

JAERI-Data/Code
95-007



改定版 VESCAL : 計量槽校正データ解析プログラム
— 円環・平板型計量槽の非線型領域モデルの改良 —

1995年5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, 1995

編集兼発行 日本原子力研究所
印刷 いばらき印刷機

改定版 V E S C A L : 計量槽校正データ解析プログラム
- 円環・平板型計量槽の非線型領域モデルの改良 -

日本原子力研究所東海研究所 N U C E F 試験室
柳澤 宏司

(1995年4月12日受理)

燃料サイクル安全工学研究施設 (N U C E F : Nuclear Fuel Cycle Safety Engineering Research Facility) の核物質計量管理のために、計量槽校正データ解析プログラム V E S C A L を改良し、円環型及び平板型計量槽の非線型領域に適用する新たなモデルを追加した。

今回追加したモデルは、三種類の未知パラメータによって液位を体積に関する平方根関数で記述するものである。この新たなモデルを利用することによって、多項式モデルと比較して、円環型及び平板型計量槽の非線型領域の液位と体積の関係をより少ないパラメータ数で精度良く記述することができる。今回の改良モデルに対する検証の結果、本プログラムによる計算結果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。

また、今回の改良モデルは N U C E F のみならず他の核物質溶液を取り扱うバルク施設での同様の解析においても効果的に利用できるものとする。

本書は、プログラム全体の概要と今回の改定に関する計算手法及び検証計算結果についてまとめたものである。

Revised VESCAL: Vessel Calibration Data Analysis Program
- Improvement of a Model for Non-linear Parts of Annular and Slab Tanks -

Hiroshi YANAGISAWA

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

(Received April 12, 1995)

For the purpose of the nuclear material accountancy and control for NUCEF: the Nuclear Fuel Cycle Safety Engineering Research Facility, the vessel calibration data analysis program: VESCAL is revised, and a new model for non-linear parts of annular and slab tanks is added to the program.

The new model has three unknown parameters, and liquid level is expressed as a square root function with respect to liquid volume. Using the new model, an accurate calibration function on the level and volume data for non-linear parts of annular and slab tanks can be obtained with the smaller number of unknown parameters, compared with a polynomial function model. As a result of benchmark tests for this revision, it was proved that numerical results computed with VESCAL well agreed with those by a statistical analysis program package which is widely used.

In addition, the new model would be useful for carrying out data analyses on the vessel calibration at the other bulk handling facilities as well as at NUCEF.

This paper describes summary of the program, computational methods and results of benchmark tests concerning this revision.

Keywords: NUCEF, Nuclear Material Accountancy and Control, Vessel Calibration, Computational Program, Data Analysis, Calibration Function, Non-linear Model

目 次

1. はじめに	1
2. プログラム概要	2
3. 計算手法	17
3.1 非線型最小二乗法	17
3.2 パラメータ推定値の誤差	19
3.3 モデルによる推定値の誤差	20
3.4 VESCAL内蔵非線型モデルへの適用	20
3.5 分散分析	24
3.6 F -検定	28
3.7 t -検定及び u -検定	29
3.8 カイ二乗検定	30
3.9 逆推定方法	31
3.10 数値計算手法	33
4. 検証計算結果	40
5. おわりに	66
謝 辞	67
参考文献	67
付録 VESCAL操作マニュアル	68

Contents

1. Introduction	1
2. Summary of Program	2
3. Computational Method	17
3.1 Non-linear Least Square Method	17
3.2 Error of Estimated Parameter	19
3.3 Error of Model Estimation	20
3.4 Application to Non-linear Model in VESCAL	20
3.5 Variance Analysis	24
3.6 F -test	28
3.7 t -test and u -test	29
3.8 Chi-square Test	30
3.9 Inverse Estimation	31
3.10 Method of Numerical Analysis	33
4. Result of Benchmark Test	40
5. Conclusion	66
Acknowledgment	67
References	67
Appendix VESCAL Operation Manual	68

1. はじめに

VESCAL (Vessel Calibration Data Analysis Program) は、再処理施設等の核物質溶液バルクを取扱う施設において、ディップチューブ式液位計によって溶液の計量を行う場合に、計量槽の容量校正データの解析作業を支援する目的で開発されたプログラムであり、パーソナルコンピュータ上で実行することができる。^[1] 本プログラムは、試行錯誤が要求される校正データの解析及び校正関数の決定を効率良くすすめるために、回帰計算、有意差検定等の各種の統計解析機能を備えており、最新のグラフィカル・ユーザー・インターフェイスとあいまって解析作業を強力に支援する。

プログラム VESCAL は、日本原子力研究所東海研究所に建設された燃料サイクル安全工学研究施設: NUCEF (Nuclear Fuel Cycle Safety Engineering Research Facility)^[2,3] において計量槽の容量校正データの解析に利用され、NUCEF の臨界実験施設に設置されている 17 基の計量槽（円環槽 11 基、平板槽 5 基、直立円筒槽 1 基；容量 30 ～ 580 lit.）について校正関数を決定している。^[4-6]

今回の VESCAL の改定作業は、上記の解析を通して得られた経験に基づき、円環槽及び平板槽の非線型領域に対する新たなモデルを導入することを主な目的として行った。一般的に円環槽及び平板槽には溶液回収時のホールドアップを極力低減するために傾斜した底板を有するという構造上の特徴がある。従って、これらの槽内の溶液体積は、底板が傾斜した領域では液位について非線型の関係となり（非線型領域）、ある体積以上では線型の関係となる（線型領域）。従来版の VESCAL では、このような非線型領域及び線型領域いずれについても多項式モデルによる線型回帰計算のみをサポートし、^[1] NUCEF の計量槽容量の校正関数も多項式モデルによって決定された。^[4,6] 非線型領域の正確なモデル化はヒール量（溶液回収時に回収しきれずに槽の底に残存する液量）を推定する上で重要であり、特に施設のホット運転以降に定期的実施する計量槽の再校正では、初期条件の設定（校正開始時点での槽内に残存する液量の確定）を行う上で重要な役割を果たす。

今回、プログラム VESCAL には、円環槽及び平板槽の非線型領域を対象とした新たな非線型モデルによる回帰計算機能を追加した。この新たなモデルの有効性については次章で詳しく説明するが、従来版の多項式モデルよりも少ない数の未知パラメータによって、測定データを精度良く再現することができる。また、この改定作業にあたっては、今回追加したモデルに対する回帰計算手法、分散分析、統計検定手法、数値計算手法について整理し、従来版と同様に強力なデータ解析機能をプログラムに組み込んでいる。

なお、今回追加したモデルは 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、プログラムの概要及び改定内容、計算手法及び検証計算結果についてまとめたものである。プログラムの使用方法については基本的には従来版と大きく変わることはないが、ユーザー・インターフェイス部分について若干の変更を施しているため、付録でまとめて解説する。

2. プログラム概要

本章では、先ず今回の改定作業で追加した非線型モデルの概要について説明し、改定版プログラムの全体構成、動作条件等について説明する。

今回の非線型モデルは円環槽及び平板槽の非線型領域のモデル化のために導入したものであり、非線型領域の液位と体積の実測データの関係からある程度経験的に定めたものである。文献[6]でも述べているように、計量槽内の液位と体積の関係はこれらを直接プロットするよりも、体積の液位に関する差分値（体積の液位に関する一次導関数の近似値、即ち液面の面積の近似値）としてプロットするほうがその傾向を把握しやすい。このようなプロットを差分プロット（Incremental Slope Plot）と呼ぶ。^[6]

Fig.2.1 及び Fig.2.2 にはそれぞれ NUCEF に設置されている代表的な円環槽（容量 580 lit.）と平板槽（容量 420 lit.）の差分プロットを示している。これらのプロットより、円環槽及び平板槽の非線型領域における体積の液位に関する差分値は概ね一次式で近似することができることが分かる。この傾向は、NUCEF に設置されている全ての円環型及び平板型計量槽についても同様であり、^[6] 他の施設でも同じ傾向を有するものと考えられる。従って、次式のようにこれらの形状の槽の非線型領域について体積を液位の二次式で表現することは十分妥当と考えられる。

$$V = a \cdot L^2 + b \cdot L + c \quad (2.1)$$

ここで、 V, L はそれぞれ体積、液位を表し、 a, b, c は定数を表す。

さて、このような関係を考慮して最小二乗法によるデータフィットを行う場合に注意しなければならないことは、体積及び液位データそれぞれについての誤差の大きさである。最小二乗法を適用する上での前提の一つとして独立変数の誤差はゼロでなければならない。^[7] 独立変数が離散量で誤差なく指定できるような理想的な場合もあるが、多くの場合測定誤差を伴った連続量を指定しなければならない。計量槽校正データの場合もその例外ではなく測定誤差を有する連続量としての体積及び液位のいずれかを独立変数に指定しなければならない。このような場合は、より誤差が小さく十分制御されていると見なせるデータの方を独立変数に指定して、上記の理想的な前提に近づくよう解析条件を設定する必要がある。

NUCEFでの計量槽初期校正に関する測定結果によると、非線型領域の最大液位近傍での体積データの相対誤差は、円環槽及び平板槽ともに 0.02 ~ 0.04% であるのに対し、液位データの相対誤差は、0.10 ~ 0.54%（プルトニウム用円環槽）、0.49 ~ 1.13%（ウラン用円環槽）、0.68 ~ 1.09%（ウラン用平板槽）であり、液位データの誤差のほうが圧倒的に大きい。^[5] これは、液位データの基になる差圧計測の誤差が体積データの基となる重量測定の誤差よりも大きいことに起因し、この傾向は同種の計測系統を有する他施設でもあてはまるものと考えられる。

従って、このようなデータに対して最小二乗法によるフィッティングを行う場合には、より誤差のスケールが小さい体積を独立変数に指定することが必要である。この点に関して、文献[8]では以下のようなデータ解析手続きを提示している。

まず、より誤差のスケールが小さい体積データを独立変数としたモデル、

$$L = f(V) \quad (2.2)$$

に対して回帰計算を行い、モデル中の未知パラメータを推定する。ここで定まるモデルを文献[8]では校正関数 (Calibration Function) と呼んでいる。但し、通常施設者が必要とするのは、ある測定された液位に相当する体積の値なので、上記のパラメータ推定値に対する回帰の逆推定、即ち、(2.2)式の逆関数

$$V = f^{-1}(L) \quad (2.3)$$

を算出しなければならない。この逆関数を文献[8]では測定関数 (Measurement Function) と呼んでいる。

計量槽の線型領域に上記の解析手続きを適用することは比較的容易である。線型領域では液位は体積の一次式で表されるため、その逆関数即ち測定関数もまた一次式となり回帰の逆推定は比較的簡単である。

しかし、非線型領域での解析手続きは困難となる。特に校正関数のモデルとして多項式を適用した場合には、データフィットによる校正関数の決定は比較的容易ではあるが、多項式次数が大きくなると逆関数即ち測定関数を導出することが困難であり、仮に得られたとしても測定関数が(2.1)式の関係の有していることをほとんど期待できない。つまり、従来版 VESCAL^[1] に備えている多項式モデルでは、非線型領域の測定関数を精度良く求めることが困難である。

そこで、今回の VESCAL 改定では、円環槽及び平板槽の非線型領域における校正関数として、次式のような非線型モデルを新たに導入した。

$$L = \sqrt{\alpha \cdot V + \beta} + \gamma \quad (2.4)$$

ここで、 α, β, γ は未知パラメータである。この新たなモデルは(2.1)式の逆関数として定義されるものである。両者のパラメータ間の関係は、

$$\begin{aligned}
 a &= \frac{1}{\alpha} \\
 b &= -\frac{2\gamma}{\alpha} \\
 c &= \frac{\gamma^2 - \beta}{\alpha}
 \end{aligned}
 \tag{2.5}$$

となるため、逆関数の導出は容易であり、かつこのようにして得られた逆関数即ち測定関数は(2.1)式のような液位に関する二次式で表される。しかし、(2.4)式のモデルは未知パラメータに関して線型ではないため、従来版 VESCAL に内蔵されている線型回帰計算モジュールを利用することはできない。そこで、今回の改定では非線型回帰計算モジュールを新たに作成し VESCAL に追加した。また、(2.4)式のモデルに対応した分散分析法、*F*-検定及び *t*-検定手法等を整理し、プログラムに反映した。

これらの詳細については次章で述べるが、今回の新たなモデルの有効性に関して、予備的な解析結果を Fig.2.3(1)~(6) 及び Fig.2.4(1)~(6) に示す。これらは、それぞれ Fig.2.1 及び Fig.2.2 に示した円環槽及び平板槽の非線型領域の解析結果である。Fig.2.3(1)~(4) 及び Fig.2.4(1)~(4) は二次式から五次式までの多項式でモデル化した場合のフィッティング結果、Fig.2.3(5) 及び Fig.2.4(5) は(2.4)式に示した今回のモデルによってフィッティングした結果を表している。これらの結果より、今回導入した非線型モデルは多項式モデルに比べてデータの再現性が良いことが分かる。

さらに、Fig.2.3(6) 及び Fig.2.4(6) にはこれらの解析結果のまとめとして各モデルに対する標準偏差及び重相関係数（これらの詳細は次章に述べる）を未知パラメータ数とともに示している。なお、スケーリングの都合上 Fig.2.3(6) 及び Fig.2.4(6) では、重相関係数: *R* に関して $-100/\text{Log}(1-R)$ の値をプロットしており、標準偏差とともに値が小さいほうが測定データの再現性の良いモデルといえる。これらの結果より、今回導入した非線型モデルは少ない数（三個）の未知パラメータで測定データを良好に再現できることが定量的にも確認できる。

今回のプログラム改定の主要点は以上の通りであるが、改定版プログラムの全体構成と改良・追加箇所について Fig.2.5(1)~(5) に示す。Fig.2.5(1)~(3) に示しているように従来版の「差分プロット (Incremental Slope Plot) ^[1,8] モード」及び「プロフィール・プロット (Profile Plot) ^[1,8] モード」はそのまま継承されている。主たる改良箇所は「多領域回帰分析モード」でのフィッティングモジュール部分であり、この概要は Fig.2.5(5) に示す通りである。Fig.2.5(5) の右側の黒塗り部分が今回の改定で追加された非線型最小二乗法によるフィッティング制御ルーチンである。

さらに、従来版ではフィッティングの重み付けを均一として取り扱うことしか対応していなかったが、今回の改定では、独立変数を体積に設定した場合には、データ点毎に重み

を考慮できるように一部変更した。この重みは従属変数である液位の誤差分散の逆数とし、入力データファイルを参照して計算する。この場合の最小二乗法適用の妥当性（従属変数の誤差がガウス分布に従っていること）を確認するためにカイ二乗検定機能を新たにプログラムに追加した。

また、これ以外の細かい改良点としては、プロットデータの CSV (Comma Separated Value) 形式ファイルへの保存機能^[1] に関して、プログラムに読み込んだ測定データファイル名等の詳細情報を保存するとともに複数の測定データファイルを読み込んだ場合の各ファイル毎のデータソート結果を保存するように改良されている。この改良によって、VESCAL の解析データをさらに別のアプリケーション・プログラムで加工することが一層容易になっている。

本プログラムを実行するために必要となる計算機の資源条件は Table 2.1 に示されている通りであり、従来版と同様にマイクロソフト製 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マイクロソフト製 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。なお、今回の改定に伴ってプログラムサイズが 47 キロバイト程度大きくなっているが、殆ど実用上問題にはならない。また、ユーザー・インターフェイスの配置を見直して、スクリーン解像度の制限を緩め、640 x 480 ピクセルの解像度 (VGA解像度) でも操作可能としている。

Table 2.1 Conditions for executing revised VESCAL program

- | | |
|-----------------------|--|
| 1. Operating System: | Microsoft Windows Version 3.1J, |
| 2. Program Size: | About 157 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: | 640 x 480 pixels or more, |
| 8. Other: | VBRJP200.DLL and GRID.VBX are needed. |

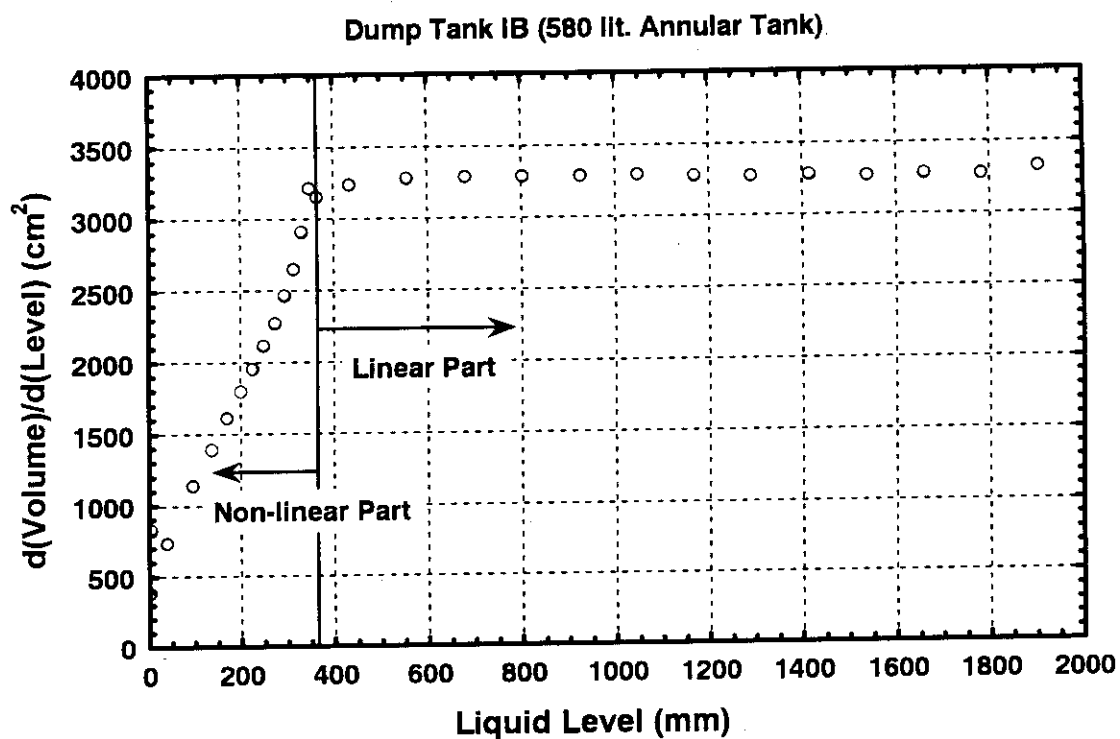


Fig.2.1 Incremental slope plot of 580 lit. annular tank in NUCEF

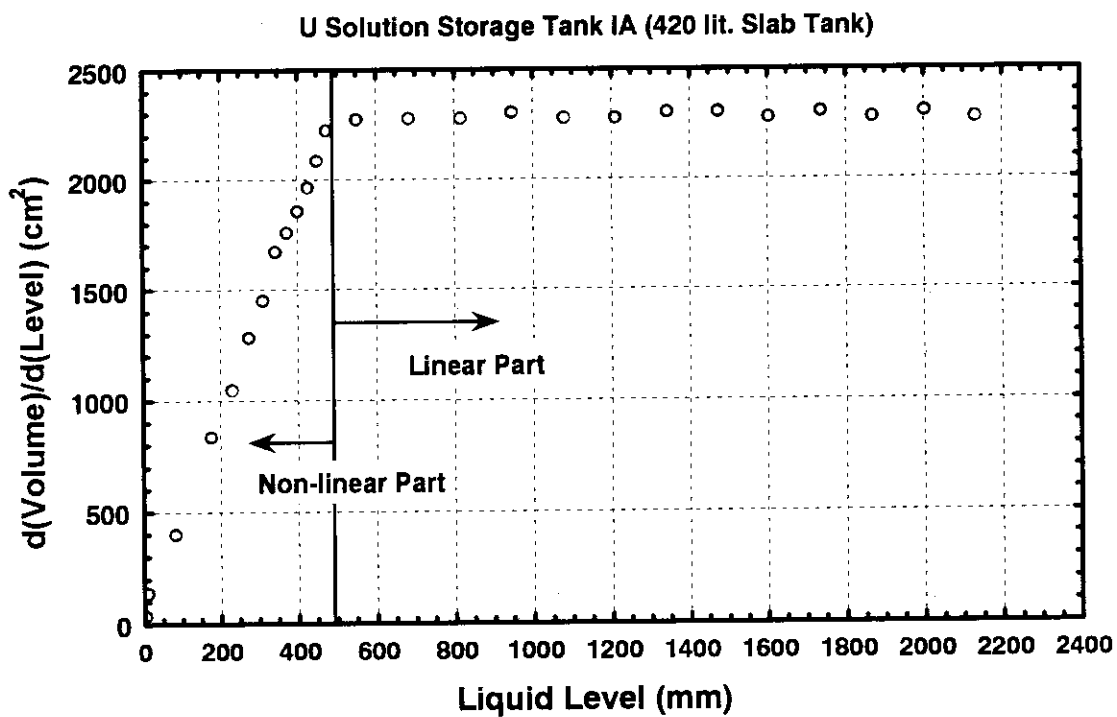


Fig.2.2 Incremental slope plot of 420 lit. slab tank in NUCEF

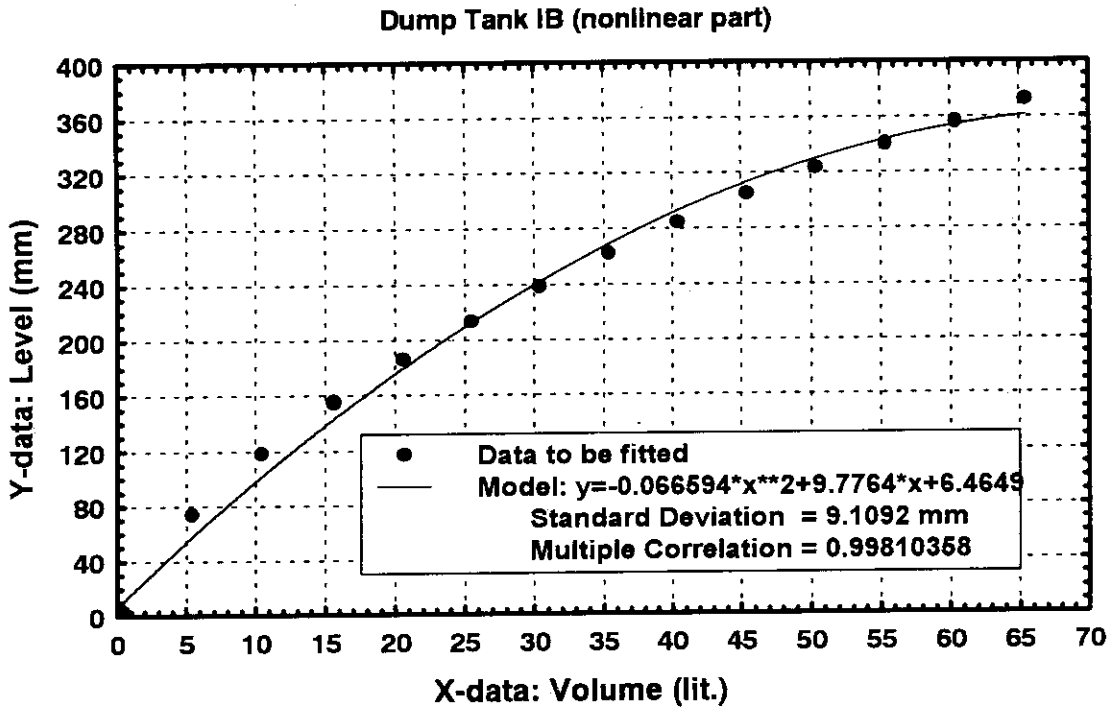


Fig.2.3(1) Result of data fitting (nonlinear part of 580 lit. annular tank)
 - polynomial model of 2nd degree -

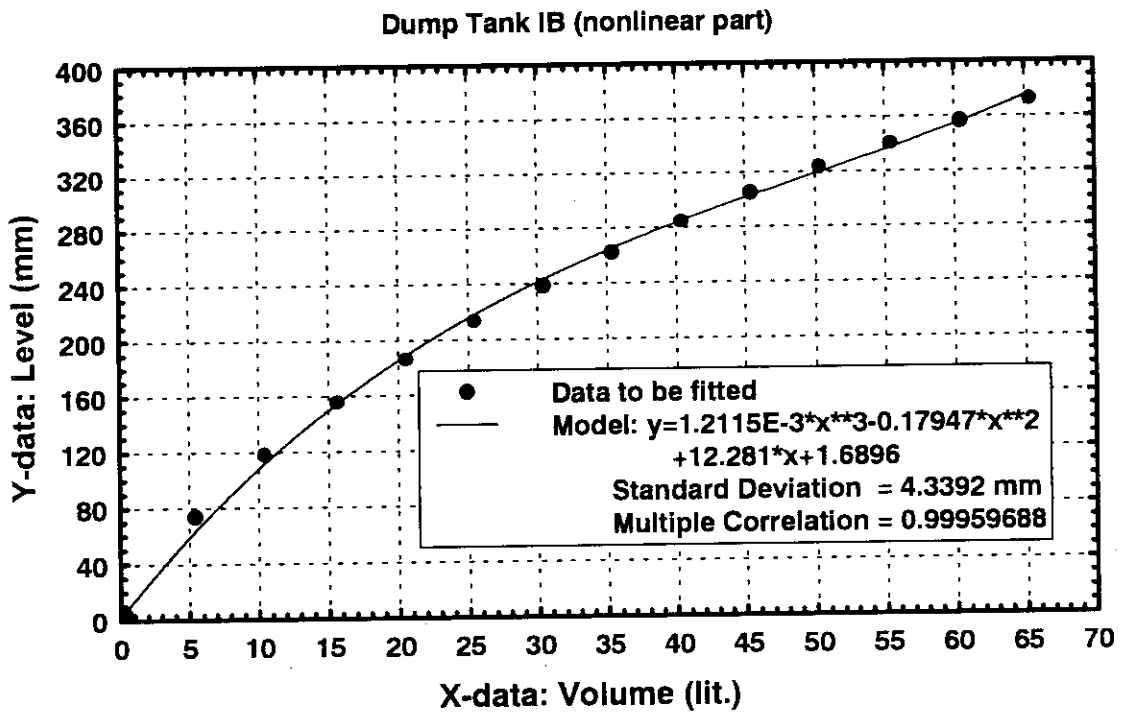


Fig.2.3(2) Result of data fitting (nonlinear part of 580 lit. annular tank)
 - polynomial model of 3rd degree -

