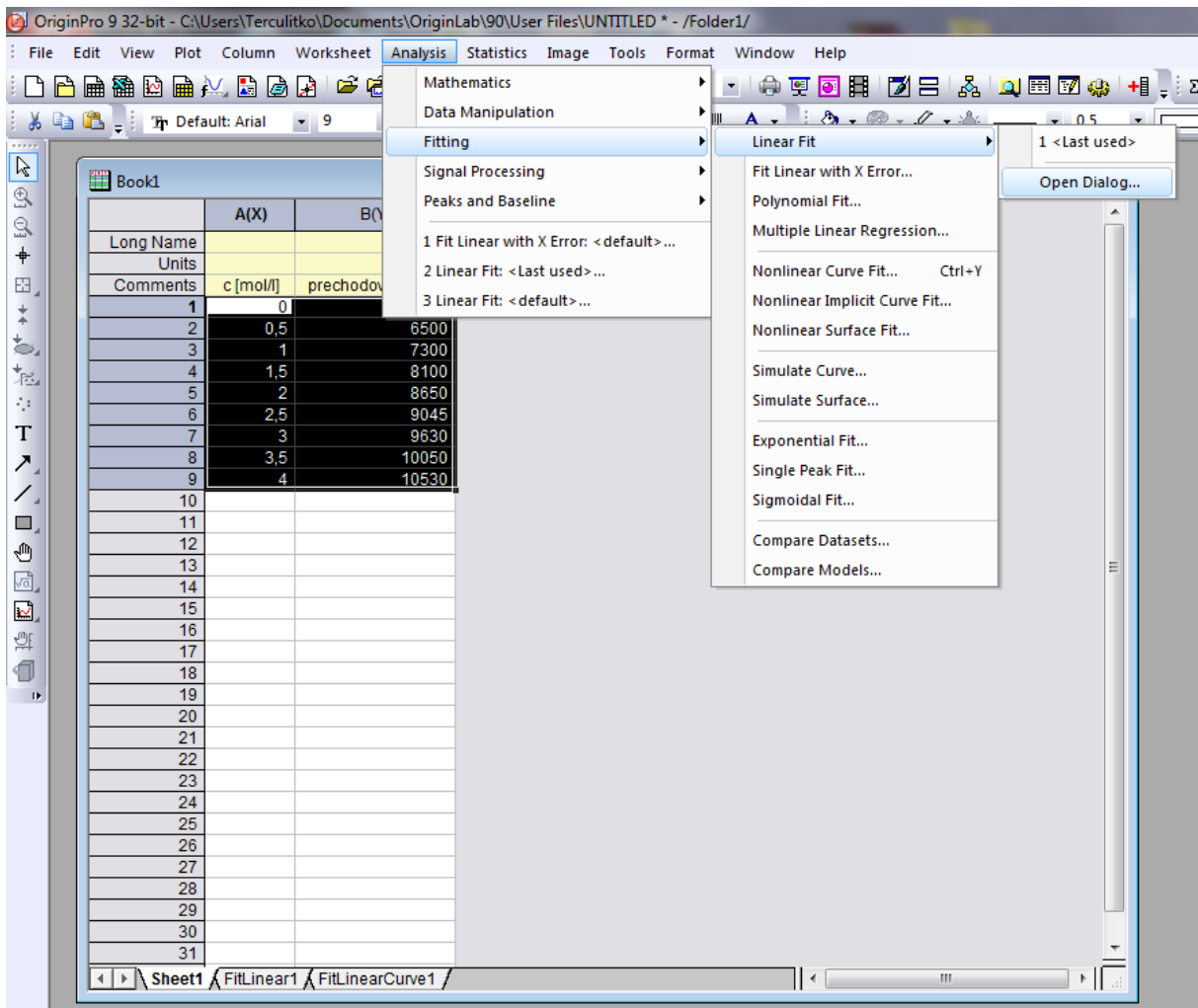
