Kalibrace

Menu:	QCExpert	Kalibrace

Modul Kalibrace je určen především pro analytické laboratoře a metrologická pracoviště. Nabízí kalibrační modely pro lineární a nelineární kalibrační závislosti s možností automatické detekce linearity. Díky použité metodě vážené regrese řeší tento modul i kalibrační modely s nekonstantní chybou, což je obvykle nutné zvláště při měření v blízkosti nuly (např. stopová analýza).

Při kalibraci vystupují vždy dvě veličiny. Jednak vlastní měřená veličina *X*, jako koncentrace, viskozita, teplota, jednak odezva měřicího přístroje *Y*, například absorbance, napětí, počet částic, odpor. Úloha kalibrace má vždy dvě části: (a) tvorbu (konstrukci) kalibračního modelu a (b) použití kalibračního modelu. Při tvorbě modelu zaznamenáváme odezvy přístroje: y_1, y_2, y_3,… na známé hodnoty veličiny *X* (obvykle v podobě certifikovaných standardů): x_1, x_2, x_3,… . Závislost *Y* na *X* popíšeme regresním modelem, který co nejlépe vyjadřuje vztah mezi známými x_i a experimentálně stanovenými y_i. Jako regresní model je v QCExpertu™ použita přímka nebo parabola. Regresní metodou je přímá regrese nevážená, nebo vážená. Přímá regrese je ve srovnání s inverzní regresí, kdy se model získá regresí *X* v závislosti na *Y*, přesnější a poskytuje nevychýlené zpětné odhady *X*. Tím je ukončen krok (a). Použití kalibračního modelu spočívá v „co nejlepším“ odhadu neznámé hodnoty *X* na základě jednoho nebo několika opakovaných měření odezvy *Y*. Tento inverzní, nebo zpětný odhad musí být vždy charakterizován intervalem spolehlivosti na uživatelem zadané hladině významnosti α (nejčastěji se volí α = 0.05, tedy 5%). Interval spolehlivosti odhadu *X* je dán šířkou pásu spolehlivosti kalibračního (regresního) modelu. K určení minimálních měřitelných hodnot a úrovně šumu jsou dále vypočítány kalibrační meze (kritická hodnota, meze detekce a meze stanovení).

Data a parametry

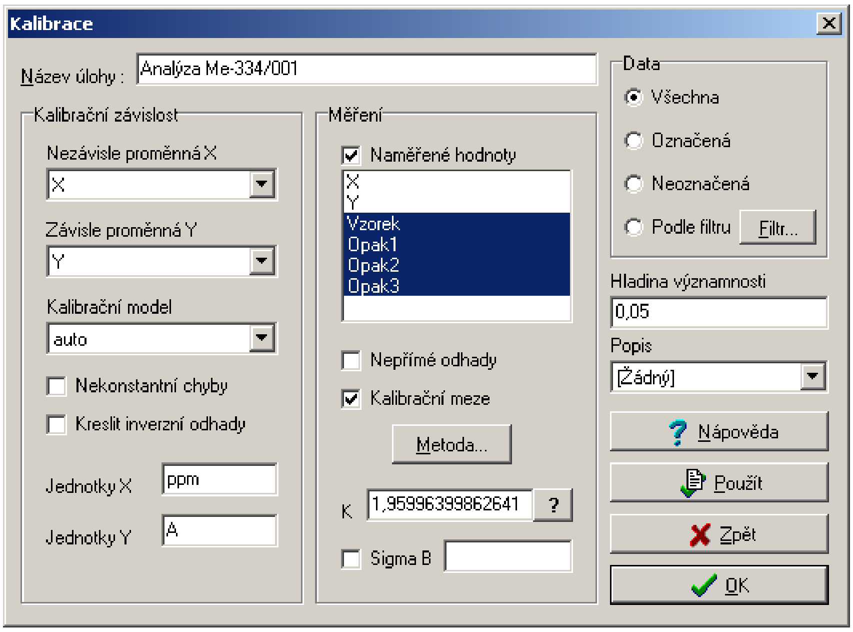
Modul Kalibrace očekává data ve formě dvou sloupců s hodnotami standardů *X* (nezávisle proměnná) a jim odpovídajících naměřených hodnot *Y* (závisle proměnná). Tyto dva sloupce jsou povinné. Chceme-li pomocí kalibračního modelu ještě stanovit *X* pro neznámé vzorky, musíme v dalších sloupcích uvést naměřené *Y*. Naměřené hodnoty *Y* pro neznámé hodnoty *X* se zapíší do jednotlivých řádků dalšího sloupce. Opakovaná měření se zapíší do dalších buněk téhož řádku. Příklad je uveden v následující tabulce. Zde jsme pro konstrukci kalibračního modelu použili 5 kalibračních standardů s hodnotami *X*=1.281, 2.558, 5.430, 7.373 a 11.59. U prvních čtyř standardů jsme měření odezvy *Y* vždy dvakrát opakovali. Takto kalibrovanou metodou jsme analyzovali 4 vzorky označené *Úpa A*, *Úpa B*, *Labe AE*, *Labe AR*. U prvních dvou vzorků jsme analýzu provedli třikrát (*Opak1* až *Opak3*), u dalších dvou pouze jednou. Sloupec *Vzorek* bude sloužit jen jako komentář, pro výpočet se v dialogovém panelu nebude vybírat. Chceme-li pouze zkonstruovat kalibrační model, budou data obsahovat jen první dva sloupce. Další data jsou nepovinná.

Tabulka 1 Příklad dat pro kalibraci

X	Y	Vzorek	Opak1	Opak2	Opak3
1.281	25.53	*Úpa A*	33.69	33.74	33.73
1.281	25.58	*Úpa B*	39.25	39.25	39.27
2.558	51.37	*Labe AE*	50.6		
2.558	51.23	*Labe AR*	57.3		
5.430	106.4				
5.430	108.7				
7.373	148.4				
7.373	146.6				
11.59	233				

Možné nastavení dialogového panelu pro právě popsaný příklad uvádí Obrázek 1.

