

Obsah

Předmluva	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>	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

2	Průzkumová analýza jednorotměrných dat	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
3	Statistická analýza jednorozměrných dat	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 listků</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 rozličenými 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
5	Analýza rozptylu	479
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&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
6	Lineární regresní modely	578
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</i> <i>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
7	Korelace	741
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 γ 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
8	Nelineární regresní modely	777
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

9 Interpolace a aproximace	824
9.1 Klasické interpolační postupy	825
Vzorová úloha 9.1 <i>Náhrada funkce $\exp(x)$</i>	825
9.1.1 Lagrangeova a Newtonova interpolační formule	826
Vzorová úloha 9.2 <i>Náhrada funkce $\exp(x)$</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 $\exp(x)$</i>	831
9.1.3 Racionální interpolace	832
Vzorová úloha 9.5 <i>Racionální interpolace funkce $\exp(x)$</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 $\exp(x)$</i>	849
9.4 Aproximace tabelárních závislostí	850
9.4.1 Polynomická aproximace	850
Vzorová úloha 9.12 <i>Čebyševova aproximace funkce $\exp(x)$</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 piku</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 piku algoritmem SPÄTH</i>	871
Vzorová úloha 9.18 <i>Vyhlazování piku algoritmem REINSCH</i>	873
Vzorová úloha 9.19 <i>Optimální vyhlazení piku</i>	876
9.5.2 Neparametrická regrese	877
Vzorová úloha 9.20 <i>Neparametrická regrese piku</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

10	Kontrola a řízení jakosti	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 R</i>	927
10.2.11	Pravidla pro určování zvláštních případů	929
	Vzorová úloha 10.3 <i>Aplikace regulačního diagramu pro jednotlivé hodnoty x</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
Dodatek		963
	Systém STATISTICA	963
Rejstřík		975