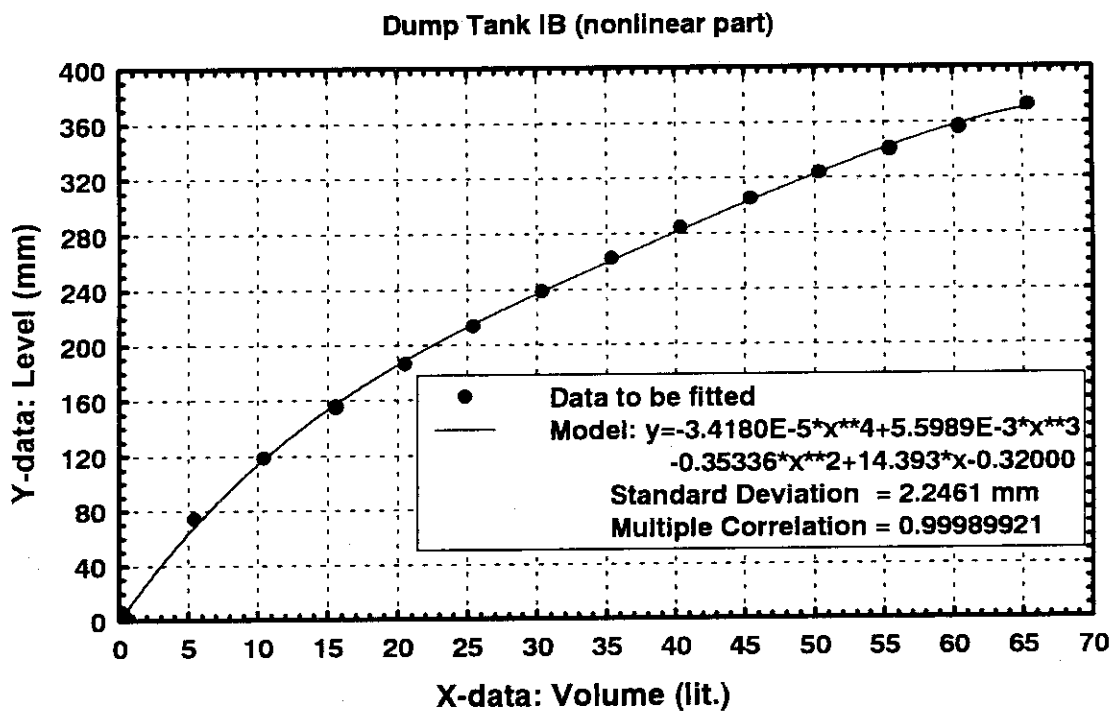


Fig.2.3(3) Result of data fitting (nonlinear part of 580 lit. annular tank)
 - polynomial model of 4th degree -

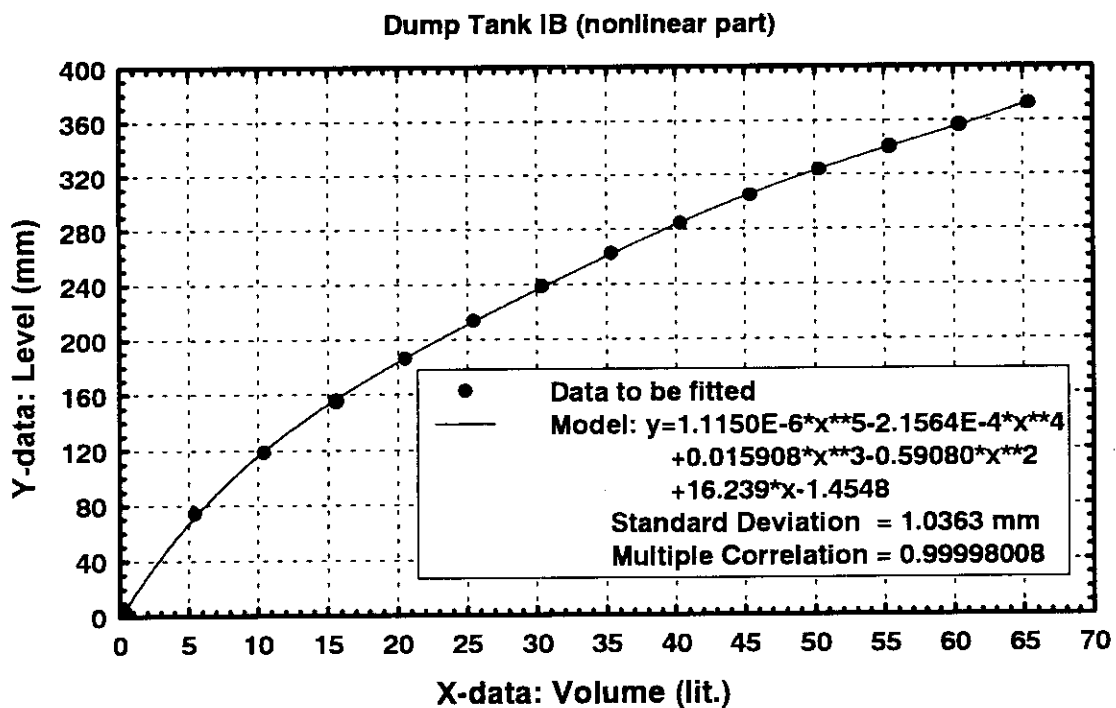


Fig.2.3(4) Result of data fitting (nonlinear part of 580 lit. annular tank)
 - polynomial model of 5th degree -

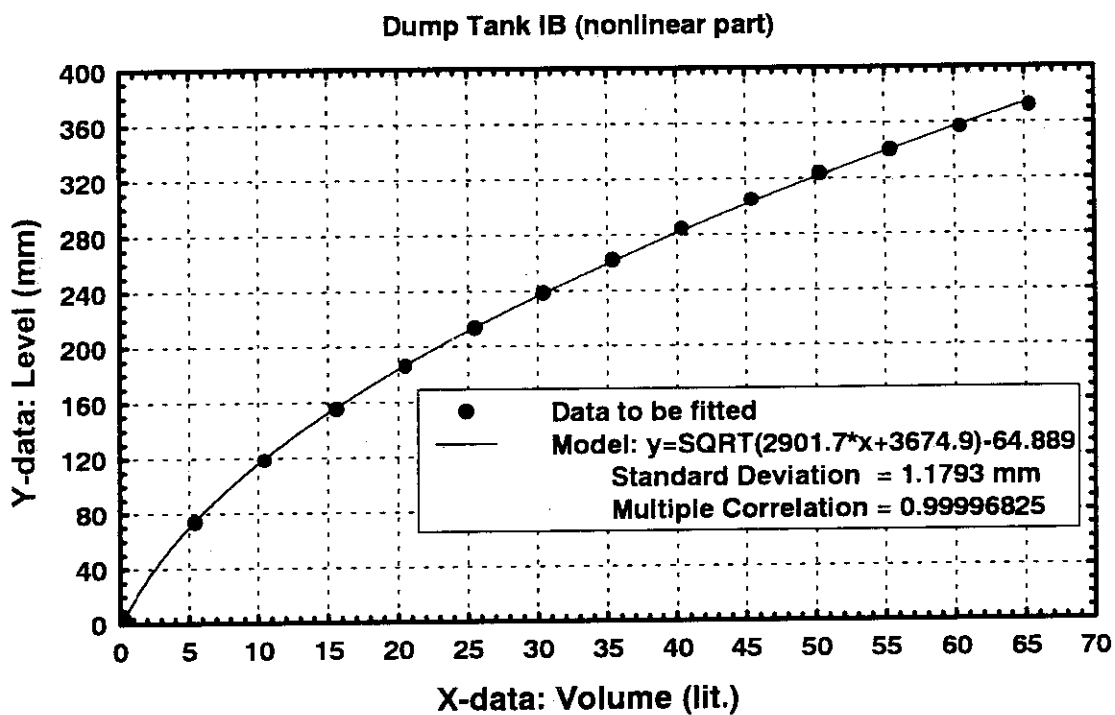


Fig.2.3(5) Result of data fitting (nonlinear part of 580 lit. annular tank)
 - new nonlinear model: square root function -

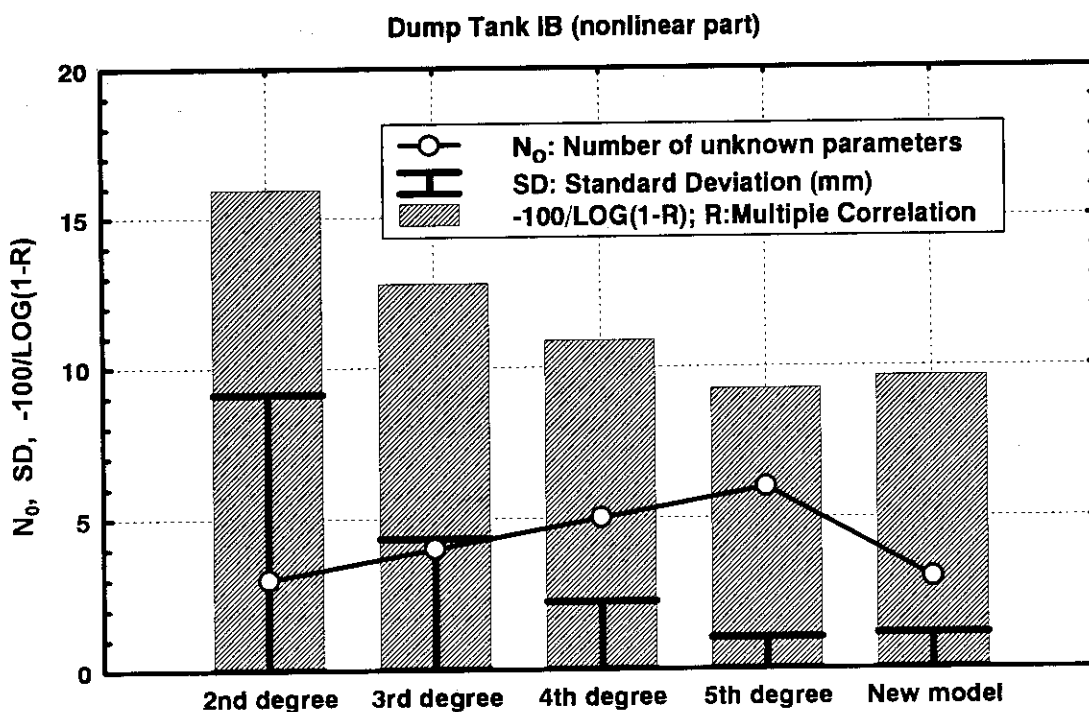


Fig.2.3(6) Summary result of data fitting
 (nonlinear part of 580 lit. annular tank in NUCEF)

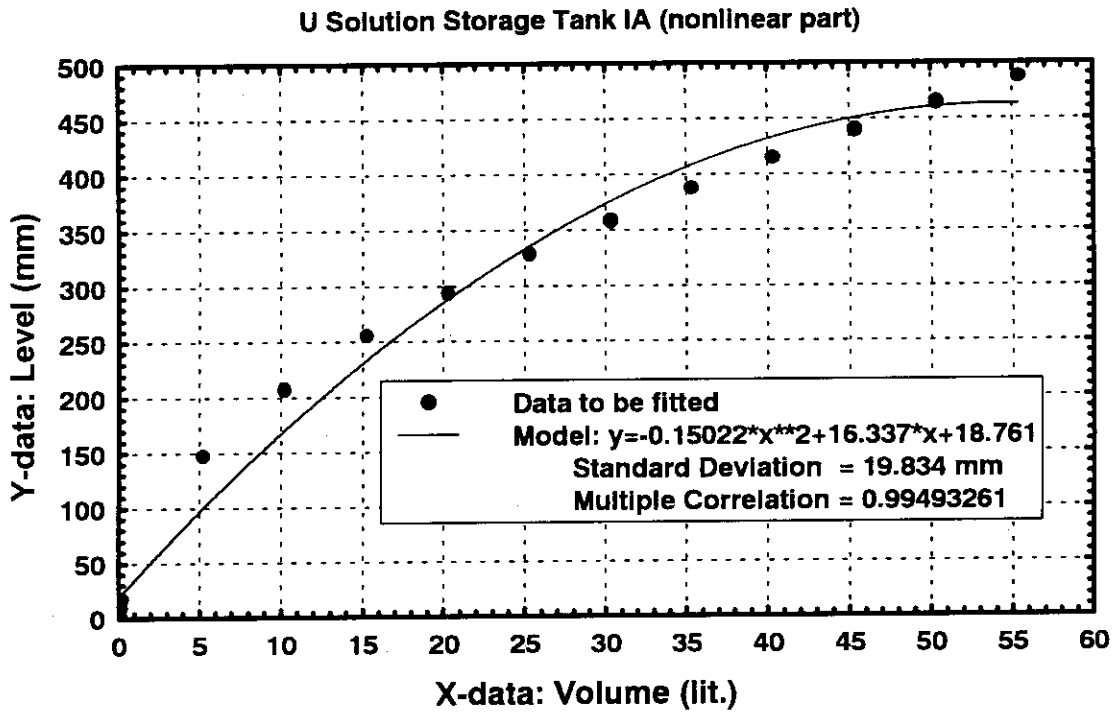


Fig.2.4(1) Result of data fitting (nonlinear part of 420 lit. slab tank)
 - polynomial model of 2nd degree -

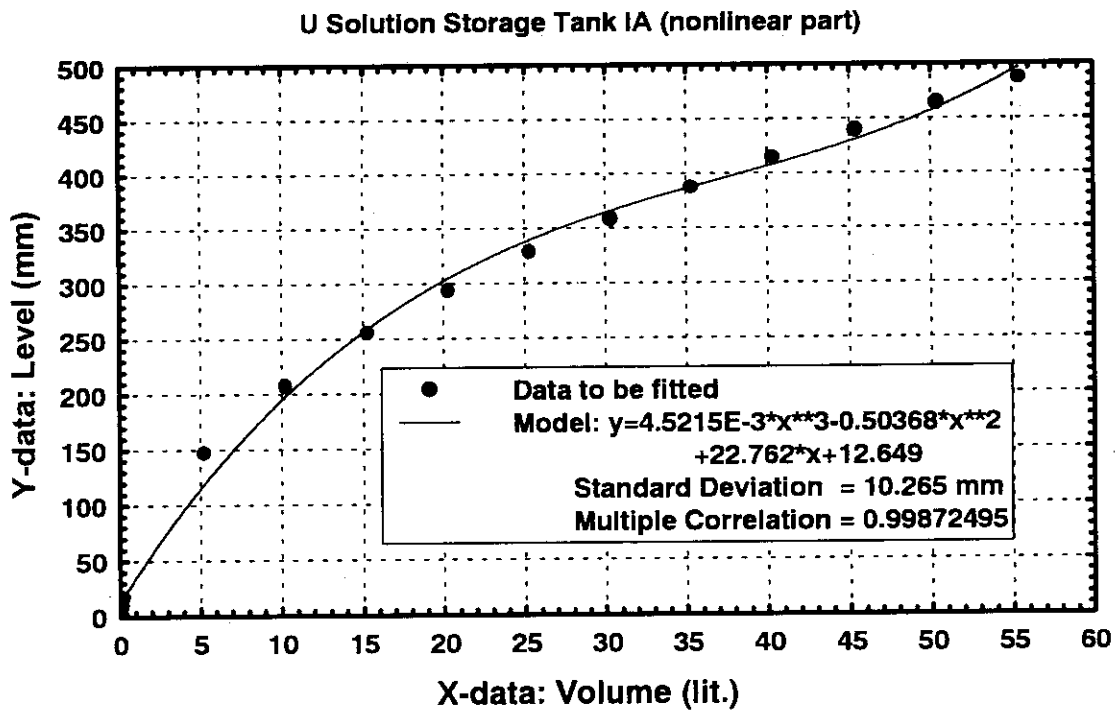


Fig.2.4(2) Result of data fitting (nonlinear part of 420 lit. slab tank)
 - polynomial model of 3rd degree -

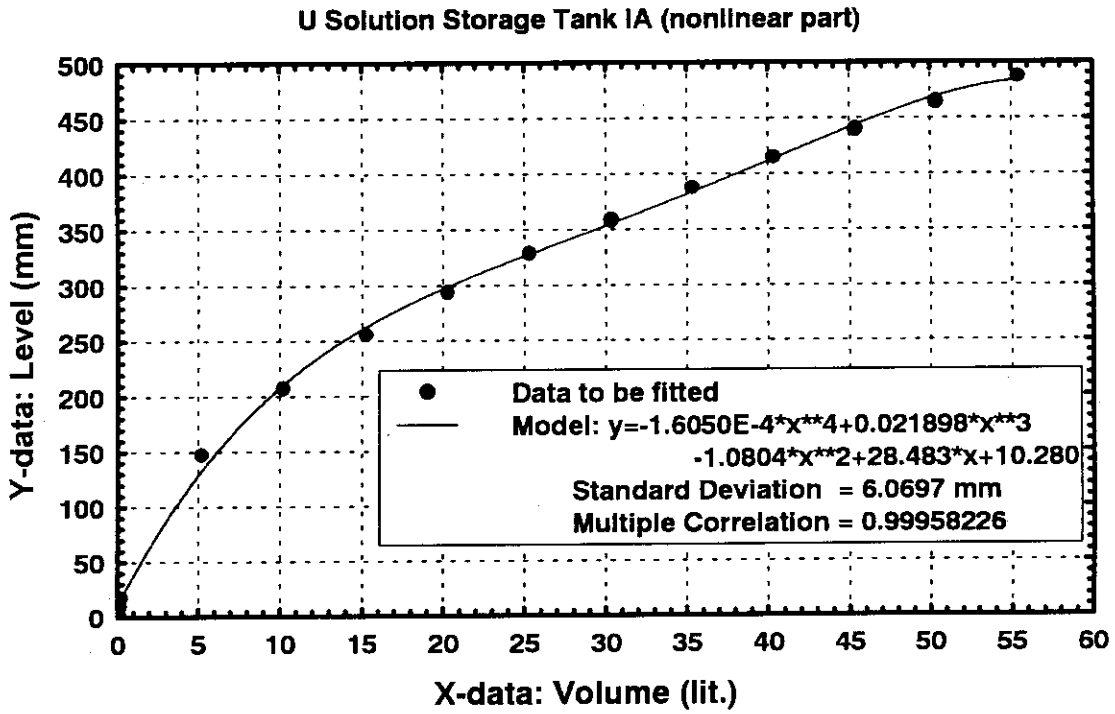


Fig.2.4(3) Result of data fitting (nonlinear part of 420 lit. slab tank)
- polynomial model of 4th degree -

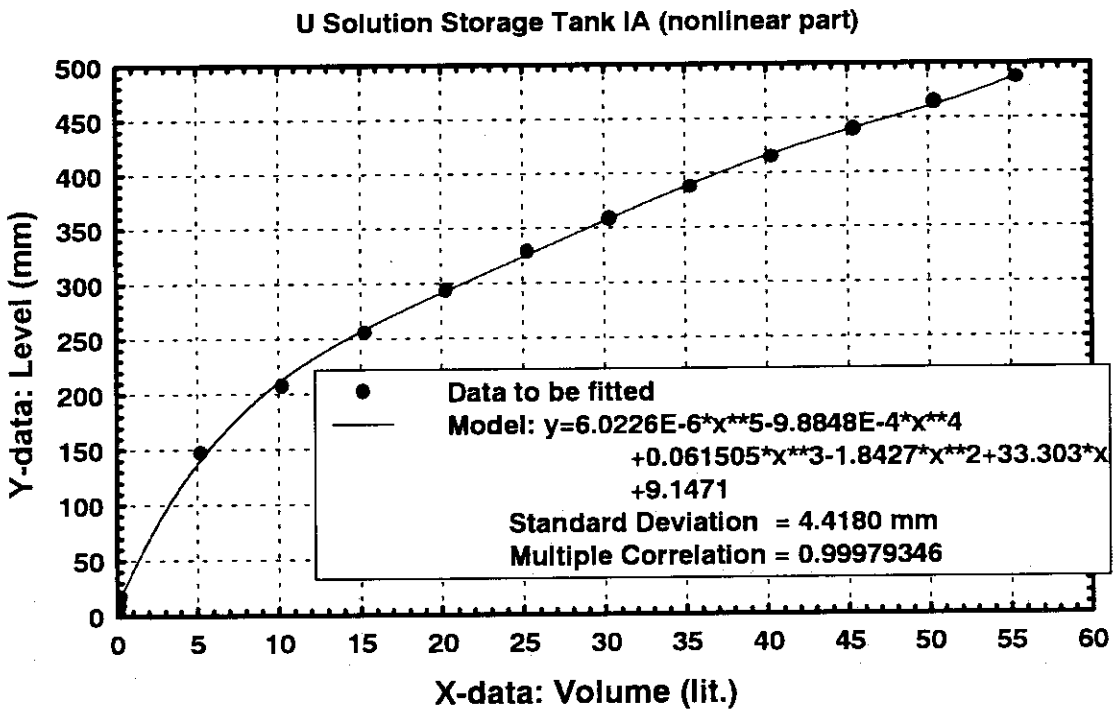


Fig.2.4(4) Result of data fitting (nonlinear part of 420 lit. slab tank)
- polynomial model of 5th degree -

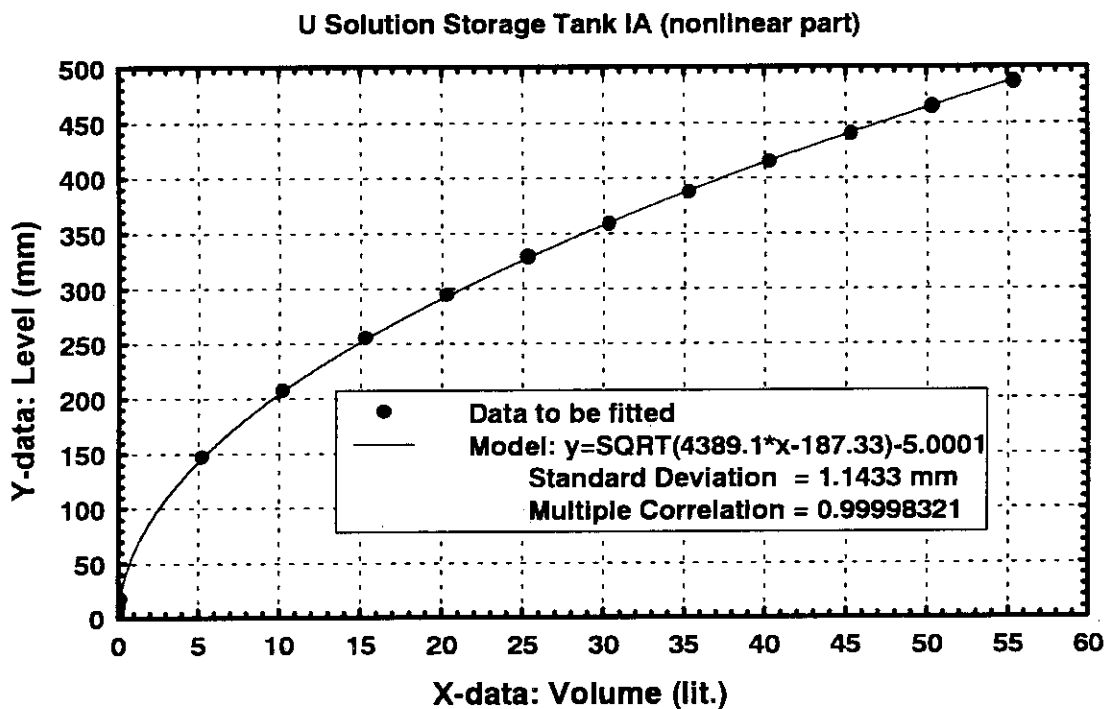


Fig.2.4(5) Result of data fitting (nonlinear part of 420 lit. slab tank)
 - new nonlinear model: square root function -

