

# Obsah

Předmluva .....	17
<b>1 Chyby, variabilita a nejistoty instrumentálních měření .....</b>	<b>21</b>
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> .....	25
Vzorová úloha 1.3 <i>Mezní absolutní a relativní chyba ampérmetru</i> .....	25
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 .....	29
Vzorová úloha 1.5 <i>Kvantilové odhady chyb přístroje</i> .....	30
1.2.3 Nepravděpodobnostní intervalové odhady chyb .....	31
1.3 Šíření chyb a nejistot .....	31
1.3.1 Metoda Taylorova rozvoje .....	31
Vzorová úloha 1.6 <i>Šíření chyb v metodě izotopového zředování</i> .....	32
Vzorová úloha 1.7 <i>Korelace chyb objemů v laboratorních operacích</i> .....	33
Vzorová úloha 1.8 <i>Výpočet jemnosti vlákna z hmotností a délek vláken</i> .....	34
Vzorová úloha 1.9 <i>Určení střední hodnoty jemnosti vláken</i> .....	34
1.3.2 Metoda dvoubodové aproximace .....	35
Vzorová úloha 1.10 <i>Určení chyby viskozity dvoubodovou aproximací</i> .....	36
1.3.3 Metoda simulací Monte Carlo .....	36
Vzorová úloha 1.11 <i>Hromadění chyb při určení rozpustnosti stříbrné soli</i> ..	37
Vzorová úloha 1.12 <i>Korelace v hromadění chyb</i> .....	37
1.4 Nejistoty výsledků měření .....	38
1.4.1 Porovnání přístupů k výpočtu nejistot .....	39
1.4.2 Kritické poznámky k výpočtu nejistot .....	41
Vzorová úloha 1.13 <i>Nejistota aritmetických operací přibližných čísel</i> .....	41
1.4.3 Přístup intervalové analýzy k nejistotám .....	42
Vzorová úloha 1.14 <i>Výpočet nejistoty teploty měřené rtuťovým teploměrem</i> .	43
1.4.4 Zaokrouhlování čísel .....	43
Vzorová úloha 1.15 <i>Zaokrouhlování čísel na 2, 3 a 4 platná místa</i> .....	44
1.5 Úlohy .....	44
1.5.1 Analýza farmakologických a biochemických dat .....	44
1.5.2 Analýza chemických a fyzikálních dat .....	45
1.5.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat .....	48
1.5.4 Analýza hutnických a mineralogických dat .....	49
1.5.5 Analýza fyzikálních dat .....	49
1.6 Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000) .....	50
1.6.1 Analýza farmakologických a biochemických dat .....	50
1.6.2 Analýza chemických a fyzikálních dat .....	50
1.6.3 Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat .....	51
1.6.4 Analýza hutnických a mineralogických dat .....	51
1.6.5 Analýza fyzikálních dat .....	51
1.7 Kontrolní otázky .....	51
Literatura .....	52

<b>2</b>	<b>Průzkumová analýza jednorotměrných dat</b>	54
	Vzorová úloha 2.1 <i>Analýza dat normálního a logaritmicko-normálního rozdělení</i>	55
2.1	Průzkumová (exploratorní) analýza dat EDA	55
2.2	Ověření předpokladů o datech	67
2.3	Transformace dat	70
2.4	Průběh průzkumové analýzy dat	73
	Vzorová úloha 2.2 <i>Průzkumová analýza velkého výběru</i>	75
2.5	Úlohy	81
2.5.1	Analýza farmakologických a biochemických dat	81
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	112
2.5.5	Analýza ekonomických a sociologických dat	120
2.6	Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	125
2.6.1	Analýza farmakologických a biochemických dat	125
2.6.2	Analýza chemických a fyzikálních dat	127
2.6.3	Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	130
2.6.4	Analýza hutnických a mineralogických dat	133
