

Obsah

Předmluva autorů	11
O autorech	17
1 CHYBY, VARIABILITA A NEJISTOTY INSTRUMENTÁLNÍCH MĚŘENÍ	21
1.1 Chyby měřicích přístrojů	21
Vzorová úloha 1.1 <i>Absolutní a relativní chyba pH-metru</i>	25
Vzorová úloha 1.2 <i>Třída přesnosti a práh citlivosti ampérmetru</i>	26
Vzorová úloha 1.3 <i>Mezní absolutní a relativní chyba ampérmetru</i>	26
1.2 Způsoby vyjádření odhadů chyb měření	26
1.2.1 Momentové odhady chyb	27
Vzorová úloha 1.4 <i>Relativní a absolutní systematická chyba pipety</i>	29
1.2.2 Kvantilové odhady chyb	30
Vzorová úloha 1.5 <i>Kvantilové odhady chyb přístroje</i>	31
1.2.3 Nepravděpodobnostní intervalové odhady chyb	32
1.3 Šíření chyb a nejistot	32
1.3.1 Metoda Taylorova rozvoje	32
Vzorová úloha 1.6 <i>Šíření chyb v metodě izotopového zředování</i>	33
Vzorová úloha 1.7 <i>Korelace chyb objemů v laboratorních operacích</i>	34
Vzorová úloha 1.8 <i>Výpočet jemnosti vlákna z hmotností a délek vláken</i>	35
Vzorová úloha 1.9 <i>Určení střední hodnoty jemnosti vláken</i>	36
1.3.2 Metoda dvoubodové aproximace	36
Vzorová úloha 1.10 <i>Určení chyby viskozity metodou dvoubodové aproximace</i>	37
1.3.3 Metoda simulací Monte Carlo	37
Vzorová úloha 1.11 <i>Hromadění chyb při určení rozpustnosti stříbrné soli</i>	38
Vzorová úloha 1.12 <i>Korelace v hromadění chyb</i>	39
1.4 Nejistoty výsledků měření	39
1.4.1 Porovnání přístupů k výpočtu nejistot	40
1.4.2 Kritické poznámky k výpočtu nejistot	42
Vzorová úloha 1.13 <i>Nejistota aritmetických operací přibližných čísel</i>	43
1.4.3 Přístup intervalové analýzy k nejistotám	43
Vzorová úloha 1.14 <i>Výpočet nejistoty teploty měřené rtuťovým teploměrem</i>	44
1.4.4 Zaokrouhlování čísel	45
Vzorová úloha 1.15 <i>Zaokrouhlování čísel na 2, 3 a 4 platná místa</i>	45
1.5 Úlohy	45
1.5.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	46
1.5.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	46
1.5.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	50
1.5.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	51
1.5.5 Analýza fyzikálních dat	51
1.6 Kontrolní hodnoty (použitý software ADSTAT, NCSS2000)	52
1.6.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	52
1.6.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	52
1.6.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	53
1.6.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	53
1.6.5 Analýza fyzikálních dat	53
1.7 Doporučená literatura	53
2 PRŮZKUMOVÁ ANALÝZA JEDNOROZMĚRNÝCH DAT	55
Vzorová úloha 2.1 <i>Analýza dat normálního a logaritmicke-normálního rozdělení</i>	56
2.1 Průzkumová (exploratorní) analýza dat EDA	57
2.2 Ověření předpokladů o datech	68
2.3 Transformace dat	71
2.4 Průběh průzkumové analýzy dat	73

Vzorová úloha 2.2 <i>Průzkumová analýza velkého výběru</i>	75
--	----

2.5 Úlohy	82
2.5.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	82
2.5.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	90
2.5.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	101
2.5.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	108
2.5.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	116
2.6 Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	122
2.6.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	122
2.6.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	124
2.6.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	126
2.6.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	127
2.6.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	129
2.7 Doporučená literatura	132

3 STATISTICKÁ ANALÝZA JEDNOROZMĚRNÝCH DAT

3.1 Bodový odhad parametrů polohy, rozptýlení a tvaru	133
A. Momentové míry polohy a rozptýlení	133
B. Kvantilové a robustní míry polohy a rozptýlení	136
C. Odhady parametrů polohy a rozptýlení pro důležitá rozdělení	140
3.2 Intervalový odhad parametrů polohy a rozptýlení	145
3.3 Analýza malých výběrů	146
3.4 Statistické testování	147
A. Postup testování statistické hypotézy	147
B. Testy střední hodnoty ("testy správnosti")	148
C. Testy shody středních hodnot ("testy shodnosti")	149
Vzorová úloha 3.1 <i>Analýza velkého výběru</i>	153
Vzorová úloha 3.2 <i>Analýza malého výběru</i>	156
Vzorová úloha 3.3 <i>Test střední hodnoty (test správnosti)</i>	158
Vzorová úloha 3.4 <i>Test shodnosti středních hodnot</i>	159
Vzorová úloha 3.5 <i>Párový test</i>	160
3.5 Úlohy	160
3.5.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	161
3.5.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	167
3.5.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	178
3.5.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	185
3.5.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	190
3.6 Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	194
3.6.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	194
3.6.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	197
3.6.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	203
3.6.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	206
3.6.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	209
3.7 Doporučená literatura	210