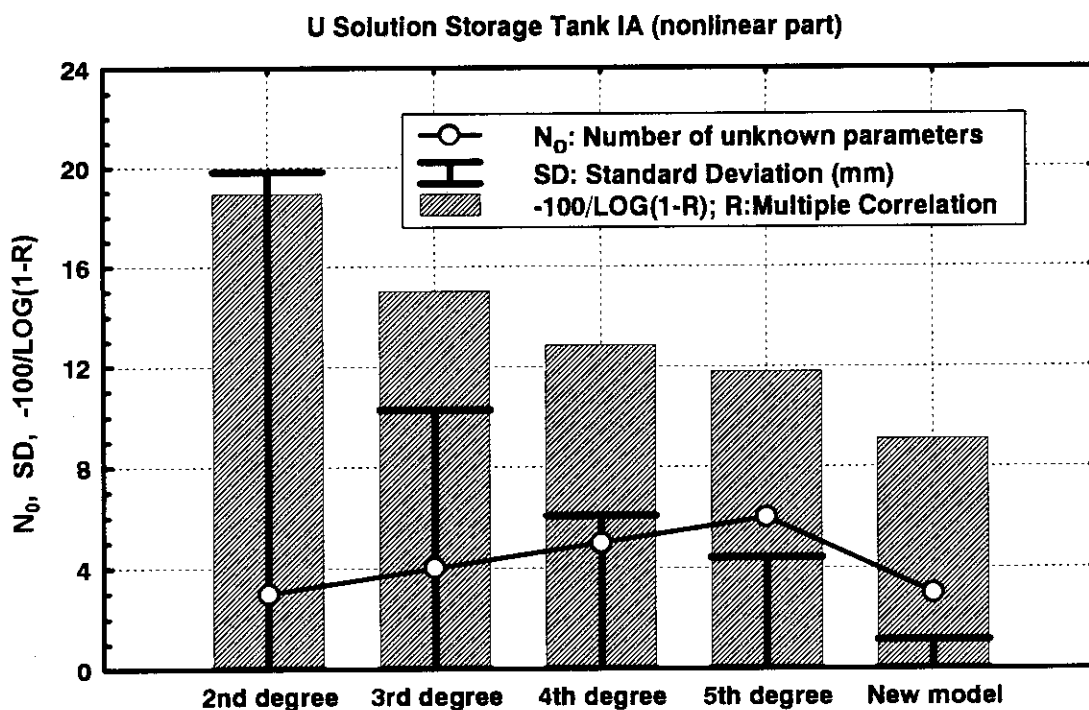


Fig.2.3(6) Summary result of data fitting
 (nonlinear part of 420 lit. slab tank in NUCEF)

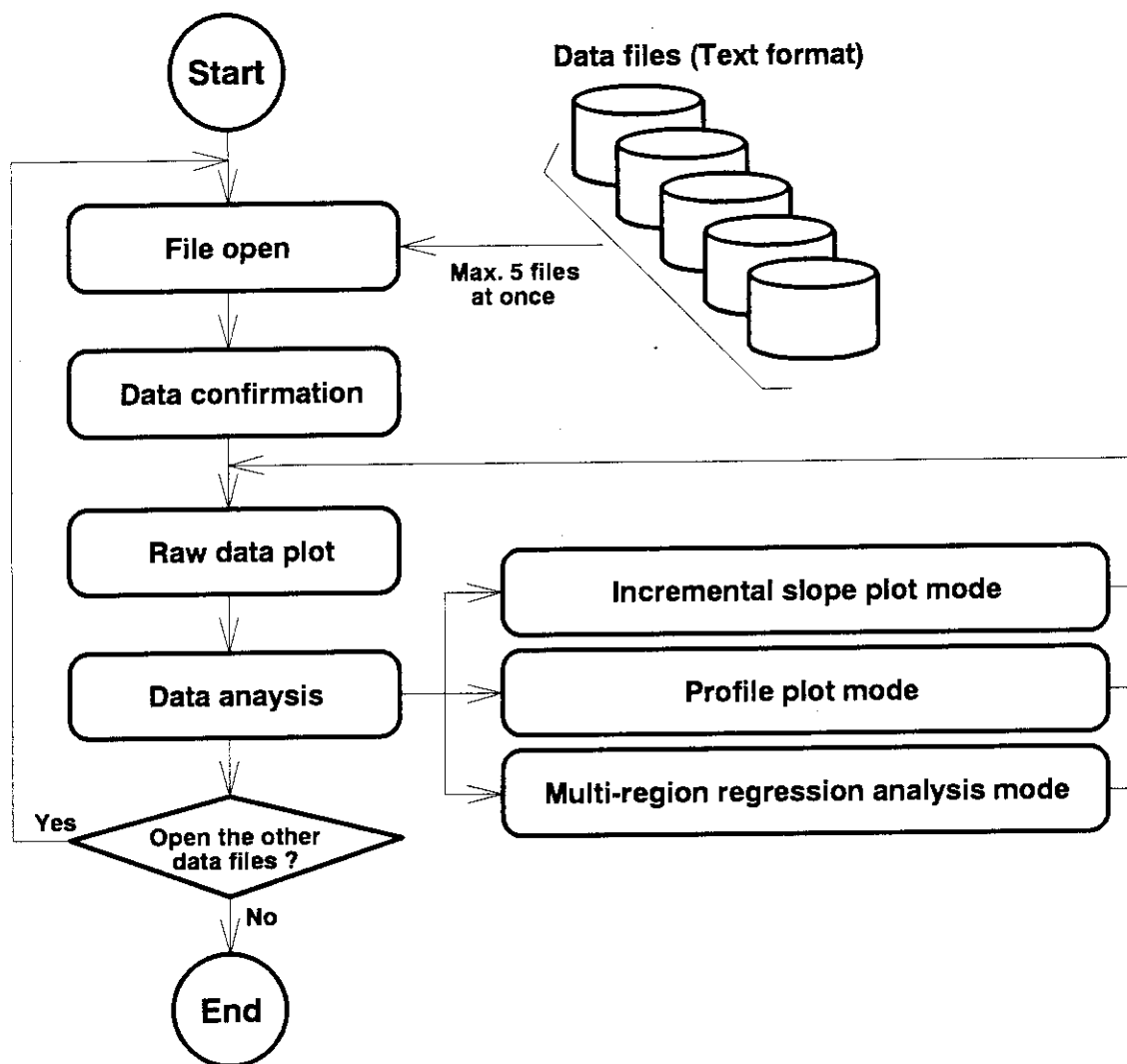


Fig.2.5(1) Summary flow of revised VESCAL program (1)
 - Overall flow of the program -

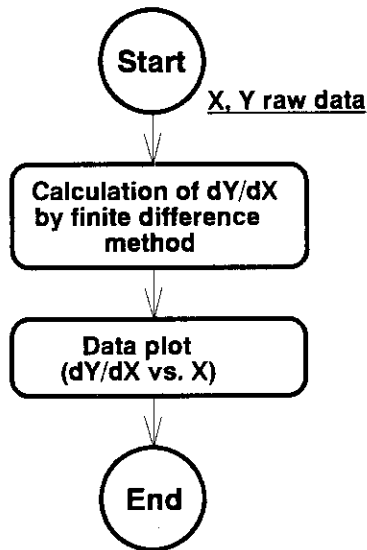


Fig.2.5(2) Summary flow of revised VESCAL program (2)
 - Incremental slope plot mode -

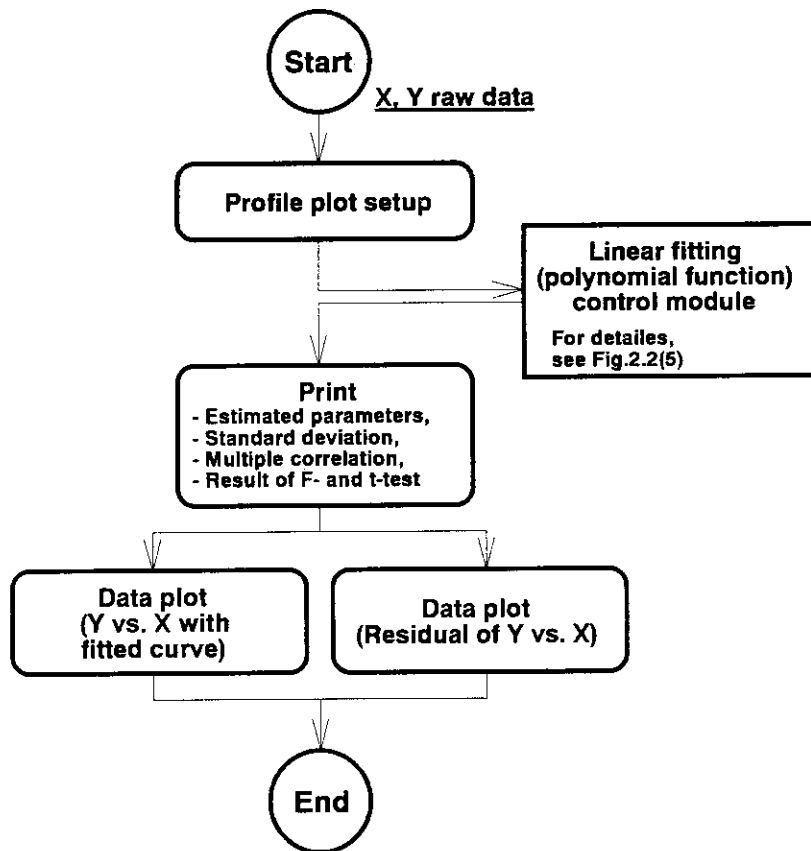


Fig.2.5(3) Summary flow of revised VESCAL program (3)
 - Profile plot mode -

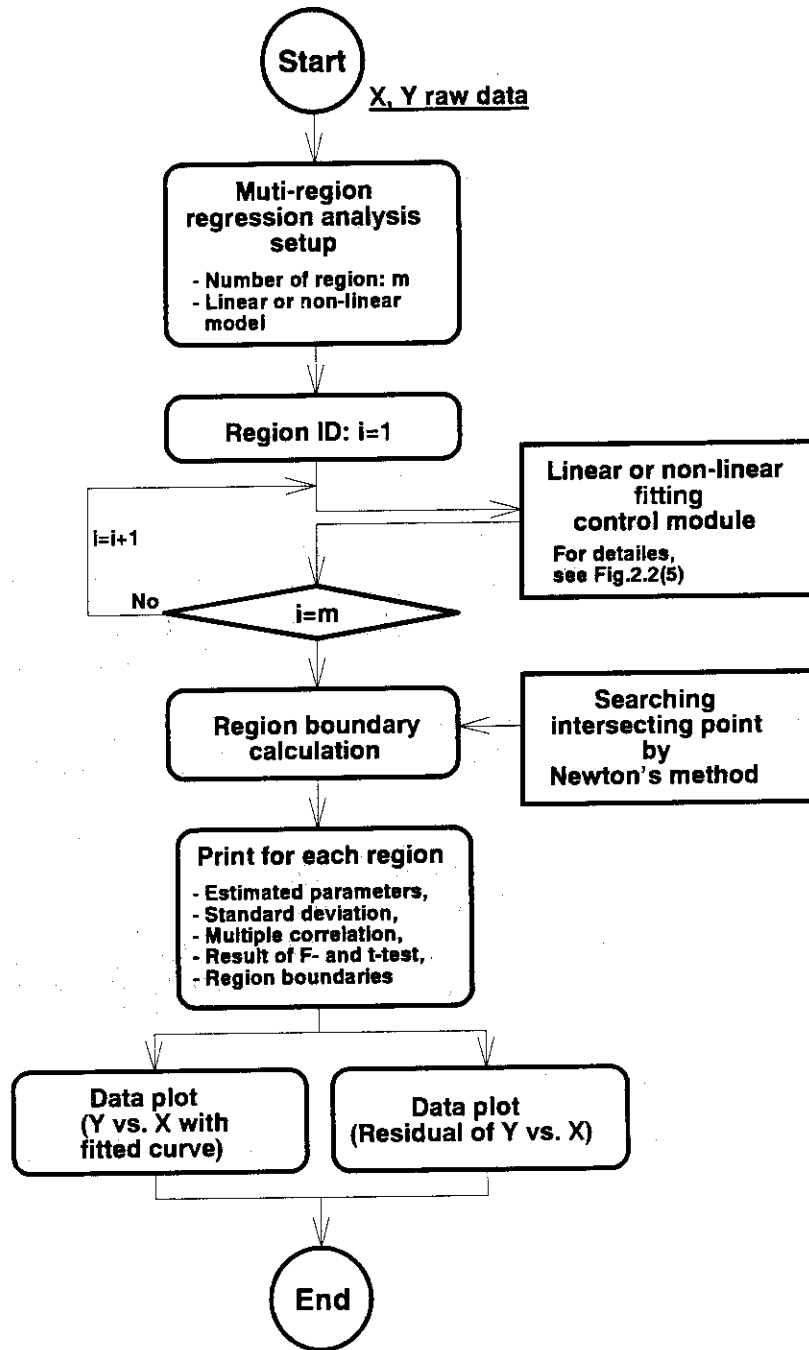


Fig.2.5(4) Summary flow of revised VESCAL program (4)
- Multi-region regression analysis mode -

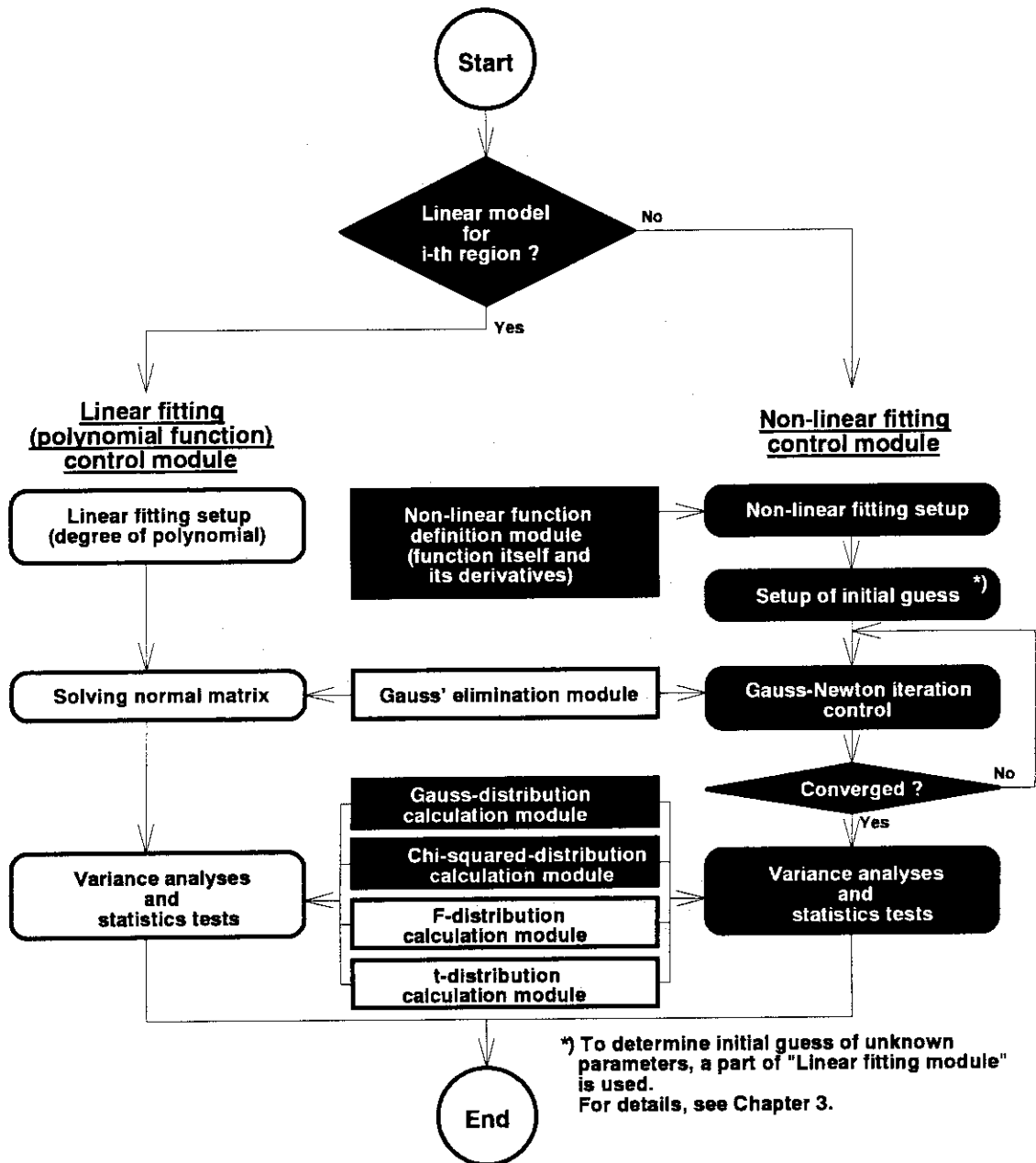


Fig.2.5(5) Summary flow of revised VESCAL program (5)
 - Data fitting procedure in the "Multi-region regression analysis mode" -

3. 計算手法

本章では、今回の改良でプログラム VESCAL に追加された非線型モデルに対する計算手法について説明する。前章までに説明してきたように今回追加したモデルは、従来版の VESCAL に内蔵されていた多項式モデルのように未知パラメータに関して線型ではないため、非線型最小二乗法に基づく解法が不可欠である。そこで、ここでは先ず非線型最小二乗法の一般的手法^[7]について紹介するとともに、この手法を今回追加したモデルに適用した結果を説明し、さらに最小二乗法によって決定されたモデル及びパラメータ推定値に関する有意差検定手法について説明する。また、これらの手法に基づいた VESCAL コードモジュールでの数値計算方法について説明する。

なお、本章では、太字で記載されている数式記号は特にことわりのないかぎり、行列又はベクトルを表すものとする。

3.1 非線型最小二乗法

今、 n 個の測定データ対 $(x_i, y_i, i=1, 2, 3, \dots, n)$ の関係を記述するために、未知パラメータ m 個（未知パラメータを m 次元ベクトル \mathbf{p} とする）を持つモデル： $y=f(x|\mathbf{p})$ を仮定すると、これらの測定データ対の関係は以下ようになる。

$$\begin{aligned} y_1 &= f(x_1|\mathbf{p}) + \varepsilon_1 \\ y_2 &= f(x_2|\mathbf{p}) + \varepsilon_2 \\ y_3 &= f(x_3|\mathbf{p}) + \varepsilon_3 \\ &\vdots \\ y_n &= f(x_n|\mathbf{p}) + \varepsilon_n \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

ここで、 ε_i は第 i 番目の測定データ： y_i に対する残差であり、一般的に最小二乗法とは、以下の重み付き残差平方和： $S(\mathbf{p})$ を最小にする未知パラメータ： \mathbf{p} を決定することである。

$$S(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - f(x_i|\mathbf{p})]^2 \tag{3.1.2}$$

(3.1.2)式の ω_i は第 i 番目の測定データに対する重みであり、次式で定義される。^[7]

$$\omega_i = \frac{\sigma_0^2}{\sigma_i^2} \tag{3.1.3}$$

ここで、 σ_i^2 は測定データ y_i の誤差分散であり、 σ_0^2 は任意のスケーリング定数である。

(3.1.2)式の $S(\mathbf{p})$ が最小となるための必要条件は、

$$\frac{\partial S(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (3.1.4)$$

であり、この条件を満たすパラメータ: \mathbf{p} は最小二乗推定値と呼ばれる。ここで、仮定するモデルが未知パラメータに関して非線型の場合は、(3.1.4)式から定まる条件は連立非線型方程式となり、Newton法のアルゴリズムによって以下のように k 番目の近似値 $\mathbf{p}^{(k)}$ から修正ベクトル $\Delta \mathbf{p}^{(k)}$ を決定し、これらの和を $k+1$ 番目の近似値とした反復計算によって解を得ることができる。

$$\sum_{i=1}^m \left[\frac{\partial^2 S(\mathbf{p})}{\partial p_j \partial p_i} \right]^{(k)} \Delta p_i^{(k)} = - \left[\frac{\partial S(\mathbf{p})}{\partial p_j} \right]^{(k)}, \quad (j=1,2,3,\dots,m) \quad (3.1.5)$$

$$\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{p}^{(k)} + \Delta \mathbf{p}^{(k)}$$

ここで、(3.1.2)式より、(3.1.5)式中の偏微分は次式で表すことができる。

$$\begin{aligned} -\frac{\partial S(\mathbf{p})}{\partial p_j} &= 2 \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_i|\mathbf{p})}{\partial p_j} \omega_i [y_i - f(x_i|\mathbf{p})] \\ \frac{\partial^2 S(\mathbf{p})}{\partial p_j \partial p_i} &= 2 \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f(x_i|\mathbf{p})}{\partial p_j} \omega_i \frac{\partial f(x_i|\mathbf{p})}{\partial p_i} - \frac{\partial^2 f(x_i|\mathbf{p})}{\partial p_j \partial p_i} \omega_i \{y_i - f(x_i|\mathbf{p})\} \right] \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

これら(3.1.5)式及び(3.1.6)式において、モデル中の未知パラメータに関する二階導関数の値が小さいと仮定すること、即ち、モデルが未知パラメータに関して線型近似できるものとして解く方法は Gauss-Newton法と呼ばれ、プログラム VESCAL では基本的にこの手法を採用している。

Gauss-Newton法による反復計算式は(3.1.5)式及び(3.1.6)式の二階微分を近似的にゼロとすることによって得られ、以下のような行列形式によって表すことができる。

$$({}^t \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{A})^{(k)} \Delta \mathbf{p}^{(k)} = [{}^t \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} \cdot \{\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{p})\}]^{(k)} \quad (3.1.7)$$

ここで、 \mathbf{A} はヤコビアン行列 ($n \times m$) であり、その要素は次式で表される。また、

左上付きの記号 t は行列又はベクトルの転置を表す。

$$A_{ij} = \frac{\partial f(x_i | p)}{\partial p_j}, \quad (i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, m) \quad (3.1.8)$$

また、 W は対角要素を ω_i とする対角行列 ($n \times n$, 重み行列) である。

以下では、(3.1.7)式の反復計算式によって定まるパラメータ推定値を \hat{p} と表すことにする。

3.2 パラメータ推定値の誤差

ここでは、測定値: y の誤差がどのようにパラメータ推定値: \hat{p} の誤差に伝播するかについて示す。測定値の誤差範囲が小さく局所的に線型近似ができると仮定すると、パラメータ推定値の誤差: $\delta\hat{p}$ は(3.1.7)式の関係より、以下のように測定値の誤差: δy の線型結合で表すことができる。^[7]

$$\delta\hat{p} = ({}^tAWA)^{-1} \cdot {}^tAW \cdot \delta y \quad (3.2.1)$$

従って、パラメータ推定値の誤差の分散・共分散からなる誤差行列: $\Sigma_{\hat{p}}$ は次式で表すことができる。

$$\begin{aligned} \Sigma_{\hat{p}} &= \langle \delta\hat{p} \cdot {}^t\delta\hat{p} \rangle \\ &= ({}^tAWA)^{-1} \cdot {}^tAW \langle \delta y \cdot {}^t\delta y \rangle WA \cdot ({}^tAWA)^{-1} \\ &= ({}^tAWA)^{-1} \cdot {}^tAW \cdot \Sigma_y \cdot WA \cdot ({}^tAWA)^{-1} \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

ここで、 Σ_y は測定値: y の誤差行列であり、(3.1.3)式より次式で表される。

$$\Sigma_y \equiv \sigma_0^2 \cdot W^{-1} \quad (3.2.3)$$

そこで、(3.2.3)式を(3.2.2)式に代入して整理すると、パラメータ推定値の誤差行列は次式のようになる。

$$\begin{aligned} \Sigma_{\hat{p}} &= ({}^tAWA)^{-1} \cdot {}^tAW \cdot \Sigma_y \cdot WA \cdot ({}^tAWA)^{-1} \\ &= ({}^tAWA)^{-1} \cdot {}^tAW \cdot (\sigma_0^2 \cdot W^{-1}) \cdot WA \cdot ({}^tAWA)^{-1} = \sigma_0^2 \cdot ({}^tAWA)^{-1} \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

この式により、誤差行列: $\Sigma_{\hat{p}}$ の対角要素が対応するパラメータ推定値の誤差の分散であり、非対角要素が誤差の共分散となる。

3.3 モデルによる推定値の誤差

ここでは、3.2 で導いたパラメータ推定値: \hat{p} の誤差がモデル: $f(x|\hat{p})$ による推定値: \hat{y} の誤差にどのように伝播するかについて示す。やはり線型近似ができると仮定すると、モデルによる推定値の誤差: $\delta\hat{y}$ は、以下のようにパラメータ推定値の誤差: $\delta\hat{p}$ の線型結合で表すことができる。

$$\delta\hat{y} = A\delta\hat{p} \quad (3.3.1)$$

従って、モデルによる推定値の誤差の分散及び共分散からなる誤差行列: $\Sigma_{\hat{y}}$ は(3.2.2)式より次式で表すことができる。

$$\begin{aligned} \Sigma_{\hat{y}} &= \langle \delta\hat{y} \cdot {}^t\delta\hat{y} \rangle \\ &= A \langle \delta\hat{p} \cdot {}^t\delta\hat{p} \rangle A \\ &= A \cdot \Sigma_{\hat{p}} \cdot {}^tA \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

さらに、測定値以外の点、即ち未だ測定されていない点: x_s に対するモデル推定値の分散: V_{y_s} は(3.3.2)式と同様に次式で与えることができる。

$$V_{y_s} = G \cdot \Sigma_{\hat{p}} \cdot {}^tG \quad (3.3.3)$$

ここで、 G は次式で表される m 次元ベクトルである。

$$G_i = \frac{\partial f(x_s|\hat{p})}{\partial p_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (3.3.4)$$

3.4 VESCAL内蔵非線型モデルへの適用

ここでは、今回の改良によってプログラム VESCAL に追加した以下の非線型モデルについて着目する。このモデルは α , β , γ という三つの未知パラメータを含む平方根関数であり、円環型あるいは平板型計量槽の非線型領域のモデル化に利用する。具体的には、 x が計量槽内の溶液の体積を表し、 y が対応する液位を表す。また、こ

のモデルの逆関数は前章で説明したように、 y 即ち液位についての二次式で表現できる。

$$y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha \cdot x + \beta} + \gamma \quad (3.4.1)$$

