Если калибровка проведена и значения констант a и b определены, величину X_i находят по измеренному значению y_i:

$$X_i = \frac{1}{b} y_i - \frac{a}{b}. \tag{6.2}$$

При калибровке величину x рассматривают как аргумент, а величину y – как функцию.

Наличие линейной зависимости между x и y целесообразно подтверждать расчетным путем. Для этого по экспериментальным данным, полученным при калибровке, оценивают достоверность линейной связи между x и y с использованием корреляционного анализа и лишь затем рассчитывают значения констант a и b зависимости (6.1) и их доверительные интервалы. В первом приближении судить о достоверности линейной связи между переменными x и y можно по эмпирической величине коэффициента корреляции r, который вычисляют по уравнению:

$$r = \frac{m\sum_1^m x_i y_i - \sum_1^m x_i \sum_1^m y_i}{\sqrt{\left[m\sum_1^m x_i^2 - \left(\sum_1^m x_i\right)^2\right]\left[m\sum_1^m y_i^2 - \left(\sum_1^m y_i\right)^2\right]}}, \tag{6.3}$$

исходя из экспериментальных данных, представленных в табл. 6. Чем ближе значение $|r|$ к единице, тем менее наблюдаемая линейная зависимость между переменными x и y может рассматриваться как случайная. В аналитической химии в большинстве случаев используют линейные зависимости, отвечающие условию $|r| \geq$ 0,98, и только при анализе следовых количеств рассматривают линейные зависимости, для которых $|r| \geq$ 0,90. При столь близких к 1 значениях величины $|r|$ формальное подтверждение наличия линейной связи между переменными x и y проводить не следует.

Коэффициенты a и b и метрологические характеристики зависимости (6.1) рассчитывают с использованием регрессионного анализа, т. е. методом наименьших квадратов по экспериментально измеренным значениям переменной y для заданных значений аргумента x. Пусть в результате эксперимента найдены представленные в табл. 6 пары значений аргумента x