4 STATISTICKÁ ANALÝZA VÍCEROZMĚRNÝCH DAT

4.1 Popis vícerozměrných dat	214
4.2 Obecný postup analýzy vícerozměrných dat	216
4.3 Charakteristiky vícerozměrných náhodných veličin	218
Vzorová úloha 4.1 <i>Popisné charakteristiky vícerozměrných náhodných veličin</i>	221
4.4 Exploratorní analýza struktury objektů (EDA)	221
4.5 Určení struktury a vazeb v proměnných a objektech	227
4.5.1 Analýza hlavních komponent (PCA)	228
Vzorová úloha 4.2 <i>Postup metody hlavních komponent</i>	235
4.5.2 Faktorová analýza (FA)	240

Vzorová úloha 4.3 <i>Vyčíslení faktorů z korelační matice</i>	241
Vzorová úloha 4.4 <i>Ukázka pojmů a podstaty faktorové analýzy</i>	242
4.5.3 Kanonická korelační analýza	245
Vzorová úloha 4.5 <i>Ukázka pojmů a podstaty kanonické korelační analýzy</i>	246
Vzorová úloha 4.6 <i>Postup kanonické korelační analýzy</i>	248
4.6 Klasifikace objektů	252
4.6.1 Diskriminační analýza DA	252
Vzorová úloha 4.7 <i>Užití lineární diskriminační funkce</i>	254
Vzorová úloha 4.8 <i>Užití logistické diskriminace</i>	258
Vzorová úloha 4.9 <i>Užití postupu diskriminační analýzy</i>	260
4.6.2 Analýza shluků CLU	269
(a) Hierarchické shlukování	271
Vzorová úloha 4.10 <i>Nalezení shluků hráčů podobných vlastností</i>	272
Vzorová úloha 4.11 <i>Vytvoření dendrogramu objektů neuroleptika</i>	277
(b) Shlukování metodou nejbližších středů (K-Means)	279
Vzorová úloha 4.12 <i>Klasifikace objektů do shluků</i>	280
(c) Shlukování metodou středů-medoidů	283
Vzorová úloha 4.13 <i>Odhalení struktury objektů rozličnými metodami shlukování</i>	285
(d) Fuzzy shlukování	289
Vzorová úloha 4.14 <i>Klasifikace objektů barev fuzzy shlukováním</i>	290
4.7 Vícerozměrné škálování MDS	292
Vzorová úloha 4.15 <i>Vícerozměrné škálování u analýzy podobnosti</i>	295
4.8 Vícerozměrná kalibrace (V. Centner)	296
4.8.1 Klasická vícerozměrná kalibrace	297
4.8.2 Inverzní vícerozměrná kalibrace	298
Vzorová úloha 4.16 <i>Postup vícerozměrné kalibrace</i>	306
4.9 Úlohy	315
4.9.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	316
4.9.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	324
4.9.3 Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	330
4.9.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	340
4.9.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	344
4.10 Doporučená literatura	350
5 ANALÝZA ROZPTYLU	353
5.1 Jednofaktorová analýza rozptylu	353
Vzorová úloha 5.1 <i>Zkrácený postup jednofaktorové analýzy rozptylu</i>	360
Vzorová úloha 5.2 <i>Podrobný postup v jednofaktorové analýze rozptylu</i>	362
5.2 Dvoufaktorová analýza rozptylu bez opakování v cele	368
Vzorová úloha 5.3 <i>Dvoufaktorová analýza rozptylu bez opakování</i>	371
5.3 Vyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu	377
Vzorová úloha 5.4 <i>Vyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu</i>	380
5.4 Nevyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu	382
Vzorová úloha 5.5 <i>Nevyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu</i>	384
5.5 Opakovatelnost a reprodukovatelnost (O&R analýza)	385
Vzorová úloha 5.6 <i>Schéma O&R analýzy</i>	386
5.6 Úlohy	392
5.6.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	393
5.6.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	401
5.6.3 Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	408
5.6.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	413
5.6.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	420
5.7 Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	427
5.7.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	427
5.7.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	427