2.6.5	Analýza ekonomických a sociologických dat	136
2.7	Kontrolní otázky	138
	Literatura	139
<b>3</b>	<b>Statistická analýza jednorozměrných dat</b>	140
3.1	Bodový odhad parametrů polohy, rozptýlení a tvaru	140
	Momentové míry polohy a rozptýlení	140
	Kvantilové a robustní míry polohy a rozptýlení	143
	Odhady parametrů polohy a rozptýlení pro důležitá rozdělení	146
3.2	Intervalový odhad parametrů polohy a rozptýlení	152
3.3	Analýza malých výběrů	153
3.4	Statistické testování	154
A.	Postup testování statistické hypotézy	154
B.	Testy střední hodnoty („testy správnosti“)	155
C.	Testy shody středních hodnot („testy shodnosti“)	155
	Vzorová úloha 3.1 <i>Analýza velkého výběru</i>	160
	Vzorová úloha 3.2 <i>Analýza malého výběru</i>	162
	Vzorová úloha 3.3 <i>Test střední hodnoty (test správnosti)</i>	164
	Vzorová úloha 3.4 <i>Test shodnosti středních hodnot</i>	165
	Vzorová úloha 3.5 <i>Párový test</i>	166
3.5	Úlohy	167
3.5.1	Analýza farmakologických a biochemických dat	167
3.5.2	Analýza chemických a fyzikálních dat	176
3.5.3	Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	190
3.5.4	Analýza hutnických a mineralogických dat	201
3.5.5	Analýza ekonomických a sociologických dat	207
3.6	Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	211
3.6.1	Analýza farmakologických a biochemických dat	211
3.6.2	Analýza chemických a fyzikálních dat	216

3.6.3	Analýza environmentálních, potravinářských a zemědělských dat	223
3.6.4	Analýza hutnických a mineralogických dat	230
3.6.5	Analýza ekonomických a sociologických dat	232
3.7	Kontrolní otázky	234
	Literatura	235
4	Statistická analýza vícerozměrných dat	237
4.1	Zdrojová matice dat	237
4.1.1	Popis vícerozměrných dat	237
4.1.2	Postup analýzy vícerozměrných dat	240
4.1.3	Předúprava dat	241
	Vzorová úloha 4.1 <i>Grafy různých forem škálování</i>	243
4.2	Popisné charakteristiky	244
4.2.1	Odhady parametrů polohy a rozptýlení	244
4.2.2	Intenzita vztahu mezi proměnnými	245
	Vzorová úloha 4.2 <i>Popisné charakteristiky vícerozměrných náhodných veličin</i>	248
4.3	Exploratorní analýza struktury objektů (EDA)	249
	A. Určení struktury a vazeb ve znacích a objektech	255
4.4	Analýza hlavních komponent (PCA)	255
4.4.1	Podstata metody	255
4.4.2	Těsnost proložení vyjádřená rezidui objektů	257
4.4.3	Grafické diagnostiky metody hlavních komponent	258
4.4.4	Problémy v PCA	260
4.4.5	Interpretace výsledků metody hlavních komponent (PCA)	261
	Vzorová úloha 4.3 <i>Sledování spotřeby proteinů v 25 zemích Evropy</i>	263
4.5	Faktorová analýza (FA)	273
4.5.1	Podstata metody	273
4.5.2	Porovnání FA a PCA	275
4.5.3	Průběh diagnostikování metodou faktorové analýzy	275
4.5.4	Interpretace výsledků faktorové analýzy FA	275
	Vzorová úloha 4.4 <i>Sociologický průzkum spokojenosti v životě</i>	277
4.6	Kanonická korelační analýza CCA	286
4.6.1	Podstata metody	286
4.6.2	Průběh diagnostikování kanonickou korelační analýzou CCA	288
4.6.3	Interpretace výsledků kanonické korelační analýzy	289
	Vzorová úloha 4.5 <i>Porovnání tří nových psychologických testů vůči třem standardním IQ testům</i>	290
	B. Klasifikace objektů	296
4.7	Diskriminační analýza DA	296
