ΓΕΩΡΓΙΟΥ Χ. ΚΤΙΣΤΗ

ΜΑΘΗΜΑΤΑ ΦΥΣΙΚΗΣ ΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗΣ

Τέταρτη έκδοση

ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΖΗΤΗ

ISBN 978-960-456-062-2

Φωτοστοιχειοθεσία
Εκτύπωση

Π. ΖΗΤΗ & Σια ΟΕ
18ο χλμ Θεσ/νίκης-Περαίας
Τ.Θ. 4171 • Περαία Θεσσαλονίκης • Τ.Κ. 570 19
Τηλ.: 23920 72.222 (10 γραμ.) - Fax: 23920 72.229
e-mail: info@ziti.gr

Βιβλιοπωλείο

ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΖΗΤΗ
Αρμενοπούλου 27 • 546 35 Θεσσαλονίκη
Τηλ. 2310 203.720, Fax 2310 211.305
e-mail: sales@ziti.gr

www.ziti.gr

Πρόλογος 4ης έκδοσης

Η τέταρτη έκδοση του βιβλίου "Μαθήματα Φυσικής Φαρμακευτικής" έχει για σκοπό, όπως και οι προηγούμενες εκδόσεις του, να δώσει στους αναγνώστες τις ειδικές εκείνες φυσικές και φυσικοχημικές γνώσεις που είναι απαραίτητες για την κατανόηση της ερμηνείας των φαινομένων που παρουσιάζονται στην παρασκευή και τον έλεγχο των φαρμάκων.

Το βιβλίο εκδόθηκε για πρώτη φορά το 1986 για να καλύψει τις διδακτικές ανάγκες του υποχρεωτικού μαθήματος "Φυσική Φαρμακευτική", το οποίο διδάσκεται στους τριτοετείς φοιτητές του Τμήματος Φαρμακευτικής του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης. Μετά τις βελτιώσεις, που έγιναν με τη δεύτερη (1993) και τρίτη (1998), η τέταρτη έκδοση θεωρήθηκε αναγκαία για να εκσυγχρονίσει την παλαιά ύλη όπως και για να συμπεριλάβει νέα, η οποία θεωρείται απαραίτητη για τις γνώσεις των φαρμακοποιών μετά και τις αλλαγές που έγιναν στο πρόγραμμα σπουδών του Τμήματος Φαρμακευτικής.

Τα σχόλια για τη μορφή του βιβλίου, τις ασάφειες, τα λάθη ή τις τυπογραφικές αβλεψίες θα είναι χρήσιμα και ευπρόσδεκτα, ώστε τα "Μαθήματα Φυσικής Φαρμακευτικής" να βελτιωθούν ακόμη περισσότερο σε μια μελλοντική τους έκδοση.

Θεσσαλονίκη 2007 — Γεώργιος Χ. Κτίστης

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή

2. Διάλυση Φαρμακευτικών Ουσιών

5. Μέγεθος Σωματιδίων

6. Φαρμακευτικές Διασπορές

7. Διάχυση και Διάλυση Φαρμάκων

Γεώργιος Κτίστης

1 Εισαγωγή

Η Φαρμακευτική είναι μια επιστήμη στην οποία βρίσκουν εφαρμογή τα ερευνητικά αποτελέσματα και των άλλων Φυσικών επιστημών. Ο φαρμακοποιός, που εργάζεται στην εκπαίδευση, τη βιομηχανία ή τη διακίνηση των φαρμάκων, πρέπει να γνωρίζει τις τελευταίες εξελίξεις των άλλων επιστημών και να μπορεί να τις εφαρμόζει ή τουλάχιστον να παρακολουθεί την εφαρμογή τους, στη δική του επιστήμη. Για να γίνει όμως αυτό, που σήμερα είναι απαραίτητο περισσότερο από κάθε άλλη φορά, θα πρέπει ο φαρμακοποιός να γνωρίζει τις βασικές αρχές των άλλων συγγενών επιστημών.

Στο κεφάλαιο αυτό θα αναφερθούν μερικές βασικές αρχές της Φυσικής και των Μαθηματικών, που πρέπει να είναι γνωστές για να μελετηθούν τα επόμενα κεφάλαια της Φυσικής Φαρμακευτικής, όπου γίνονται εφαρμογές της Φυσικής στη Φαρμακευτική.

1.1 Μεθοδολογία της Επιστημονικής Έρευνας

Η φυσική και η χημεία είναι οι πρώτες από τις άλλες φυσικές επιστήμες που στην έρευνά τους ακολουθούν μία ασφαλή και αποδοτική μέθοδο. Σύμφωνα με τη μέθοδο αυτή γίνεται προσπάθεια με την παρατήρηση και το πείραμα, να βρεθεί η αιτία που προκαλεί ένα φαινόμενο και να το ερμηνεύσει.

Με την απλή παρατήρηση ενός φαινομένου, όπως ακριβώς αυτό συμβαίνει στη φύση, δεν εξάγονται πάντοτε ασφαλή συμπεράσματα. Γι' αυτό γίνεται το ***πείραμα*** όπου επαναλαμβάνεται σκόπιμα πολλές φορές το φαινόμενο κάτω από συνθήκες που ρυθμίζονται και ελέγχονται. Με το πείραμα δίνεται η δυνατότητα να μετρηθούν με ακρίβεια τα διάφορα μεγέθη που υπεισέρχονται στο φαινόμενο που εξετάζεται. Από τις μετρήσεις αυτές βρίσκεται η μαθηματική συνάρτηση που υπάρχει μεταξύ των διαφόρων μεγεθών του φαινομένου. Αυτή η λογική σχέση, που συνδέει τα διάφορα μεγέθη που εμφανίζονται σε ένα φαινόμενο, αποτελεί ένα ***νόμο***.

Ο λογικός συνδυασμός πολλών νόμων και η συνένωσή τους σε ένα ενιαίο λογικό σύστημα οδηγεί, κατ' αρχάς, σε μια ***υπόθεση*** για την αιτία που προκαλεί τα φαινόμενα μιας ορισμένης κατηγορίας. Αν αυτή η υπόθεση ερμηνεύει όλα τα γνωστά φαινόμενα μιας κατηγορίας και επιπλέον προβλέπει νέα φαινόμενα, τότε η υπόθεση αυτή γίνεται θεωρία. Η ***θεωρία*** δηλαδή είναι ένα λογικό σύστημα που ερμηνεύει ορισμένη ομάδα φαινομένων και οδηγεί στην ανακάλυψη νέων φαινομένων. Η αξία μιας θεωρίας είναι τόσο μεγαλύτερη όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των φαινομένων που ερμηνεύει. Όταν ανακαλυφθεί έστω και ένα φαινόμενο που δεν μπορεί η θεωρία να το ερμηνεύσει τότε αυτή εγκαταλείπεται ή τροποποιείται, ώστε να συμφωνεί απόλυτα με τις προόδους της πειραματικής έρευνας.

1.2 Μονάδες και Διαστάσεις

Κάθε μέγεθος που χρησιμοποιείται στην περιγραφή των φυσικών φαινομένων ονομάζεται ***φυσικό μέγεθος***. Η ***μέτρηση*** ενός φυσικού μεγέθους συνίσταται στη σύγκριση αυτού με άλλο ομοειδές του το οποίο, κατά συνθήκη, γίνεται δεκτό σαν μονάδα. Η ***αριθμητική τιμή*** που φανερώνει πόσες φορές περιέχεται η μονάδα σε ένα μέγεθος χαρακτηρίζεται σαν ***μέτρηση***, όταν δίνεται απευθείας από ένα όργανο μετρήσεων ή σαν ***αποτέλεσμα***, όταν προσδιορίζεται μετά από κάποια επεξεργασία των πειραματικών μετρήσεων.

Οι μονάδες που χρησιμοποιούνται για τη μέτρηση των φυσικών μεγεθών διακρίνονται σε ***θεμελιώδεις μονάδες*** και ***παράγωγες μονάδες***.

Οι θεμελιώδεις μονάδες ορίζονται ανεξάρτητα μεταξύ τους ενώ οι παράγωγες παράγονται από τις θεμελιώδεις με τη βοήθεια των σχέσεων που συνδέουν τα διάφορα μεγέθη. Η επιλογή ενός συστήματος μονάδων είναι αποτέλεσμα συμφωνίας των επιστημόνων οι οποίοι διαλέγουν τις μονάδες που θα θεωρήσουν θεμελιώδεις με κριτήρια θεωρητικής συνέπειας και πρακτικής χρησιμότητας. Με την πρόοδο των επιστημών ενδέχεται να αλλάξουν και οι ανάγκες για μονάδες. Παλαιότερα μετρικά συστήματα όπως το C.G.S. με θεμελιώδεις μονάδες το εκατοστόμετρο (cm), το γραμμάριο (g) και το δευτερόλεπτο (s) και το

M.K.S. με θεμελιώδεις μονάδες το μέτρο (m), το χιλιόγραμμο (Kg) και το δευτερόλεπτο (s), αντικαταστάθηκαν από το Διεθνές Σύστημα Μονάδων S.I. (Systeme International) το οποίο έχει για θεμελιώδεις μονάδες το μέτρο (m) το χιλιόγραμμο (Kg), το δευτερόλεπτο (s), το αμπέρ (A), το κέλβιν (K), το μολ (mol) και την καντέλα (cd). Ακόμη και σήμερα εξακολουθούν να επιβιώνουν μερικές μονάδες έξω από το σύστημα S.I., όπως είναι το λεπτό (min), το άνγκστρομ (Å) κ.ά.

Κάθε φυσικό μέγεθος βρίσκεται σε ορισμένη σχέση με τα θεμελιώδη μεγέθη και μπορεί να παρασταθεί σαν συνάρτηση αυτών. Έτσι π.χ. το εμβαδόν (A) και η ταχύτητα (υ) είναι:

$$\mathrm{A} = \text{μήκος} \cdot \text{μήκος}$$

$$\upsilon = \frac{\text{μήκος}}{\text{χρόνος}}$$

Αν παρασταθεί το μήκος με L, η μάζα με M και ο χρόνος με T, οι παραπάνω σχέσεις γράφονται συμβολικά:

$$\begin{aligned} \mathrm{A} &= \mathrm{L} \cdot \mathrm{L} = \mathrm{L}^2 \\ \upsilon &= \frac{\mathrm{L}}{\mathrm{T}} = \mathrm{L} \cdot \mathrm{T}^{-1} \end{aligned} \qquad (1.2)$$

ή

$$\begin{aligned} \mathrm{A} &= \mathrm{L}^2 \cdot \mathrm{M}^0 \cdot \mathrm{T}^0 \\ \upsilon &= \mathrm{L}^1 \cdot \mathrm{M}^0 \cdot \mathrm{T}^{-1} \end{aligned} \qquad (1.3)$$

Οι εκθέτες των θεμελιωδών μεγεθών στις εξισώσεις (1.3) ονομάζονται ***διαστάσεις των μεγεθών***. Δηλαδή, οι διαστάσεις του εμβαδού είναι 2, 0, 0 και της ταχύτητας 1, 0, –1. Καταχρηστικά, όμως, όταν λέμε διαστάσεις ενός φυσικού μεγέθους, εννοούμε όλο το δεξιό μέλος των εξισώσεων (1.2), δηλαδή για το εμβαδό το L^2 και για την ταχύτητα το $\mathrm{L} \cdot \mathrm{T}^{-1}$.