5.7.3 Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	428
5.7.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	428
5.7.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	429
5.8 Doporučená literatura	429
6 LINEÁRNÍ REGRESNÍ MODELY	431
6.1 Jednorozměrné lineární regresní modely	437
Vzorová úloha 6.1 <i>Postup výstavby modelu a regresní diagnostika</i>	437
6.1.1 Úlohy na jednorozměrné lineární regresní modely	447
6.2 Validace nové analytické metody	455
Vzorová úloha 6.2 <i>Postup validace a regresní diagnostika</i>	455
6.2.1 Úlohy na validaci nové analytické metody	465
6.3 Lineární a nelineární kalibrace	472
Vzorová úloha 6.3 <i>Postup nelineární kalibrace spline funkcí</i>	473
6.3.1 Úlohy na lineární a nelineární kalibraci	475
6.4 Polynomické regresní modely	492
Vzorová úloha 6.4 <i>Optimální stupeň polynomu a snížení multikolinearity</i>	492
6.4.1 Úlohy na polynomické regresní modely	506
6.5 Vícerozměrné lineární regresní modely	514
Vzorová úloha 6.5 <i>Regresní triplet ve výstavbě vícerozměrného lineárního regresního modelu.</i>	514
6.5.1 Úlohy na vícerozměrné lineární regresní modely	530
6.6 Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	543
6.6.1 Jednorozměrné lineární regresní modely	543
6.6.2 Validace nové analytické metody	544
6.6.3 Úlohy na lineární a nelineární kalibraci	545
6.6.4 Úlohy na polynomické regresní modely	546
6.6.5 Vícerozměrné lineární regresní modely	547
6.7 Doporučená literatura	549
7 KORELACE	553
7.1 Druhy korelačních koeficientů	553
7.1.1 Párový korelační koeficient	553
7.1.2 Parciální korelační koeficient	554
7.1.3 Vícenásobný korelační koeficient	556
7.2 Pořadový korelační koeficient	556
7.3 Cronbachův korelační koeficient γ spolehlivosti výsledku	557
Vzorová úloha 7.1 <i>Postup vyšetření korelace</i>	559
7.4 Úlohy na korelaci	561
7.4.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	561
7.4.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	565
7.4.3 Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	568
7.4.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	571
7.4.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	572
7.5 Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	576
7.5.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	576
7.5.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	577
7.5.3 Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	577
7.5.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	578
7.5.5 Analýza ekonomických a sociologických dat	578
7.6 Doporučená literatura	578
8 NELINEÁRNÍ REGRESNÍ MODELY	579
8.1 Tvorba nelineárního regresního modelu	579
Vzorová úloha 8.1 <i>Odhad tří parametrů rozšířeného Debyeova-Hückelova vztahu</i>	583