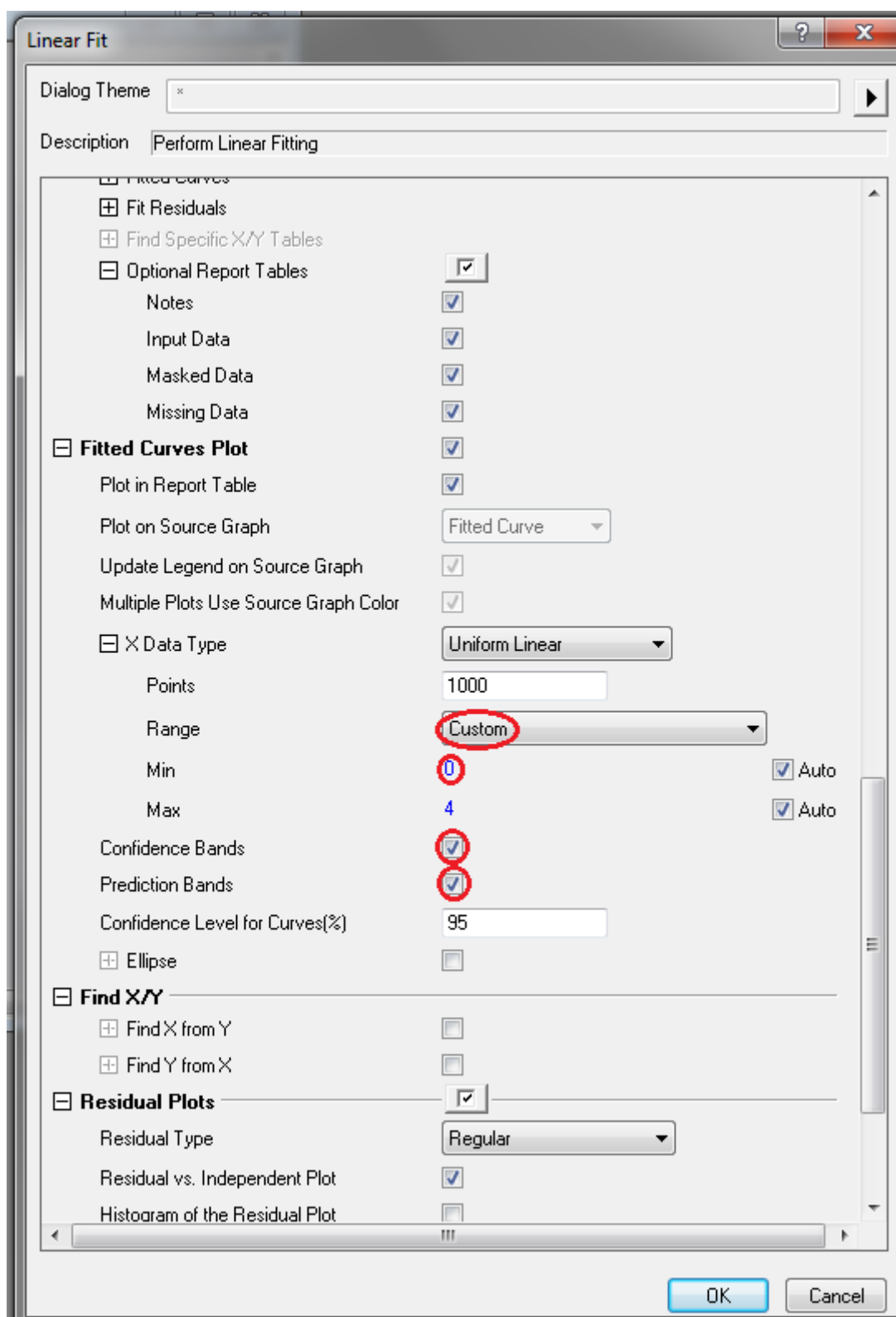