Οι μαθηματικοί τύποι που εκφράζουν τους νόμους της φυσικής είναι εξισώσεις και θα πρέπει οι διαστάσεις του ενός μέλους της εξίσωσης να είναι ίσες με τις διαστάσεις του άλλου. Αυτό μπορεί να χρησιμεύσει για κριτήριο ορθότητας ενός τύπου. Δηλαδή όταν υπολογίζονται οι διαστάσεις των μελών ενός τύπου θα πρέπει να υπάρχει ισότητα, μεταξύ των διαστάσεων των δύο μελών του.

Το ***μήκος*** χρησιμοποιείται για τη μέτρηση της απόστασης και έχει για μονάδα το ***μέτρο*** (m). Αυτό οριζόταν από την απόσταση των δύο γραμμών που υπάρχουν στον κανόνα του ιριδιούχου λευκόχρυσου που φυλάγεται στο Διεθνές Γραφείο Μέτρων και σταθμών στο παρισινό προάστιο Sèrves. Αργότερα ορίσθηκε από την εξίσωση:

$$1 \text{ m} = 1{,}64076373 \times 10^6 \lambda_{\mathrm{Kr}-86} \tag{1.4}$$

όπου $\lambda_{\mathrm{Kr}-86}$ είναι το μήκος κύματος, σε κενό, της πορτοκαλί γραμμής του φάσματος του Κρυπτού-86. Το 1983 η απόφαση να ορισθεί η ταχύτητα του φωτός με μηδενικό πειραματικό σφάλμα οδήγησε τους μετρολόγους σε ένα νέο ορισμό του μέτρου που βασίζεται ακριβώς στην ταχύτητα του φωτός ($c = 299792458$ $\mathrm{m \cdot sec^{-1}}$). Έτσι ο επίσημος ορισμός του μέτρου σήμερα είναι:

Το μέτρο είναι το μήκος του διαστήματος που διανύει το φως στο κενό σε χρόνο 1/299792458 του δευτερολέπτου.

Στη Φαρμακευτική, συνήθως, χρησιμοποιείται το εκατοστόμετρο (cm) που ισούται με το 1/100 του μέτρου. Στη μικροσκοπία το μήκος εκφράζεται με μικρόμετρα (μm) ή (μ), νανόμετρα (nm) ή (mμ) και angstroms ($1\ \text{Å} = 10^{-8}$ cm).

Το ***εμβαδό*** και ο ***όγκος*** χρησιμοποιούνται για τη μέτρηση της επιφάνειας και του χώρου αντίστοιχα. Αυτά έχουν για μονάδες μέτρησης τις παράγωγες μονάδες ***τετραγωνικό μέτρο*** (m^2) και ***κυβικό μέτρο*** (m^3). Στο σύστημα C.G.S. χρησιμοποιείται το τετραγωνικό εκατοστόμετρο (cm^2) και το κυβικό εκατοστόμετρο (cm^3) ή (cc). Αρχική μονάδα όγκου ήταν το λίτρο (*l*) και οριζόταν με τον όγκο ενός χιλιόγραμμου νερού σε 4°C που ισούται με 1000 cm^3. Στη Φαρμακευτική χρησιμοποιείται πολύ το χιλιοστόλιτρο (ml) που συνήθως λέγεται μιλιλίτρο (mililiter).

Η ***μάζα*** χρησιμοποιείται για τη μέτρηση της ύλης και έχει για μονάδα μέτρησης το ***χιλιόγραμμο*** (kg). Αυτό ισούται με τη μάζα του προτύπου χιλιογράμμου που είναι ένας κύλινδρος από ιριδιούχο λευκόχρυσο και φυλάγεται στο Διεθνές Γραφείο Μέτρων και Σταθμών στο Sèrves. Στο σύστημα C.G.S. μονάδα μέτρησης της μάζας είναι το γραμμάριο (g). Στη Φαρμακευτική συνήθως χρησιμοποιούνται το γραμμάριο (g) και το χιλιοστόγραμμο (milligram) (mg), ενώ οι συμβολισμοί (mcg) και (γ) χρησιμοποιούνται, μερικές φορές, στη συνταγογραφία και στη βιολογία αντίστοιχα για τον συμβολισμό του μικρογραμμαρίου (μg).

Η ***πυκνότητα*** μιας ουσίας δίνει τη μάζα της, που περιέχεται στη μονάδα όγκου, σε ορισμένη θερμοκρασία και πίεση. Στο σύστημα C.G.S. η πυκνότητα εκφράζεται σε γραμμάρια ανά κυβικό εκατοστόμετρο (g/cm^3).

Ως ***σχετική πυκνότητα*** μιας ουσίας, $d_{t_2}^{t_1}$, ορίζεται ο λόγος του ορισμένου όγκου της ουσίας αυτής σε θερμοκρασία t_1 ως προς τη μάζα ίσου όγκου νερού σε θερμοκρασία t_2. Αν δεν ορίζεται αλλιώς, χρησιμοποιείται η σχετική πυκνότητα d_{20}^{20}. Η σχετική πυκνότητα είναι καθαρός αριθμός.

Ειδικό βάρος μιας ουσίας ονομάζεται το πηλίκο της πυκνότητάς της προς την πυκνότητα του νερού. Οι πυκνότητες και των δύο ουσιών μετριούνται στην ίδια θερμοκρασία εκτός αν ορίζεται αλλιώς. Το ειδικό βάρος είναι καθαρός αριθμός και συχνά ορίζεται σαν το πηλίκο της μάζας μιας ουσίας προς τη μάζα ίσου όγκου νερού σε ορισμένες θερμοκρασίες. Γι’ αυτό, όταν δίνεται επίσημα, το ειδικό βάρος καθορίζονται οι θερμοκρασίες μέτρησης της πυκνότητας της ουσίας και του νερού. Η Ελληνική Φαρμακοποιία ζητά η πυκνότητα των ουσιών να εκφράζεται στους 20 °C. Το ειδικό βάρος και η πυκνότητα μιας ουσίας είναι δύο διάφορα φυσικά μεγέθη, που διαφέρουν στη μονάδα μέτρησής τους και στην αριθμητική τιμή τους, ακόμη και όταν εκφράζονται στο ίδιο σύστημα μονάδων. Επειδή όμως η διαφορά της αριθμητικής τιμής τους είναι σχετικά μικρή στους φαρμακευτικούς υπολογισμούς το ειδικό βάρος και η πυκνότητα θεωρούνται συχνά συνώνυμοι όροι.

Στον πίνακα 1.1 αναφέρονται μερικά φυσικά μεγέθη, που συναντιούνται συχνά στη Φαρμακευτική. Στις διπλανές στήλες φαίνονται οι διαστάσεις και οι μονάδες μέτρησής τους στα συστήματα μονάδων C.G.S. και S.I. Το newton (N) και το pascal (Pa) είναι οι μονάδες μέτρησης της δύναμης και της πίεσης αντίστοιχα στο σύστημα S.I.

Εκτός από τις μονάδες των φυσικών μεγεθών, που αναφέρονται στον πίνακα 1.1, στη Φαρμακευτική χρησιμοποιούνται συχνά και τα πολλαπλάσια ή υποπολλαπλάσια στην ονομασία και τον συμβολισμό κάποιας μονάδας, για να σχηματισθεί το πολλαπλάσιο ή υποπολλαπλάσιό της. Στην πρώτη στήλη του πίνακα 1.2 φαίνεται η δύναμη του δέκα με την οποία πρέπει να πολλαπλασιασθεί μια μονάδα, για να βρεθεί η αντιστοιχία της με το πολλαπλάσιο ή υποπολλαπλάσιό της. Έτσι για παράδειγμα έχουμε:

$$1 \text{ nm (νανόμετρο)} = 1\times10^{-9} \text{ m (μέτρα)} \qquad (1.5)$$

Πίνακας 1.1: *Διαστάσεις και Μονάδες Φυσικών Μεγεθών*

Μέγεθος		**Διαστάσεις**	**Μονάδα C.G.S.**	**Μονάδα S.I.**	
Μήκος	(*l*)	L	cm	m	$= 10^2$ cm
Μάζας	(m)	M	g	Kg	$= 10^3$ g
Χρόνος	(t)	T	sec	s	= 1 sec
Εμβαδό	(A)	L^2	cm^2	m^2	$= 10^4\ cm^2$
Όγκος	(V)	L^3	cm^3	m^3	$= 10^6\ cm^3$
Πυκνότητα	(ρ)	$M \cdot L^{-3}$	g/cm^3	$Kg \cdot m^{-3}$	$= 10^{-3}\ g \cdot cm^{-3}$
Ταχύτητα	(υ)	$L \cdot T^{-1}$	cm/sec	$m \cdot s^{-1}$	$= 10^2\ cm \cdot sec^{-1}$
Επιτάχυνση	(α)	$L \cdot T^{-2}$	cm/sec^2	$m \cdot s^{-2}$	$= 10^2\ cm \cdot sec^{-2}$
Δύναμη	(f)	$M \cdot L \cdot T^{-2}$	$dyne = g \cdot cm/sec^2$	$N = Kg \cdot m \cdot s^{-2} = J \cdot m^{-1}$	$= 10^5$ dyne
Πίεση	(p)	$M \cdot L^{-1} \cdot T^{-2}$	$dyne/cm^2$	$P_a = N \cdot m^{-2} = Kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$	$= 10\ dyne \cdot cm^{-2}$
Ιξώδες	(η)	$M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}$	poice	$p_a \cdot s$	= 10 p
Συντελεστής επιφανει-ακής τάσης	(γ)	$M \cdot T^{-2}$	dyne/cm	$N \cdot m^{-1}$	$= 10^{-3}\ dyne \cdot cm^{-1}$
Ενέργεια	(E)	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$erg = g \cdot cm^2/sec^2$	$J = Kg \cdot m^2 \cdot s^{-2} = N \cdot m$	$= 10^7$ erg
Ισχύς	(P)	$M \cdot L^2 \cdot T^{-3}$	erg/sec	W = J/s	$= 17^7$erg/sec
Απορροφηθείσα δόση ακτινοβολίας	(D)	$L^2 \cdot T^{-2}$	$rad = 10^2$ erg/g	$Gy = J \cdot Kg^{-1}$	$= 10^2$ rad

Πίνακας 1.2: *Πολλαπλάσια και Υποπολλαπλάσια των Μονάδων*

Πολλαπλάσια	Πρόθεμα	Σύμβολο
10^{12}	τερα	T
10^{9}	γιγα	G
10^{6}	μεγα	M
10^{3}	κιλο	K
10^{-3}	μιλι	m
10^{-6}	μικρο	μ
10^{-9}	νανο	n
10^{-12}	πικο	p

