

$$RMSEC = \sqrt{\frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} (\hat{y}_i - y_i)^2},$$

где N_c – число образцов калибровочного набора;
 y_i – количественная характеристика, полученная по аттестованной методике;
 \hat{y}_i – количественная характеристика, полученная по калибровочной модели.

$$RMSEP = \sqrt{\frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} (\hat{y}_j - y_j)^2},$$

где N_p – число образцов проверочного набора, схожих с образцами калибровочного набора;
 y_j – количественная характеристика, полученная по аттестованной методике;
 \hat{y}_j – предсказанная с помощью калибровочной модели количественная характеристика.

Для сравнения результатов калибровки, построенной по БИК-спектрам, с результатами, полученными по аттестованной методике, могут быть использованы альтернативные статистические методы (парный t -тест, оценка смещения и др.).

Выбросы

При анализе БИК методом следует учитывать, корректировать и обоснованно исключать резко выделяющиеся результаты.

Все выбросы подлежат анализу и, в случае их информативной важности или подтверждения правильности с помощью аттестованной методики, они могут быть включены в модель.

Ревалидация или повторная валидация

Прошедший валидацию и признанный пригодным для применения метод качественного или количественного анализа нуждается в периодической повторной валидации или ревалидации. При выявлении отклонений необходимо провести корректировку метода.