

# 検量線の作成と評価用ソフト

## 使用説明

WREG inst  
Ver 2.2

1996年10月 - 2010年12月

秋山 功

フリーソフトです。本ソフトによる損害等は、作製者は一切負いません。  
計算の間違い、バグ等はご連絡下さい。

## 1 はじめに

濃度測定の検量線では、重み付き回帰が一般的に使用されています。しかし、分析方法の立ち上げ時に検量線が直線か曲線か、重み付け変数をどのようにするか、などについて明確に記載された本はありません。

採用した検量線により、精確さ（正確さと精密度）が左右されます。このため、検量線の回帰モデルを何らかの形で評価し、選択の妥当性を示す必要性があります。

本ソフトは、検量線回帰モデルの選択と測定誤差の推定のために作製したものです。

本ソフトにより、何故検量線を直線回帰にしたのか、何故重み付けを行ったのか、その検量線でどの程度の精確さが得られるのかなどの検討をすることができます。

**日常の測定でも使用できるように、エクセルなどのデータから簡単に検量線から濃度を求める（逆推定）ことが可能**です。

### 変更履歴

本ソフトは1996年に作成し3年間改良しませんでした。 (Ver1.0)

1999年 log log回帰式を追加し、計算結果の表示桁数を合わせました。 (Ver2.0)

2010年 12月20日 本ソフトが分析現場で今も使用され、今後も使用したいとの要望から、使用説明文を改正し一部プログラムの変更、追加（不要な部分を削除）を行いました。表示桁数の4桁合わせを止めました。

(Ver2.2)

### 計算結果の確認

Agilent Technologies、Applied Biosystems、島津製作所、日立製作所などの分析機器での重み付き回帰1次から2次回帰については計算結果の確認をしました。

可能ならば、使用時に実例で同じ結果が得られるか確認して下さい。

## 2 データの作成

データはエクセルで作成します。多くの人はエクセルを使用しています。

（ワープロで作成する場合はデータをスペースかカンマで区切ります。）

濃度とレスポンスの入力データは0.00000001～1000000000の範囲になるようにして下さい。

下記のデータを例を示します。

4濃度を4測定した検量線データです。下記の様に縦に並べて下さい。

xに繰り返し同じ数値が並ぶことにより、自動で4回の測定データであると判断します。

A	B	C	D
4	測定回数	x(ppm)	y(面積)
5	1回目	0.10	30449
6		0.25	84911
7		0.50	186362
8		1.00	400984
9	2回目	0.10	31173
10		0.25	85804
11		0.50	191810
12		1.00	399847
13	3回目	0.10	30373
14		0.25	84082
15		0.50	191885
16		1.00	389802
17	4回目	0.10	33817
18		0.25	96466
19		0.50	217635
20		1.00	439615

もしも繰り返しが無いときは下記のようにします。3濃度から計算可能です。

x(ppm)	y(面積)
0.10	30449
0.25	84911
0.50	186362
1.00	400984

(4濃度の検量線)

### 注意（計算出来ないデータの作成形式の例）

下記の様に横に並べたデータは計算出来ません。また、右下の様な場合も繰り返しデータとは判断しません。

x(ppm)	y			
	1回目	2回目	3回目	4回目
0.10	30449	31173	30373	33817
0.25	84911	85804	84082	96466
0.50	186362	191810	191885	217635
1.00	400984	399847	389802	439615

x(ppm)	y(面積)
0.10	30449
	31173
	30373
	33817
0.25	84911
	85804
	84082
	96466
0.50	186362
	191810
	191885
	217635
1.00	400984
	399847
	389802
	439615

エクセルで下記のようにデータを作成します。（添付サンプルデータ）

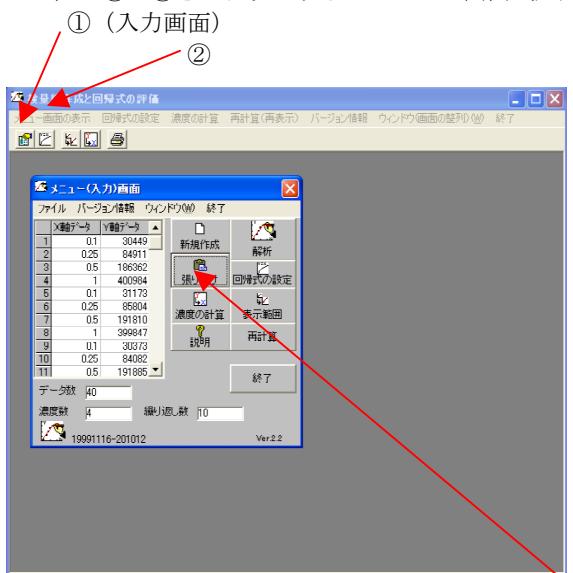
The screenshot shows a Microsoft Excel spreadsheet titled "サンプルデータ2 [複数モード] - Microsoft Excel". The data is organized into columns A (測定回数), B (x(ppm)), and C (y(面積)). The data points are grouped by measurement number (1回目, 2回目, 3回目, 4回目, 5回目, 6回目, 7回目, 8回目, 9回目, 10回目) and then by concentration (0.10, 0.25, 0.50, 1.00). A context menu is open over the data in row 19, specifically over the value '439615'. The menu items include '貼り付け' (Paste), '貼り付けオプション' (Paste Options), '挿入' (Insert), '削除' (Delete), '数式バークリア' (Clear formula bar), 'フィルタ' (Filter), '並べ替える' (Sort), 'コメント挿入' (Comment), 'セルの書式設定' (Format Cells), 'ドロップダウンリストから選択' (Select from dropdown), '名前を定義' (Define name), and 'ハイバージョン' (Hyperlink). A red arrow points from the text 'データの範囲を指定し' to the '貼り付け' option in the menu.

データの範囲を指定し  
コピーします。  
(データはクリップボー  
ドに送られます。)

