

JAERI-Data/Code

94-008



計量槽校正データ解析プログラム:VESCAL

1994年8月

柳澤宏司

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の間合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division, Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokaimura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1994

編集兼発行 日本原子力研究所  
印 刷 (株)原子力資料サービス

計量槽校正データ解析プログラム：VESCAL

日本原子力研究所東海研究所NUCEF試験室

柳澤 宏司

(1994年7月1日受理)

燃料サイクル安全工学研究施設 (NUCEF: Nuclear Fuel Cycle Safety Engineering Research Facility)の核物質計量管理に関して、溶液燃料計量槽の校正データを簡便に解析するための計算機プログラムを作成した。このプログラムは、計量槽内の液体の体積と液位とからなるデータに対して回帰分析を行い、これらの関係式(校正関数)を決定するための機能を備えている。

検証計算の結果、本プログラムで計算された偏回帰係数とその誤差、標準偏差、重相関係数、F-, t-分布累積確率密度等は汎用統計解析パッケージプログラムの計算結果と良好な一致を示した。

さらに、本プログラムはNUCEFのみならず他の核物質溶液を取り扱う施設での同様の解析においても有効な道具であると考えられる。

本書は、このプログラムの概要、計算手法、検証計算結果及び操作方法についてまとめたものである。

Vessel Calibration Date Analysis Program : VESCAL

Hiroshi YANAGISAWA

Department of NUCEF Project  
Tokai Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received July 1, 1994)

Regarding the nuclear material accountancy and control for NUCEF: Nuclear Fuel Cycle Safety Engineering Research Facility, a computational program is developed in order to easily carry out analyses on calibration data of solution fuel accountancy vessels. The program supports executing the regression analysis on the data both of liquid volume and level in the vessel, and determining relationships of them which are called calibration functions.

As a result of benchmark tests, it was proved that such quantities computed with the program as partial regression coefficients and their errors, standard deviation, multiple correlation, cumulative probability density of F- and t-distribution etc. well agreed with those by a statistical analysis program package which is widely used.

In addition, this program would be useful for carrying out the above-mentioned analyses at the other facilities handling the nuclear material solution as well as at NUCEF.

This paper describes summary of the program, computational methods employed in it, results of benchmark tests and operating procedures of the program.

Keywords: NUCEF, Nuclear Material Accountancy and Control,  
Vessel Calibration, Computational Program, Data Analysis,  
Regression Analysis, Calibration Function

## 目 次

1. はじめに .....	1
2. プログラム概要 .....	3
3. 計算手法 .....	9
3.1 多項式へのあてはめ .....	9
3.2 標準偏差と重相関係数 .....	11
3.3 F-検定 .....	12
3.4 t-検定 .....	12
3.5 信頼区間 .....	13
3.6 数値計算手法 .....	14
4. 検証計算結果 .....	19
4.1 回帰分析計算の検証 .....	19
4.2 F-, t-分布累積確率密度計算の検証 .....	34
5. 操作方法 .....	44
5.1 プログラムの起動とファイルの読み込み .....	44
5.2 データプロットに関する操作 .....	47
5.3 データ解析に関する操作 .....	50
6. おわりに .....	58
謝 辞 .....	58
参考文献 .....	59

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Summary of Program .....	3
3. Computational Method .....	9
3.1 Data Fitting to Polynomial Function.....	9
3.2 Standard Deviation and Multiple Correlation .....	11
3.3 F-test .....	12
3.4 t-test .....	12
3.5 Confidence Limit .....	13
3.6 Method of Numerical Analysis .....	14
4. Results of Benchmark Test .....	19
4.1 Verification of Regression Analysis .....	19
4.2 Verification of F-, t-distribution Cumulative Probability Density ...	34
5. Operating Procedures .....	44
5.1 Executing Program and File Open .....	44
5.2 Procedure for Data Plot .....	47
5.3 Procedure for Data Analysis .....	50
6. Conclusion .....	58
Acknowledgment .....	58
References .....	59

## 1. はじめに

現在、日本原子力研究所東海研究所において建設・整備が進められている燃料サイクル安全工学研究施設 (NUCEF: Nuclear Fuel Cycle Safety Engineering Research Facility) では、再処理施設等の核燃料サイクルバックエンドに関する研究開発が計画されており、最大 60 kg のプルトニウムを含む多量の溶液状の核物質を実験に使用する。<sup>[1,2]</sup>

NUCEF のように核燃料を溶液状態で取り扱う施設の核物質計量管理では、核物質のバルク測定が重要な位置を占める。ここで、バルク測定とは単位体としての計量ができない溶液等の核物質を対象として、これらのあるままとまりとしての体積又は重量を測定することをいい、サンプリング・分析によって決定される核物質濃度を乗じて目的とする核物質質量を算定する。従って、バルク測定の正確さは、最終評価量である実在庫 (Physical Inventory) 及び在庫差 (MUF: Material Unaccounted for) に直接的に影響を与える。

NUCEF のバルク測定は、工程内の溶液状核物質を定期的に計量槽に集積し、ディップチューブ式液位計により測定された液位を予め定めた校正関数 (液位と体積の関係式) によって体積に換算することを基本とする。<sup>[3]</sup>この測定方法では、液位測定の精度管理のみならず校正関数を予め精度良く決定しておくことが重要である。

校正関数を決定するためには先ず計量槽の校正を行う必要がある。これは、密度等の特性が良く分かっている液体 (通常、水又は硝酸が用いられる) を槽に投入し、この投入量 (重量又は体積) と液位に関するデータ取得することを基本とし、一般的に施設のホット運転開始以前 (初期校正: Initial Calibration) とホット運転後定期的に (再校正: Recalibration) 実施される。NUCEF では、合計18基の貯槽が核物質計量管理上の計量槽として定められており、この内将来設置予定の1基を除く全てについて初期校正を実施し、校正データを取得した。<sup>[4,5]</sup>

校正データを解析し校正関数を決定するためには、各種の統計解析的アプローチが必要であり、特にデータのあるモデル (校正関数) に対する回帰計算は必要不可欠な作業である。通常このような解析作業は信頼性の確認された汎用統計解析プログラムを利用して進められることが多いが、計量槽の校正データの解析に目的を限定した場合には、汎用性がむしろ作業工程の煩雑さを招くことになる。計量槽の校正データ解析では、槽の形状及び寸法を考慮して校正データをいくつかの領域に分割してそれぞれ異なるモデルに対する回帰計算を実施し、得られた結果を解釈してさらに分割方法を検討するというようないわば試行錯誤を繰り返すことになる。従って、この作業を効率的に実施するためには、作業内容を踏まえた専用の解析ツールが必要となる。特に NUCEF における計量槽は他の類似施設に比べて数が多く、今後の定期的な再校正によって得られるデータを解析する上で、専用ツールの開発は必要不可欠である。

今回作成したプログラム VESCAL: VESsel CALibration Data Analysis Program は、このような校正データの解析と校正関数の決定を簡便かつ効率的に行うことを目的とした専用の解析ツールである。本プログラムはパーソナル・コンピュータ上で実行することが

でき、最近のグラフィカル・ユーザー・インターフェイス<sup>\*1</sup>及びイベント・ドリブン式プログラム<sup>\*2</sup>を採用することにより操作性を高めている。前者の利点は、特別な計算機能を備えた環境を必要としない点であり、後者の利点は、試行錯誤が要求される解析において、汎用大型計算機等で利用されるバッチ処理よりも柔軟性をもって解析作業を進めることができるという点である。

このような特徴を有することにより、本プログラムは NUCEF に限らず他の類似の計測系によりバルク測定を行う施設での解析作業にも十分効果を発揮し、有効な道具となるものと考えられる。

本書は、このプログラムの概要、計算手法、検証計算結果及び使用方法についてまとめたものである。

---

\*1 従来のコマンド入力のみによる操作方法ではなく、グラフィック画面に対してマウス等の補助入力装置を積極的に利用して必要な操作を行う。操作者は複雑なコマンドを覚える必要はなくボタンを押す等の直観的な操作により作業を進めることができる。

\*2 ボタンを押す、マウスを移動する等の操作イベントに連動して各種の処理を実行する形式のプログラムであり、操作が会話形式で進められるため、操作方法の習得が容易である。上記のグラフィカル・ユーザー・インターフェイスとあいまって威力を発揮する。



## 2. プログラム概要

NUCEF の計量槽校正で得られた測定生データは、基本的に投入した校正液の重量、ディップチューブ式液位計による差圧、槽内の校正液温度である。これらの生データは、校正液の密度補正、重量測定に係る浮力補正を行って、槽内の溶液体積と液位の組み合わせからなる二次元データに加工される。プログラム VESCAL は、このようにして加工された液位と体積のデータ対に対して校正関数を簡便に決定することを目的として作成されている。

槽内の溶液体積と液位の関係は基本的には計量槽の形状に依存する。NUCEF を含めて、核燃料取扱施設の計量槽の多くは、臨界管理上の制限から円環形状あるいは平板形状で構成されるが、槽の底部に残存する溶液量を低減させるために通常傾斜した底板を有している。

Fig.2.1 は、典型的な円環槽の形状を示している。この図から分かるように高液位領域（直筒部分）では、槽内の溶液と体積の関係は概ね線型であるが、低液位領域（傾斜部分）では非線型の関係となる。従って、校正関数は少なくとも二つの領域に分けて決定されなければならない。また、貯槽は通常部材の溶接によって製作されるため、あてはめ精度の良い校正関数を取得するためには、溶接による槽の歪み等を考慮して適宜領域を分割する必要があり、解析者には、槽の構造と校正関数のあてはめ結果を比較しながら領域分割方法についての試行錯誤が要求される。

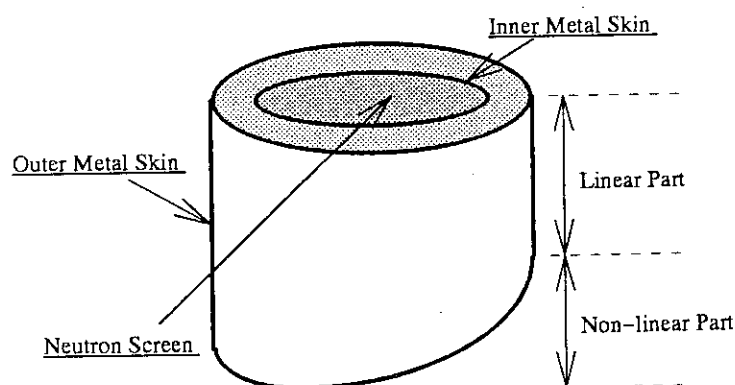


Fig.2.1 Typical Annular Vessel

プログラム VESCAL は、このような解析作業を簡便に進めるための道具であり、以下の基本的な機能を有している。

- 複数ランの校正データから校正関数を決定するために、同時に最大5つまでの校正データファイル（ファイルの書式は5. 操作方法を参照のこと）が入力可能である。
- 液位又は体積についてデータを最大5領域に分割して、各領域に対して最小二乗法によりそれぞれ最大5次の多項式モデルに対する回帰計算を一度に行

うことができる。また、相互に隣接する領域について多項式の交点を算出することができる。

- データの回帰モデルからの残差の標準偏差及び重相関係数を算出するとともに、残差の分散分析により F-分布累積確率密度及び t-分布累積確率密度を計算し、回帰モデル及び偏回帰係数の統計的有為性について検討することができる。

さらに、領域分割の目安を得るために、

- 差分プロット (Incremental Slope Plot) <sup>[6]</sup> 機能：  
体積又は液位の差分値（微分値）の計算とプロット。線型領域ではフラットなプロット、二次領域では直線的なプロットが得られる。領域境界及びあてはめるべき多項式の次数に関する情報が得られるが、差分近似に基づいているため、データ間隔がまばらで値が急激に変化する領域では、注意を要する。
- プロフィール・プロット (Profile Plot) <sup>[6]</sup> 機能：  
全てのデータに対する液位又は体積の一次回帰による残差のプロット。線型領域では直線的なプロットが得られる。主として、線型領域と非線型領域の境界点若しくは線型領域同士の境界点に関する情報が得られる。

を有している。また、解析作業を円滑に進めるために結果を迅速に表示、作図するとともにこれらをプリンタへ出力することができる。

本プログラムを実行するために必要となる条件を Table 2.1 に示す。なお、本プログラムはマイクロソフト製 Visual BASIC Version 2.0J で作成されているため、実行に当たってはランタイムライブラリとして VBRJP200.DLL 及び GRID.VBX という二種類のファイルが別途必要である。

Table 2.1 Conditions for Executing VESCAL Program

1. Operating System:	Microsoft Windows Version 3.1J,
2. Program Size:	About 110 KBytes,
3. Number of Files to be opened:	Max. 5 Files at once,
4. Number of Data Points per a File:	Max. 200 Points,
5. Printer:	Necessary if hard copy of graphs etc. is needed,
6. Mouse:	Necessary,
7. Screen Resolution:	1024 x 768 pixels is recommended,
8. Other:	VBRJP200.DLL and GRID.VBX are needed.

本プログラムの概略フローを Fig.2.2(1), (2), (3), (4) に示す。Fig.2.2(1) より、データ解析を行う場合には、差分プロットモード、プロフィール・プロットモード、多領域回帰分析モードの三種類の中から一つを選択する。差分プロットモードでは、Fig.2.2(2) に示されるように有限差分法によるデータ処理を行う。プロフィール・プロットモードと多領域回帰分析モードでは、Fig.2.2(3), (4) に示されているようにデータの多項式モデルへの回帰計算が行われる。両者の違いは、前者が1つの領域にしか対応していないのに対し後者は最大5つの領域についてそれぞれ異なるモデルに対する回帰計算を一度に実施できることである。

プログラムの中核部分である回帰分析用のモジュールは、Fig.2.2(3), (4)右に示されているように大別して二種類のコードモジュールから構成されており、一つは多項式モデルにおける偏回帰係数を計算するためのフィッティング・モジュールであり、もう一つは標準偏差、重相関係数及びF-, t-分布累積確率密度を計算し統計検定を行うための統計解析モジュールである。これらのモジュールは、プログラム内部のパラメータ設定により、プロフィール・プロットモードと多領域回帰分析モードで共通して利用される。

通常解析者は、差分プロットモード又はプロフィール・プロットモードを選択し、先ず校正データの特長（線型領域及び非線型領域の範囲）を把握するとともに各領域での回帰モデルを設定する。次に多領域回帰分析モードにより領域毎の回帰計算を実施し、モデルの妥当性を検討する。この結果が予め解析者が設定した基準（例えば回帰モデルからの残差の大きさ等）を満足しない場合には、領域の範囲及び回帰モデルを再設定し、計算を繰り返すことになる。

