



用Excel解決農業研究資料

統計分析的方法(八) 檢量線

一、前言

檢量線 (calibration curve) 或譯為校正曲線，又稱標準曲線 (standard curve)，已成為分析檢測中的例行性工作。檢量線是標準物質的物理/化學性質在特定狀況下與儀器反應之間的函數關係，利用已知濃度的標準物質樣品建立檢量線之後，再以內插法來定量待測未知樣品的理化性質。本篇在說明如何利用Excel來進行檢量線的評估與繪製。

二、檢量線的評估

檢量線的評估，普遍利用迴歸方程式 (regression equation)。檢量線不一定是直線，欲建立反應P與標準樣品濃度C之間的檢量線，有以下四種可能：

- (1) 以P為縱座標，標準樣品濃度C為橫座標

$$P = a + bC$$

- (2) 以P的logit值為縱座標，標準樣品濃度C為橫座標

$$\text{logit}(P) = \log\left(\frac{P}{1-P}\right) = a + bC$$

- (3) 以P為縱座標，標準樣品濃度C的log或ln值為橫座標

$$P = a + b \log C \quad \text{或} \quad P = a + b \ln C$$

- (4) 以P的logit值為縱座標，標準樣品濃度C的log或ln值為橫座標

$$\text{logit}(P) = \log\left(\frac{P}{1-P}\right) = a + b \log C$$

或

$$\text{logit}(P) = \log\left(\frac{P}{1-P}\right) = a + b \ln C$$

上述迴歸方程式中的a及b分別為截距及斜率 (即迴歸係數)。第一種檢量線是P隨C呈現簡單的直線關係，第二種檢量線是P之logit值與C間有直線關係，第三種檢量線是P與C之對數 (log或ln) 值間有直線關係，而第四種檢量線是P之logit值與C之對數值間呈現直線關係。至於選用哪種指標、哪種曲線配合方法，還需要根據不同檢測項目和不同的要求來決定。若不確定應該採用哪種檢量線，可以四種都去嘗試，最後選出解釋能力最好的迴歸式。而迴歸方程式的解釋能力，一般以決定係數 (coefficient of determination, R^2) 來判斷， R^2 越接近於1，表示迴歸方程式解釋能力的滿意度越高。

作者：呂椿棠副研究員
連絡電話：04-23317127

C	P	C	logit P	logC	P	logC
0	0	0	0	0	0	0
6.25	0.12	6.25	=LOG10(B4/(1-B4))	=LOG10(A4)	0.12	=LOG10(A4)
12.5	0.2	12.5	=LOG10(B5/(1-B5))	=LOG10(A5)	0.2	=LOG10(A5)
25	0.23	25	=LOG10(B6/(1-B6))	=LOG10(A6)	0.23	=LOG10(A6)

三、利用Excel快速求得檢量線的程序

欲從上述四種可能的檢量線迴歸方程式中，選出一個最適合的檢量線，皆可利用Excel的「工具」中「資料分析」內所提供的「迴歸」選項進行簡單迴歸分析。但在此之前，若考慮第二、三、四種檢量線，則必須先分別就P或（與）C進行資料轉換（data transformation）。因此，完整的檢量線分析程序，必須包含三個步驟：資料轉換、迴歸方程式估計及線圖繪製，除非一開始就已經決定了第一種檢量線，才能省略資料轉換步驟。

現以一實例來說明，假設採用比色計的吸光度來測定植物組織中可溶性糖含量的資料如下：

糖濃度 ($\mu\text{g/L}$, C)	0	6.25	12.5	25	50	100	200
吸光度 (P)	0	0.12	0.2	0.23	0.27	0.32	0.38

（一）資料轉換

將吸光度P與糖濃度C的原始資料輸入Excel工作表內後，分別就P或（與）C進行資料轉換，以產生四種資料集，如（圖一）所示（其中P與C皆為0之數值無須任何轉換）。在資料轉換中所涉及的log或ln，本文試以10為底的log為例來分析，其Excel函數為LOG10（ ）。

