

Spis treści

Od autorów	9
1. Podstawowe pojęcia w analizie statystycznej	11
1.1. Podstawowe definicje	11
1.1.1. Próbką analityczną	11
1.1.2. Próbką statystyczną, losową.	11
1.1.3. Średnia arytmetyczna próbki statystycznej	12
1.1.4. Rozrzut (rozstęp) wyników	12
1.1.5. Wariancja	12
1.1.6. Odchylenie standardowe	13
1.1.7. Względne odchylenie standardowe	13
1.1.8. Współczynnik zmienności.	14
1.1.9. Błąd standardowy	14
1.1.10. Niepewność pomiaru	14
1.1.11. Precyzja	14
1.1.12. Dokładność i poprawność	14
1.1.13. Materiał odniesienia.	15
1.1.14. Pomiar	15
1.2. Rozkład normalny (Gaussa)	16
1.3. Cyfry znaczące.	27
1.4. Reguły zaokrąglania liczb	29
1.5. Wynik pomiaru i jego zapis	30
2. Błędy i niepewność pomiaru.	32
2.1. Błędy pomiarowe	33
2.2. Szacowanie niepewności pomiaru.	35
2.3. Propagacja niepewności	39
2.4. Propagacja niepewności w praktyce laboratoryjnej. Przykłady	45
2.5. Niepewność rozszerzona.	53
3. Testy statystyczne	55
3.1. Testy na wykrycie błędu grubego	55
3.1.1. Test Dixona	56
3.1.2. Test Grubbsa.	58

3.2. Testy istotności.	60
3.2.1. Porównanie wartości średniej próbki z wartością prawdziwą.	60
3.2.2. Porównanie wartości średnich dwóch serii	63
3.2.3. Porównanie wartości parami	66
3.2.4. Testy istotności jedno- i dwustronne	68
3.2.5. Porównanie odchyleń standardowych: test F	70
3.2.6. Podsumowanie	71
3.3. Jednoczynnikowa analiza wariancji (ANOVA)	73
4. Regresja liniowa	82
4.1. Regresja liniowa zwykła.	82
4.2. Krzywa kalibracyjna. Wyznaczanie stężenia analitu w badanej próbce.	86
4.3. Metoda kilkakrotnego dodatku wzorca	90
4.4. Regresja liniowa ważona (Y)	92
4.5. Regresja liniowa ważona (X,Y) z uwzględnieniem niepewności obu zmiennych.	97
4.6. Regresja funkcji liniowej – podsumowanie	111
4.7. Linearyzacja funkcji	114
5. Walidacja metody pomiarowej	118
5.1. Zakres roboczy (analityczny) i charakterystyka krzywej kalibracyjnej	119
5.2. Powtarzalność	122
5.3. Odtwarzalność	125
5.4. Obciążenie	129
5.5. Poprawność	140
5.6. Odporność	140
5.7. Granica wykrywalności i granica oznaczalności	141
5.8. Szacowanie niepewności pomiaru.	143
5.9. Studia przypadków.	143
5.9.1. Paliwa stałe – wyznaczanie parametrów fizykochemicznych.	144
5.9.2. Oznaczanie chemicznego zapotrzebowania tlenu (ChZT) metodą dichromianową w próbkach wodnych.	174
5.9.3. Wagowe oznaczanie włókna surowego w paszach pochodzenia roślinnego	190
6. Karty kontrolne	199
6.1. Karty Shewharta	199
6.2. Karta CuSum.	214
7. e-stat: analiza statystyczna przez internet	216
7.1. Krótka charakterystyka modułów e-stat	217
7.1.1. Testy statystyczne	217
7.1.2. Regresja liniowa.	218
7.1.3. Błąd losowy	219

7.1.4.	Błąd systematyczny	220
7.1.5.	Karty kontrolne	221
7.1.6.	Szacowanie niepewności	221
7.1.7.	Tablice rozkładów statystycznych.	222
7.2.	Walidacja metody pomiarowej oraz konstrukcja budżetu niepewności za pomocą usługi e-stat	222
7.2.1.	Konstrukcja i charakterystyka krzywej kalibracyjnej.	223
7.2.2.	Badanie precyzji w warunkach powtarzalności.	233
7.2.3.	Badanie obciążenia	237
7.2.4.	Szacowanie niepewności	244
8.	Wstęp do chemometrii	251
8.1.	Przygotowanie danych do obróbki chemometrycznej.	252
8.1.1.	Transformacje zmiennych.	252
8.2.	Analiza podobieństwa	253
8.3.	Metoda głównych składowych.	255
8.4.	Optymalizacja – metoda simpleksu	255
8.5.	Rozpoznawanie obrazów	258
8.6.	Sposób pomiaru ilości informacji uzyskanej w procesie analitycznym	260
9.	Tablice	262
	Literatura	266
	Skorowidz.	268

naukowych o różnych profilach działalności badawczej.

Odpowiednie wykonanie statystycznej analizy uzyskanych wyników pomiarowych prowadzi do zwiększenia ilości informacji podawanej bezpośrednio czytelnikowi i w związku z tym podnosi jakość każdego sprawozdania. Jakość wyniku eksperymentalnego zawsze była istotna, ale w ostatnich latach stała się szczególnie ważna, zwłaszcza w chemii analitycznej. Zauwagi i uwagi analityczne nie mogą oczekiwać, że wyniki analiz uzyskane w laboratorium są poprawne oraz wiarygodne, gdyż na ich podstawie zwykle podejmuje się ważne decyzje. Błędne decyzje podjęte na podstawie błędnych lub nieprawidłowo przedstawionych rezultatów badań mogą doprowadzić do strat finansowych w przemyśle chemicznym, nieprawidłowości w wyznaczaniu opłat celnych, niepotrzebnych składek środowiskowych i zagrożeń dla zdrowia ludzi, czy do niepożądanych wyroków w procesach sądowych.

Materiał zawarty w podręczniku powinien być pomocny osobom mniej doświadczonej w zakresie prowadzenia statystycznej analizy wyników pomiarowych. Osobom bardziej doświadczonym wskazuje możliwości w zakresie sterowania jakością badań w rzeczywistej pracy laboratoryjnej lub w technikach chemometrycznych skierowane przystosowane do opracowywania bardzo dużych zbiorów danych eksperymentalnych. Zagadnienia te wychodzą naprzeciw specyficznemu wyzwaniu w naukach eksperymentalnych.