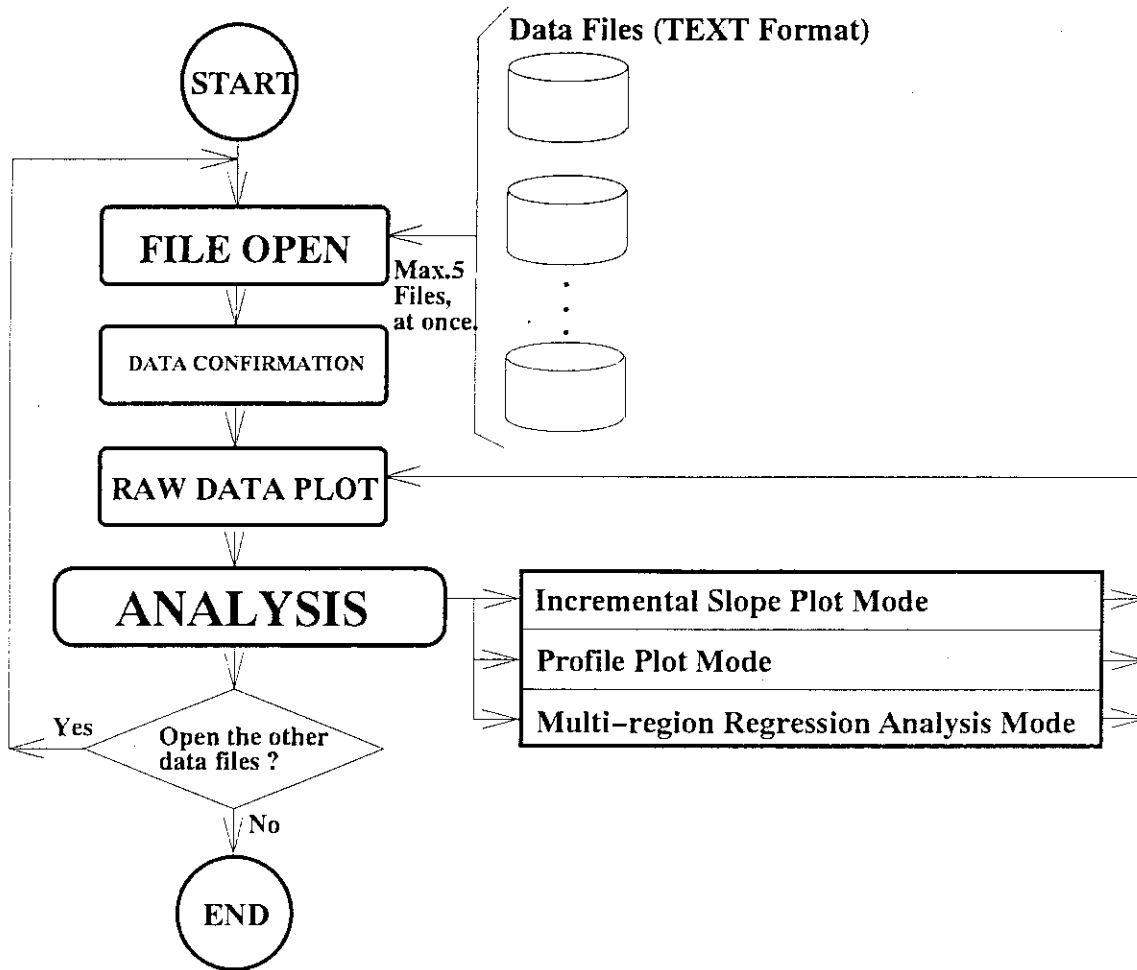


Fig.2.2(1) Summary Flow of VESCAL Program (1)  
 - overall flow of the program -

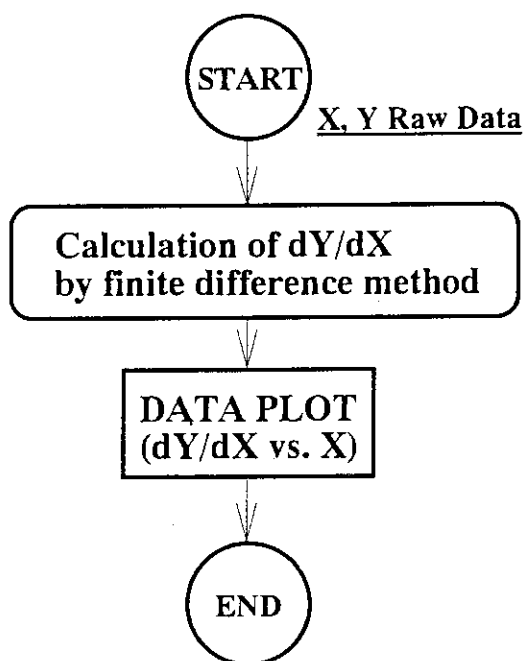


Fig.2.2(2) Summary Flow of VESCAL Program (2)  
- incremental slope plot mode -

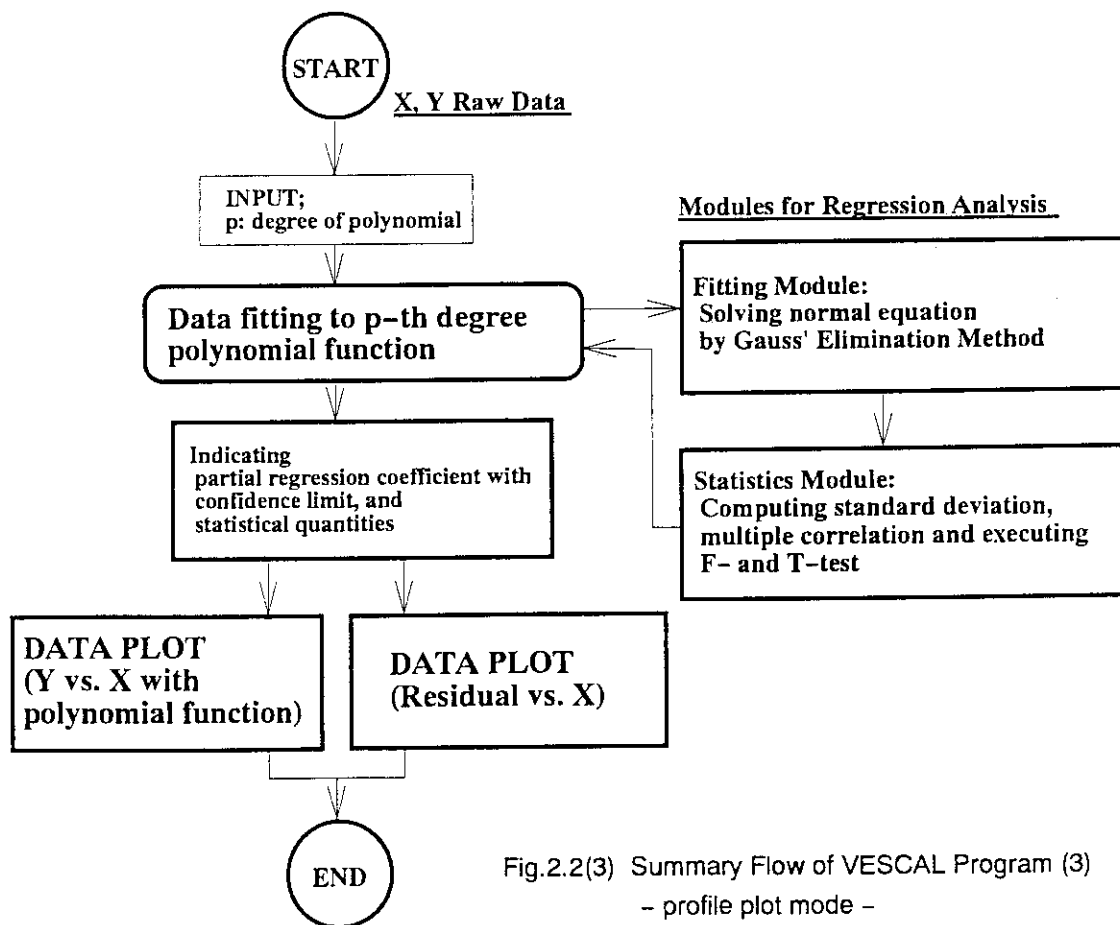


Fig.2.2(3) Summary Flow of VESCAL Program (3)  
- profile plot mode -

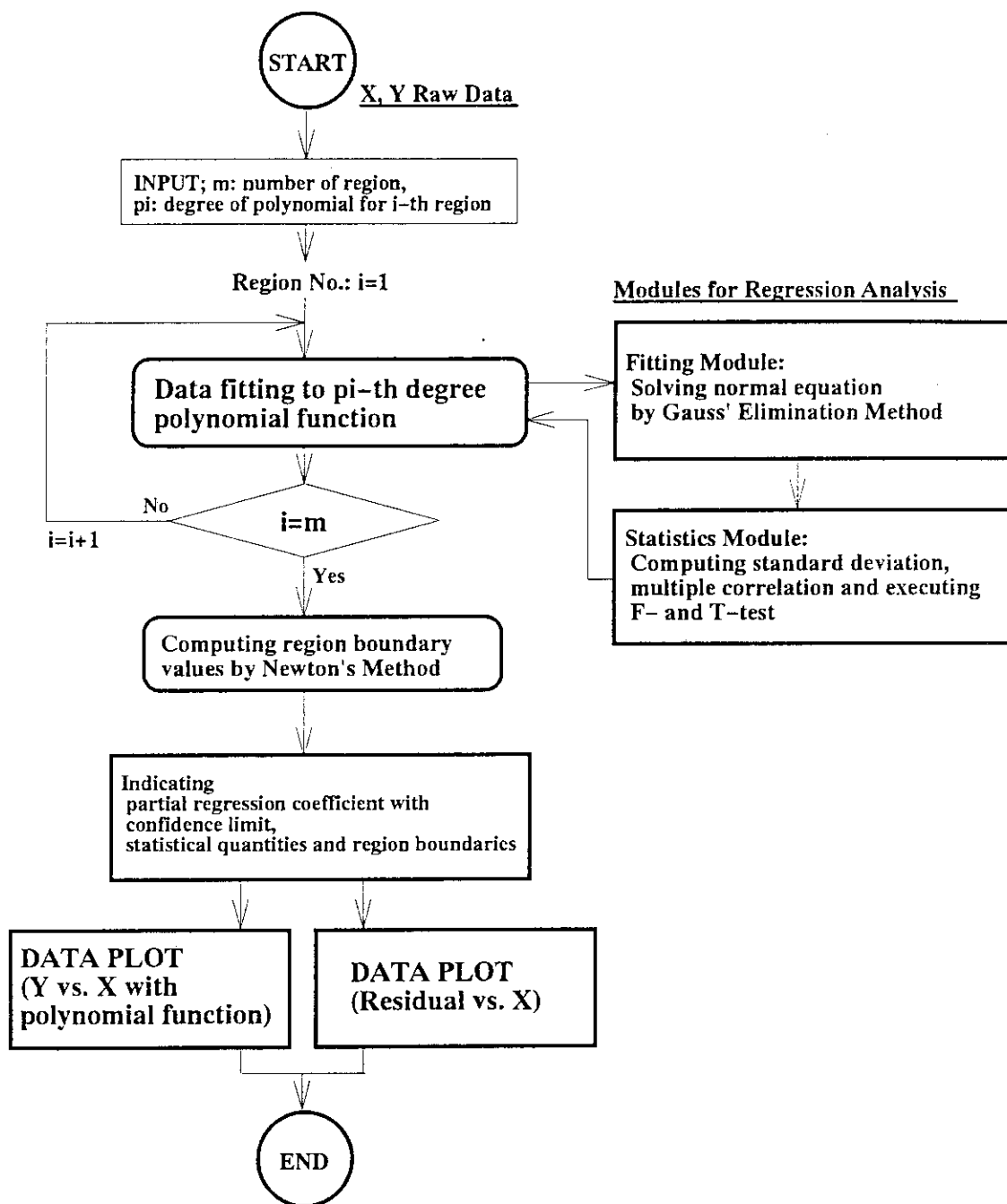


Fig.2.2(4) Summary Flow of VESCAL Program (4)  
- multi-region regression analysis mode -

### 3. 計 算 手 法

本章は、プログラム VESCAL の計算手法について説明する。2. プログラム概要 で説明したように、VESCAL の数値計算上の中核部分はデータの回帰分析 (Regression Analysis) に係るコードモジュールである。ここでは先ず回帰分析の方法 [7] について簡単に紹介し、上記のコードモジュールで採用している数値計算方法について説明する。

#### 3.1 多項式へのあてはめ

説明変数： $x$  (液位又は体積) と目的変数： $y$  (体積又は液位) に対して以下の回帰モデルを仮定する。

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots + \beta_p x^p \quad (3.1.1)$$

ここで、 $\beta_i, i=0,1,\dots,p$  はこの多項式モデルにおける偏回帰係数 (Partial Regression Coefficient) である。 $x$  と  $y$  の観測データ対として  $(x_\alpha, y_\alpha), \alpha=1,2,3,\dots,n$  が得られている場合、これらのデータ対に対する関係式は、(3.1.1)式より以下のように表される。

$$\begin{aligned} y_1 &= \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_1^2 + \cdots + \beta_p x_1^p + \varepsilon_1 \\ y_2 &= \beta_0 + \beta_1 x_2 + \beta_2 x_2^2 + \cdots + \beta_p x_2^p + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ y_{n-1} &= \beta_0 + \beta_1 x_{n-1} + \beta_2 x_{n-1}^2 + \cdots + \beta_p x_{n-1}^p + \varepsilon_{n-1} \\ y_n &= \beta_0 + \beta_1 x_n + \beta_2 x_n^2 + \cdots + \beta_p x_n^p + \varepsilon_n \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

ここで、 $\varepsilon_\alpha, \alpha=1,2,3,\dots,n$  は回帰モデルからの残差 (Residual) を表し、この残差の平方和が最小となるような偏回帰係数を求めることを考える。この方法は最小二乗推定法と呼ばれ、具体的に残差平方和の偏回帰係数に対する微分値をゼロとした方程式 (正規方程式: Normal Equation) を解くことにより係数を推定する。このような方法によって得られる偏回帰係数の推定値 (最小二乗推定値) を  $b_i, i=0,1,\dots,p$  とすると、正規方程式は (3.1.3)式に示すように与えられる。

$$\begin{aligned}
 \sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha} &= b_0 \cdot n + b_1 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha} + b_2 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^2 + \cdots + b_p \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^p \\
 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha} y_{\alpha} &= b_0 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha} + b_1 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^2 + b_2 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^3 + \cdots + b_p \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{p+1} \\
 &\vdots \\
 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{p-1} y_{\alpha} &= b_0 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{p-1} + b_1 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^p + b_2 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{p+1} + \cdots + b_p \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{2p-1} \\
 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^p y_{\alpha} &= b_0 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^p + b_1 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{p+1} + b_2 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{p+2} + \cdots + b_p \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{2p}
 \end{aligned}$$

(3.1.3)

ここで、正規方程式の第1式を  $b_0$  について整理する。

$$b_0 = \frac{\sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha}}{n} - \left( \frac{b_1 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}}{n} + \frac{b_2 \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^2}{n} + \cdots + \frac{b_p \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^p}{n} \right)$$

(3.1.4)

この  $b_0$  を(3.1.3)式第2式以下に代入して整理すると、正規方程式は以下のように変形される。

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1,p-1} & S_{1p} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2,p-1} & S_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ S_{p-1,1} & S_{p-1,2} & \cdots & S_{p-1,p-1} & S_{p-1,p} \\ S_{p1} & S_{p2} & \cdots & S_{pp-1} & S_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{p-1} \\ b_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{Y1} \\ S_{Y2} \\ \vdots \\ S_{Y,p-1} \\ S_{Yp} \end{pmatrix}$$

$$S_{ij} = \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^{i+j} - \frac{\left( \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^i \right) \left( \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^j \right)}{n} \quad (i, j = 1, 2, 3, \dots, p)$$

$$S_{Yi} = \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^i \cdot y_{\alpha} - \frac{\left( \sum_{\alpha=1}^n x_{\alpha}^i \right) \left( \sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha} \right)}{n} \quad (i = 1, 2, 3, \dots, p)$$

(3.1.5)



(3.1.5)式の連立一次方程式を解くことにより、偏回帰係数の最小二乗推定値  $b_i$  が決定される。[7]

### 3.2 標準偏差と重相関係数

正規方程式を解くことによって得られた多項式モデルに対する目的変数:  $y$  の残差の大きさを評価するために、並びに観測データ対に対するモデルの適性を確認するために、それぞれ標準偏差 (Standard Deviation)、重相関係数 (Multiple Correlation) という指標が有効である。残差の標準偏差: SD は残差平方和を自由度 (Degree of Freedom)  $n - (p+1)$  で除したものの平方根であり、次式で定義される。

$$\begin{aligned} SD &= \sqrt{\frac{S_e}{n - (p+1)}} \\ &= \sqrt{\frac{\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2}{n - (p+1)}} = \sqrt{\frac{S_{yy} - \sum_{i=1}^p b_i \cdot S_{y_i}}{n - (p+1)}} \end{aligned}$$

$$Y_{\alpha} = \sum_{i=0}^p b_i \cdot x_{\alpha}^i, \quad S_{yy} = \sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - \bar{y})^2, \quad \bar{y} = \frac{\sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha}}{n}$$

(3.2.1)

ここで、 $Y_{\alpha}$  は得られた回帰モデルに観測データ  $x_{\alpha}$  を代入して得られた値を表す。標準偏差は、残差の平均的な大きさを検討するのに有効である。

一方、重相関係数:  $R$  は次式で定義され、普通の相関係数とは異なり常に正の値となる。[7] この値が1に近いほど、観測データ対をよく表現したモデルであることを示す。通常計量槽の校正データに対しては、よほど測定データがばらつかない限り、あるいは強制的に高次の多項式にあてはめることをしない限り、重相関係数が1よりも著しく小さい値となることは滅多にない。

$$R = \frac{\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - \bar{y})(Y_{\alpha} - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - \bar{y})^2 \sum_{\alpha=1}^n (Y_{\alpha} - \bar{Y})^2}} = \sqrt{1 - \frac{S_e}{S_{yy}}}, \quad \bar{Y} = \frac{\sum_{\alpha=1}^n Y_{\alpha}}{n}$$