このデータで使用方法  
を説明します。

### 3 起動画面

- 1) 起動するはじめに下記の画面が出力されます。
- 2) ①か②をクリックするとメニュー画面（入力画面）が出ます。

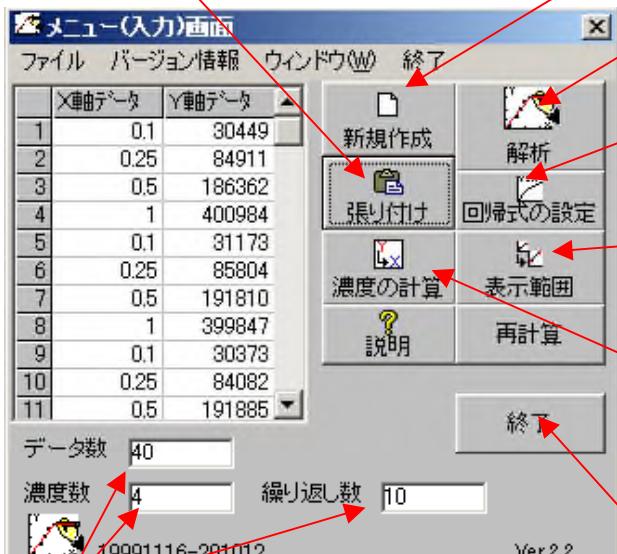


エクセルで作成しコピーブラウザしたデータを本ソフトに「張り付け」します。

(注) 本ソフトのグリッドにデータを入力することはできません。

### 4 メニュー（入力）画面

「張り付け」 エクセルなどデータを作成して、コピーして貼り付けます。



張り付いたデータを消して「新規作成」するときに使用します。（データを消します。）

「解析」で検量線を計算します。

「回帰式の設定」で回帰式の次数、重み付け関数などを設定します。

「表示範囲」で作成した回帰図のx軸とy軸の表示範囲を設定します。

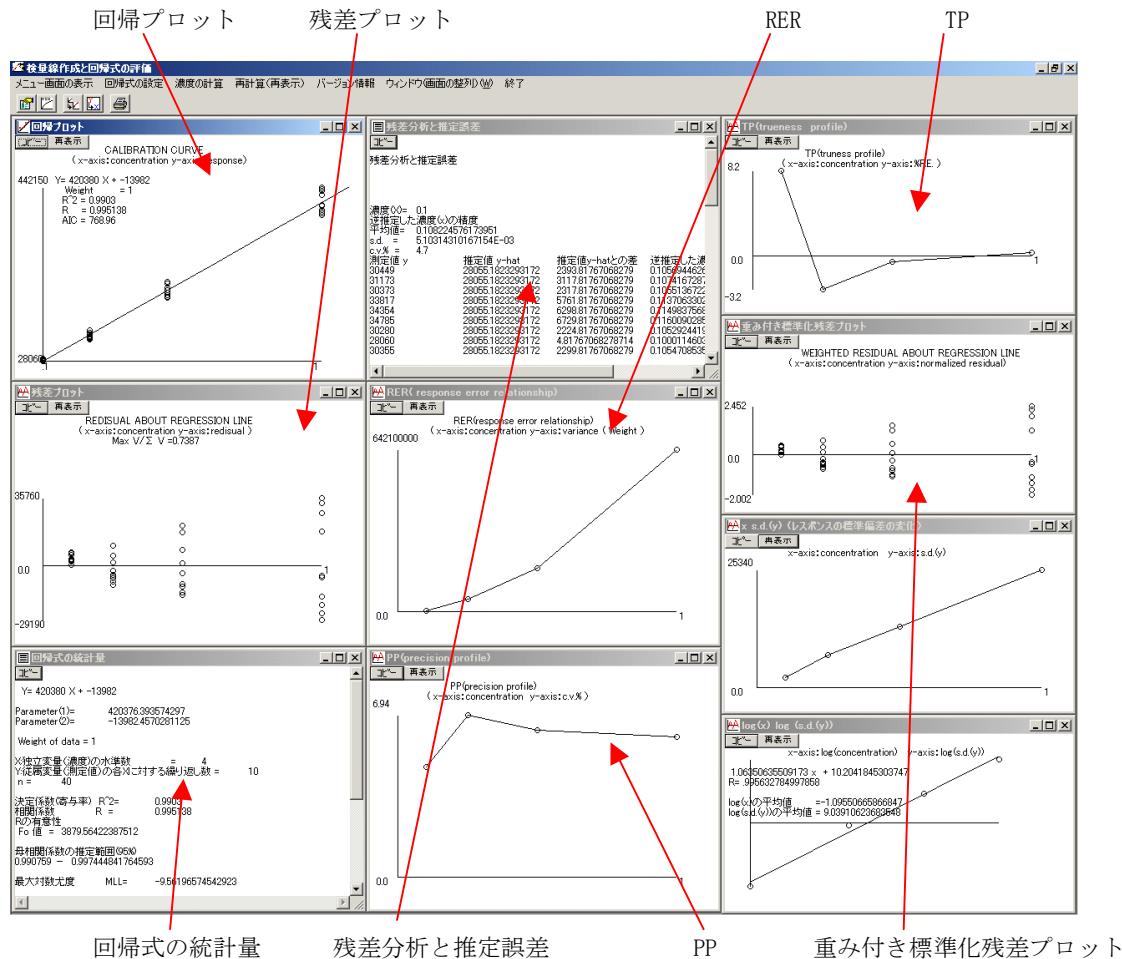
「濃度の計算」で作成した検量線を用いて、濃度（逆推定）の計算をします。

プログラムを終了します。

正しく取り込めたかを確認します。（同じ濃度が繰り返されていると、繰り返しと判断します。）  
データを貼り付けたら、まず「解析」ボタンを押します。

1 次回帰で重み付け無しの計算が実行されます。

## 5 解析画面



計算後、上記10個の画面（子ウインドウ）が開きます。

10個のウインドウについて説明します。

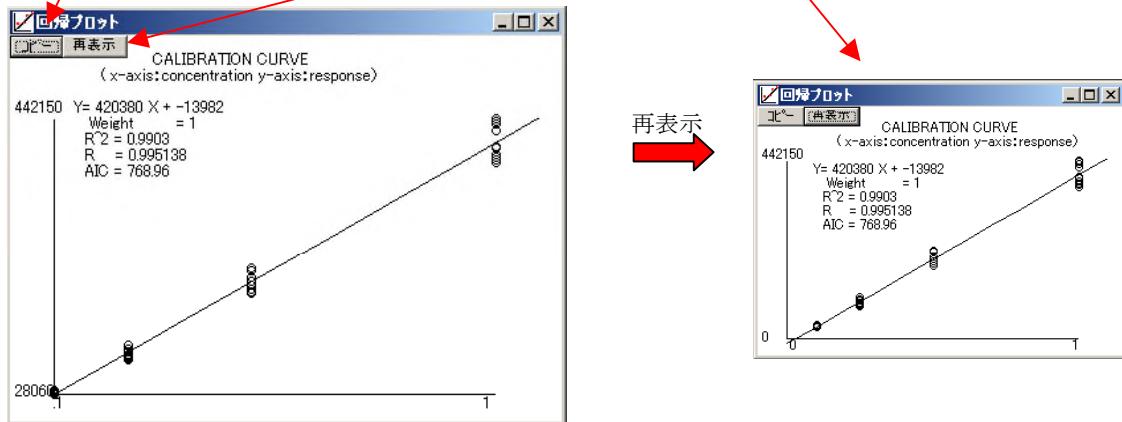
繰り返しが無い場合や重み付けで分母が0になる場合、対数変換で0が含まれる場合は、一部の子ウインドウは表示されないか、「計算エラー」が表示されます。

## [回帰プロット]

検量線を表示します。

[再表示] 大きさを変えて、再表示で枠内に表示する。

[コピー] でエクセル等に張り付ける。



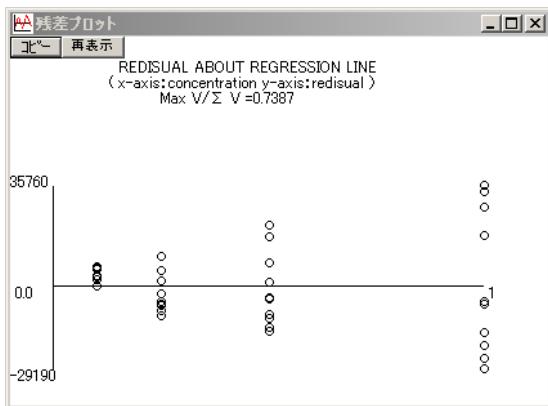
(注)

