



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Projekt „R”

Biblioteka chemCal

mgr inż. Maciej Słoboda



Instalacja pakietu chemCal i jego autor

Autor biblioteki:

Johannes Ranke
jranke@uni-bremen.de

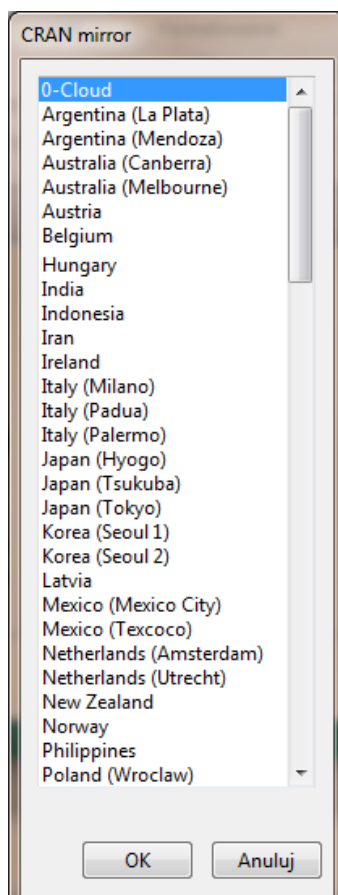




AGH

Instalacja pakietu chemCal i jego autor

```
install.packages("chemCal", dependencies = TRUE)
```



A następnie:
library(chemCal)

Sprawdzanie dostępnych baz
danych: **data()**



Funkcje chemCal: calplot

```
calplot(object, xlim = c("auto", "auto"), ylim = c("auto",  
"auto"), xlab = "Concentration", ylab = "Response",  
alpha=0.05, varfunc = NULL)
```

Parametry:

object – jednowymiarowy model klasy lm lub rlm z formułą
 $y \sim x$ lub $y \sim x - 1$