(3.2.2)

### 3.3 F-検定

得られた多項式モデルの統計的有為性は、F-検定 (F-test) により検定することができる。いま、帰無仮説 (Null Hypothesis) として、 $\beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_p = 0$  即ち「x の 1 次以上の項は y の説明に全く役をなさない。」と仮定すると、(3.3.1)式に示す分散比 F は自由度 (p, n-(p+1)) の F-分布に従う。<sup>[7]</sup>ここで、(3.3.1)式分母は多項式モデルに対する観測値:  $y_\alpha$  の残差平方和を自由度 (p 次多項式では、偏回帰係数の数は合計 p+1 個であるため、この場合の自由度は n-(p+1) となる) で除したものであり、分子は多項式モデルによる回帰推定値:  $Y_\alpha$  とこれらの平均値との差の平方和を自由度 (差をとることによって定数項が消去され、自由度は (p+1)-1=p となる) で除したものである。この分散比 F に関して、有為水準 (Significance Level)  $\alpha$  に対する  $F(p, n-(p+1); \alpha)$  の値と比較して、有為性の検定を行うことができる。

$$F = \frac{\frac{\sum_{\alpha=1}^n (Y_\alpha - \bar{Y})^2}{p}}{\frac{\sum_{\alpha=1}^n (y_\alpha - Y_\alpha)^2}{n-(p+1)}} = \frac{\frac{\sum_{i=1}^p b_i \cdot S_{Y_i}}{p}}{\frac{S_{yy} - \sum_{i=1}^p b_i \cdot S_{Y_i}}{n-(p+1)}} \quad (3.3.1)$$

プログラム VESCAL では、分散比 F に対する自由度 (p, n-(p+1)) の F-分布関数の累積確率密度 (Cumulative Probability Density) を計算しその値を表示する。従って、この累積確率密度が  $1-\alpha$  よりも大きい場合には上記の帰無仮説は棄却され、x の 1 次以上の項は y を説明するうえで統計的に意味のあるものといえる。

計量槽校正データの場合、得られた多項式モデルのまわりの観測データのばらつきがよほど大きくない場合には、通常  $\alpha = 0.05$  (95%信頼確率)で上記の帰無仮説は棄却される。

### 3.4 t-検定

個々の偏回帰係数の統計的有為性は、t-検定 (t-test) により検定することができる。いま、帰無仮説として、 $\beta_i = 0$  ( $i=1,2,3,\dots,p$ ) 即ち「y の説明に x の第 i 次の項には独自の役割がない。」と仮定すると、以下に示す t 値は自由度 n-(p+1) の t-分布に従う。<sup>[7]</sup>そこで、F-検定と同様に有為水準  $\alpha$  に対する  $t(n-(p+1); \alpha)$  の値と比較して、有為性の検定を行うことができる。

$$t = \frac{b_i - \beta_i}{\sqrt{S_{ii}^{-1} \cdot V_e}} = \frac{b_i}{\sqrt{S_{ii}^{-1} \cdot V_e}} \quad (\beta_i = 0) \quad (i = 1, 2, 3, \dots, p) \quad (3.4.1)$$

ここで、 $S_{ii}^{-1}$  は(3.1.5)式の係数行列  $[S_{ij}]$  の逆行列 (Inverse Matrix) の対角要素を表す。また、 $V_e$  は多項式モデルに対する目的変数:  $y$  の残差の平方和を自由度で除したものであり、次式で定義されるものである。

$$V_e = (SD)^2 = \frac{\sum_{\alpha=1}^n (y_\alpha - Y_\alpha)^2}{n - (p+1)} \quad (3.4.2)$$

一方、定数項については、帰無仮説:  $\beta_0 = 0$  のもと以下の  $t$  値が自由度  $n - (p+1)$  の  $t$ -分布に従うことを利用して有為性の検討を行う。<sup>[7]</sup>

$$t = \frac{b_0 - \beta_0}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \bar{x}^i \cdot \bar{x}^j \cdot S_{ij}^{-1}\right) V_e}} = \frac{b_0}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \bar{x}^i \cdot \bar{x}^j \cdot S_{ij}^{-1}\right) V_e}} \quad (\beta_0 = 0) \quad (3.4.3)$$

$$\bar{x}^i = \frac{\sum_{\alpha=1}^n x_\alpha^i}{n}$$

プログラム VESCAL では、個々の偏回帰係数についてそれぞれの  $t$  値に対する自由度  $n - (p+1)$  の  $t$ -分布関数の累積確率密度を計算しその値を表示する。従って、この累積確率密度が  $1 - \alpha$  よりも大きい場合には、上記の帰無仮説は棄却され、検定の対象とした偏回帰係数は統計的に意味のあるものといえる。

### 3.5 信頼区間

プログラム VESCAL では、有為水準:  $\alpha$  を入力データとして与えて計算される  $t$ -分布百分率点  $t(n - (p+1); \alpha)$  より、偏回帰係数及び回帰推定値の信頼区間を計算する。

偏回帰係数の信頼区間は、

$$b_i \pm t(n - (p+1); \alpha) \cdot \sqrt{S_{ii}^{-1} \cdot V_e}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots, p)$$

$$b_0 \pm t(n - (p+1); \alpha) \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{n} + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \bar{x}^i \cdot \bar{x}^j \cdot S_{ij}^{-1}\right) V_e} \quad (3.5.1)$$

で計算され、一方回帰推定値の信頼区間は次式で計算される。[7]

$$y \pm t(n-(p+1); \alpha) \cdot \sqrt{\left\{ \frac{1}{n} + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p (x^i - \bar{x}^i)(x^j - \bar{x}^j) S_{ij}^{-1} \right\} V_e} \quad (3.5.2)$$

なお、プログラム VESCAL では入力データとして  $\alpha=0$  と指定すると、 $t(n-(p+1); \alpha)$  を強制的に 1 に置き換えて上記の信頼区間の計算を行う。

### 3.6 数値計算手法

ここでは、プログラム VESCAL で採用している数値計算手法について、主として回帰分析に係る計算手法を中心として紹介する。

#### 正規方程式の解法

(3.1.5)式の正規方程式は、ガウスの消去法 (Gauss' Elimination Method) によって解かれる。ガウスの消去法とは、連立一次方程式の解法の一つである加減法を組織化したものであり、係数行列を上三角行列 (Upper Triangular Matrix) に変形するための前進消去 (Forward Elimination) と解を決定するための後退代入 (Backward Substitution) とから構成される。

前進消去では、(3.1.5)式の左辺係数行列及び右辺定数ベクトルに対して、先ず第 1 列目について第 2 行目以降の各要素をゼロとするために以下の変形操作を行う。

$$S_{ij} \leftarrow S_{ij} - S_{1j} \frac{S_{i1}}{S_{11}}, \quad S_{y_i} \leftarrow S_{y_i} - S_{y_1} \frac{S_{i1}}{S_{11}} \quad (i = 2, 3, \dots, p; j = 1, 2, \dots, p) \quad (3.6.1)$$

次に、第 2 列目について第 3 行目以降の各要素をゼロとするために、

$$S_{ij} \leftarrow S_{ij} - S_{2j} \frac{S_{i2}}{S_{22}}, \quad S_{y_i} \leftarrow S_{y_i} - S_{y_2} \frac{S_{i2}}{S_{22}} \quad (i = 3, 4, \dots, p; j = 2, 3, \dots, p) \quad (3.6.2)$$

と変形する。以下同様の操作を繰り返すことにより正規方程式は、次式のような上三角行列を係数とする式に変形することができる。

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1p-1} & S_{1p} \\ 0 & S_{22} & \cdots & S_{2p-1} & S_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & S_{p-1p-1} & S_{p-1p} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & S_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{p-1} \\ b_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{Y1} \\ S_{Y2} \\ \vdots \\ S_{Yp-1} \\ S_{Yp} \end{pmatrix} \quad (3.6.3)$$

この変形操作で注意すべき点は、(3.6.1)式及び(3.6.2)式から明らかなように対角要素がゼロの場合には、計算できないことである。仮にゼロでなくても絶対値がゼロに近い小さい値の場合には計算精度が著しく低下する。この問題点を回避するためにプログラム VESCAL では、上記の変形操作の過程で行の入替え操作を適宜行い、対角要素の絶対値ができるだけ大きい値となるようにしている。この入替え操作はピボットイング (Pivoting) と呼ばれる。

以上の操作により変形された正規方程式は、後退代入により偏回帰係数  $b_i$  を計算する。これは、(3.6.3)式を最下行から順番に代入演算を行う操作であり、

$$b_p = \frac{S_{Yp}}{S_{pp}}, \quad b_{p-1} = \frac{S_{Yp-1} - S_{p-1p} \cdot b_p}{S_{p-1p-1}}, \quad \dots \quad (3.6.4)$$

という操作を繰り返すことにより  $b_i$  を得ることができる。このようにして得られた偏回帰係数より、定数項  $b_0$  は(3.1.4)式を利用して計算する。

#### 正規方程式係数行列の逆行列の計算

(3.1.5)式の正規方程式の係数行列  $[S_{ij}]$  の逆行列  $[S_{ij}^{-1}]$  は、やはりガウスの消去法によって計算することができる。これは、 $[S_{ij}]$  と  $[S_{ij}^{-1}]$  の積が単位行列となる性質を利用したものであり、次式の行列方程式に対してピボットイングによる行の入替え操作を併用したガウスの消去法を適用することにより、 $[S_{ij}^{-1}]$  を計算する。

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1p-1} & S_{1p} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2p-1} & S_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ S_{p-11} & S_{p-12} & \cdots & S_{p-1p-1} & S_{p-1p} \\ S_{p1} & S_{p2} & \cdots & S_{pp-1} & S_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11}^{-1} & S_{12}^{-1} & \cdots & S_{1p-1}^{-1} & S_{1p}^{-1} \\ S_{21}^{-1} & S_{22}^{-1} & \cdots & S_{2p-1}^{-1} & S_{2p}^{-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ S_{p-11}^{-1} & S_{p-12}^{-1} & \cdots & S_{p-1p-1}^{-1} & S_{p-1p}^{-1} \\ S_{p1}^{-1} & S_{p2}^{-1} & \cdots & S_{pp-1}^{-1} & S_{pp}^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.6.5)$$

#### F-分布累積確率密度の計算

F-分布累積確率密度：  $Q(F|v_1, v_2)$  (確率密度関数のF値から無限大までの積分

量)は、以下の多項式展開形<sup>[8]</sup>を利用して計算する。

$$Q(F|v_1, v_2) = \begin{cases} x^{\frac{v_2}{2}} \left[ 1 + \frac{v_2}{2}(1-x) + \frac{v_2(v_2+2)}{2 \cdot 4}(1-x)^2 + \dots \right. \\ \left. + \frac{v_2(v_2+2) \cdots (v_2+v_1-4)}{2 \cdot 4 \cdots (v_1-2)} (1-x)^{\frac{v_1-2}{2}} \right] & (v_1 \text{ even}) \\ 1 - (1-x)^{\frac{v_1}{2}} \left[ 1 + \frac{v_1}{2}x + \frac{v_1(v_1+2)}{2 \cdot 4}x^2 + \dots \right. \\ \left. + \frac{v_1(v_1+2) \cdots (v_1+v_2-4)}{2 \cdot 4 \cdots (v_2-2)} x^{\frac{v_2-2}{2}} \right] & (v_2 \text{ even}) \\ 1 - A(t|v_2) + \beta(v_1, v_2) & (v_1, v_2 \text{ odd}) \end{cases}$$

(3.6.6)

ここで、 $x, A(t|v_2), \beta(v_1, v_2)$  は、次式で定義される。

$$x = \frac{v_2}{v_2 + v_1 F}$$

(3.6.7)

$$A(t|v_2) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left\{ \theta + \sin \theta \left[ \cos \theta + \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \dots + \frac{2 \cdot 4 \cdots (v_2-3)}{3 \cdot 5 \cdots (v_2-2)} \cos^{v_2-2} \theta \right] \right\} \\ \text{for } v_2 > 1 \\ 2\theta/\pi \quad \text{for } v_2 = 1 \end{cases}$$

(3.6.8)

$$\beta(v_1, v_2) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\left(\frac{v_2-1}{2}\right)!}{\left(\frac{v_2-2}{2}\right)!} \sin \theta \cos^{v_2} \theta \times \\ \times \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{v_2+1}{3} + \dots \\ + \frac{(v_2+1)(v_2+3)\dots(v_1+v_2-4) \sin^{v_1-3} \theta}{3 \cdot 5 \dots (v_1-2)} \end{array} \right\} & (\text{for } v_2 > 1) \\ 0 & (\text{for } v_1 = 1) \end{cases} \quad (3.6.9)$$

さらに、(3.6.8)式及び(3.6.9)式中にあらわれる  $\theta$  は次式で定義される。

$$\theta = \arctan \sqrt{\frac{v_1}{v_2}} F \quad (3.6.10)$$

#### t-分布累積確率密度の計算

t-分布累積確率密度：  $A(t|v)$  (確率密度関数の  $-t$  値から  $+t$  値までの積分量) は、以下の多項式展開形 [8] を利用して計算する。

$$A(t|v) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left\{ \theta + \sin \theta \left[ \cos \theta + \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \dots + \frac{2 \cdot 4 \dots (v-3)}{3 \cdot 5 \dots (v-2)} \cos^{v-2} \theta \right] \right\} & (\text{for } v > 1 \text{ and odd}) \\ 2\theta / \pi & (\text{for } v = 1) \end{cases} \quad (3.6.11)$$

$$A(t|v) = \sin \theta \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{1}{2} \cos^2 \theta + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} \cos^4 \theta + \dots \\ + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (v-3)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \dots (v-2)} \cos^{v-2} \theta \end{array} \right\} \quad (v \text{ even}) \quad (3.6.12)$$

ここで、(3.6.11)式及び(3.6.12)式中にあらわれる  $\theta$  は次式で定義される。

$$\theta = \arctan \frac{t}{\sqrt{v}} \quad (3.6.13)$$

#### t-分布百分率点の計算

信頼区間の評価に用いる t-分布百分率点  $t(n-(p+1); \alpha)$  は、(3.6.11)式又は(3.6.12)式で与えられる t-分布累積確率密度を用いて二分法 (Bisection Method, はさみうち法とも呼ばれる) により計算される。

まず、t の初期値  $t_L=1$ ,  $t_U=1000000$  に対してそれぞれ、 $P_L=[1-A(t_L|n-(p+1))]-\alpha$  と  $P_U=[1-A(t_U|n-(p+1))]-\alpha$  を計算し、さらにこれら t 値の midpoint  $t=(t_L+t_U)/2$  に対して  $P=[1-A(t|n-(p+1))]-\alpha$  を計算する。

ここで、 $P_L \times P$  の値がゼロもしくは負の場合には、 $t_L$  はそのまま  $t_U=t$  と置き換える。一方、 $P_U \times P$  の値がゼロもしくは負の場合には、 $t_U$  はそのまま  $t_L=t$  と置き換える。この操作を  $t_L$  と t の相対差の絶対値及び  $t_U$  と t の相対差の絶対値が 0.000001 以下となるまで繰り返す。このような反復計算の結果収束した t 値を百分率点  $t(n-(p+1); \alpha)$  としている。

#### 多項式交点の計算

プログラム VESCAL では、多領域回帰分析によって決定された多項式について、相互に隣接する領域の多項式の交点を算出し、この X 座標点を領域境界値として設定する (4.3節(3)多領域回帰分析モード 参照)。相互に隣接する領域に対して得られた多項式の交点は、ニュートン法 (Newton's Method) によって計算する。第 i 領域の多項式を  $f_i(x)$ 、第 i+1 領域の多項式を  $f_{i+1}(x)$  とすると、x の初期値を入力境界値として、

$$x \leftarrow x - \frac{g(x)}{d\{g(x)\}}, \quad g(x) = f_i(x) - f_{i+1}(x) \quad (3.6.14)$$

という反復計算を行う。各反復ステップにおける x の相対差の絶対値が 0.000001 以下となった時点での x 値を交点の X 座標とする。なお、反復回数が 200 回を超えた場合には、計算を中断し交点がないものとして処理する。



## 4. 検証計算結果

本章では、プログラム VESCAL の検証計算結果について示す。ここでは先ず第3章で解説したプログラムの回帰分析機能全般に関するテスト結果を示し、続いて F-, t-分布関数の累積確率密度の計算に関するテスト結果を示す。

