷۲	۲-۱-۲ معرفی کاربرگ
۷۵	۲-۱-۳ اطلاعات موجود در سلول
۷۷	۲-۱-۴ کاربرد AutoFit
۷۸	۲-۱-۵ کاربرد AutoFit
۷۹	۲-۱-۶ تغییرات سطر و ستون در اکسل
۸۰	۲-۱-۷ مرتب کردن و ترتیب‌دهی داده‌ها
۸۲	۲-۱-۸ ادغام کردن سلول‌ها
۸۳	۲-۱-۹ کاربرد مهمترین کلیدها در داخل تب Data
۸۴	۲-۲ داده‌ها در اکسل
۸۴	۲-۲-۱ انواع داده‌ها
۸۵	۲-۲-۲ تبدیل داده عددی به متنی
۸۵	۲-۲-۳ قالب‌بندی داده‌ها در اکسل
۹۴	۲-۲-۴ درج انواع اشیاء
۹۵	۲-۲-۵ اصطلاحات و کاربرد سایر ابزارهای جانبی
۹۸	۲-۳ فرمول‌ها
۹۹	۲-۳-۱ ایجاد یک فرمول ریاضی
۱۰۲	۲-۳-۳ کاربرد چند تابع معروف
۱۰۳	۲-۴ نمودارها

۱۰۴.....	۲-۴-۱ انواع نمودارها
۱۰۶.....	۲-۴-۲ اصطلاحات کاربردی نمودارها
۱۰۶.....	۲-۴-۳ ترسیم نمودار با اکسل
۱۰۷.....	۲-۴-۴ ویرایش نمودار: نموداری که رسم می شود قابل تغییر می باشد
۱۰۷.....	۲-۴-۴-۱ تغییر داده های نمودار
۱۰۷.....	۲-۴-۴-۲ تغییر اندازه نمودار
۱۰۷.....	۲-۴-۴-۳ تغییر عنوان نمودار
۱۰۷.....	۲-۴-۴-۴ اضافه کردن عنوان نمودار
۱۰۸.....	۲-۴-۴-۵ اضافه کردن چسب داده ها
۱۰۸.....	۲-۴-۴-۶ تغییر مرز بر روی داده ها
۱۰۸.....	۲-۴-۴-۷ تغییر مقیاس
۱۰۹.....	۲-۴-۴-۸ تغییر رنگ نمودار
۱۰۹.....	۲-۴-۴-۹ تغییر نوع نمودار
۱۰۹.....	۲-۴-۵ ترسیم نمودار ستونی
۱۱۱.....	۲-۴-۶ ترسیم نمودار دایره ای
۱۱۲.....	۲-۴-۷ ترسیم نمودار پراکنده توزیعی با مثال کاربردی
۱۱۵.....	۲-۵ پردازش داده ها
۱۱۵.....	۲-۵-۱ پردازش داده های تجربی با استفاده از solver
۱۲۳.....	فصل سوم: تحلیل آماری داده های شیمی توسط Minitab
۱۲۵.....	۳-۱-۱ مقدمه
۱۲۶.....	۳-۲-۱ معرفی پنجره ها
۱۲۶.....	۳-۲-۲-۱ پنجره داده ها (Worksheet)
۱۲۹.....	۳-۲-۲-۲ پنجره Session
۱۳۰.....	۳-۲-۲-۳ پنجره Project Manager
۱۳۱.....	۳-۲-۲-۴ پنجره History
۱۳۱.....	۳-۲-۲-۵ پنجره Info

