

O B S A H

ÚVOD	3
1. METROLOGIE V ANALYTICKÉ CHEMII	7
1.1 Analytická chemie ve vědě a v praxi	7
1.1.1 Pojem a postavení chemické analýzy	7
1.1.2 Analytický systém	10
1.1.3 Analytický signál	14
1.1.4 Základní pojmy analytické metrologie signálu a výsledku	16
1.1.5 Analytická metoda	19
1.2 Metrologické vlastnosti analytického signálu a výsledku	21
1.2.1 Statistický charakter analytických výsledků	21
1.2.2 Odhady základních metrologických charakteristik výsledků	23
1.2.3 Testování metrologických vlastností analytických výsledků	30
1.2.4 Praktické použití metrologických charakteristik při uvádění analytických výsledků	40
1.3 Metrologické vlastnosti analytické metody a analytického systému	43
1.3.1 Oblast použitelnosti analytické metody	44
1.3.2 Ověření správnosti výsledků	52
1.3.3 Informační vlastnosti analytického výsledku, metody a systému	57
1.4 Vývoj analytické metody	65
1.4.1 Obecná strategie vývoje analytické metody	65
1.4.2 Kalibrace a vyhodnocování signálu	68

1.4.3	Interference a vyhodnocování	69
1.4.4	Určení a zpracování analytické funkce	73
1.4.5	Zvláštnosti vyhodnocování ve stopové analýze	76
1.4.6	Vyhodnocení signálu z hlediska teorie informace	77
1.5	Referenční materiály v analytické chemii	79
1.5.1	Pojem a základní vlastnosti referenčního materiálu chemického složení	79
1.5.2	Použití RM v analytické chemii	82
2.	VYBRANÉ KAPITOLY Z CHEMOMETRIE	88
2.1	Vznik, úloha a postavení chemometrie v chemii	88
2.2	Určování matematického modelu a jeho parametrů, regrese	90
2.2.1	Základní pojmy a vztahy	90
2.2.2	Lineární regrese	96
2.2.2.1	Lineární regrese obecné přímkové závislosti	96
2.2.2.2	Regrese přímky procházející počátkem	101
2.2.2.3	Transformace na lineární regresi	104
2.2.2.4	Aplikace statistických vah při lineární regresi přímky ...	108
2.2.2.5	Vícenásobná lineární regrese ..	110
2.2.2.6	Polynomická regrese, splajny ..	111
2.2.3	Metody obecné regrese, minimalisace funkcí	113
2.2.3.1	Funkce jedné proměnné	113
2.2.3.1.1	Metoda zlatého řezu	114
2.2.3.1.2	Metoda Fibonacciho	115

2.2.3.1.3	Metoda "úspěchu-neúspě- chu" Rosenbrocka	118
2.2.3.1.4	Kvadratická interpolace	119
2.2.3.2	Funkce více proměnných	121
2.2.3.2.1	Relaxační metoda	121
2.2.3.2.2	Simplexová metoda	122
2.2.3.2.3	Derivační (gradientové) metody	125
2.2.3.3	Jiné metody, soubory minima- lizačních programů a závěr	129
	Literatura	133
2.3	Rozpoznávání vzoru a metody umělé inteligence ..	134
2.3.1	Metody umělé inteligence	134
2.3.2	Rozpoznávání vzoru - Pattern Recognition (PR)	135
2.3.2.1	Základy metody rozpoznávání vzoru	138
2.3.2.2	Klasifikace metodou PRIMA	141
	Literatura	167
2.4	Faktorová analýza	148
2.4.1	Podstata a schema faktorové analýsy	148
2.4.2	Metoda hlavních komponent (PCA)	152
2.4.2.1	Triangulace matice	153
2.4.2.2	Určení hodnoty matice (počtu faktorů) pomocí vlastních čísel	154
	Literatura	162
3.	MIKROPOČÍTAČE	163
3.1	Mikropočítače, chemometrie a pár slov úvodem	163

3.2	Od počítače k mikroprocesoru	166
3.3	Historický vývoj	167
3.4	Mikropočítač	170
3.4.1	Mikroprocesor 8080A	174
3.4.2	Mikroprocesor Zilog Z80	177
3.5	Stavební prvky	182
3.6	Zobrazení dat	184
3.7	Přenos dat	187
3.7.1	Sériový přenos	187
3.7.2	Paralelní přenos	189
3.7.3	Synchronní a asynchronní přenos	189
3.7.4	Informačně-měřicí systém IMS-2	191
3.7.5	Organisace přenosu dat	192
3.8	Aplikace mikropočítačů v chemické instrumenta- ci	195
3.8.1	Zlepšení přístrojové techniky	195
3.8.2	Laboratorní automatisace	197
3.8.3	Zlepšení vyhodnocovacího procesu	201
3.8.4	Připojování přístrojů	202
3.9	Programovací jazyky pro UPO	204
3.10	Základní programové vybavení SAPI-1	207
3.11	Slovníček	213
	Literatura	218