前者では、三種類のベンチマーク問題を設定して、汎用統計解析パッケージプログラムとの比較を行った。比較検証の基準としたのは市販の汎用統計解析パッケージプログラム "STATISTICA for Windows Release 4.0 (米国 StatSoft 社製、以下 STATISTICA と略称する)" である。なお、STATISTICA 自身の信頼性については、StatSoft 社の解説資料によると各種のベンチマークテストにより計算結果の信頼性が検証されており、例として統計解析プログラムあるいは数値解析プログラムのテスト用に公開されているベンチマークデータセット(重回帰分析一般問題、多項式モデルへの回帰問題を含む)<sup>[9]</sup>に対する検証計算を実施し良好な結果が得られている。

また、後者は累積確率密度を計算するモジュール単体のテストであり、VESCAL 内蔵モジュールによる計算結果と文献[8]の百分率点表との比較を示す。

### 4.1 回帰分析計算の検証

以下の三つのケースについて、プログラム VESCAL と汎用統計解析パッケージプログラム STATISTICA の計算結果を比較した。比較対象は、

- ・標準偏差 (Standard Deviation)、
- ・重相関係数 (Multiple Correlation)、
- ・偏回帰係数 (Partial Regression Coefficient) とその誤差、
- ・F-分布累積確率密度  
(Cumulative Probability Density of F-distribution:  $1-Q(F|v_1, v_2)$ )、
- ・t-分布累積確率密度  
(Cumulative Probability Density of t-distribution:  $A(t|v)$ )

である。これらの定義等については、第3章を参照のこと。

#### ケース1：模擬データによる検証(1)

目的： 主として F-分布累積確率密度の計算結果の検証

方法：  $y=a$  ( $a=1,5,10$ )の定数関数をベースに正規乱数を用いて作成した模擬データについてそれぞれ一次式モデルへの回帰計算を実施した。

データを Table 4.1(1),(2),(3) に示す。

ケース2：模擬データによる検証（2）

目的： 計算結果全般についての検証

方法： 1次から5次までの多項式をベースに正規乱数を用いて作成した模擬データについてそれぞれの次数に対応する多項式モデルへの回帰計算を実施した。

データを Table 4.2(1),(2),(3),(4),(5) に示す。

ケース3：実データによる検証

目的： 実データによる計算結果全般についての検証

方法： 実データ（NUCEF円環型計量槽の現地校正データ）を用いて、全てのデータ（線型領域と非線型領域全て）に対して1次から3次までの多項式モデルへの回帰計算を実施した。

データを Table 4.3 に示す。

なお、いずれのケースについても比較計算の便宜上、(3.5.1)式中の  $t(n-(p+1); \alpha) = 1$  として偏回帰係数の信頼区間を計算した。（3.5 信頼区間 参照）

Table 4.1(1) Data for Case: 1(1)

- original relationship:  $Y=1$  -

X	Y
0.991982	0.970975
2.011840	0.981472
2.970335	1.019682
3.967606	0.987638
5.046285	1.027373
6.025265	0.996853
7.065932	0.994047
8.022786	1.025052
9.010981	1.023770
10.02502	1.012234

Table 4.1(2) Data for Case: 1(2)

- original relationship: Y=5 -

X	Y
1.008310	5.099799
2.004496	4.852283
3.019319	5.043334
4.032918	4.883114
5.027926	5.081786
6.003234	4.929189
7.040229	4.915158
7.993411	5.070182
8.980044	5.067289
9.990644	5.009610

Table 4.1(3) Data for Case: 1(3)

- original relationship: Y=10 -

X	Y
1.004951	10.09882
1.997777	10.20379
3.009241	9.985886
4.019481	10.26545
5.011129	10.06279
5.983078	9.757596
7.016713	9.729534
7.966536	10.03958
8.947700	10.02677
9.954706	9.911407

Table 4.2(1) Data for Case: 2(1)

- original relationship:  $Y=X+1$  -

X	Y
0.997155	1.972987
1.982185	2.990971
2.985853	3.900802
3.988297	5.015783
4.972149	5.897347
6.056302	7.086601
6.962141	8.076523
8.064168	8.825133
9.057536	9.792885
10.07675	11.30528

Table 4.2(2) Data for Case: 2(2)

- original relationship:  $Y=X^2+X+1$  -

X	Y
0.992271	2.915527
2.012418	6.876375
2.971202	13.26714
3.968762	20.75861
5.047730	31.87544
6.026999	42.90198
7.067955	56.71011
8.025098	74.89209
9.013582	93.24200
10.02791	112.4543

Table 4.2(3) Data for Case: 2(3)

- original relationship:  $Y=X^3+X^2+X+1$  -

X	Y
0.993599	3.903307
2.015074	14.79485
2.975186	40.98135
3.974074	84.36163
4.954371	151.6670
6.034968	259.4415
6.937252	399.5594
8.035723	602.4935
9.025535	843.4698
10.04119	1129.982

Table 4.2(4) Data for Case: 2(4)

- original relationship:  $Y=X^4+X^3+X^2+X+1$  -

X	Y
1.006451	5.071908
2.000777	31.77123
3.014092	121.4162
4.025949	331.2460
5.019215	789.6929
5.992781	1524.850
7.028033	2738.831
7.979473	4722.238
8.962254	7436.564
9.970878	11066.47

Table 4.2(5) Data for Case: 2(5)

- original relationship:  $Y=X^5+X^4+X^3+X^2+X+1$  -

X	Y
0.99438	5.869007
2.016635	62.28587
2.977527	373.7824
3.977196	1357.944
4.958272	3806.652
6.039650	9368.751
6.942714	19632.30
8.041965	36409.58
9.032558	64501.05
10.05017	113308.6

Table 4.3 Data for Case: 3

X: Level (mm)	Y: Volume (lit.)
3.59	0.3655
4.67	0.4068
4.72	0.3860
5.22	0.4273
5.81	0.4476
6.37	0.4691
74.18	5.4278
118.47	10.4668
155.28	15.5842
186.04	20.5243
213.57	25.4586
238.79	30.3815
262.33	35.3590
284.52	40.4018
304.73	45.3841
323.51	50.3563

Table 4.3 Data for Case: 3 (cont.)

X: Level (mm)	Y: Volume (lit.)
340.81	55.3804
356.51	60.4198
372.32	65.4009
496.28	105.4717
619.18	145.7567
742.45	186.2420
865.12	226.4943
987.47	266.6255
1109.70	306.7767
1232.05	346.8885
1355.74	387.3629
1478.12	427.4261
1600.01	467.2278
1722.00	507.1831
1844.61	547.2998
1966.80	587.8573

計算結果を以下に示す。これらの結果より、VESCAL と STATISTICA の計算結果はよく一致し、プログラム VESCAL の計算結果の信頼性が確認された。

ケース1 : 計算結果を Table 4.4(1),(2),(3) に示す。

ケース2 : 計算結果を Table 4.5(1),(2),(3),(4),(5) に示す。

ケース3 : 計算結果を Table 4.6 に示す。

Table 4.4(1) Results of Case: 1(1)

Fitted to  $Y=b_1*X+b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	1.6958E-02	1.6958E-02 *
Multiple Correlation:	0.61634632	0.616346323
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	0.94225969	0.94226
Partial Regression		
Coefficient:	b <sub>0</sub>	9.8124E-01 +/- 1.1562E-02
	b <sub>1</sub>	4.1124E-03 +/- 1.8576E-03
A(t v):	b <sub>0</sub>	1.00000000
	b <sub>1</sub>	0.94225969

\*: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 0.002300614$

Table 4.4(2) Results of Case: 1(2)

Fitted to  $Y=b_1*X+b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	9.6031E-02	9.6031E-02 *
Multiple Correlation:	0.15262705	0.152627051
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	0.32620223	0.326202
Partial Regression		
Coefficient:	b <sub>0</sub>	4.9697E+00 +/- 6.5840E-02
	b <sub>1</sub>	4.6312E-03 +/- 1.0602E-02
A(t v):	b <sub>0</sub>	1.00000000
	b <sub>1</sub>	0.32620223

\*: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 0.073775142$



Table 4.4(3) Results of Case: 1(3)

Fitted to $Y=b_1*X+b_0$		<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:		1.5952E-01	1.5952E-01 *
Multiple Correlation:		0.48817441	0.488174410
1-Q(F  $\nu_1, \nu_2$ ):		0.84771470	0.847715
Partial Regression			
Coefficient:	$b_0$	1.0162E+01 +/- 1.0938E-01	10.16171 +/- 0.109384
	$b_1$	-2.7964E-02 +/- 1.7675E-02	-0.02796 +/- 0.017675
A(t  $\nu$ ):	$b_0$	1.00000000	1.0
	$b_1$	0.84771470	0.847715

\*: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 0.203578828$

Table 4.5(1) Results of Case: 2(1)

Fitted to $Y=b_1*X+b_0$		<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:		1.5807E-01	1.5807E-01 *
Multiple Correlation:		0.99881360	0.99881360
1-Q(F  $\nu_1, \nu_2$ ):		1.00000000	1.0
Partial Regression			
Coefficient:	$b_0$	9.7419E-01 +/- 1.0736E-01	0.974193 +/- 0.107363
	$b_1$	9.9963E-01 +/- 1.7231E-02	0.999635 +/- 0.017231
A(t  $\nu$ ):	$b_0$	0.99998255	0.999983
	$b_1$	1.00000000	1.0

\*: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 0.199900303$

Table 4.5(2) Results of Case: 2(2)

(1) Fitted to  $Y=b_2*X^2+b_1*X+b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	8.9595E-01	8.9595E-01 *1
Multiple Correlation:	0.99978219	0.99978219
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	1.00000000	1.0
Partial Regression		
Coefficient:		
b <sub>0</sub>	1.4222E+00 +/- 1.0504E+00	1.422215 +/- 1.050425
b <sub>1</sub>	6.9787E-01 +/- 4.3916E-01	0.697868 +/- 0.439158
b <sub>2</sub>	1.0403E+00 +/- 3.8865E-02	1.040254 +/- 0.038865
A(t v):		
b <sub>0</sub>	0.78216235	0.782162
b <sub>1</sub>	0.84393953	0.84394
b <sub>2</sub>	0.99999997	1.0

\*1: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 5.619110361$

(2) Fitted to  $Y=b_2*X^2+b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	9.7764E-01	9.7764E-01 *2
Multiple Correlation:	0.99970360	0.99970360
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	1.00000000	1.0
Partial Regression		
Coefficient:		
b <sub>0</sub>	2.9380E+00 +/- 4.8004E-01	2.938006 +/- 0.480038
b <sub>2</sub>	1.1005E+00 +/- 9.4750E-03	1.100454 +/- 0.009475
A(t v):		
b <sub>0</sub>	0.99971695	0.999717
b <sub>2</sub>	1.00000000	1.0

\*2: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 7.646211491$

Table 4.5(3) Results of Case: 2(3)

		<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
(1) Fitted to $Y=b_3*X^3+b_2*X^2+b_1*X+b_0$			
Standard Deviation:		5.0714E+00	5.0714E+00 *1
Multiple Correlation:		0.99994342	0.99994342
1-Q(F  $\nu_1, \nu_2$ ):		1.00000000	1.0
Partial Regression			
Coefficient:	$b_0$	8.9529E+00 +/- 9.7810E+00	8.952877 +/- 9.781013
	$b_1$	-6.7558E+00 +/- 7.3025E+00	-6.75575 +/- 7.302464
	$b_2$	2.7839E+00 +/- 1.5018E+00	2.783905 +/- 1.501804
	$b_3$	9.0098E-01 +/- 8.9776E-02	0.900976 +/- 0.089776
A(t  $\nu$ ):	$b_0$	0.60468570	0.604686
	$b_1$	0.60941177	0.609412
	$b_2$	0.88679306	0.886793
	$b_3$	0.99994325	0.999943
*1: Calculated from $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 154.31545498$			
(2) Fitted to $Y=b_3*X^3+b_2*X^2+b_0$			
		<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:		5.0189E+00	5.0189E+00 *2
Multiple Correlation:		0.99993535	0.99993535
1-Q(F  $\nu_1, \nu_2$ ):		1.00000000	1.0
Partial Regression			
Coefficient:	$b_0$	4.9819E-01 +/- 3.4495E+00	0.498191 +/- 3.449466
	$b_2$	1.4240E+00 +/- 3.0439E-01	1.423986 +/- 0.304386
	$b_3$	9.7910E-01 +/- 3.0145E-02	0.979104 +/- 0.030145
A(t  $\nu$ ):	$b_0$	0.11076537	0.110765
	$b_2$	0.99773447	0.997734
	$b_3$	0.99999999	1.0
*2: Calculated from $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 176.32780807$			

Table 4.5(3) Results of Case: 2(3) (cont.)

(3) Fitted to $Y=b_3*X^3+b_1*X+b_0$			
		<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:		5.8882E+00	5.8882E+00 *3
Multiple Correlation:		0.99991102	0.99991102
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):		1.00000000	1.0
Partial Regression			
Coefficient:	b <sub>0</sub>	-6.5964E+00 +/- 5.8407E+00	-6.59641 +/- 5.840672
	b <sub>1</sub>	6.4940E+00 +/- 1.7364E+00	6.49396 +/- 1.736395
	b <sub>3</sub>	1.0656E+00 +/- 1.5179E-02	1.06562 +/- 0.015179
A(t v):	b <sub>0</sub>	0.70405648	0.704056
	b <sub>1</sub>	0.99273636	0.992736
	b <sub>3</sub>	1.00000000	1.0
*3: Calculated from $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 242.69268776$			
(4) Fitted to $Y=b_3*X^3+b_0$			
		<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:		9.5369E+00	9.5369E+00 *4
Multiple Correlation:		0.99973319	0.99973319
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):		1.00000000	1.0
Partial Regression			
Coefficient:	b <sub>0</sub>	1.3089E+01 +/- 4.0998E+00	13.08928 +/- 4.099775
	b <sub>3</sub>	1.1183E+00 +/- 9.1354E-03	1.11832 +/- 0.009135
A(t v):	b <sub>0</sub>	0.98724813	0.987248
	b <sub>3</sub>	1.00000000	1.0
*4: Calculated from $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 727.62440182$			

Table 4.5(4) Results of Case: 2(4)

Fitted to  $Y=b_4 \cdot X^4 + b_3 \cdot X^3 + b_2 \cdot X^2 + b_1 \cdot X + b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	6.4863E+01	6.4863E+01 *
Multiple Correlation:	0.99991775	0.99991775
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	1.00000000	1.0
Partial Regression		
Coefficient:		
b <sub>0</sub>	-1.9698E+02 +/- 2.1726E+02	-196.985 +/- 217.2564
b <sub>1</sub>	2.7575E+02 +/- 2.4496E+02	275.7484 +/- 244.9637
b <sub>2</sub>	-1.0690E+02 +/- 8.4841E+01	-106.896 +/- 84.8405
b <sub>3</sub>	1.6173E+01 +/- 1.1342E+01	16.17308 +/- 11.3417
b <sub>4</sub>	3.1722E-01 +/- 5.1319E-01	0.317223 +/- 0.5132
A(t v):		
b <sub>0</sub>	0.59385665	0.593857
b <sub>1</sub>	0.68858354	0.688584
b <sub>2</sub>	0.73670976	0.73671
b <sub>3</sub>	0.78679575	0.786796
b <sub>4</sub>	0.43644815	0.436448

\*: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 21035.896923$

Table 4.5(5) Results of Case: 2(5)

---

Fitted to  $Y=b_5*X^5+b_4*X^4+b_3*X^3+b_2*X^2+b_1*X+b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	6.2845E+02	6.2845E+02 *
Multiple Correlation:	0.99993742	0.99993742
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	0.99999993	1.0
Partial Regression		
Coefficient:		
b <sub>0</sub>	-4.6121E+03 +/- 3.7566E+03	-4612.06 +/- 3756.605
b <sub>1</sub>	8.3566E+03 +/- 5.6891E+03	8356.565 +/- 5689.102
b <sub>2</sub>	-4.9157E+03 +/- 2.8407E+03	-4915.67 +/- 2840.717
b <sub>3</sub>	1.2356E+03 +/- 6.1676E+02	1235.603 +/- 616.763
b <sub>4</sub>	-1.3546E+02 +/- 6.0317E+01	-135.464 +/- 60.317
b <sub>5</sub>	6.4188E+00 +/- 2.1759E+00	6.418767 +/- 2.176
A(t v):		
b <sub>0</sub>	0.71314121	0.713141
b <sub>1</sub>	0.78420574	0.784206
b <sub>2</sub>	0.84139786	0.841398
b <sub>3</sub>	0.88432891	0.884329
b <sub>4</sub>	0.91195228	0.911952
b <sub>5</sub>	0.95802702	0.958027

---

\*: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 1579808.4467$

Table 4.6 Results of Case: 3

(1) Fitted to  $Y=b_1*X+b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	1.7285E+01	1.7285E+01 *1
Multiple Correlation:	0.99593872	0.99593872
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	1.00000000	1.0
Partial Regression		
Coefficient:		
	b <sub>0</sub> -2.8595E+01 +/- 4.3076E+00	-28.5953 +/- 4.307564
	b <sub>1</sub> 3.0531E-01 +/- 5.0391E-03	0.305312 +/- 0.005039
A(t v):		
	b <sub>0</sub> 0.99999976	1.0
	b <sub>1</sub> 1.00000000	1.0

\*1: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 8962.9653049$

(2) Fitted to  $Y=b_2*X^2+b_1*X+b_0$

	<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:	1.1740E+01	1.1740E+01 *2
Multiple Correlation:	0.99819103	0.99819103
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):	1.00000000	1.0
Partial Regression		
Coefficient:		
	b <sub>0</sub> -1.4867E+01 +/- 3.7134E+00	-14.8670 +/- 3.713438
	b <sub>1</sub> 2.3126E-01 +/- 1.2802E-02	0.231261 +/- 0.012802
	b <sub>2</sub> 4.2273E-05 +/- 7.0421E-06	0.000042 +/- 0.000007
A(t v):		
	b <sub>0</sub> 0.99960379	0.999604
	b <sub>1</sub> 1.00000000	1.0
	b <sub>2</sub> 0.99999842	0.999998

\*2: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 3996.7703759$

Table 4.6 Results of Case: 3 (cont.)