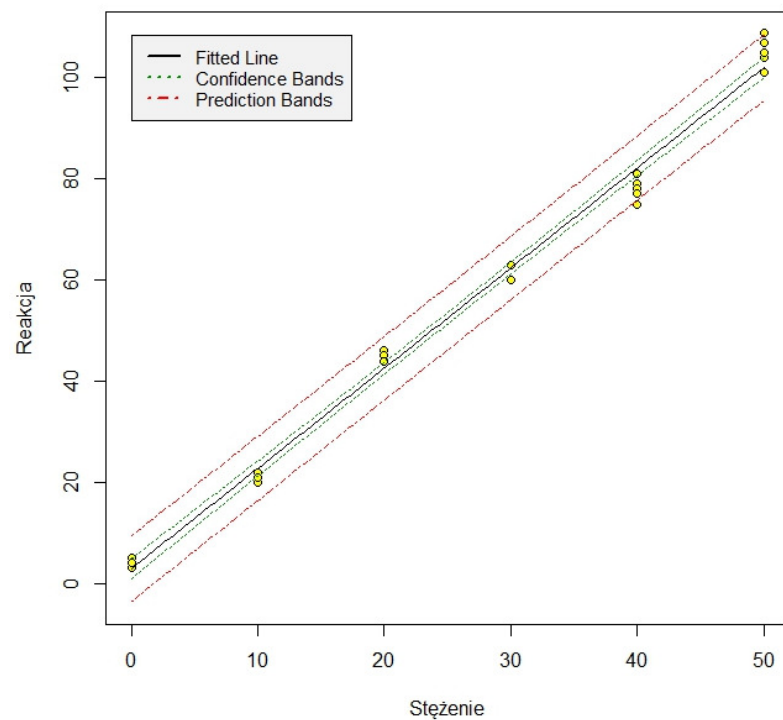
xlim i ylim – granice osi x i y

xlab i ylab – etykiety osi x i y

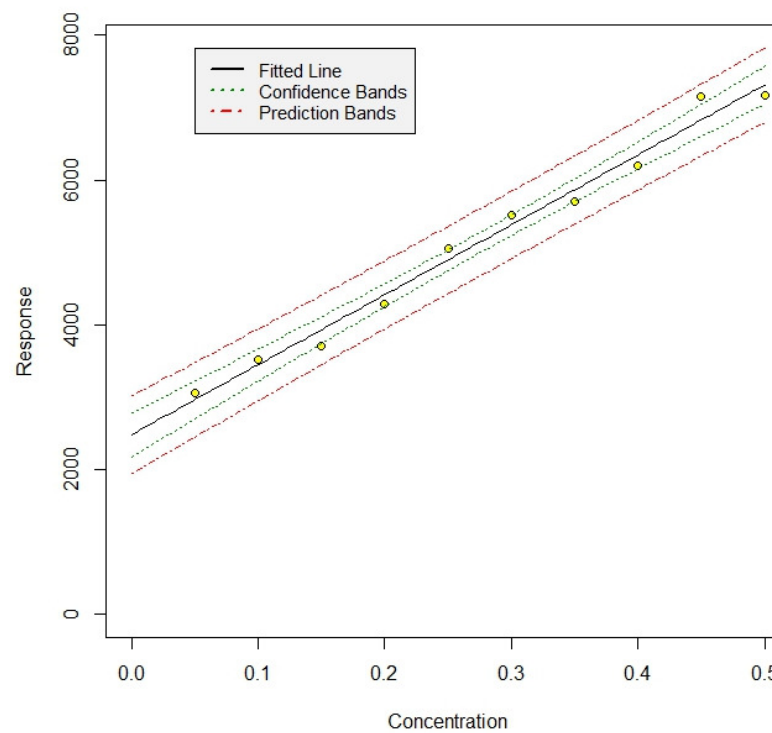
alpha – przedziały ufności

Varfunc – funkcja wariacji dla generowania wartości
wagowych w modelu

Dodane etykiety



Wartości domyślne





Funkcje chemCal: inverse.predict

`inverse.predict(object, newdata, ..., ws, alpha=0.05, var.s = "auto")`

`object` - jednowymiarowy model klasy `lm` lub `rlm` z formułą $y \sim x$ lub $y \sim x - 1$

`newdata` – wektor obserwowanej wartości y

`ws` – waga próbki

`alpha` - Poziom tolerancji błędu dla przedziału ufności

`var.s` - Szacowana wariancja pomiarów próbek.



Funkcje chemCal: inverse.predict

```
> (prediction <- inverse.predict(m, 3500, alpha = 0.01))
```

```
$Prediction
```

```
[1] 0.1054792
```

```
$`Standard Error`
```

```
[1] 0.02215619
```

```
$Confidence
```

```
[1] 0.07434261
```

```
$`Confidence Limits`
```

```
[1] 0.03113656 0.17982178
```



Funkcje chemCal: lod

Szacowanie granicy wykrywalności:

```
lod(object, ..., alpha = 0.05, beta = 0.05, method =  
"default")
```

alpha – tolerancja błędu dla wartości granicznej

beta - tolerancja błędu dla granicy wykrywalności

method – metoda wyznaczania

```
> lod(m, alpha = 0.01, beta = 0.5)
```

```
$x
```

```
$y
```

```
[1] 0.0698127
```

```
3155.393
```




Funkcje chemCal: loq

```
loq(object, ..., alpha = 0.05, k = 3, n = 1,  
     w.loq = "auto", var.loq = "auto")
```

k - odwrotność wartości błędu względnego

n - liczba powtórzeń pomiarów dla których LOQ
powinno być określone

w.loq - waga, która powinna być przypisana do LOQ

var.loq - przybliżona wariancja w LOQ

```
> loq(m)
```

```
$x
```

```
[1] 0.1493462
```

```
$y
```

```
3923.84
```



Koniec