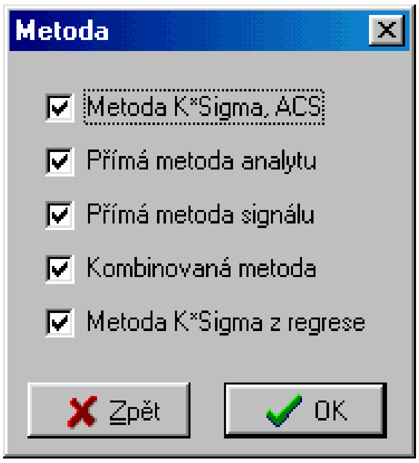
Název úlohy je text převzatý z názvu datového listu, lze jej přepsat a po výpočtu se objeví v záhlaví protokolu. V části *Kalibrační závislost* se specifikuje kalibrační model. Zvolí se nezávisle a závisle proměnná a kalibrační model. Kalibrační model může být lineární (přímka) nebo kvadratický. Kvadratický model dovoluje zakřivení (nelinearitu) kalibrační závislosti. Při volbě *auto* v políčku *Kalibrační model* se provede automatické rozpoznání linearity modelu na základě statistické významnosti kvadratického členu a použije se ten model, který lépe vyhovuje datům. (Je-li kvadratický člen významný, použije se kvadratický model, jinak je použit model lineární). Volba *auto* se doporučuje, nejsme-li si jisti, který model máme použít. Políčko *Nekonstantní chyby* označíme vždy, kdy předpokládáme, že velikost chyby *Y* může záviset na *X*. Tento případ heteroskedasticity je častý například pokrývá-li kalibrační závislost více než jeden řád, tedy například u stopové analýzy. Kalibrační model se pak počítá metodou iterativně vážené regrese (IRWLS), přičemž váhy se určují jako převrácené hodnoty predikovaného rozptylu reziduí pomocí neparametrické regrese. Tento predikovaný rozptyl je zobrazen v grafu absolutních reziduí. Výsledkem je kalibrační model, jehož pás spolehlivosti je užší v oblasti, kde je měření přesnější. Je-li přesnost měření větší pro *X* blízké nule, umožní takový kalibrační model dosáhnout výrazně menší hodnoty meze detekce.



Obrázek 1 Dialogový panel modulu Kalibrace

Políčko *Kreslit inverzní odhady* označte, chcete-li v grafu kalibrační závislosti vyznačit zpětné odhady. Tato volba se nedoporučuje, je-li zpětných odhadů mnoho a je-li pás spolehlivosti kalibračního modelu široký, neboť graf pak může být nepřehledný. Text v políčkách *Jednotky X* a *Jednotky Y* označuje rozměr, resp. jednotky těchto veličin, nemá žádný vliv na výpočet a uvádí se v protokolu. Tato políčka mohou zůstat i prázdná.

V části *Měření* označte položku *Naměřené hodnoty*, chcete-li počítat zpětné odhady neznámých *X* z naměřených *Y*. Po označení vyberte ze seznamu všechny sloupce, v nichž se nacházejí naměřené hodnoty *Y*. Nepřímé (někdy označované jako nelineární) odhady jsou speciální zpětné odhady *X* pro tzv. statistickou kalibraci, velmi nepřesnou, kdy *X* i *Y* jsou náhodné veličiny, data tvoří „mrak“ bodů. Těchto odhadů lze použít i pro nelineární vztah mezi X a Y. Tyto odhady se nepočítají, je-li závislost proměnných těsná. Políčko *Nepřímé odhady* označte tehdy, chcete-li tyto odhady vypočítat. Pro nepřímé odhady se nepočítají intervaly spolehlivosti pro *X*. Při označení položky Kalibrační meze bude ve výsledném protokolu uvedena tabulka s hodnotami kritické úrovně, meze detekce a meze stanovení (kvantifikace). Tyto hodnoty se někdy označují jako kalibrační meze. QCExpert™ nabízí výpočet těchto mezí pěti metodami doporučenými v různých zdrojích. Stiskem tlačítka *Metoda*... lze vybrat (Obrázek 2), které metody se mají použít. Je nutno vybrat alespoň jednu metodu.



Obrázek 2 Výběr metod výpočtu kalibračních mezí

V políčku K se uvede koeficient K, který bude použit při výpočtu kalibračních mezí triviální metodou K*Sigma. Obvykle se volí K=3, avšak vzhledem k tomu, že tento koeficient má význam kvantilu normálního rozdělení, měla by jeho hodnota odpovídat zvolené hladině významnosti α, aby byly takto vypočtené kalibrační meze srovnatelné s ostatními čtyřmi metodami. K tomuto účelu slouží tlačítko „?“, které vypočítá správnou hodnotu K podle zadané hladiny významnosti (pro $\alpha = 0.05$ je $K = 1.96$). Trváme-li na použití hodnoty $K = 3$, je nutno odpovídajícím způsobem změnit hladinu významnosti na $\alpha = 0.0027$, aby byly kalibrační meze vypočítané různými metodami vzájemně srovnatelné. Známe-li směrodatnou odchylku slepého pokusu (blank signal) (tedy odezvy při X=0, bez přítomnosti vzorku) σ_{blank}, označíme políčko *Sigma B* a hodnotu zapíšeme. V části *Data* lze (podobně jako ve všech ostatních modulech) zvolit, zda se mají pro výpočet použít všechny, pouze označené, či pouze neoznačené řádky. Označení řádků se provádí tlačítkem v horní liště. *Hladina významnosti* musí mít hodnotu menší než 0.5 a větší než 0 a používá se při všech testech, výpočtech intervalů spolehlivosti a kalibračních mezí.

Dále uvádíme popis jednotlivých metod výpočtu kalibračních mezí a jejich definice. Protože se jedná především o oblast analytické chemie, používáme zde chemickou terminologii.

Y_C … kritická úroveň Y. Nejmenší hodnota Y rozeznatelná od šumu (hodnota Y, nad níž se vyskytuje šum s pravděpodobností menší než α). Hodnoty menší než Y_C se považují za šum, resp. slepý pokus.