1.2.1 Σημαντικά ψηφία – Στρογγυλοποίηση αριθμών

Η αριθμητική τιμή που εκφράζει το αποτέλεσμα μιας μέτρησης ή ενός υπολογισμού περιέχει έναν συγκεκριμένο αριθμό ψηφίων. Ο αριθμός αυτός των ψηφίων δηλώνει τον βαθμό ακρίβειας των μετρήσεων ή των υπολογισμών. Σύμφωνα με τον κανόνα που εφαρμόζεται και στη Φαρμακευτική το τελευταίο ψηφίο μιας αριθμητικής τιμής και μόνον αυτό, έχει κάποια αβεβαιότητα, ενώ όλα τα άλλα ψηφία είναι ***βέβαια ψηφία.*** Για παράδειγμα αναφέρεται η ζύγιση μιας ουσίας με έναν ζυγό, του οποίου οι μικρότερες υποδιαιρέσεις είναι 1 g. Όταν το βάρος της ουσίας που ζυγίζεται είναι λίγο μεγαλύτερο από 4 g και εκτιμηθεί, με τον ζυγό αυτόν, ότι το αβέβαιο κλάσμα του γραμμαρίου είναι 0,3 g, το βάρος της ουσίας γράφεται ως 4,3 g. Αν επαναληφθεί η ζύγιση και εκτιμηθεί ότι το βάρος είναι 4,1 g ή 4,5 g η τελική τιμή γράφεται ως $4{,}3 \pm 0{,}2$ g. Δηλαδή υπάρχει ένας προσδιορισμός ακρίβειας $\pm 0{,}2$ g. Αν ο προσδιορισμός αυτός δεν υπάρχει, θεωρείται ότι είναι $\pm$ 1 του τελευταίου ψηφίου της αριθμητικής τιμής. Η εγγραφή του παραπάνω βάρους ως 4,30 g είναι ανακριβής, διότι ο ζυγός έχει τη δυνατότητα να δίνει ακρίβεια μέχρι και το πρώτο δεκαδικό ψηφίο του γραμμαρίου. Η εγγραφή της παραπάνω τιμής ως 4 g είναι ελλιπής, διότι έτσι ως αβέβαιο ψηφίο θεωρείται το 4. Τέτοιου είδους παραλείψεις γίνονται συνήθως όταν το τελευταίο δεκαδικό ψηφίο είναι μηδέν.

Ο αριθμός των ***σημαντικών ψηφίων*** μιας αριθμητικής τιμής δείχνει το εύρος της περιοχής μέσα στην οποία αυτή είναι ακριβής. Στον υπολογισμό του αριθμού των σημαντικών ψηφίων μιας τιμής το μηδέν (0) θεωρείται σημαντικό ψηφίο, εκτός εάν αυτό γράφεται για να καθορίσει την τάξη μεγέθους της τιμής. Έτσι τα τρία πρώτα μηδενικά της τιμής 0,00350 δεν είναι σημαντικά, αλλά υπάρχουν για να καθορίσουν την δεκαδική αξία του αριθμού, ενώ το τελευταίο μηδενικό είναι σημαντικό ψηφίο, διότι η εγγραφή του δεν έγινε για να καθορισθεί η τάξη μεγέθους της τιμής, αλλά ο βαθμός ακριβείας της. Ο αριθμός των σημαντικών ψηφίων της τιμής 3500 είναι ασαφής, διότι δεν είναι γνωστό αν τα δύο μηδενικά δηλώνουν και το βαθμό ακριβείας της τιμής ή γράφηκαν μόνον για να καθορίσουν την τάξη μεγέθους της τιμής. Για να ξεπερασθεί αυτή η ασάφεια η τιμή αυτή είναι προτιμότερο να γράφεται με την εκθετική της μορφή $3{,}5\times10^3$, όταν έχει δύο σημαντικά ψηφία ή $3{,}500\times10^3$ όταν έχει τέσσερα σημαντικά ψηφία. Στον πίνακα 1.3 φαίνεται ο αριθμός των σημαντικών ψηφίων μερικών αριθμητικών τιμών.

Πίνακας 1.3: *Σημαντικά ψηφία διαφόρων αριθμητικών τιμών*

Τιμή	Αριθμός σημαντικών ψηφίων
35	2
350,0	4
0,0035	2
3,5000	5
$3{,}5\times10^3$	2
$3{,}500\times10^3$	4
3500	ασαφής

Σήμερα οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές όπως και οι αριθμομηχανές δίνουν τα αποτελέσματα με μεγάλο αριθμό δεδαδικών ψηφίων. Επειδή ο αριθμός των ψηφίων μιας αριθμητικής τιμής δηλώνει και τον βαθμό ακριβείας της τιμής αυτής, πρέπει τα αποτελέσματα των υπολογιστών να στρογγυλοποιούνται για να έχουν το σωστό αριθμό σημαντικών ψηφίων. Για τη στρογγυλοποίηση αυτή ισχύουν τα παρακάτω:

α) Η απόρριψη των επιπλέον ψηφίων αυξάνει το τελευταίο ψηφίο που απομένει κατά 1, όταν το ψηφίο που ακολουθεί είναι 5 ή μεγαλύτερο του 5, ενώ παραμένει το ίδιο, όταν είναι μικρότερο του 5. Έτσι η τιμή 15,3264 στρογγυλοποιείται στην τιμή με τέσσερα σημαντικά ψηφία 15,33, ενώ η τιμή

15,3244 στην τιμή 15,32.

β) Το τελικό αποτέλεσμα της πρόσθεσης ή της αφαίρεσης τιμών που έχουν διαφορετικό αριθμό δεκαδικών ψηφίων πρέπει να έχει τον ίδιο αριθμό δεκαδικών ψηφίων με αυτά που έχει η τιμή με τα λιγότερα δεκαδικά ψηφία. Έτσι το άθροισμα των τιμών $25{,}32+3{,}4=28{,}72$ στρογγυλοποιείται στην τιμή 28,7. Ο κανόνας αυτός δεν εφαρμόζεται στη συνταγογραφία όπου η αριθμητική τιμή που εκφράζει το βάρος ή τον όγκο κάθε συστατικού της συνταγής πρέπει να έχει αρκετή ακρίβεια, ώστε το εκατοστιαίο σφάλμα, που μπορεί να γίνει κατά τη μέτρηση, να μην είναι μεγαλύτερο από 5% ή από αυτό που επιτρέπει η μέγιστη επιτρεπτή δόση της φαρμακευτικής ουσίας.

γ) Το τελικό αποτέλεσμα του πολλαπλασιασμού ή της διαίρεσης των αριθμητικών τιμών πρέπει να έχει τον ίδιο αριθμό δεκαδικών ψηφίων με αυτόν που έχει και η τιμή με τα λιγότερα δεκαδικά ψηφία. Έτσι το γινόμενο των τιμών $3{,}52\times 2{,}4 = 8{,}448$ στρογγυλοποιείται στην τιμή 8,4. Ένας ακριβέστερος κανόνας για τον πολλαπλασιασμό και τη διαίρεση είναι το αποτέλεσμα να στρογγυλοποιείται σε μια τιμή της οποίας τα σημαντικά ψηφία να επιτρέπουν σφάλμα μόλις μικρότερο από αυτό της τιμής με το μεγαλύτερο σφάλμα. Έτσι επειδή το σφάλμα της τιμής 3,52 είναι $\frac{0{,}01\times100}{3{,}52}=0{,}28$ και της τιμής 2,4 είναι $\frac{0{,}1\times100}{2{,}4}=4{,}16$ θα πρέπει το σφάλμα του αποτελέσματος να είναι μόλις μικρότερο από 4,16. Αυτό επιτυγχάνεται όταν το γινόμενο στρογγυλοποιείται στο πρώτο δεκαδικό ψηφίο όπου το σφάλμα είναι $\frac{0{,}1\times100}{8{,}4}=1{,}19$ το οποίο είναι μόλις μικρότερο του 4,16. Αν στρογγυλοποιούταν στον ακέραιο θα ήταν λάθος, διότι το σφάλμα θα ήταν $\frac{1\times100}{8}=12{,}5$ μεγαλύτερο του 4,16. Επίσης αν στρογγυλοποιούταν στο δεύτερο δεκαδικό ψηφίο θα ήταν και πάλι λάθος, διότι το σφάλμα θα ήταν $\frac{0{,}01\times100}{8{,}45}=0{,}12$ πολύ μικρότερο του 4,16.

δ) Στον πολλαπλασιασμό ή τη διαίρεση μιας τιμής με έναν λογαριθμικό αριθμό διατηρείται ο ίδιος αριθμός δεκαδικών ψηφίων με αυτόν που έχει η τιμή πριν από τον πολλαπλασιασμό ή τη διαίρεση.

1.3 Εύρεση Εξίσωσης Πειραματικών Αποτελεσμάτων

Στις ερευνητικές μελέτες και εργασίες γίνεται προσπάθεια να συσχετισθούν μεταξύ τους τα διάφορα φυσικά μεγέθη του φαινομένου και να βρεθούν οι εξισώσεις που ανταποκρίνονται, όσο το δυνατόν περισσότερο, στα πειραματικά αποτελέσματα. Το πρόβλημα, συνήθως απλουστεύεται όταν εξετάζεται η σχέση δύο μεγεθών που μεταβάλλονται με κάποιο ορισμένο ρυθμό ή ειδικό τρόπο. Στην περίπτωση αυτή το ένα μέγεθος μεταβάλλεται από τον ερευνητή και θεωρείται η ***ανεξάρτητη μεταβλητή*** (x), ενώ το άλλο παίρνει τιμές που εξαρτιούνται από τις τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής και είναι η ***εξαρτημένη μεταβλητή*** (y). Η εξάρτηση μιας μεταβλητής y από τη μεταβολή μιας άλλης x εκφράζεται μαθηματικά με τη συνάρτηση:

$$y = f(x) \tag{1.6}$$

Αν τα ζεύγη των τιμών y_i και x_i έχουν σταθερό πηλίκο, δηλαδή:

$$\frac{y_1}{x_1} = \frac{y_2}{x_2} = \ \dots \ = \frac{y_n}{x_n} = K \tag{1.7}$$

Οι τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής είναι ανάλογες με τις τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής και συμβολίζεται:

$$y \propto x \tag{1.8}$$

Τότε η εξίσωση, που συνδέει τις δύο μεταβλητές, έχει τη γραμμική μορφή:

$$y = Kx \tag{1.9}$$

Για τον καθορισμό αυτής της εξίσωσης αρκεί να προσδιοριστεί, από την (1.7), η σταθερά αναλογίας K.