Do sloupečku A(X) se napíše hodnoty , které mají být vyneseny na ose x (např. koncentrace). Do sloupečku B(Y) se napíše hodnoty, které mají být vyneseny na ose y (např. přechodový čas). (Origin je kompatibilní s excelem, hodnoty tedy lze nakopírovat z excelovského souboru).

Hodnoty, ze kterých má být vytvořen graf, označíme a pokračujeme → Analysis → Fitting → Linear Fit (očekáváme lineární závislost, ale pásy se vytvoří i pro nelineární závislosti) → Open Dialog...



V nově otevřeném okně „Linear Fit“ → Fitted Curves plot → zaklikneme Confidence bands (pásy spolehlivosti) a Prediction bands. Škálu “Range” zvolíme Custom (běžnou) a minimální hodnotu nastavíme na 0 (v případě, že chceme bod [0,0] – to je potřeba k vytvoření horního pásu až k průsečíku s osou y). Poté dáme OK.



V pracovním sešitu „BOOK 1“ se nám vytvoří dva nové listy – FitLinear1 a FitLinearCurve1.

Linear Fit (11.3.2014 13:19:19)

Notes

Input Data

Masked Data - Values Excluded from Computations

Bad Data (missing values) -- Values that are invalid and thus not used in computations

Parameters

		Value	Standard Error
B	Intercept	3864,44444	1142,71069
	Slope	1945,83333	480,03451

Statistics

	B
Number of Points	9
Degrees of Freedom	7
Residual Sum of Squares	2,41955E7
Pearson's r	0,83741
Adj. R-Square	0,65857

Summary

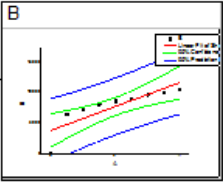
	Intercept		Slope		Statistics
B	Value	Standard Error	Value	Standard Error	Adj. R-Square
B	3864,44444	1142,71069	1945,83333	480,03451	0,65857

ANOVA

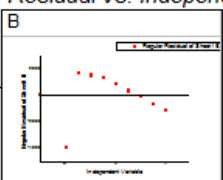
		DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Prob>F
B	Model	1	5,6794E7	5,6794E7	16,43109	0,00485
	Error	7	2,41955E7	3,4565E6		
	Total	8	8,09895E7			

At the 0.05 level, the slope is significantly different from zero.

Fitted Curves Plot



Residual vs. Independent Plot



Sheet1 | FitLinear1 | FitLinearCurve1

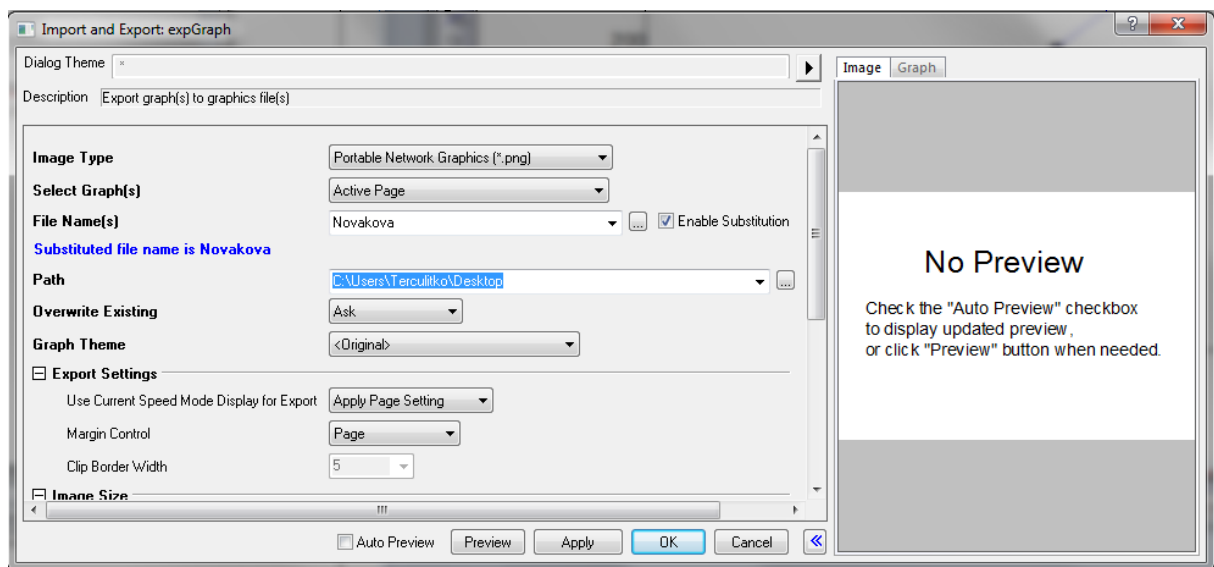
V listu „FitLinear1“ v horní tabulce jsou napsány hodnoty úseku (Intercept) a směrnice (slope) kalibrační přímky. Pokud 2x kliknete na graf „Fitted Curves plot“, graf se zvětší na celé okno a lze ho dále upravovat (popsat osy, změnit legendu...)

Pokud chceme graf exportovat, tak postupujeme následovně:

File → Export Graphs → Open Dialog...

V novém okně je nutné zvolit **typ obrázku** (jpg, png...), do pole **File Name** napište jméno, do pole **Path** zvolte, kam se bude exportovat obrázek (např. Plocha – desktop). **OK**

Pokud nemáte Origin na svém počítači a chcete graf dále upravovat, zkopírujte si celou tabulku níže. Jsou tam ve sloupcích B, A diskrétní hodnoty hranice predikčních pásů, které si pak můžete přidat do grafu v excelu jako nové řady.



Pokud otevřete list „FitLinearCurve1“, vidíte souřadnice bodů lineární závislosti i jednotlivých pásů.