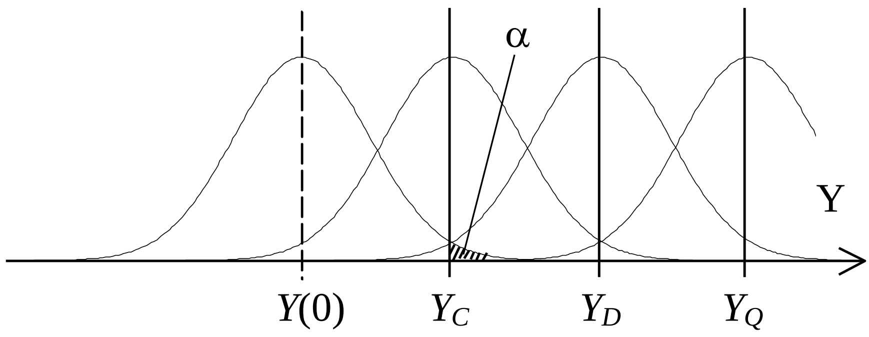
Y_D … mez detekce Y. Hodnota, nad níž můžeme bezpečně (s pravděpodobností $1-\alpha$) prokázat přítomnost vzorku. Pravděpodobnost naměření $y > Y_D$ při slepém pokusu je menší než $1-\alpha$.

Y_Q ... mez kvantifikace Y. Hodnota, nad níž lze stanovit skutečnou hodnotu Y s relativní chybou menší než α. Pod touto mezí není doporučena kvantitativní analýza.

X_C … kritická úroveň X. Hodnota odpovídající Y_C podle kalibračního modelu.

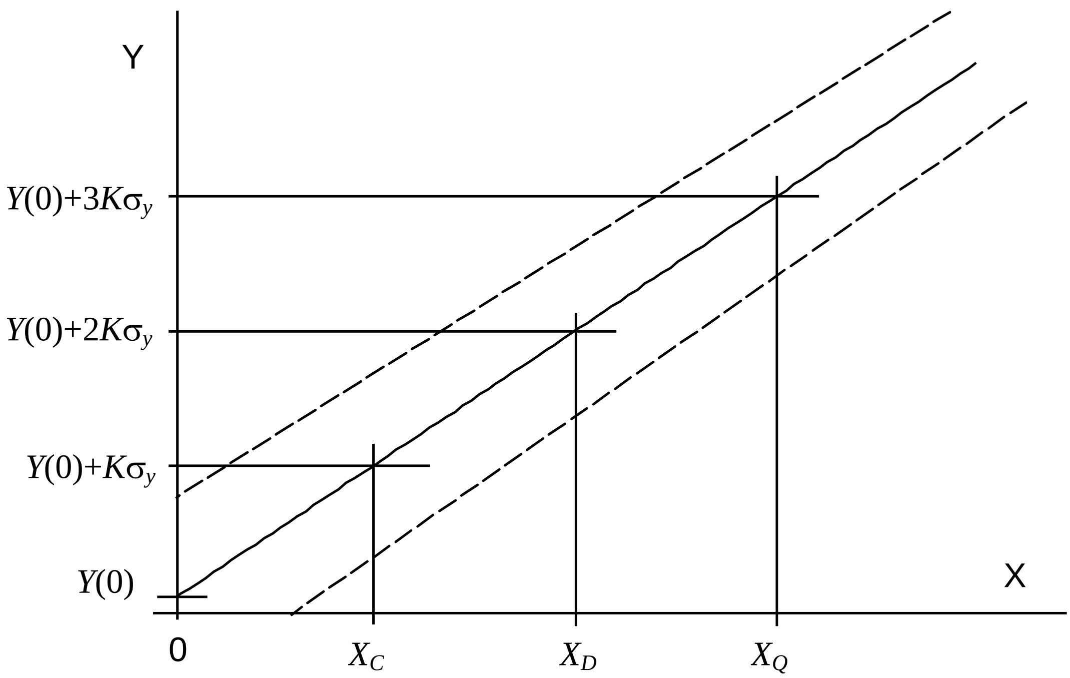
X_D … mez detekce X. Minimální detekovatelná hodnota X (např. koncentrace, hmotnost) danou metodou.

X_Q … mez kvantifikace X. Minimální hodnota X, kterou lze stanovit s relativní chybou menší než α. Danou metodou lze tedy kvantitativně stanovit pouze hodnoty větší než X_Q.



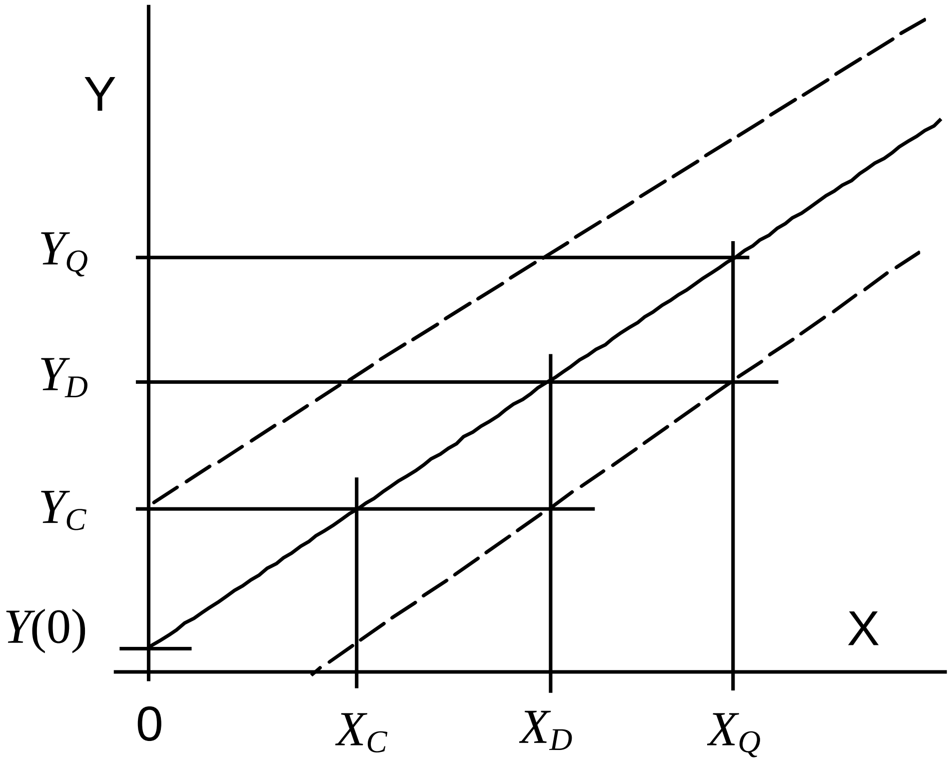
Obrázek 3 Schematické znázornění mezí Y_C, Y_D a Y_Q

Metoda K*Sigma, viz Obrázek 3 a Obrázek 4.
$Y_C = K.\sigma$, $Y_D = 2K.\sigma$, $Y_Q = 3K.\sigma$
Někdy se používá také hodnota $Y_Q = 10/3K.\sigma$, která pro K=3 odpovídá 10-ti násobku σ. Hodnota K se doporučuje volit jako (1−α) - kvantil normálního rozdělení, aby byly kritické meze srovnatelné s ostatními metodami. Kritické hodnoty X tato metoda neposkytuje, informativně je lze získat z kalibrační závislosti. Hodnota σ se získá buď výpočtem směrodatné odchylky slepého pokusu, nebo jako reziduální rozptyl kalibračního modelu.