4.7.1	Podstata metody	296
4.7.2	Druhy diskriminační funkce	298
	Vzorová úloha 4.6 <i>Užití lineární diskriminační funkce</i>	299
4.7.3	Kvalita zařazení objektů do tříd (diskriminace)	300
4.7.4	Logistická diskriminace	301
	Vzorová úloha 4.7 <i>Užití logistické diskriminace</i>	301
4.7.5	Posouzení správnosti diskriminace	302
4.7.6	Průběh diagnostikování DA	303
4.7.7	Interpretace výsledků diskriminační analýzy	303
	Vzorová úloha 4.8 <i>Klasifikace kosatců dle délky a šířky okvětních lístků</i>	307

4.8	Logistická regrese (LR)	319
4.8.1	Podstata metody	319
4.8.2	Formulace logistického regresního modelu	320
4.8.3	Volba proměnných	322
4.8.4	Hledání řešení a těsnost proložení logistickým modelem	323
4.8.5	Kvalita vyhodnocení logistickou regresí	324
4.8.6	Aplikace logistické regrese	325
4.8.7	Interpretace výsledků logistické regrese	325
	Vzorová úloha 4.9 <i>Sledované znaky ovlivňující ústup leukemie</i>	327
4.9	Analýza shluků CLU	337
4.9.1	Podstata metody	337
4.9.2	Hierarchické shlukování	340
4.9.3	Průběh diagnostikování v analýze shluků	341
4.9.4	Interpretace výsledků analýzy shluků	343
	Vzorová úloha 4.10 <i>Sledování spotřeby proteinů v 25 zemích Evropy (CLU)</i>	344
4.9.5	Shlukování metodou nejbližších středů (K-Means)	350
	Vzorová úloha 4.11 <i>Klasifikace 12 hráčů košíkové na základě osmi hráčských vlastností</i>	351
4.9.6	Shlukování metodou středů-metoidů	355
	Vzorová úloha 4.12 <i>Struktura objektů rozličnými metodami shlukování</i>	356
4.9.7	Fuzzy shlukování	360
	Vzorová úloha 4.13 <i>Klasifikace objektů barev fuzzy shlukováním</i>	361
4.10	Vícerozměrné škálování (MDS)	364
4.10.1	Podstata metody	364
4.10.2	Druhy metod MDS	365
4.10.3	Průběh diagnostikování metodou vícerozměrného škálování	366
4.10.4	Interpretace výsledků metodou vícerozměrného škálování	368
	Vzorová úloha 4.14 <i>Vícerozměrné škálování různých druhů coca-coly</i>	368
4.11	Korespondenční analýza (CA)	371
4.11.1	Podstata metody	371
4.11.2	Průběh diagnostikování korespondenční analýzou	373
4.11.3	Interpretace výsledků korespondenční analýzy	374
	Vzorová úloha 4.15 <i>Sledování spotřeby proteinů v 25 zemích Evropy (CA)</i>	374
4.12	Úlohy	383
4.12.1	Analýza farmakologických a biochemických dat	384
4.12.2	Analýza chemických a fyzikálních dat	421
4.12.3	Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat	427
4.12.4	Analýza hutnických a mineralogických dat	444
4.12.5	Analýza ekonomických a sociologických dat	449
4.13	Kontrolní otázky	464
4.13.1	Pojem vícerozměrné náhodné veličiny	464
4.13.2	Obecný postup analýzy	464
4.13.3	Průzkumová analýza vícerozměrných dat	464
4.13.4	Metoda hlavních komponent PCA	465
4.13.5	Faktorová analýza FA PCA	466
4.13.6	Kanonická korelační analýza CCA	467
4.13.7	Diskriminační analýza DA	468
4.13.8	Logistická regrese LR	470
4.13.9	Analýza shluků CLU	471

4.13.10	Vícerozměrné škálování MDS .....	472
4.13.11	Korespondenční analýza CA .....	473
	Literatura .....	474
<b>5</b>	<b>Analýza rozptylu</b> .....	<b>479</b>
5.1	Jednofaktorová analýza rozptylu (ANOVA 1) .....	479
Vzorová úloha 5.1	<i>Zkrácený postup jednofaktorové analýzy rozptylu</i> .....	485
