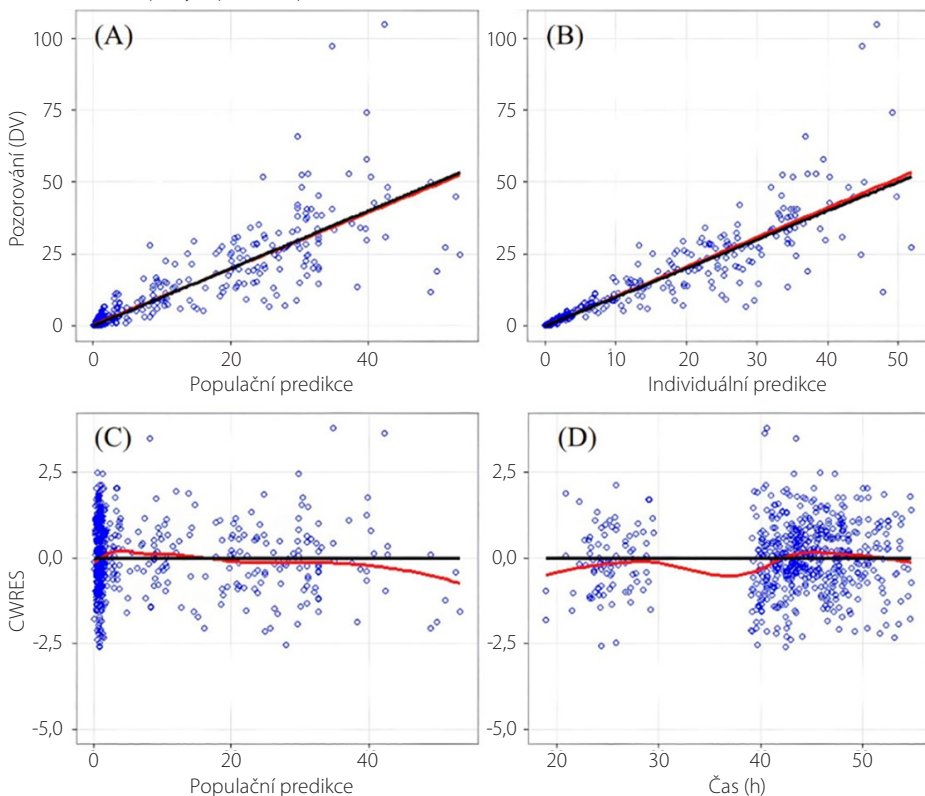


Obr. 7.1. GOF ploty (upraveno podle (16))



CWRES (conditional weighted residuals) – pokročilá metoda znázornění rozdílu mezi individuálními daty a modelovou předpovědí těchto dat.

Přímka znázorňuje linii identity.

Červená křivka znázorňuje lokálně váženou vyhlazovací křivku rozptýlení (locally weighted scatterplot smoothing line). Vyhlazovací techniky poskytují prostředek ke snížení volatility koncentračních dat. Lze tak zřetelněji pozorovat trend v datech.

které je pro každé pozorování generována normalizovaná referenční distribuce, která bere v potaz korelaci reziduí v rámci subjektu (viz Obr. 7.3).

### Metody validace

Validitu modelu můžeme posoudit s použitím interních nebo externích dat. Metody popsané níže tak můžeme využít při externí i interní validaci.

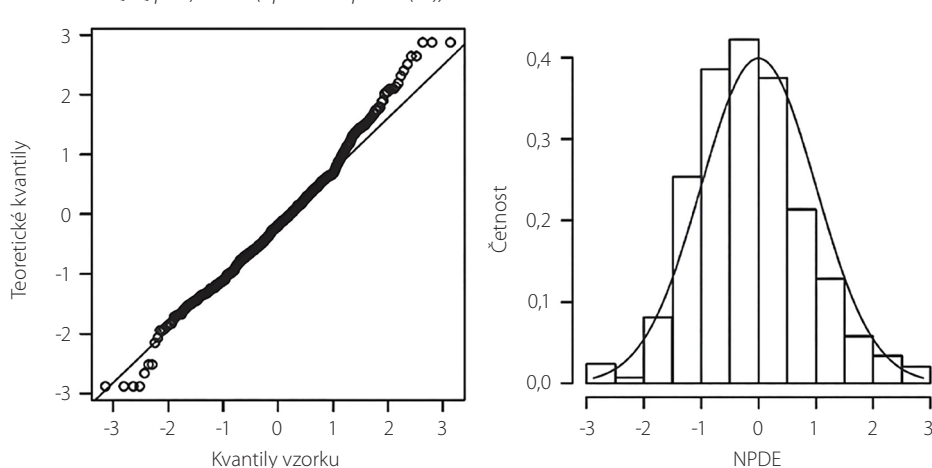
Bootstrap analýza se používá k odhadu zkreslení, standardních chyb a intervalů spolehlivosti parametrů modelu. Pomocí náhodného „převzorkování“ dat z původního zdrojového souboru se vytváří mnoho nových souborů dat, které se opakovaně „fitují“ na model. Tím se získají odhady parametrů modelu, které se dají numericky a graficky zobrazit. Tato analýza může také pomoci identifikovat subjekty s výraznými odchylkami ve zdrojových datech.

Monte Carlo simulace je metoda k posouzení přesnosti modelu, při které jsou generovány vzorky založené na náhodném

výběru hodnot z distribuce parametrů každého subjektu a v populaci. Tímto způsobem je vytvořeno velké množství simulovaných subjektů, na kterých se poté provádí analýzy. Jinak řečeno, vygenerovaná data se použijí k simulaci PK procesů (11).

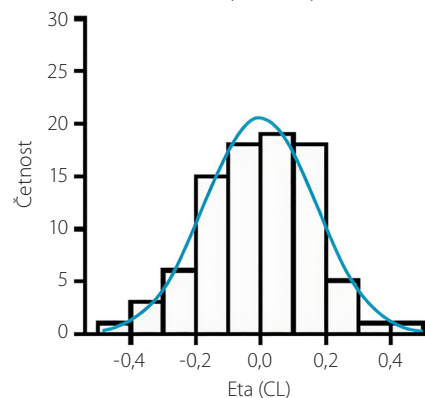
Visual/numerical predictive check (VPC/NPC) jsou nástroje pro hodnocení kvality mo-

Obr. 7.3. Q-Q plot, NPDE (upraveno podle (18))



Přímka znázorňuje linii identity.

Obr. 7.2. Eta distribuce (upraveno podle (17))



delu populační PK. Tyto metody se používají k ověření, zda model odpovídá skutečným datům o PK profilech subjektů. VPC/NPC umožňuje porovnat simulované PK profily s experimentálně získanými daty a poskytuje v případě VPC grafickou reprezentaci shody mezi modelem a daty. Tato porovnání mohou být provedena pro jednotlivé subjekty nebo pro celou populaci. VPC/NPC mohou pomoci identifikovat nesoulad mezi modelem a daty a poskytnout informace pro úpravu a vylepšení modelu (12) (viz Obr. 7.4).

Objective Function Value (OFV) je hodnota funkce, která se používá k hodnocení kvality a přesnosti modelu. OFV se používá k měření rozdílu mezi skutečnými a predikovanými hodnotami. Pokud je hodnota OFV vysoká, znamená to, že model nedokáže přesně odhadnout skutečné hodnoty, a je třeba jej zlepšit. Naopak je-li hodnota OFV nízká, znamená to, že model má vysokou přesnost a může být považován za účinný. OFV se používá k popisu měření shody mezi modelovými predikcemi a expe-