再計算 **再計算** 、「再表示」を使用すると、再計算、再表示し、図の大きさはそのままです。

## [残差のプロット]

横軸（x 軸）と残差のプロットです。

(注) y 軸との残差ではない点に注意して下さい。



この例では、濃度に比例して誤差が大きくなっています。

等分散ではないので、重み付け回帰が必要です。

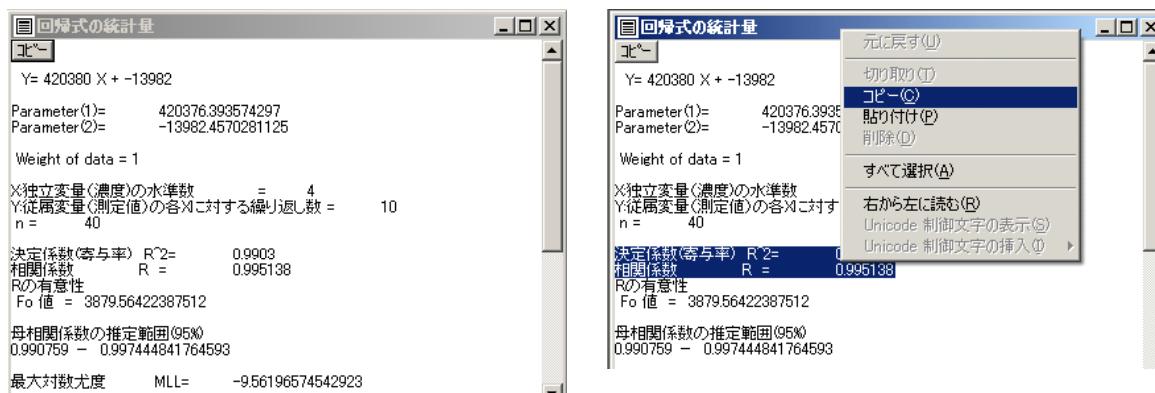
もしも各濃度のバラツキが同じ程度ならば、重みの必要はありません。

残差プロットと検量線から、1次回帰で適合しています。

## [回帰式の統計量]

各統計量を出力します。

必要なものをコピーしエクセル等に張り付けます。



下記の統計量が出力されます。

(例)

$Y = 420380 X + -13982$   
 Parameter(1)= 420376.393574297  
 Parameter(2)= -13982.4570281125  
 Weight of data = 1

X:独立変量 (濃度) の水準数 = 4  
 Y:従属変量 (測定値) の各Xに対する繰り返し数 = 10  
 n = 40  
 決定係数(寄与率)  $R^2$ = 0.9903  
 相関係数 R = 0.995138  
 Rの有意性  
 Fo 値 = 3879.56422387512

母相関係数の推定範囲(95%)  
 0.990759 — 0.997444841764593

最大対数尤度 MLL= -9.56196574542923  
 赤池の情報量規準 AIC = 768.96  
 Xの重心 = 0.4625  
 Yの重心 = 180441.625

Hartley の等分散性の検定  
 Max V/Min V = 139.522  
 5% 点 = 6.31  
 等分散性の仮説は危険率5%で棄却された

Cochranの等分散性の検定  
 Max V/ $\Sigma$  V = 0.7387  
 5% 点 = 0.5018  
 等分散性の仮説は危険率5%で棄却された

## [残差分析と誤差の推定]

各濃度の誤差の推定ができます。（逆推定した値の誤差）

全濃度域の誤差が推定でき、最も良く適合し、精度の良い適切な回帰式を選択し採用します。

濃度(X)= 0.1 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.108224576173951 s.d. = 5.10314310167154E-03 c.v.% = 4.7				
測定値 y	推定値 y-hat	推定値 y-hatとの差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE
30449	28055	2394	0.1057	5.7
31173	28055	3118	0.1074	7.4
30373	28055	2318	0.1055	5.5
33817	28055	5762	0.1137	13.7
34354	28055	6299	0.1150	15.0
34785	28055	6730	0.1160	16.0
30280	28055	2225	0.1053	5.3
28060	28055	5	0.1000	0.0
30355	28055	2300	0.1055	5.5
31480	28055	3425	0.1081	8.2

### (例)

逆推定したときの濃度の平均値、精度が計算されます。

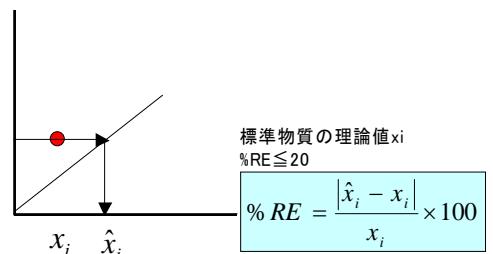
### 残差分析と推定誤差

濃度(X)= 0.1  
逆推定した濃度(x)の精度  
平均値= 0.108224576  
s.d. = 5.10E-03  
c.v.% = 4.7

測定値 y	推定値 y-hat	推定値 y-hatとの差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE
30449	28055	2394	0.1057	5.7
31173	28055	3118	0.1074	7.4
30373	28055	2318	0.1055	5.5
33817	28055	5762	0.1137	13.7
34354	28055	6299	0.1150	15.0
34785	28055	6730	0.1160	16.0
30280	28055	2225	0.1053	5.3
28060	28055	5	0.1000	0.0
30355	28055	2300	0.1055	5.5
31480	28055	3425	0.1081	8.2

各レスポンス  $y_i$  のその推定値  $\hat{y}_i$  や  
各レスポンスからの逆推定値  $x_{i(yi)}$  と標準物質の濃度  $x_i$  との%RE (%diff.) を計算します。  
実際にその検量線が使用可能であるかの判断を可能にします。