Σε άλλες περιπτώσεις η εξίσωση που συνδέει τα δύο μεγέθη έχει τη γραμμική μορφή:

$$y = a \pm bx \tag{1.10}$$

Στην περίπτωση αυτή για να προκύψει ένα σταθερό πηλίκο, πρέπει να αφαιρείται ή να προστίθεται στις τιμές y ένας ορισμένος αριθμός a, δηλαδή:

$$\frac{y \mp a}{x} = b \tag{1.11}$$

Με τον προσδιορισμό των σταθερών a και b καθορίζεται η εξίσωση (1.10), που συνδέει τα δύο μεγέθη.

Στις περιπτώσεις που η σχέση των δύο μεταβλητών είναι μια ημιλογαριθμική ή λογαριθμική συνάρτηση της μορφής:

$$y = ae^{bx} \qquad \text{ή} \qquad y = ax^{b} \tag{1.12}$$

Με λογαρίθμηση έχουμε αντίστοιχα:

$$\mathbf{ln}\, y = \mathbf{ln}\, a + bx\,, \qquad \mathbf{ln}\, y = \mathbf{ln}\, a + b\, \mathbf{ln}\, x \tag{1.13}$$

Οπότε:

$$\frac{\mathbf{ln} y - \mathbf{ln} a}{x} = b, \qquad \frac{\mathbf{ln} y - \mathbf{ln} a}{\mathbf{ln} x} = b, \tag{1.14}$$

Δηλαδή υπάρχει σταθερός λόγος της διαφοράς ενός σταθερού αριθμού από το λογάριθμο των τιμών της εξαρτημένης μεταβλητής y προς την ανεξάρτητη μεταβλητή x ή τον λογάριθμό της. Στις περιπτώσεις αυτές προκύπτει σταθερός λόγος μετά από λογαρίθμηση των τιμών της εξαρτημένης μεταβλητής y, αφαίρεση ενός σταθερού αριθμού και διαίρεση με τις τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής x ή τους λογαρίθμους της. Με τον προσδιορισμό των σταθερών αριθμών a, b καθορίζεται η εξίσωση (1.12) που συνδέει τα δύο μεγέθη.

Αν αυτοί οι τρόποι συσχέτισης των μεγεθών δεν καταλήξουν σε θετικά αποτελέσματα, τότε χρησιμοποιούνται συναρτήσεις της μορφής:

$$y = a + bx + cx^2 + \ldots \tag{1.15}$$

Στις περιπτώσεις αυτές το πρόβλημα γίνεται δυσκολότερο και για τη λύση του, δηλαδή την εύρεση των σταθερών αριθμών a, b, c, …, καταφεύγουμε στη λύση ενός συστήματος εξισώσεων, με ισάριθμους αγνώστους, αλγεβρικά ή γραφικά. Σήμερα ο προσδιορισμός των σταθερών παραμέτρων ή συντελεστών της εξίσωσης (1.15) γίνεται με τους ηλεκτρονικούς υπολογιστές (Η/Υ).

1.4 Γραφική Παράσταση Φαινομένου

Η γραφική παράσταση ενός φαινομένου, συνήθως, γίνεται σε ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων το οποίο περιγράφεται στη συνέχεια. Από τα άλλα συστήματα συντεταγμένων, όπως είναι τα τρισορθογώνια και τα τριγωνικά, θα περιγραφεί το τριγωνικό διάγραμμα που χρησιμοποιείται στην παράσταση των φυσικών ιδιοτήτων των τριαδικών συστημάτων.

1.4.1 Ορθογώνιο σύστημα

Τα ορθογώνια συστήματα συντεταγμένων έχουν δύο κάθετους άξονες. Οι κλίμακες αυτών των αξόνων είναι, ανάλογα με την περίπτωση που εξετάζεται, γραμμικές, λογαριθμικές ή η μια γραμμική και η άλλη λογαριθμική (ημιλογαριθμικό σύστημα αξόνων). Στον οριζόντιο άξονα ή ***άξονα των τετμημένων*** μετριούνται οι τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής x. Στον κατακόρυφο ***άξονα των τεταγμένων*** μετριούνται οι τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής y.

Στο επίπεδο, που ορίζουν οι ***άξονες συντεταγμένων***, σημειώνονται τα σημεία, που αντιστοιχούν στα ζεύγη των πειραματικών αποτελεσμάτων (x_i, y_i). Χαράσσεται, μετά, η ευθεία ή η καμπύλη γραμμή, που διέρχεται από αυτά ή πλησιέστερα από αυτά τα σημεία. Το διάγραμμα που σχηματίζεται δείχνει, παραστατικά, την πορεία του φαινομένου και τη μορφή αλληλοεξάρτησης των μεγεθών του.

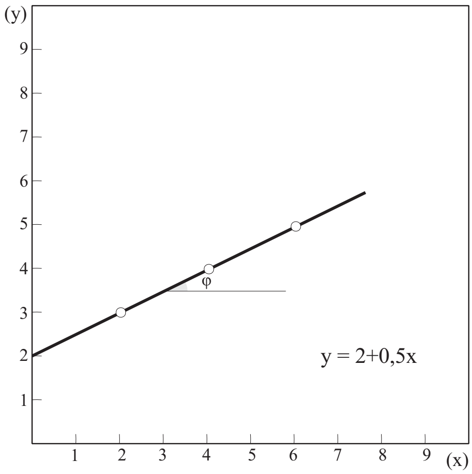
Από μια σωστή γραφική παράσταση ενός φαινομένου, μπορεί να προσδιοριστούν, σε πολλές περιπτώσεις, οι σταθερές της εξίσωσης που συνδέει τα μεγέθη του φαινομένου. Η απλούστερη περίπτωση είναι αυτή που υπάρχει γραμμική σχέση μεταξύ δύο μεταβλητών μεγεθών. Τότε η γραφική παράσταση του φαινομένου σε ορθογώνιο γραμμικό σύστημα συντεταγμένων, είναι ευθεία (σχ. 1.1α).

Από την εξίσωση (1.10), που είναι η γενική μορφή της γραμμικής συνάρτησης έχουμε:

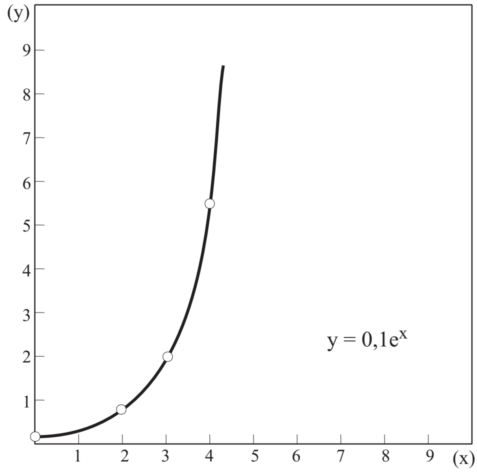
$$b = \frac{y \mp a}{x} \tag{1.16}$$

ή $$b = \frac{\Delta y}{\Delta x} \tag{1.17}$$

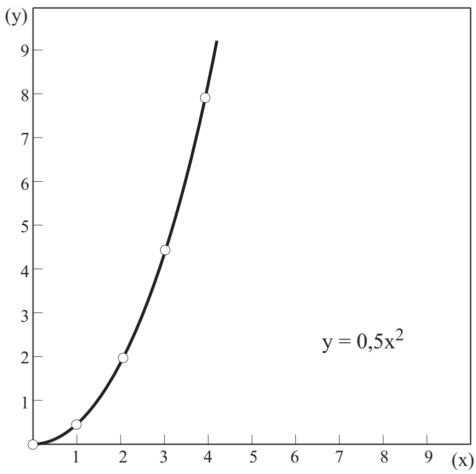
ή $$b = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \tag{1.18}$$



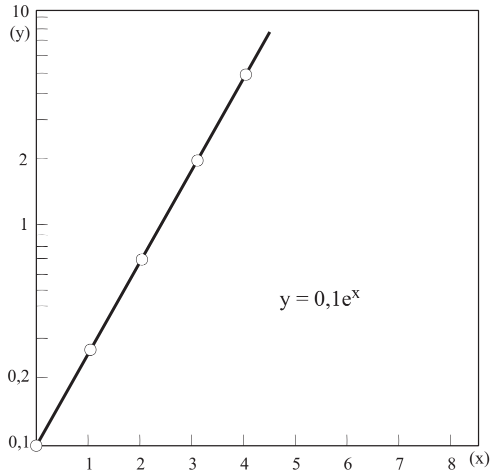
(α) Γραμμική μεταβολή σε ορθογώνιο σύστημα αξόνων



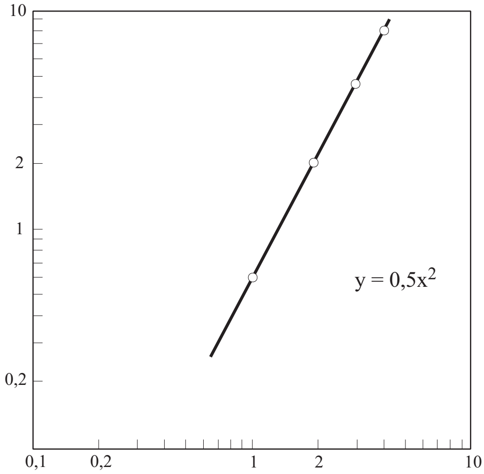
(β) Ημιλογαριθμική μεταβολή σε ορθογώνιο σύστημα αξόνων



(γ) Λογαριθμική μεταβολή σε ορθογώνιο σύστημα αξόνων



(δ) Ημιλογαριθμική μεταβολή σε ημιλογαριθμικό σύστημα αξόνων



(ε) Λογαριθμική μεταβολή σε λογαριθμικό σύστημα αξόνων

Σχήμα 1.1: Γραφικές παραστάσεις φαινομένων.

Στη γεωμετρία η κλίση μιας ευθείας ορίζεται από τη σχέση:

$$\lambda = \mathbf{\varepsilon\varphi}\,\varphi = \frac{\Delta y}{\Delta x} \tag{1.19}$$

Συνεπώς, η σταθερά b ισούται με την κλίση λ της ευθείας και μπορεί να υπολογισθεί από τη γωνία φ.

Από την εξίσωση (1.10) για $x=0$ έχουμε:

$$y = \pm a \tag{1.20}$$

Συνεπώς, η σταθερά a ισούται με την ***τεταγμένη στην αρχή***, δηλαδή με την τεταγμένη του σημείου τομής της ευθείας με τον άξονα των y.

Στις περιπτώσεις που η σχέση των δύο μεταβλητών μεγεθών του φαινομένου έχει μορφή εκθετικής εξίσωσης, η γραφική παράστασή του, σε ορθογώνιο γραμμικό σύστημα συντεταγμένων, δίνει καμπύλη γραμμή (σχ. 1.1β) και (σχ. 1.1γ).