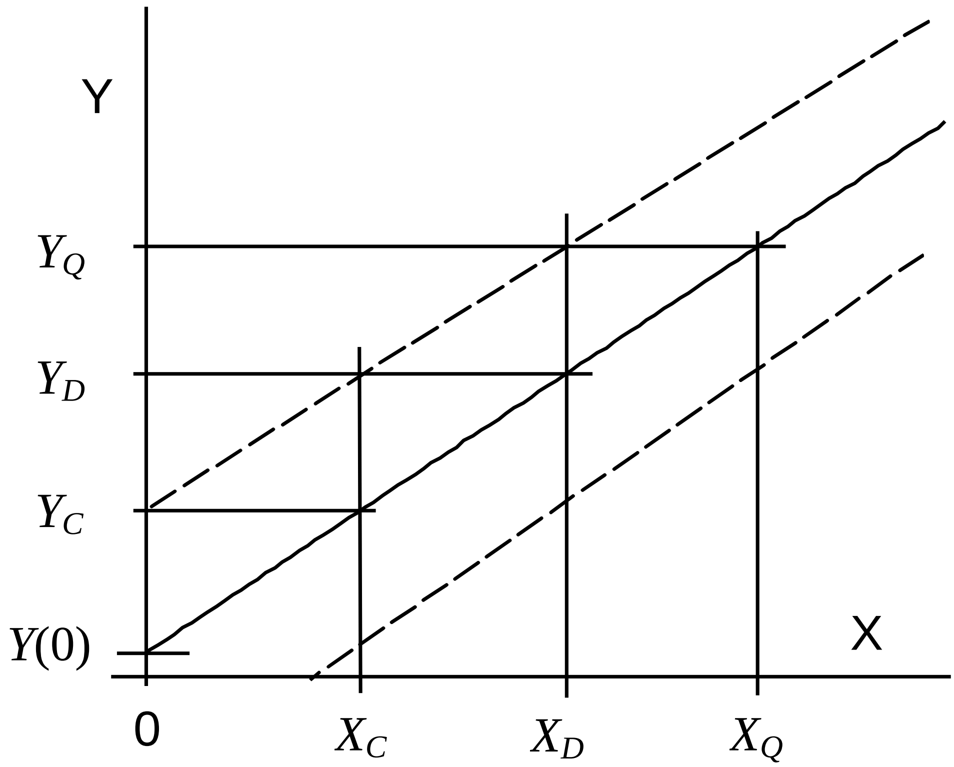
Obrázek **4** Metoda K*Sigma

Následující tři metody využívají plně statistických vlastností kalibračního modelu a umožňují vypočítat korektně i kritické hodnoty pro X, které jsou obvykle nižší (a tedy příznivější) než u metody K*Sigma. U přímé metody analytu (Obrázek 5) se využívá intervalů spolehlivosti zpětných odhadů X.



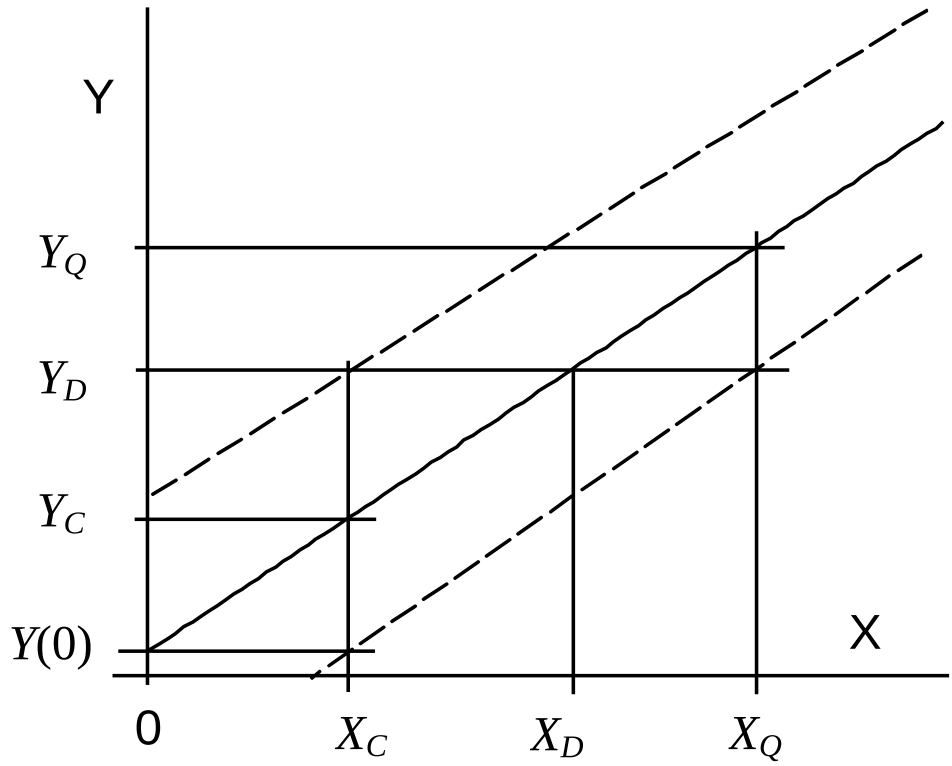
Obrázek 5 Přímá metoda analytu

U přímé metody signálu se využívá intervalů spolehlivosti odhadů *Y*, Obrázek 6.