%diff. は%RE ( % relative error) と最近は呼ばれます。  
基準として低濃度域では15%から20%以下がよく使用されます。

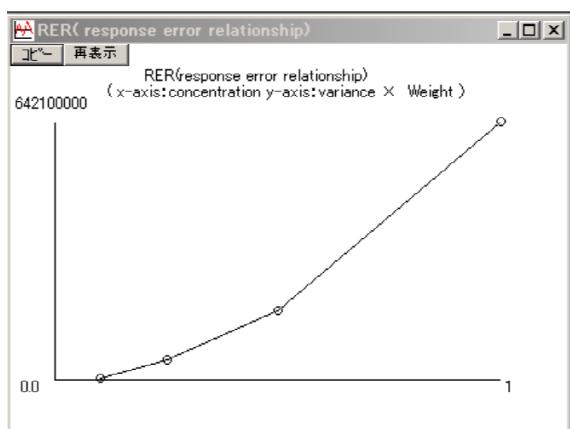


### [RER]

RIAで使用されているRER(Response Error Relationship)を検量線の評価に取り入れたものです。

**全濃度域での分散の変化**を知ることができます。

横軸が濃度で縦軸は測定値の誤差分散です。



この例では、各濃度で分散が異なり、等分散でないことが解ります。

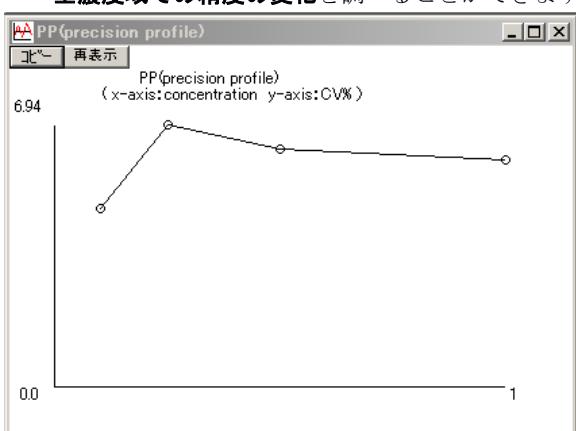
誤差分散が濃度に比例していれば直線になります。

### [PP]

RIAで使用されているPP(Precision Profile)を検量線の評価に取り入れたものです。

横軸が濃度で、縦軸は測定値から逆推定した濃度の精度(c. v. %)です。

**全濃度域での精度の変化**を調べることができます。

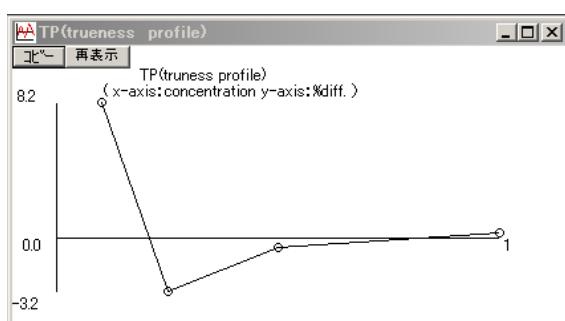


この例では、ほぼ全濃度域でc. v.%が一定です。

### [TP]

横軸が濃度で、縦軸は測定値から逆推定した濃度の平均の%RE(%diff.)です。

**全濃度域での真度の変化**を調べることができます。

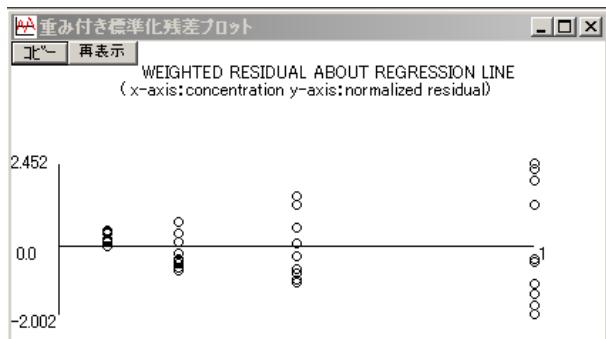


%REを真度の評価に使用すると、割合なので、回帰式からのズレは一般に低濃度域での%が大きくなります。

### [重み付き標準化残差プロット]

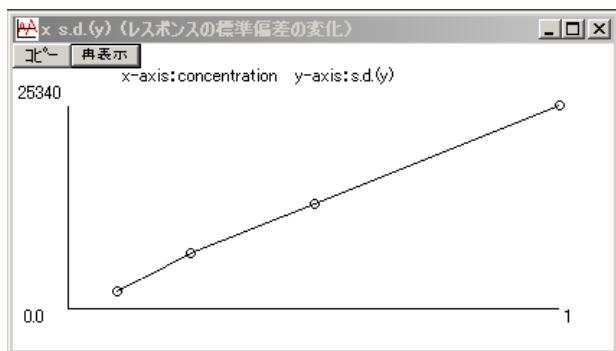
標準化した残差のプロットです。この残差は重み付けの影響を考慮しています。

重み付けした標準化残差を表示します。このため、重み付けで変化しますので最適な重み付けを調べることができます。



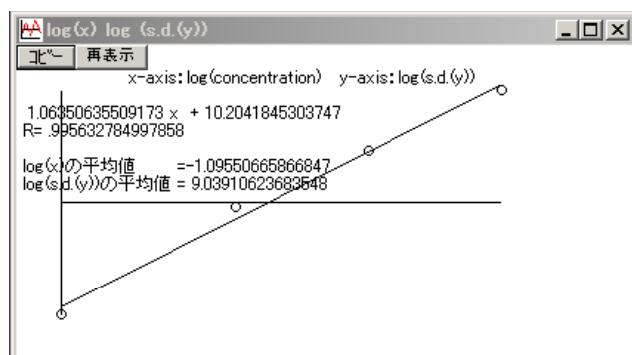
### [濃度 $x_i$ の変化とレスポンス $y_i$ の標準偏差の変化]

横軸  $x$  に濃度を取り、縦軸  $y$  にレスポンスの標準偏差を取った図です。



### [濃度 $x$ の変化とレスポンス $y$ の標準偏差を対数変換した図]

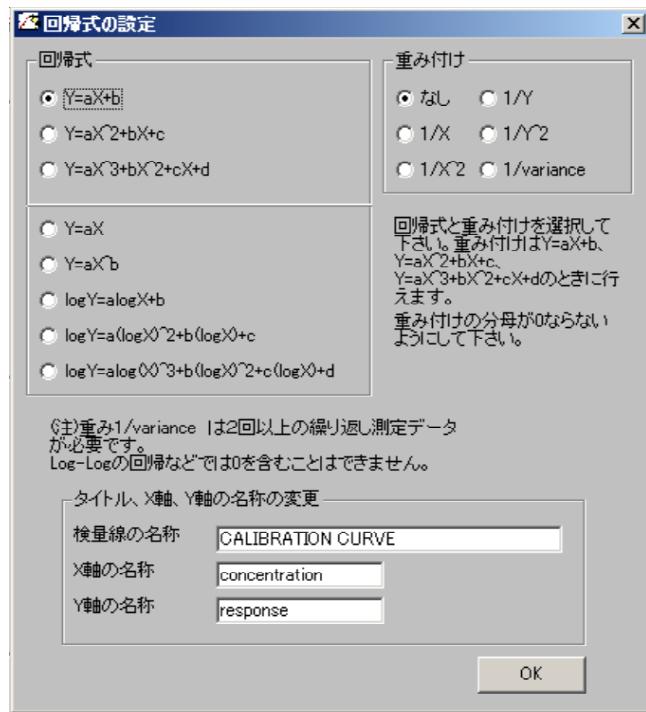
横軸  $x$  に濃度と、縦軸  $y$  のレスポンスの標準偏差を対数変換した散布図です。



1次回帰式が計算されます。この図の詳細な説明は後で行いますが、回帰式の  $x$  の係数が1の時は  $1/x^2$  で、係数が0.5の時は  $1/x$  の重み付けが考えられます。