Σε μερικές περιπτώσεις, όπως είναι αυτές που η εκθετική εξίσωση έχει τη μορφή των εξισώσεων (1.12), η γραφική παράσταση του φαινομένου σε ορθογώνιο ημιλογαριθμικό, ή λογαριθμικό σύστημα δίνει ευθεία (σχ. 1.1δ) και (σχ. 1.1ε). Η γραφική παράσταση ενός φαινομένου με ευθεία επιδιώκεται, γιατί πλεονεκτεί της καμπύλης γραμμής στον ευκολότερο και σαφέστερο καθορισμό της.

Από τις εξισώσεις (1.13) για $x=0$ ή $x=1$ έχουμε:

$$\mathbf{ln}\,y = \mathbf{ln}\,a \tag{1.21}$$

ή

$$y = a \tag{1.22}$$

Συνεπώς, οι σταθερές a ισούνται με την τεταγμένη στην αρχή ή την τεταγμένη στο 1 αντίστοιχα.

Από τις εξισώσεις (1.14) έχουμε:

$$\begin{aligned} b &= \frac{\mathbf{ln}y - \mathbf{ln}a}{x} \\ b &= \frac{\mathbf{ln}y - \mathbf{ln}a}{\mathbf{ln}x} \end{aligned} \tag{1.23}$$

$$b = \frac{\Delta \mathbf{ln} y}{\Delta x}$$

ή (1.24)

$$b = \frac{\Delta \mathbf{ln} y}{\Delta \mathbf{ln} x}$$

$$b = \frac{\mathbf{ln} y_2 - \mathbf{ln} y_1}{x_2 - x_1}$$

ή (1.25)

$$b = \frac{\mathbf{ln} y_2 - \mathbf{ln} y_1}{\ln x_2 - \ln x_1}$$

Στα ορθογώνια ημιλογαριθμικά ή λογαριθμικά συστήματα αξόνων η κλίση της ευθείας ισούται αντίστοιχα:

$$\lambda = \boldsymbol{\varepsilon\varphi\varphi} = \frac{\Delta \mathbf{ln} y}{\Delta x}$$

$$\lambda = \boldsymbol{\varepsilon\varphi\varphi} = \frac{\Delta \mathbf{ln} y}{\Delta \mathbf{ln} x} \tag{1.26}$$

Συνεπώς, οι σταθερές b ισούνται με τις κλίσεις των ευθειών και υπολογίζονται γραφικώς από τη γωνία φ. Για τον αλγεβρικό υπολογισμό των σταθερών αυτών χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις (1.25).

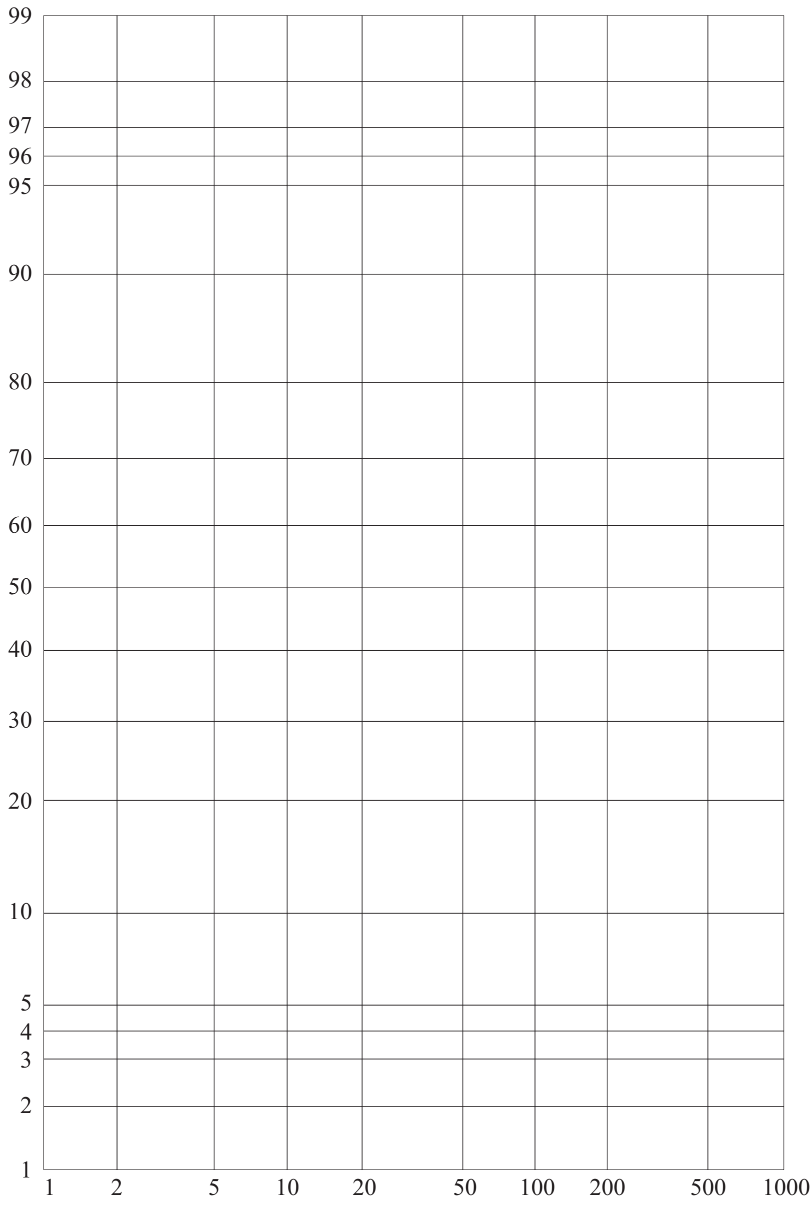
1.4.2 Λογαριθμικό – Πιθανοτήτων διάγραμμα

Το **λογαριθμικό - πιθανοτήτων διάγραμμα**, σχήμα 1.2, έχει δύο κάθετους άξονες ο ένας από τους οποίους είναι μια λογαριθμική κλίμακα και ο άλλος μία κλίμακα πιθανοτήτων.

Για τη σχεδίαση της **λογαριθμικής κλίμακας** σημειώνονται σε μια ευθεία τιμές που απέχουν από την αρχή όσο και ο δεκαδικός λογάριθμός τους.

Για τη σχεδίαση της **κλίμακας πιθανοτήτων** σημειώνονται σε μια ευθεία τιμές πιθανότητας που απέχουν από την αρχή όσο η τιμή u της συνάρτησης αθροιστικής κατανομής F(u).

$$F(u) = \int_{-\infty}^{u} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\upsilon^2}{2}} d\upsilon \tag{1.27}$$



Σχήμα 1.2: Λογαριθμικό – Πιθανοτήτων διάγραμμα.

Η συνάρτηση αυτή δίνει για κάθε τιμή του u την πιθανότητα F(u) ώστε η ανηγμένη μεταβλητή $\upsilon = \frac{x - \overline{x}}{\sigma}$ να είναι μικρότερη από την τιμή u.

Οι τιμές της συναρτήσεως F(u) βρίσκονται σε πίνακες βιβλίων στατιστικής. Για παράδειγμα δίνονται οι τιμές του πίνακα 1.4, με τις οποίες γράφεται η κλίμακα πιθανοτήτων του λογαριθμικού πιθανοτήτων διαγράμματος του σχήματος 1.6. Με τον ίδιο τρόπο μπορεί να σχεδιασθεί διάγραμμα με περισσότερες διαιρέσεις για να υπάρχει μεγαλύτερη ακρίβεια.

Τα λογαριθμικά - πιθανοτήτων διαγράμματα βρίσκουν εφαρμογή στην εύρεση των παραγόντων που καθορίζουν την κατανομή μεγέθους σωματιδίων ενός πλήθους τους, όπως θα δούμε στο κεφάλαιο "μέγεθος σωματιδίων".

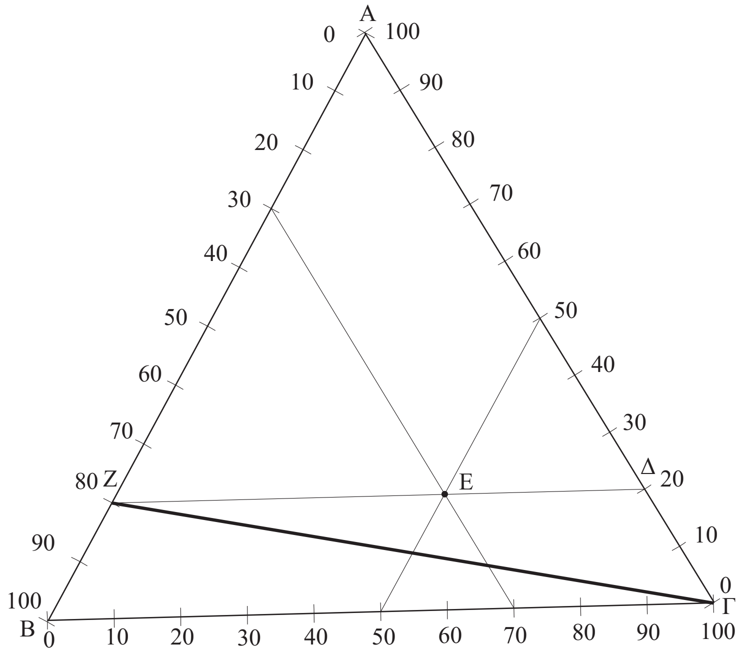
Πίνακας 1.4: *Τιμές της αθροιστικής κατανομής, F(u), για μερικές τιμές της u.*

u	**F(u)**	**u**	**F(u)**
2,33	99	–0,25	40
2,05	98	–0,53	30
1,88	97	–0,84	20
1,75	96	–1,29	10
1,65	95	–1,65	5
1,29	90	–1,75	4
0,84	80	–1,88	3
0,53	70	–2,05	2
0,25	60	–2,33	1
0,00	50		

1.4.3 Τριγωνικά διαγράμματα

Με τα τριγωνικά διαγράμματα παρουσιάζονται φυσικές ιδιότητες ενός συστήματος ουσιών σε συνάρτηση με τις συγκεντρώσεις τριών συστατικών του.

Το τριγωνικό διάγραμμα είναι ένα ισόπλευρο τρίγωνο (σχήμα 1.3) με βαθμολογημένες τις πλευρές του σε εκατοστά της πλευράς του. Η κάθε κορυφή του αντιπροσωπεύει ένα από τα τρία εξεταζόμενα συστατικά του συστήματος σε συγκέντρωση 100%. Π.χ. το σημείο Α παριστάνει "σύστημα" με συγκέντρωση



Σχήμα 1.3: Τριγωνικό διάγραμμα συστήματος των τριών συστατικών Α, Β και Γ.

ενός συστατικού Α = 100%, ενώ οι συγκεντρώσεις των άλλων δύο συστατικών είναι μηδενικές, Β = 0% και Γ = 0%. Τα σημεία κάθε πλευράς του τριγώνου αντιπροσωπεύουν συστήματα των δύο συστατικών του συστήματος που αντιστοιχούν στις κορυφές της πλευράς αυτής. Π.χ. το σημείο Δ της πλευράς ΑΓ παριστάνει σύστημα δύο συστατικών Α = 20% και Γ = 80%, ενώ η συγκέντρωση του συστατικού Β = 0%. Τέλος κάθε σημείο του τριγώνου αντιπροσωπεύει μίγμα των τριών συστατικών του συστήματος. Π.χ. το σημείο Ε παριστάνει σύστημα των τριών συστατικών Α = 20%, Β = 30% και Γ = 50%.

