

SADRŽAJ

SPISAK OZNAKA

1. UVOD	1
1.1. Klasične i savremene metode hemijske analize	1
1.2 Pojam hemometrije.....	2
1.3 Primena hemometrije	2
2. GREŠKE U KVANTITATIVNOJ HEMIJSKOJ ANALIZI	5
2.1 Osnovni pojmovi	5
2.2 Izražavanje rezultata	11
2.2.1 Značajne cifre	11
2.2.2 Nula kao značajna cifra	12
2.2.3 Pravila zaokruživanja	13
2.2.4 Značajne cifre u matematičkim operacijama.....	14
2.3 Postupanje sa greškama.....	17
2.4 Greške i planiranje eksperimenta	18
2.5 Pitanja.....	19
3. PRIMENA STATISTIKE NA REZULTATE PONOVLJENIH MERENJA	21
3.1 Mere centralne tendencije.....	21
3.2 Mere rasipanja	22
3.3 Raspodela rezultata ponovljenih merenja.....	24
3.3.1 Normalna raspodela.....	25
3.3.2 Standardizovana normalna raspodela	29
3.3.3 Log-normalna raspodela.....	31
3.3.4 Raspodela sa teškim repovima	32
3.3.5 Ispitivanje tipa raspodele.....	32
3.4 Uzorak	33
3.4.1 Raspodela srednjih vrednosti uzoraka	33
3.5 Interval poverenja.....	35
3.6 Procena grešaka rezultata dobijenih izračunavanjem	41
3.7 Pitanja.....	45

4. STATISTIČKI TESTOVI	47
4.1 Statistički <i>t</i> -testovi.....	50
4.1.1 Poređenje eksperimentalno dobijene srednje vrednosti sa poznatom vrednošću.....	50
4.1.2 Poređenje dve srednje vrednosti eksperimentalno dobijenih rezultata.....	52
4.1.3 Upporedni <i>t</i> -test.....	54
4.2 Jednosmerni i dvosmerni testovi.....	56
4.3 <i>F</i> -test za poređenje standardnih devijacija.....	58
4.4 Grabsov (<i>Grubbs</i>) test.....	60
4.5 Diksonov (<i>Dixon</i>) test.....	61
4.6 Analiza varijanse.....	63
4.6.1 Variranje unutar uzorka.....	65
4.6.2 Variranje između uzoraka.....	66
4.6.3 Primena aritmetike u <i>ANOVA</i> metodi.....	68
4.7 Neparametarski testovi.....	72
4.7.1 <i>Hi</i> -kvadrat test.....	73
4.8 Robusne metode.....	75
4.9 Pitanja.....	76
5. METODE KALIBRACIJE.....	77
5.1 Kalibracioni dijagram.....	78
5.2 Pirsonov koeficijent korelacije.....	81
5.3 Linearna zavisnost <i>y</i> od <i>x</i>	85
5.4 Greške nagiba i odsečka linije regresije.....	87
5.5 Izračunavanje koncentracije i odgovarajuće slučajne greške.....	90
5.6 Granica detekcije i granica kvantifikacije.....	92
5.7 Metoda standardnog dodatka.....	95
5.8 Metoda unutrašnjeg standarda.....	98
5.9 Primena linije regresije za poređenje analitičkih metoda.....	98
5.10 Težinske linije regresije.....	102
5.11 Krivolinijska regresija.....	103
5.12 Odstupanja od regresije.....	105
5.13 Pitanja.....	105
6. EKSPERIMENTALNI DIZAJN I OPTIMIZACIJA.....	107
6.1 Randomizacija.....	109
6.2 Primena analize varijanse.....	111
6.3 Tipovi eksperimentalnog dizajna.....	115
6.4 Metode optimizacije.....	119

6.4.1 Optimizacija jednog faktora	120
6.4.2 Optimizacija dva faktora	121
6.4.3 Optimizacija više faktora.....	122
6.4.4 Prirodne računarske metode	122
6.5 Pitanja.....	125
7. KVALITET ANALITIČKIH MERENJA.....	125
7.1 Uzorkovanje	125
7.1.1 Plan uzorkovanja	127
7.1.2 Kontrolno uzorkovanje.....	128
7.2 Metode za kontrolu kvaliteta	130
7.2.1 Kontrolni dijagrami	131
7.2.2 Utvrđivanje sposobnosti procesa.....	135
7.2.3 Kumulativni kontrolni dijagrami.....	136
7.3 Šeme ispitivanja osposobljenosti.....	137
7.4 Međulaboratorijska ispitivanja	140
7.5 Procena nesigurnosti.....	144
7.5.1 Pristup odozdo na gore	145
7.5.2 Pristup <i>odozgo na dole</i>	147
7.6 Validacija analitičkih metoda	149
7.7 Pitanja.....	153
8. METODE MULTIVARIJACIONE ANALIZE.....	155
8.1 Analiza glavnih komponentata	160
8.2 Faktorska analiza.....	163
8.3 Analiza klastera	165
8.4 Analiza diskriminante.....	168
8.5 Modelovanje razdvojenih grupa.....	170
8.6 Metode regresije	171
8.6.1 Višestruka linearna regresija	172
8.6.2 Regresija glavnih komponentata	172
8.6.3 Parcijalna regresija najmanjih kvadrata.....	172
8.7 Veštačke neuronske mreže	174
8.8 Pitanja.....	176
REČNIK POJMOVA.....	179
LITERATURA.....	195

Tabela P.1 Standardna normalna kumulativna funkcija raspodele, $F(z)$

Tabela P.2 Kritične t -vrednosti za dvosmerni test

Tabela P.3 Kritične F -vrednosti za jednosmerni test ($P = 0,05$)

Tabela P.4 Kritične F -vrednosti za dvosmerni test ($P = 0,05$)

Tabela P.5 Kritične G -vrednosti za dvosmerni test ($P = 0,05$)

Tabela P.6 Kritične Q -vrednosti za dvosmerni test ($P = 0,05$)

Tabela P.7 χ^2 – kritične vrednosti ($P = 0,05$)

Tabela P.8 Kritične C -vrednosti ($P = 0,05$) za $n = 2$