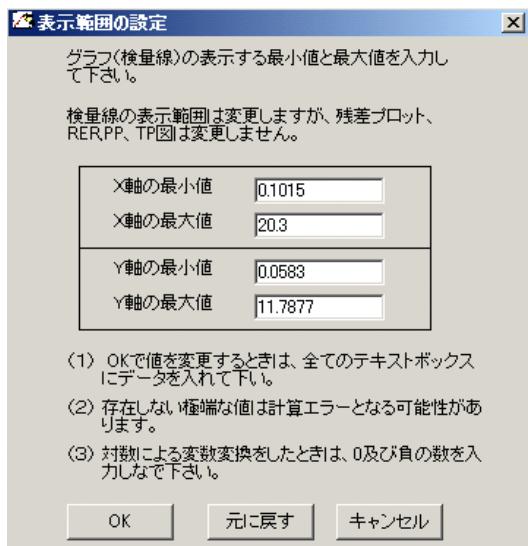
## 6 回帰式の設定

メニュー画面かツールバーの [回帰式の設定] で回帰式を選択します。



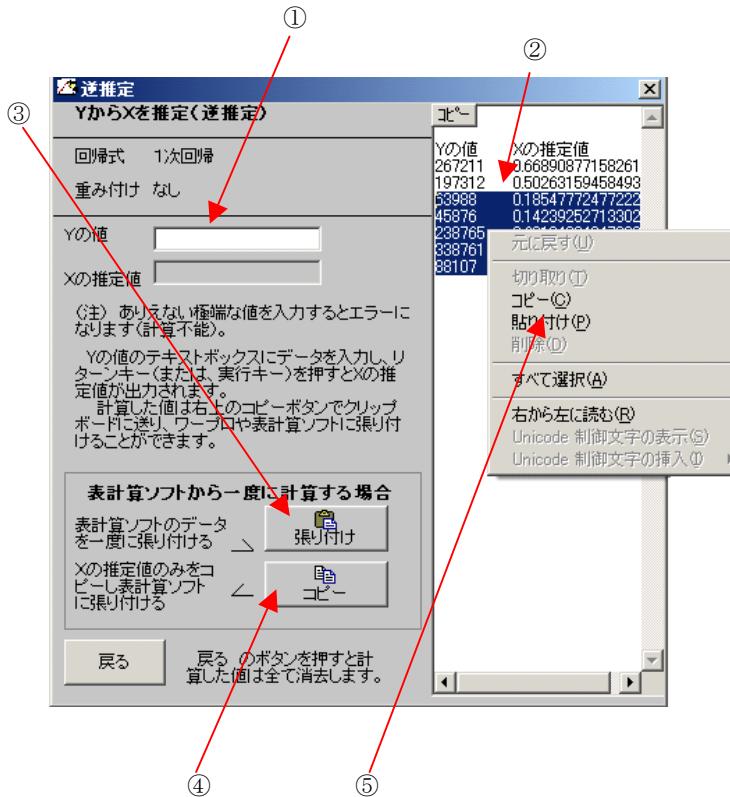
## 7 表示範囲の設定

メニュー画面かツールバーの [表示範囲の設定] で、検量線の表示する最小値と最大値を変更できます。

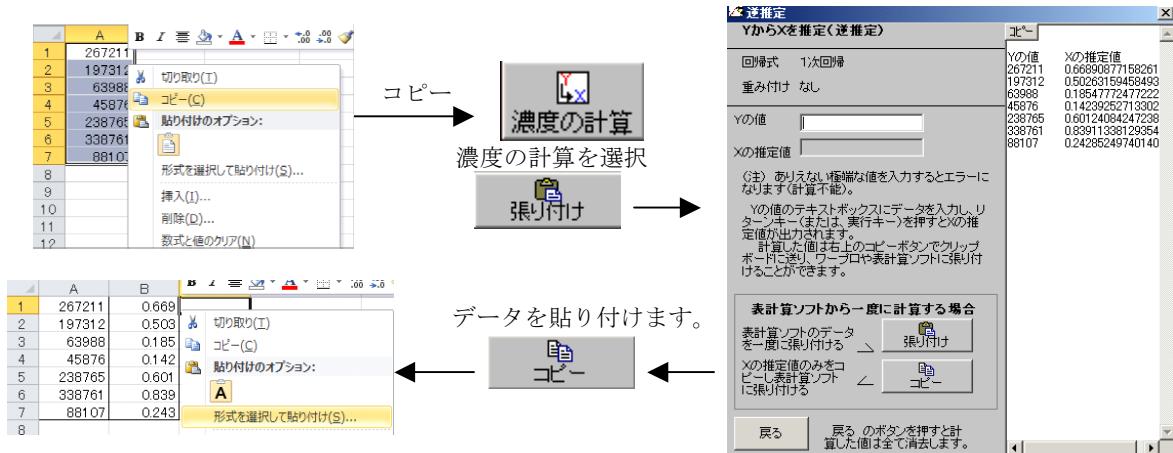


## 8 逆推定

メニュー画面かツールバーの【濃度の計算】で、選択した検量線での濃度の計算（逆推定）ができます。

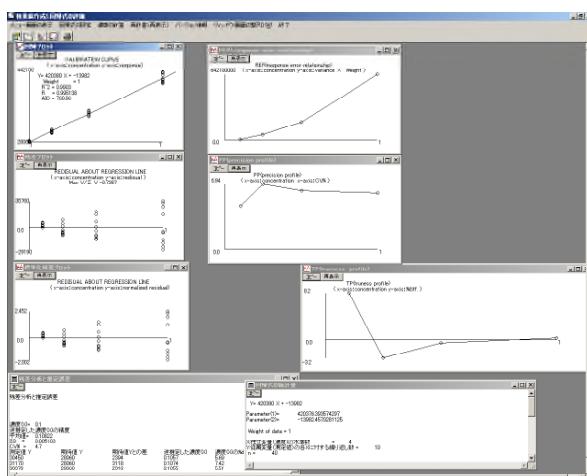


- 1) テキストボックスでのデータ入力  
①のテキストボックスにデータを入力すると②に計算値を出力します。
- 2) 右クリック⑤で②のテキストボックスの値を【コピー】し、エクセルなどの表計算ソフトに張り付けることもできます。
- 3) エクセルのデータを計算し、エクセルに貼り付ける方法  
下記のようなレスポンス（面積、高さなど）が得られたら、エクセルのデータから次のように計算します。



## 9 同じ大きさの図で、データのみ変える方法

エクセルに同じ図の大きさの検量線を貼り付けたい時など、検量線の大きさを変えたくない場合を説明します。



エクセルに検量線を貼り付ける場合、「新規作成」でデータを消して、新しいデータを「貼り付け」ます。

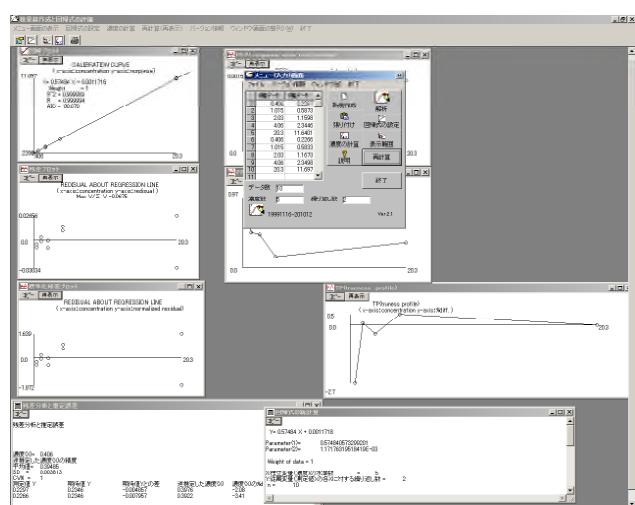


「解析」ではなく、**再計算**を選択して下さい。新しいデータで再計算しますが、各ウインドウの位置と大きさは変化しません。



を選択して下さい。新しいデータで再計算しますが、各ウインドウの位置と大きさは変化しません。

データが変りますが、各ウインドウの位置は変化しませんので、そのままエクセルなどに貼り付ければ、同じ大きさの検量線となります。

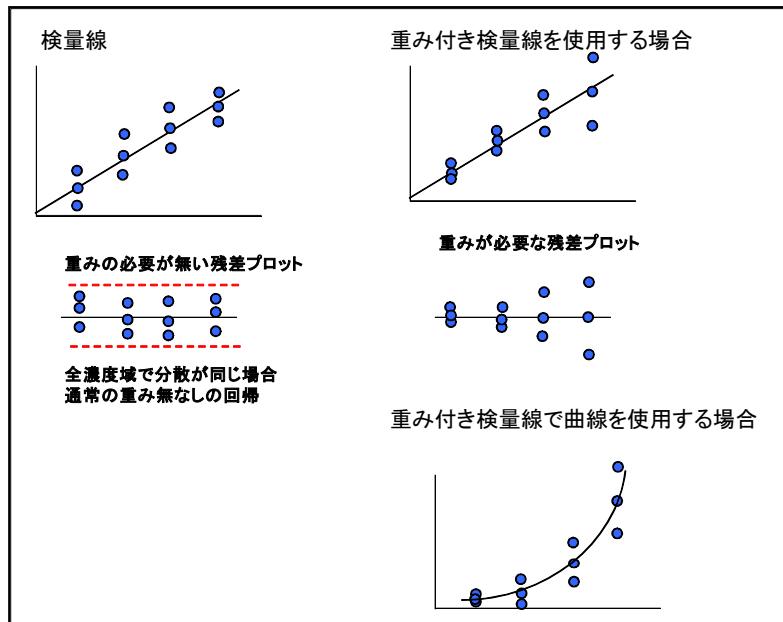


「回帰式の設定」や「濃度計算」でも大きさは変化しませんので、回帰式の変更、重み付けの変更などを検討して、各検量線で濃度（逆推定）を計算し、比較することができます。

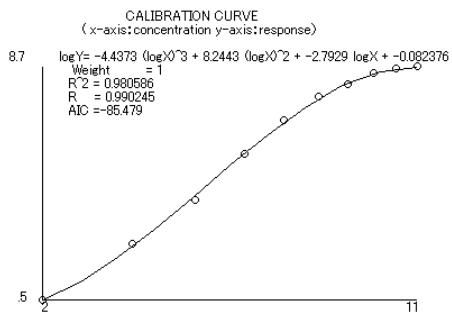
## 10 適切な回帰式と重み付けの選択

回帰式の選択と重み付けの必要性を下記の図に示します。

残差プロットから誤差の等分散性が得られない場合に適切な重み付けを行い、等分散性が満たせるようにします。回帰式が望ましい特性を持つためには、等分散性を満たす必要があります。