Τα σημεία που βρίσκονται σε ευθείες παράλληλες με μια πλευρά του τριγώνου αντιστοιχούν σε συστήματα που έχουν σταθερή συγκέντρωση του συστατικού που απουσιάζει από την πλευρά αυτή. Π.χ. οι ευθείες που είναι παράλληλες με την πλευρά ΒΓ παριστάνουν συστήματα στα οποία η συγκέντρωση του συστατικού Α είναι σταθερή, δηλαδή στα σημεία της ευθείας ΔΖ η συγκέντρωση του συστατικού Α = 20%.

Τα σημεία της ευθείας, που ενώνει μια κορυφή με ένα σημείο της απέναντι πλευράς της, αντιστοιχούν σε συστήματα που έχουν τα δύο συστατικά της πλευράς σε σταθερό λόγο συγκεντρώσεων. Π.χ. η ευθεία ΓΖ παριστάνει συστήματα στα οποία ο λόγος των συστατικών $A:B = 20:80$.

Για να σημειωθεί το σημείο που αντιπροσωπεύει ένα συγκεκριμένο σύστημα γνωστών συγκεντρώσεων των συστατικών του, βρίσκεται η τομή των ευθειών σταθερής συγκέντρωσης του κάθε συστατικού του. Π.χ. για να σημειωθεί το σημείο Ε (20%, 30%, 50%) βρίσκεται η τομή των ευθειών: σταθερής συγκέντρωσής του συστατικού $A = 20\%$, του συστατικού $B = 30\%$ και του συστατικού $\Gamma = 50\%$. Η τομή των δύο από τις τρεις αυτές ευθείες είναι αρκετή, διότι και η τρίτη υποχρεωτικά περνά από το ίδιο σημείο.

Τα τριγωνικά διαγράμματα βρίσκουν εφαρμογή στον καθορισμό της περιοχής που σχηματίζονται τα μικρογαλακτώματα, όπως και της περιοχής διαλυματοποιήσεως ενός φαρμάκου.

1.5 Σφάλματα

Στη μελέτη, τον έλεγχο και την παρασκευή των φαρμάκων γίνονται διάφορα σφάλματα. Αν ο φαρμοκοποιός θέλει να πετύχει έναν υψηλό βαθμό ακριβείας στα προϊόντα που παρασκευάζει, θα πρέπει να βρίσκει και να περιορίζει τα σφάλματα στο ελάχιστα δυνατόν. Επειδή, όμως, είναι φυσικά αδύνατο να πραγματοποιηθεί το απόλυτα σωστό, θα πρέπει μετά την αναγνώριση και τον περιορισμό των σφαλμάτων, να προσδιορίζονται για να καθορίζονται τα όρια των αποτελεσμάτων.

Η απόκλιση της τιμής ενός μεγέθους από την αληθή τιμή του ορίζεται σαν ***σφάλμα***. Τα σφάλματα οφείλονται σε διάφορες αιτίες και διακρίνονται σε συστηματικά σφάλματα και τυχαία σφάλματα. Τα συστηματικά αλλοιώνουν το αποτέλεσμα πάντοτε προς την ίδια φορά, θετική ή αρνητική. Ενώ τα τυχαία αλλοιώνουν το αποτέλεσμα και προς τις δύο φορές, θετική και αρνητική.

Τα ***συστηματικά σφάλματα*** οφείλονται:

α) *Σε ατέλειες των οργάνων.* Στις περιπτώσεις αυτές τα σφάλματα αποφεύγονται με έλεγχο του οργάνου, εύρεση των αποκλίσεων από την πραγματική τιμή και διόρθωση των αποτελεσμάτων.

β) *Στη μέθοδο εργασίας.* Τα σφάλματα αυτά αποκαλύπτονται δύσκολα και γι' αυτό, αν απαιτείται ακρίβεια, επιβάλλεται επανάληψη της εργασίας και με άλλη μέθοδο.

γ) *Στον ανθρώπινο παράγοντα.* Όλες οι εργασίες απαιτούν τελικά την επέμβαση του ανθρώπου. Αυτός έχει ιδιορρυθμίες που δημιουργούν συστηματικά σφάλματα. Αυτά προσδιορίζονται με επανάληψη της εργασίας και από άλλα άτομα.

δ) *Σε εξωτερικές αιτίες.* Οι εξωτερικοί παράγοντες όπως είναι η θερμοκρασία, η υγρασία, η πίεση κ.τ.λ. επηρεάζουν τα αποτελέσματα. Γι' αυτό θα πρέπει οι εξωτερικοί παράγοντες να λαμβάνονται υπόψη ή να αναφέρονται οι συνθήκες εργασίας.

Τα ***τυχαία σφάλματα*** οφείλονται:

α) Στην περιορισμένη ευαισθησία των οργάνων μέτρησης.
β) Στην ατέλεια των αισθητηρίων οργάνων.
γ) Στην αστάθεια των εξωτερικών συνθηκών και
δ) Σε μεγάλο πλήθος αστάθμητων παραγόντων.

Τα τυχαία σφάλματα είναι αδύνατο να αποφευχθούν τελείως και να διορθωθούν γιατί οφείλονται σε φυσικές διακυμάνσεις που συμβαίνουν σε όλες τις μετρήσεις και διεργασίες. Παρουσιάζουν όμως, όπως όλα τα τυχαία γεγονότα, μια κανονικότητα και γι' αυτό υπακούουν στους στατιστικούς νόμους της κανονικής κατανομής. Έτσι είναι δυνατό να προσδιοριστούν, στατιστικά, ορισμένα μεγέθη που καθορίζουν το μέγεθος και τα όριά τους.

1.5.1 Ιδιότητες τυχαίων σφαλμάτων

Το σύνολο των τιμών $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_N$, που προκύπτουν από τις επανειλημμένες μετρήσεις κάποιου μεγέθους, καλύπτει ορισμένη ***έκταση***, που καθορίζεται από τη διαφορά της μικρότερης από τη μεγαλύτερη τιμή του συνόλου αυτών των τιμών. Η ***αληθής τιμή*** (μ) αυτού του μεγέθους δεν είναι δυνατό να βρεθεί, μπορεί όμως να υπολογισθεί η πιο πιθανή τιμή του. Αυτή συμπίπτει με την ***αριθμητική μέση τιμή*** ($\overline{x}$) και δίνεται από τη σχέση:

$$\overline{x} = \frac{\sum x_i}{N} \tag{1.28}$$

όπου: N είναι ο αριθμός των μετρήσεων και $\sum x_i$ είναι το άθροισμα όλων των τιμών του συνόλου δηλαδή:

$$\sum x_i = x_1 + x_2 + x_3 + \ldots + x_N \, .$$

Αν στο σύνολο των τιμών υπάρχουν τιμές x_1, x_2, x_3, …, x_N που επαναλαμβάνονται n_1, n_2, n_3, …, n_k φορές αντίστοιχα, τότε ονομάζεται ***συχνότητα επανάληψης*** της τιμής x_1 το n_1, της x_2 το n_2 κ.τ.λ. Στην περίπτωση αυτή η αριθμητική μέση τιμή δίνεται από τη σχέση:

$$\bar{x} = \frac{\sum n_i x_i}{N} \tag{1.29}$$

όπου: $\sum n_i x_i = n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3 + \ldots + n_k x_k$.

Ως ***απόκλιση*** (d_i) μιας τιμής (x_i), από την αριθμητική μέση τιμή ($\bar{x}$) ορίζεται η διαφορά:

$$d_i = x_i - \bar{x} \tag{1.30}$$

και αποδεικνύεται ότι το άθροισμα των αποκλίσεων όλων των τιμών του συνόλου ισούται με μηδέν.

$$\sum_{i=1}^{N} d_i = 0 \tag{1.31}$$

Ως ***σφάλμα*** (ε_i) μιας τιμής (x_i) από την αληθή τιμή (μ) ορίζεται η διαφορά:

$$\varepsilon_i = x_i - \mu \tag{1.32}$$

και αποδεικνύεται ότι το άθροισμα όλων των τυχαίων σφαλμάτων των τιμών του συνόλου ισούται με μηδέν:

$$\sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i = 0 \tag{1.33}$$

Όταν οι τιμές του συνόλου των μετρήσεων απομακρύνονται συχνά από την αριθμητική μέση τιμή, λέγεται ότι οι μετρήσεις έχουν μεγάλη διασπορά ή διακύμανση. Αντίθετα όταν οι τιμές αυτές πλησιάζουν συχνά στην αριθμητική μέση τιμή, λέγεται ότι οι μετρήσεις έχουν μικρή διασπορά ή διακύμανση. Μέτρο αυτού του φαινομένου είναι ο αριθμός:

$$\sigma^2 = \frac{(x_1 - \bar{x})^2 n_1 + (x_2 - \bar{x})^2 n_2 + \ldots + (x_k - \bar{x})^2 n_k}{N} \tag{1.34}$$

Πράγματι οι ποσότητες $(x_1-\overline{x})^2$, $(x_2-\overline{x})^2$, ... είναι μέτρα των απομακρύνσεων από την αριθμητική μέση τιμή $\overline{x}$, ενώ το άθροισμα (1.34) εκφράζει τον μέσο όρο αυτών των απομακρύνσεων.

