

各サンプルの吸光度（IRMの出力）と実測データ（水分値、厚さ値、塗工量値）を実測にて求め、そのデータをそれぞれ（ $x_i, y_i$ ）とした時に検量線は下記のように求められます。

### 1. 検量線1次式の場合

$y = ax + b$ ……求める検量線

$$a = \frac{n \cdot \sum x_i \cdot y_i - \sum x_i \cdot \sum y_i}{n \cdot \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \qquad b = \frac{\sum y_i - a \cdot \sum x_i}{n}$$

となります。又、参考に標準偏差、相関関係を求める式は以下のようになります。

$$= \sqrt{\frac{\sum (ax_i - b)^2}{n - 2}}$$

$$= \frac{\sum x_i y_i - \frac{\sum x_i \cdot \sum y_i}{n}}{\sqrt{\sum x_i^2 - \frac{(\sum x_i)^2}{n}} \sqrt{\sum y_i^2 - \frac{(\sum y_i)^2}{n}}}$$

### 2. 検量線が多項式(2次以上)の場合

多項式を  $y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \dots + b_{k-1} x^{k-1}$  と表すと最小自乗法の定義（条件）にあてはめ、式を展開すると

$$\sum_{j=0}^{k-1} b_j \cdot A_{m,j} = B_m \quad (m = 0, 1, \dots, k-1)$$

ここで  $B_m = \sum_{i=1}^n y_i x_i^m$ 、 $A_{m,j} = \sum_{i=1}^n x_i^{m+j}$

これを行列で表すと

$$\begin{pmatrix} A_{0,0} & A_{0,1} & A_{0,2} & \dots & A_{0,k-1} \\ A_{1,0} & A_{1,1} & A_{1,2} & \dots & A_{1,k-1} \\ A_{2,0} & A_{2,1} & A_{2,2} & \dots & A_{2,k-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{k-1,0} & A_{k-1,1} & A_{k-1,2} & \dots & A_{k-1,k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_0 \\ B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_{k-1} \end{pmatrix}$$

という連立方程式となります。

ここで検量線多項式の係数  $b_0 \sim b_{k-1}$  を求めるには、掃き出し法という連立方程式の解法を用いますが、これを簡単には式で現わすのは難かしく、通常は、統計プログラムのサンプルプログラムを使って解を求めていきます。

\*\*\*\*\*参考\*\*\*\*\*

EXCELのグラフ処理機能にて、「散布図」を使ってグラフ作成後に「近似曲線の追加」を行えば、簡単に回帰式を求める事ができます。

以上