(注) 本ソフトでは1次回帰からlog-log3次回帰などが使用できますので、最適な回帰式を見つけます。  
(抗原抗体反応を使用した測定系ではlog-log3次回帰などになります。)



但し、重み付けは対数変換した回帰式では現在は対応していません。

また、 $1/y$ と $1/y^2$ の重み付けは各  $y_i$  による重み付けで、 $y$  の推定値  $\hat{y}$  での重み付けではありません。

多く分析機器が各  $y_i$  による重み付けを採用しているため、反復計算による、推定値  $\hat{y}$  での重み付けは追加する予定です。

$y$  での重み付けは、曲線になり、誤差が  $x$  ではなく  $y$  に誤差が比例する場合や、回帰式の切片が原点付近にならない場合などに使用します。

本ソフトでいろいろ試して、最適な重み付けを選択します。

検量線について多くのデータがある場合、例えば精度管理データがある場合などで各濃度の標準偏差が推定できるときは、分散の逆数  $1/s.d.^2$  での重み付けが可能です。

## よく使用する $1/x^2$ と $1/x$ の重みの選択(妥当性)について

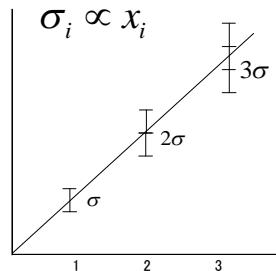
### 1)重み付け $1/x^2$ とは

濃度  $x_i$  に  $y_i$  の 標準偏差が比例している場合は、1次回帰ならば、下記の関係にあると考えられます。

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon \quad \varepsilon \sim N(0, (x_i\sigma)^2)$$

検量線の回帰式の重み付けは、下記の式で等分散になります。

$$w_i = \frac{1}{x_i^2}$$

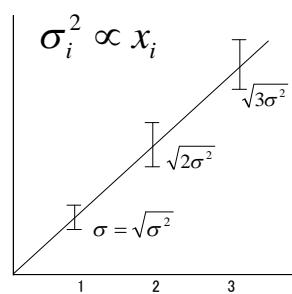


### 2)重み付け $1/x$ とは

濃度  $x_i$  に  $y_i$  の 分散が比例している場合は、1次回帰ならば、下記の関係にあると考えられます。

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon \quad \varepsilon \sim N(0, x_i\sigma^2)$$

$$w_i = \frac{1}{x_i}$$



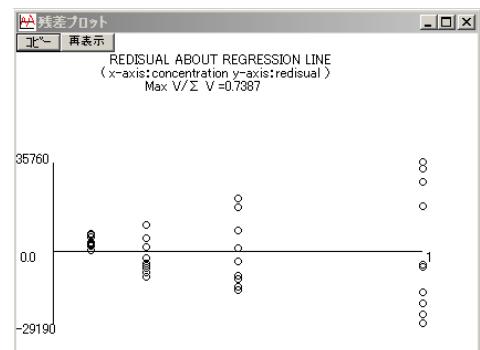
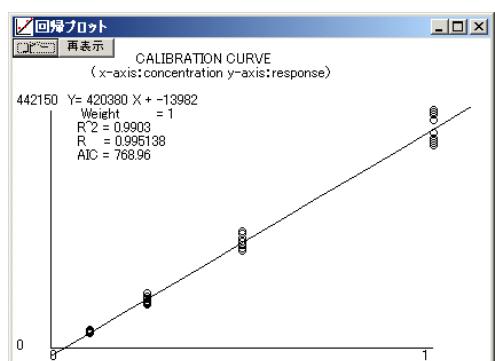
### 1.1 重み付けの例

添付エクセルの10回測定した下記のファイルのデータで解析してみます。

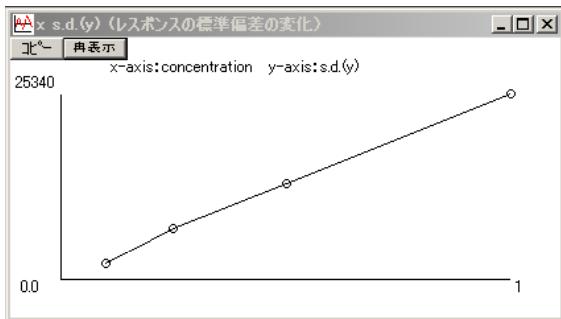
A	B	C	D
	測定回数	x(ppm)	y(面積)
4			
5	1回目	0.10	30449
6		0.25	84911
7		0.50	186362
8		1.00	400984
9	2回目	0.10	31173
10		0.25	85804
11		0.50	191810
12		1.00	399847
13	3回目	0.10	30373
14		0.25	84082
15		0.50	191885
16		1.00	389802
17	4回目	0.10	33817
18		0.25	96466
19		0.50	217635
20		1.00	439615
21	5回目	0.10	34354
22		0.25	92840
23		0.50	213935
24		1.00	442153
25	6回目	0.10	34785
26		0.25	80814
27		0.50	184952
28		1.00	380838
29	7回目	0.10	30280
30		0.25	82304
31		0.50	181699
32		1.00	385393
33	8回目	0.10	28060
34		0.25	80564
35		0.50	180265
36		1.00	377203
37	9回目	0.10	30355
38		0.25	101585
39		0.50	204428
40		1.00	434438
41	10回目	0.10	31460
42		0.25	88107
43		0.50	197312
44		1.00	424506

検量線は右のようになり、1次回帰を選択します。

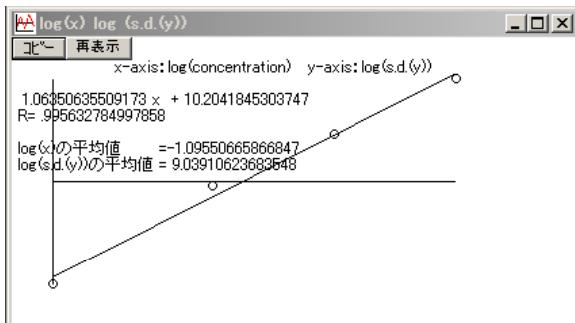
残差プロットから濃度でバラツキが異なることより重み付き回帰が必要です。



各濃度を横軸  $x$  にし、各レスポンス  $y$  の標準偏差 s. d. を縦軸にした下記の図から、濃度  $x_i$  とレスポンス  $y_i$  の標準偏差がほぼ比例しています。



この回帰式が原点を通るとして、両対数を取ると下記の図になります。



1次回帰式が計算されます。上記例では

$$y = 1.06x + 10.2$$

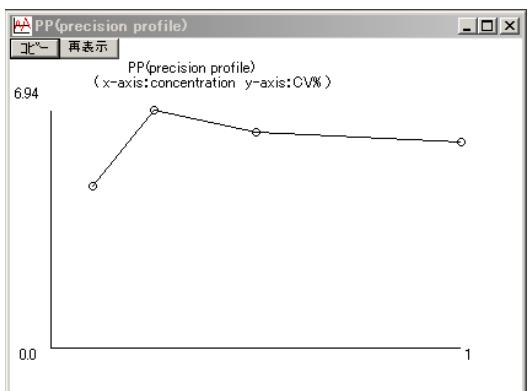
が得られていています。これは元に戻すと

$$s.d.(y) = \exp(10.2)x^{1.06}$$

で原点を通るとすると濃度  $x_i$  に  $y_i$  の標準偏差が比例していることは係数が 1.06 で 1 に近く、相関係数も 1 に近いことから解ります。係数が 0.5 に近い場合はと濃度  $x_i$  に  $y_i$  の分散が比例してことになります。