Η ποσότητα σ^2 ονομάζεται ***διακύμανση*** των τιμών x_i και ισούται:

$$\sigma^2 = \frac{\sum(x_i-\overline{x})^2}{N} \tag{1.35}$$

Η θετική τετραγωνική ρίζα της διακύμανσης ονομάζεται ***τυπική απόκλιση*** (standard deviation) και δίνεται από τη σχέση:

$$\boxed{\sigma = \sqrt{\frac{\sum(x_i-\overline{x})^2}{N}}} \tag{1.36}$$

Στις περιπτώσεις που έχουμε ένα δείγμα τιμών και όχι το σύνολο όλων των τιμών N, η τυπική απόκλιση συμβολίζεται με s και δίνεται από τη σχέση:

$$\boxed{s = \sqrt{\frac{\sum(x_i-\overline{x})^2}{n-1}}} \tag{1.37}$$

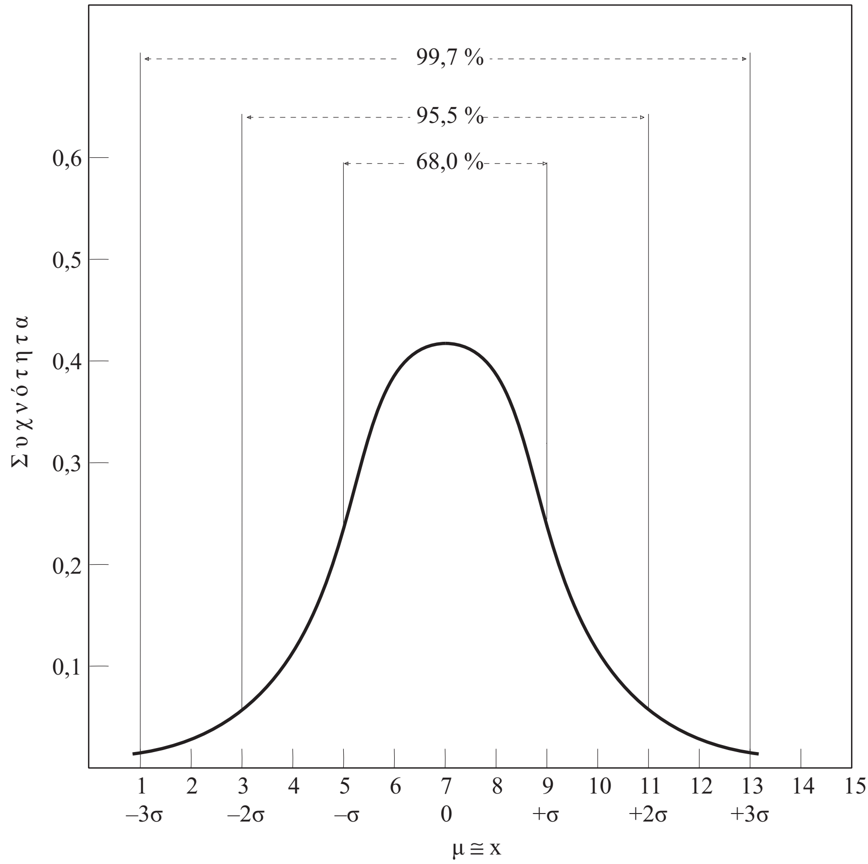
Η ***σχετική τυπική απόκλιση*** δίνει το ποσοστό της τυπικής απόκλισης σχετικά με τη μέση τιμή και ισούται:

$$s_{rel} = \frac{s\times 100}{\overline{x}} \tag{1.38}$$

Με τη σύγκριση των σχετικών τυπικών αποκλίσεων δύο δειγμάτων δίνεται η δυνατότητα να συγκριθεί η επαναληψιμότητα μιας μεθόδου με την επαναληψιμότητα μιας άλλης και όταν ακόμη η αριθμητική μέση τιμή ενός δείγματος διαφέρει από την αριθμητική μέση τιμή του άλλου δείγματος.

Όταν υπάρχουν μόνο τυχαία σφάλματα, η γραφική παράσταση της συχνότητας εμφάνισης μιας τιμής προς την τιμή αυτή δίνει κωδωνοειδή καμπύλη (σχ. 1.4). Σε αυτή η αριθμητική μέση τιμή συμπίπτει με την τιμή εκείνη που έχει τη μεγαλύτερη συχνότητα εμφάνισης.

Έχει βρεθεί ότι στο 68% των τιμών ενός συνόλου μετρήσεων κάποιου μεγέθους υπάρχουν τυχαία σφάλματα μικρότερα από την τυπική απόκλιση, στο 95,5% μικρότερα από το διπλάσιο της τυπικής απόκλισης και στο 99,7% μικρότερα από το τριπλάσιο της τυπικής απόκλισης. Αυτό σημαίνει ότι σε ένα



Σχήμα 1.4: Κανονική καμπύλη για την κατανομή των τυχαίων σφαλμάτων.

σύνολο μετρήσεων, όπου τα σφάλματα είναι μόνο τυχαία, η πιθανότητα μια τιμή να έχει σφάλμα μικρότερο από την τυπική απόκλιση είναι 68%, μικρότερο από το διπλάσιο της τυπικής απόκλισης είναι 95,5% και μικρότερο από το τριπλάσιο της τυπικής απόκλισης είναι 99,7%.

Στη φαρμακευτική μια μέτρηση ή ένα αποτέλεσμα θεωρείται παραδεκτό όταν τουλάχιστον το 95% των μετρήσεων βρίσκονται μέσα στα όρια αυτού του αποτελέσματος. Δηλαδή, όταν αυτό βρίσκεται μέσα στο όρια $\overline{x} \pm 2s$.

Παράδειγμα 1.1:

Από τη ζύγιση ενός δείγματος 12 δισκίων βρέθηκαν οι τιμές του πίνακα 1.5.

Πίνακας 1.5: Στατιστική ανάλυση του βάρους δείγματος δισκίων

α/α	βάρος [g]	$x-\bar{x}$	$(x-\bar{x})^2$
1	1,02	0,00	0,0000
2	0,98	–0,04	0,0016
3	1,12	0,10	0,0100
4	1,00	–0,02	0,0004
5	0,98	–0,04	0,0016
6	1,00	–0,02	0,0004
7	1,10	0,08	0,0064
8	1,03	0,01	0,0001
9	1,00	–0,02	0,0004
10	0,93	–0,09	0,0081
11	1,03	0,01	0,0001
12	1,05	0,03	0,0009
	12,24	0,00	0,0300

Η αριθμητική μέση τιμή είναι:

$$\bar{x} = \frac{12,24}{12} = 1,02 \text{ g}$$

Η έκταση του δείγματος είναι:

$$1,12 - 0,93 = 0,19 \text{ g}$$

Η απόκλιση μιας τιμής π.χ. της δεύτερης από την αριθμητική μέση τιμή είναι:

$$d_2 = 0,98 - 1,02 = -0,04 \text{ g}$$

Παρατηρούμε ότι:

$$\sum d_i = 0$$

Το πραγματικό σφάλμα δεν είναι δυνατό να βρεθεί γιατί δεν είναι γνωστή η αληθής τιμή. Αν δοθεί ότι αυτά τα δισκία παρασκευάστηκαν με στόχο η αληθής τιμή τους να είναι $1,00$ g και ζητηθεί το σφάλμα κάθε δισκίου, τότε το σφάλμα π.χ. του πρώτου δισκίου είναι:

$$\varepsilon_1 = 1{,}02 - 1{,}00 = 0{,}02 \text{ g}$$

Παρατηρούμε ότι:

$$\sum \varepsilon_i = 0{,}24 \neq 0$$

Αυτό σημαίνει ότι εκτός από τα τυχαία σφάλματα υπάρχει και συστηματικό σφάλμα με αριθμητική μέση τιμή:

$$\overline{x} - \mu = 1{,}02 - 1{,}00 = 0{,}02 \text{ g}$$

Η τυπική απόκλιση των δισκίων του δείγματος είναι:

$$s = \sqrt{\frac{0{,}0300}{12-1}} = 0{,}052 \text{ g}$$

Η σχετική τυπική απόκλιση των δισκίων του δείγματος είναι:

$$s_{rel} = \frac{0{,}052 \times 100}{1{,}02} = 5{,}10\%$$

Το βάρος ενός τυχαίου δισκίου από όλη την παρτίδα δισκίων, όχι μόνο του δείγματος, με πιθανότητα 95,5% είναι:

$$1{,}02 \pm 2 \cdot 0{,}052 = 1{,}02 \pm 0{,}10 \text{ g}$$

1.6 Έλεγχος Μέσης προς Αληθή Τιμή Φαρμακευτικού Προϊόντος

Πολλές φορές χρειάζεται να διαπιστωθεί αν η μέση τιμή κάποιου μεγέθους ενός φαρμακευτικού προϊόντος αποκλίνει από την αληθή τιμή του μεγέθους που επιδιώκεται, περισσότερο από ό,τι επιτρέπει η τύχη. Για να γίνει η διαπίστωση αυτή πρέπει να ελεγχθεί, σε ένα δείγμα του προϊόντος, αν η διαφορά μεταξύ της μέσης τιμής των τιμών του δείγματος και της αληθούς τιμής οφείλεται στην τύχη.

Σύμφωνα με τους νόμους της στατιστικής, αν το δείγμα έχει $n < 30$ τιμές που παρουσιάζουν τυπική απόκλιση s, ο έλεγχος της μέσης τιμής του $\overline{x}$ προς την αληθή τιμή μ, σε μια ***στάθμη σημαντικότητας*** α (με κίνδυνο το σφάλμα στο συμπέρασμα να είναι α, γίνεται με τη σύγκριση της τιμής t που δίνεται από τη σχέση:

$$t = \frac{\overline{x} - \mu}{s}\sqrt{n-1} \tag{1.39}$$

προς την τιμή $t_{n-1,\,\alpha}$ που βρίσκεται από τον πίνακα της κατανομής t.

Αν η απόλυτος τιμή $|t|$ που υπολογίζεται από τη σχέση (1.39) είναι μικρότερη από την τιμή $t_{n-1,\,\alpha}$ που βρίσκεται από τον πίνακα της κατανομής t, γίνεται δεκτή η υπόθεση ότι η διαφορά μεταξύ της μέσης και της αληθούς τιμής οφείλεται στην τύχη. Στην αντίθετη περίπτωση, δηλαδή αν $|t| > t_{n-1,\,\alpha}$, απορρίπτεται η υπόθεση και μπορεί να λεχθεί ότι η διαφορά μεταξύ της μέσης και της αληθούς τιμής δεν οφείλεται στην τύχη αλλά σε άλλους παράγοντες.

Πίνακας 1.6: *Τιμές $t_{n,\,0,05}$ της κατανομής t.*

n	$t_{n,\,0,05}$	n	$t_{n,\,0,05}$	n	$t_{n,\,0,05}$
1	12,71	11	2,20	21	2,08
2	4,30	12	2,18	22	2,07
3	3,18	13	2,16	23	2,07
4	2,78	14	2,14	24	2,06
5	2,57	15	2,13	25	2,06
6	2,45	16	2,12	26	2,06
7	2,36	17	2,11	27	2,05
8	3,31	18	2,10	28	2,05
9	2,26	19	2,09	29	2,05
10	2,23	20	2,09	30	2,04

Επειδή στη φαρμακευτική ένα αποτέλεσμα θεωρείται αρκετά ικανοποιητικό όταν υπάρχει βεβαιότητα γι' αυτό 95%, ο παραπάνω έλεγχος γίνεται συνήθως σε στάθμη σημαντικότητας 0,05. Στον πίνακα 1.6 δίνονται οι τιμές της κατανομής t για αριθμό παρατηρήσεων n και στάθμη σημαντικότητας 0,05.

Παράδειγμα 1.2:

Για να ελεγχθεί αν μια δισκιοποιητική μηχανή που ρυθμίστηκε να παρασκευάζει δισκία του 1,00 g λειτουργεί κανονικά, όταν τα βάρη ενός δείγματος 12 δισκίων είναι αυτά που φαίνονται στον πίνακα 1.5, ακολουθείται ο παρακάτω συλλογισμός.

