

Předmluva	3
ÚVOD Obsah chemometrie	9
A. MATEMATICKÉ A STATISTICKÉ METODY A POMŮCKY V CHEMOMETRII	11
1. ZÁKLADY TEORIE CHYB A UDÁVÁNÍ VÝSLEDKU MĚŘENÍ	11
1.1. Druhy chyb instrumentálních měření	11
1.2. Zákon o šíření (hromadění) chyb	11
1.3. Zaokrouhlování čísel	12
1.4. Řešené příklady	13
1.5. Kontrolní otázky a cvičení	17
2. NÁHODNÝ VÝBĚR A ZÁKLADNÍ TYPY ROZDĚLENÍ PRAVDĚPODOBNOTI	18
2.1. Základní soubor a náhodný výběr	18
2.2. Druhy náhodných veličin	19
2.3. Rozdělení výběrových charakteristik	19
2.3.1. Binomické rozdělení	19
2.3.2. Poissonovo rozdělení	20
2.3.3. Normální rozdělení	20
2.3.4. Logaritmicko-normální rozdělení	23
2.3.5. Rozdělení výběrových rozptylů, χ^2	23
2.3.6. Fisherovo-Snedecorovo rozdělení F	24
2.4. Přehled užívaných algoritmů	25
2.5. Řešené příklady	27
2.6. Kontrolní otázky a cvičení	31
3. STATISTICKÉ MÍRY POLOHY A ROZPTÝLENÍ	32
3.1. Bodový odhad parametrů polohy a rozptýlení	32
3.1.1. Bodový odhad míry polohy	33
3.1.2. Bodový odhad míry rozptýlení	36
3.1.3. Bodový odhad míry šikmosti	39
3.1.4. Bodové odhady míry špičatosti	40
3.2. Intervalové odhady	40
3.2.1. Intervalový odhad míry polohy	40
3.2.2. Intervalový odhad rozptylu	42
3.2.3. Intervalový odhad parametrů log.-normálního rozdělení	42
3.2.4. Intervalový odhad parametru p alternativního rozdělení	42
3.3. Statistické toleranční meze	43
3.4. Přehled užívaných algoritmů	43
3.5. Řešené příklady	44
3.6. Kontrolní otázky a cvičení	52
4. OVĚŘOVÁNÍ STATISTICKÝCH HYPOTÉZ	53
4.1. Postup při ověřování (testování) hypotézy	54
4.2. Rozhodování při testování hypotézy	54
4.3. Parametrické testy	55
4.3.1. Testy správnosti výsledků	55
4.3.2. Testy shodnosti dvou výsledků	56
4.3.3. Test rozdílu průměrů párových hodnot	58
4.3.4. Test rozdílu mezi dvěma rozptyly	59
4.3.5. F_{\max} —test homogenity rozptylu	59
4.3.6. Test homogenity rozptylu	60
4.3.7. Testy vylučování odlehlých výsledků	61
4.3.8. Testy dobré shody (přiléhavosti)	62

4.4.	Neparametrické testy	65
4.4.1.	Znaménkový test	65
4.4.2.	Iterační test	66
4.4.3.	Wilcoxonův pořadový test párových hodnot	67
4.4.4.	U—test dle Mann-Whitneye	68
4.5.	Obecný postup vyhodnocení souboru dat s využitím rozličných testů ..	69
4.5.1.	Soubor s normálním rozložením dat	69
4.5.2.	Soubor s log. - normálním rozložením dat	70
4.5.3.	Soubor s neznámým rozložením dat	70
4.6.	Přehled užívaných algoritmů	70
4.7.	Řešené příklady	74
4.8.	Kontrolní otázky a cvičení	83
5.	ANALÝZA ROZPTYLU, ANOVA	84
5.1.	Třídění dle jednoho faktoru	84
5.1.1.	Testování jednofaktorovou ANOVA	87
5.1.2.	Geometrie jednofaktorové ANOVA	88
5.1.3.	Diagnostiky vyšetřovaného modelu	88
5.2.	Třídění dle dvou faktorů bez opakování a bez interakce	89
5.3.	Třídění dle dvou faktorů s opakováním a s interakcí	92
5.4.	Přehled užívaných algoritmů	95
5.5.	Řešené příklady	95
5.6.	Kontrolní otázky a cvičení	102
6.	LINEÁRNÍ REGRESE A KORELACE	103
6.1.	Volba modelu a druhy chyb	103
6.2.	Jednoduchá lineární regrese	104
6.2.1.	Odhady parametrů regresní přímky	105
6.2.2.	Přesnost odhadovaných parametrů a, b	107
6.2.3.	Koeficient korelace a determinace	108
6.2.4.	Testy odhadů parametrů regresní přímky	109
6.2.5.	Testy koeficientů korelace	112
6.2.6.	Test těsnosti proložení regresní přímkou	114
6.3.	Jednoduchá lineární regrese pro více závisle proměnných	116
6.4.	Vícenásobná lineární regrese	118
6.5.	Přehled užívaných algoritmů	120
6.6.	Řešené příklady	126
6.7.	Kontrolní otázky a cvičení	136
7.	APROXIMACE EXPERIMENTÁLNÍCH ZÁVISLOSTÍ	137
7.1.	Polynomická regrese	138
7.1.1.	Regrese polynomem známého stupně	138
7.1.2.	Určení stupně polynomu	139
7.1.3.	Redukce členů polynomu	139
7.2.	Aproximace polynomem v intervalu	139
7.3.	Aproximace ortogonálními polynomy	140
7.4.	Aproximace funkcemi spline	141
7.5.	Aproximace empirickými tvary závislostí	141
7.6.	Přehled užívaných algoritmů	142
7.7.	Řešené příklady	144
7.8.	Kontrolní otázky a cvičení	147
8.	NELINEÁRNÍ REGRESE	148
8.1.	Formulace nelineárního modelu	148
8.2.	Odhad parametrů nelineárního modelu	149