۱۳۲	۳-۳-منوی File.....
۱۳۴	۳-۴- نمودار پراکنش.....
۱۳۷	۳-۵- اضافه کردن پاورقی به نمودار.....
۱۳۸	۳-۵-۱- اضافه کردن پاورقی به صورت اتوماتیک.....
۱۳۹	۳-۶- اضافه کردن نمودارها به گزارش کار.....
۱۴۰	۳-۷- اضافه کردن دستورات Session به گزارش کار.....
۱۴۰	۳-۸- ذخیره کردن یک گزارش.....
۱۴۰	۳-۹- پیسی کردن گزارش کار در WORD.....
۱۴۱	۳-۱۰- نمودار میله‌ای.....
۱۴۵	۳-۱۱- رگرسیون.....
۱۴۹	۳-۱۲- نمودار دایره‌ای.....
۱۵۳	۳-۱۳- نمودار میله‌ای.....
۱۵۴	۳-۱۳-۱- نمودار میله‌ای ساده.....
۱۵۴	۳-۱۳-۲- نمودار میله‌ای خوشه‌بندی شده.....
۱۵۵	۳-۱۳-۳- نمودار میله‌ای پشته‌ای (انباشته).....
۱۵۷	۳-۱۳-۴- تبدیل نمودار میله‌ای به هیستوگرام.....
۱۵۸	۳-۱۴- نمودار هیستوگرام.....
۱۵۹	۳-۱۴-۱- تغییر نحوه نمایش شکل.....
۱۶۰	۳-۱۴-۲- نحوه تعیین Scale نمودار.....
۱۶۰	۳-۱۴-۳- انواع الگوهای هیستوگرام.....
۱۶۰	۳-۱۴-۱- الگوی زنگوله‌ای.....
۱۶۱	۳-۱۴-۲- الگوی دو نمایی یا دو قلای.....
۱۶۱	۳-۱۴-۳- الگوی چولگی.....
۱۶۱	۳-۱۵- نمودار Pareto.....
۱۶۲	۳-۱۵-۱- ترسیم نمودار Pareto.....
۱۶۳	۳-۱۶- آمار توصیفی.....

۱۶۴	۱۷-۳ آمار استنباطی
۱۶۸	۱۷-۳ ۱ آزمونهای آمار استنباطی
۱۶۸	۱۷-۳ ۱-۱ آزمونهای پارامتری و ناپارامتری
۱۶۹	۱۸-۳ آزمون T-Student
۱۷۰	۱۸-۳ ۱ آزمون T یک نمونه‌ای (One Sample T-Test)
۱۷۴	۱۸-۳ ۲ آزمون t برای نمونههای وابسته
۱۷۶	۱۸-۳ ۳ آزمون t نمونههای مستقل
۱۷۹	۱۹-۳ آزمون تحلیل واریانس (ANOVA)
۱۸۰	۱۹-۳ ۱ تحلیل واریانس یک طرفه
۱۸۱	۱۹-۳ ۱-۱ نمودارهای Box Plot
۱۸۲	۱۹-۳ ۱-۲ نمودار Individual Value Plot
۱۸۲	۱۹-۳ ۳-۱ Residual plots
۱۸۲	۱۹-۳ ۱-۳-۱ Histogram of residuals
۱۸۲	۱۹-۳ ۲-۳-۱ Normal probability plot
۱۸۲	۱۹-۳ ۳-۳-۱ Residuals Versus fits
۱۸۳	۱۹-۳ ۴-۳-۱ Residuals Versus Order
۱۸۴	۱۹-۳ ۲ تحلیل واریانس دو طرفه
۱۸۵	۱۹-۳ ۳ بررسی برابری واریانسها
۱۸۵	۱۹-۳ ۴ بررسی تاثیر هر فاکتور
۱۸۶	۱۹-۳ ۵ بررسی اثر متقابل فاکتورها
۱۸۶	۲۰-۳ ایجاد اعداد با یک الگوی مشخص
۱۸۸	۲۱-۳ ایجاد اعداد تصادفی
۱۸۹	۲۲-۳ ایجاد نمونههای تصادفی
۱۹۰	۲۳-۳ انجام عملیات بر روی سطرها و ستونها
۱۹۰	۲۳-۳ ۱ کپی کردن
۱۹۲	۲۳-۳ ۲ حذف کردن سطرها

۱۹۲	۳-۲۳-۳ دسته‌بندی داده‌ها
۱۹۴	۳-۲۳-۴ انباشته کردن اطلاعات
۱۹۴	۳-۲۳-۵ رتبه‌بندی داده‌های یک ستون
۱۹۵	۳-۲۳-۶ کدگذاری داده‌ها
۱۹۶	۳-۲۴ کاربرد و نحوه استفاده از ماشین حساب
۱۹۸	۳-۲۵ محاسبه احتمالات
۲۰۰	۳-۲۶ روش ایجاد یک ماتریس
۲۰۱	۳-۲۷ استاندارد کردن داده‌ها
۲۰۳	۳-۲۸ طراحی آزمایش
۲۰۵	۳-۲۸-۱ قابلیت مدل تب برای تحلیل DOE
۲۱۲	۳-۲۸-۲ نمودار پارتو
۲۱۳	۳-۲۸-۳ نمودار اثرات اصلی
۲۱۵	۳-۲۸-۴ نمودار اثرات متقابل بین فاکتورها
۲۱۷	فصل چهارم: آشنایی با نرم‌افزار Matlab
۲۱۹	۴-۱-MATLAB
۲۲۱	۴-۲ معرفی محیط کار نرم‌افزار MATLAB
۲۲۵	۴-۲-۲ منوها Menu
۲۳۰	۴-۳-۱-۱ آشنایی با انواع داده‌ها
۲۳۲	۴-۳-۱-۲ ساخت ماتریس ۳ بعدی
۲۳۳	۴-۳-۱-۲-۲ آدرسدهی در ماتریس
۲۳۴	۴-۳-۱-۳ عملیات روی ماتریس‌ها
۲۳۵	۴-۳-۱-۵ پارامترهای اولیه
۲۳۸	۴-۳-۲ عملگرها
۲۴۹	۴-۳-۳ توابع
۲۴۹	۴-۳-۳-۱ توابع عددی
۲۵۱	۴-۳-۳-۳ نشان دادن قسمت‌های حقیقی و موهومی