Εκλέγεται για στάθμη σημαντικότητας το 0,05.
Δόθηκε η αληθή τιμή $\mu = 1{,}00$ g.
Βρίσκεται από τα βάρη των δισκίων του δείγματος

$$\overline{x} = 1{,}02 \text{ g} \quad \text{και} \quad s = 0{,}052 \text{ g}$$

Αντικαθίστανται οι τιμές αυτές στη σχέση 1.39 και βρίσκεται:

$$t = \frac{1{,}02 - 1{,}00}{0{,}052}\sqrt{12-1}$$

$$t = 1{,}28$$

Από τον πίνακα 1.4 για $n = 11$ βρίσκεται:

$$t_{11,\,0{,}05} = 2{,}20$$

Επειδή το $|t| < t_{11,\,0{,}05}$ μπορεί να γίνει δεκτό ότι η δισκιοποιητική μηχανή λειτουργεί κανονικά.

1.7 Εφαρμογή της Μεθόδου των Ελαχίστων Τετραγώνων στην Εύρεση Εξίσωσης Πειραματικών Αποτελεσμάτων

Σε προηγούμενο κεφάλαιο περιγράφηκε η μορφή της εξίσωσης, που ακολουθεί η μεταβολή ενός φυσικού μεγέθους σε σχέση με τη μεταβολή ενός άλλου, όπως και ο τρόπος υπολογισμού των σταθερών, που καθορίζουν αυτή την εξίσωση. Επειδή τα πειραματικά αποτελέσματα, συνήθως δεν εφαρμόζουν ακριβώς σε μια εξίσωση, στην πράξη χρησιμοποιούνται στατιστικοί κανόνες για να διαπιστωθεί η μορφή και να καθορισθούν οι σταθερές της εξίσωσης, που συσχετίζει τα μεταβαλλόμενα φυσικά μεγέθη ενός φαινομένου.

Όταν η απόλυτος τιμή του ***συντελεστή συσχετίσεως*** (correlation coefficient, r) των τιμών δύο φυσικών μεγεθών, που μεταβάλλονται, ισούται με τη μονάδα ($|r|=1$), σημαίνει ότι η μεταβολή του ενός μεγέθους εξαρτάται πλήρως από τη μεταβολή του άλλου. Ενώ όταν ο συντελεστής συσχετίσεως ισούται με το μηδέν ($|r|=0$), σημαίνει ότι η μεταβολή του ενός μεγέθους είναι ανεξάρτητη από τη μεταβολή του άλλου.

Ο συντελεστής συσχετίσεως δύο μεταβλητών x και y, που παίρνουν τις τιμές $x_1, x_2, \ldots, x_n$ και $y_1, y_2, \ldots, y_n$, δίνεται από τις σχέσεις:

α) Για γραμμική συσχέτιση

$$r_1 = \frac{\sum x_i y_i - \frac{\sum x_i \sum y_i}{n}}{\sqrt{\left[\sum x_i^2 - \frac{\left(\sum x_i\right)^2}{n}\right]\left[\sum y_i^2 - \frac{\left(\sum y_i\right)^2}{n}\right]}} \tag{1.40}$$

β) Για ημιλογαριθμική συσχέτιση

$$r_2 = \frac{\sum x_i \mathbf{ln} y_i - \frac{\sum x_i \sum \mathbf{ln} y_i}{n}}{\sqrt{\left[\sum x_i^2 - \frac{\left(\sum x_i\right)^2}{n}\right]\left[\sum \mathbf{ln} y_i^2 - \frac{\left(\sum \mathbf{ln} y_i\right)^2}{n}\right]}} \tag{1.41}$$

γ) Για λογαριθμική συσχέτιση

$$r_3 = \frac{\sum \mathbf{ln} x_i \mathbf{ln} y_i - \frac{\sum \mathbf{ln} x_i \sum \mathbf{ln} y_i}{n}}{\sqrt{\left[\sum (\mathbf{ln} x_i)^2 - \frac{\left(\sum \mathbf{ln} x_i\right)^2}{n}\right]\left[\sum (\mathbf{ln} y_i)^2 - \frac{\left(\sum \mathbf{ln} y_i\right)^2}{n}\right]}} \tag{1.42}$$

Ο υπολογισμός του συντελεστή συσχετίσεως από τις παραπάνω σχέσεις δίνει διαφορετικές τιμές. Η σχέση που δίνει την πλησιέστερη προς τη μονάδα απόλυτη τιμή δείχνει και την ισχυρότερη μορφή της εξίσωσης που ακολουθούν τα μεταβαλλόμενα φυσικά μεγέθη. Η τιμή του συντελεστή συσχετίσεως από την οποία η συσχέτιση θεωρείται «σημαντική», εξαρτάται από το μέγεθος του δείγματος (n) και τη στάθμη σημαντικότητας.

Για να υπολογισθούν οι σταθερές που καθορίζουν την εξίσωση που ακολουθεί ένα μεταβαλλόμενο φυσικό μέγεθος σε σχέση με ένα άλλο, χρησιμοποιούνται οι παρακάτω μαθηματικοί τύποι:

α) Για τη γραμμική εξίσωση $y = a + bx$

$$b = \frac{\sum x_i y_i - \frac{\sum x_i \sum y_i}{n}}{\sum x_i^2 - \frac{\left(\sum x_i\right)^2}{n}} \tag{1.43}$$

$$a = \frac{\sum y_i}{n} - \frac{b\sum x_i}{n} \tag{1.44}$$

β) Για την ημιλογαριθμική εξίσωση $y = ae^{bx}$

$$b = \frac{\sum x_i \ln y_i - \frac{\sum x_i \sum \ln y_i}{n}}{\sum x_i^2 - \frac{\left(\sum x_i\right)^2}{n}} \tag{1.45}$$

$$a = e^{\frac{\sum \mathbf{ln} y_i}{\mathbf{n}} - \frac{b\sum x_i}{n}} \tag{1.46}$$

γ) Για τη λογαριθμική εξίσωση $y = ax^b$

$$b = \frac{\sum (\mathbf{ln} x_i)(\mathbf{ln} y_{i)} - \frac{\left(\sum \mathbf{ln} x_i\right)\left(\sum \mathbf{ln} y_i\right)}{n}}{\sum (\mathbf{ln} x_i)^2 - \frac{\left(\sum \mathbf{ln} x_i\right)^2}{n}} \tag{1.47}$$

$$a = e^{\frac{\sum \mathbf{ln} y_i}{n} - \frac{b\sum \mathbf{ln} x_i}{n}} \tag{1.48}$$

Σήμερα με τους Η/ Υ διευκολύνεται ο υπολογισμός των συντελεστών συσχετίσεως και των σταθερών των εξισώσεων. Υπάρχουν μάλιστα προσιτά λογισμικά (softwares) που δίνουν απ’ ευθείας την τιμή του συντελεστή γραμμικής συσχετίσεως.

Παράδειγμα 1.3:

Η μέτρηση του ιξώδους σε διάφορες θερμοκρασίες έδωσε τις τιμές του πίνακα 1.7.

Πίνακας 1.7: *Μεταβολή του ιξώδους (y) σε poise με τη θερμοκρασία (x) σε °C και οι συναρτήσεις τους, που βοηθούν στον υπολογισμό του συντελεστή συσχετίσεως*

a/a	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**Σ**
x	25	30	35	40	45	50	225
y	16,04	10,76	7,41	5,23	3,78	2,76	45,98
x^2	625	900	1225	1600	2025	2500	8875
y^2	257,28	115,78	54,91	27,35	14,29	7,62	477,23
xy	401,00	322,80	259,35	209,20	170,10	138,00	1500,45
lnx	3,2189	3,4012	3,5553	3,6889	3,8067	3,9120	21,5830
lny	2,7751	2,3758	2,0028	1,6544	1,3297	1,0152	11,1531
$(\mathbf{ln}x)^2$	10,3612	11,5681	12,6405	13,6078	14,4907	15,3039	77,9722
$(\mathbf{ln}y)^2$	7,7011	5,6446	4,0113	2,7371	1,7682	1,0307	22,8930
x**ln**y	69,3771	71,2751	70,0991	66,1765	59,8376	50,7615	387,527
(**ln**x)(**ln**y)	8,9327	8,0807	7,1208	6,1029	5,0618	3,9716	39,2704

Από τις σχέσεις 1.40, 1.41 και 1.42 υπολογίζονται οι τιμές r_1, r_2 και r_3 του συντελεστή συσχετίσεως για γραμμική, ημιλογαριθμική και λογαριθμική συσχέτιση αντίστοιχα:

$$r_1 = \frac{1500,45 - \dfrac{225 \times 45,98}{6}}{\sqrt{\dfrac{8875 - 225^2}{6} \quad \dfrac{477,23 - 45,98^2}{6}}} = -0,9575$$

$$r_2 = \frac{387,527 - \dfrac{225 \times 11,1531}{6}}{\sqrt{\dfrac{8875 - 225^2}{6} \quad \dfrac{22,8930 - 11,1531^2}{6}}} = -0,9989$$

$$r_3 = \frac{39{,}2704 - \frac{21{,}5830 \times 11{,}1531}{6}}{\sqrt{\frac{77{,}97224 - 21{,}5830^2}{6}\ \frac{22{,}8930 - 11{,}1531^2}{6}}} = -0{,}9985$$

Η αρνητική τιμή του συντελεστή συσχετίσεως δείχνει ότι η μία μεταβλητή αυξάνει όταν η άλλη ελαττώνεται.

Από τις τιμές του συντελεστή συχετίσεως, που υπολογίστηκαν φαίνεται ότι αυτή που υπολογίστηκε για ημιλογαριθμική συσχέτιση έχει την πλησιέστερη απόλυτη τιμή προς τη μονάδα. Συνεπώς οι πειραματικές τιμές εφαρμόζουν περισσότερο σε μία ημιλογαριθμική εξίσωση από ότι σε μία γραμμική ή λογαριθμική εξίσωση.

Οι σταθερές a και b της ημιλογαριθμικής εξίσωσης, που ακολουθούν τα πειραματική αποτελέσματα υπολογίζονται από τις σχέσεις 1.45 και 1.46 αντίστοιχα.

$$b = \frac{387{,}527 - \frac{225 \times 11{,}1531}{6}}{\frac{8875 - 225^2}{6}} = -0{,}0702$$

$$a = e^{\frac{11{,}1531}{6} + \frac{0{,}0702 \times 225}{6}} = 89{,}24$$

Συνεπώς η εξίσωση που ακολουθεί η μεταβολή του ιξώδους του υγρού που εξετάσθηκε με τη θερμοκρασία είναι

$$\eta = 89{,}24e^{-0{,}07t}$$

Από την εξίσωση αυτή μπορεί εύκολα να υπολογισθεί το ιξώδες του υγρού που εξετάσθηκε σε οιανδήποτε θερμοκρασία. Για παράδειγμα το ιξώδες του υγρού στους $37°$ C υπολογίζεται ότι είναι

$$\eta = 89{,}24e^{-0{,}07 \times 37} = 6{,}69 \text{ poice}$$