

# 2 THETA

Analytical standards equipment

Ing. Václav Helán – 2 THETA  
P. S. 103, 737 01 Český Těšín, CZ  
e-mail: [2theta@2theta.cz](mailto:2theta@2theta.cz)

Tel/Fax: 558 732 122, 558 732 224, mobil: 602 720 747  
[www.2theta.cz](http://www.2theta.cz)

## MĚŘENÍ A VÝSLEDKY V ANALYTICKÉ CHEMII

**Jiří G. K. Ševčík**

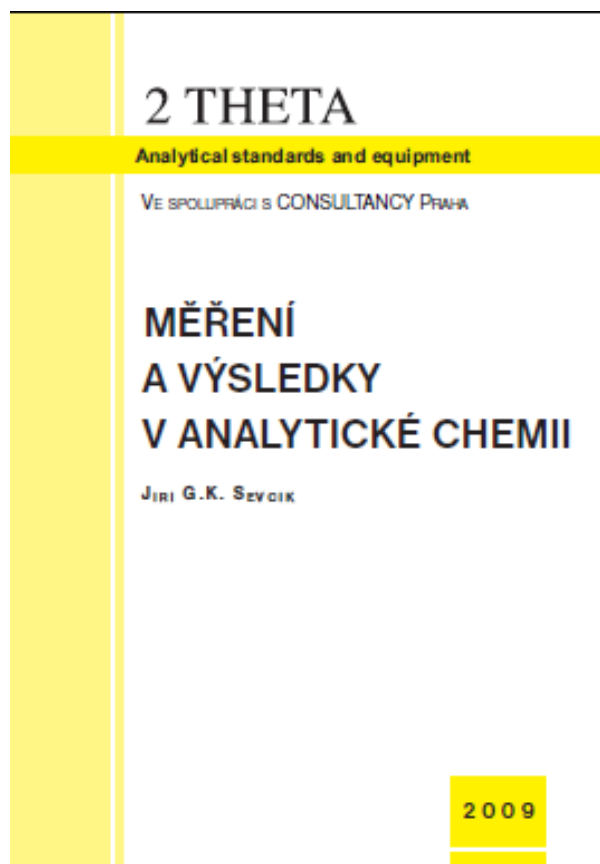
**ISBN 978-80-86380-48-3**

**187 stran**, součástí publikace je CD

formát A5, náklad 200 výtisků

Vydal: **Ing. Václav Helán – 2 THETA**  
Český Těšín, jako svou 72 publikaci ve  
spolupráci  
s **Prof. Ing. Jiří Ševčík, DrSc.** -  
**CONSULTANCY Praha**

Cena: **300,- Kč + 14% DPH**



### **O autorovi**

*Jiří (Georg Kamil) Ševčík, (Prof., PhD., DSc.), profesor analytické chemie, ukončil v roce 1962 studia na Fakultě technické a jaderné fyziky ČVUT v Praze, v roce 1966 získal na Přírodovědné fakultě Karlovy univerzity titul CSc. a v roce 1995 na Univerzitě Pardubice titul DrSc.*

*V letech 1976–1996 pracoval jako vedoucí výzkumu mezinárodních přístrojových firem v Holandsku a v Německu. V roce 1991 mu byla v Chicagu udělena americká cena za výzkum „R&D100 AWARD“.*

*V roce 1998 byl jmenován profesorem na Karlově univerzitě, 1997-2001 byl proděkanem Přírodovědné fakulty UK, 1997-2005 vedoucím katedry analytické chemie, 2001-2008 konsultantem RWE Transgas. Spolu s RWE je vlastníkem platných patentů v řadě zemí EU a USA.*

*V roce 2004 byl zvolen členem Inženýrské Akademie České republiky.*

*Výzkumná činnost autora je zaměřena na separační analytické metody, obzvláště plynovou chromatografii a automatizaci a využití numerických řešení pro adaptivní instrumentaci.*

# 2 THETA

## Analytical standards equipment

Ing. Václav Helán – 2 THETA  
P. S. 103, 737 01 Český Těšín, CZ  
e-mail: [2theta@2theta.cz](mailto:2theta@2theta.cz)

Tel/Fax: 558 732 122, 558 732 224, mobil: 602 720 747  
[www.2theta.cz](http://www.2theta.cz)

