

Obsah

1.	ÚVOD	9
2.	HODNOCENÍ ANALYTICKÝCH VÝSLEDKŮ	12
2.1	Chyby analytických výsledků. Přesnost, správnost, reprodukovatelnost, shodnost. Zákon šíření chyb. Pravděpodobnost	12
2.2	Rozdělení výsledků, očekávaná hodnota a rozptyl. Některá rozdělení	15
2.3	Odhad parametrů normálního rozdělení	21
2.3.1	Odhad parametru μ	21
2.3.2	Odhad parametru σ	24
2.3.3	Odhad parametrů μ a σ graficky znázorněné proměnné	29
2.4	Odhad parametrů rozdělení konečných výsledků	32
2.5	Interval spolehlivosti průměru	32
2.6	Správnost výsledků	38
2.7	Shodnost výsledků	42
2.7.1	Studentův test pro $n_A = n_B$ a Lordův test	42
2.7.2	Studentův test pro $n_A \neq n_B$ a Moorův test	44
2.8	Vylučování odlehklých výsledků	50
2.9	Dovolená difference výsledků paralelních stanovení	55
2.10	Informační obsažnost výsledků analýzy	57
2.11	Odečítání hodnoty slepého pokusu. Mez stanovitelnosti	63
2.11.1	Mez stanovitelnosti při bezšumové hodnotě $\bar{x}_0$	64
2.11.2	Mez stanovitelnosti při šumu $\bar{x}_0$	64
2.11.3	Horní mez stanovitelnosti	66
2.12	Sekvenční statistická analýza	66
2.12.1	Zjišťování soustavné chyby porovnáním se standardní metodou	67
2.12.2	Testování průměru	69
2.12.3	Testování výsledků na hranici meze stanovitelnosti	71
2.13	Neparametrické statistické metody	71
2.13.1	Znaménkové neparametrické testy	72
2.13.2	Pořadové testy	75
2.13.3	Neparametrické toleranční meze	76
2.13.4	Neparametrické testování za použití mediánu	77
2.14	Testování směrodatné odchylky nebo rozptylu	80
3.	HODNOCENÍ POKUSNĚ ZJIŠTĚNÉ ZÁVISLOSTI	82
3.1	Závislost dvou proměnných	82
3.2	Jednoduchá lineární regresní závislost	83
3.2.1	Koeficienty lineární regresní rovnice	85
3.2.2	Testování koeficientů	87
3.2.3	Interval spolehlivosti hodnoty vypočtené z regresní rovnice	92
3.2.4	Vícenásobná lineární regrese	93
3.3	Nelineární regresní závislost	94
3.3.1	Transformace na lineární regresi	95
3.3.2	Polynomiální regrese	96
3.3.2.1	Regrese polynomelem známého stupně	96

3.3.2.2	Určení stupně polynomu	97
3.3.2.3	Redukce členů polynomu	100
3.3.2.4	Vliv odlehklých hodnot	100
3.3.3	Obecný problém nelineární regrese	101
3.3.4	Optimalizace parametrů	101
3.4	Korelace mezi dvěma proměnnými	103
3.4.1	Zpracování stochastické závislosti pomocí dvou regresních rovnic	106
3.4.2	Elipsa spolehlivosti	108
3.4.3	Zpracování velmi rozsáhlých souborů dat	109
3.5	Analytický signál	110
3.5.1	Hledání důležitých bodů	113
3.5.2	Určení plochy píku	116
3.6	Interpolace a extrapolace	117
4.	HODNOCENÍ ANALYTICKÝCH METOD	123
4.1	Klasifikace analytických metod	123
4.2	Hodnocení spolehlivosti analytických metod	123
4.2.1	Zjišťování spolehlivosti nezávislé analytické metody pomocí standardu	125
4.2.2	Zjišťování spolehlivosti analytické metody porovnáním s výsledky nalezenými jinou metodou	130
4.2.3	Zjišťování spolehlivosti závislé analytické metody	131
4.2.4	Spolehlivost závislých metod při použití jednoho standardu	133
4.2.5	Spolehlivost závislých metod při použití několika vnějších standardů	134
4.2.6	Zjišťování vlivu jednotlivých analytických operací na spolehlivost výsledků analýzou rozptylu	136
4.3	Hodnocení analytických metod podle informačních vlastností	140
4.3.1	Vliv vlastností analytických metod a podmínek provádění analýz na informační obsažnost výsledků	141
4.3.2	Informační obsažnost výsledků nezávislých a závislých analytických metod	142
4.3.3	Informační výkon, efektivita a rentabilita	144
4.4	Meze postačující přesnosti analytických metod	147
4.4.1	Přesnost jako míra účelného používání analytické metody	147
4.4.2	Používání analytické metody mimo meze postačující přesnosti	148
5.	POUŽITÍ VÝPOČETNÍ TECHNIKY	149
5.1	Účelnost použití počítače v analytické praxi	149
5.2	Výpočetní technika	152
5.3	Využití počítačů při zpracování chromatografických dat	157
5.4	Použití počítačů ve spektrální analýze	163
5.4.1	Použití počítače v molekulové spektroskopii	163
	A. Použití počítače při vlastním experimentu	164
	B. Použití počítače při vyhodnocení výsledku experimentu	165
5.5	Jiné využití výpočetní techniky v analytické chemii	166
5.5.1	Hromadné zpracování dat a usnadnění složitých výpočtů	166
5.5.2	Statistické zpracování analytických dat	167
5.5.3	Modelování pomocí počítače	168
5.5.4	Katalogizace analytických výsledků	168
5.6	Programy pro samočinný počítač v jazyku Fortran	169
	P1 Statistické hodnocení výsledků analýz	173
	P2 Srovnání průměru dvou souborů dat	176
	P3 Stanovení rozsahu výběru	179
	P4 Jednoduchá lineární regrese	181
	P5 Obecná polynomiální regrese	185
	P6 Vícenásobná lineární regrese	186

P7	Průsečík přímk	192
P8	Inflexní bod	195
P9	Optimalizace jednoho parametru	198
P10	Optimalizace dvou parametrů	201
P11	Numerická interpolace	204
P12	Numerická integrace 1 (integrace funkčního předpisu)	206
P13	Numerická integrace 2 (integrace tabelárního předpisu)	207
PP1	Podprogram NC1 (lineární regresní závislost)	209
PP2	Podprogram NC2 (parabolická regresní závislost)	210
PP3	Podprogram LINREG (charakteristiky lineární regrese)	211
PP4	Podprogram RGA (polynomická regrese daného stupně n)	213
PP5	Podprogram LREG4 (vícenásobná lineární regrese)	214
PP6	Podprogram GAJO (řešení soustavy lineárních rovnic)	218
LITERATURA		220
REJSTŘÍK		221