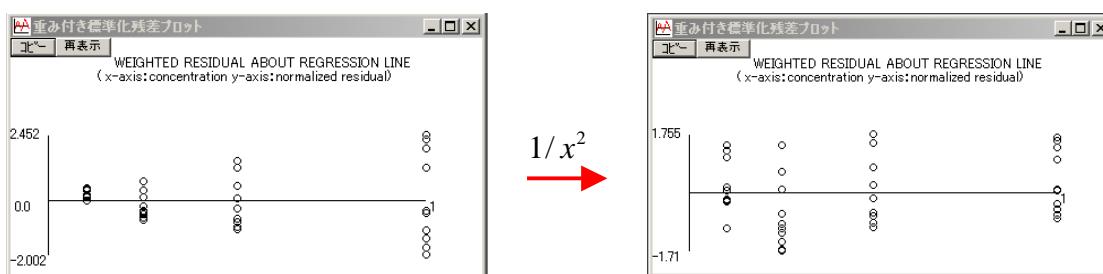
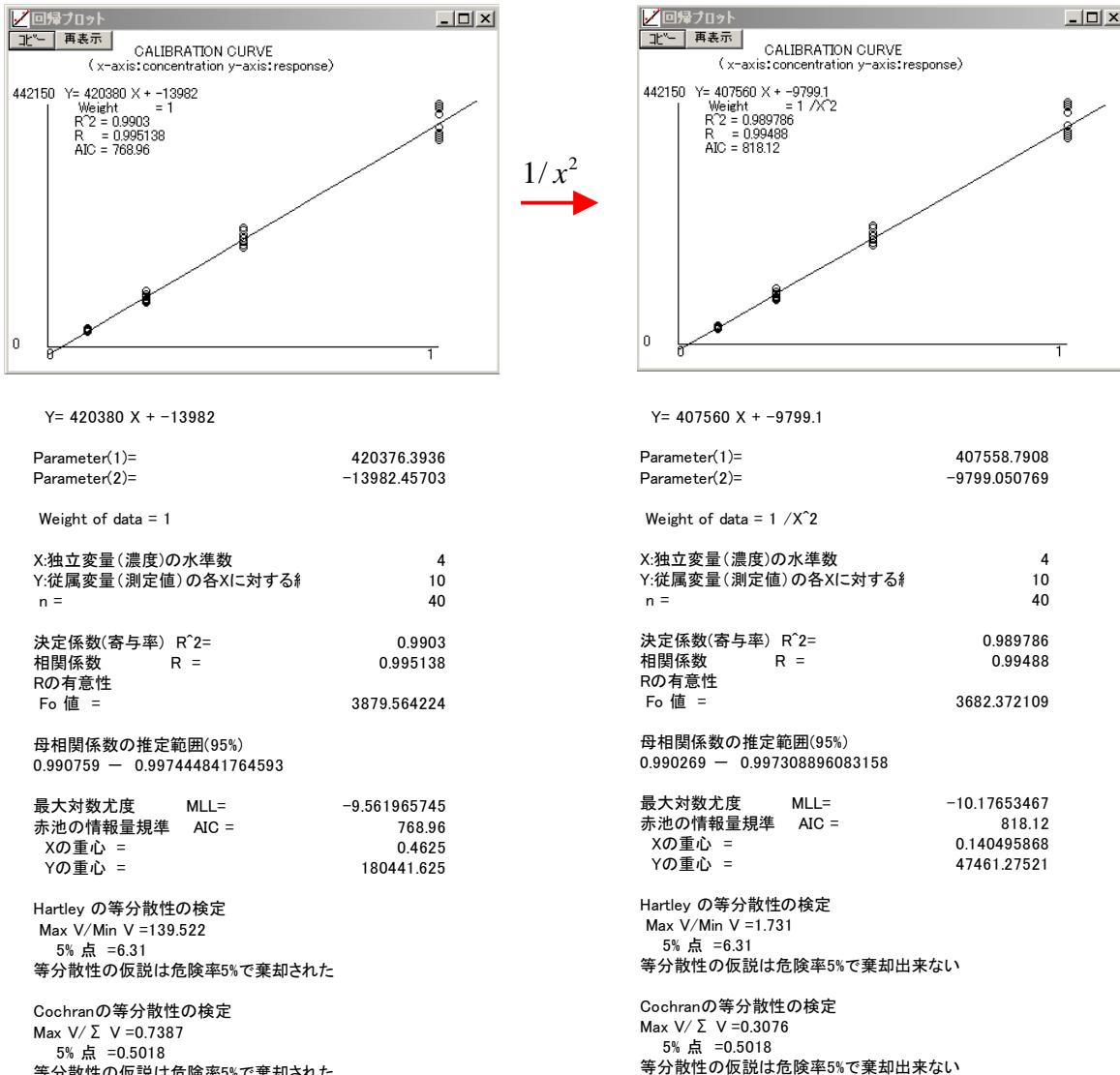
つまり、この例では  $y_i$  の標準偏差が比例していることから、 $1/x_i^2$  の重み付けが適していることになります。

さらに、逆推定した濃度での c. v. % がほぼ一定であることは、各濃度と各濃度での標準偏差が比例していることを示しています。

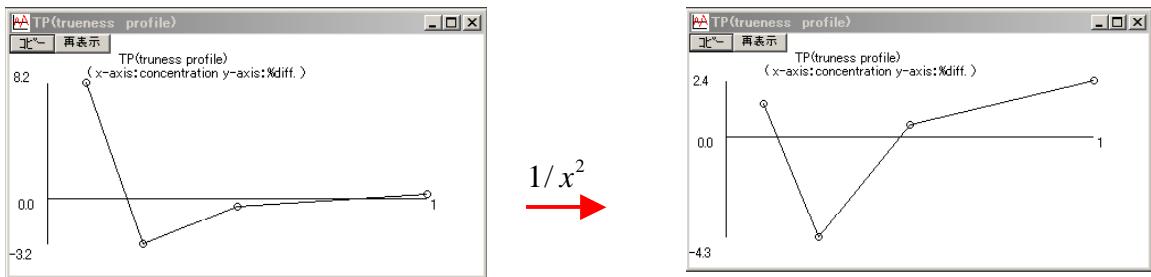


$$c.v.\% = \frac{s.d.}{\bar{x}}$$

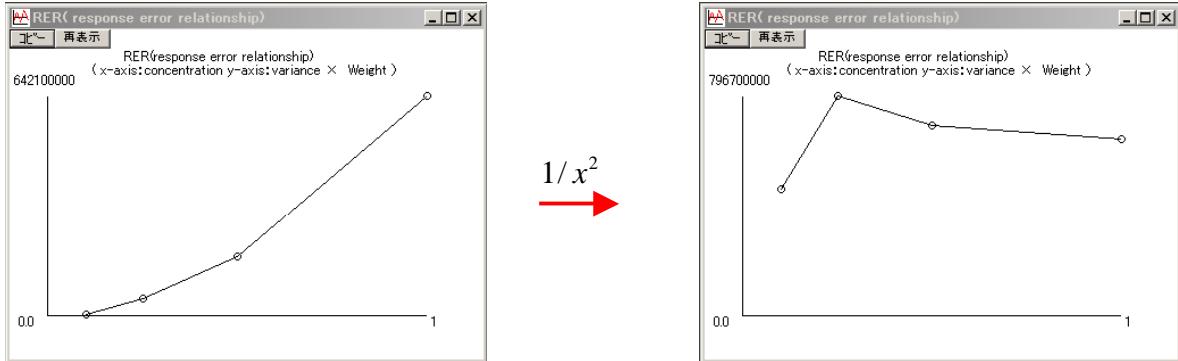
以下に、左の図に重み付け無し、右の図に重み付け  $1/x^2$  の場合を示し、その変化を調べてみます。