（二）迴歸方程式之估計

在Excel「工具」的「資料分析」中選擇「迴歸」（圖二），分別就四種資料集個別進行迴歸分析（操作方法請詳閱參考文獻），分析結果經整理如下：

- (1) $P = 0.1359 + 0.0014C$, $R^2 = 0.6701$
- (2) $\text{logit } P = a + bC$ 迴歸式不顯著存在

$$(3) P = 0.0013 + 0.1626 \log C, R^2 = 0.9933$$

(4) $\text{logit } P = a + b \log C$ 迴歸式不顯著存在
由於只有第一、三種檢量線顯著存在，且以第三種檢量線的 R^2 最高，因此以此迴歸式最為適合，亦即吸光值P與log（糖濃度C）之間具有直線關係。

（三）檢量線圖之繪製

操作步驟說明如下：

首先利用滑鼠拉選欲製圖的資料範圍如（圖一）第三種檢量線資料範圍為G3：H9），然後點選Excel的「散佈圖」功能，以繪製出資料點的二維分布圖。

在圖中資料點上按滑鼠左鍵，使每個資料點都出現小選框後，再按滑鼠右鍵，於出現的輔助視窗內選擇「加入趨勢線」，如（圖三）-（A）所示。

在出現的「趨勢線格式」視窗中「趨勢線選項」畫面內，選擇「線性」（此為內設值），並勾選下方的「圖表上顯示公式」、「圖表上顯示R平方值」，然後按「關閉」，如（圖三）-（B）所示。此畫面顯示內容會因Excel版本不同而多少差異，但所應選擇的項目基本上都一樣，本文顯示畫面為Excel 2007版。

此時就會產生一個檢量線圖，內含資料點、迴歸線及公式。Excel將迴歸式以 $Y = bX + a$ 來呈現，此與 $Y = a + bX$ 並無不同，都可被接受，端視個人習慣。惟利用Excel所產生的公式之a與b數值，只顯示到小數點後3位數，若要增加位數，可直接於該公式文字框內直接修改數值，也能調整字體顏色大小、或增刪任何文字。最後可以利用Excel圖編輯功能進行圖的美化加工，如線條與資料標記之改變、加入座標標籤等。由於本例是選擇P與logC具直線關係的第三種檢量線，若單純以 $Y = 0.1626X + 0.0013$ 顯示，恐怕會讓人誤以為是第一種P與C的簡單直線

2	C	P		C	logit P		logC	P		logC
3	0	0		0	0		0	0		0
4	6.25	0.12		6.25	=LOG10(B4/(1-B4))		=LOG10(A4)	0.12		=LOG10(A4) =LOG10(B4/(1-B4))
5	12.5	0.2		12.5	=LOG10(B5/(1-B5))		=LOG10(A5)	0.2		=LOG10(A5) =LOG10(B5/(1-B5))
6	25	0.23		25	=LOG10(B6/(1-B6))		=LOG10(A6)	0.23		=LOG10(A6) =LOG10(B6/(1-B6))