Limit detekce lze odečíst následujícím způsobem:

Long Name	A1(X1)	A2(Y1)	A3(Y1)	A4(Y1)	A5(Y1)	A6(Y1)	A7(X2)	A8(Y2)
Units	Independent Variable	Linear Fit of Sheet1 B	95% Confidence Band of B	95% Confidence Band of B	95% Prediction Band of B	95% Prediction Band of B	Independent Variable	Regular Residual of Sheet1 B
Comments	C				B	A		
Parameters	Fitted Curves Plot	Lower Confidence Limit	Upper Confidence Limit	Lower Prediction Limit	Upper Prediction Limit			
1	0	3864.44444	1162.36303	6566.52586	-1295.79453	9024.68342	0	-3864.44444
2	0.004	3872.23557	1173.97155	6570.49959	-1286.00551	9030.47665	0.5	1662.63889
3	0.00801	3880.02669	1185.57781	6574.47558	-1276.21972	9036.27311	1	1489.72222
4	0.01201	3887.81782	1197.18181	6578.45383	-1266.43717	9042.0728	1.5	1316.80556
5	0.01602	3895.60894	1208.78352	6582.43436	-1256.65785	9047.87574	2	893.88889
6	0.02002	3903.40007	1220.38295	6586.41718	-1246.88178	9053.68192	2.5	315.97222
7	0.02402	3911.19119	1231.98009	6590.40229	-1237.10896	9059.49134	3	-71.94444
8	0.02803	3918.98232	1243.57492	6594.38972	-1227.33939	9065.30402	3.5	-624.86111
9	0.03203	3926.77344	1255.16743	6598.37945	-1217.57307	9071.11995	4	-1117.77778
10	0.03604	3934.56456	1266.75761	6602.37152	-1207.81001	9076.93914		
11	0.04004	3942.35569	1278.34546	6606.36592	-1198.05021	9082.76159		
12	0.04404	3950.14681	1289.93096	6610.36267	-1188.29368	9088.5873		
13	0.04805	3957.93794	1301.51411	6614.36177	-1178.54041	9094.41629		
14	0.05205	3965.72906	1313.09489	6618.36324	-1168.79042	9100.24855		
15	0.05606	3973.52019	1324.67329	6622.36708	-1159.04371	9106.08409		
16	0.06006	3981.31131	1336.24931	6626.37332	-1149.30028	9111.9229		
17	0.06406	3989.10244	1347.82293	6630.38195	-1139.56013	9117.765		
18	0.06807	3996.89356	1359.39414	6634.39298	-1129.82327	9123.61039		
19	0.07207	4004.68468	1370.96293	6638.40644	-1120.08971	9129.45908		
20	0.07608	4012.47581	1382.5293	6642.42232	-1110.35944	9135.31105		
21	0.08008	4020.26693	1394.09323	6646.44064	-1100.63246	9141.16633		
22	0.08408	4028.05806	1405.6547	6650.46141	-1090.9088	9147.02491		
23	0.08809	4035.84918	1417.21372	6654.48464	-1081.18843	9152.8868		
24	0.09209	4043.64031	1428.77027	6658.51034	-1071.47138	9158.752		
25	0.0961	4051.43143	1440.32434	6662.53852	-1061.75765	9164.62051		
26	0.1001	4059.22256	1451.87591	6666.56892	-1052.04723	9170.49234		
27	0.1041	4067.01368	1463.42499	6670.60237	-1042.34013	9176.36749		

Nejprve se podíváte na hodnoty ve sloupci **A6(Y1)**, který obsahuje hodnoty predikčního pásu „horního“ (nad kalibrační přímkou) a zjistíte první hodnotu v tomto sloupečku (v našem obrázku je to číslo 9024,68342). Poté se podíváte do sloupečku **B A5(Y1)**, který obsahuje hodnoty predikčního pásu „dolního“ (pod kalibrační přímkou). V tomto sloupečku budete hledat hodnotu, která se bude nejvíce blížit hodnotě odečtené ze sloupečku **A** (v našem případě tedy hledáte tedy hodnotu co neblíží číslu 9024,68342). Tato hodnota odpovídá nejnižšímu možnému signálu analytu (vynesen na ose y), který lze detekovat. Pro nás je ale nejdůležitější zjistit, která hodnota koncentrace na ose x tomuto signálu odpovídá. Tuto hodnotu nalezneme ve sloupečku **C A1(X1)** (v tomto sloupečku jsou vyneseny

hodnoty osy x – v našem případě koncentrace). Hodnota LOD se bude nacházet na stejném řádku, jako číslo nalezené ve sloupečku **B**. Takto zjištěný LOD je dán především rozptylem bodů kolem regresní přímky (obecně křivky). Může se proto stát, že při velkém rozptylu bodů a nízkém R^2 vyjde LOD do oblasti hodnot v kalibrační závislosti. Ideálně by však měl vyjít mezi $c = 0$ a prvním bodem v kalibrační závislosti. Je proto nutné se nad výsledkem zamyslet, dále porovnat tento LOD s LOD z 3-sigma, pokud jej lze zjistit, a rozhodnout, který údaj má nebo nemá smysl.