(3) Fitted to $Y=b_3*X^3+b_2*X^2+b_1*X+b_0$		<u>VESCAL</u>	<u>STATISTICA</u>
Standard Deviation:		5.7195E+00	5.7195E+00 *3
Multiple Correlation:		0.99958572	0.99958572
1-Q(F v <sub>1</sub> ,v <sub>2</sub> ):		1.00000000	1.0
Partial Regression			
Coefficient:	b <sub>0</sub>	-4.3207E+00 +/- 2.1105E+00	-4.32067 +/- 2.110482
	b <sub>1</sub>	1.2314E-01 +/- 1.2769E-02	0.123136 +/- 0.012769
	b <sub>2</sub>	2.0580E-04 +/- 1.7196E-05	0.000206 +/- 0.000017
	b <sub>3</sub>	-5.9842E-08 +/- 6.1664E-09	-0.000000 +/- 0.000000
A(t v):	b <sub>0</sub>	0.94987854	0.949879
	b <sub>1</sub>	1.00000000	1.0
	b <sub>2</sub>	1.00000000	1.0
	b <sub>3</sub>	1.00000000	1.0

\*3: Calculated from  $\sum_{\alpha=1}^n (y_{\alpha} - Y_{\alpha})^2 = 915.96341638$

#### 4.2 F-, t-分布累積確率密度計算の検証

プログラム VESCAL には、F-分布関数の累積確率密度及び t-分布関数の累積確率密度を計算するためのサブモジュールが組み込まれており、以下の値を計算する。

F-分布関数累積確率密度：  $Q(F|v_1, v_2)$

ある F 値から無限大までの F-分布関数の積分値をあらわす。

ここで、 $v_1, v_2$  はそれぞれ分散比 F の分子の自由度、分母の自由度をあらわす。

t-分布関数累積確率密度：  $A(t|v)$

ある -t 値から t 値までの t-分布関数の積分値をあらわす。

ここで、 $v$  は t の自由度をあらわす。

これらの計算方法は、第3章を参照のこと。

通常、統計学に関する書籍では、上記のある Q 値又は A 値を与える F 値又は t 値（百分率点）として整理されている。そこで、ここでの検証計算は、上記のコードモジュールを利用して百分率点の計算を行い、文献[8]に記載されている数値との比較を行った。なお、百分率点の計算は二分法（Bisection Method；詳細は第3章を参



照のこと)による逆関数値計算モジュールを別途作成し、VESCAL 内蔵の  $Q(F|v_1, v_2)$  及び  $A(t|v)$  計算モジュールと組み合わせることによって行った。

結果として、プログラム VESCAL のモジュールによって計算された F-分布関数累積確率密度の百分率点 (有為水準;  $\alpha=0.10, 0.05, 0.01$ ) を Table 4.7(1),(2),(3) に示す。同様に、t-分布関数累積確率密度の百分率点 (有為水準;  $1-\alpha=0.99, 0.95, 0.90$ 、但し両側検定時) を Table 4.8 に示す。

これらの計算値は、文献[8]に記載されている数値とよく一致し、プログラム VESCAL の計算結果の信頼性が確認された。

Table 4.7(1) Percentage Points of F-distribution; calculated with VESCAL statistics module

$v_2 \backslash v_1$	1	2	3	4	5	6	8	12	15	20	30	60
1	39.86	49.50	53.59	55.83	57.24	58.20	59.44	60.71	61.22	61.74	62.26	62.79
2	8.53	9.00	9.16	9.24	9.29	9.33	9.37	9.41	9.42	9.44	9.46	9.47
3	5.54	5.46	5.39	5.34	5.31	5.28	5.25	5.22	5.20	5.18	5.17	5.15
4	4.54	4.32	4.19	4.11	4.05	4.01	3.95	3.90	3.87	3.84	3.82	3.79
5	4.06	3.78	3.62	3.52	3.45	3.40	3.34	3.27	3.24	3.21	3.17	3.14
6	3.78	3.46	3.29	3.18	3.11	3.05	2.98	2.90	2.87	2.84	2.80	2.76
7	3.59	3.26	3.07	2.96	2.88	2.83	2.75	2.67	2.63	2.59	2.56	2.51
8	3.46	3.11	2.92	2.81	2.73	2.67	2.59	2.50	2.46	2.42	2.38	2.34
9	3.36	3.01	2.81	2.69	2.61	2.55	2.47	2.38	2.34	2.30	2.25	2.21
10	3.29	2.92	2.73	2.61	2.52	2.46	2.38	2.28	2.24	2.20	2.16	2.11
11	3.23	2.86	2.66	2.54	2.45	2.39	2.30	2.21	2.17	2.12	2.08	2.03
12	3.18	2.81	2.61	2.48	2.39	2.33	2.24	2.15	2.10	2.06	2.01	1.96
13	3.14	2.76	2.56	2.43	2.35	2.28	2.20	2.10	2.05	2.01	1.96	1.90
14	3.10	2.73	2.52	2.39	2.31	2.24	2.15	2.05	2.01	1.96	1.91	1.86
15	3.07	2.70	2.49	2.36	2.27	2.21	2.12	2.02	1.97	1.92	1.87	1.82
16	3.05	2.67	2.46	2.33	2.24	2.18	2.09	1.99	1.94	1.89	1.84	1.78
17	3.03	2.64	2.44	2.31	2.22	2.15	2.06	1.96	1.91	1.86	1.81	1.75
18	3.01	2.62	2.42	2.29	2.20	2.13	2.04	1.93	1.89	1.84	1.78	1.72
19	2.99	2.61	2.40	2.27	2.18	2.11	2.02	1.91	1.86	1.81	1.76	1.70

Table 4.7(1) Percentage Points of F-distribution; calculated with VESCAL statistics module (cont.)

$$-Q(F|v_1, v_2)=0.10 -$$

$v_2 \backslash v_1$	1	2	3	4	5	6	8	12	15	20	30	60
20	2.97	2.59	2.38	2.25	2.16	2.09	2.00	1.89	1.84	1.79	1.74	1.68
21	2.96	2.57	2.36	2.23	2.14	2.08	1.98	1.87	1.83	1.78	1.72	1.66
22	2.95	2.56	2.35	2.22	2.13	2.06	1.97	1.86	1.81	1.76	1.70	1.64
23	2.94	2.55	2.34	2.21	2.11	2.05	1.95	1.84	1.80	1.74	1.69	1.62
24	2.93	2.54	2.33	2.19	2.10	2.04	1.94	1.83	1.78	1.73	1.67	1.61
25	2.92	2.53	2.32	2.18	2.09	2.02	1.93	1.82	1.77	1.72	1.66	1.59
26	2.91	2.52	2.31	2.17	2.08	2.01	1.92	1.81	1.76	1.71	1.65	1.58
27	2.90	2.51	2.30	2.17	2.07	2.00	1.91	1.80	1.75	1.70	1.64	1.57
28	2.89	2.50	2.29	2.16	2.06	2.00	1.90	1.79	1.74	1.69	1.63	1.56
29	2.89	2.50	2.28	2.15	2.06	1.99	1.89	1.78	1.73	1.68	1.62	1.55
30	2.88	2.49	2.28	2.14	2.05	1.98	1.88	1.77	1.72	1.67	1.61	1.54
40	2.84	2.44	2.23	2.09	2.00	1.93	1.83	1.71	1.66	1.61	1.54	1.47
60	2.79	2.39	2.18	2.04	1.95	1.87	1.77	1.66	1.60	1.54	1.48	1.40
120	2.75	2.35	2.13	1.99	1.90	1.82	1.72	1.60	1.55	1.48	1.41	1.32

Table 4.7(2) Percentage Points of F-distribution; calculated with VESCAL statistics module

$$- Q(F|v_1, v_2) = 0.05 -$$

$v_2 \backslash v_1$	1	2	3	4	5	6	8	12	15	20	30	60
1	161.45	199.50	215.71	224.58	230.16	233.99	238.88	243.91	245.95	248.01	250.10	252.20
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.37	19.41	19.43	19.45	19.46	19.48
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.85	8.74	8.70	8.66	8.62	8.57
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.04	5.91	5.86	5.80	5.75	5.69
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.82	4.68	4.62	4.56	4.50	4.43
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.15	4.00	3.94	3.87	3.81	3.74
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.73	3.57	3.51	3.44	3.38	3.30
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.44	3.28	3.22	3.15	3.08	3.01
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.23	3.07	3.01	2.94	2.86	2.79
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.07	2.91	2.85	2.77	2.70	2.62
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	2.95	2.79	2.72	2.65	2.57	2.49
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.85	2.69	2.62	2.54	2.47	2.38
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.77	2.60	2.53	2.46	2.38	2.30
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.70	2.53	2.46	2.39	2.31	2.22
15	4.54	3.68	3.29	3.06	2.90	2.79	2.64	2.48	2.40	2.33	2.25	2.16
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.59	2.42	2.35	2.28	2.19	2.11
17	4.45	3.59	3.20	2.96	2.81	2.70	2.55	2.38	2.31	2.23	2.15	2.06
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.51	2.34	2.27	2.19	2.11	2.02
19	4.38	3.52	3.13	2.90	2.74	2.63	2.48	2.31	2.23	2.16	2.07	1.98

Table 4.7(2) Percentage Points of F-distribution; calculated with VESCAL statistics module (cont.)

$v_2 \backslash v_1$	1	2	3	4	5	6	8	12	15	20	30	60
20	4.35	3.49	3.10	2.87	2.71	2.60	2.45	2.28	2.20	2.12	2.04	1.95
21	4.32	3.47	3.07	2.84	2.68	2.57	2.42	2.25	2.18	2.10	2.01	1.92
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.40	2.23	2.15	2.07	1.98	1.89
23	4.28	3.42	3.03	2.80	2.64	2.53	2.37	2.20	2.13	2.05	1.96	1.86
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.36	2.18	2.11	2.03	1.94	1.84
25	4.24	3.39	2.99	2.76	2.60	2.49	2.34	2.16	2.09	2.01	1.92	1.82
26	4.23	3.37	2.98	2.74	2.59	2.47	2.32	2.15	2.07	1.99	1.90	1.80
27	4.21	3.35	2.96	2.73	2.57	2.46	2.31	2.13	2.06	1.97	1.88	1.79
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.29	2.12	2.04	1.96	1.87	1.77
29	4.18	3.33	2.93	2.70	2.55	2.43	2.28	2.10	2.03	1.94	1.85	1.75
30	4.17	3.32	2.92	2.69	2.53	2.42	2.27	2.09	2.01	1.93	1.84	1.74
40	4.08	3.23	2.84	2.61	2.45	2.34	2.18	2.00	1.92	1.84	1.74	1.64
60	4.00	3.15	2.76	2.53	2.37	2.25	2.10	1.92	1.84	1.75	1.65	1.53
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.18	2.02	1.83	1.75	1.66	1.55	1.43

$$-Q(F|v_1, v_2) = 0.05 -$$

Table 4.7(3) Percentage Points of F-distribution; calculated with VESCAL statistics module

$\nu_2 \backslash \nu_1$	1	2	3	4	5	6	8	12	15	20	30	60
1	4052.18	4999.50	5403.35	5624.58	5763.65	5858.99	5981.07	6106.32	6157.28	6208.73	6260.65	6313.03
2	98.50	99.00	99.17	99.25	99.30	99.33	99.37	99.42	99.43	99.45	99.47	99.48
3	34.12	30.82	29.46	28.71	28.24	27.91	27.49	27.05	26.87	26.69	26.50	26.32
4	21.20	18.00	16.69	15.98	15.52	15.21	14.80	14.37	14.20	14.02	13.84	13.65
5	16.26	13.27	12.06	11.39	10.97	10.67	10.29	9.89	9.72	9.55	9.38	9.20
6	13.75	10.92	9.78	9.15	8.75	8.47	8.10	7.72	7.56	7.40	7.23	7.06
7	12.25	9.55	8.45	7.85	7.46	7.19	6.84	6.47	6.31	6.16	5.99	5.82
8	11.26	8.65	7.59	7.01	6.63	6.37	6.03	5.67	5.52	5.36	5.20	5.03
9	10.56	8.02	6.99	6.42	6.06	5.80	5.47	5.11	4.96	4.81	4.65	4.48
10	10.04	7.56	6.55	5.99	5.64	5.39	5.06	4.71	4.56	4.41	4.25	4.08
11	9.65	7.21	6.22	5.67	5.32	5.07	4.74	4.40	4.25	4.10	3.94	3.78
12	9.33	6.93	5.95	5.41	5.06	4.82	4.50	4.16	4.01	3.86	3.70	3.54
13	9.07	6.70	5.74	5.21	4.86	4.62	4.30	3.96	3.82	3.66	3.51	3.34
14	8.86	6.51	5.56	5.04	4.69	4.46	4.14	3.80	3.66	3.51	3.35	3.18
15	8.68	6.36	5.42	4.89	4.56	4.32	4.00	3.67	3.52	3.37	3.21	3.05
16	8.53	6.23	5.29	4.77	4.44	4.20	3.89	3.55	3.41	3.26	3.10	2.93
17	8.40	6.11	5.18	4.67	4.34	4.10	3.79	3.46	3.31	3.16	3.00	2.83
18	8.29	6.01	5.09	4.58	4.25	4.01	3.71	3.37	3.23	3.08	2.92	2.75
19	8.18	5.93	5.01	4.50	4.17	3.94	3.63	3.30	3.15	3.00	2.84	2.67

Table 4.7(3) Percentage Points of F-distribution; calculated with VESCAL statistics module (cont.)