残差プロットは重み付け  $1/x^2$  により、ほぼ等分散に変化しています。

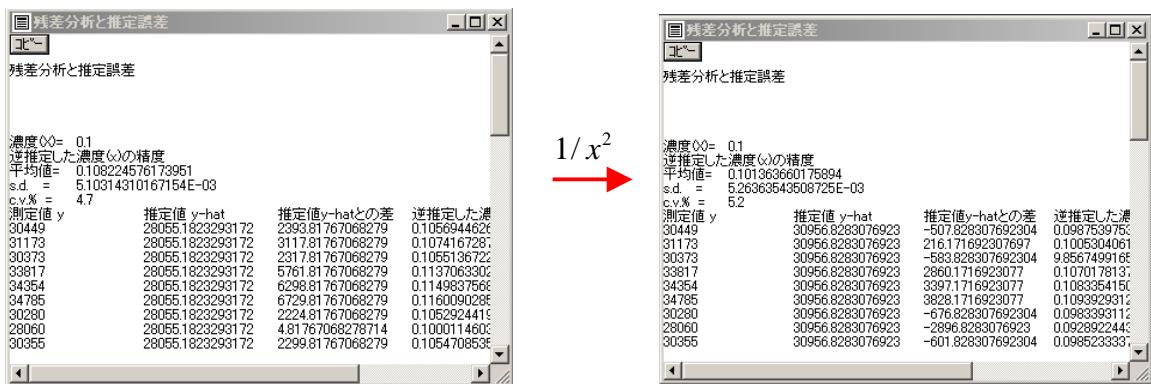


低濃度域に重みが掛かり %diff. (%RE) が変化し、低濃度域で 8.2 から -3.2% が、2.4% から -4.3% になり、%diff. が全体で同程度になるように変化しています。



上の図から、誤差分散は  $1/x^2$  の重み付けにより、各濃度でほぼ一定に変化しています。

検量線は逆推定を目的として使用されます。このため検量線から濃度の「打ち返し値」（逆推定）の精確さを調べ、検量線として使用できるかを検討する必要があります。そのための「打ち返し値」の統計量を算出します。



本ソフトで得られるデータをエクセルで整えたものを下記に示します。

「打ち返し」（逆推定）でどのようなデータが得られるのかを知ることができます。

$y = 42038x - 13982$	$y = 40756x - 9799$
残差分析と推定誤差	重み付け 無し
濃度(x)= <b>0.1</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.108224576 s.d. = 5.10E-03 c.v.% = <b>4.7</b> 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 30449 28055 2394 0.106 <b>5.7</b> 31173 28055 3118 0.107 <b>7.4</b> 30373 28055 2318 0.106 <b>5.5</b> 33817 28055 5762 0.114 <b>13.7</b> 34354 28055 6299 0.115 <b>15.0</b> 34785 28055 6730 0.116 <b>16.0</b> 30280 28055 2225 0.105 <b>5.3</b> 28060 28055 5 0.100 <b>0.0</b> 30355 28055 2300 0.105 <b>5.5</b> 31480 28055 3425 0.108 <b>8.2</b>	濃度(x)= <b>0.1</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.101364 s.d. = 5.26E-03 c.v.% = <b>5.2</b> 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 30449 30957 -508 0.099 <b>-1.3</b> 31173 30957 216 0.101 <b>0.5</b> 30373 30957 -584 0.099 <b>-1.4</b> 33817 30957 2860 0.107 <b>7.0</b> 34354 30957 3397 0.108 <b>8.3</b> 34785 30957 3828 0.109 <b>9.4</b> 30280 30957 -677 0.098 <b>-1.7</b> 28060 30957 -2897 0.093 <b>-7.1</b> 30355 30957 -602 0.099 <b>-1.5</b> 31480 30957 523 0.101 <b>1.3</b>
濃度(x)= <b>0.25</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.241997787 s.d. = 1.68E-02 c.v.% = 6.9 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 84911 91112 -6201 0.235 -5.9 85804 91112 -5308 0.237 -5.1 84082 91112 -7030 0.233 -6.7 96466 91112 5354 0.263 5.1 92840 91112 1728 0.254 1.6 80814 91112 -10298 0.226 -9.8 82304 91112 -8808 0.229 -8.4 80564 91112 -10548 0.225 -10.0 101585 91112 10473 0.275 10.0 88107 91112 -3005 0.243 -2.9	濃度(x)= <b>0.25</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.239344 s.d. = 1.73E-02 c.v.% = <b>7.2</b> 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 84911 92091 -7180 0.2324 -7.1 85804 92091 -6287 0.2346 -6.2 84082 92091 -8009 0.2303 -7.9 96466 92091 4375 0.2607 4.3 92840 92091 749 0.2518 0.7 80814 92091 -11277 0.2223 -11.1 82304 92091 -9787 0.2260 -9.6 80564 92091 -11527 0.2217 -11.3 101585 92091 9494 0.2733 9.3 88107 92091 -3984 0.2402 -3.9
濃度(x)= <b>0.5</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.497199082 s.d. = 3.13E-02 c.v.% = 6.3 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 186362 196206 -9844 0.477 -4.7 191810 196206 -4396 0.490 -2.1 191885 196206 -4321 0.490 -2.1 217635 196206 21429 0.551 10.2 213935 196206 17729 0.542 8.4 184952 196206 -11254 0.473 -5.4 181699 196206 -14507 0.465 -6.9 180265 196206 -15941 0.462 -7.6 204428 196206 8222 0.520 3.9 197312 196206 1106 0.503 0.5	濃度(x)= <b>0.5</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.502571 s.d. = 0.032248 c.v.% = <b>6.4</b> 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 186362 193980 -7618 0.4813 -3.7 191810 193980 -2170 0.4947 -1.1 191885 193980 -2095 0.4949 -1.0 217635 193980 23655 0.5580 11.6 213935 193980 19955 0.5490 9.8 184952 193980 -9028 0.4778 -4.4 181699 193980 -12281 0.4699 -6.0 180265 193980 -13715 0.4663 -6.7 204428 193980 10448 0.5256 5.1 197312 193980 3332 0.5082 1.6
濃度(x)= <b>1</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 1.002578555 s.d. = 6.0E-02 c.v.% = 6 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 400984 406394 -5410 0.987 -1.3 399847 406394 -6547 0.984 -1.6 389802 406394 -16592 0.961 -4.0 439615 406394 33221 1.079 7.9 442153 406394 35759 1.085 8.5 380838 406394 -25556 0.939 -6.1 385393 406394 -21001 0.950 -5.0 377203 406394 -29191 0.931 -6.9 434438 406394 28044 1.067 6.7 424506 406394 18112 1.043 4.3	濃度(x)= <b>1</b> 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 1.023845 s.d. = 6.22E-02 c.v.% = <b>6.1</b> 測定値 y 推定値 $\hat{y}$ 推定値 $\hat{y}$ との差 逆推定した濃度(x) 濃度(x)の%RE. 400984 397760 3224 1.008 0.8 399847 397760 2087 1.005 0.5 389802 397760 -7958 0.980 -2.0 439615 397760 41855 1.103 10.3 442153 397760 44393 1.109 10.9 380838 397760 -16922 0.958 -4.2 385393 397760 -12367 0.970 -3.0 377203 397760 -20557 0.950 -5.0 434438 397760 36678 1.090 9.0 424506 397760 26746 1.066 6.6

1回回帰重み付け  $1/x^2$  で、本ソフトの各子ウインドウの図と上の計算値の表から、回帰式の選択、重み付け関数の妥当性と、どの程度の精確さでデータが得られるのかを推定できます。

この例では、ブランク検体に添加したマトリックス検量線であることから、全濃度域でc. v.%は10%以内、%RE(%diff.) 15%以内が確保できると予想できます。

適切な重み付けを行った方が検量線は安定します。