このモデルに対して、ここまで説明した非線型最小二乗法の手法を適用すると、(3.1.7)式に相当する Gauss-Newton 法による反復計算式は次式で表され、この式を反復計算することによって最小二乗解としてパラメータ推定値: $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ を決定することができる。

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^{(k)} \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \omega_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \omega_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & 1 \\ a_{31} & a_{32} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & 1 \end{bmatrix}^{(k)} \begin{bmatrix} \Delta\alpha \\ \Delta\beta \\ \Delta\gamma \end{bmatrix}^{(k)} \\ & = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^{(k)} \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \omega_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \omega_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 - f(x_1|\alpha, \beta, \gamma) \\ y_2 - f(x_2|\alpha, \beta, \gamma) \\ y_3 - f(x_3|\alpha, \beta, \gamma) \\ \vdots \\ y_n - f(x_n|\alpha, \beta, \gamma) \end{bmatrix}^{(k)} \end{aligned}$$

$$a_{i1} = \frac{x_i}{2\sqrt{\alpha x_i + \beta}}, \quad a_{i2} = \frac{1}{2\sqrt{\alpha x_i + \beta}}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (3.4.2)$$

プログラム VESCAL では、(3.4.2)式において各測定データの重み付けの方法を二種類用意している。一つは、データ点に依存しない均一の重みであり、次式を用いる。

$$\omega_i = \frac{\sigma_0^2}{\sigma_i^2} = 1 \quad (\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \cdots = \sigma_i^2 = \cdots = \sigma_n^2) \quad (3.4.3)$$

この場合、(3.2.4)式の誤差評価に必要なスケーリング定数: σ_0^2 は得られたパラメータ推定値: $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ より、 σ_i^2 の不偏推定量^[7]: V_e を用いて以下の式により計算する。

$$\sigma_0^2 = V_e = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})]^2}{n-3} \quad (3.4.4)$$

この方法は、測定データ y_i の誤差分散の大きさが不明である場合に適用できるが、あくまでも誤差分散がデータ点によらずほぼ一定と仮定できることが前提である。

プログラム VESCAL で採用しているもう一つの重み付け方法は、何らかの方法によって別途推定した測定データ y_i の誤差分散を直接データファイルから入力し、データ点に依存した重みを考慮する方法である。

この場合のスケーリング定数は、VESCAL 内部での数値計算上の都合により、入力で与えられた σ_i^2 の算術平均値とし、重み: ω_i が無次元の値となるようにしている。

$$\sigma_0^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}{n} \quad (3.4.5)$$

さらに、プログラム VESCAL では、(3.4.2)式を反復計算して得られたパラメータ推定値: $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ より、標準偏差: SD 及び測定データ: y_i とモデルによる推定値: $f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})$ との相関係数である重相関係数: R について計算することができ、これらは重み付けした値と重み付けなしの値の両者を計算し、結果を表示する。

重み付けあり

$$SD = \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})]^2}{n-3} \quad (3.4.6)$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \bar{y}] [f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}]}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \bar{y}]^2 \cdot \sum_{i=1}^n \omega_i [f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}]^2}}, \quad (3.4.7)$$

$$\bar{y} \equiv \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}, \quad \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})} \equiv \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}{n}$$

重み付けなし

$$SD = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})]^2}{n-3} \quad (3.4.8)$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \bar{y}] [f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}]}{\sqrt{\sum_{i=1}^n [y_i - \bar{y}]^2 \cdot \sum_{i=1}^n [f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}]^2}}, \quad (3.4.9)$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}, \quad \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})} = \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}{n}$$

なお、データ点に依存しない一定の重み付けを行った場合には(3.4.3)式より、重み付けありとなしの SD と R の計算結果はそれぞれ全く同じである。

パラメータ推定値: $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ の誤差行列は(3.4.1)式を(3.2.4)式に適用することによって次式のように表現され、この行列の対角要素が各パラメータ推定値の分散、パラメータ推定値間の共分散になる。

$$\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}} = \sigma_0^2 \left\{ \begin{matrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \omega_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \omega_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & 1 \\ a_{31} & a_{32} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & 1 \end{bmatrix} \end{matrix} \right\}^{-1} \quad (3.4.10)$$

$$a_{i1} = \frac{x_i}{2\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}}}, \quad a_{i2} = \frac{1}{2\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}}}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n)$$

一方モデルによる推定値の誤差行列は(3.4.1)式を(3.3.2)式に適用することによって次式で表され、この行列の対角要素がそれぞれの測定データに対する推定値の分散になる。

$$\Sigma_{\hat{y}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & 1 \\ a_{31} & a_{32} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},12} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},13} \\ \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},21} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},22} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},23} \\ \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},31} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},32} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (3.4.11)$$

$$a_{i1} = \frac{x_i}{2\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}}}, \quad a_{i2} = \frac{1}{2\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}}}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n)$$

測定値以外の点、即ち未だ測定されていない点: x_s に対するモデル推定値の分散は(3.3.3)式と同様に次式で与えることができる。

$$V_{\hat{y}_s} = \begin{bmatrix} g_1 & g_2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},12} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},13} \\ \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},21} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},22} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},23} \\ \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},31} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},32} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.4.12)$$

$$g_1 = \frac{x_s}{2\sqrt{\hat{\alpha}x_s + \hat{\beta}}}, \quad g_2 = \frac{1}{2\sqrt{\hat{\alpha}x_s + \hat{\beta}}}$$

3.5 分散分析

最小二乗法によって推定されたパラメータ及びこれらから構成されるモデルの妥当性については、統計的な有意差検定によって確認する必要がある。

Fig.3.1 に示されているように、一般的にあるモデルにデータフィットして関係式を導くということは、全くモデルが得られていない場合の y の推定範囲よりもモデルが与えられた場合の推定範囲の方が減少することを期待しているものであり、この減少効果が少ない場合にはモデルを導入することの必然性を失うこととなる。従って、この減少の度合いが有意なものであるかどうかについては統計的な検定手法によらなければならない。このため、ここでは先ず、今回プログラム: VESCAL に追加した(3.4.1)式のモデルに対する基本的な分散分析^[9]の結果を示す。

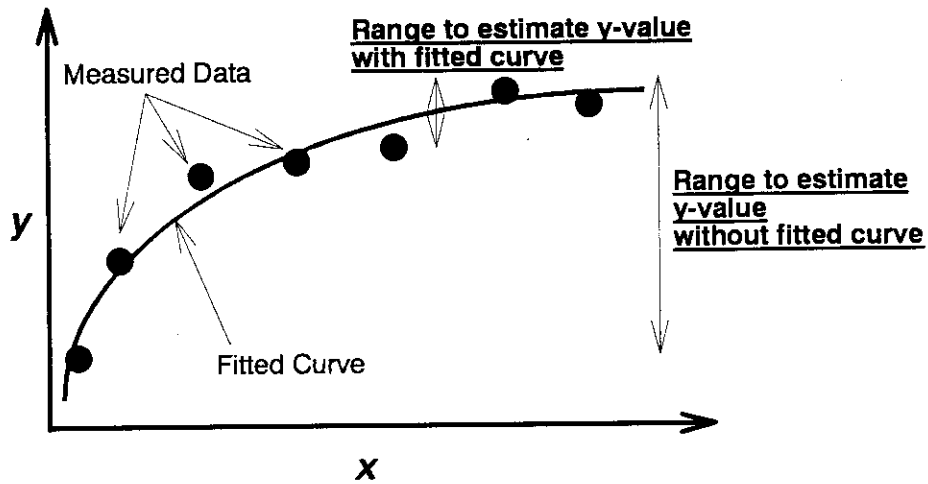


Fig. 3.1 Range to estimate y-value

まず、全くモデルが得られていない場合に、 y の母集団から n 個の標本を抽出した（つまり、 n 個のデータを測定した）場合の y の最良推定値はこれらの平均値： \bar{y} であり、重み付け偏差平方和： S_T は次式で表される。

$$S_T = \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \bar{y}]^2 \quad (3.5.1)$$

以下では、(3.4.1)式のモデルに着目して上記の偏差平方和の分解を行うが、その前に(3.4.1)式のパラメータ推定値に関する基本的な関係式を導いておく。

(3.4.1)式に対する最小二乗条件は、(3.1.2)式よりパラメータ推定値： $\hat{\gamma}$ に関しては、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n -2\omega_i \left\{ y_i - \left(\sqrt{\hat{\alpha}x_i} + \hat{\beta} + \hat{\gamma} \right) \right\} &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n \omega_i \left\{ y_i - f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} &= 0 \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

パラメータ推定値： $\hat{\beta}$ に関しては、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{-2\omega_i}{\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}}} \left\{ y_i - \left(\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}} + \hat{\gamma} \right) \right\} &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \hat{\gamma}} \left\{ y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} &= 0 \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

パラメータ推定値: $\hat{\alpha}$ に関してはさらに(3.5.2)式と(3.5.3)式の関係を用いることにより、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{-2\omega_i x_i}{\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}}} \left\{ y_i - \left(\sqrt{\hat{\alpha}x_i + \hat{\beta}} + \hat{\gamma} \right) \right\} &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n \frac{\omega_i \left\{ f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \hat{\gamma} \right\}^2 - \hat{\beta}}{f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \hat{\gamma}} \left\{ y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n \omega_i \left\{ f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \hat{\gamma} \right\} \left\{ y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} - \sum_{i=1}^n \frac{\hat{\beta}\omega_i}{f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \hat{\gamma}} \left\{ y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \left\{ y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} - \sum_{i=1}^n \hat{\gamma}\omega_i \left\{ y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \left\{ y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right\} &= 0 \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

となる。

これらの関係式を用いることにより、(3.5.1)式の偏差平方和は次式のように分解することができる。

$$\begin{aligned} S_T &= \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \bar{y}]^2 = \sum_{i=1}^n \omega_i \left[y_i - \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \right]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \omega_i \left[y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) + f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}{n} \right]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})]^2 + \sum_{i=1}^n \omega_i \left[f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}{n} \right]^2 \\ &\quad + 2 \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \left[y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right] - 2 \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}{n} \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})] \\ &= \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})]^2 + \sum_{i=1}^n \omega_i \left[f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i|\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})}{n} \right]^2 \end{aligned} \quad (3.5.5)$$

ここで、(3.5.5)式右辺第1項はモデルが与えられた場合に、測定値: x_i による y の最良推定値の偏差平方和、即ちモデルからの偏差平方和であり、第2項はモデル自身によって説明される偏差平方和である。これらをそれぞれ S_e , S_R と表すと、偏差平方和: S_T (全変動偏差平方和) は次式のようになる。

$$S_T = S_e + S_R$$

$$S_e = \sum_{i=1}^n \omega_i \left[y_i - f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right]^2 \quad (3.5.6)$$

$$S_R = \sum_{i=1}^n \omega_i \left[f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})} \right]^2$$

なお、この関係式はいかなるモデルについても成立するとは限らない。例えば、(3.4.1)式で γ を消去したモデル、即ち、

$$y = f(x | \alpha, \beta) = \sqrt{\alpha \cdot x + \beta} \quad (3.5.7)$$

の場合には、(3.5.2)式に相当する関係が得られないため、(3.5.6)式のような偏差平方和の分解ができない。因みに β のみを消去したモデル、即ち、

$$y = f(x | \alpha, \gamma) = \sqrt{\alpha \cdot x + \gamma} \quad (3.5.8)$$

や一般的に多項式モデル (線型モデル) の場合には(3.5.6)式と同様な偏差平方和の分解が可能である。

従って、(3.5.6)式より今回プログラム VESCAL に追加した(3.4.1)式のモデルに対する分散分析表は、Table 3.1 のように表される。

Table 3.1 Variance Analysis for the model described by eq.(3.4.1)

Type	Degree of Freedom	Variance
S_R	2	$V_1 = S_R / 2$
S_e	$n-3$	$V_2 = S_e / (n-3)$
Total(S_T)	$n-1$	

Table 3.1において、 S_R の自由度は、モデル自身の自由度が3（即ち、パラメータが三つ）であり、それから平均値を引くことにより自由度が一つ失われるため、差引2となる。また、 S_e の自由度は、全データ数 n から y の推定に用いたパラメータの数（3個）の分だけ自由度が減少するため、差引 $n-3$ である。これらの自由度の和は、 S_T の自由度、即ち $n-1$ に等しい。

3.6 F検定

Table 3.1 に示した分散分析結果に基づき、モデル自身によって説明される偏差平方和の分散: V_1 とモデルからの偏差平方和の分散: V_2 について、両者の統計的有意性を検定することによって、モデルが与えられた場合における y の推定範囲の減少効果を確認することができる。それには、次式で表される分散比について着目する。

$$F = \frac{V_1}{V_2}$$

$$V_1 = \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i \left[f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) - \overline{f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})} \right]^2}{2} \quad (3.6.1)$$

$$V_2 = \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i \left[y_i - f(x_i | \hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \right]^2}{n-3}$$

言い換えると、(3.6.1)式の分子: V_1 はモデル推定値の平均値まわりのばらつきの大きさを表し、分母: V_2 は測定値のモデル推定値まわりのばらつきの大きさを表す。

モデルが与えられた場合における y の推定範囲が有意に減少する場合には、(3.6.1)式の V_2 は V_1 に対して相対的に小さくなり、その結果分散比: F は大きくなる。これとは逆に減少効果があまり認められない場合には、分散比: F は相対的に小さくなる。

そこで、帰無仮説: $H_0: V_1=V_2$

対立仮説: $H_1: V_1>V_2$

として、帰無仮説: H_0 が棄却され、 $V_1>V_2$ が成立すること。即ちモデルを導入することによって y の推定範囲が有意に減少し、モデルによる測定値の再現性が良好であることを確認する。^[9]

(3.6.1)式の分散比: F は自由度 (2, $n-3$) の F -分布に従うので、有意水準: α に対する F -分布百分率点 $F(2, n-3; \alpha)$ の値と比較することによって上記の有意性検定ができる。

プログラム VESCAL では、分散比: F に対する自由度 (2, $n-3$) の F -分布関数累

積確率密度を計算しその値を表示する。従って、この累積確率密度の値が a よりも小さい場合には上記の帰無仮説: H_0 は棄却され、モデルを導入することによって y の推定範囲が有意に減少し、モデルによる測定値の再現性が良好であると結論づけることができる。

3.7 t-検定及び u-検定

3.6 で示した F -検定手法は、導入したモデル全体についての統計的有意性については確認できるものの、モデルに含まれる個々のパラメータ推定値についての統計的有意性までは確認することができない。そこで、以下の統計量 t について着目する。

$$t = \frac{\hat{p} - p}{\sqrt{V_{\hat{p}}}} \quad (3.7.1)$$

ここで、 \hat{p} はパラメータの推定値、 p はパラメータの真値、 $V_{\hat{p}}$ はパラメータ推定値の分散を表す。

この統計量に対して、パラメータの真値がある特定の値をとるものかどうかの検定を行う。具体的には、パラメータの真値: p がゼロ、即ちそのようなパラメータを考慮する必然性が無いかどうかを確認する。この場合は、

$$\text{帰無仮説: } H_0: p=0$$

$$\text{対立仮説: } H_1: p>0 \text{ あるいは } p<0$$

として、帰無仮説: H_0 が棄却され、 $p>0$ あるいは $p<0$ が成立すること、即ちパラメータの真値がゼロでない有意な値であり、そのようなパラメータを考慮することは統計的に意味があることを確認する。^[9]

上記の帰無仮説の下(3.7.1)式の統計量を(3.4.1)式のモデルの各パラメータに適用すると、次式を得る。

$$\begin{aligned} t_{\alpha} &= \frac{\hat{\alpha} - \alpha}{\sqrt{\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}, 11}}} = \frac{\hat{\alpha}}{\sqrt{\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}, 11}}}, \quad (\alpha = 0) \\ t_{\beta} &= \frac{\hat{\beta} - \beta}{\sqrt{\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}, 22}}} = \frac{\hat{\beta}}{\sqrt{\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}, 22}}}, \quad (\beta = 0) \\ t_{\gamma} &= \frac{\hat{\gamma} - \gamma}{\sqrt{\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}, 33}}} = \frac{\hat{\gamma}}{\sqrt{\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}, 33}}}, \quad (\gamma = 0) \end{aligned} \quad (3.7.2)$$

(3.7.2)式の統計量: $t_{\alpha}, t_{\beta}, t_{\gamma}$ が従う確率分布は、フィッティングデータの重み付

けの方法により異なる。

データ点に依存しない均一な重み付けをした場合には、誤差分散は残差から得られる不偏推定量に基づいているため、上記の統計量はいずれも自由度 $n-3$ の t -分布に従う。そこで、有意水準: α に対する t -分布百分率点 $t(n-3; \alpha)$ の値と比較することによって上記の有意性検定を行うことができる (t -検定)。

一方データ点に依存した重み付けの場合には、測定データの推定誤差分散から重みを計算し、この誤差はガウス分布に従っていることが前提なので、上記の統計量はいずれも標準ガウス分布 (平均 0、分散 1) に従う。従って、有意水準: α に対する標準ガウス分布百分率点 $u(\alpha)$ の値と比較することによって上記の有意性検定を行うことができる (u -検定)。

いずれの場合についても、プログラム VESCAL では、上記統計量に対する自由度 $n-3$ の t -分布関数累積確率密度あるいは標準ガウス分布累積確率密度を計算しその値を表示する。従って、この累積確率密度の値が α よりも小さい場合には上記の帰無仮説: H_0 は棄却され、パラメータの真値がゼロでない有意な値であり、そのようなパラメータを考慮することは統計的に意味があると結論づけることができる。

3.8 カイ二乗検定

3.4 で述べたように、プログラム VESCAL ではデータ点に依存した重み付けを行う場合には、測定データ y_i の推定誤差分散から重みを計算する。この場合、実際にデータフィットして得られた残差が推定誤差の分布から見て妥当であることを検定する必要がある。^[7] このためには、(3.1.2)式の残差平方和: $S(p)$ に対してカイ二乗検定を用いる。

この検定では、

帰無仮説: H_0 : 確率変数 $[y_i - f(x_i|p)]/\sigma_i$ は標準ガウス分布 (平均 0、分散 1) に従う。

対立仮説: $H_1: H_0$ が偽

として、ある有意水準において帰無仮説: H_0 が棄却されるか否かを確認する。 H_0 が棄却された場合には、測定データ又はモデルに最小二乗法的前提を乱すものがあると考えられる。

上記の帰無仮説の下(3.1.2)式に(3.1.3)式と(3.4.1)式を代入することによって得られる下記の残差平方和: χ^2 は自由度 $n-3$ のカイ二乗分布に従うため、有意水準: α に対する百分率点 $\chi^2(n-3; \alpha)$ の値と比較することによって上記の有意性検定を行うことができる。

$$\chi^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - f(x_i | \alpha, \beta, \gamma)]^2}{\sigma_0^2} \quad (3.8.1)$$

$$= \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - f(x_i | \alpha, \beta, \gamma)]^2}{\sigma_i^2}$$

プログラム VESCAL では、上記統計量に対する自由度 $n-3$ のカイ二乗分布関数累積確率密度を計算しその値を表示する。従って、この累積確率密度の値が a よりも小さい場合には上記の帰無仮説: H_0 は棄却され、測定データの確認あるいはモデルの見直しを行う必要がある。

なお、データ点に依存しない均一な重み付けをした場合には、(3.4.3)式及び(3.4.4)式より測定データ y_i の誤差分散をデータフィットの残差から推定していることになるため、カイ二乗検定の適用は無意味である。

3.9 逆推定方法

ここまでは、体積を独立変数: x としたときの以下の非線型モデルに対するデータフィッティング方法、パラメータ推定値の誤差計算方法及び有意差検定方法等について説明してきた。

$$y = f(x | \alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha \cdot x + \beta} + \gamma \quad (3.9.1)$$

前章で説明したように、実際のバルク測定で施設者が必要とするのは、液位を独立変数としたときの体積の値であり、(3.9.1)式の逆関数、即ち測定関数^[8]を導出しなければならない。

(3.9.1)式の逆関数そのものは、パラメータ推定値: $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ から次式のように簡単に得ることができる。

$$x = g(y | a, b, c) = ay^2 + by + c \quad (3.9.2)$$

$$a \equiv \frac{1}{\hat{\alpha}}, \quad b \equiv -\frac{2\hat{\gamma}}{\hat{\alpha}}, \quad c \equiv \frac{\hat{\gamma}^2 - \hat{\beta}}{\hat{\alpha}}$$

ここで、パラメータ推定値: $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ は誤差を伴う量なので、当然これらから計算される a, b, c にはこの誤差が伝播することになる。そこで、ここでは測定関数: $g(y | a, b, c)$

中のパラメータ: a, b, c の誤差計算方法について説明する。

先ずパラメータ推定値: $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ の誤差範囲が小さく線型近似ができると仮定する。すると、測定関数中のパラメータの誤差: $\delta a, \delta b, \delta c$ は、以下のように $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ の誤差: $\delta \hat{\alpha}, \delta \hat{\beta}, \delta \hat{\gamma}$ の線型結合で表すことができる。

$$\begin{bmatrix} \delta a \\ \delta b \\ \delta c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial a}{\partial \hat{\alpha}} & \frac{\partial a}{\partial \hat{\beta}} & \frac{\partial a}{\partial \hat{\gamma}} \\ \frac{\partial b}{\partial \hat{\alpha}} & \frac{\partial b}{\partial \hat{\beta}} & \frac{\partial b}{\partial \hat{\gamma}} \\ \frac{\partial c}{\partial \hat{\alpha}} & \frac{\partial c}{\partial \hat{\beta}} & \frac{\partial c}{\partial \hat{\gamma}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta \hat{\alpha} \\ \delta \hat{\beta} \\ \delta \hat{\gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a^2 & 0 & 0 \\ -ab & 0 & -2a \\ -ac & -a & -b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta \hat{\alpha} \\ \delta \hat{\beta} \\ \delta \hat{\gamma} \end{bmatrix} \quad (3.9.3)$$

従って、パラメータ: a, b, c の誤差行列: Σ_{abc} は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \Sigma_{abc} &= \begin{bmatrix} \delta a \\ \delta b \\ \delta c \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta a & \delta b & \delta c \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -a^2 & 0 & 0 \\ -ab & 0 & -2a \\ -ac & -a & -b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta \hat{\alpha} \\ \delta \hat{\beta} \\ \delta \hat{\gamma} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta \hat{\alpha} & \delta \hat{\beta} & \delta \hat{\gamma} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -a^2 & -ab & -ac \\ 0 & 0 & -a \\ 0 & -2a & -b \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -a^2 & 0 & 0 \\ -ab & 0 & -2a \\ -ac & -a & -b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},11} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},12} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},13} \\ \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},21} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},22} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},23} \\ \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},31} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},32} & \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -a^2 & -ab & -ac \\ 0 & 0 & -a \\ 0 & -2a & -b \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.9.4)$$

ここで、 $\Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\gamma},ij}$ は(3.4.6)式の誤差行列の i 行 j 列要素である。

(3.9.4)式の誤差行列の各要素について計算すると、パラメータ: a, b, c の分散及び共分散は次式のように表すことができる。

Variance of a:

$$Var(a) = \Sigma_{abc,11} = a^4 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11}$$

Variance of b:

$$Var(b) = \Sigma_{abc,22} = a^2 b^2 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11} + 4a^2 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},33} + 4a^2 b \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},13}$$

Variance of c:

$$Var(c) = \Sigma_{abc,33} = a^2 c^2 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11} + a^2 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},22} + b^2 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},33} \\ + 2a^2 c \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},12} + 2abc \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},13} + 2ab \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},23}$$

Covariance between a and b:

$$Cov(a,b) = \Sigma_{abc,12} = \Sigma_{abc,21} = a^3 b \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11} + 2a^3 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},13}$$

Covariance between a and c:

$$Cov(a,c) = \Sigma_{abc,13} = \Sigma_{abc,31} = a^3 c \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11} + a^3 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},12} + a^2 b \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},13}$$

Covariance between b and c:

$$Cov(b,c) = \Sigma_{abc,23} = \Sigma_{abc,32} = a^2 bc \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},11} + 2ab \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},33} + a^2 b \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},12} \\ + (2a^2 c + ab^2) \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},13} + 2a^2 \cdot \Sigma_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma},23} \quad (3.9.5)$$

ここで、 $\Sigma_{abc,ij}$ は(3.9.4)式の誤差行列の i 行 j 列要素である。

従って、(3.9.2)式の測定関数: $g(y|a,b,c)$ で計算される体積: x の誤差分散は以下のように計算することができる。

$$Var(x) = \left(\frac{\partial g}{\partial a}\right)^2 \cdot Var(a) + \left(\frac{\partial g}{\partial b}\right)^2 \cdot Var(b) + \left(\frac{\partial g}{\partial c}\right)^2 \cdot Var(c) \\ + 2\left(\frac{\partial g}{\partial a}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial b}\right) \cdot Cov(a,b) + 2\left(\frac{\partial g}{\partial a}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial c}\right) \cdot Cov(a,c) \\ + 2\left(\frac{\partial g}{\partial b}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial c}\right) \cdot Cov(b,c) \quad (3.9.6) \\ = y^4 \cdot Var(a) + y^2 \cdot Var(b) + Var(c) \\ + 2y^3 \cdot Cov(a,b) + 2y^2 \cdot Cov(a,c) + 2y \cdot Cov(b,c)$$