迴歸方程式，因此建議橫座標標籤一定要清楚標明logC，且將迴歸式改用原變數符號來表達會更好，即寫成 $P=0.1626$

$\log C+0.0013$ ，可避免混淆。結果如（圖四）所示。由於在檢量線圖繪製過程中，利用「加入趨勢線」即能自動產生

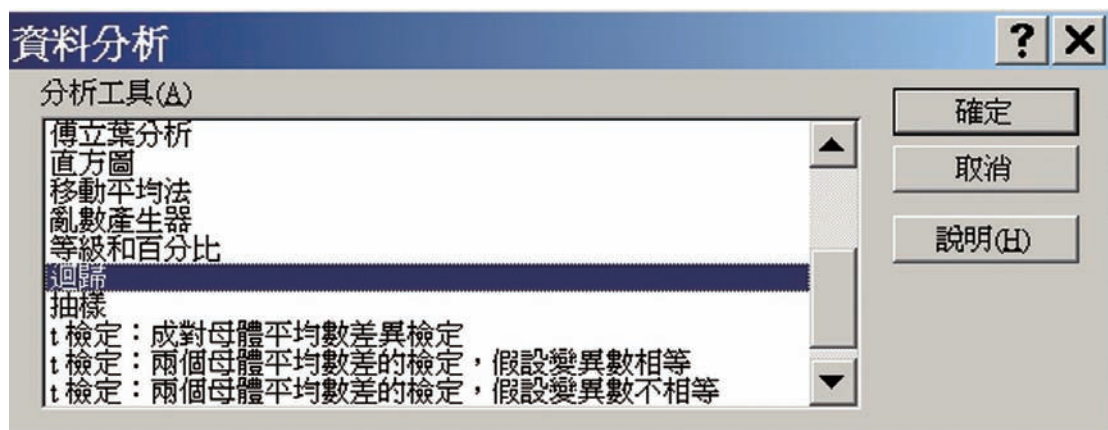
(A)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	
1	(1)			(2)			(3)			(4)		
2		C	P		C	logit P		logC	P		logC	logit P
3		0	0		0	0		0	0		0	0
4		6.25	0.12		6.25	=LOG10(B4/(1-B4))		=LOG10(A4)	0.12		=LOG10(A4)	=LOG10(B4/(1-B4))
5		12.5	0.2		12.5	=LOG10(B5/(1-B5))		=LOG10(A5)	0.2		=LOG10(A5)	=LOG10(B5/(1-B5))
6		25	0.23		25	=LOG10(B6/(1-B6))		=LOG10(A6)	0.23		=LOG10(A6)	=LOG10(B6/(1-B6))
7		50	0.27		50	=LOG10(B7/(1-B7))		=LOG10(A7)	0.27		=LOG10(A7)	=LOG10(B7/(1-B7))
8		100	0.32		100	=LOG10(B8/(1-B8))		=LOG10(A8)	0.32		=LOG10(A8)	=LOG10(B8/(1-B8))
9		200	0.38		200	=LOG10(B9/(1-B9))		=LOG10(A9)	0.38		=LOG10(A9)	=LOG10(B9/(1-B9))

(B)

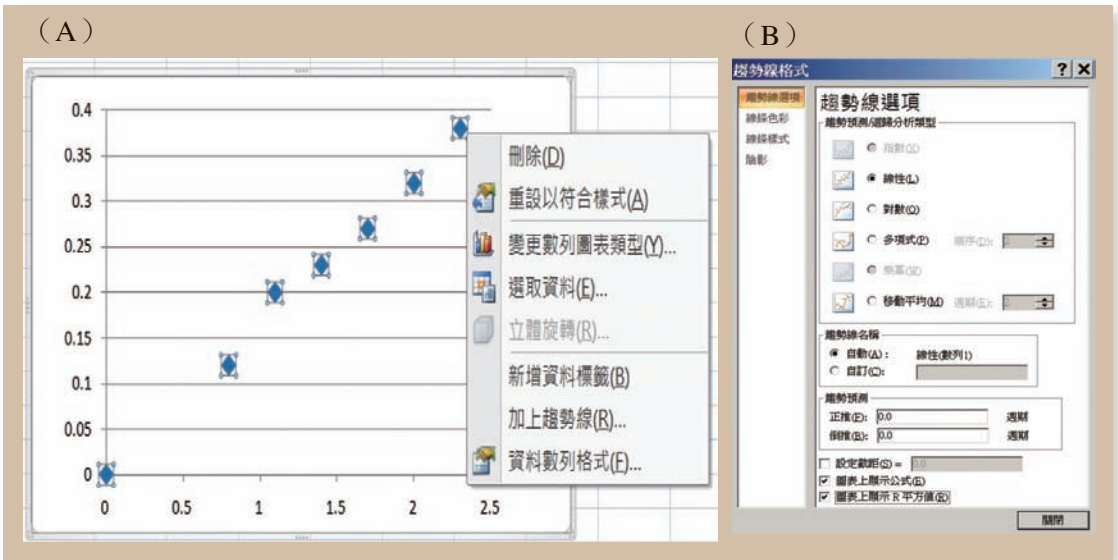
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	
1	(1)			(2)			(3)			(4)		
2		C	P		C	logit P		logC	P		logC	logit P
3		0	0		0	0		0	0		0	0
4		6.25	0.12		6.25	-0.8653		0.79588	0.12		0.79588	-0.8653
5		12.5	0.2		12.5	-0.60206		1.09691	0.2		1.09691	-0.60206
6		25	0.23		25	-0.52476		1.39794	0.23		1.39794	-0.52476
7		50	0.27		50	-0.43196		1.69897	0.27		1.69897	-0.43196
8		100	0.32		100	-0.32736		2	0.32		2	-0.32736
9		200	0.38		200	-0.21261		2.30103	0.38		2.30103	-0.21261