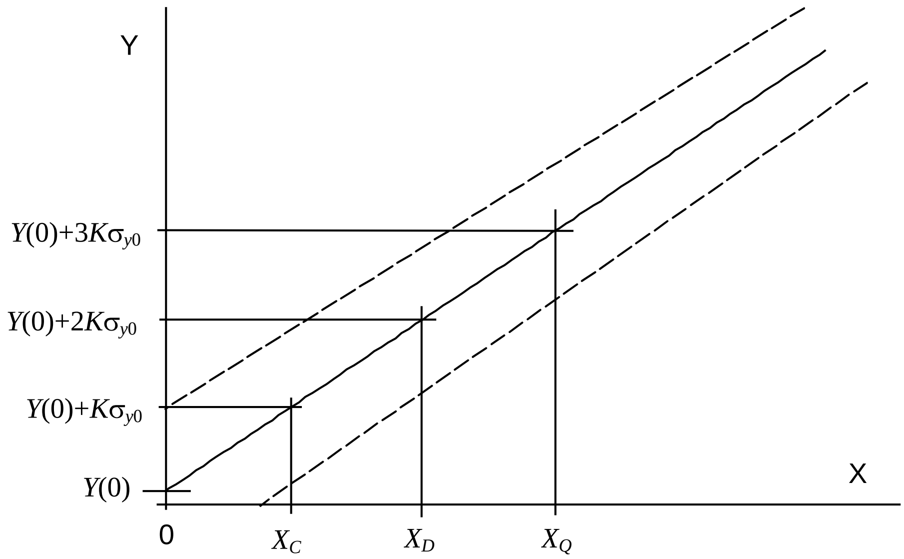
Obrázek 6 Přímá metoda signálu

U kombinované metody podle Ebela a Kamma se používá kombinace předešlých dvou postupů, Obrázek 7.



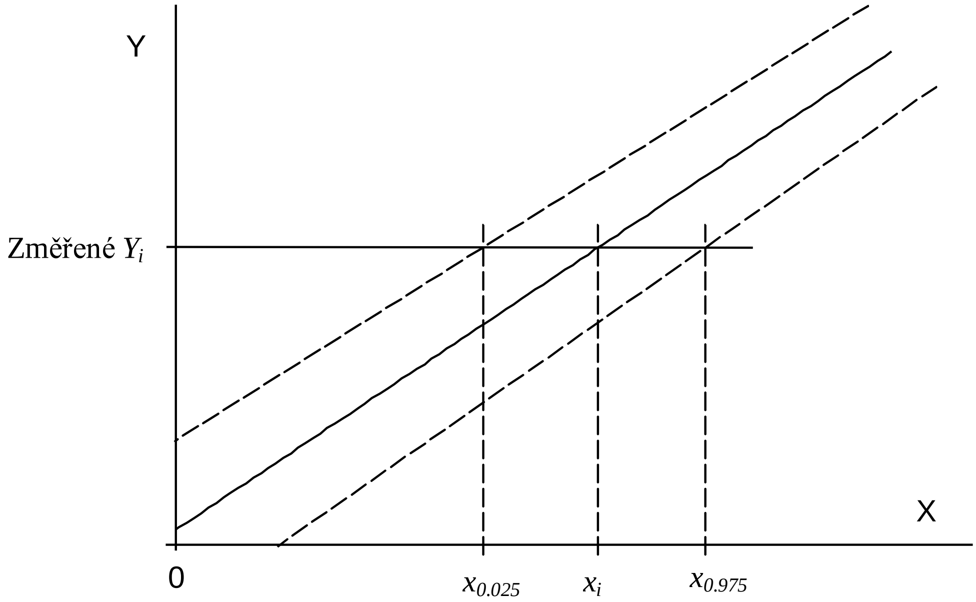
Obrázek 7 Kombinovaná metoda Ebel, Kamm

Poslední metoda *K*Sigma z regrese* je stejná jako první metoda *K*Sigma* s tím rozdílem, že jako $K\sigma$ se zde bere polovina konfidenčního intervalu predikce pro x=0, tedy pološířka konfidenčního pásu regresního modelu v bodě x=0. při dané hladině významnosti.

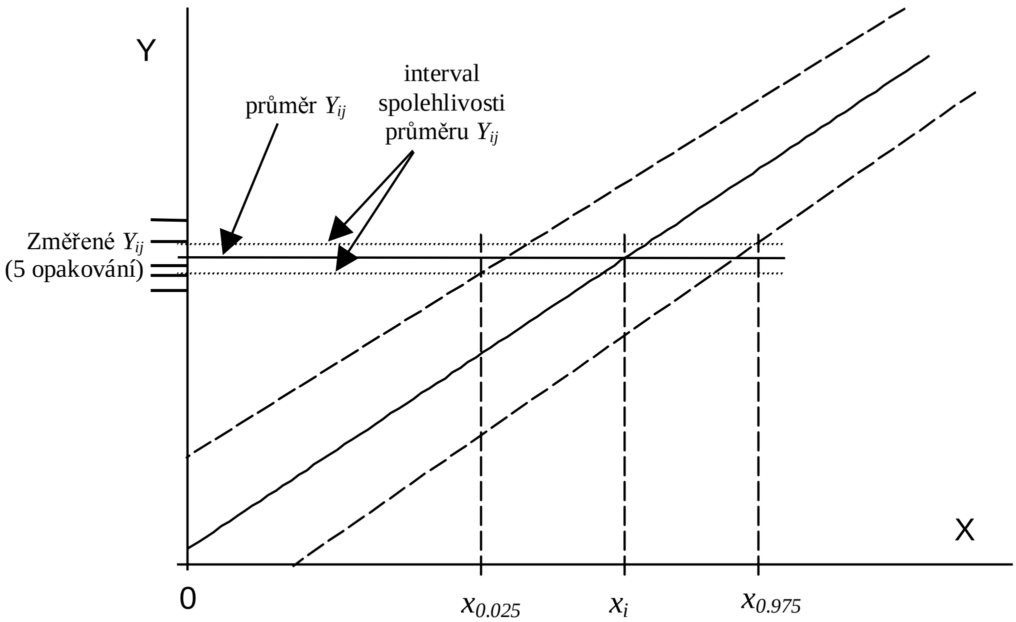


Obrázek 8 Metoda K*sigma z regrese

Zpětný odhad. Tato veličina je hlavním výsledkem a smyslem kalibrace. Zpětné odhady jsou hodnoty X neznámého vzorku vypočítané z naměřené odezvy Y pomocí zvoleného kalibračního modelu. Protože se jedná pouze o odhad skutečné hodnoty, nelze tuto hodnotu vyjádřit jinak, než intervalem. Ke konstrukci zpětného odhadu se využívá intervalu spolehlivosti kalibračního modelu, interval zpětného odhadu je jeho 95% intervalem spolehlivosti. Příklad konstrukce zpětného odhadu pro jednu změřenou hodnotu znázorňuje Obrázek 9. Máme-li informaci o rozptylu měření Y_i pro daný vzorek, například pomocí opakovaného měření Y_{ij}, jsme schopni zkonstruovat interval spolehlivosti Y_i a získáme realističtější (i když širší, pesimističtější) interval spolehlivosti zpětného odhadu X_i, v němž se projeví jak variabilita kalibrační závislosti, tak variabilita aktuálního měření Y pro konkrétní vzorek, viz Obrázek 10. Proto je důležité mít k dispozici opakované měření, je-li to možné. Výsledkem stanovení je pak interval ($x_{0.025}$, $x_{0.975}$), s případným uvedením odhadu x_i. ***Poznámka:*** interval spolehlivosti obecně *není* symetrický kolem x_i.