$v_2 \backslash v_1$	1	2	3	4	5	6	8	12	15	20	30	60
20	8.10	5.85	4.94	4.43	4.10	3.87	3.56	3.23	3.09	2.94	2.78	2.61
21	8.02	5.78	4.87	4.37	4.04	3.81	3.51	3.17	3.03	2.88	2.72	2.55
22	7.95	5.72	4.82	4.31	3.99	3.76	3.45	3.12	2.98	2.83	2.67	2.50
23	7.88	5.66	4.76	4.26	3.94	3.71	3.41	3.07	2.93	2.78	2.62	2.45
24	7.82	5.61	4.72	4.22	3.90	3.67	3.36	3.03	2.89	2.74	2.58	2.40
25	7.77	5.57	4.68	4.18	3.85	3.63	3.32	2.99	2.85	2.70	2.54	2.36
26	7.72	5.53	4.64	4.14	3.82	3.59	3.29	2.96	2.81	2.66	2.50	2.33
27	7.68	5.49	4.60	4.11	3.78	3.56	3.26	2.93	2.78	2.63	2.47	2.29
28	7.64	5.45	4.57	4.07	3.75	3.53	3.23	2.90	2.75	2.60	2.44	2.26
29	7.60	5.42	4.54	4.04	3.73	3.50	3.20	2.87	2.73	2.57	2.41	2.23
30	7.56	5.39	4.51	4.02	3.70	3.47	3.17	2.84	2.70	2.55	2.39	2.21
40	7.31	5.18	4.31	3.83	3.51	3.29	2.99	2.66	2.52	2.37	2.20	2.02
60	7.08	4.98	4.13	3.65	3.34	3.12	2.82	2.50	2.35	2.20	2.03	1.84
120	6.85	4.79	3.95	3.48	3.17	2.96	2.66	2.34	2.19	2.03	1.86	1.66

Table 4.8 Percentage Points of t-distribution;  
calculated with VESCAL statistics module

[A-value: A(t v)]			
v\A-value	0.99	0.95	0.90
1	63.657	12.706	6.314
2	9.925	4.303	2.920
3	5.841	3.182	2.353
4	4.604	2.776	2.132
5	4.032	2.571	2.015
6	3.707	2.447	1.943
7	3.499	2.365	1.895
8	3.355	2.306	1.860
9	3.250	2.262	1.833
10	3.169	2.228	1.812
11	3.106	2.201	1.796
12	3.055	2.179	1.782
13	3.012	2.160	1.771
14	2.977	2.145	1.761
15	2.947	2.131	1.753
16	2.921	2.120	1.746
17	2.898	2.110	1.740
18	2.878	2.101	1.734
19	2.861	2.093	1.729
20	2.845	2.086	1.725
21	2.831	2.080	1.721
22	2.819	2.074	1.717
23	2.807	2.069	1.714
24	2.797	2.064	1.711
25	2.787	2.060	1.708



Table 4.8 Percentage Points of t-distribution;  
calculated with VESCAL statistics module (cont.)

[A-value: A(t|v)]

v\A-value	0.99	0.95	0.90
26	2.779	2.056	1.706
27	2.771	2.052	1.703
28	2.763	2.048	1.701
29	2.756	2.045	1.699
30	2.750	2.042	1.697
40	2.704	2.021	1.684
60	2.660	2.000	1.671
120	2.617	1.980	1.658

## 5. 操作方法

ここでは、プログラム VESCAL の基本的な操作について解説する。

### 5.1 プログラムの起動とファイルの読み込み

プログラムを起動すると Fig.5.1 の画面が表示される。

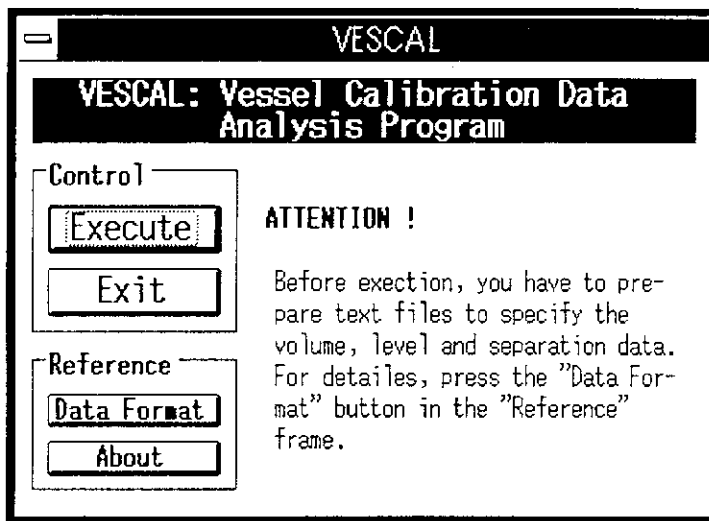


Fig.5.1 Screen View -VESCAL Opening

本プログラムでは、テキスト形式で保存された校正データファイルを読み込んでデータ処理を行う。このファイルの内容は全て1バイトの英数字で記述し、その書式は、

- 1行目: ダミー行 (リターン・コードのみ可)
- 2行目: データのタイトル
- 3行目: ダミー行 (リターン・コードのみ可)
- 4行目: ダミー行 (リターン・コードのみ可)
- 5行目: 体積 (lit.)、液位 (mm)、ディアフェーブ・セハレション (mm) からなるデータ。但し、ディアフェーブ・セハレションの値は本プログラムでは現在使用していないので (将来拡張予定)、ダミーの数値 (例えば、ゼロ) を入力する。各データは1つ以上の空白又はコンマによって区切ること。
- 6行目以降: 上記5行目の書式を必要なデータ点分繰り返す。但し、1ファイル当たりの最大データ点数は200である。

である。また、ファイル拡張子は " VES " と設定しておくこと、他のファイルとの区別が容易であり、本プログラムではこの拡張子のファイルを優先的に検索するように設計されている。

Fig.5.1 の画面で "Execute" ボタンをマウスでクリックすると Fig.5.2(1) に示すファイル入力画面が現れる。

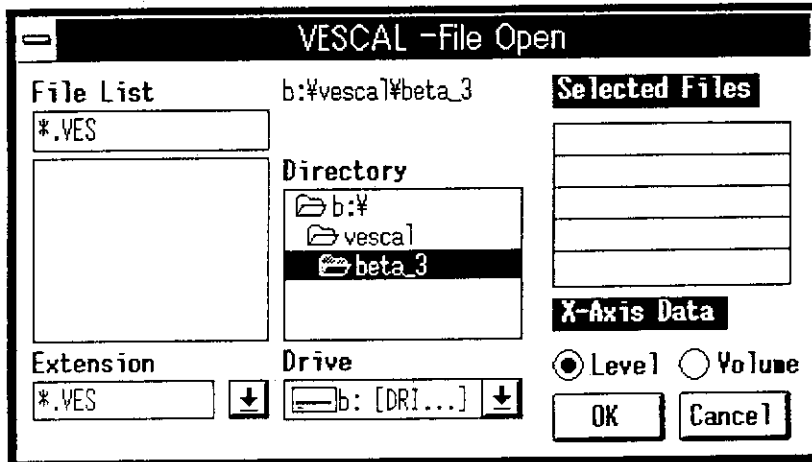


Fig.5.2(1) Screen View -VESCAL File Open (1)

ここで、データが保管されているドライブとディレクトリを指定し、ファイルリスト中のファイル名をマウスでダブルクリックすると Fig.5.2(2) のように選択ファイル欄にファイル名が表示される。この操作を繰り返して最大5つのファイルを選択することができる。

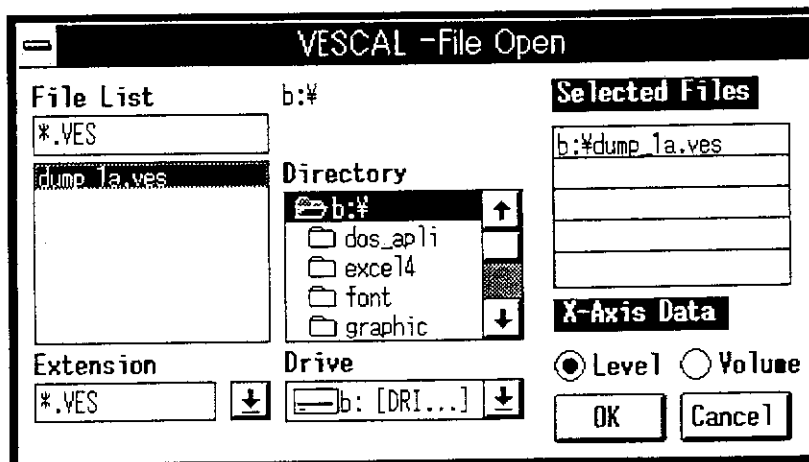


Fig.5.2(2) Screen View -VESCAL File Open (2)

- after a file is selected -

選択ファイル欄の下のオプションボタン "X-Axis Data" は、X軸（プロットの横軸）データの指定に使用する。

以上のように、ファイルの選択及びX軸データの設定を行い、"OK" ボタンをマウ

スでクリックすると Fig.5.3 の画面が表示される。ここで、入力したファイル名とデータを確認して " OK " ボタンをクリックすると Fig.5.4(1) の画面が表示される。本プログラムでは、Fig.5.4(1) のデータプロット画面を中心として必要な解析作業を行う。

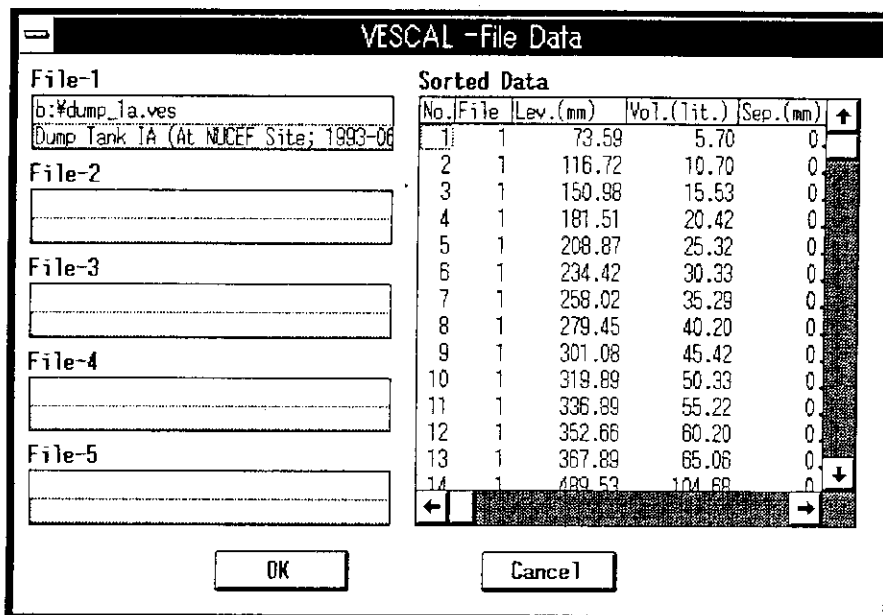


Fig.5.3 Screen View -VESCAL File Data

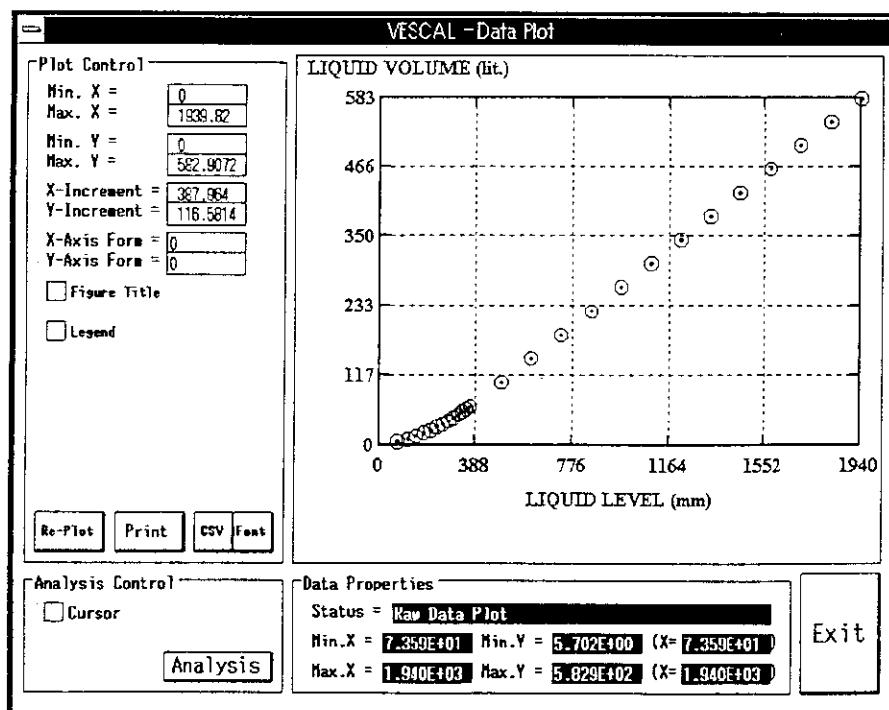


Fig.5.4(1) Screen View -VESCAL Raw Data Plot (1)

## 5.2 データプロットに関する操作

ここでは、Fig.5.4(1)の画面を中心として、データプロットに関する操作方法を説明する。画面下には、プロットされているデータの最大値と最小値をX軸、Y軸それぞれについて表示している。プロットの制御は画面左側のコントロールを使用して行う。これらのコントロールでは、プロットする範囲（X軸の最小値、最大値及びY軸の最小値、最大値）、XY軸の増分、XY軸の目盛り数字の書式をキーボードから直接入力する。目盛り数字の書式を Table 5.1 に示す。また、図のタイトル、データの凡例に関するチェックボックスをマウスでクリックすると、これらに関する入力フィールドが現れ、やはり直接キーボードから入力する。これらの指定をプロットに反映させるには、"Re-Plot" ボタンをマウスでクリックする。タイトルと凡例を表示させた例を Fig.5.4(2) に示す。なお、プロットの軸名称、目盛り数字、凡例、タイトルの表示に使用しているフォントとそのサイズを変更したい場合には、"Font" ボタンをマウスでクリックする。すると Fig.5.5 のフォント選択画面が表示され設定後 "OK" ボタンをクリックする。設定をプロット表示に反映させるためには "Re-Plot" ボタンをマウスでクリックする。なお、使用可能なフォントはOS内蔵のビットマップフォントあるいはアウトラインフォント (True Type等) であり、プリンタ内蔵のフォントを指定するとエラーを生じる。

また、画面左下の "Cursor" チェックボックスをマウスでチェックするとプロット上にカーソル線 (赤の縦線) が表示され、表示位置 X 座標の数値がチェックボックス下に表示される (Fig.5.4(2) 参照)。カーソル線はマウスの移動に連動して移動させることができる。この機能は、領域分割する際に境界座標を得るための有効な手段となる。

Table 5.1 Sample of Scale Value Format

Format Samples	Results for 233.142568
0	233
0.0	233.1
0.00	233.14
0.000e+00	2.331E+02
0.000e-00	2.331E02

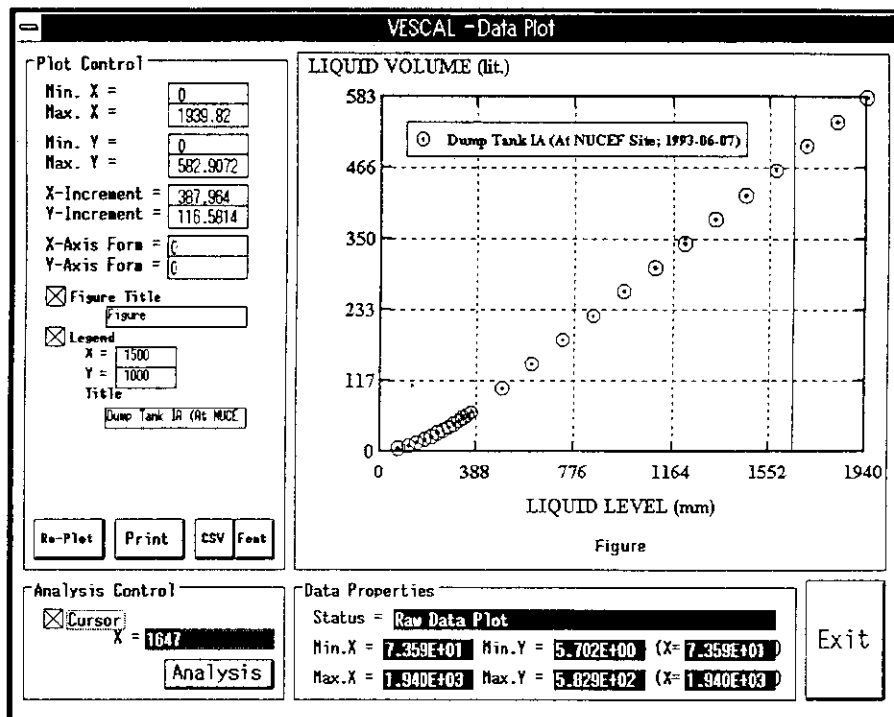


Fig.5.4(2) Screen View -VESCAL Raw Data Plot (2)  
- executing re-plot and indicating cursor-