プログラム VESCAL では、このような逆推定に必要な情報としてパラメータ: a, b, c の分散共分散を計算することができる。

3.10 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

て非線型最小二乗法に関する計算手法を中心として紹介する。

Gauss-Newton法による反復計算手法

(3.4.2)式の反復計算式は、基本的に以下の行列方程式によって記述することができる。

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} A_{11}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) & A_{12}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) & A_{13}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) \\ A_{21}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) & A_{22}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) & A_{23}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) \\ A_{31}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) & A_{32}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) & A_{33}(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta\alpha^{(k)} \\ \Delta\beta^{(k)} \\ \Delta\gamma^{(k)} \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} B_1(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) \\ B_2(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) \\ B_3(\alpha^{(k)}, \beta^{(k)}, \gamma^{(k)}) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.10.1)$$

ここで、 $\alpha^{(k)}$, $\beta^{(k)}$, $\gamma^{(k)}$ はそれぞれ第 k 番目の反復ステップにおけるパラメータ推定値であり、上式の三元連立線型方程式の解を用いて第 $k+1$ 番目のパラメータは次式によって計算する。

$$\begin{aligned} \alpha^{(k+1)} &= \alpha^{(k)} + \Delta\alpha^{(k)} \\ \beta^{(k+1)} &= \beta^{(k)} + \Delta\beta^{(k)} \\ \gamma^{(k+1)} &= \gamma^{(k)} + \Delta\gamma^{(k)} \end{aligned} \quad (3.10.2)$$

このような反復計算を行う場合にはパラメータ推定値の初期値設定が重要であり、この設定によっては正しい値に収束しないことがある。

そこで、プログラム VESCAL はデータ対 $(x_i, y_i, i=1, 2, 3, \dots, n)$ を(3.4.1)式のモデルでフィットする場合、以下の手順によって初期値を算出して反復計算を開始する。

- (1) データ対 $(x_i, y_i, i=1, 2, 3, \dots, n)$ の x -, y -軸を反転させ、

$$x = ay^2 + by + c \quad (3.10.3)$$

なる関数で線型回帰計算を行い、パラメータ: a, b, c の推定値を算出する。

- (2) (1)で得られたパラメータ推定値: $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ を利用して逆関数を算出し、以

下の式により、(3.10.1)式の反復計算初期値を設定する。

$$\begin{aligned}\alpha^{(0)} &= \frac{1}{\hat{a}} \\ \beta^{(0)} &= -\frac{4\hat{a}\hat{c} - \hat{b}^2}{4\hat{a}^2} \\ \gamma^{(0)} &= -\frac{\hat{b}}{2\hat{a}}\end{aligned}\quad (3.10.4)$$

反復計算における収束判定条件は、各パラメータともに反復計算前後の相対差の絶対値が 10^{-6} 以下としている。また、反復回数が 500 回を超えてもこの条件を満足しない場合には反復計算を打ち切ることとしている。

ここで、(3.4.2)式から明らかなように反復計算の過程で $\alpha^{(k)} \cdot x_i + \beta^{(k)}$ がゼロ以下となる場合には計算を継続することができなくなる。このような場合プログラム VESCAL では、パラメータ α と β に摂動を加えて（微小量値を変動させて）計算を継続するようなアルゴリズムを採用している。円環型及び平板型計量槽の非線型領域では、Fig.2.3(5) 及び Fig.2.4(5) に示されているように、液位の体積に関する依存性は上凸曲線となる。従って、パラメータ α は常に正の値となることが期待されるため、反復計算中に $\alpha x_i + \beta$ がゼロ以下となった場合は、以下のような 1% の摂動をパラメータに加えて計算を続行するようにしている。

$$\alpha \rightarrow \alpha \times 1.01, \quad \beta \rightarrow \beta \div 1.01$$

このアルゴリズムにより、本プログラムでは反復計算を比較的安定に進めることが可能となっている。

なお、各反復計算ステップでの(3.10.1)式の解法及び初期値算出に係る(3.10.3)式のフィッティング計算には、行の入替え操作（ピボットイング）を伴うガウスの消去法を採用しており、この連立一次方程式解法モジュールは多項式モデルに対する線型回帰計算モジュールと共用している。

また、(3.4.6)式の誤差行列の算出に必要な逆行列の計算にも上記のガウスの消去法に基づく計算モジュールを利用している。

F-分布, t-分布, カイ二乗分布, 標準ガウス分布累積確率密度の計算

有意差検定に必要な

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)、

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)、

カイ二乗分布累積確率密度:

$Q(\chi^2|v)$ (確率密度関数の χ^2 値から無限大までの積分量)及び

標準ガウス分布累積確率密度:

$A(u)$ (確率密度関数の $-u$ 値から $+u$ 値までの積分量)

は、文献[1]と同様に多項式展開形^[10]を利用して計算する。即ち、

$$Q(F|v_1, v_2) = \begin{cases} x^{\frac{v_2}{2}} \left[1 + \frac{v_2}{2}(1-x) + \frac{v_2(v_2+2)}{2 \cdot 4}(1-x)^2 + \dots \right. \\ \left. + \frac{v_2(v_2+2) \cdots (v_2+v_1-4)}{2 \cdot 4 \cdots (v_1-2)} (1-x)^{\frac{v_1-2}{2}} \right] & (v_1 \text{ even}) \\ 1 - (1-x)^{\frac{v_1}{2}} \left[1 + \frac{v_1}{2}x + \frac{v_1(v_1+2)}{2 \cdot 4}x^2 + \dots \right. \\ \left. + \frac{v_1(v_1+2) \cdots (v_1+v_2-4)}{2 \cdot 4 \cdots (v_2-2)} x^{\frac{v_2-2}{2}} \right] & (v_2 \text{ even}) \\ 1 - A(t|v_2) + \beta(v_1, v_2) & (v_1, v_2 \text{ odd}) \end{cases} \quad (3.10.5)$$

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

$$x = \frac{v_2}{v_2 + v_1 F} \quad (3.10.6)$$

$$A(t|v_2) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left\{ \theta + \sin \theta \left[\cos \theta + \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \dots + \frac{2 \cdot 4 \cdots (v_2-3)}{3 \cdot 5 \cdots (v_2-2)} \cos^{v_2-2} \theta \right] \right\} & \text{for } v_2 > 1 \\ 2\theta / \pi & \text{for } v_2 = 1 \end{cases} \quad (3.10.7)$$

$$\beta(\nu_1, \nu_2) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\left(\frac{\nu_2-1}{2}\right)!}{\left(\frac{\nu_2-2}{2}\right)!} \sin \theta \cos^{\nu_2} \theta \times \\ \times \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{\nu_2+1}{3} + \dots \\ + \frac{(\nu_2+1)(\nu_2+3)\dots(\nu_1+\nu_2-4) \sin^{\nu_1-3} \theta}{3 \cdot 5 \dots (\nu_1-2)} \end{array} \right\} & (\text{for } \nu_2 > 1) \\ 0 & (\text{for } \nu_1 = 1) \end{cases} \quad (3.10.8)$$

さらに、(3.10.7)式及び(3.10.8)式中にあらわれる θ は次式で定義される。

$$\theta = \arctan \sqrt{\frac{\nu_1}{\nu_2}} F \quad (3.10.9)$$

$A(t|\nu)$ は、次式によって計算する。

$$A(t|\nu) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left\{ \theta + \sin \theta \left[\cos \theta + \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \dots + \frac{2 \cdot 4 \dots (\nu-3)}{3 \cdot 5 \dots (\nu-2)} \cos^{\nu-2} \theta \right] \right\} & (\text{for } \nu > 1 \text{ and odd}) \\ 2\theta/\pi & (\text{for } \nu = 1) \end{cases} \quad (3.10.10)$$

$$A(t|\nu) = \sin \theta \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{1}{2} \cos^2 \theta + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} \cos^4 \theta + \dots \\ + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (\nu-3)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \dots (\nu-2)} \cos^{\nu-2} \theta \end{array} \right\} \quad (\nu \text{ even}) \quad (3.10.11)$$

ここで、(3.10.10)式及び(3.10.11)式中にあらわれる θ は次式で定義される。

$$\theta = \arctan \frac{t}{\sqrt{\nu}} \quad (3.10.12)$$

$Q(\chi^2|v)$ は、次式によって計算する。

$$Q(\chi^2|v) = \begin{cases} 2Q(\chi) + 2Z(\chi) \sum_{r=1}^{\frac{v-1}{2}} \frac{\chi^{2r-1}}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2r-1)} & (v \text{ odd}) \text{ and } \chi = \sqrt{\chi^2} \\ \sqrt{2\pi} Z(\chi) \left\{ 1 + \sum_{r=1}^{\frac{v-2}{2}} \frac{\chi^{2r}}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2r)} \right\} & (v \text{ even}) \end{cases} \quad (3.10.13)$$

ここで、 $Z(\chi)$ は後述の(3.10.16)式の u を χ で置き換えたもので表され、 $Q(\chi)$ は(3.10.15)式の u を χ で置き換えたものと次式により計算できる。

$$Q(\chi) = 1 - \frac{A(\chi) + 1}{2} \quad (3.10.14)$$

$A(u)$ は、次式によって計算する。

$$A(u) = 1 - 2Z(u) \sum_{i=1}^5 \frac{b_i}{1 + pu} + \varepsilon(u) \quad (3.10.15)$$

$$|\varepsilon(u)| < 7.5 \times 10^{-8}$$

$$p = 0.2316419$$

$$b_1 = 0.319381530$$

$$b_2 = -0.356563782$$

$$b_3 = 1.781477937$$

$$b_4 = -1.821255978$$

$$b_5 = 1.330274429$$

ここで、 $Z(u)$ は標準ガウス分布（平均: 0、分散: 1）そのものであり、次式で表される。

$$Z(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}} \quad (3.10.16)$$

t-分布及び標準ガウス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 $t(n-3; a)$ は、上記の t -分布累積確率密度: $A(t|v)$ を用いて二分法により計算する。

まず、 t の初期値 $t_L=1$, $t_U=1000000$ に対してそれぞれ、 $P_L=[1-A(t_L|n-3)]-a$ と $P_U=[1-A(t_U|n-3)]-a$ を計算し、さらにこれら t 値の中間点 $t=(t_L+t_U)/2$ に対して $P=[1-A(t|n-3)]-a$ 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 10^{-6} 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 $t(n-3; a)$ としている。

標準ガウス分布百分率点 $u(a)$ も、同様の二分法によって計算する。

隣接領域関数モデルの交点の計算

プログラム VESCAL では、多領域回帰分析モードにおいて相互に隣接する領域の関数の交点を算出し、この x -座標点を領域境界値として設定する。^[1] 相互に隣接する領域に対して得られた関数モデルの交点は、ニュートン法によって計算する。第 i 領域の関数を $f_i(x)$ 、第 $i+1$ 領域の関数を $f_{i+1}(x)$ とすると、 x の初期値をユーザーの入力した境界値として、

$$x \leftarrow x - \frac{g(x)}{\frac{d\{g(x)\}}{dx}}, \quad g(x) = f_i(x) - f_{i+1}(x) \quad (3.10.17)$$

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 10^{-6} 以下となった時点での x 値を交点の x -座標点とする。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、改定版 VESCAL の検証計算結果として、二種類のベンチマーク問題に対して、汎用統計解析パッケージプログラムと比較した結果を示す。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 "Visual Stat for Windows Release 4.5 日本語版 (以下、Visual Stat 4.5J と略称する)" であり、本プログラムは従来版 VESCAL [1] の比較検証に用いた "STATISTICA for Windows Release 4.0 (米国 StatSoft 社製)" が日本語利用環境に移植されたものである。

今回の検証計算は、データフィットの重みを全て均一として行った。なお、Visual Stat 4.5J の非線型回帰分析モジュールでは、パラメータ推定値の誤差、 F -分布累積確率密度: $Q(F|v_1, v_2)$ 、 t -分布累積確率密度: $1-A(t|v)$ の計算結果が得られなかったため、標準偏差、重相関係数及びパラメータ推定値の計算結果についてのみ比較した。因みに VESCAL では、これら全てについて計算結果を得ることができ、本章では参考のため VESCAL の計算結果を全て記載している。

ベンチマーク問題は、以下の二ケースを設定した。

ケース1 : 模擬データによる検証

方法 : 二次関数、

$$x = ay^2 + by + c \quad (a, b, c: \text{constant})$$

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以下のモデルにフィットする計算を実施した。

$$y = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$$

データを Table 4.1(1),(2),(3),(4),(5),(6),(7) に示す。

なお、Table 4.1(1),(4) のデータについては、以下のモデルにフィットする計算もあわせて行った。

$$y = \sqrt{\alpha x} + \gamma$$

ケース2 : 実データによる検証

方法 : 実データ (NUCEFの代表的な計量槽の現地校正データ) の非線型領域 [5,6] に対して以下のモデルにフィットする計算を実施した。

$$y = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$$

データを Table 4.3(1),(2),(3),(4),(5),(6),(7),(8) に示す。

ここで、Table 4.3(1),(2),(3),(4),(5),(6) は円環槽に対するデータであり、Table 4.3(7),(8) は平板槽に対するデータである。

なお、Table 4.3(5),(6) のデータについては、以下のモデルにフィットする計算もあわせて行った。

$$y = \sqrt{\alpha x} + \gamma$$

計算結果を、ケース1については Table 4.2(1), (2), (3), (4), (5), (6), (7) に、ケース2については Table 4.4(1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8) にそれぞれ示す。これらの計算結果より、改定版 VESCAL の計算結果は、汎用統計解析パッケージプログラム Visual Stat 4.5J と良好な一致を示すことが確認された。

なお、参考までに、VESCAL のフィッティング結果をケース1については Fig.4.1(1), (2), (3), (4), (5), (6), (7) に、ケース2については Fig.4.2(1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8) にそれぞれ示す。特に、Fig.4.2(1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8) に示したケース2を見ると、今回の改定で導入した非線型モデルは円環型及び平板型計量槽の非線型領域の校正データを良好に再現していることが分かる。

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

- Original relationship: $x=y^2+y+1$ -

No.	x-data	y-data
1	3.98	1.02
2	8.07	2.01
3	14.04	3.06
4	21.96	3.94
5	31.93	4.98
6	43.74	6.00
7	57.66	6.82
8	73.32	8.14
9	91.70	8.74
10	111.91	9.94

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

- Original relationship: $x=2y^2+2y+2$ -

No.	x-data	y-data
1	7.01	0.98
2	15.07	2.05
3	26.78	2.99
4	43.03	3.91
5	62.59	4.88
6	87.24	5.98
7	114.54	6.81
8	147.86	7.79
9	183.90	8.90
10	221.94	10.13

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

- Original relationship: $x=5y^2+5y+5$ -

No.	x-data	y-data
1	15.91	1.02
2	35.67	2.06
3	65.40	3.01
4	105.24	3.94
5	155.81	5.00
6	215.12	6.14
7	286.67	7.11
8	367.95	8.02
9	454.89	8.78
10	556.59	10.17

Table 4.1(4) Data for benchmark test: Case 1(4)

- Original relationship: $x=10y^2+10y+10$ -

No.	x-data	y-data
1	30.81	1.01
2	71.23	1.95
3	130.54	3.04
4	212.34	4.05
5	312.68	5.14
6	431.46	5.96
7	571.36	7.03
8	724.77	8.06
9	908.15	8.84
10	1103.81	10.26

Table 4.1(5) Data for benchmark test: Case 1(5)

- Original relationship: $x=10y^2+y+1$ -

No.	x-data	y-data
1	12.89	1.02
2	43.72	1.96
3	95.01	2.91
4	166.56	4.07
5	254.44	4.95
6	367.57	5.84
7	494.79	7.21
8	647.13	7.93
9	816.19	9.24
10	1016.01	10.12

Table 4.1(6) Data for benchmark test: Case 1(6)

- Original relationship: $x=y^2+10y+1$ -

No.	x-data	y-data
1	13.13	1.02
2	26.14	1.97
3	41.20	2.94
4	58.07	3.93
5	77.09	4.87
6	98.31	6.10
7	121.46	6.79
8	146.91	7.82
9	171.73	8.74
10	201.12	9.73

Table 4.1(7) Data for benchmark test: Case 1(7)

- Original relationship: $x=y^2+y+10$ -

No.	x-data	y-data
1	12.94	1.03
2	16.98	1.99
3	22.81	3.02
4	31.03	4.11
5	40.76	5.02
6	53.21	5.94
7	67.20	7.15
8	82.45	7.88
9	100.28	8.83
10	122.10	9.84

Table 4.2(1) Results for Case 1(1)

- Original relationship: $x=y^2+y+1$ -

(1) Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

	<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:	1.2407E-01	1.2407E-01 *
Multiple Correlation:	0.99932695	0.999326947
$Q(F v_1, v_2)$:	0.00000000	-----
Estimated		
Parameters: α	9.6936E-01 +/- 5.1532E-02	0.969363
β	-1.8046E+00 +/- 7.6858E-01	-1.80460
γ	-4.1940E-01 +/- 2.5310E-01	-0.419401
$1-A(t v)$: α	0.00000030	-----
β	0.05124020	-----
γ	0.14147788	-----

(2) Model: $y = f(x|\alpha, \gamma) = \sqrt{\alpha x} + \gamma$

	<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:	1.3726E-01	1.3726E-01 **
Multiple Correlation:	0.99905833	0.999058328
$Q(F v_1, v_2)$:	0.00000000	-----
Estimated		
Parameters: α	1.0538E+00 +/- 3.2359E-02	1.053765
γ	-8.8348E-01 +/- 1.0670E-01	-0.883486
$1-A(t v)$: α	0.00000000	-----
γ	0.00003407	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 0.107745158$

** : Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \gamma)]^2 = 0.150726485$

Table 4.2(2) Results for Case 1(2)

- Original relationship: $x=2y^2+2y+2$ -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.2159E-01	1.2159E-01 *
Multiple Correlation:		0.99936640	0.999366405
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	5.1275E-01 +/- 2.9003E-02	0.512747
	β	-4.8424E-01 +/- 1.1143E+00	-0.484236
	γ	-7.2356E-01 +/- 2.9322E-01	-0.723560
$1-A(t v)$:	α	0.00000046	-----
	β	0.67695814	-----
	γ	0.04297985	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 0.103495885$

Table 4.2(3) Results for Case 1(3)

- Original relationship: $x=5y^2+5y+5$ -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.2184E-01	1.2184E-01 *
Multiple Correlation:		0.99937150	0.999371499
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	1.9906E-01 +/- 1.0370E-02	0.199057
	β	-9.6989E-01 +/- 8.3003E-01	-0.969892
	γ	-4.5349E-01 +/- 2.5349E-01	-0.453495
$1-A(t v)$:	α	0.00000026	-----
	β	0.28085281	-----
	γ	0.11675277	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 0.103922525$

Table 4.2(4) Results for Case 1(4)

- Original relationship: $x=10y^2+10y+10$ -

(1) Model: $y = f(x \alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x} + \beta + \gamma$			
		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.2752E-01	1.2752E-01 *
Multiple Correlation:		0.99932189	0.999321885
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	1.0356E-01 +/- 5.7560E-03	0.103557
	β	-6.3706E-01 +/- 9.8796E-01	-0.637056
	γ	-5.9381E-01 +/- 2.7978E-01	-0.593816
$1-A(t v)$:	α	0.00000040	-----
	β	0.53959132	-----
	γ	0.07146736	-----
(2) Model: $y = f(x \alpha, \gamma) = \sqrt{\alpha x} + \gamma$			
		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.2205E-01	1.2205E-01 **
Multiple Correlation:		0.99928997	0.999289965
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	1.0657E-01 +/- 2.8412E-03	0.106569
	γ	-7.5426E-01 +/- 9.2284E-02	-0.754256
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	γ	0.00003742	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 0.113822364$

** : Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \gamma)]^2 = 0.119178206$

Table 4.2(5) Results for Case 1(5)

- Original relationship: $x=10y^2+y+1$ -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.3191E-01	1.3191E-01 *
Multiple Correlation:		0.99929099	0.999290994
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	1.0804E-01 +/- 5.7654E-03	0.108036
	β	3.9863E-01 +/- 8.2626E-01	0.398630
	γ	-3.1509E-01 +/- 2.5194E-01	-0.315090
1-A(t v):	α	0.00000031	-----
	β	0.64420626	-----
	γ	0.25124302	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 0.121803569$

Table 4.2(6) Results for Case 1(6)

- Original relationship: $x=y^2+10y+1$ -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		8.7173E-02	8.7173E-02 *
Multiple Correlation:		0.99965731	0.999657310
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	9.1807E-01 +/- 6.9229E-02	0.918074
	β	1.8473E+01 +/- 7.4441E+00	18.47262
	γ	-4.5290E+00 +/- 7.0378E-01	-4.52899
1-A(t v):	α	0.00000324	-----
	β	0.04211689	-----
	γ	0.00035520	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 0.053193438$

Table 4.2(7) Results for Case 1(7)

- Original relationship: $x=y^2+y+10$ -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

	<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:	8.6339E-02	8.6339E-01 *
Multiple Correlation:	0.99967016	0.999670164
$Q(F v_1, v_2)$:	0.00000000	-----
Estimated		
Parameters: α	9.1914E-01 +/- 3.1903E-02	0.919138
β	-1.0490E+01 +/- 2.5139E-01	-10.4896
γ	-1.8774E-01 +/- 1.5400E-01	-0.187740
$1-A(t v)$: α	0.00000002	-----
β	0.00000000	-----
γ	0.26229374	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 0.052181546$

Case 1(1) Original relationship: $x=y^2+y+1$

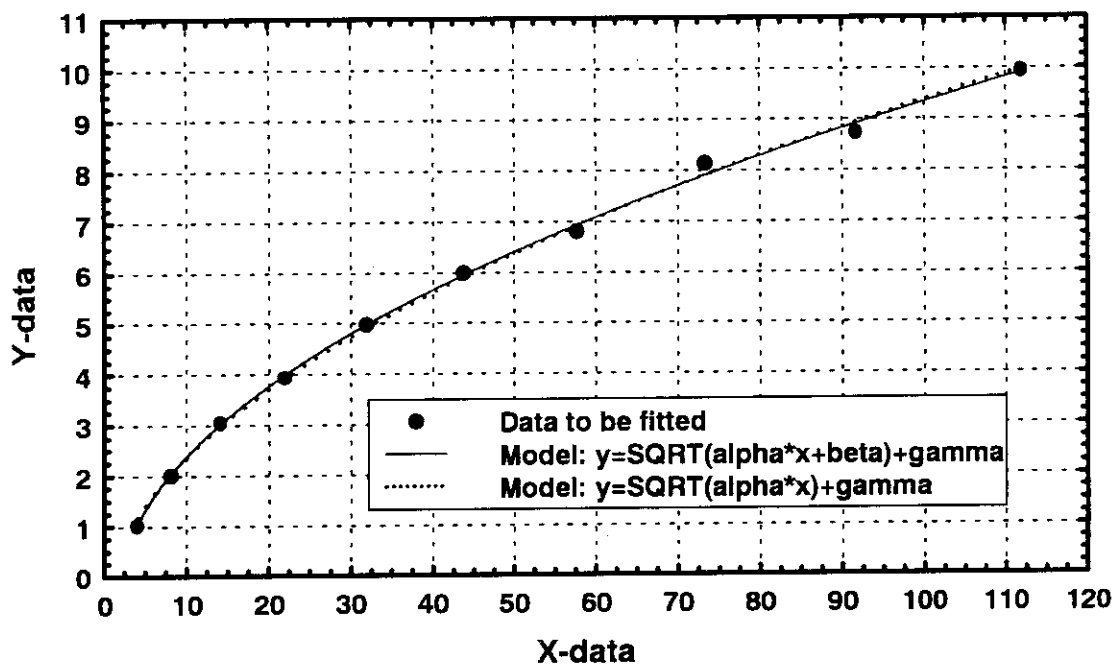


Fig.4.1(1) Fitted curve of Case 1(1)

Case 1(2) Original relationship: $x=2y^2+2y+2$

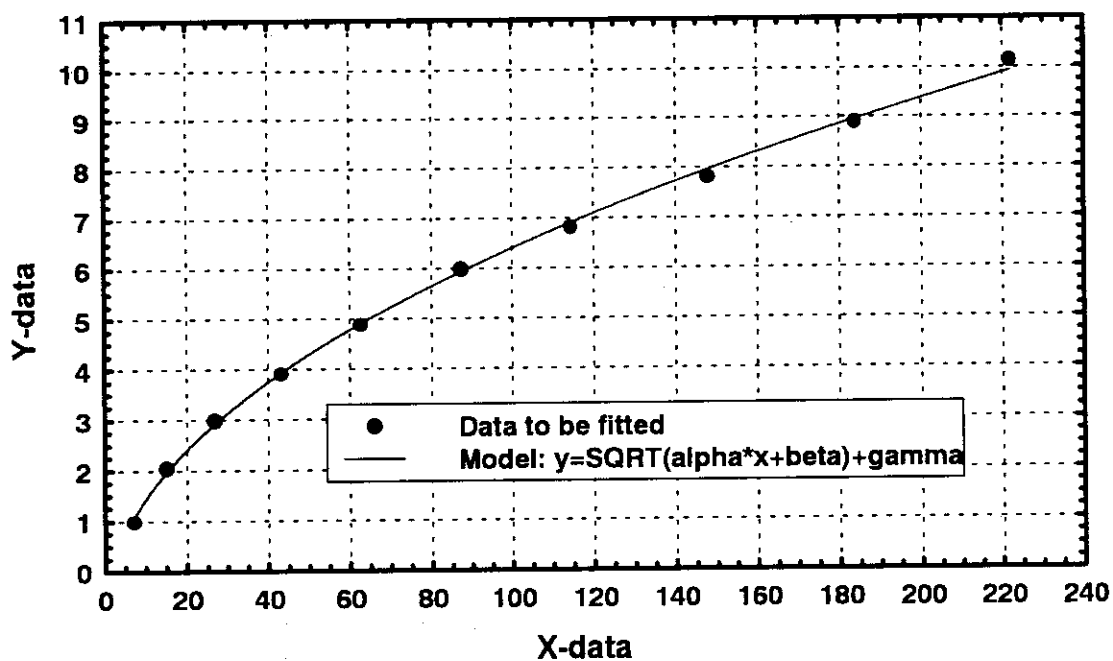


Fig.4.1(2) Fitted curve of Case 1(2)