Obrázek 9 Zpětný odhad pro jediné měření



Obrázek 10 Zpětný odhad pro opakované měření

Validace nové metody. Modul Kalibrace lze využít pro validaci nové metody porovnáním výsledků dvou metod. Na místo X zadáme výsledky původní ověřené, či certifikované metody pro jistou pevně zvolenou sadu vzorků pokrývajících dostatečně celý interval hodnot X, pro které chceme novou metodu validovat. Na místo Y zadáme hodnoty získané novou metodou, kterou chceme validovat na přesně stejných vzorcích (při zachování počtu a pořadí!). Při výpočtu se použije automatický výběr kalibračního modelu „*auto*". Nová metoda je validována, vyjde-li *lineární* model, směrnice je *jednotková* a absolutní člen je statisticky *nevýznamný*. Příslušný test směrnice a absolutního členu najdeme v protokolu v odstavci *Významnost absolutního členu* a *Validace směrnice*. Alternativně lze použít pro validaci metody modul *Porovnání dvou výběrů – Párové porovnání*.

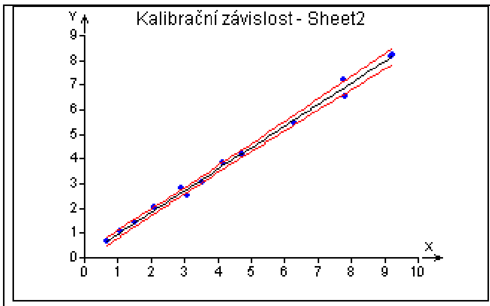
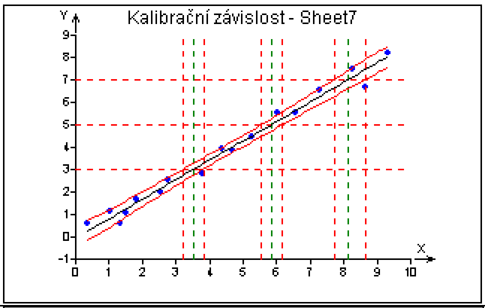
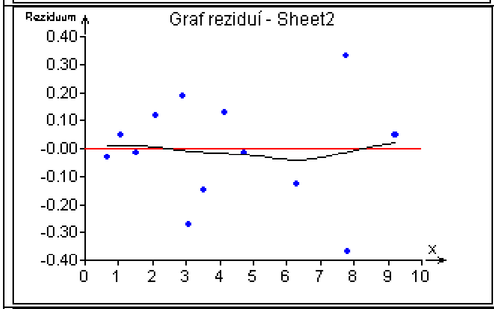
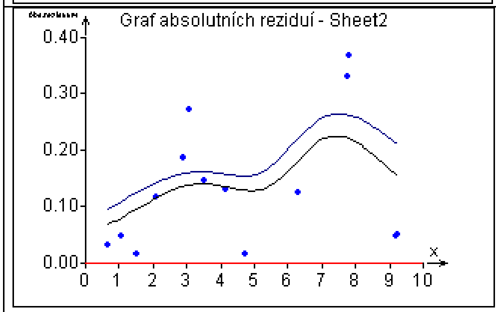
Protokol

Název úlohy	Název úlohy převzatý z dialogového panelu.
Počet dat	*n*, počet platných dvojic *X*,*Y* použitý pro tvorbu kalibračního modelu.
Hladina významnosti	Zadaná hodnota hladiny významnosti α.
Volba kalibračního modelu	Způsob volby kalibračního modelu (manuální nebo automatická).
Použitý kalibrační model	Použitý typ kalibračního modelu (lineární nebo kvadratický). Počet stupňů volnosti ν kalibračního modelu je roven počtu dat zmenšenému o počet parametrů, tedy pro lineární model je $\nu = n - 2$, pro kvadratický model je $\nu = n - 3$.
Vhodnost použitého modelu	Test linearity kalibračního modelu vzhledem k modelu skutečně použitému. Použijeme-li (manuálně) lineární model pro data s významnou nelinearitou, nebo naopak použijeme kvadratická model pro lineární data, dopouštíme se chyby, která se projeví zvětšením chyby stanovení. V takovém případě je uvedeno "*Nevyhovuje*", jinak je uvedeno "*Vyhovuje*". V případě automatické volby modelu je výsledek vždy "*Vyhovuje*".
Použita vážená regrese	Informace (*Ano* nebo *Ne*), zda byla použita metoda vážené regrese s předpokladem nekonstantní chyby měření.
Parametry kalibračního modelu	Informace o parametrech kalibračního modelu. Je-li model lineární, budou uvedeny absolutní člen "Abs" (průsečík s osou y) a lineární člen X (směrnice). Je-li model kvadratický, bude navíc uveden ještě kvadratický člen X^2, lineární člen v tomto případě nemá význam směrnice.
Parametr	Název parametru: "Abs" = absolutní člen, X=lineární člen, X^2=kvadratický člen
Odhad	Odhad parametru.
Sm. odchylka	Odhad směrodatné odchylky parametru.
Spodní mez	Spodní mez intervalu spolehlivosti parametru na hladině významnosti α.
Horní mez	Horní mez intervalu spolehlivosti parametru na hladině významnosti α.
Významnost absolutního členu	Test hypotézy, že absolutní člen je nulový. Tento test lze použít rovněž při validaci nové metody (resp. porovnání výsledků dvou metod).
Hodnota	Hodnota absolutního členu opsaná z odstavce *Parametry kalibračního modelu*.
Závěr	Závěr testu významnosti. Je-absolutní člen *Nevýznamný*, můžeme říci, že kalibrační závislost prochází počátkem souřadnic (přesněji: nelze to vyloučit na hladině významnosti α). Ani v tomto případě však nevylučujeme absolutní člen z kalibračního modelu (v modulu *Kalibrace* to ani není možné, na rozdíl od modulu *Lineární regrese*), neboť by to vedlo k nežádoucí deformaci intervalu spolehlivosti predikce pro x=0 a k nemožnosti vypočítat kalibrační meze. V případě, že absolutní člen je *Významný*, lze hypotézu o jeho nulové hodnotě zamítnout a kalibrační závislost neprochází počátkem, tedy $Y(X=0) \neq 0$.
Validace směrnice	Tento test lze použít při validaci nové metody (resp. porovnání výsledků dvou metod).
Hodnota	Hodnota lineárního členu (v případě lineárního modelu jde skutečně o směrnici) opsaná z odstavce Odhady *Parametry kalibračního modelu*.
Směrnice=1	Závěr testu jednotkovosti lineárního členu (*Ano* nebo *Ne*). Je- li model