8.3.	Minimalizační metody nederivační	151
8.3.1.	Metoda přímého hledání	151
8.3.2.	Rosenbrockova metoda	151
8.3.3.	Simplexová metoda	152
8.3.4.	Metoda LETAGROP (mapování dolíčku)	153
8.4.	Minimalizační metody derivační	155
8.4.1.	Gauss-Newtonova a Newton-Raphsonova metoda	157
8.4.2.	Metoda největšího spádu	159
8.4.3.	Metoda konjugovaných gradientů	160
8.4.4.	Davidon-Fletcher-Powellova metoda s proměnnou metrikou	161
8.5.	Odhad chyb hledaných parametrů	162
8.6.	Vyšetřování modelu a spolehlivost odhadu parametrů	163
8.7.	Přehled užívaných algoritmů	165
8.8.	Řešené příklady	175
8.9.	Kontrolní otázky a cvičení	194
9.	INTERPOLACE A EXTRAPOLACE	196
9.1.	Lineární interpolace	196
9.2.	Lagrangeova interpolace	196
9.3.	Newtonova interpolace	197
9.4.	Odvozené typy interpolačních vzorců	199
9.4.1.	Aitkenova interpolace	199
9.4.2.	Gaussova interpolace	199
9.5.	Přehled užívaných algoritmů	200
9.6.	Řešené příklady	202
9.7.	Kontrolní otázky a cvičení	204
10.	DERIVACE A INTEGRACE	205
10.1.	Derivace	205
10.1.1.	Analytická derivace	206
10.1.2.	Numerická derivace	206
10.2.	Integrace	208
10.2.1.	Analytická integrace	208
10.2.2.	Numerická integrace	208
10.3.	Řešení diferenciálních rovnic	210
10.3.1.	Eulerova metoda	211
10.3.2.	Rungovy-Kuttovy metody	211
10.3.3.	Adamsovy metody	212
10.4.	Přehled užívaných algoritmů	213
10.5.	Řešené příklady	215
10.6.	Kontrolní otázky a cvičení	217
B.	VYHODNOCENÍ INSTRUMENTÁLNÍCH MĚŘENÍ	218
11.	ANALÝZA ROVNOVÁH V ROZTOCÍCH	218
11.1.	Určení chemického modelu regresní analýzou instrumentálních dat ...	220
11.2.	Vyhodnocení rovnováh při potenciometrické titraci	220
11.2.1.	Program PSEQUAD(83)	222
11.2.2.	Program MINQUAD	223
11.2.3.	Program PKAS	223
11.2.4.	Program ACBA	224
11.2.5.	Program ESAB	224
11.2.6.	Program MAGEC	225
11.2.7.	Vnější a vnitřní standardizace článku	225
11.3.	Vyhodnocení rovnováh při fotometrické titraci	226

11.3.1.	Program MRLET, MRFIT (metoda molárních poměrů)	226
11.3.2.	Program NCLET (chelatometrická titrační křivka)	228
11.3.3.	Program JOBCON (metoda kontinuálních variací)	229
11.3.4.	Programy DCLET, DCFIT, DCMINUIT, DCSPONA (SPOPT) disociační konstanty z A-pH křivky	231
11.3.5.	Programy DHLET, DHMINUIT (termodynamická disociační konstanta a parametry Debye-Hückelova zákona)	232
11.4.	Vyhodnocení rovnováh analýzou UV-VIS spekter	232
11.4.1.	Určení počtu barevných částic směsi	234
11.4.2.	Postup při určení chemického modelu regresní analýzou spekter (programy SQUAD(84), FA608+EY608, PSEQUAD(83)).....	236
11.5.	Přehled užívaných algoritmů	240
11.6.	Řešené příklady	253
11.7.	Kontrolní otázky a cvičení	271
12.	DODATEK: TABULKY KRITICKÝCH HODNOT	272
	Tabulka D1: Distribuční funkce binomického rozdělení	272
	Tabulka D2: Distribuční funkce Poissonova rozdělení	274
	Tabulka D3: Kritické hodnoty normovaného normálního rozdělení	276
	Tabulka D4: Kritické hodnoty Studentova t-testu	277
	Tabulka D5: Kritické hodnoty rozdělení χ^2	278
	Tabulka D6: Kritické hodnoty Fisherova-Snedecorova F rozdělení	279
	Tabulka D7: Kritické hodnoty Lordova testu	282
	Tabulka D8: Kritické hodnoty Mooreova testu	282
	Tabulka D9: Kritické hodnoty Dean-Dixonova testu odlehlých hodnot	282
	Tabulka D10: Kritické hodnoty Grubbsova testu odlehlých hodnot	283
	Tabulka D11: Kritické hodnoty Dornbosova testu odlehlých hodnot	283
	Tabulka D12: Kritické hodnoty testu Shapira a Wilka	284
	Tabulka D13: Kritické hodnoty testu koeficientu šikmosti	285
	Tabulka D14: Kritické hodnoty testu koeficientu špičatosti	285
	Tabulka D15: Kritické hodnoty počtu znamének (+) či (-) znaménkového testu	286
	Tabulka D16: Medián a jeho interval spolehlivosti	286
	Tabulka D17: Hodnoty koeficientů výpočtu dovolené difference	286
	Tabulka D18: Kritické hodnoty korelačního koeficientu	287
	Tabulka D19: Koeficienty k pro oboustranné předpovědní meze	283