Case 1(3) Original relationship: $x=5y^{**2}+5y+5$

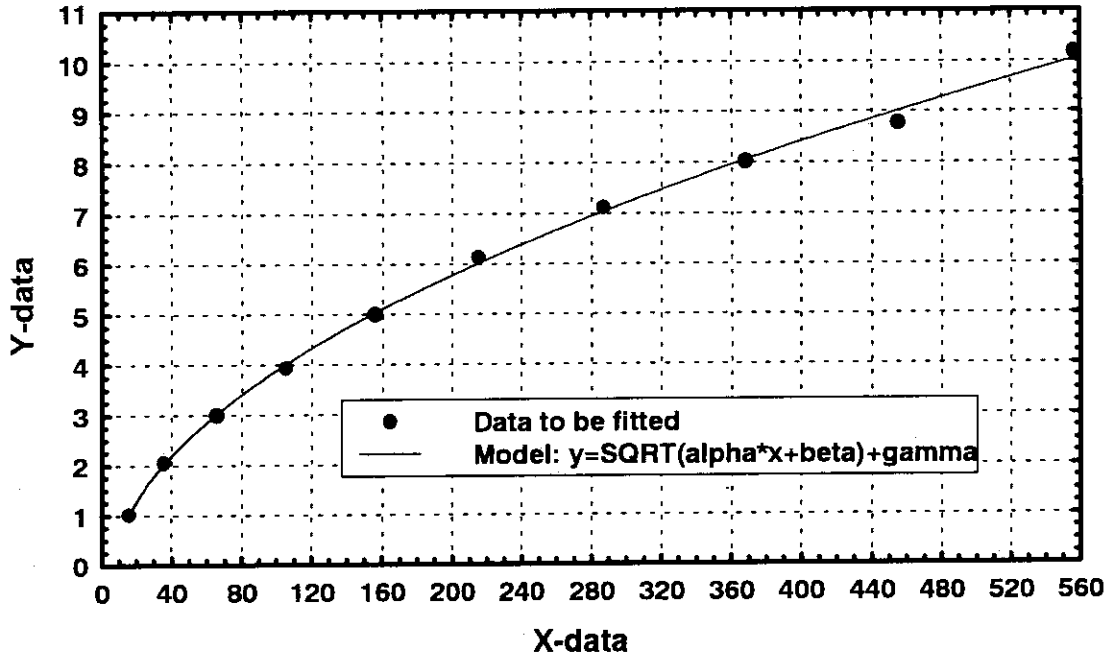


Fig.4.1(3) Fitted curve of Case 1(3)

Case 1(4) Original relationship: $x=10y^{**2}+10y+10$

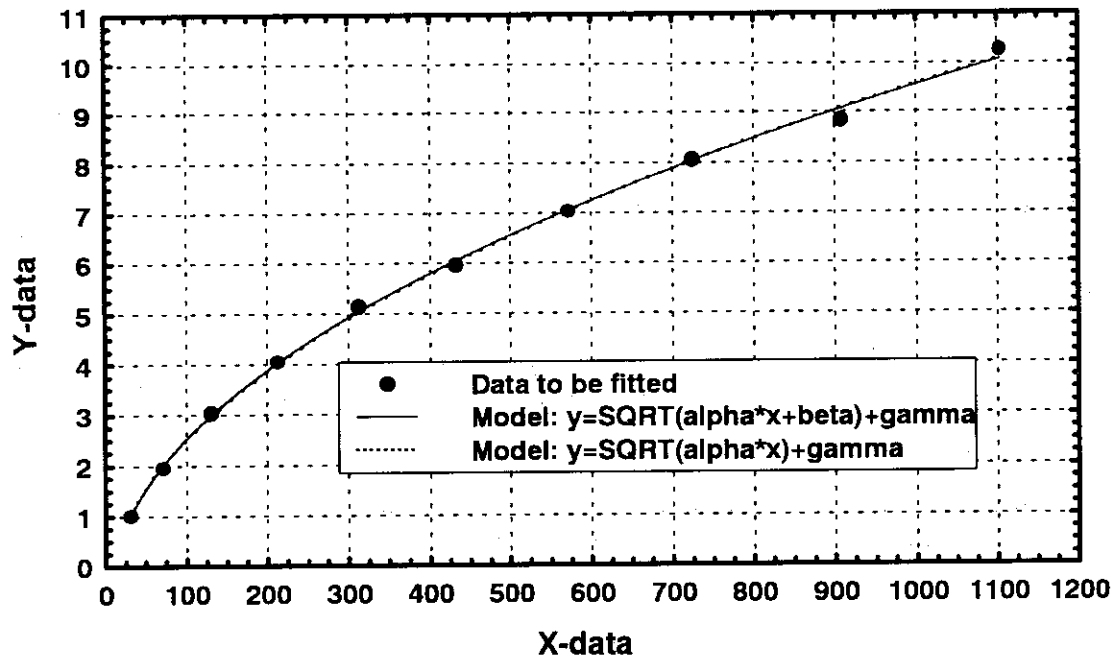


Fig.4.1(4) Fitted curve of Case 1(4)

Case 1(5) Original relationship: $x=10y^{**2}+y+1$

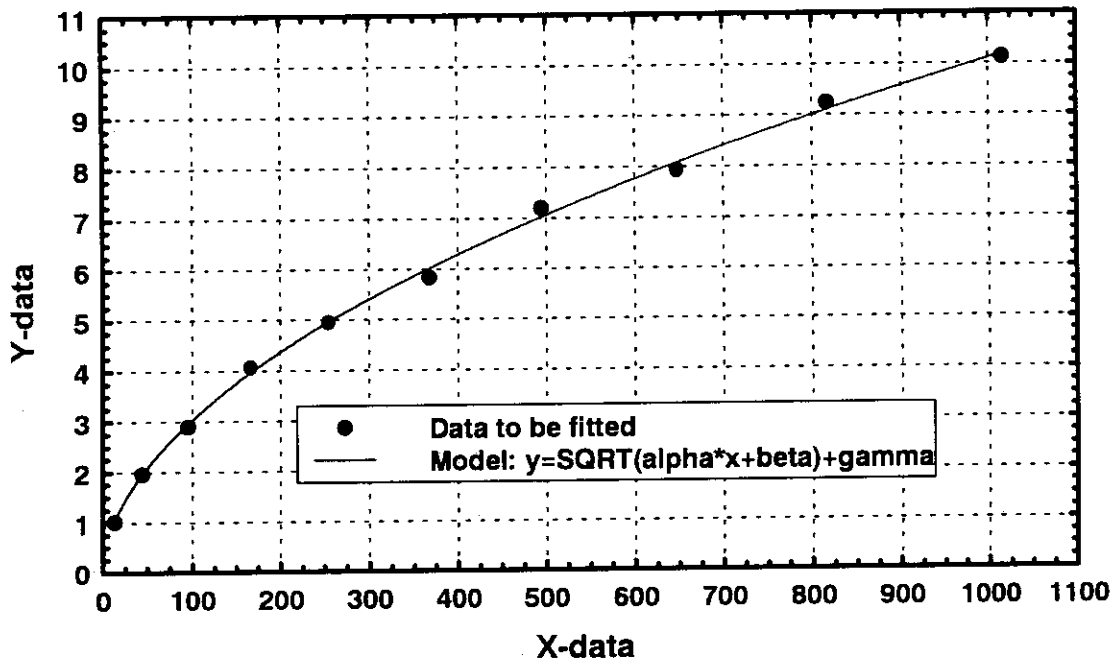


Fig.4.1(5) Fitted curve of Case 1(5)

Case 1(6) Original relationship: $x=y^{**2}+10y+1$

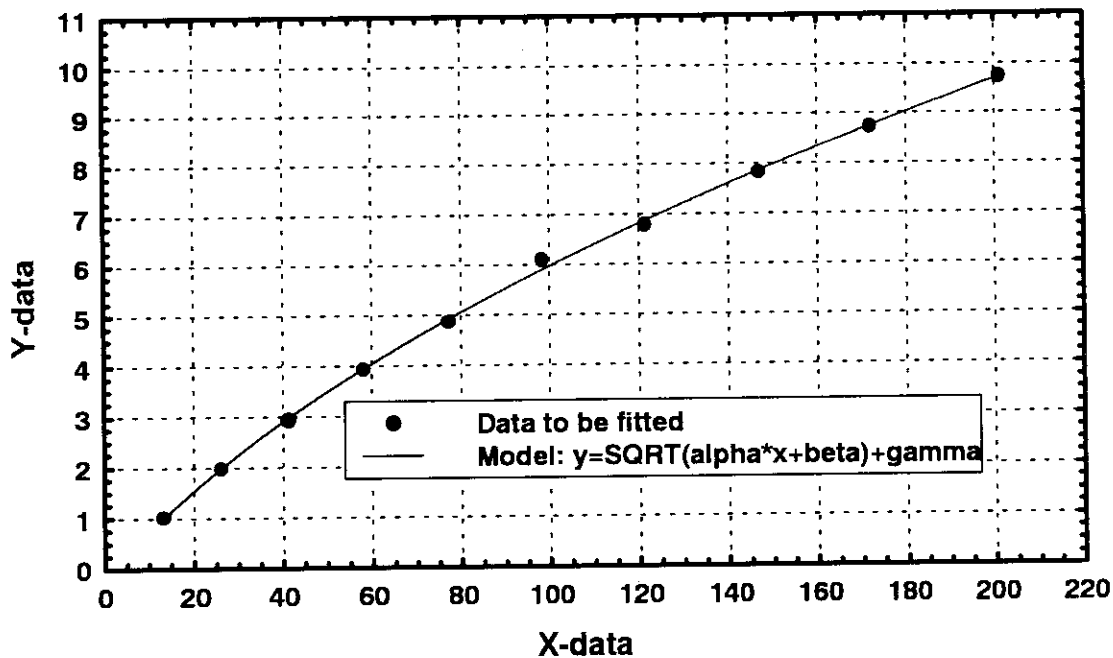


Fig.4.1(6) Fitted curve of Case 1(6)

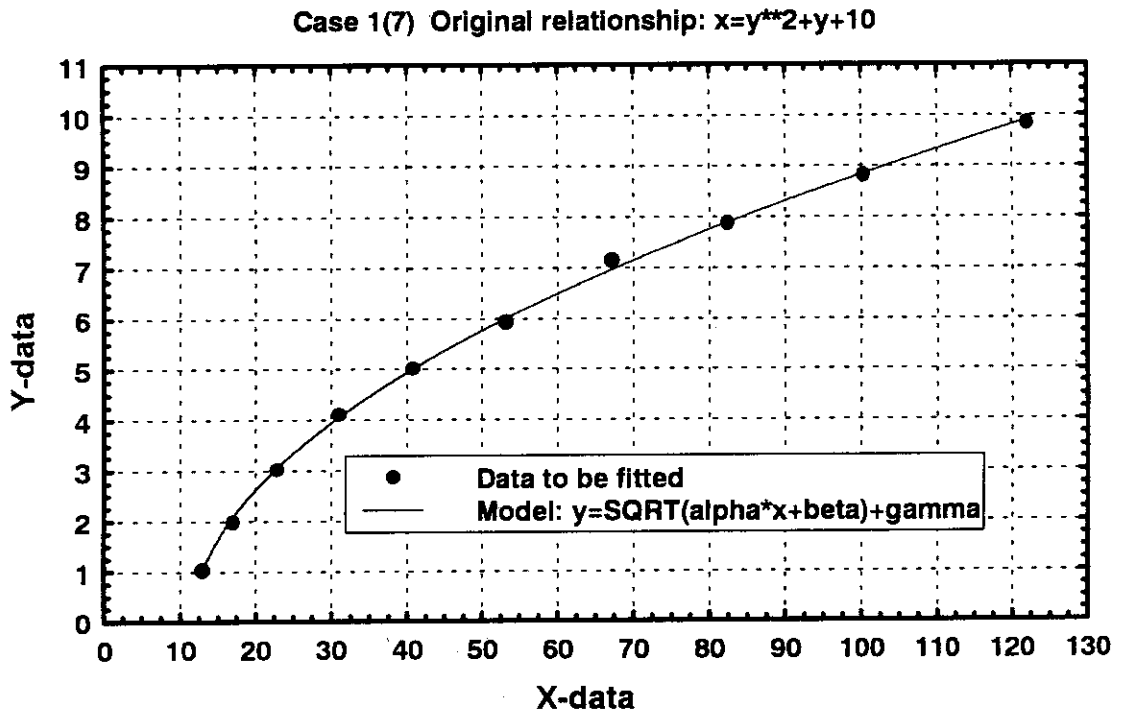


Fig.4.1(7) Fitted curve of Case 1(7)

Table 4.3(1) Data for benchmark test: Case 2(1)
- Dump Tank IB (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.3655	3.59
2	0.3860	4.72
3	0.4068	4.67
4	0.4273	5.22
5	0.4476	5.81
6	0.4691	6.37
7	5.4278	74.18
8	10.4668	118.47
9	15.5842	155.28
10	20.5243	186.04
11	25.4586	213.57
12	30.3815	238.79
13	35.3590	262.33
14	40.4018	284.52
15	45.3841	304.73
16	50.3563	323.51
17	55.3804	340.81
18	60.4198	356.51
19	65.4009	372.32

Table 4.3(2) Data for benchmark test: Case 2(2)
- Dump Tank II (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.2536	4.06
2	0.2739	4.89
3	0.2942	5.42
4	0.3145	6.27
5	0.3347	7.44
6	0.3553	8.07
7	2.0591	48.59
8	3.5991	75.23
9	5.0528	96.03
10	6.5201	113.41
11	8.0988	131.36
12	9.6042	147.22
13	11.0915	161.26
14	12.5527	173.33
15	14.0496	185.76
16	15.5800	196.97
17	17.0792	206.95
18	18.6758	217.63
19	20.1456	227.02

Table 4.3(3) Data for benchmark test: Case 2(3)
- Decay Tank A (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.4394	1.98
2	0.4655	2.48
3	0.4910	3.18
4	0.5168	3.58
5	0.5429	4.57
6	0.5689	5.27
7	3.5265	52.69
8	6.4984	86.27
9	9.5789	114.37
10	12.6251	138.98
11	15.6605	161.30
12	18.7060	181.73
13	21.7044	200.26
14	24.7167	217.60
15	27.6699	233.44
16	30.7557	248.89
17	33.7715	262.64
18	36.8196	275.09
19	39.8524	287.15

Table 4.3(4) Data for benchmark test: Case 2(4)
- Pu Solution Feed Tank A (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.2815	1.13
2	0.3018	5.43
3	0.3222	6.16
4	0.3422	6.85
5	0.3624	7.60
6	0.3825	8.31
7	0.4025	8.97
8	1.4044	34.19
9	2.4070	53.68
10	3.4094	69.46
11	4.4118	83.09
12	5.4146	95.46
13	6.4171	106.78
14	7.4202	117.01
15	8.4232	126.30
16	9.4255	134.51
17	10.4285	142.23
18	11.4312	150.01

Table 4.3(5) Data for benchmark test: Case 2(5)
- Concentrated Pu Receiver Tank (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.2816	4.57
2	0.3016	5.68
3	0.3219	6.77
4	0.3422	7.55
5	0.3622	8.32
6	0.3827	9.01
7	0.4031	9.80
8	0.4234	10.62
9	0.9240	26.25
10	1.4255	38.88
11	1.9268	49.84
12	2.4307	59.30
13	2.9322	67.59
14	3.4342	75.38
15	3.9357	82.18
16	4.4375	88.41
17	4.9387	94.04
18	5.4402	99.87
19	5.9423	105.50

Table 4.3(6) Data for benchmark test: Case 2(6)
- Extraction Feed Tank (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.2119	1.55
2	0.2322	5.28
3	0.2523	7.25
4	0.2725	8.48
5	0.2929	9.19
6	0.3129	9.52
7	0.3334	10.27
8	0.3537	11.17
9	0.8553	27.29
10	1.3560	42.15
11	1.8571	53.25
12	2.3585	63.05
13	2.8606	71.81
14	3.3612	79.71
15	3.8626	86.66
16	4.3640	92.77
17	4.8657	98.75
18	5.3670	104.53
19	5.8684	110.75
20	6.3699	117.11
21	6.8711	123.39
22	7.3721	129.45

Table 4.3(7) Data for benchmark test: Case 2(7)
 - U Solution Storage Tank IA (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.0513	1.50
2	0.0716	7.51
3	0.0918	10.52
4	0.1121	12.02
5	0.1324	13.52
6	0.1524	16.53
7	0.1729	18.03
8	0.1935	19.53
9	0.2143	21.03
10	5.2273	147.26
11	10.2412	207.37
12	15.2571	255.46
13	20.2714	294.54
14	25.2850	329.10
15	30.2992	359.16
16	35.3139	387.71
17	40.3311	414.77
18	45.3450	440.31
19	50.3600	464.36
20	55.3765	486.91

Table 4.3(8) Data for benchmark test: Case 2(8)
 - U Solution Storage Tank II (nonlinear part) -

No.	x-data (lit.)	y-data (mm)
1	0.1008	7.51
2	0.1207	9.02
3	0.1408	12.02
4	0.1610	13.52
5	0.1809	15.03
6	0.2010	16.53
7	0.2210	19.54
8	5.2366	144.30
9	10.2527	205.93
10	15.2684	252.53
11	20.2845	290.11
12	25.3001	326.19
13	30.3167	356.25
14	35.3324	386.31
15	40.3480	411.87
16	45.3651	437.43
17	50.3818	461.48
18	55.3997	484.04

Table 4.4(1) Results for Case 2(1)
- Dump Tank IB (nonlinear part) -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.1793E+00	1.1793E+00 *
Multiple Correlation:		0.99996825	0.999968247
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	2.9017E+03 +/- 3.1114E+01	2901.722
	β	3.6749E+03 +/- 3.2117E+02	3674.854
	γ	-6.4889E+01 +/- 2.2333E+00	-64.8894
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.00000000	-----
	γ	0.00000000	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 22.250252332$

Table 4.4(2) Results for Case 2(2)
- Dump Tank II (nonlinear part) -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		9.1190E-01	9.1190E-01 *
Multiple Correlation:		0.99994730	0.999947302
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	3.6312E+03 +/- 5.2751E+01	3631.191
	β	1.4336E+03 +/- 1.9287E+02	1433.561
	γ	-4.4447E+01 +/- 1.9485E+00	-44.4465
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.00000142	-----
	γ	0.00000000	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 13.305058998$

Table 4.4(3) Results for Case 2(3)

- Decay Tank A (nonlinear part) -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x} + \beta + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.0129E+00	1.0129E+00 *
Multiple Correlation:		0.99996067	0.999960666
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	3.0911E+03 +/- 3.9701E+01	3091.146
	β	3.2558E+03 +/- 3.1626E+02	3255.754
	γ	-6.5935E+01 +/- 2.2793E+00	-65.9348
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.00000002	-----
	γ	0.00000000	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 16.413958359$

Table 4.4(4) Results for Case 2(4)

- Pu Solution Feed Tank A (nonlinear part) -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x} + \beta + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.0186E+00	1.0186E+00 *
Multiple Correlation:		0.99985230	0.999852301
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	2.8773E+03 +/- 8.0040E+01	2877.325
	β	4.4597E+02 +/- 1.7561E+02	445.9673
	γ	-3.1560E+01 +/- 2.5673E+00	-31.5597
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.02266069	-----
	γ	0.00000000	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 15.564490876$

Table 4.4(5) Results for Case 2(5)
 - Concentrated Pu Receiver Tank (nonlinear part) -

(1) Model: $y = f(x \alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$			
		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		4.3608E-01	4.3608E-01 *
Multiple Correlation:		0.99994033	0.999940332
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	2.8914E+03 +/- 5.4172E+01	2891.401
	β	8.7501E+01 +/- 7.1225E+01	87.50075
	γ	-2.5444E+01 +/- 1.3144E+00	-25.4439
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.23701759	-----
	γ	0.00000000	-----
(2) Model: $y = f(x \alpha, \gamma) = \sqrt{\alpha x} + \gamma$			
		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		4.4575E-01	4.4575E-01 **
Multiple Correlation:		0.99993376	0.999933761
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	2.8255E+03 +/- 1.5776E+01	2825.508
	γ	-2.3798E+01 +/- 2.1689E-01	-23.7980
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	γ	0.00000000	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 3.042718696$

** : Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \gamma)]^2 = 3.377767618$

Table 4.4(6) Results for Case 2(6)
- Extraction Feed Tank (nonlinear part) -

(1) Model: $y = f(x \alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$			
		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.0279E+00	1.0279E+00 *
Multiple Correlation:		0.99976980	0.999769802
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	3.1048E+03 +/- 9.1191E+01	3104.800
	β	1.1374E+02 +/- 1.2175E+02	113.7411
	γ	-2.3685E+01 +/- 2.2381E+00	-23.6853
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.36189391	-----
	γ	0.00000000	-----
(2) Model: $y = f(x \alpha, \gamma) = \sqrt{\alpha x} + \gamma$			
		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.0273E+00	1.0273E+00 **
Multiple Correlation:		0.99975794	0.999757945
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	3.0207E+03 +/- 2.9728E+01	3020.694
	γ	-2.1546E+01 +/- 4.4608E-01	-21.5458
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	γ	0.00000000	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 20.074828062$

** : Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \gamma)]^2 = 21.108718401$

Table 4.4(7) Results for Case 2(7)
 - U Solution Storage Tank IA (nonlinear part) -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		1.1433E+00	1.1433E+00 *
Multiple Correlation:		0.99998321	0.999983205
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	4.3891E+03 +/- 1.7882E+01	4389.108
	β	-1.8733E+02 +/- 1.7977E+01	-187.327
	γ	-5.0001E+00 +/- 6.9780E-01	-5.00007
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.00000001	-----
	γ	0.00000158	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 22.221883302$

Table 4.4(8) Results for Case 2(8)
 - U Solution Storage Tank II (nonlinear part) -

Model: $y = f(x|\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\alpha x + \beta} + \gamma$

		<u>Revised VESCAL</u>	<u>Visual Stat 4.5J</u>
Standard Deviation:		9.4828E-01	9.4828E-01 *
Multiple Correlation:		0.99998837	0.999988372
$Q(F v_1, v_2)$:		0.00000000	-----
Estimated			
Parameters:	α	4.3479E+03 +/- 2.0927E+01	4347.931
	β	-2.9877E+02 +/- 3.0994E+01	-298.774
	γ	-5.9194E+00 +/- 9.0008E-01	-5.91941
$1-A(t v)$:	α	0.00000000	-----
	β	0.00000008	-----
	γ	0.00000878	-----

*: Calculated from $\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i|\alpha, \beta, \gamma)]^2 = 13.488650860$

Case 2(1) Dump Tank IB (nonlinear part)

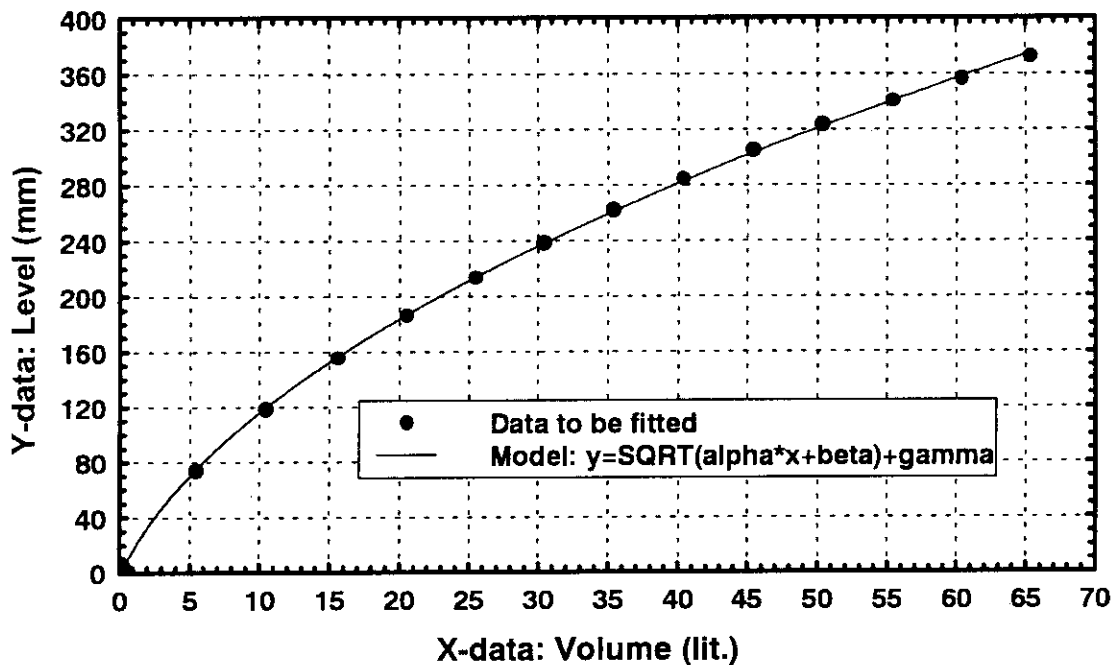


Fig.4.2(1) Fitted curve of Case 2(1)