8.2 Úlohy	586
8.2.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	587
8.2.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	588
8.2.3 Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	597
8.2.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	603
8.2.5 Analýza matematických modelů a fyzikálních dat	603
8.3 Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	609
8.3.1 Analýza farmakologických a biochemických dat	609
8.3.2 Analýza chemických a fyzikálních dat	609
8.3.3 Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	610
8.3.4 Analýza hutnických a mineralogických dat	611
8.3.5 Analýza matematických modelů a fyzikálních dat	611
8.4 Doporučená literatura	612
9 INTERPOLACE A APROXIMACE	615
9.1 Klasické interpolační postupy	616
Vzorová úloha 9.1 <i>Náhrada funkce $\exp(x)$</i>	617
9.1.1 Lagrangeova a Newtonova interpolační formule	617
Vzorová úloha 9.2 <i>Náhrada funkce $\exp(x)$</i>	621
Vzorová úloha 9.3 <i>Aproximace racionální funkce</i>	621
9.1.2 Hermitovská interpolace	622
Vzorová úloha 9.4 <i>Hermitovská interpolace funkce $\exp(x)$</i>	623
9.1.3 Racionální interpolace	623
Vzorová úloha 9.5 <i>Racionální interpolace funkce $\exp(x)$</i>	624
9.2 Spline interpolace	625
Vzorová úloha 9.6 <i>Lineární B-spline</i>	627
9.2.1 Lokální Hermitovská interpolace	629
Vzorová úloha 9.7 <i>Lokální kubická interpolace stupňovité závislosti</i>	631
Vzorová úloha 9.8 <i>Akimova interpolace schodovité závislosti</i>	633
9.2.2 Kubické spline	633
Vzorová úloha 9.9 <i>Spline interpolace schodovité závislosti</i>	635
Vzorová úloha 9.10 <i>Interpolace pomocí spline pod napětím</i>	637
9.3 Aproximace funkcí	638
Vzorová úloha 9.11 <i>Aproximace funkce $\exp(x)$</i>	641
9.4 Aproximace tabelárních závislostí	642
9.4.1 Polynomická aproximace	642
Vzorová úloha 9.12 <i>Čebyševova aproximace funkce $\exp(x)$</i>	643
Vzorová úloha 9.13 <i>Hledání nejlepšího poměru polynomů</i>	644
9.4.2 Úseková regrese	647
Vzorová úloha 9.14 <i>Aproximace píku</i>	650
Vzorová úloha 9.15 <i>Aplikace postupu úsekové polynomické regrese</i>	654
Vzorová úloha 9.16 <i>Určení bodu ekvivalence u dvou větví titrační křivky</i>	656
9.5 Numerické vyhlazování	658
9.5.1 Spline vyhlazování	659
Vzorová úloha 9.17 <i>Vyhlazování píku algoritmem SPÄTH</i>	663
Vzorová úloha 9.18 <i>Vyhlazování píku algoritmem REINSCH</i>	664
Vzorová úloha 9.19 <i>Optimální vyhlazení píku</i>	667
9.5.2 Neparametrická regrese	668
Vzorová úloha 9.20 <i>Neparametrická regrese píku</i>	669
9.5.3 Číslicová filtrace	670
Vzorová úloha 9.21 <i>Porovnání vlastností lineárních a nelineárních filtrů</i>	672
Vzorová úloha 9.22 <i>Vliv délky regresního filtru na vyhlazující vlastnosti</i>	676
Vzorová úloha 9.23 <i>Filtrace absorpčního spektra fenolové červeně</i>	677
Vzorová úloha 9.24 <i>Výpočet hustoty kyseliny fosforečné</i>	678
Vzorová úloha 9.25 <i>Určení chybějící hodnoty v infračerveném spektru</i>	679

9.6 Postup při interpolaci a aproximaci	679
9.7 Úlohy	680
9.7.1 Analýza chemických a fyzikálních dat	681
9.7.2 Analýza ekonomických a ostatních dat	683
9.8 Doporučená literatura	685
10 KONTROLA A ŘÍZENÍ JAKOSTI	687
10.1 Podstata úloh řízení jakosti	687
10.2 Regulační diagramy	694
10.2.1 Regulační diagramy pro dílčí výběry	695
10.2.2 Regulační diagramy typu "x s pruhem"	695
10.2.3 Regulační diagramy pro posouzení variability	700
10.2.4 Regulační diagramy kumulativních součtů, CUSUM	701
10.2.5 Regulační diagramy na bázi lokálního vyhlazení	705
10.2.6 Regulační diagramy pro jednotlivé hodnoty	707
10.2.7 Regulační diagramy pro distrétní znaky	709
10.2.8 Regulační diagramy pro více proměnných	711
10.2.9 Používání regulačních diagramů (K. Kupka)	714
10.2.10 Konstrukce regulačních diagramů (K. Kupka)	715
Vzorová úloha 10.1 <i>Aplikace regulačního diagramu pro průměry a směrodatné</i> <i>odchylky</i>	715
Vzorová úloha 10.2 <i>Aplikace diagramu R</i>	717
10.2.11 Pravidla pro určování zvláštních případů	720
Vzorová úloha 10.3 <i>Aplikace regulačního diagramu pro jednotlivé hodnoty x</i>	722
10.2.12 Porušení předpokladů o datech	723
10.2.13 Pomůcky diagramů kumulativních součtů CUSUM	727
Vzorová úloha 10.4 <i>Lucasova modifikace regulačního diagramu CUSUM</i>	729
Vzorová úloha 10.5 <i>Aplikace diagramů exponenciálně vážených klouzavých průměrů,</i> <i>EWMA</i>	730
Vzorová úloha 10.6 <i>Kontrola tavby v metalurgickém provozu regulačním diagramem</i> ...	732
Vzorová úloha 10.7 <i>Chemická analýza složení plyných splodin</i>	733
Vzorová úloha 10.8 <i>Aplikace Hotellingova regulačního diagramu</i>	735
10.3 Indexy způsobilosti procesu	738
10.4 Software pro řízení jakosti	741
10.5 Úlohy	745
10.6 Kontrolní výsledky (ADSTAT, NCSS2000)	751
10.7 Doporučená literatura	752
Rejstřík	755
Doprovodné CD	765
Data pro úlohy	766
Statistický systém QCExpert	767