ภาคผนวก

การคำนวณ

1. การคำนวณค่าร้อยละส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานสัมพัทธ์ (%RSD)

จากสูตร $\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^{n} Xi}{n}$

$SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (Xi - \bar{X})^2}{n-1}}$

$\%RSD = \left(\frac{SD}{\bar{X}}\right) 100$

โดย n คือจำนวนข้อมูลที่นำมาคำนวณทั้งหมด ซึ่งเท่ากับ 5

X_i คือข้อมูลที่นำมาคำนวณ

$\bar{X}$ คือค่าเฉลี่ย

SD คือส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในกลุ่มตัวอย่าง

%RSD คือร้อยละส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานสัมพัทธ์

ตัวอย่าง หา %RSD ของการวิเคราะห์ซ้ำของพื้นที่ใต้พีกของกรดแกลลิก

แทนค่า $\bar{X} = \frac{(25.27 + 23.91 + 24.70 + 24.76 + 24.38)}{5} = 24.60$

$SD = \sqrt{\frac{(25.27 - 24.60)^2 + (23.91 - 24.60)^2 + (24.70 - 24.60)^2 + (24.76 - 24.60)^2 + (24.38 - 24.60)^2}{5 - 1}}$

$= 0.50$

$\%RSD = \left(\frac{0.50}{24.60}\right) \times 100 = 2.04$

$\therefore$ เปอร์เซ็นต์ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานสัมพัทธ์ของ GA มีค่าเท่ากับ **2.04**

ส่วนค่า %RSD ของสารมาตรฐานอื่น ๆ คำนวณในทำนองเดียวกัน

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

2. การคำนวณหาขีดจำกัดต่ำสุดในการวิเคราะห์โดยอ้างอิงจากวิธี Miller และ Miller

LOD คือความเข้มข้นของสารที่ให้สัญญาณเท่ากับสัญญาณแบลงค์บวกกับสามเท่าของส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของแบลงค์ :

$$Y_{lod} = Y_{blank} + 3S_{blank}$$

ในการทดลองนี้ไม่ได้วิเคราะห์โดยใช้แบลงค์ แต่สามารถใช้ข้อมูลกราฟมาตรฐาน และสถิติการถดถอยแทนได้ โดยใช้จุดตัดแกน Y และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของการถดถอย :

$$Y_{lod} = a + 3S_{x/y}$$

ตัวอย่าง หาปริมาณต่ำสุดของการตรวจวัดของกรดแกลลิกในความเข้มข้นช่วง 2.10 – 6.31 พีพีเอ็ม ได้สมการกราฟเส้นตรง Y = 36.598X - 23.56

คำนวณค่า $\bar{X}, \bar{Y}, \sum[(X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})], \sum(X_i - \bar{X})^2$ และ $\sum(Y_i - \hat{Y}_i)^2$ แสดงดังตาราง ก

ตาราง ก การหาค่าขีดต่ำสุดในการวิเคราะห์สารมาตรฐานแกลลิก

	ppm GA (X_i)	Signal (Y_i)	$X_i-\bar{X}$	$Y_i-\bar{Y}$	$(X_i-\bar{X})(Y_i-\bar{Y})$	$(X_i-\bar{X})^2$	$\hat{Y}_i$	$(Y-\hat{Y}_i)$	$(Y-\hat{Y}_i)^2$
	2.10	48.5	-2.10	-81.81	171.63	4.40	53.37	-4.87	23.74
	3.15	95.0	-1.05	-35.28	36.93	1.10	91.84	3.19	10.20
	4.20	135.8	0.00	5.52	0.02	0.00	130.31	5.53	30.56
	5.26	167.6	1.06	37.32	39.39	1.11	168.77	-1.14	1.30
	6.31	204.5	2.11	74.22	156.34	4.44	207.24	-2.70	7.32
ผลรวม	**21.02**	**651.53**			**404.30**	**11.05**			**73.12**
ค่าเฉลี่ย	**4.20**	**130.31**							

โดยที่ Y_i = ค่าสัญญาณที่ได้รายงานจากการทดลอง ณ ความเข้มข้น X_i

$\hat{Y}_i$ = ค่าที่คำนวณได้จากสมการเส้นตรง ณ ความเข้มข้น X_i

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

คำนวณสมการการถดถอยเชิงเส้นในรูปแบบของสมการ y = bx+a โดยที่ b คือความชันของเส้นตรง และ a คือจุดตัดแกน y

หาความชันหาได้ จากสมการ $b = \frac{\sum[(X_i-\bar{X})(Y_i-\bar{Y})]}{\sum(X_i-\bar{X})^2}$

จะได้ $b = \frac{404.30}{11.05} = \mathbf{36.60}$

หาจุดตัดแกน จากสมการ $a = \bar{Y} - b\bar{X}$

จะได้ $a = 130.31 - 36.60(4.22) = \mathbf{-23.56}$

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{\sum(Y_i-\hat{Y}_i)^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{73.12}{3}} = 4.94$$

หาค่า LOD ของ Y จากสมการ $Y_{lod} = a + 3S_{x/y}$ จะได้ $Y_{lod} = -23.56 + 3(4.94) = -8.75$ หาค่าความเข้มข้น X จากสมการเส้นตรง $Y = 36.598X - 23.56$ จะได้ $X = (-8.75+23.56)/36.598$ $= 0.40$ ดังนั้น **ค่า LOD ของ GA เท่ากับ 0.40 พีพีเอ็ม**	ค่า LOQ ของค่า Y จากสมการ $Y_{lod} = a + 10S_{x/y}$ จะได้ $Y_{lod} = -23.56 + 10(4.94) = 25.81$ หาค่าความเข้มข้น X จากสมการเส้นตรง $Y = 36.598X - 23.56$ จะได้ $X = (25.81+23.56)/36.598$ $= 1.35$ ดังนั้น **ค่า LOQ ของ GA เท่ากับ 1.35 พีพีเอ็ม**

ส่วนค่า LOD และ LOQ ของสารมาตรฐานอื่น ๆ คำนวณในทำนองเดียวกัน

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-สกุล นางสาวเบญจภรณ์ ปาวิน

วัน เดือน ปีเกิด 16 พฤศจิกายน 2529

ประวัติการศึกษา สำเร็จการศึกษามัธยมศึกษาตอนปลาย
จากโรงเรียนมงฟอร์ตวิทยาลัย แผนกมัธยม จังหวัดเชียงใหม่ ปีการศึกษา 2547

สำเร็จการศึกษาปริญญาตรีวิทยาศาสตรบัณฑิต
สาขาเคมี มหาวิทยาลัยแม่โจ้ ปีการศึกษา 2552

การนำเสนอผลงาน

1. การประชุมนานาชาติ Separation Science Singapore 2010
   ณ Biopolis Park ประเทศสิงคโปร์ ระหว่างวันที่ 5-6 สิงหาคม 2553
2. การประชุมนานาชาติ Pure and Applied Chemistry Conference 2012 (PACCON 2012) ณ โรงแรมดิเอ็มเพรส จังหวัดเชียงใหม่
   ระหว่างวันที่ 11 – 13 มกราคม 2555

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved