

# 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、バグ等のご連絡下さい。

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

もしも繰り返しが無いときは下記のようににします。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)

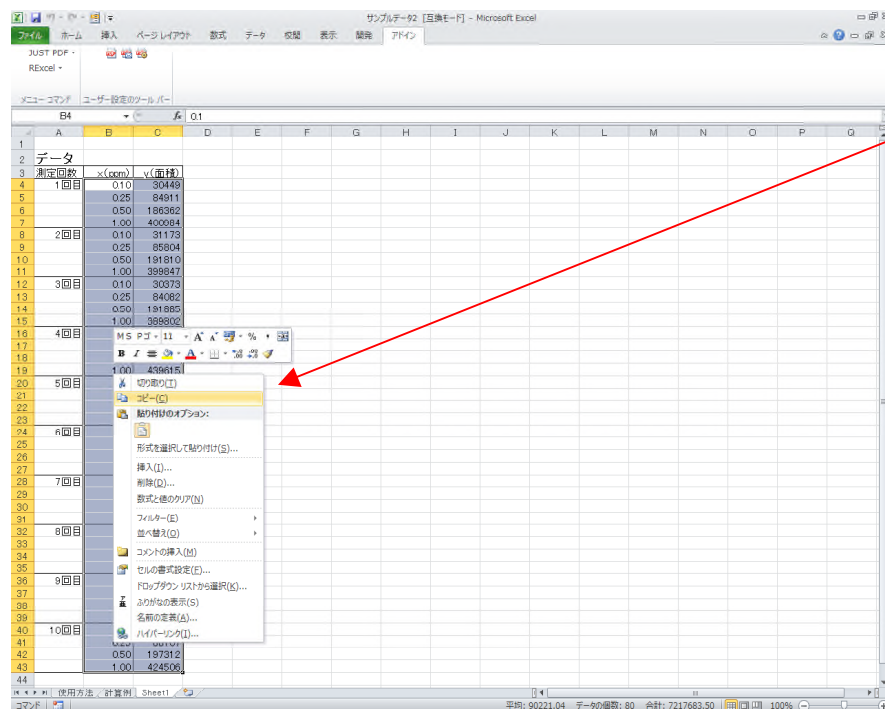
## 注意（計算出来ないデータの作成形式の例）

下記のよう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。

	y			
x(ppm)	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）



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。)

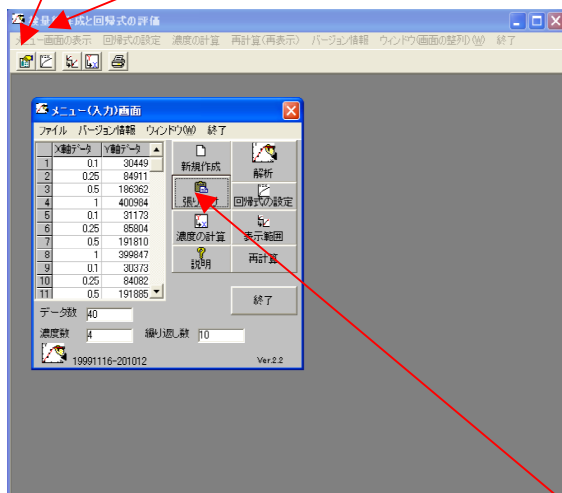
このデータで使用方法  
を説明します。

### 3 起動画面

- 1) 起動すると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。

①（入力画面）

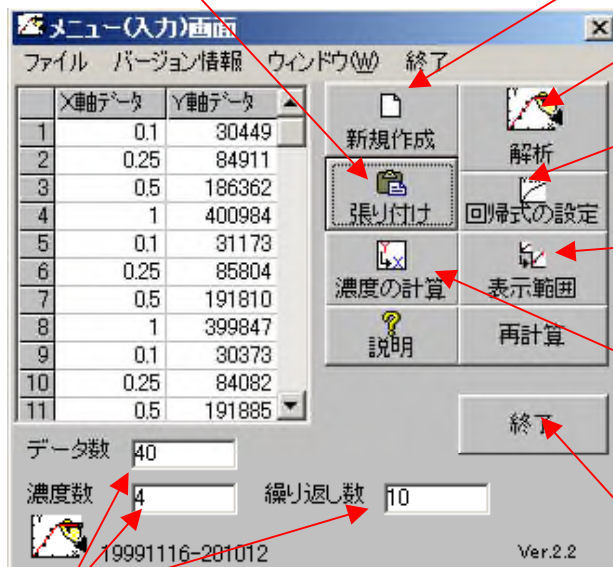
②



エクセルで作成しコピーしたデータを本ソフトに「張り付け」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」するときにご利用します。（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。

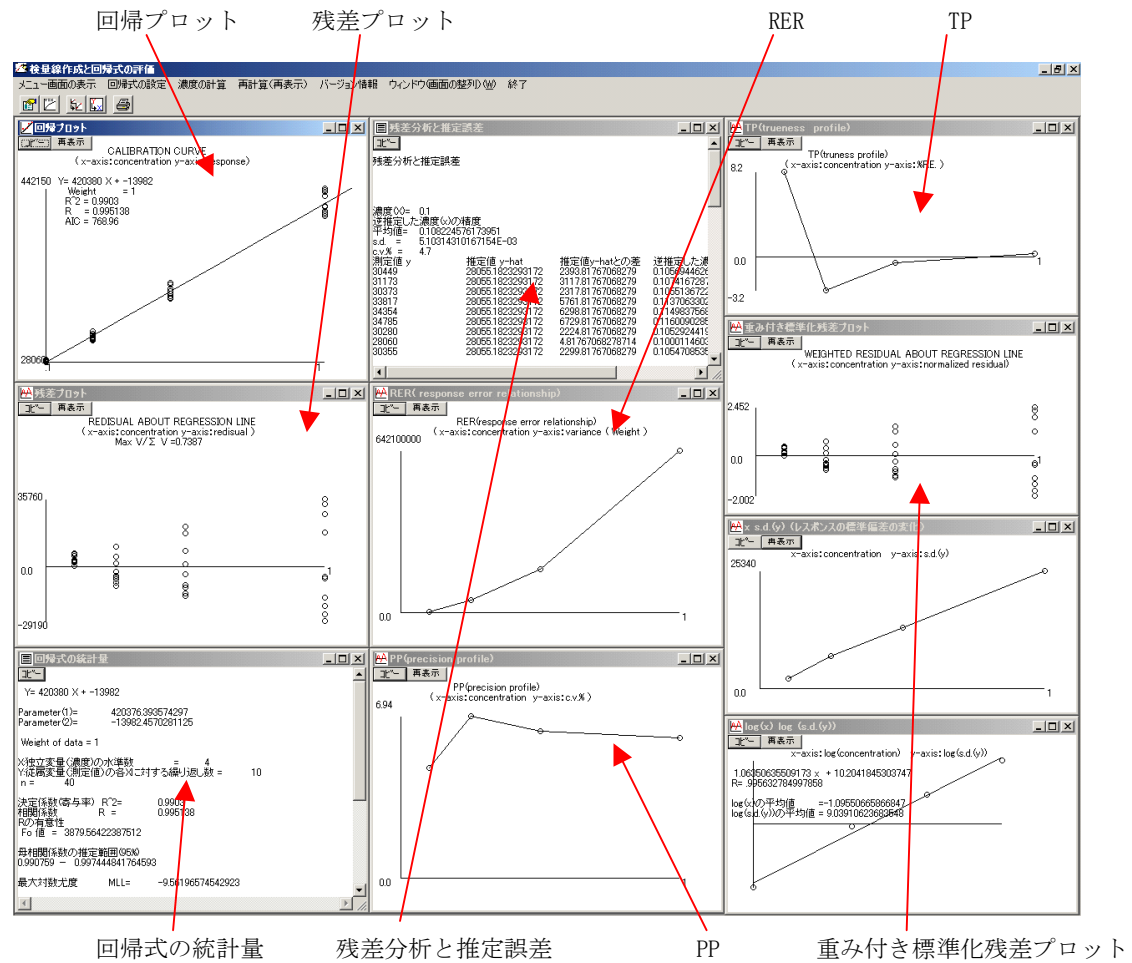
「濃度の計算」作成した検量線を用いて、濃度（逆推定）の計算をします。

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。

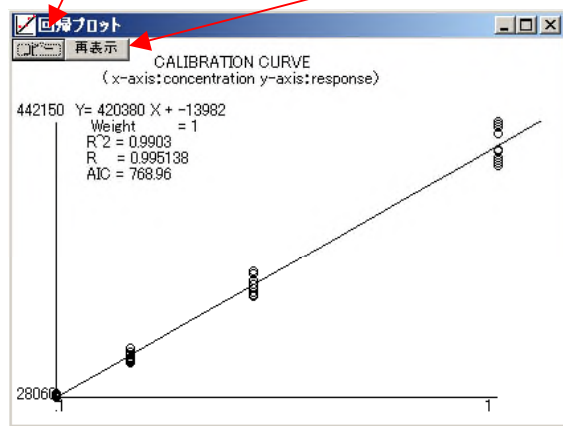
繰り返しが無い場合や重み付けで分母が0になる場合、対数変換で0が含まれる場合などは、一部の子ウインドウは表示されないか、「計算エラー」が表示されます。

### 【回帰プロット】

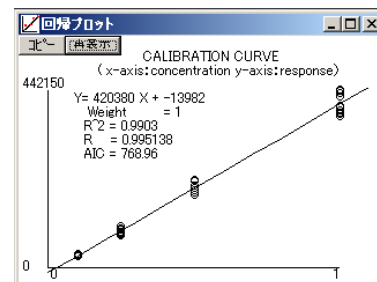
検量線を表示します。

[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。



再表示



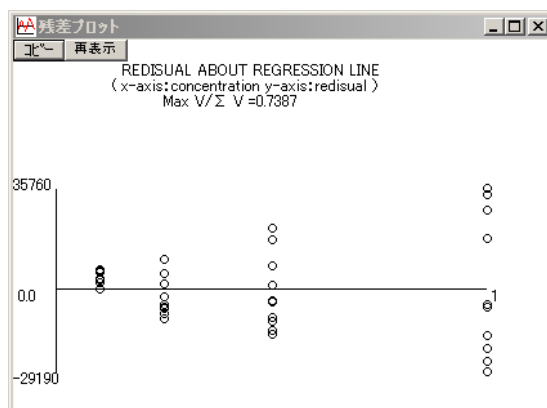
(注)

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。

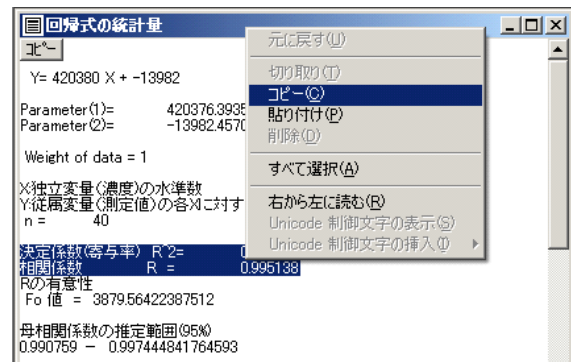
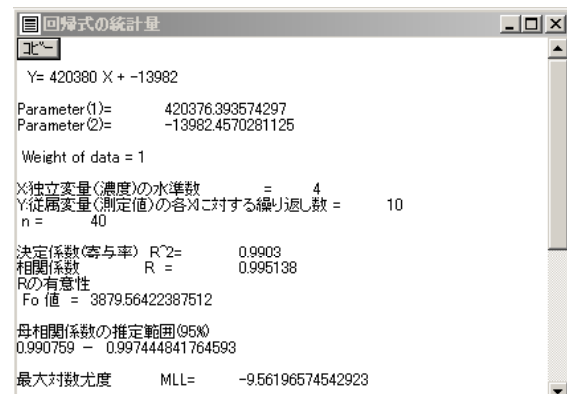
もしも各濃度のバラツキが同じ程度ならば、重みの必要はありません。

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/Σ V = 0.7387

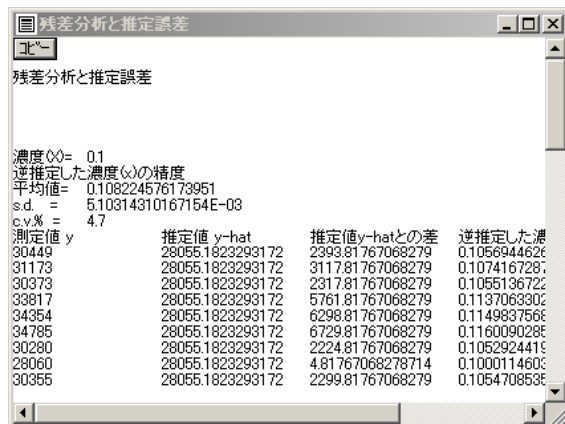
5% 点 = 0.5018

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、精確さの良い適切な回帰式を選択し採用します。



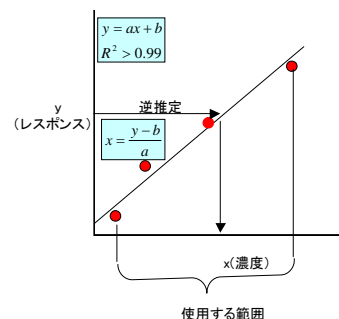
(例)

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

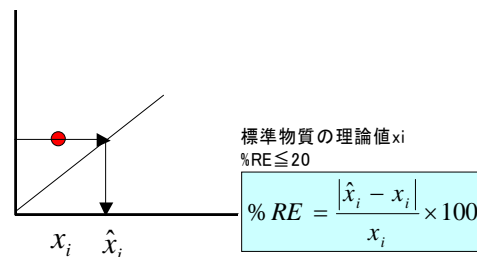


各レスポンス  $y_i$  のその推定値  $\hat{y}_i$  や

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。



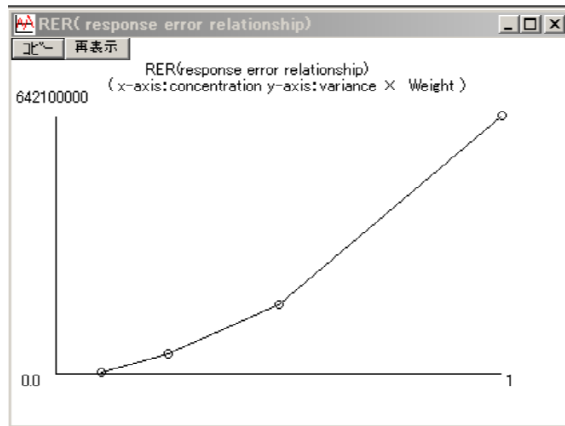


#### [RER]

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。



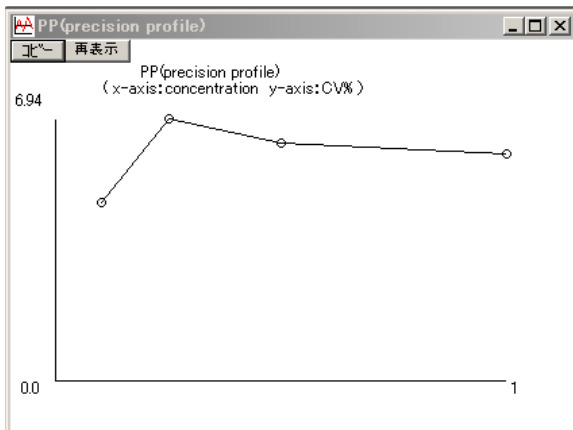
この例では、各濃度で分散が異なり、等分散でないことが解ります。  
誤差分散が濃度に比例していれば直線になります。

#### [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。

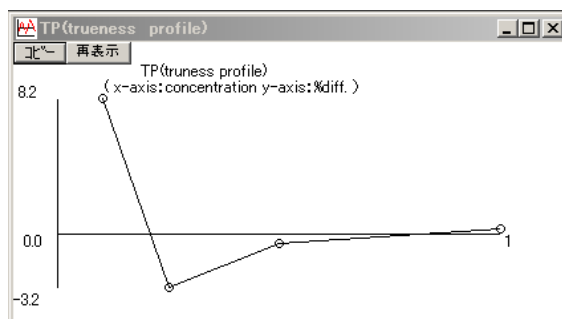


この例では、ほぼ全濃度域でc. v. %が一定です。

#### [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。

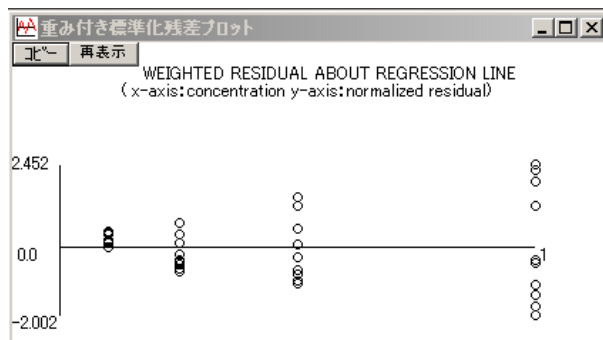
全濃度域での真度の変化を調べることができます。



%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。

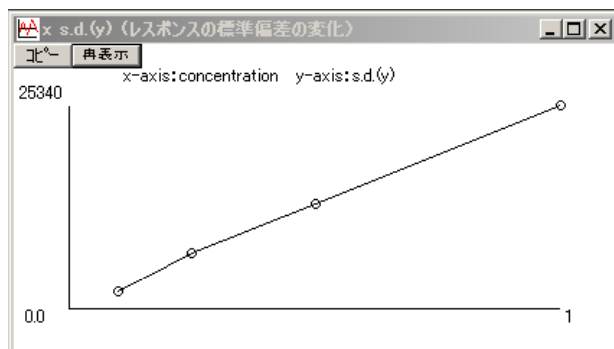
### 【重み付き標準化残差プロット】

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。



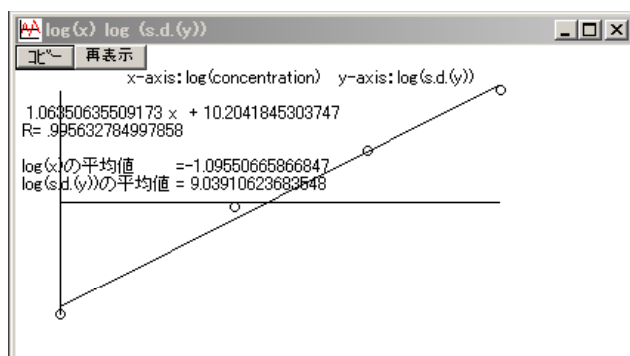
### 【濃度 $x_i$ の変化とレスポンス $y_i$ の標準偏差の変化】

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】

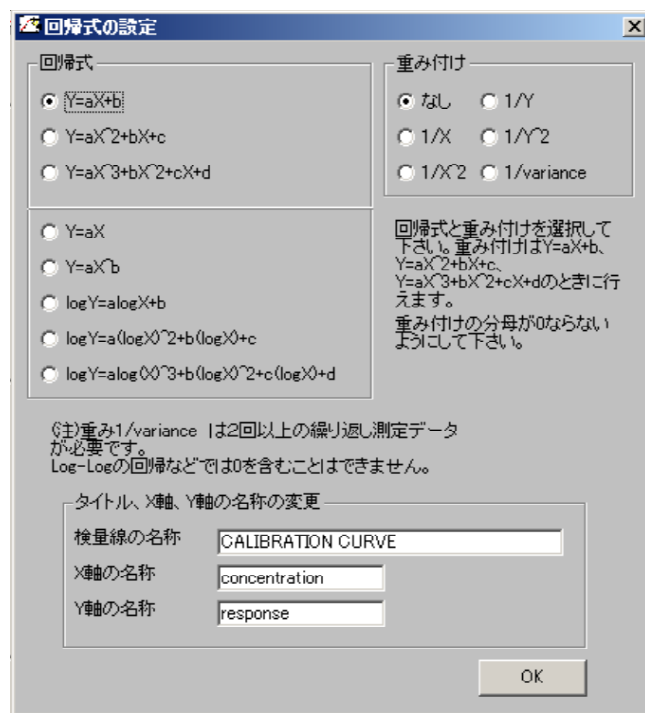
横軸  $x$  に濃度と、縦軸  $y$  のレスポンスの標準偏差を対数変換した散布図です。



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。



回帰式の設定 dialog box. The dialog has two main sections: '回帰式' (Regression Equation) and '重み付け' (Weighting). The '回帰式' section contains several radio button options for different regression models. The '重み付け' section contains radio button options for weighting. A note explains that weighting is only applicable for certain regression models. At the bottom, there is a section for 'タイトル、X軸、Y軸の名称の変更' (Change title, X-axis, Y-axis names) with text input fields for '検量線の名称' (Calibration Curve Name), 'X軸の名称' (X-axis Name), and 'Y軸の名称' (Y-axis Name). An 'OK' button is at the bottom right.

**回帰式**

- ☒  $Y=aX+b$
- ☐  $Y=aX^2+bX+c$
- ☐  $Y=aX^3+bX^2+cX+d$
- ☐  $Y=aX$
- ☐  $Y=aX^b$
- ☐  $\log Y=a\log X+b$
- ☐  $\log Y=a(\log X)^2+b(\log X)+c$
- ☐  $\log Y=a\log X^3+b(\log X)^2+c(\log X)+d$

**重み付け**

- ☒ なし
- ☐  $1/Y$
- ☐  $1/X$
- ☐  $1/Y^2$
- ☐  $1/X^2$
- ☐  $1/\text{variance}$

回帰式と重み付けを選択して下さい。重み付けは  $Y=aX+b$ 、 $Y=aX^2+bX+c$ 、 $Y=aX^3+bX^2+cX+d$  のときに行えます。重み付けの分母が0ならないようにして下さい。

(注)重み  $1/\text{variance}$  は2回以上の繰り返し測定データが必要です。  
Log-Logの回帰などでは0を含むことできません。

タイトル、X軸、Y軸の名称の変更

検量線の名称: CALIBRATION CURVE

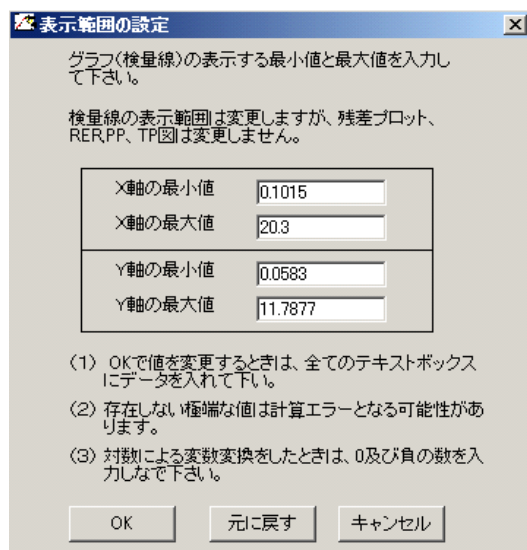
X軸の名称: concentration

Y軸の名称: response

OK

## 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。



表示範囲の設定 dialog box. The dialog contains instructions for setting the minimum and maximum values for the calibration curve. It includes a table for inputting these values for the X-axis and Y-axis. Below the table, there are three numbered instructions. At the bottom, there are three buttons: 'OK', '元に戻す' (Reset), and 'キャンセル' (Cancel).

グラフ(検量線)の表示する最小値と最大値を入力して下さい。

検量線の表示範囲は変更しますが、残差プロット、RER, PP, TP図は変更しません。

X軸の最小値	0.1015
X軸の最大値	20.3
Y軸の最小値	0.0583
Y軸の最大値	11.7877

(1) OKで値を変更するときは、全てのテキストボックスにデータを入れて下さい。

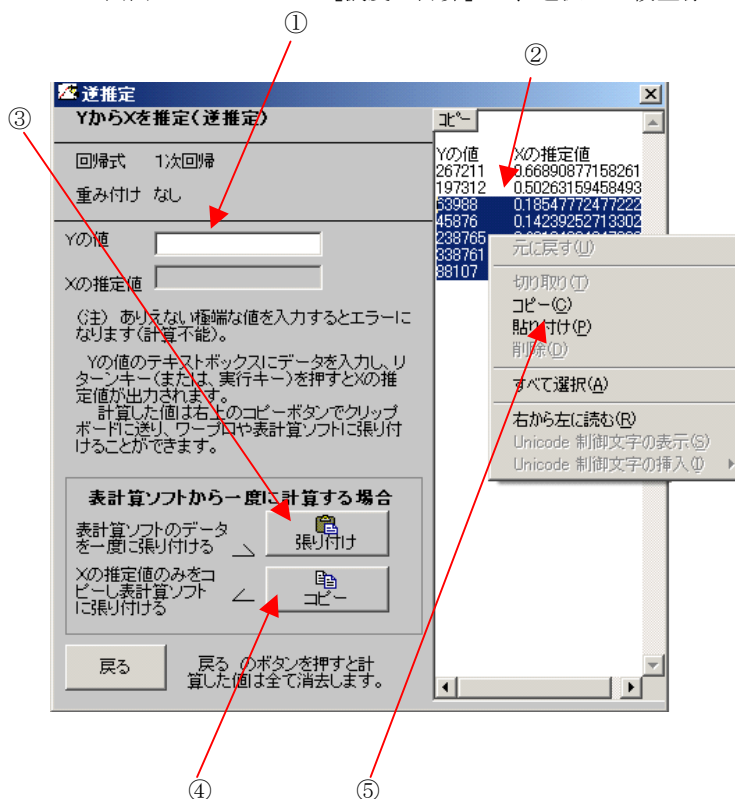
(2) 存在しない極端な値は計算エラーとなる可能性があります。

(3) 対数による変数変換をしたときは、0及び負の数を入力しないで下さい。

OK 元に戻す キャンセル

## 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。



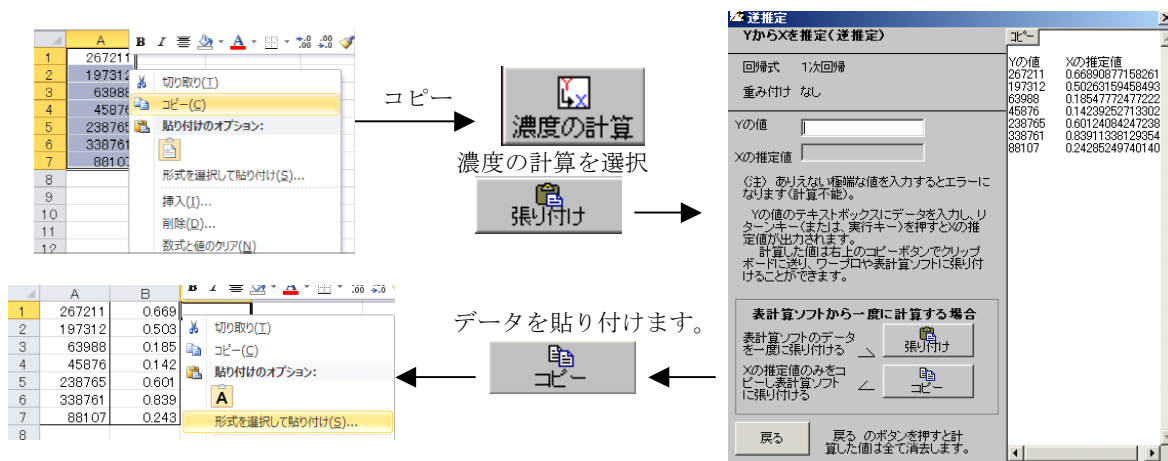
### 1) テキストボックスでのデータ入力

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。

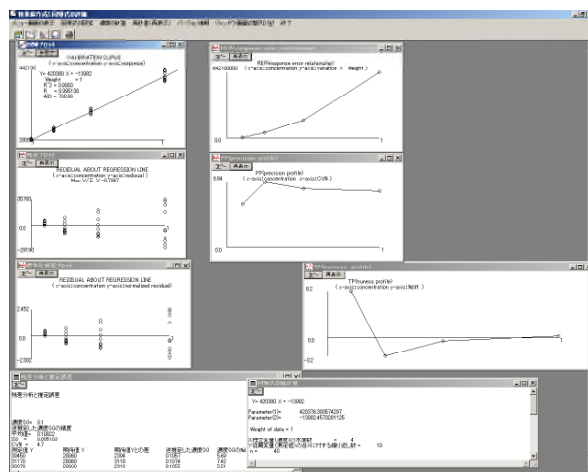
### 3) エクセルのデータを計算し、エクセルに貼り付ける方法

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。

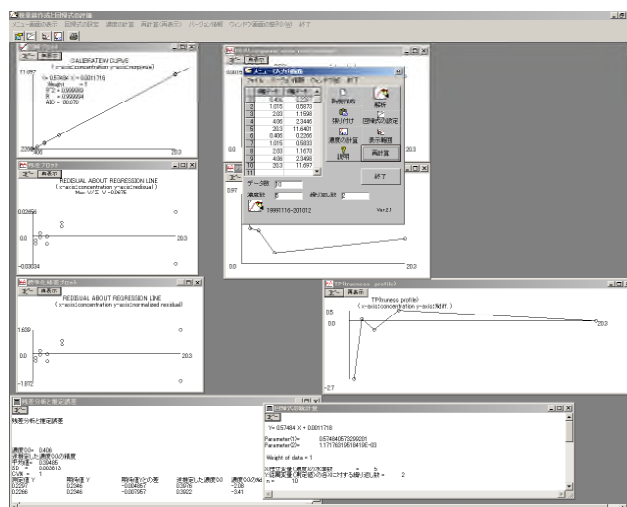


エクセルに検量線を貼り付ける場合、「新規作成」でデータを消して、新しいデータを「貼り付け」ます。



「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。

データが変わりますが、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。

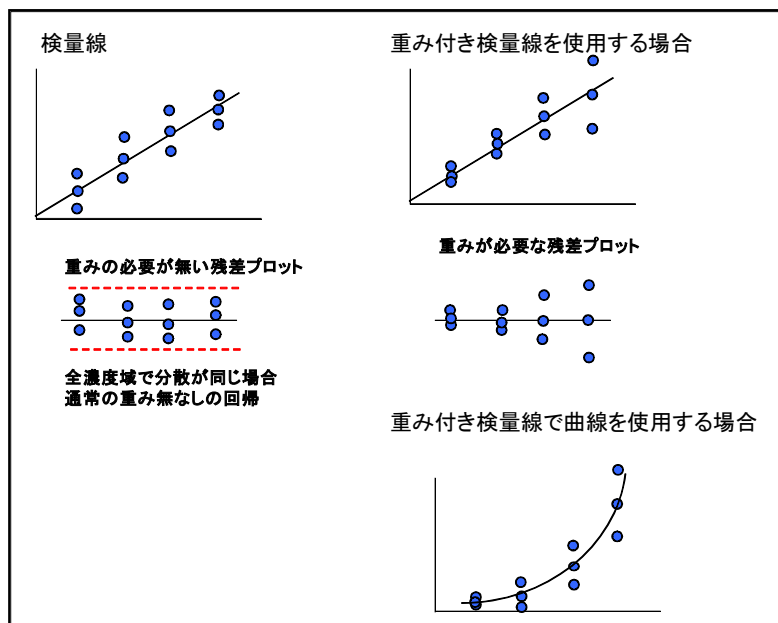


「回帰式の設定」**回帰式の設定** や「濃度の  
計算」でも大きさは変化しませんので、回帰式の変更、重み付けの変更などを検討して、各検量線で濃度（逆  
推定）を計算し、比較することができます。

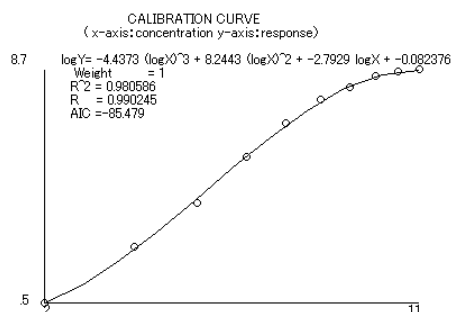
## 1 0 適切な回帰式と重み付けの選択

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是对応していません。

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

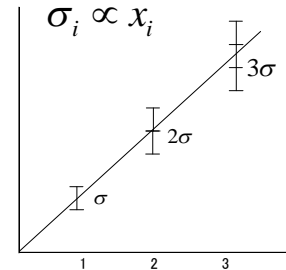
### 1) 重み付け $1/x^2$ とは

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。

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

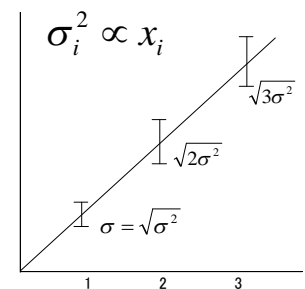


### 2) 重み付け $1/x$ とは

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。

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

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

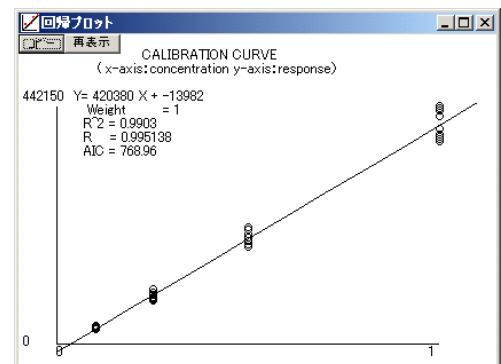


## 1 1 重み付けの例

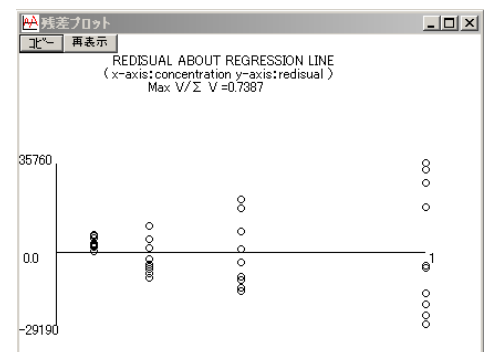
添付エクセルの10回測定した下記のファイルのデータで解析してみます。

	A	B	C	D
		測定回数	x(gpm)	y(面積)
4		1回目	0.10	30449
5			0.25	64911
6			0.50	186362
7			1.00	400984
8		2回目	0.10	31173
9			0.25	85804
10			0.50	191810
11			1.00	399847
12		3回目	0.10	30373
13			0.25	84082
14			0.50	191885
15			1.00	389802
16		4回目	0.10	33817
17			0.25	96466
18			0.50	217635
19			1.00	439615
20		5回目	0.10	34354
21			0.25	92840
22			0.50	213935
23			1.00	442153
24		6回目	0.10	34785
25			0.25	80814
26			0.50	184952
27			1.00	380838
28		7回目	0.10	30280
29			0.25	82304
30			0.50	181699
31			1.00	385393
32		8回目	0.10	28060
33			0.25	80564
34			0.50	180265
35			1.00	377203
36		9回目	0.10	30355
37			0.25	101585
38			0.50	204428
39			1.00	434438
40		10回目	0.10	31480
41			0.25	88107
42			0.50	197312
43			1.00	424506
44				

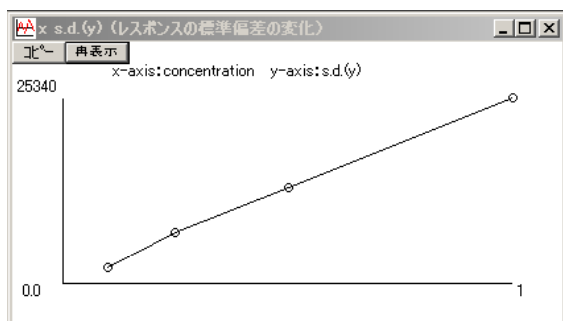
検量線は右のようになり、1次回帰を選択します。



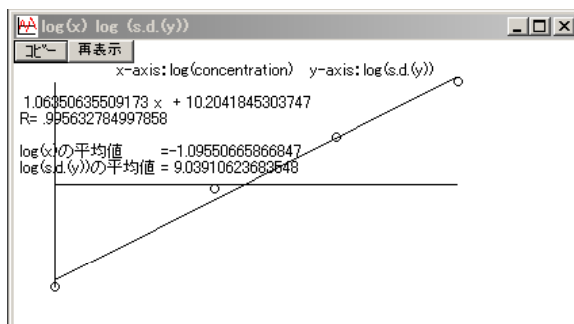
残差プロットから濃度でバラツキが異なることより重み付き回帰が必要です。



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

$$y = 1.06x + 10.2$$

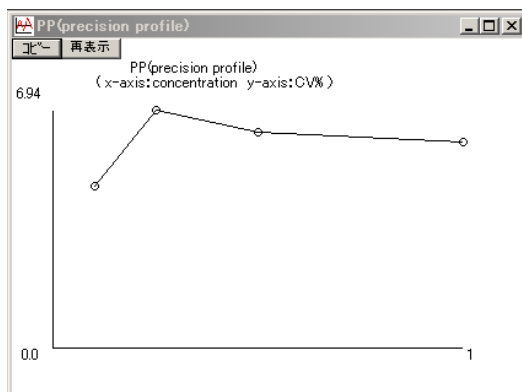
が得られています。これは元に戻すと

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

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。

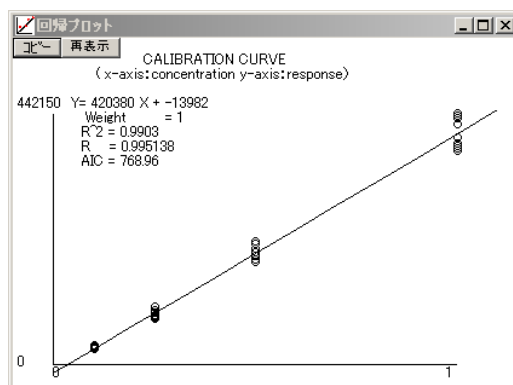
さらに、逆推定した濃度での  $c.v. \%$  がほぼ一定であることは、各濃度と各濃度での標準偏差が比例していることを示しています。



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



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。



$$Y = 420380 X + -13982$$

Parameter(1)= 420376.3936  
Parameter(2)= -13982.45703

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# 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 = 3879.564224

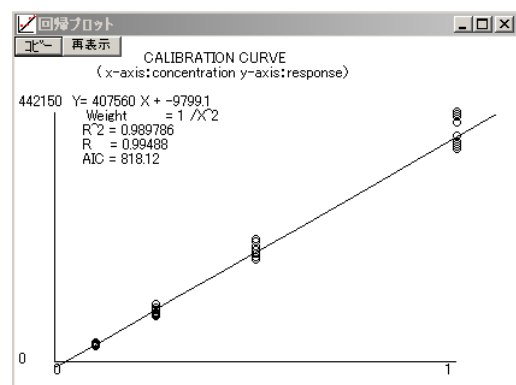
母相関係数の推定範囲(95%)  
0.990759 — 0.997444841764593

最大対数尤度 MLL= -9.561965745  
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/Σ 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

$1/x^2$



$$Y = 407560 X + -9799.1$$

Parameter(1)= 407558.7908  
Parameter(2)= -9799.050769

Weight of data =  $1/X^2$

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# 10  
n = 40

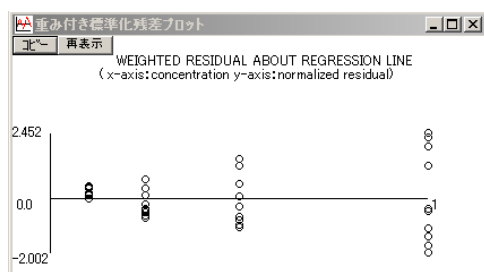
決定係数(寄与率)  $R^2$ = 0.989786  
相関係数 R = 0.99488  
Rの有意性  
Fo 値 = 3682.372109

母相関係数の推定範囲(95%)  
0.990269 — 0.997308896083158

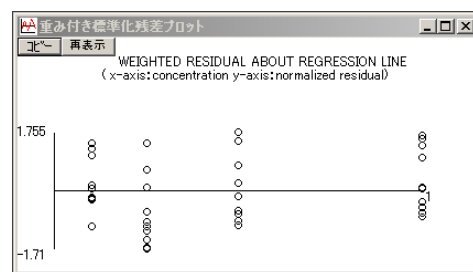
最大対数尤度 MLL= -10.17653467  
赤池の情報量規準 AIC = 818.12  
Xの重心 = 0.140495868  
Yの重心 = 47461.27521

Hartley の等分散性の検定  
Max V/Min V = 1.731  
5% 点 = 6.31  
等分散性の仮説は危険率5%で棄却出来ない

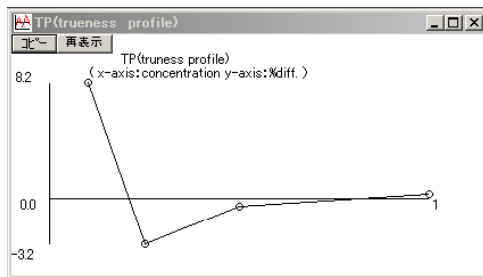
Cochranの等分散性の検定  
Max V/Σ V = 0.3076  
5% 点 = 0.5018  
等分散性の仮説は危険率5%で棄却出来ない



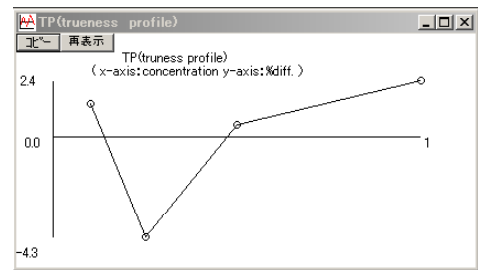
$1/x^2$



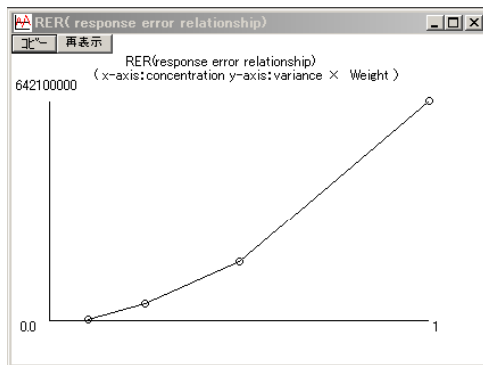
残差プロットは重み付け $1/x^2$ により、ほぼ等分散に変化しています。



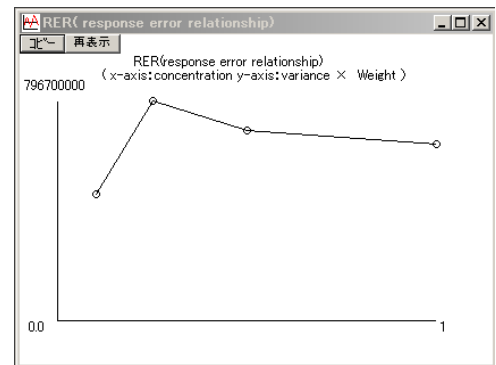
$1/x^2$



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。



$1/x^2$



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。

残差分析と推定誤差			
残差分析と推定誤差			
濃度 0.1			
逆推定した濃度(%)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
30449	28055.1823293172	2393.81767068279	0.1056944626
31173	28055.1823293172	3117.81767068279	0.1074167257
30373	28055.1823293172	2317.81767068279	0.1055136722
33817	28055.1823293172	5761.81767068279	0.1137063302
34354	28055.1823293172	6298.81767068279	0.1149837568
34785	28055.1823293172	6729.81767068279	0.1160090288
30280	28055.1823293172	2224.81767068279	0.1052924419
28060	28055.1823293172	4.81767068278714	0.1000114603
30355	28055.1823293172	2299.81767068279	0.1054708538

$1/x^2$

残差分析と推定誤差			
残差分析と推定誤差			
濃度 0.1			
逆推定した濃度(%)の精度			
平均値=	0.101363660175894		
s.d. =	5.26363543508725E-03		
c.v.% =	5.2		
測定値 y	推定値 y-hat	推定値 y-hatとの差	逆推定した濃度
30449	30956.8283076923	-607.828307692304	0.0987639753
31173	30956.8283076923	216.171692307697	0.1005304061
30373	30956.8283076923	-583.828307692304	0.09567499168
33817	30956.8283076923	2860.1716923077	0.1070178137
34354	30956.8283076923	3397.1716923077	0.1083354150
34785	30956.8283076923	3828.1716923077	0.1093929312
30280	30956.8283076923	-676.828307692304	0.0983393112
28060	30956.8283076923	-2896.8283076923	0.0928922443
30355	30956.8283076923	-601.828307692304	0.0985233333

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出来ます。

y = 42038x - 13982					y = 40756x - 9799				
残差分析と推定誤差		重み付け 無し			残差分析と推定誤差		重み付け 1/x <sup>2</sup>		
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					濃度(x)= 0.1 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.101364 s.d. = 5.26E-03 c.v.% = 5.2				
測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.	測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.
30449	28055	2394	0.106	5.7	30449	30957	-508	0.099	-1.3
31173	28055	3118	0.107	7.4	31173	30957	216	0.101	0.5
30373	28055	2318	0.106	5.5	30373	30957	-584	0.099	-1.4
33817	28055	5762	0.114	13.7	33817	30957	2860	0.107	7.0
34354	28055	6299	0.115	15.0	34354	30957	3397	0.108	8.3
34785	28055	6730	0.116	16.0	34785	30957	3828	0.109	9.4
30280	28055	2225	0.105	5.3	30280	30957	-677	0.098	-1.7
28060	28055	5	0.100	0.0	28060	30957	-2897	0.093	-7.1
30355	28055	2300	0.105	5.5	30355	30957	-602	0.099	-1.5
31480	28055	3425	0.108	8.2	31480	30957	523	0.101	1.3
濃度(x)= 0.25 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					濃度(x)= 0.25 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.239344 s.d. = 1.73E-02 c.v.% = 7.2				
測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.	測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.
84911	91112	-6201	0.235	-5.9	84911	92091	-7180	0.2324	-7.1
85804	91112	-5308	0.237	-5.1	85804	92091	-6287	0.2346	-6.2
84082	91112	-7030	0.233	-6.7	84082	92091	-8009	0.2303	-7.9
96466	91112	5354	0.263	5.1	96466	92091	4375	0.2607	4.3
92840	91112	1728	0.254	1.6	92840	92091	749	0.2518	0.7
80814	91112	-10298	0.226	-9.8	80814	92091	-11277	0.2223	-11.1
82304	91112	-8808	0.229	-8.4	82304	92091	-9787	0.2260	-9.6
80564	91112	-10548	0.225	-10.0	80564	92091	-11527	0.2217	-11.3
101585	91112	10473	0.275	10.0	101585	92091	9494	0.2733	9.3
88107	91112	-3005	0.243	-2.9	88107	92091	-3984	0.2402	-3.9
濃度(x)= 0.5 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					濃度(x)= 0.5 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 0.502571 s.d. = 0.032248 c.v.% = 6.4				
測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.	測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.
186362	196206	-9844	0.477	-4.7	186362	193980	-7618	0.4813	-3.7
191810	196206	-4396	0.490	-2.1	191810	193980	-2170	0.4947	-1.1
191885	196206	-4321	0.490	-2.1	191885	193980	-2095	0.4949	-1.0
217635	196206	21429	0.551	10.2	217635	193980	23655	0.5580	11.6
213935	196206	17729	0.542	8.4	213935	193980	19955	0.5490	9.8
184952	196206	-11254	0.473	-5.4	184952	193980	-9028	0.4778	-4.4
181699	196206	-14507	0.465	-6.9	181699	193980	-12281	0.4699	-6.0
180265	196206	-15941	0.462	-7.6	180265	193980	-13715	0.4663	-6.7
204428	196206	8222	0.520	3.9	204428	193980	10448	0.5256	5.1
197312	196206	1106	0.503	0.5	197312	193980	3332	0.5082	1.6
濃度(x)= 1 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 1.002578555 s.d. = 6.0E-02 c.v.% = 6					濃度(x)= 1 逆推定した濃度(x)の精度 平均値= 1.023845 s.d. = 6.22E-02 c.v.% = 6.1				
測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.	測定値 y	推定値 y <sup>^</sup>	推定値 y <sup>^</sup> との差	逆推定した濃度(x)	濃度(x)の%RE.
400984	406394	-5410	0.987	-1.3	400984	397760	3224	1.008	0.8
399847	406394	-6547	0.984	-1.6	399847	397760	2087	1.005	0.5
389802	406394	-16592	0.961	-4.0	389802	397760	-7958	0.980	-2.0
439615	406394	33221	1.079	7.9	439615	397760	41855	1.103	10.3
442153	406394	35759	1.085	8.5	442153	397760	44393	1.109	10.9
380838	406394	-25556	0.939	-6.1	380838	397760	-16922	0.958	-4.2
385393	406394	-21001	0.950	-5.0	385393	397760	-12367	0.970	-3.0
377203	406394	-29191	0.931	-6.9	377203	397760	-20557	0.950	-5.0
434438	406394	28044	1.067	6.7	434438	397760	36678	1.090	9.0
424506	406394	18112	1.043	4.3	424506	397760	26746	1.066	6.6

1次回帰重み付け  $1/x^2$  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。