Vzorová úloha 5.2	<i>Podrobný postup v jednofaktorové analýze rozptylu</i> .....	487
5.2	Dvoufaktorová analýza rozptylu bez opakování v cele .....	494
Vzorová úloha 5.3	<i>Dvoufaktorová analýza rozptylu bez opakování</i> .....	498
5.3	Vyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu .....	505
Vzorová úloha 5.4	<i>Vyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu</i> .....	507
5.4	Nevyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu .....	509
Vzorová úloha 5.5	<i>Nevyvážená dvoufaktorová analýza rozptylu</i> .....	511
5.5	Opakovatelnost a reprodukovatelnost (analýza O&R) .....	512
Vzorová úloha 5.6	<i>Schéma analýzy O&amp;R</i> .....	513
5.6	Úlohy .....	520
5.6.1	Analýza farmakologických a biochemických dat .....	520
5.6.2	Analýza chemických a fyzikálních dat .....	530
5.6.3	Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat .....	540
5.6.4	Analýza hutnických a mineralogických dat .....	554
5.6.5	Analýza ekonomických a sociologických dat .....	562
5.7	Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000) .....	572
5.7.1	Analýza farmakologických a biochemických dat .....	572
5.7.2	Analýza chemických a fyzikálních dat .....	573
5.7.3	Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat .....	573
5.7.4	Analýza hutnických a mineralogických dat .....	574
5.7.5	Analýza ekonomických a sociologických dat .....	575
5.8	Kontrolní otázky .....	576
	Literatura .....	576
<b>6</b>	<b>Lineární regresní modely</b> .....	<b>578</b>
6.1	Jednorozměrné lineární regresní modely .....	583
Vzorová úloha 6.1	<i>Postup výstavby modelu a regresní diagnostika</i> .....	583
6.1.1	Úlohy na jednorozměrné lineární regresní modely .....	593
6.2	Validace nové analytické metody .....	609
Vzorová úloha 6.2	<i>Postup validace a regresní diagnostika</i> .....	609
6.2.1	Úlohy na validaci nové analytické metody .....	618
6.3	Lineární a nelineární kalibrace .....	630
Vzorová úloha 6.3	<i>Postup kalibrace spline funkcí</i> .....	631
6.3.1	Úlohy na lineární a nelineární kalibraci .....	633
6.4	Polynomické regresní modely .....	663
Vzorová úloha 6.4	<i>Optimální stupeň polynomu a snížení multikolinearity</i> .....	664
6.4.1	Úlohy na polynomické regresní modely .....	678
6.5	Vícerozměrné lineární regresní modely .....	691
Vzorová úloha 6.5	<i>Regresní triplet u vícerozměrného lineárního regresního modelu.</i> .....	692
6.5.1	Úlohy na vícerozměrné lineární regresní modely .....	705

6.6	Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000) .....	728
6.6.1	Jednorozměrné lineární regresní modely .....	728
6.6.2	Validace nové analytické metody .....	729
6.6.3	Úlohy na lineární a nelineární kalibraci .....	730
6.6.4	Úlohy na polynomické regresní modely .....	733
6.6.5	Vícerozměrné lineární regresní modely .....	733
6.7	Kontrolní otázky .....	736
	Literatura .....	738
<b>7</b>	<b>Korelace</b> .....	<b>741</b>
7.1	Druhy korelačních koeficientů .....	741
7.1.1	Párový korelační koeficient .....	741
7.1.2	Parciální korelační koeficient .....	742
7.1.3	Vícenásobný korelační koeficient .....	744
7.2	Pořadový korelační koeficient .....	744
7.3	Cronbachův korelační koeficient $\gamma$ spolehlivosti výsledku .....	746