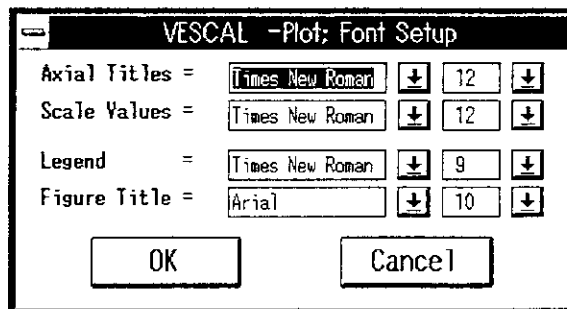


Fig.5.5 Screen View -VESCAL Plot Font Setup

Fig.5.4(1) 又は Fig.5.4(2) で表示されているプロットは " Print " ボタンをクリックすることによりハードコピーが得られる。ハードコピーの品質は接続されているプリンタの解像度に依存するが、参考までに 600 dot-per-inch のページプリンタに出力した結果を Fig.5.6 に示す。

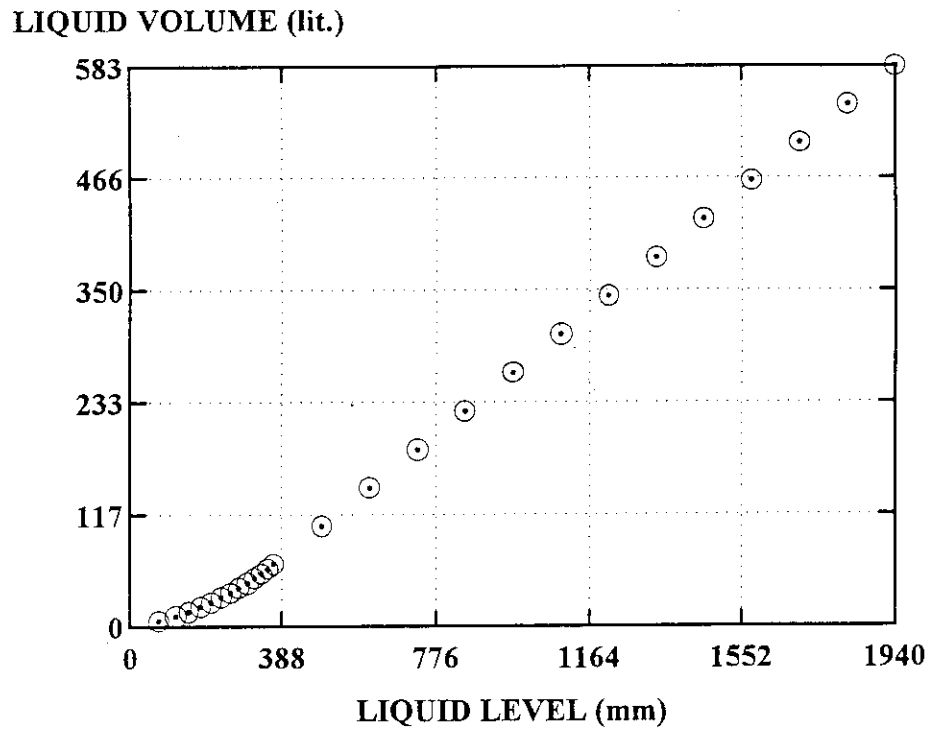


Fig.5.6 Hard Copy of Graph, printed with 600dpi Page Printer

さらに、プロットされているデータは、CSV(Comma Separated Value)形式でファイルに保存することができ、他の表計算アプリケーション等により簡単に読み込むことができる。Fig.5.4(1)又はFig.5.4(2)の画面で"CSV"ボタンをマウスでクリックするとFig.5.7の画面が表示され、ドライブとディレクトリを選択してファイル名を入力し、"OK"ボタンをクリックすると、プロットデータのCSVファイルが作成される。

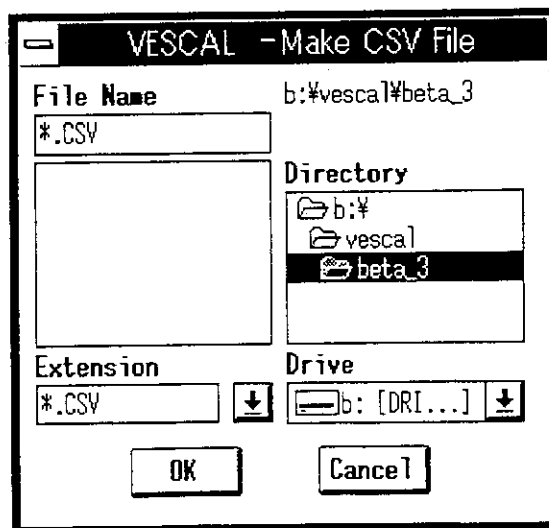


Fig.5.7 Screen View -VESCAL CSV File Output

### 5.3 データ解析に関する操作

データの解析を行う場合には、Fig.5.4(1)の画面左下の"Analysis"ボタンをマウスでクリックする。すると、Fig.5.8の画面が表示され、差分プロットモード、プロフィール・プロットモード、多領域回帰分析モードのいずれかを選択する。以下では各モード毎の操作について説明する。

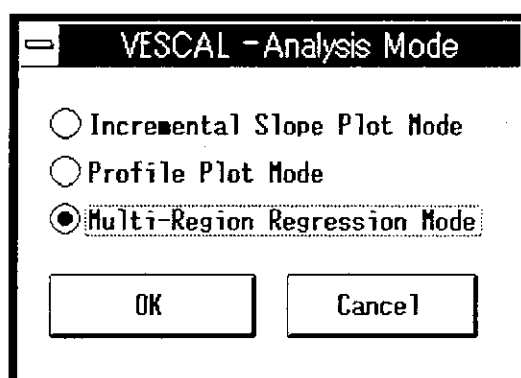


Fig.5.8 Screen View -VESCAL Analysis Setup

#### (1) 差分プロットモード (Incremental Slope Plot Mode)

差分プロットモードを選択すると、Fig.5.9のセットアップ画面が表示される。ここで"Execute"ボタンをクリックすると、計算結果のプロットが表示される(Fig.5.10)。Fig.5.10の画面左下の"Raw Data"ボタンをクリックすると解析前の表示に戻る。

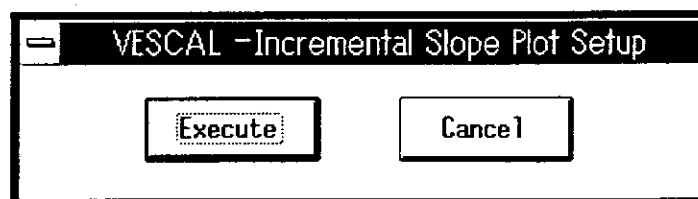


Fig.5.9 Screen View -VESCAL Incremental Slope Plot Setup



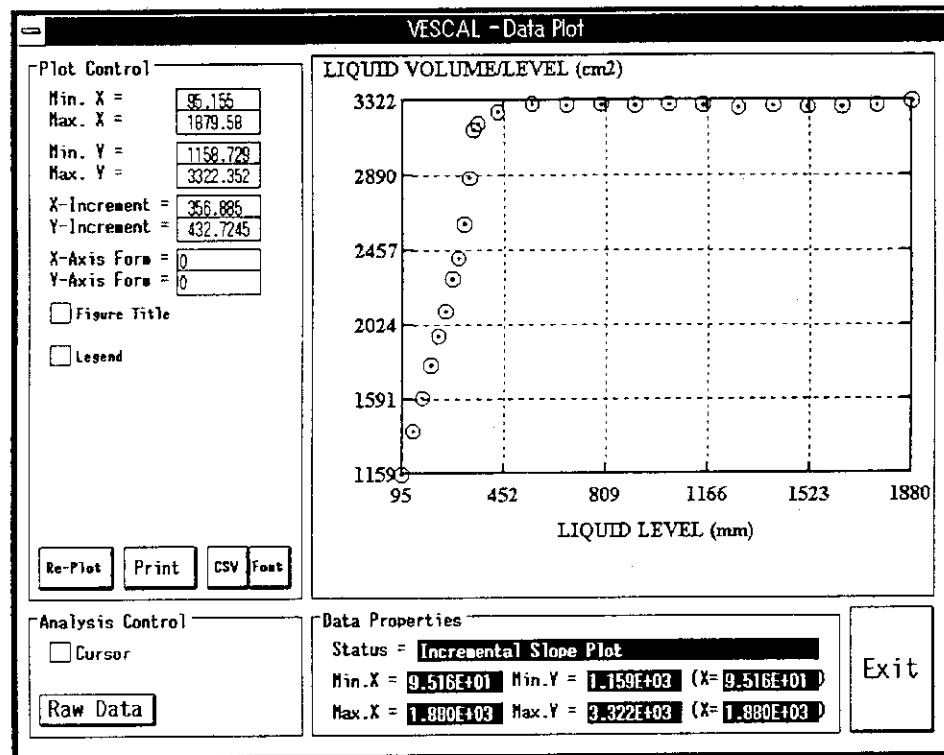


Fig.5.10 Screen View -VESCAL Incremental Slope Plot

## (2) プロフィール・プロットモード (Profile Plot Mode)

プロフィール・プロットモードを選択すると、Fig.5.11 のセットアップ画面が表示される。ここでドロップダウンリストから多項式の次数（最大5次、通常は1次に指定する）を選択するとともに偏回帰係数の誤差及び回帰誤差を算出するための有為水準  $\alpha$  (Significance Level) をキーボードから入力する。デフォルトでは、 $\alpha=0$  と設定されている。これらを設定した後に "Execute" ボタンをクリックすると解析が始まる。先ず解析結果の各種統計量は Fig.5.12 の画面に表示される。Fig.5.12 の画面では、X軸データの最大、最小値、データ数、多項式の次数、標準偏差、重相関係数、F-分布累積確率密度及び偏回帰係数（多項式の係数）に関する情報が与えられる。この情報は "Print" ボタンをクリックすることにより、プリンタへ出力することができる。なお、"Print" ボタンをクリックすると印刷に使用するフォントを指定することができる (Fig.5.13 参照)。また、Fig.5.12 で "Fitting Result" ボタン、"Residual Plot" ボタンをクリックするとそれぞれフィッティング結果と残差の計算結果がプロットされる (Fig.5.14(1), Fig.5.14(2))。