۲۵۳	۴-۳-۳-۴ توابع مثلثاتی
۲۵۸	۴-۳-۳-۶ توابع ماتریسی یا آرایه‌ای
۲۶۹	۴-۳-۳-۷ توابع و دستورات منطقی
۲۷۳	۴-۴ برنامه‌نویسی با MATLAB
۲۷۷	۴-۴-۱ خطایابی برنامه‌ها
۲۸۳	۴-۵ رسم نمودار در MATLAB (ترسیم نمودارهای دو بعدی و سه بعدی)
۲۸۵	۴-۵-۱-۱ تفاوت صفحات رسم
۲۸۷	۴-۵-۲ رسم نمودار در یک نمودار
۲۹۴	۴-۵-۴ ترسیم توابع
۲۹۶	۴-۵-۵ نمودارهای ماری
۲۹۱	فصل پنجم: معرفی جمع‌آوری داده‌ها: متلب : ژنتیک الگوریتم، شبکه عصبی، برازش منحنی
۳۰۳	۵-۱ برازش منحنی
۳۰۴	۵-۱-۱ انواع روش‌های برازش منحنی
۳۰۴	۵-۱-۱-۱ روش حداقل مربعات
۳۰۵	۵-۱-۱-۲ روش خط حداقل مربعات
۳۲۵	۵-۲-۱ تاریخچه شبکه‌های عصبی مصنوعی
۳۲۸	۵-۲-۲ شبکه عصبی چیست؟
۳۳۴	۵-۲-۳ از سلول‌های عصبی انسانی تا سلول‌های عصبی مصنوعی
۳۳۴	۵-۲-۴ یک سلول عصبی ساده
۳۳۶	۵-۲-۴-۱ مدل سلول عصبی
۳۴۲	۵-۲-۴-۲ انواع سلول‌های عصبی
۳۴۲	۵-۲-۴-۱-۲ مدل سلول عصبی تک ورودی
۳۴۲	۵-۲-۴-۲-۲ سلول عصبی چند ورودی
۳۴۳	۵-۲-۴-۲-۳ ساختار شبکه عصبی مصنوعی (نوع توبولوژی)
۳۴۴	۵-۲-۴-۲-۱ شبکه عصبی مصنوعی تک لایه

- ۳۴۵..... شبکه عصبی مصنوعی چند لایه ۲-۲-۴-۲-۵
- ۳۴۶..... اجزاء شبکه‌های عصبی ۳-۲-۴-۲-۵
- ۳۴۶..... آموزش در شبکه عصبی (نوع آموزش) ۳-۴-۲-۵
- ۳۴۷..... انواع یادگیری برای شبکه‌های عصبی ۲-۳-۴-۲-۵
- ۳۴۷..... نحوه حل مسائل با شبکه‌های عصبی ۱-۳-۴-۲-۵
- ۳۵۰..... شبکه‌های عصبی در مقابل کامپیوترهای معمولی ۵-۲-۵
- ۳۵۱..... کاربردها و قابلیت‌های شبکه‌های عصبی مصنوعی ۶-۲-۵
- ۳۵۴..... مزیت‌های شبکه‌های عصبی مصنوعی ۲-۱-۵
- ۳۵۶..... کاربرد شبکه عصبی مصنوعی در MATLAB ۱-۱-۵
- ۳۶۶..... الگوریتم ژنتیک ۳-۵
- ۳۶۸..... تاریخچه ۱-۳-۵
- ۳۶۹..... الگوریتم ژنتیک چیست ۲-۳-۵
- ۳۷۱..... حل مساله با استفاده از الگوریتم ژنتیک ۳-۳-۵
- ۳۷۳..... شرط پایان الگوریتم ۴-۳-۵
- ۳۷۴..... اصطلاحات الگوریتم ژنتیک ۵-۳-۵
- ۳۷۷..... عملگرهای الگوریتم ژنتیک ۶-۳-۵
- ۳۷۸..... برازش ۱-۶-۳-۵
- ۳۷۸..... انتخاب ۲-۶-۳-۵
- ۳۷۹..... ادغام یا تبادل ۳-۶-۳-۵
- ۳۸۰..... جهش ۴-۶-۳-۵
- ۳۸۱..... نمایش یا کد کردن ۷-۳-۵
- ۳۸۱..... انواع کدینگ ۱-۷-۳-۵
- ۳۸۲..... روشهای کدینگ ۲-۷-۳-۵
- ۳۸۴..... روش‌های انتخاب ۸-۳-۵
- ۳۸۶..... روش ادغام دو نقطه‌ای ۲-۹-۳-۵
- ۳۸۶..... روش ادغام توسط ماسک ۴-۹-۳-۵