	lineární, je lineární člen číselně roven směrnici závislosti.
Citlivost metody	Citlivost metody je definována jako změna odezvy *Y* při jednotkové změně *X*. V případě lineárního modelu je citlivost totožná s hodnotou směrnice, u nelineárního modelu (kvadratického) je citlivost dána derivací kalibrační závislosti, která se mění s X. Proto se pro kvadratický model uvádí citlivost ve čtyřech významných bodech: v bodě $x = 0$, na začátku měřených dat **min**(x), uprostřed měřených dat, (**min**(x) − **max**(x))/2, a na konci, **max**(x).
Zvolený faktor K	Zvolený kvantil pro výpočet kalibračních mezí metodou K*sigma.
Zadaná sm.odch. slepého signálu	Hodnota z dialogového panelu jako Sigma B (σ_{blank}), byla-li zadána.
Vypočítaná sm.odch. slepého signálu	Není-li směrodatná odchylka zadaná v dialogovém panelu, použije se místo ní směrodatná odchylka reziduí. Tato hodnota se použije k výpočtu kalibračních mezí metodou K*Sigma. Směrodatní odchylka reziduí bývá většinou větší než σ_{blank}, metoda K*sigma pak nedává spolehlivé výsledky.
Kalibrační meze	Kritická hodnota, mez (limita) detekce a mez kvantifikace pro *Y* i pro *X* vypočítané metodami K*Sigma, přímou metodou analytu, přímou metodou signálu, kombinovanou metodou Ebel-Kamm a metodou K*Sigma z regrese.
Yc, Yd, Yq, Xc, Xd, Xq, Yq(10sigma), Xq(10sigma)	Yc = Kritická hodnota pro *Y*, Yd = mez (limita) detekce pro *Y*, Yq = mez kvantifikace pro *Y*. Xc = Kritická hodnota pro *X*, Xd = mez (limita) detekce pro *X*, Xq = mez kvantifikace pro *X*. Yq(10sigma) a Xq(10sigma) jsou alternativní hodnoty meze kvantifikace, které pro *K*=3 odpovídají 10σ, kdežto Xq a Yq odpovídají při *K*=3 9σ.
Kalibrační tabulka	Tento odstavec je hlavním výsledkem a smyslem kalibrace. Zpětné odhady jsou hodnoty *X* neznámého vzorku vypočítané z naměřené odezvy *Y* pomocí zvoleného kalibračního modelu. Nebyly-li ve vstupních datech zadány naměřené hodnoty, nebo nebylo-li vybráno políčko *Naměřené hodnoty*, tento odstavec není uveden.
Číslo vzorku	Pořadové číslo.
Zpětný odhad	Zpětný odhad *X*.
Spodní mez	Spodní mez 100(1−α)% intervalu spolehlivosti zpětného odhadu.
Horní mez	Horní mez 100(1−α)% intervalu spolehlivosti zpětného odhadu.
Nepřímý odhad	Zpětný odhad pro statistickou kalibraci Tyto odhady se počítají pouze bylo-li vybráno políčko *Nepřímý odhad* a je-li rozptyl Y dostatečně velký. Jinak jsou ve sloupci uvedeny nuly.
Naměřené hodnoty	Zadané naměřené hodnoty neznámého vzorku, byly-li zadány. Zkratka NA (not available) je použita pro chybějící data.
Analýza reziduí	Analýza pro konstrukci modelu.
Reziduální součet čtverců	Součet čtverců reziduí.
Půměrné absolutní reziduum	Průměr absolutních hodnot reziduí.
Korelační koeficient	Odhad korelačního koeficientu. ***Poznámka:*** Korelační koeficient *nelze* použít k posouzení který ze dvou modelů (lineární, kvadratický) je lepší pro daná data!
Číslo měření	Pořadové číslo dvojice *X,Y*.

Naměřené X	Hodnota standardu ze vstupních dat.
Naměřené Y	Hodnota odezvy *Y* ze vstupních dat.
Vypočítané Y	Vypočítaná hodnota *Y* pro dané *X* z kalibračního modelu.
Reziduum	Rozdíl (Naměřené Y – Vypočítané Y)
Váha	Váha daného měření. Nebylo-li vybráno políčko *Nekonstantní chyby*, obsahuje tento sloupec jedničky.