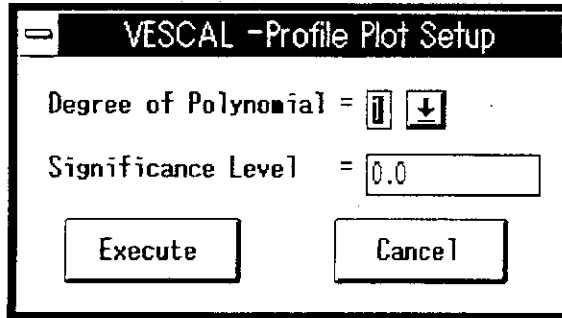


Fig.5.11 Screen View -VESCAL Profile Plot Setup

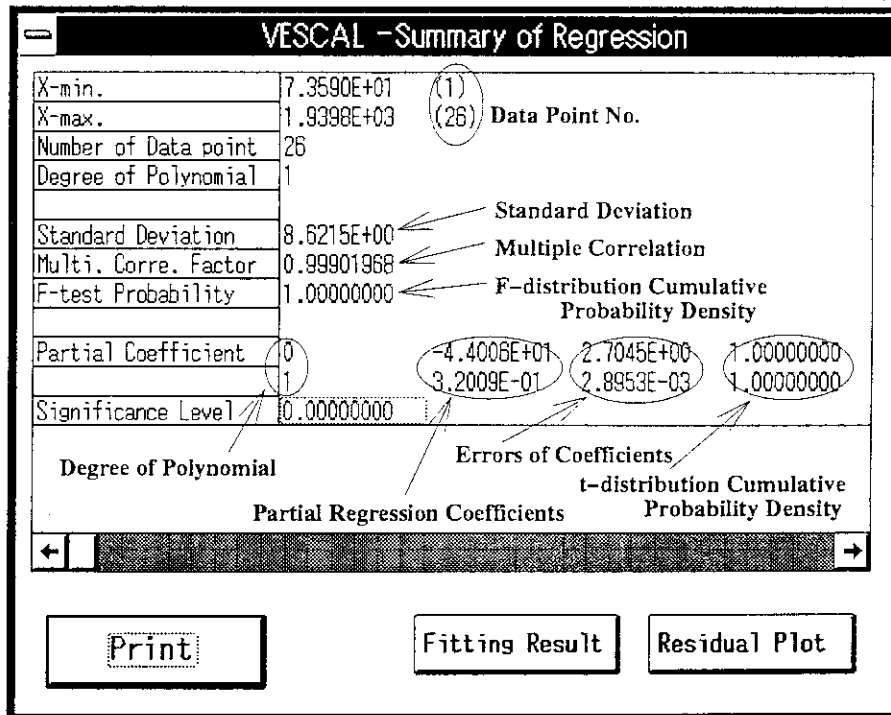


Fig.5.12 Screen View -VESCAL Summary Results of Profile Plot Analysis

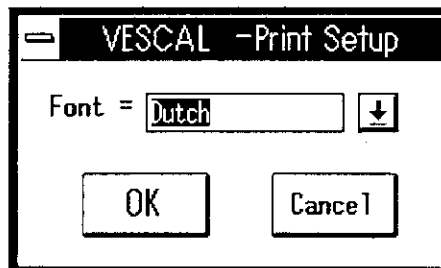


Fig.5.13 Screen View -VESCAL Print and Font Setup

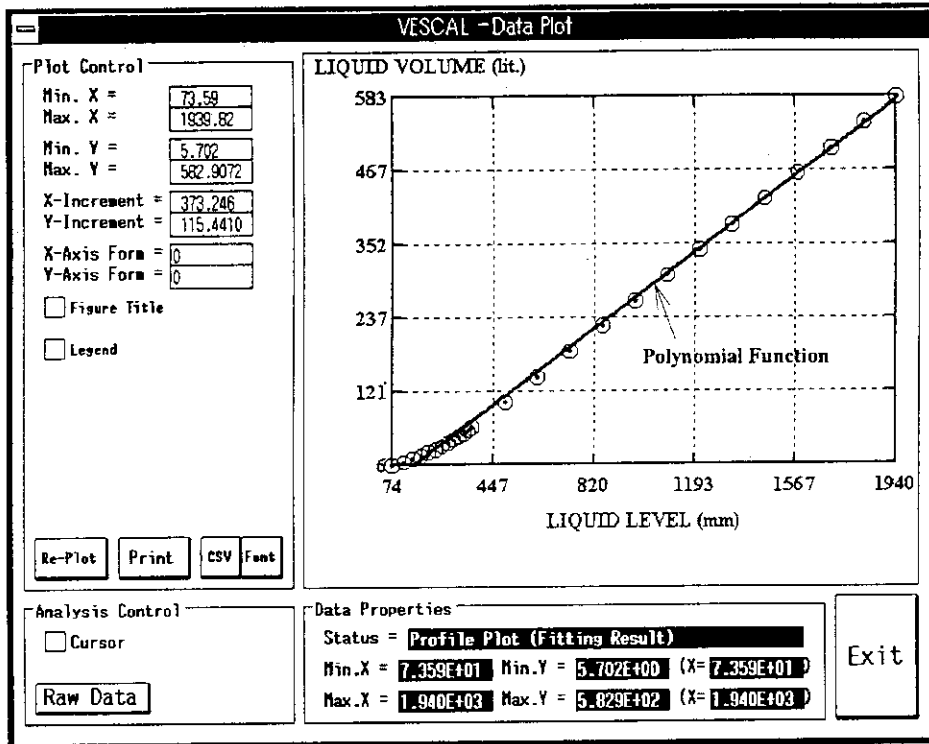


Fig.5.14(1) Screen View -VESCAL Profile Plot (1)  
- fitting result -

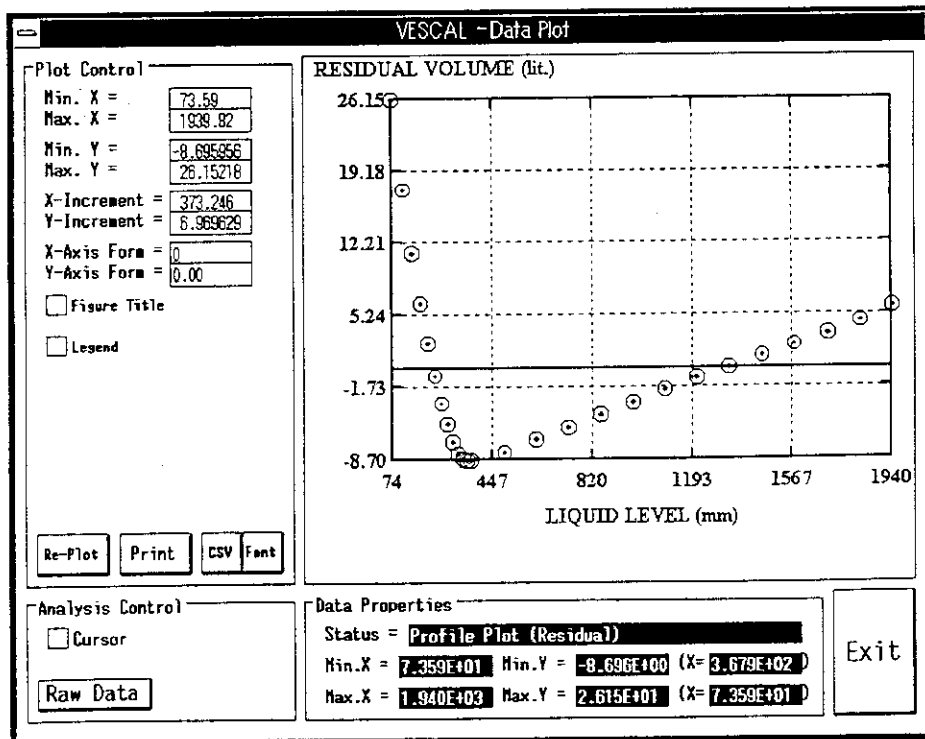


Fig.5.14(2) Screen View -VESCAL Profile Plot (2)  
- residual plot -

## (3) 多領域回帰分析モード (Multi-region Regression Mode)

多領域解析モードを選択すると、Fig.5.15(1) のセットアップ画面が表示される。ここでドロップダウンリストから領域数 (最大5領域) と多項式の次数 (最大5次) を選択する。多項式の次数については、" Select-> " ボタンをクリックするとさらに細かい指定のためのチェックボックスが表示される。チェックボックスをクリアした次数については係数を強制的にゼロとする。例として、Fig.5.15(2) の画面は第1領域の多項式を  $Y = aX^2 + b$  として設定した場合を示している。領域境界 (X値)、有為水準  $\alpha$  と管理制限については入力フィールドに直接キーボードから入力する。管理制限値は残差の相対的な大きさを検討するために用いるものであり、特に必要ない場合は何も入力しなくてよい。このような各種の指定をした後に " Execute " ボタンをクリックすると解析が始まる。解析結果は Fig.5.16 の画面に表示される。この画面は基本的に Fig.5.12 の画面と同じ構成になっているが、領域境界値 (X値) の評価結果を表示する。領域境界値は隣接領域の多項式の交点を計算することで評価し、その結果を、

- Status 0 : 交点が存在し、その値が各領域のフィッティング範囲と矛盾しない。  
 解説 : 第i領域と第i+1領域の交点が、第i領域の最大データ値と第i+1領域の最小データ値の間に位置する (Fig.5.17 参照)。
- Status 1 : 交点が存在するが、その値が各領域のフィッティング範囲外にある。  
 この場合、参考までに交点値を Status 表示の右側に表示する。
- Status 2 : 交点が存在しない。

として表示する。これらの情報は " Print " ボタンをクリックすることにより、プリンタへ出力することができる。また、" Fitting Result " ボタン、" Residual Plot " ボタンをクリックするとそれぞれフィッティング結果と残差の結果がプロットされる (Fig.5.18(1), Fig.5.18(2)) 。

**VESCAL - Multi-Region Regression Setup**

Number of Region =

Degree of Polynomial = Region 1:     
 Region 2:

Region Boundaries (X) Region 1-2:

Significance Level =

Control Limit (%) =

Fig.5.15(1) Screen View -VESCAL Multi-region Regression Setup (1)

**VESCAL - Multi-Region Regression Setup**

Number of Region =

Degree of Polynomial = Region 1:       
 Region 2:

Region Boundaries (X) Region 1-2:

Significance Level =

Control Limit (%) =

Fig.5.15(2) Screen View -VESCAL Multi-region Regression Setup (2)

- selecting degree of polynomial -

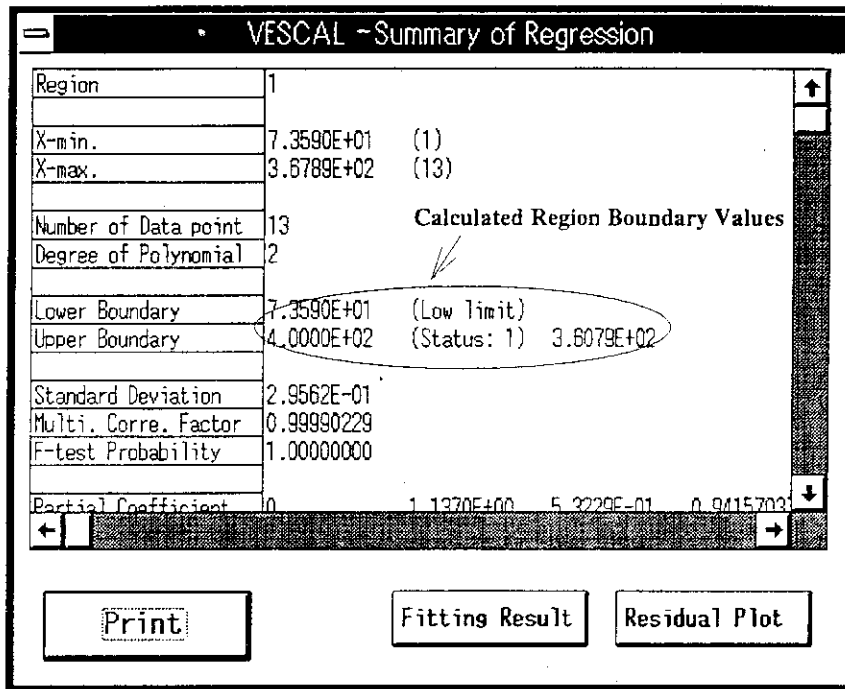


Fig.5.16 Screen View -VESCAL Summary Results of Multi-region Regression

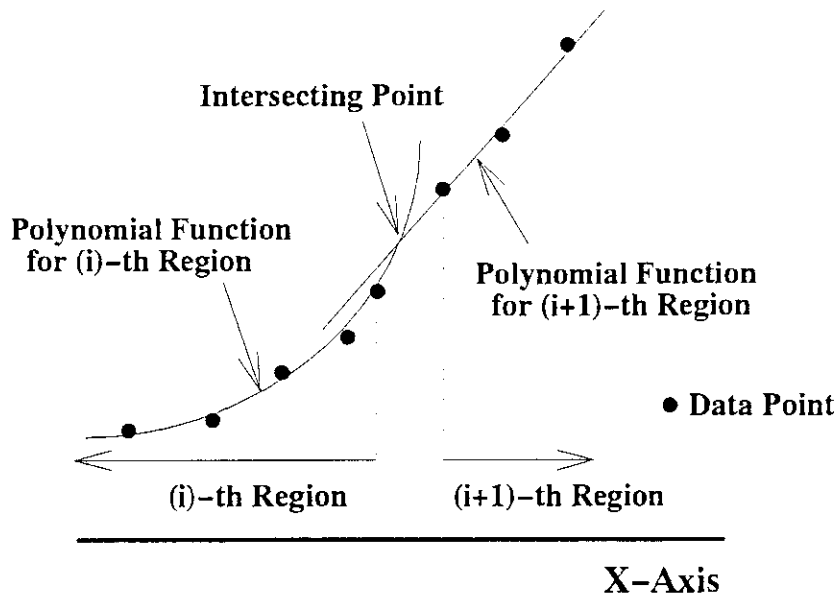


Fig.5.17 Summary of relationship between (i)-th and (i+1)-th Region Function (Status=0)

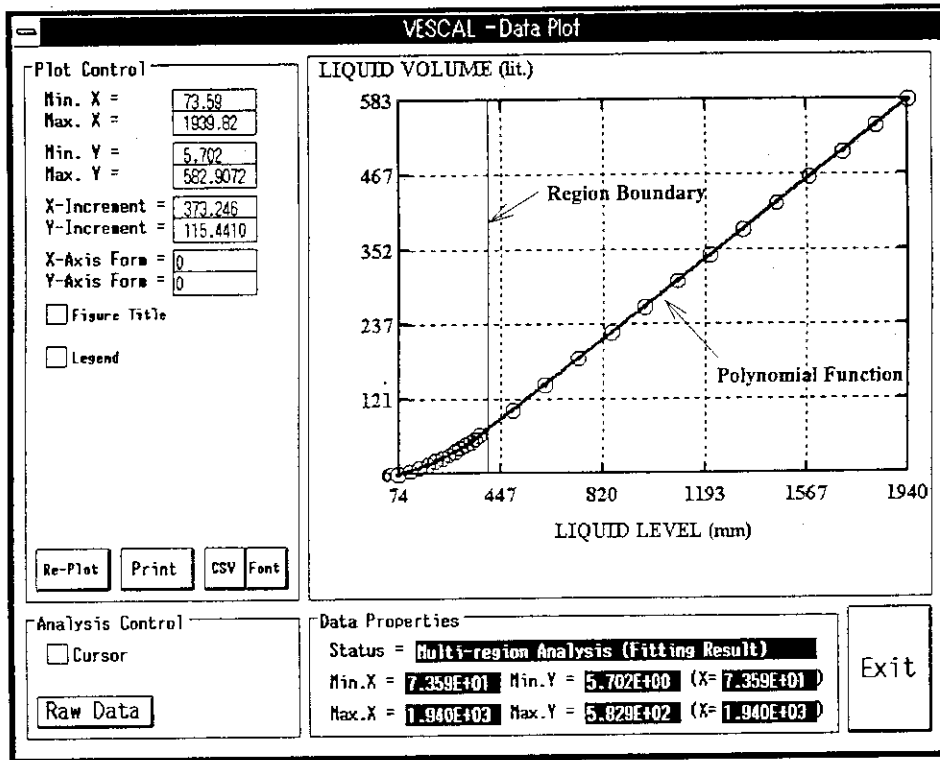


Fig.5.18(1) Screen View -VESCAL Multi-region Regression Analysis (1)  
- fitting result -

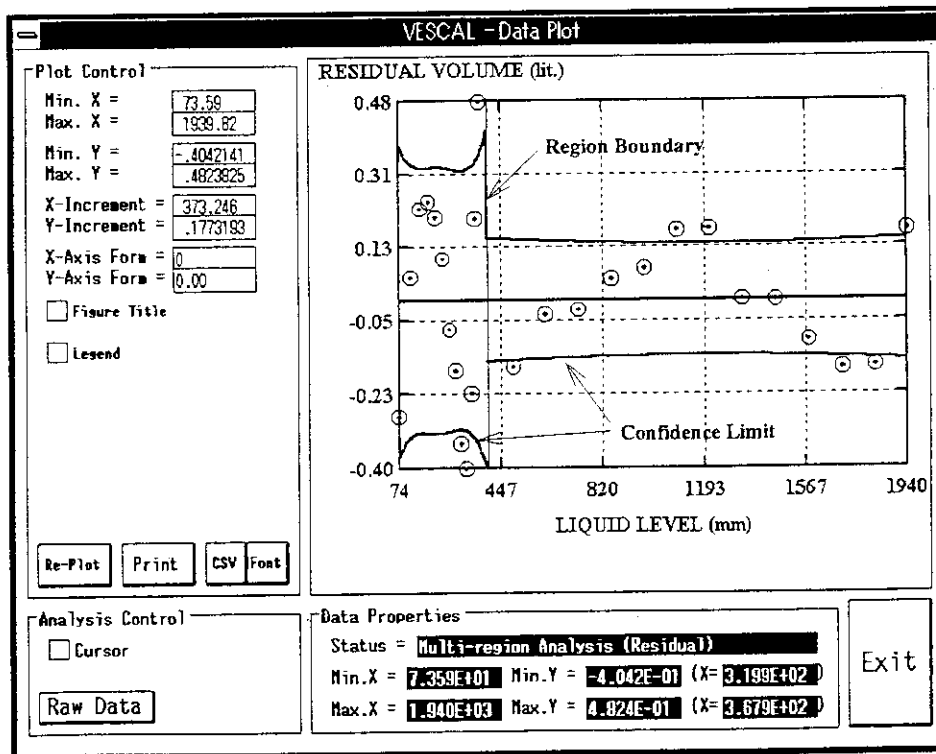


Fig.5.18(2) Screen View -VESCAL Multi-region Regression Analysis (2)  
- residual plot -

## 6. お わ り に

今回、NUCEF の計量槽校正データを簡便かつ効率良く解析し、校正関数を決定するためのプログラム VESCAL を作成した。このプログラムは、基本的には計量槽校正データの回帰分析を行うための道具であるが、この機能を効果的に利用するために、

- ごく普通のパーソナルコンピュータで実行することができ、
- 最新のグラフィカル・インターフェイスにより、簡便な操作を提供する。

という特徴を備え、試行錯誤が要求される解析作業において作業効率の向上に大きく寄与することが期待できる。プログラムの検証計算の結果、本プログラムの計算結果は汎用の統計解析パッケージプログラムの結果と良好な一致を示した。

現在本プログラムを利用して NUCEF の計量槽校正データを対象とした解析計算が行われているが、本プログラムは NUCEF に限らず、溶液状の核物質の計量管理が必要な施設における同種の解析に際しても十分効果を発揮できるものとする。

## 謝 辞

本書をまとめるにあたり、多くの助言を頂いた NUCEF 試験室長辻野毅氏、NUCEF 試験室次長竹下功氏に深く感謝いたします。さらに、本書の原稿の査読をして頂いた保障措置技術研究室主任研究員小山謹二氏に深く感謝いたします。



## 6. お わ り に

今回、NUCEF の計量槽校正データを簡便かつ効率良く解析し、校正関数を決定するためのプログラム VESCAL を作成した。このプログラムは、基本的には計量槽校正データの回帰分析を行うための道具であるが、この機能を効果的に利用するために、

- ごく普通のパーソナルコンピュータで実行することができ、
- 最新のグラフィカル・インターフェイスにより、簡便な操作を提供する。

という特徴を備え、試行錯誤が要求される解析作業において作業効率の向上に大きく寄与することが期待できる。プログラムの検証計算の結果、本プログラムの計算結果は汎用の統計解析パッケージプログラムの結果と良好な一致を示した。

現在本プログラムを利用して NUCEF の計量槽校正データを対象とした解析計算が行われているが、本プログラムは NUCEF に限らず、溶液状の核物質の計量管理が必要な施設における同種の解析に際しても十分効果を発揮できるものとする。

## 謝 辞

本書をまとめるにあたり、多くの助言を頂いた NUCEF 試験室長辻野毅氏、NUCEF 試験室次長竹下功氏に深く感謝いたします。さらに、本書の原稿の査読をして頂いた保障措置技術研究室主任研究員小山謹二氏に深く感謝いたします。

## 参 考 文 献

- [1] Matsumoto, A.: " NUCEF Program ", Proc. of the 3rd Int. Conf. on Nuclear Fuel Reprocessing and Waste Management (RECOD '91), Sendai, Japan, Vol.1, pp.189-194, (1991)
- [2] Tonoike, K. et al.: " NUCEF Project and Its Contribution to Emerging Fuel Cycle Back-end ", Proc. of the Int. Conf. and Technology Exposition on Future Nuclear Systems: Emerging Fuel Cycles and Waste Disposal Options (GLOBAL '93), Seattle, Washington, pp.555-562, (1993)
- [3] 竹下他: 「NUCEFにおける核物質管理の特徴」, 第10回核物質管理学会年次大会論文集, pp.68-72, (1989)
- [4] 柳澤他: 「NUCEF臨界実験施設の計量槽初期校正(1)-測定方法とその結果-」, JAERI-Tech 94-001, (1994)
- [5] 柳澤: 「NUCEF臨界実験施設の計量槽初期校正(2)-データ解析-」, JAERI-Tech 94-005, (1994)
- [6] ANSI/INMM.: "American National Standard for Nuclear Materials Control - Volume Calibration Techniques", ARNI N15.19, (1989)
- [7] 奥野他: 「多変量解析法」, 日科技連出版社
- [8] NBS: "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables", A Wiley-Interscience Publication, (1972)
- [9] Elliot, A.C. et al.; "Benchmark data sets for evaluating microcomputer statistical programs", Colleague Microcomputer, Vol.11, pp.289-299 (1989)