۳۹۰	۵-۳-۱۰ استفاده از جعبه ابزار الگوریتم ژنتیک
۳۹۳	پیدا کردن نقطه مینیمم تابع رسترینج
۳۹۵	۵-۳-۱۰ اصطلاحات جعبه ابزار الگوریتم ژنتیک در نرم افزار MATLAB
۳۹۶	۵-۳-۱۰ شرایط توقف برای الگوریتم
۴۰۹	فصل ششم: کاربرد نرم افزار SPSS در شیمی
۴۱۱	مقدمه
۴۱۲	۶-۱ تعریف اولیه
۴۱۳	۶-۲ فرضیه
۴۱۳	۶-۳ متغیر
۴۱۴	۶-۴ شروع کار با SPSS
۴۱۷	۶-۵ وارد کردن داده ها
۴۱۷	۶-۶ وارد کردن نام متغیرها
۴۲۰	۶-۷ ذخیره و باز کردن فایل های SPSS
۴۲۳	۶-۸ یافتن منوها
۴۲۳	۶-۹ منو Data
۴۲۴	۶-۹-۱ Split File (شکستن فایل)
۴۲۶	۶-۹-۲ Select Cases (انتخاب موارد)
۴۲۹	۶-۱۰ تبدیل داده ها
۴۳۰	۶-۱۰-۱ چگونگی تبدیل داده های کمی به کیفی
۴۳۲	۶-۱۱ رسم نمودار
۴۳۲	۶-۱۱-۱ نمودار خطی
۴۳۳	۶-۱۱-۱-۱ نمودارهای خطی فراوانی نسبی
۴۳۶	۶-۱۱-۲ نمودار میله ای
۴۳۶	۶-۱۱-۳ نمودار دایره ای
۴۳۷	۶-۱۱-۴ نمودار پراکندگی
۴۳۹	۶-۱۲ ویرایش نمودارها

۴۴۰	۱۳-۶ محاسبه شاخصهای آماری
۴۴۰	۱۳-۶ ۱ شاخص تمرکز
۴۴۱	۱۳-۶ ۲ شاخص پراکندگی
۴۴۲	۱۴-۶ توزیع نرمال و تصادفی بودن داده‌ها
۴۴۲	۱۴-۶ ۱ نرمال بودن توزیع جامعه
۴۴۶	۱۴-۶ ۲ استقلال داده‌ها (تصادفی بودن داده‌ها)
۴۴۸	۱۵-۶ آزمون فرض آماری
۴۴۸	۱۶-۶ سطح معنی داری و خطاهای آماری
۴۴۹	۱۷-۶ آزمون فیشر یک طرفه و دو طرفه
۴۴۹	۱۸-۶ آزمون P-value
۴۵۰	۱۹-۶ آزمون فرض آماری میانگین یک جامعه
۴۵۰	۲۰-۶ آزمون T مقایسه میانگین یک نمونه
۴۵۳	۲۱-۶ آزمون مقایسه میانگین دو جامعه آماری مستقل
۴۵۶	۲۲-۶ آزمون مقایسه میانگین یک متغیر در چندین گروه (One-Way Anova)
۴۶۵	۲۳-۶ ۱ انواع ضریب همبستگی با توجه به متغیرهای مورد مطالعه
۴۶۸	۲۴-۶ رگرسیون
۴۶۸	۲۴-۶ ۱ رگرسیون خطی ساده
۴۷۰	منابع و مآخذ