	Vzorová úloha 7.1 <i>Postup vyšetření korelace</i> .....	747
7.4	Úlohy na korelaci .....	748
7.4.1	Analýza farmakologických a biochemických dat .....	748
7.4.2	Analýza chemických a fyzikálních dat .....	754
7.4.3	Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat .....	758
7.4.4	Analýza hutnických a mineralogických dat .....	765
7.4.5	Analýza ekonomických a sociologických dat .....	767
7.5	Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000) .....	773
7.5.1	Analýza farmakologických a biochemických dat .....	773
7.5.2	Analýza chemických a fyzikálních dat .....	773
7.5.3	Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat .....	773
7.5.4	Analýza hutnických a mineralogických dat .....	774
7.5.5	Analýza ekonomických a sociologických dat .....	774
7.6	Kontrolní otázky .....	775
	Literatura .....	776
<b>8</b>	<b>Nelineární regresní modely</b> .....	<b>777</b>
8.1	Tvorba nelineárního regresního modelu .....	777
	Vzorová úloha 8.1 <i>Odhad tří parametrů rozšířeného Debyeova-Hückelova vztahu</i> .....	781
8.2	Úlohy .....	784
8.2.1	Analýza farmakologických a biochemických dat .....	785
8.2.2	Analýza chemických a fyzikálních dat .....	788
8.2.3	Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat .....	800
8.2.4	Analýza hutnických a mineralogických dat .....	809
8.2.5	Analýza matematických modelů a fyzikálních dat .....	810
8.3	Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000) .....	816
8.3.1	Analýza farmakologických a biochemických dat .....	816
8.3.2	Analýza chemických a fyzikálních dat .....	816
8.3.3	Analýza environmetálních, potravinářských a zemědělských dat .....	818
8.3.4	Analýza hutnických a mineralogických dat .....	819
8.3.5	Analýza matematických modelů a fyzikálních dat .....	819
8.4	Kontrolní otázky .....	820
	Literatura .....	821

<b>9 Interpolace a aproximace</b> .....	824
9.1 Klasické interpolační postupy .....	825
Vzorová úloha 9.1 <i>Náhrada funkce <math>\exp(x)</math></i> .....	825
9.1.1 Lagrangeova a Newtonova interpolační formule .....	826
Vzorová úloha 9.2 <i>Náhrada funkce <math>\exp(x)</math></i> .....	829
Vzorová úloha 9.3 <i>Aproximace racionální funkce</i> .....	830
9.1.2 Hermitovská interpolace .....	831
Vzorová úloha 9.4 <i>Hermitovská interpolace funkce <math>\exp(x)</math></i> .....	831
9.1.3 Racionální interpolace .....	832
Vzorová úloha 9.5 <i>Racionální interpolace funkce <math>\exp(x)</math></i> .....	833
9.2 Spline interpolace .....	834
Vzorová úloha 9.6 <i>Lineární B-spline</i> .....	836
9.2.1 Lokální hermitovská interpolace .....	837
Vzorová úloha 9.7 <i>Lokální kubická interpolace stupňovité závislosti</i> .....	840
Vzorová úloha 9.8 <i>Akimova interpolace schodovité závislosti</i> .....	841
9.2.2 Kubické spline .....	842
Vzorová úloha 9.9 <i>Spline interpolace schodovité závislosti</i> .....	844
Vzorová úloha 9.10 <i>Interpolace pomocí spline pod napětím</i> .....	846
9.3 Aproximace funkcí .....	846
Vzorová úloha 9.11 <i>Aproximace funkce <math>\exp(x)</math></i> .....	849
9.4 Aproximace tabelárních závislostí .....	850
9.4.1 Polynomická aproximace .....	850