Case 2(2) Dump Tank II (nonlinear part)

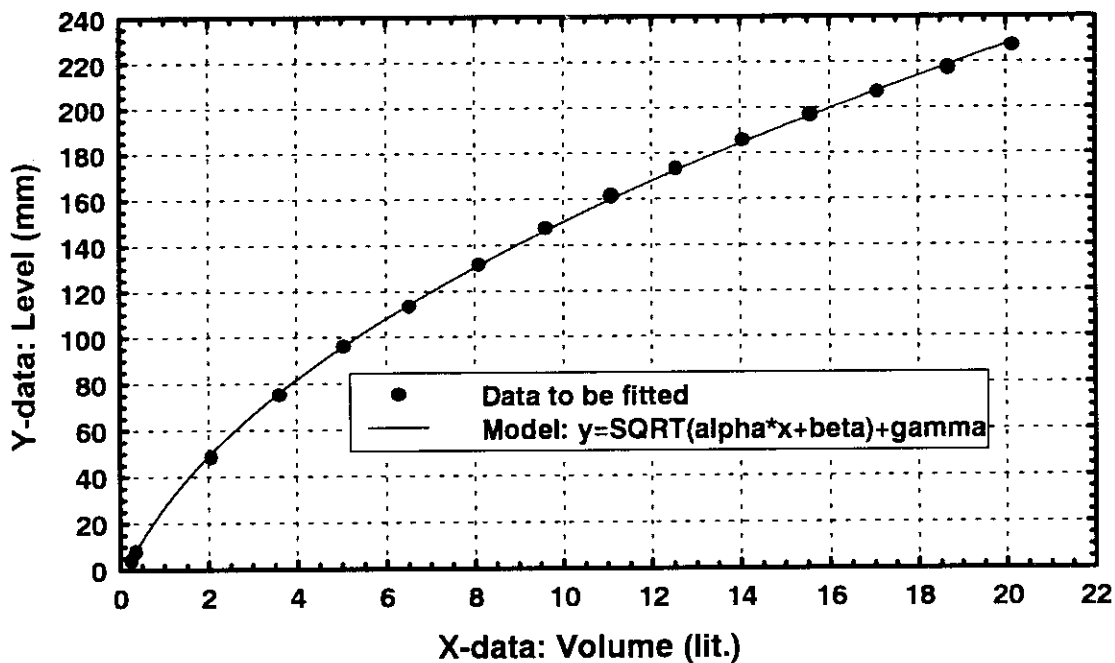


Fig.4.2(2) Fitted curve of Case 2(2)

Case 2(3) Decay Tank A (nonlinear part)

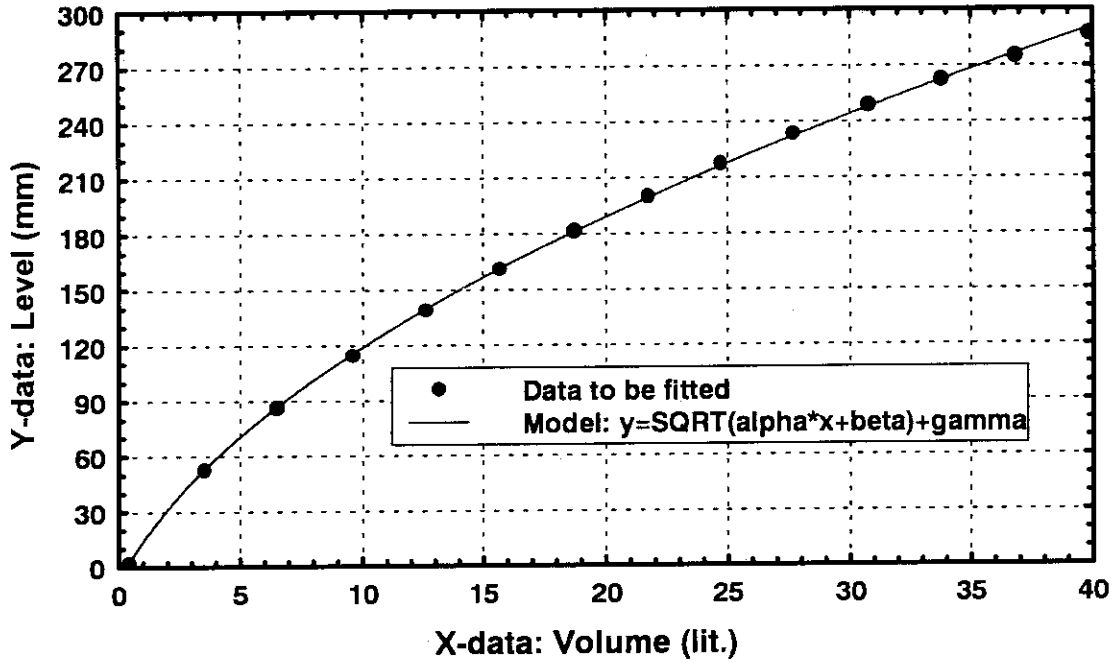


Fig.4.2(3) Fitted curve of Case 2(3)

Case 2(4) Pu Solution Feed Tank A (nonlinear part)

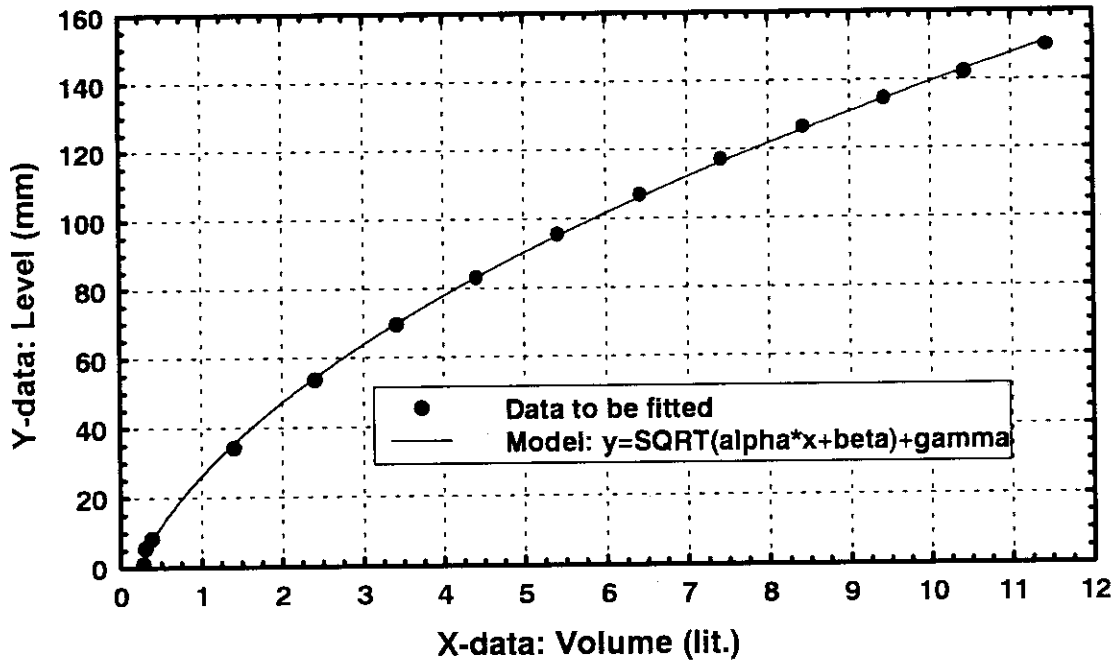


Fig.4.2(4) Fitted curve of Case 2(4)

Case 2(5) Concentrated Pu Receiver Tank (nonlinear part)

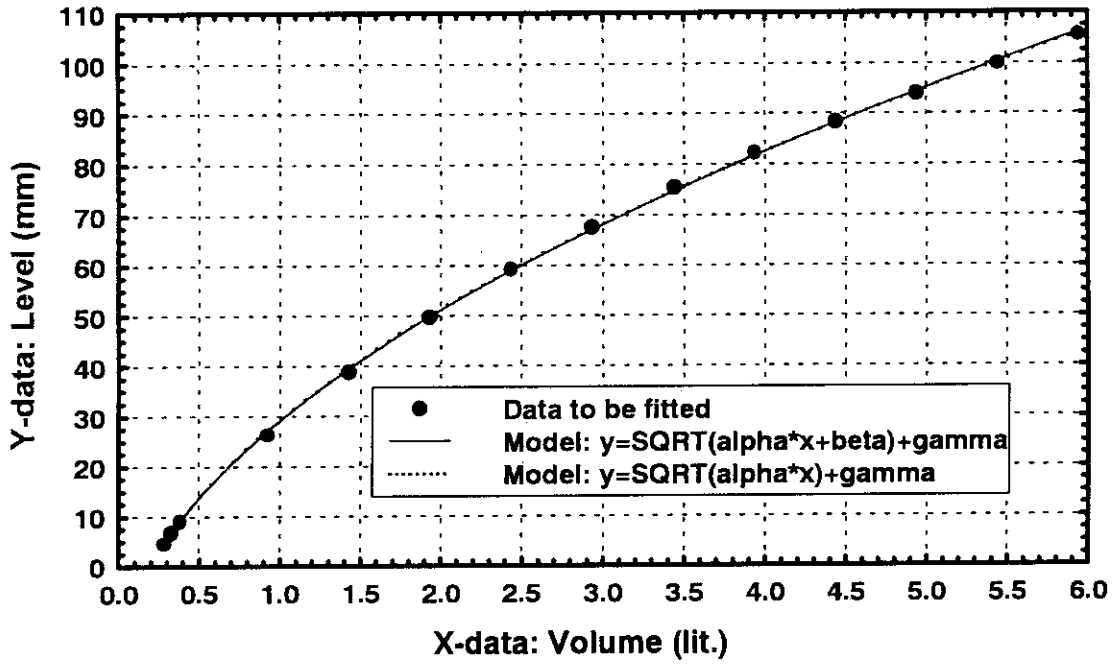


Fig.4.2(5) Fitted curve of Case 2(5)

Case 2(6) Extraction Feed Tank (nonlinear part)

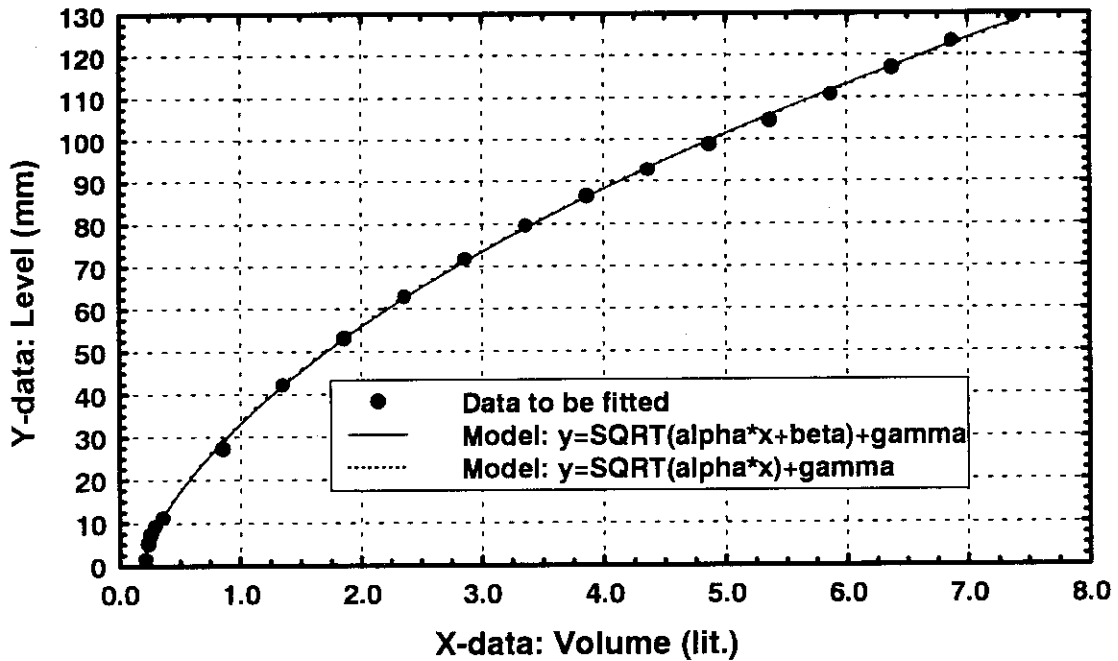


Fig.4.2(6) Fitted curve of Case 2(6)

Case 2(7) U Solution Storage Tank IA (nonlinear part)

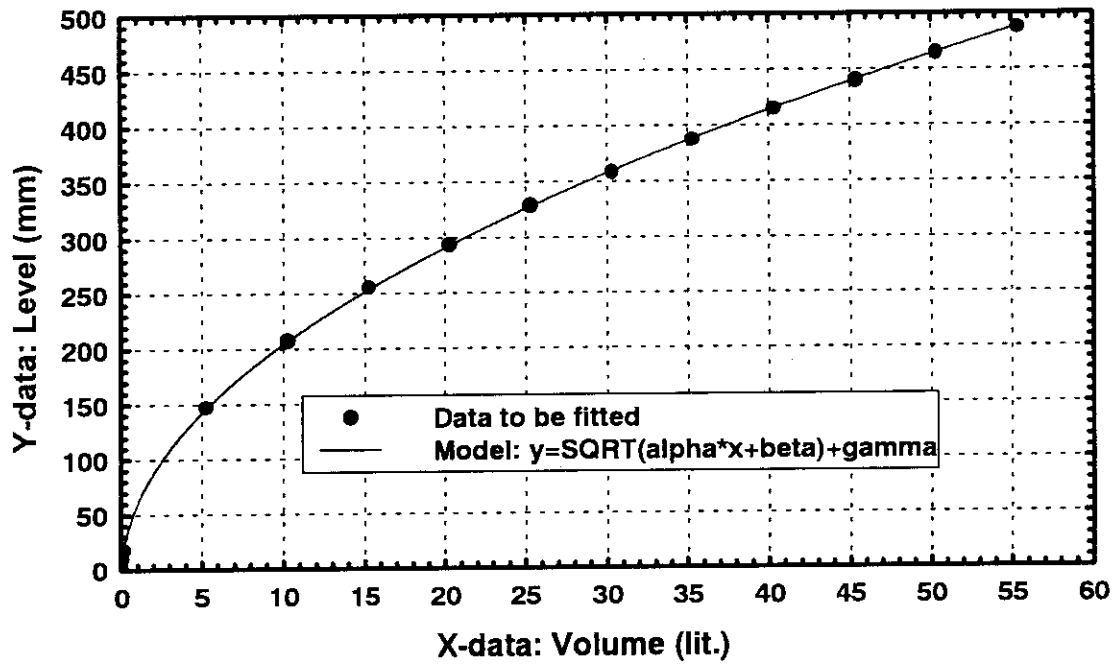


Fig.4.2(7) Fitted curve of Case 2(7)

Case 2(8) U Solution Storage Tank II (nonlinear part)

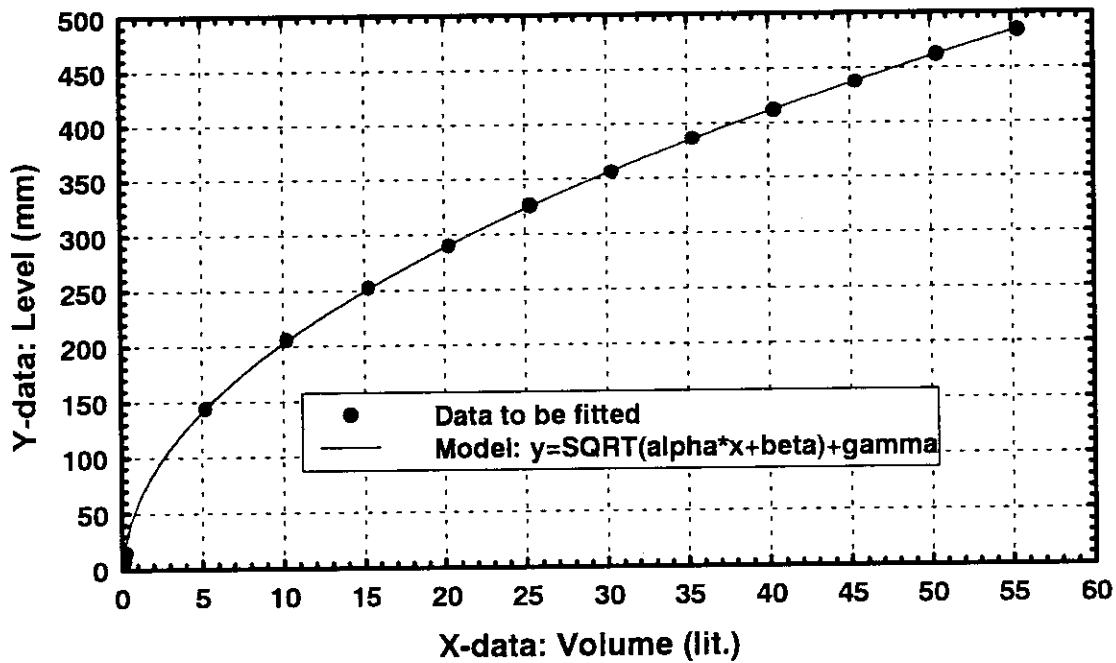


Fig.4.2(8) Fitted curve of Case 2(8)

5. おわりに

今回プログラム VESCAL を改定し、円環槽及び平板槽の非線型領域を対象とした新たなモデルによる回帰計算機能を追加した。この新たなモデルは従来版の多項式モデルよりも少ない数の未知パラメータによって、非線型領域の測定データを精度良く再現することができ、ヒール量等の評価精度の向上が期待できる。また、この改定作業にあたっては、今回追加したモデルに対する回帰計算手法、分散分析、統計検定手法、数値計算手法について整理し、従来版と同様に強力なデータ解析機能をプログラムに組み込んだ。さらに、計算結果の信頼性については汎用統計解析パッケージプログラムと比較検証し良好な結果が得られた。

改定版 VESCAL は、今後 NUCEF の計量槽校正データの再評価に利用してゆく予定であるが、今回の改定で追加したモデルは 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。

最後に、プログラム VESCAL の今後の展望について簡単に述べる。

今回の改定によってデータ解析機能は一通り備えたものの、現時点ではあくまでもデータ解析のための道具とした位置付けであり、解析結果については最終的に解析者が判断しなければならない。特に計量槽校正データの解析では、ほぼゼロレベルから定格容量までの液位に関して複数の領域に分割し、各領域毎に適当なモデルを設定する必要がある。ここで、対象となる槽をいくつの領域に分割すればよいのか？、また各領域に対してどのような関数をモデルとして適用すればよいのか？という点に関しては、解析者自ら結果の妥当性について判断して行わなければならない。そこで、今後の VESCAL の改良では、このような判断の伴う作業をできる限り自動化するような、いわばインテリジェントな解析機能を備えるように拡張してゆきたいと考える。

また、プログラム VESCAL は、パーソナルコンピュータ上での実行を前提として設計されているため、解析作業の場を選ばないという利点がある。特に昨今の計算機ダウンサイジングの傾向とともに、携帯型のパーソナルコンピュータでも十分な計算処理能力を有しており、将来的にもますます高度なものになるものと考えられる。この点から、将来的には現場での校正作業（測定作業）と平行して解析作業を進め、測定データの迅速なチェック、または場合によっては解析結果を校正作業に迅速にフィードバックすることも十分可能と考える。現在の VESCAL でも測定現場における解析作業が不可能なわけではないが、校正作業を高度に支援するためには、特にデータ測定システムと解析プログラムとの間のインターフェイスを新たに設計し、測定データのオンラインロギング及びその解析というようなシステム化が必要である。さらに、ここで上記のインテリジェント解析機能を取り入れることによって、校正作業及びデータ解析の一層の効率化が期待できるものと考えられる。

謝 辞

本プログラムの改定作業を支援して頂いたNUCEF試験室試験計画課長土尻滋氏に深く感謝いたします。また、プログラム改定にあたり多くの助言を頂くとともに本稿を査読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] 柳澤：「計量槽校正データ解析プログラム: VESCAL」, JAERI-Data/Code 94-008, (1994)
- [2] 辻野他：「動き出す燃料サイクル安全工学研究施設 -NUCEF計画の現状と展望-」, 原子力工業, Vol.40, No.5, pp.9-59, (1994)
- [3] NUCEF実験計画検討グループ：「燃料サイクル安全工学研究施設 (NUCEF) における研究計画」, JAERI-M 94-066, (1994)
- [4] Yanagisawa, H. et al.: " Measurement and Analysis on Initial Tank Calibration at NUCEF ", Proc. of the 35th Annual Meeting of INMM, Florida, pp.959-964, (1994)
- [5] 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)
- [6] 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)
- [7] 中川他：「最小二乗法による実験データ解析 プログラム SALS」, 東京大学出版会
- [8] ANSI/INMM.: "American National Standard for Nuclear Materials Control - Volume Calibration Techniques", ARNI N15.19, (1989)
- [9] 奥野他：「多変量解析法」, 日科技連出版社
- [10] NBS: "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables", A Wiley-Interscience Publication, (1972)

謝 辞

本プログラムの改定作業を支援して頂いたNUCEF試験室試験計画課長土尻滋氏に深く感謝いたします。また、プログラム改定にあたり多くの助言を頂くとともに本稿を査読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] 柳澤：「計量槽校正データ解析プログラム: VESCAL」, JAERI-Data/Code 94-008, (1994)
- [2] 辻野他：「動き出す燃料サイクル安全工学研究施設 -NUCEF計画の現状と展望-」, 原子力工業, Vol.40, No.5, pp.9-59, (1994)
- [3] NUCEF実験計画検討グループ：「燃料サイクル安全工学研究施設 (NUCEF) における研究計画」, JAERI-M 94-066, (1994)
- [4] Yanagisawa, H. et al.: " Measurement and Analysis on Initial Tank Calibration at NUCEF ", Proc. of the 35th Annual Meeting of INMM, Florida, pp.959-964, (1994)
- [5] 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)
- [6] 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)
- [7] 中川他：「最小二乗法による実験データ解析 プログラム SALS」, 東京大学出版会
- [8] ANSI/INMM.: "American National Standard for Nuclear Materials Control - Volume Calibration Techniques", ARNI N15.19, (1989)
- [9] 奥野他：「多変量解析法」, 日科技連出版社
- [10] NBS: "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables", A Wiley-Interscience Publication, (1972)

付録 VESCAL操作マニュアル

ここでは、改定版 VESCAL の基本的な操作方法について解説する。

A.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.A.1 の画面が表示される。

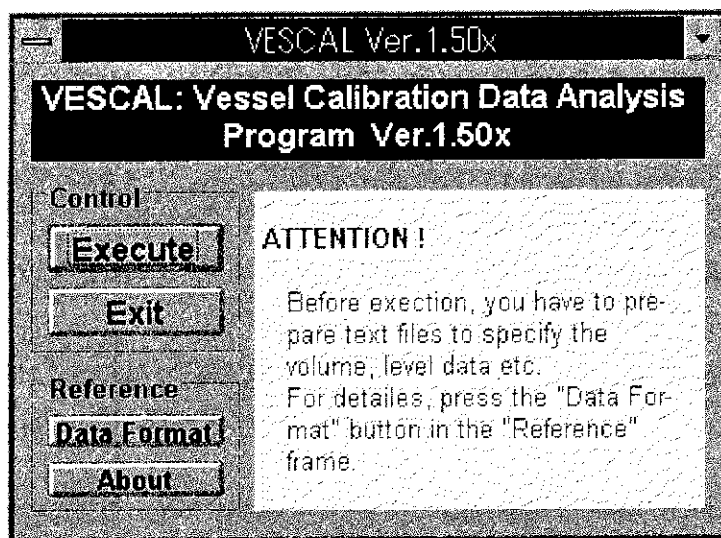


Fig.A.1 Screen view -VESCAL opening

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)、液位の誤差 (mm) からなるデータ。但し、液位の誤差データは、独立変数を体積、従属変数を液位として重み付けデータフィッティングを行う場合のみ使用する。従って、これ以外のデータ解析を行う場合には、ダミーの数値（例えば、ゼロ）を入力しても構わない。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。参考のため、校正データファイルの例を Fig.A.2 に示す。

```
001
002   Dump Tank IB (NUCEF Site; 1993-06-17)
003
004   Volume (lit.)   Level (mm)   DL (mm)
005     0.3655      ,    3.59      ,    0.45
006     0.386      ,    4.72      ,    0.45
007     0.4068     ,    4.67      ,    0.45
008     0.4273     ,    5.22      ,    0.45
009     0.4476     ,    5.81      ,    0.45
010     0.4691     ,    6.37      ,    0.45
011     5.4278     ,   74.18     ,    0.45
012    10.4668     ,  118.47     ,    0.45
013    15.5842     ,  155.28     ,    0.45
014    20.5243     ,  186.04     ,    0.45
015    25.4586     ,  213.57     ,    0.45
016    30.3815     ,  238.79     ,    0.45
017    35.359      ,  262.33     ,    0.45
018    40.4018     ,  284.52     ,    0.45
019    45.3841     ,  304.73     ,    0.45
020    50.3563     ,  323.51     ,    0.45
021    55.3804     ,  340.81     ,    0.45
022    60.4198     ,  356.51     ,    0.45
023    65.4009     ,  372.32     ,    0.45
.
.
.
.
.
```