圖一、(A)用Excel的函數和公式進行資料轉換：(1)C與P之原始資料，(2)對P進行logit轉換，(3)對C進行log轉換，(4)同時進行C之log轉換及P之logit轉換。(B)轉換後的數值。

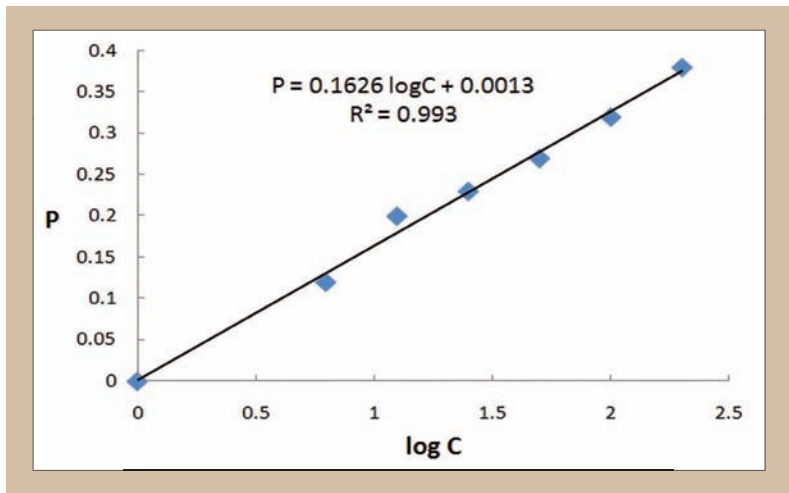


圖二、用Excel「工具」中的「資料分析」選擇「迴歸」，進行迴歸分析。

C	P	C	logit P	log C	P	log C
0	0	0	0	0	0	0
6.25	0.12	6.25	=LOG10(B4/(1-B4))	=LOG10(A4)	0.12	=LOG10(A4)
12.5	0.2	12.5	=LOG10(B5/(1-B5))	=LOG10(A5)	0.2	=LOG10(A5)
25	0.23	25	=LOG10(B6/(1-B6))	=LOG10(A6)	0.23	=LOG10(A6)



圖三、用Excel製作檢量線圖。(A)在散佈圖加入趨勢線，及(B)勾選適當的趨勢線選項。



圖四、檢量線圖之繪製結果。

迴歸方程式和 R^2 ，可能有人會質疑為何還要多此一舉先進行迴歸方程式估計？這是因為光從 R^2 值，並無法得知迴歸式是否顯著存在。因此，必須先透過「工具」之「資料分析」中的「迴歸」，同時根據迴歸分析的顯著性和 R^2 值，才能選出最適合的檢量線方程式。除非配合檢測項目和檢驗規範要求，一開始即已決定其中某一種檢量線，分析目的純粹

只在製作檢量線圖，如此迴歸方程式估計之程序就可省略。

四、參考文獻

呂秀英、魏夢麗、呂椿棠。2005。用Excel解決農業研究資料統計分析的方法（四）—相關與迴歸。農業試驗所技術服務季刊 67：27-30。