Vzorová úloha 9.12 <i>Čebyševova aproximace funkce <math>\exp(x)</math></i> .....	851
Vzorová úloha 9.13 <i>Hledání nejlepšího poměru polynomů</i> .....	853
9.4.2 Úseková regrese .....	855
Vzorová úloha 9.14 <i>Aproximace píku</i> .....	859
Vzorová úloha 9.15 <i>Aplikace postupu úsekové polynomické regrese</i> .....	863
Vzorová úloha 9.16 <i>Určení bodu ekvivalence u dvou větví titrační křivky</i> ..	865
9.5 Numerické vyhlazování .....	867
9.5.1 Spline vyhlazování .....	868
Vzorová úloha 9.17 <i>Vyhlazování píku algoritmem SPÄTH</i> .....	871
Vzorová úloha 9.18 <i>Vyhlazování píku algoritmem REINSCH</i> .....	873
Vzorová úloha 9.19 <i>Optimální vyhlazení píku</i> .....	876
9.5.2 Neparametrická regrese .....	877
Vzorová úloha 9.20 <i>Neparametrická regrese píku</i> .....	878
9.5.3 Číslicová filtrace .....	879
Vzorová úloha 9.21 <i>Porovnání vlastností lineárních a nelineárních filtrů</i> ..	881
Vzorová úloha 9.22 <i>Vliv délky regresního filtru na vyhlazující vlastnosti</i> ..	885
Vzorová úloha 9.23 <i>Filtrace absorpčního spektra fenolové červeně</i> .....	886
Vzorová úloha 9.24 <i>Výpočet hustoty kyseliny fosforečné</i> .....	887
Vzorová úloha 9.25 <i>Určení chybějící hodnoty v infračerveném spektru</i> ....	887
9.6 Postup při interpolaci a aproximaci .....	888
9.7 Úlohy .....	889
9.7.1 Analýza chemických a fyzikálních dat .....	889
9.7.2 Analýza ekonomických a ostatních dat .....	891
9.8 Kontrolní otázky .....	894
Literatura .....	895

<b>10</b>	<b>Kontrola a řízení jakosti</b>	897
10.1	Podstata úloh řízení jakosti	897
10.2	Regulační diagramy	904
10.2.1	Regulační diagramy pro dílčí výběry	904
10.2.2	Regulační diagramy typu „ $x$ s pruhem“	905
10.2.3	Regulační diagramy pro posouzení variability	910
10.2.4	Regulační diagramy kumulativních součtů, CUSUM	911
10.2.5	Regulační diagramy na bázi lokálního vyhlazení	914
10.2.6	Regulační diagramy pro jednotlivé hodnoty	917
10.2.7	Regulační diagramy pro distrétní znaky	918
10.2.8	Regulační diagramy pro více proměnných	920
10.2.9	Používání regulačních diagramů	924
10.2.10	Konstrukce regulačních diagramů	924
	Vzorová úloha 10.1 <i>Aplikace regulačního diagramu pro průměry a směrodatné odchylky</i>	925
	Vzorová úloha 10.2 <i>Aplikace diagramu <math>R</math></i>	927
10.2.11	Pravidla pro určování zvláštních případů	929
	Vzorová úloha 10.3 <i>Aplikace regulačního diagramu pro jednotlivé hodnoty <math>x</math></i>	931
10.2.12	Porušení předpokladů o datech	932
10.2.13	Pomůcky diagramů kumulativních součtů CUSUM	936
	Vzorová úloha 10.4 <i>Lucasova modifikace regulačního diagramu CUSUM</i>	938
	Vzorová úloha 10.5 <i>Aplikace diagramů exponenciálně vážených klouzavých průměrů, EWMA</i>	939
	Vzorová úloha 10.6 <i>Kontrola tavby v metalurgickém provozu regulačním diagramem</i>	940
	Vzorová úloha 10.7 <i>Chemická analýza složení plyných splodin</i>	942
	Vzorová úloha 10.8 <i>Aplikace Hotellingova regulačního diagramu</i>	944
10.3	Indexy způsobilosti procesu	947
10.4	Software pro řízení jakosti	951
10.5	Úlohy	954
10.6	Kontrolní hodnoty (ADSTAT, NCSS2000)	960
10.7	Kontrolní otázky	961
	Literatura	962
<b>Dodatek</b>		963
	System STATISTICA	963
<b>Rejstřík</b>		975