

OBSAH

Úvod	5
1 Základní statistické parametry a testy hypotéz	7
1.1 Základní soubor a typy statistických rozdělení	7
1.1.1 Základní pojmy	7
1.1.2 Náhodné veličiny	8
1.1.3 Základní typy rozdělení	10
1.2 Statistika opakovaných měření, náhodný výběr	12
1.3 Nejistota výsledku	14
1.4 Nejistoty elementárních operací v chemické a biologické laboratoři	17
1.4.1 Volumetrické operace	17
1.4.2 Vážení	17
1.4.3 Nejistota hodnoty měřeného signálu	17
1.4.4 Titrační stanovení	18
1.5 Vyhodnocování nejistot postupy „zdola nahoru“ a „shora dolů“	18
1.6 Testy hypotéz	19
1.6.1 Statistika opakovaných pokusů	20
1.6.2 Testování hypotéz s použitím nejistoty výsledku	21
1.7 Příklady ke kapitole 1	22
2 Optimalizace měřicích postupů v chemii a biologických vědách	23
2.1 Plánování experimentů	23
2.2 Experimentální optimalizace	28
2.3 Příklady ke kapitole 2	31
3 Hodnocení závislosti mezi proměnnými	33
3.1 Lineární regrese	33
3.2 Vážená lineární regrese	37
3.3 Lineární regrese s nejistotami v obou proměnných (bivariátní, bilineární regrese)	38
3.4 Nelineární regrese v biologických měřicích postupech	40
3.5 Další experimentální plány v kalibraci	42
3.5.1 Metoda přidavku standardu (SAM)	42
3.5.2 Metoda „bracketing“	44
3.6 Příklady ke kapitole 3	45
4 Validace měřicích postupů	47
4.1 Terminologie	47
4.2 Experimentální plán pro validaci	48
4.3 Selektivita (interference)	48
4.4 Rozsah měření, linearita	49
4.5 Opakovatelnost	50
4.6 Reprodukovatelnost	50
4.7 Výtěžnost	50
4.8 Mez detekce, mez stanovitelnosti	51
4.9 Robustnost měřicího postupu	53
4.10 Příklady ke kapitole 4	54

5	Statistické metody při přípravě a používání referenčních materiálů	55
5.1	Statistické principy certifikace	55
5.1.1	Stanovení nejistoty homogenity	55
5.1.2	Stanovení nejistoty stability	57
5.2	Použití certifikovaných referenčních materiálů	58
5.3	Příklady ke kapitole 5	58
6	Mezilaboratorní porovnání	59
6.1	Norma ISO 13528	59
6.2	Harmonizovaný protokol IUPAC	61
6.3	Kvalitativní zkoušky	61
7	Kontingenční tabulky	63
7.1	Příklady ke kapitole 7	66
8	Vícerozměrné metody	67
8.1	Kovarianční matice a testy hypotéz	67
8.2	Boxův test	69
8.3	Ověření úplné nezávislosti zkoumaných proměnných	69
8.4	Lineární diskriminační analýza	70
8.5	Lineární diskriminační analýza pro více skupin ($k > 2$)	72
8.6	Příklady ke kapitole 8	73
9	Používání referenčních materiálů při řízení kvality (ISO Guide 80)	75
9.1	Homogenita	75
9.2	Dlouhodobá stabilita	76
9.3	Použití QCM při tvorbě regulačních diagramů	77
10	Literatura	79
11	Seznam zkratk	81