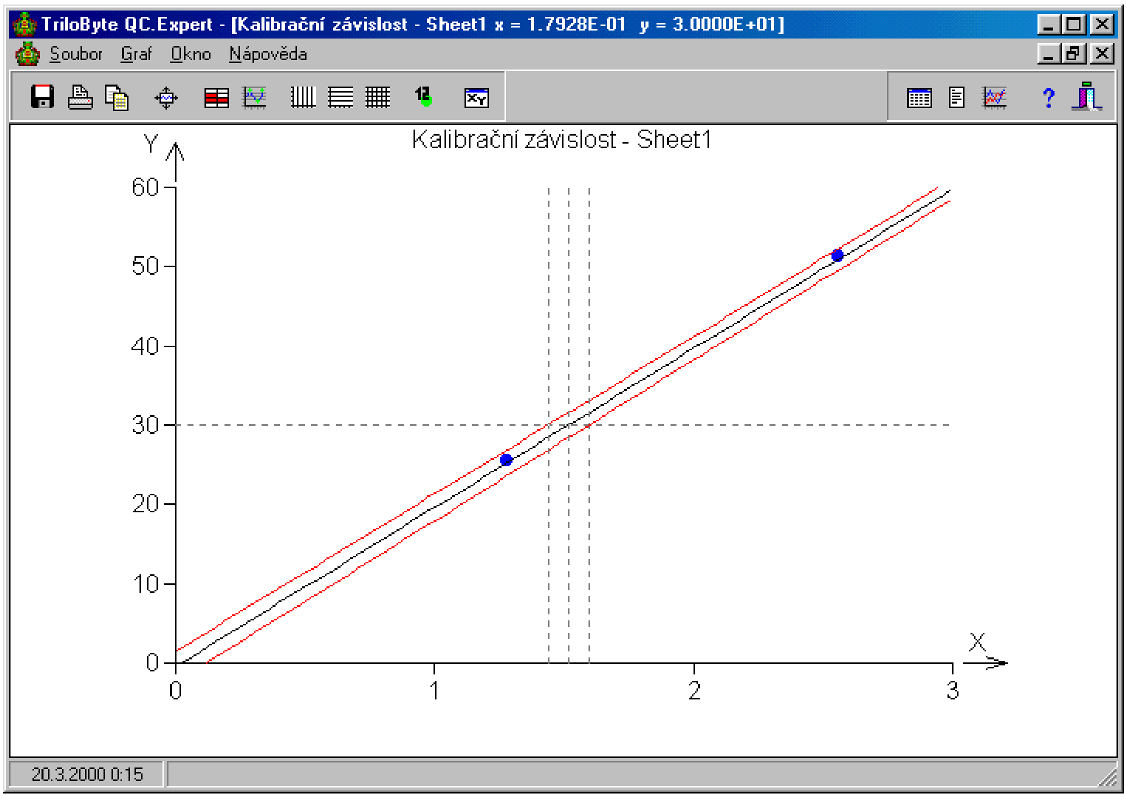
Grafy

 	Graf kalibrační závislosti s vyznčeným pásem spolehlivosti (plná čára červená). Jsou-li zadány naměřené hodnoty neznámého vzorku a vybráno políčko *Kreslit inverzní odhady*, znázorní se tyto odhady v grafu. Vodorovné přerušované čáry představují naměření hodnoty Y (v případě opakovného měření i s intervalem spolehlivosti průměru), svislé přerušované čáry představují zpětné odhady včetně intervalu spolehlivosti. Dvojitým kliknutím na graf se otevře dynamické okno, kde lze interaktivně pracovat s kalibračním modelem, viz níže.
	Graf reziduí e_i proložený neparametrickým jádrovým modelem K(e_i) (černá křivka). Výrazné zakřivení může svědčit o nelinearitě kalibrační závislosti, kterou se nepodařilo postihnout použitým modelem, případně o vybočujících bodech.
	Graf absolutních reziduí $\lvert e_i \rvert$ s neparametrickým jádrovým proložením (2 přerušované křivky), které odhadují průběh směrodatné odchylky $\sigma(x)$ v závislosti na *x*. Horní (modrá) křivka je odmocninou z proložení čtverců odchylek, $\sqrt{K(e_i^2)}$, spodní černá křivka K($\lvert e_i \rvert$) je přímým proložením absolutních odchylek (reziduí). Horní křivka je lepším odhadem $\sigma(x)$ než spodní (černá) křivka, která je prostým proložením vzhledem k tomu, že $\sigma = \sqrt{\frac{1}{n}\sum \sigma_i^2}$

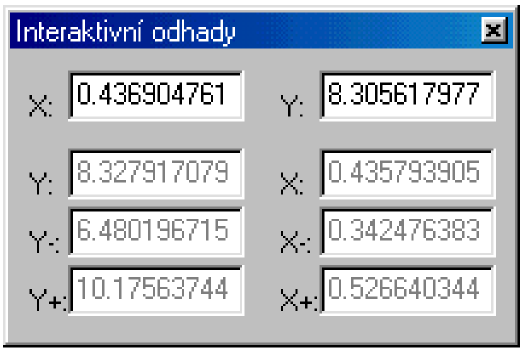
Interaktivní graf kalibrační závislosti

Dvojitým kliknutím na graf kalibrační závislosti se otevře okno s interaktivním grafem, viz Obrázek 11. V tomto okně lze přímo sledovat a odečítat přímé nebo zpětné odhady z kalibračního modelu při zachování všech funkcí interaktivního grafu. Při pohybu myší *nad* kalibrační křivkou se zobrazuje souřadnice *Y* (vodorovná přímka) a jí odpovídající zpětný odhad *X* s intervalem spolehlivosti, jak znázorňuje Obrázek 9. Při pohybu myší *pod* kalibračním modelem se zobrazuje *x*-ová souřadnice a jí odpovídající přímý odhad střední hodnoty *Y* včetně intervalu spolehlivosti. Při zvětšení (zoom-in) vybrané části grafu lze odečítat hodnoty přímo z grafu s velkou přesností. K přesnému nalezení přímých nebo zpětných odhadů však slouží spíše “kalibrační kalkulačka”, kterou se spustí tlačítkem *Interaktivní odhady*, .

V okně *Interaktivní odhady* je 8 políček. V horním řádku jsou hodnoty *X* a *Y* odpovídající aktuální poloze ukazatele myši v interaktivním grafu. Tyto hodnoty lze editovat. Pod políčkem *X* je odpovídající odhad *Y* se svým intervalem spolehlivosti, pod políčkem *Y* je naopak odpovídající odhad *X* se svým intervalem spolehlivosti. Po kliknutí na příslušné políčko X nebo Y lze zadat z klávesnice hodnotu *X* nebo *Y* a po stisku <Enter> se vypočítají příslušné odhady pro tuto hodnotu. Chceme-li tedy například vypočítat odhad *X* pro naměřenou hodnotu $Y = 25.7$, klineme na políčko *Y* v okně *Interaktivní odhady*, vymažeme jeho obsah, napíšeme 25.7 a stiskneme <Enter>. Pod hodnotou *Y* se objeví vypočítané hodnoty zpětného odhadu *X*, jeho spodní (*X*−) a horní (*X*+) meze, které představují $100(1-\alpha)\%$ interval spolehlivosti zpětného odhadu.



Obrázek 11 Okno s interaktivním grafem kalibrační závislosti



Obrázek 12 Interaktivní odhady