### Obsah

#### Úvodem

- Plán vzorkování (rovněž příloha CD)
- 1. Měřicí zařízení
  - Charakteristika pozorovaného děje
  - Objem detektoru
  - Integrační interval sběru dat
  - Časová konstanta
  - Množství analytu
- 2. Model odezvy
  - Obecný model odezvy
  - Zjednodušený model odezvy
- 3. Charakteristika detektoru
  - Citlivost
  - Selektivita
  - Linearita
  - Koeficient linearity
  - Chyby linearity
  - Lineární dynamický rozsah
  - Stanovení charakteristik měřicího zařízení (rovněž příloha CD)
- 4. Zpracování
  - Šum
  - A/D a D/A převodník
  - Hrubá data
- 5. Data
- 6. Zpracování dat
  - Integrační časový úsek "bunch"
  - Nulová linie signálu
  - Metody snížení šumu
  - Uložení nových souborů dat
- 7. Metody konverze
  - Metody kalibrace
  - Standardní vzorek
  - Pracovní postup kalibrace
  - Nejistota metody kalibrace
  - Metoda standardního přídávku
  - Metoda vnitřního standardu
  - Metoda vnějšího standardu
  - Efektivnost kalibračních metod
  - Volba metody kalibrace
- 8. Kalibrační křivka (rovněž příloha CD)
  - Model kalibrační křivky
  - Postup zhotovení kalibrační křivky
  - Verifikace modelu kalibrační křivky
  - Metoda linearizace odezvy
  - Mez detekce a mez stanovitelnosti
- 9. Výsledky
  - Standardizace výsledků
  - Zaokrouhlování výsledků (rovněž příloha CD)
    - na určený počet významných míst
      - s normativně předepsaným rozlišením
      - opakovaných měření s danou hodnotou rozptylu
      - neopakovaných měření z hodnoty
      - relativní směrodatné odchylky
- 10. Model měření
  - Lineární model měření
  - Analýza hlavních komponent (PCA)
- 11. Opakované vytvoření výsledku (post-run calculation)
  - Parametry zpracování dat

# 2 THETA

## Analytical standards equipment

Ing. Václav Helán – 2 THETA  
P. S. 103, 737 01 Český Těšín, CZ  
e-mail: [2theta@2theta.cz](mailto:2theta@2theta.cz)

Tel/Fax: 558 732 122, 558 732 224, mobil: 602 720 747  
[www.2theta.cz](http://www.2theta.cz)

- Volba časového úseku – *bunch*
- Citlivost poznání změny
- Určení počátku a konce pozorovaného děje
- Určení nulové linie
- Minimální odezva
- Volba kalibrační metody
- 12. Vyhodnocení
  - Statistické pojmy souboru výsledků
  - Statistická hypotéza
  - Testy parametrické a neparametrické
  - Vícerozměrné rozdělení
  - Analýza rozptylu – ANOVA
  - Korelační analýza
  - Koeficient determinace
  - Regresní analýza
  - Analýza s latentními proměnnými
- 13. Znázornění výsledků
  - Tabulka četnosti
  - Grafické znázornění souborů výsledků
  - Parametry deskriptivní statistiky
  - Míry centroidní tendence
  - Míry disperzní tendence
  - Míra umístění výsledku v rámci rozložení
- 14. Pravděpodobnost
  - Tvar rozdělení
  - Parametry rozdělení
  - Intervalový odhad
- 15. Statistická hypotéza
- 16. Neparametrické testy
  - Jednoduché znaménkové testy
  - Wilcoxonovy znaménkové pořadové testy
- 17. Analýza rozptylu – ANOVA
- 18. Zobecnění
  - Korelační analýza
  - Regresní
  - Lineární regresní model
- 19. Analýza latentních proměnných
  - Faktorová analýza
  - Shluková analýza
  - Analýza vzoru
- 20. Analytické informace
  - Informační tok a náklady na získání informace
- 21. Kritické hodnoty statistických testů
  - Tabulka I; Normální rozdělení
  - Tabulka II; Dvoustranné  $t$ -rozdělení
  - Tabulka III; Chí kvadrát ( $\chi^2$ )- rozdělení
  - Tabulka IV;  $F$ -rozdělení na hladině  $\alpha = 0,05$
  - Tabulka V; Grubbsův dvoustranný test odlehých výsledků
  - Tabulka VI; Parametrický korelační koeficient  $r$ 
    - Neparametrický pořadový korelační koeficient  $r_s$
  - Tabulka VII; Dvoustranného neparametrického znaménkového testu
    - Wilcoxonova znaménkového pořadového testu
  - Tabulka VIII; Dvouvýběrového pořadového Wilcoxonova testu,  
rovněž označovaného Mann-Whitneyův  $U$ -test
- 22. Výpočetní řešení základních analytických úkolů (přílohy na CD)
  - Vytvoření schématu vzorkování
  - Stanovení charakteristik měřicího zařízení
  - Konstrukce Kalibrační křivka
  - Formátování - Zaokrouhlování výsledků analýz