Fig.A.2 Example of a calibration data file

Fig.A.1 の画面で "Execute" ボタンをマウスでクリックすると Fig.A.3(1) に示すファイル入力画面が現れる。

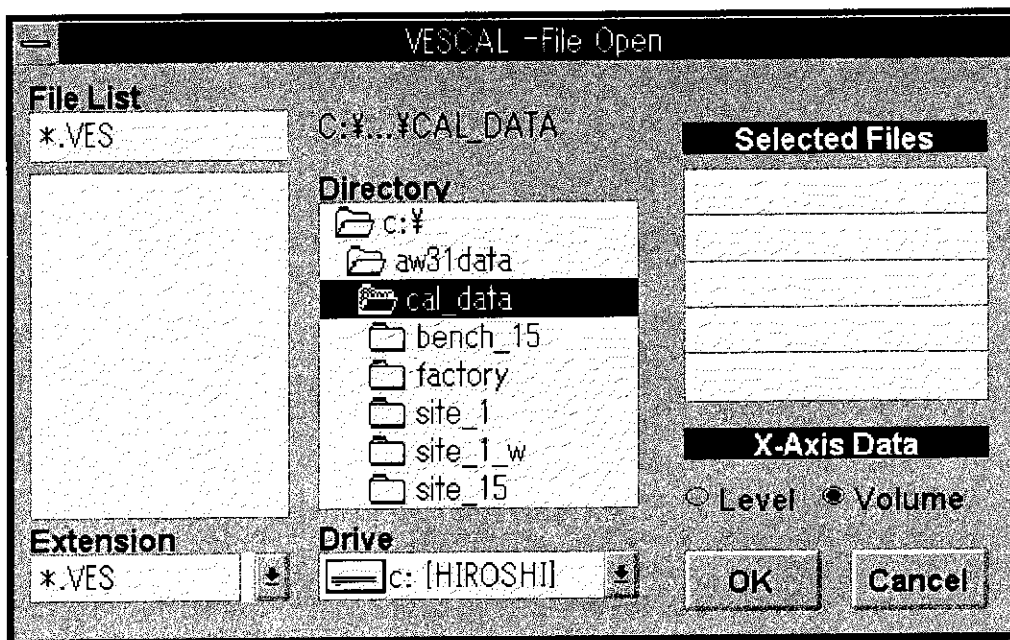


Fig.A.3(1) Screen view -VESCAL file open (1)

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.A.3(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。

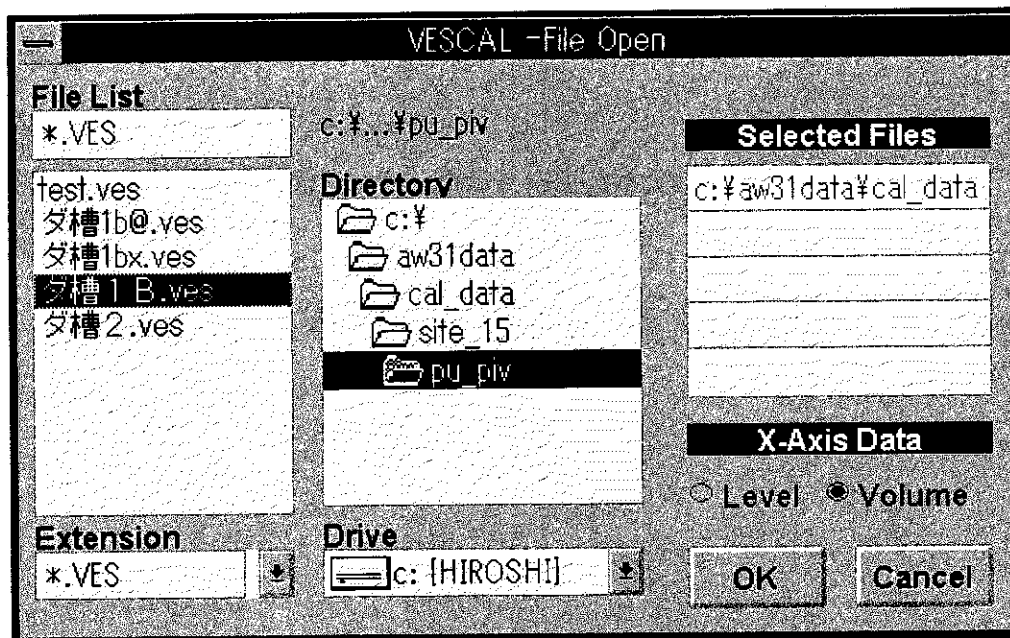
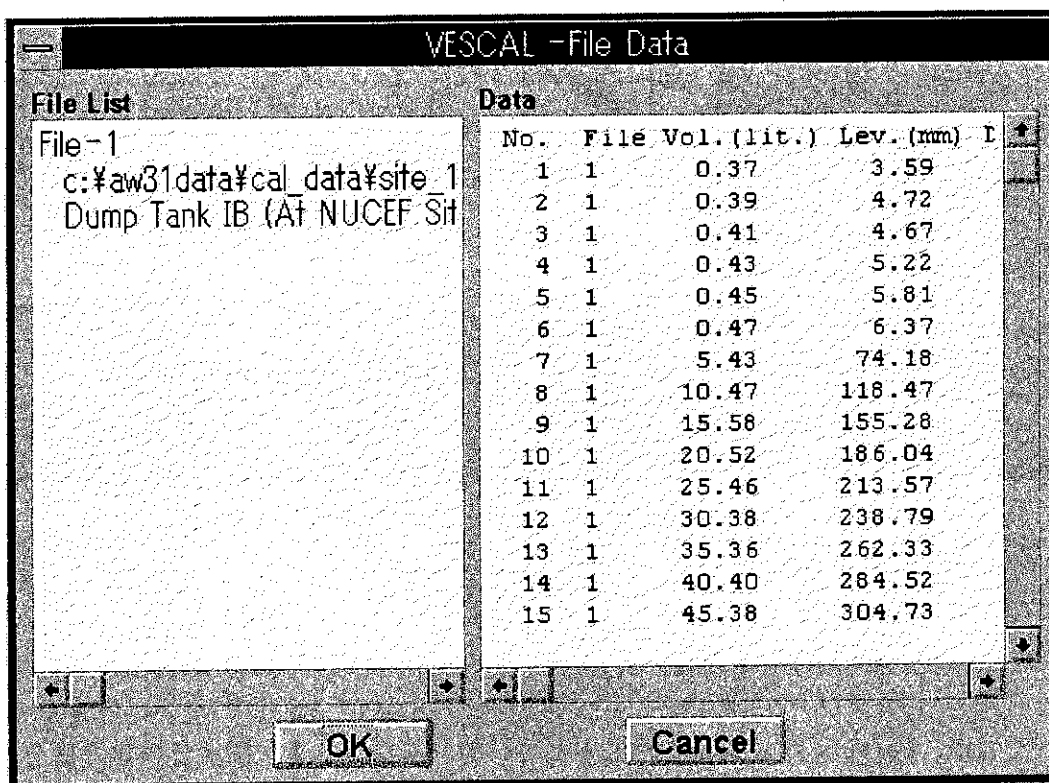


Fig.A.3(2) Screen View -VESCAL file open (2)

- 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軸データ（独立変数）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.A.4 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.A.5(1) の画面が表示される。本プログラムでは、Fig.A.5(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。



No.	File	Vol. (lit.)	Lev. (mm)	I
1	1	0.37	3.59	
2	1	0.39	4.72	
3	1	0.41	4.67	
4	1	0.43	5.22	
5	1	0.45	5.81	
6	1	0.47	6.37	
7	1	5.43	74.18	
8	1	10.47	118.47	
9	1	15.58	155.28	
10	1	20.52	186.04	
11	1	25.46	213.57	
12	1	30.38	238.79	
13	1	35.36	262.33	
14	1	40.40	284.52	
15	1	45.38	304.73	

Fig.A.4 Screen View -VESCAL file data

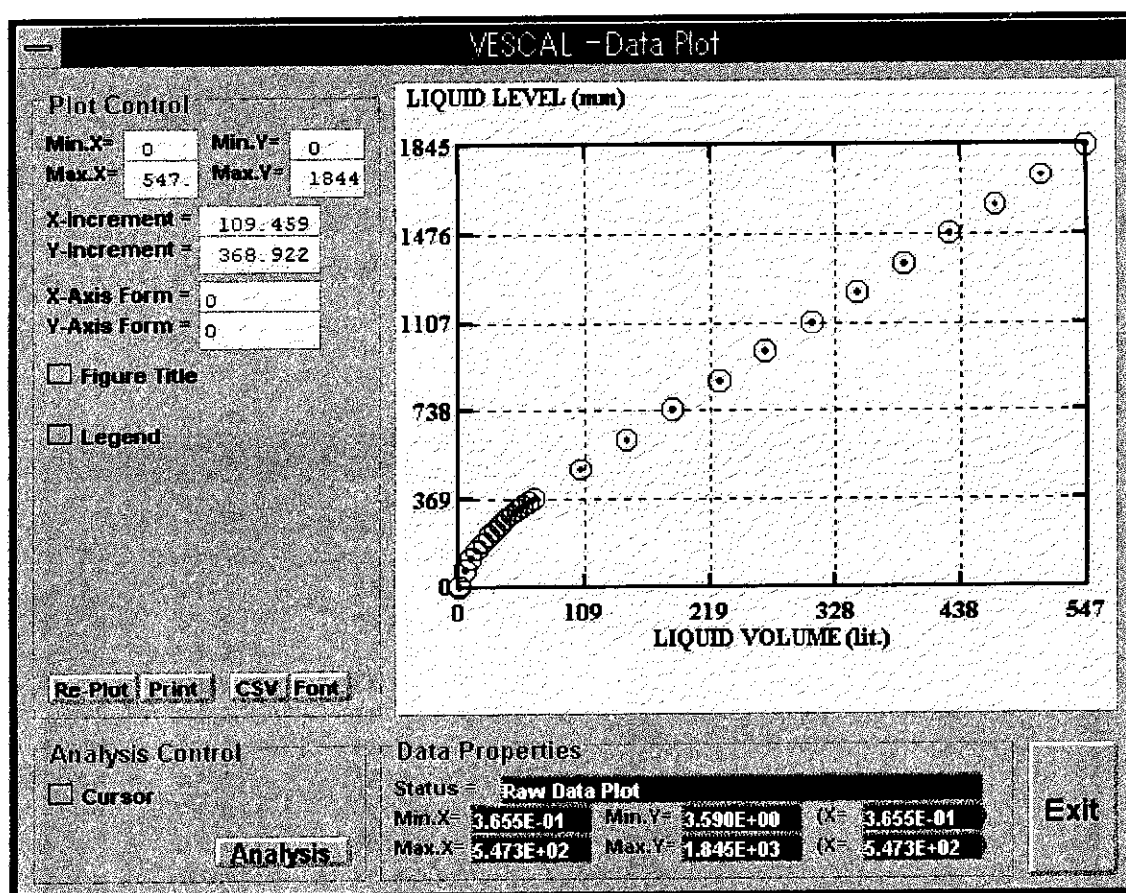


Fig.A.5(1) Screen view -VESCAL raw data plot (1)

A.2 データプロットに関する操作

ここでは、Fig.A.5(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 A.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.A.5(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.A.5(3)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ことはできない。

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.A.5(3) 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 A.1 Example 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

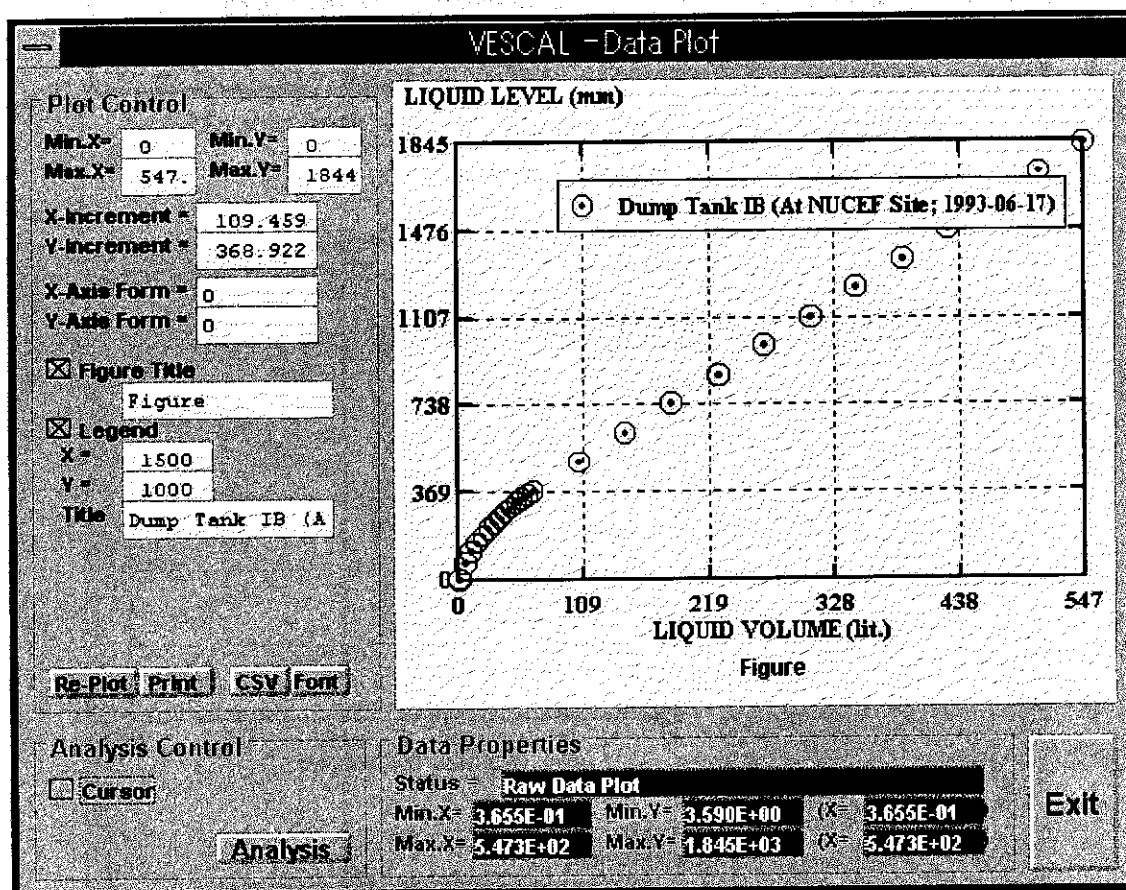


Fig.A.5(2) Screen view -VESCAL raw data plot (2)
- executing re-plot and showing figure title and legend-

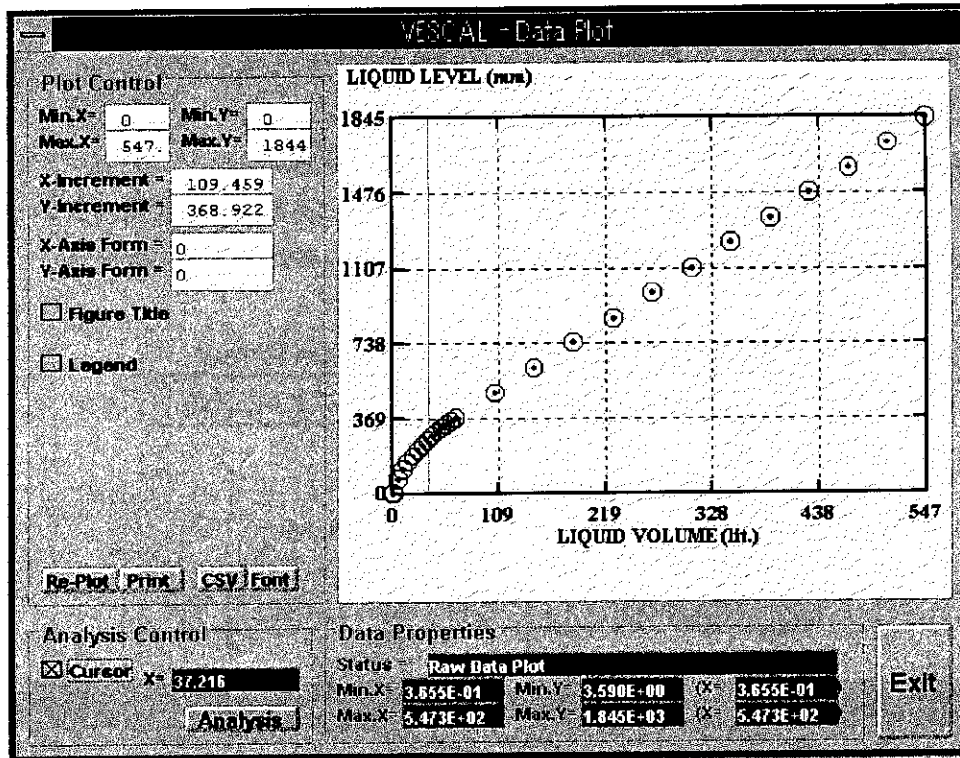


Fig.A.5(3) Screen view -VESCAL raw data plot (3)
- showing cursor-

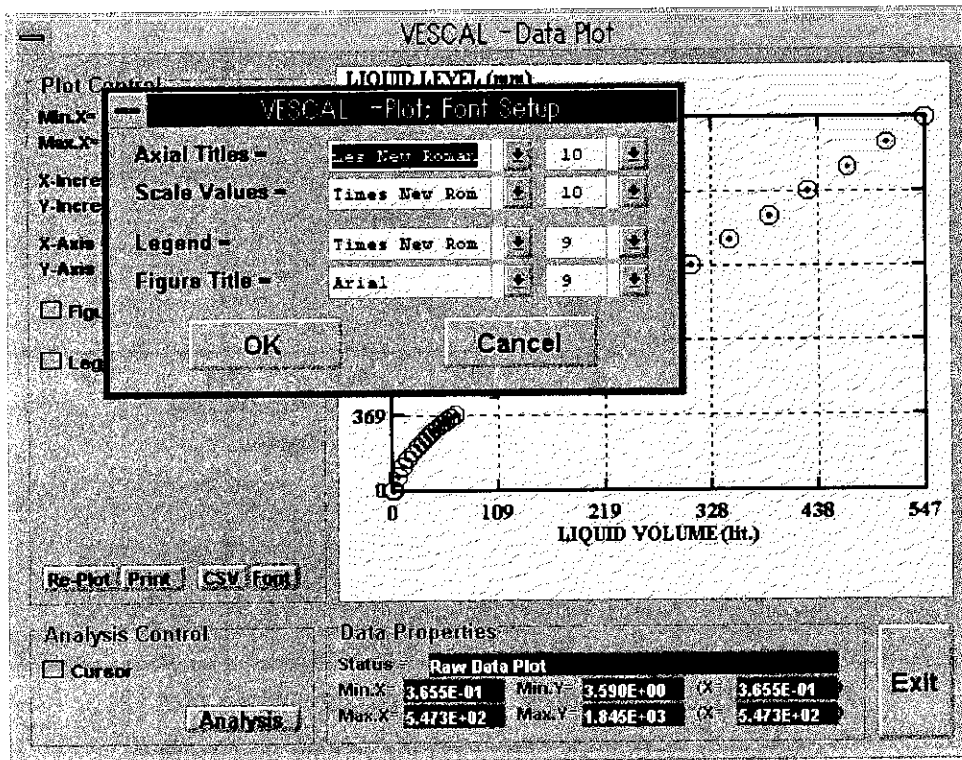


Fig.A.5(4) Screen view -VESCAL plot font setup

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.A.5(1)、Fig.A.5(2)及びFig.A.5(4)の画面で"CSV"ボタンをマウスでクリックするとFig.A.5(5)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。

ここで、"Fitted Curve"チェックボックスをチェックした場合には、フィッティング曲線及び信頼限界のデータに関するCSVファイルも同時に作成される。参考までに、これらのCSVファイルを市販の表計算アプリケーションプログラムに読み込んで、印刷した結果をFig.A.6(1),(2)に示す。

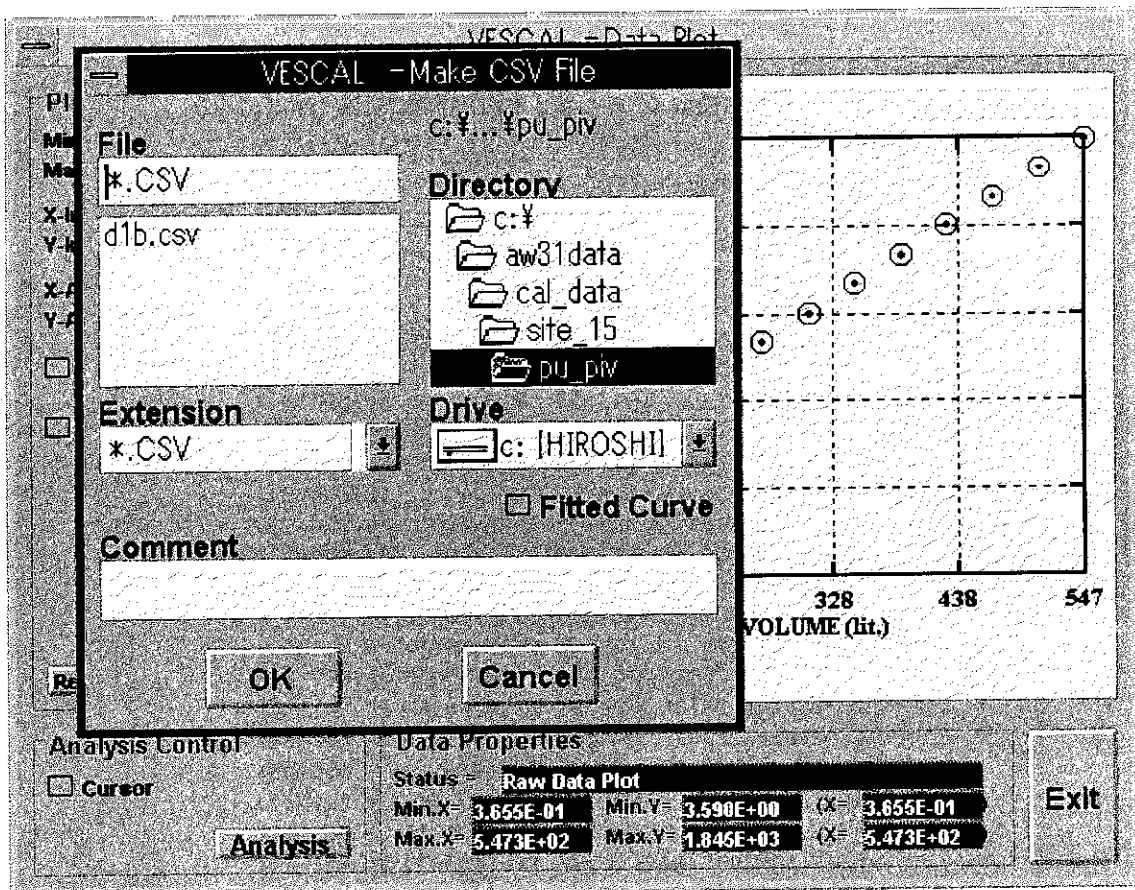


Fig.A.5(5) Screen view -VESCAL CSV file output

なお、Fig.A.5(1)、Fig.A.5(2)及びFig.A.5(4)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.A.7に示す。

```

TEST RUN:
File No. =      1
c:\aw31data\ves_rev\graphic\test.ves
Dump Tank IB (NUCEF Site; 1993-06-17)
No. X-data Y-data
  1 0.3655  3.59
  2 0.386   4.72
  3 0.4068  4.67
  4 0.4273  5.22
  5 0.4476  5.81
  .   .     .
  .   .     .
  .   .     .
 18 60.42 356.5
 19 65.401 372.3
    
```

Fig.A.6(1) Example of a CSV formatted file (plot data)

```

Polynomial Data
TEST RUN:
c:\aw31data\ves_rev\graphic\test.ves
Dump Tank IB (NUCEF Site; 1993-06-17)
No. X-data Y-data Y-upper Y-lower
  1 0.3655 3.92510036 4.41831041 3.43189031
  2 0.4955708 6.61489713 7.07615595 6.15363831
  3 0.6256416 9.20711523 9.6458745 8.76835596
  4 0.7557124 11.7116616 12.1355702 11.2877531
  5 0.8857832 14.1368724 14.5520019 13.7217429
  6 1.015854 16.4898408 16.9009041 16.0787774
  7 1.1459248 18.776662 19.1872311 18.3660929
  8 1.2759956 21.0026197 21.4153352 20.5899042
  9 1.4060664 23.1723293 23.5890914 22.7555672
 10 1.5361372 25.289851 25.7119842 24.8677178
 11 1.666208 27.3587785 27.7871674 26.9303897
 12 1.7962788 29.3823115 29.8175091 28.9471139
 13 1.9263496 31.3633129 31.8056257 30.9210001
 14 2.0564204 33.3043569 33.7539096 32.8548042
 15 2.1864912 35.2077681 35.6645529 34.7509833
 16 2.316562 37.075654 37.5395678 36.6117402
 17 2.4466328 38.9099324 39.3808046 38.4390602
 18 2.5767036 40.7123546 41.1899679 40.2347414
 19 2.7067744 42.484525 42.9686307 42.0004192
 20 2.8368452 44.2279174 44.7182472 43.7375875
  .   .     .
  .   .     .
  .   .     .
 497 64.880617 373.220615 373.811602 372.629627
 498 65.010688 373.65115 374.243768 373.058533
 499 65.140758 374.081264 374.675513 373.487015
 500 65.270829 374.510956 375.106837 373.915075
 501 65.4009 374.940229 375.537743 374.342714
    
```

Fig.A.6(2) Example of a CSV formatted file (fitting data with confidence limit)

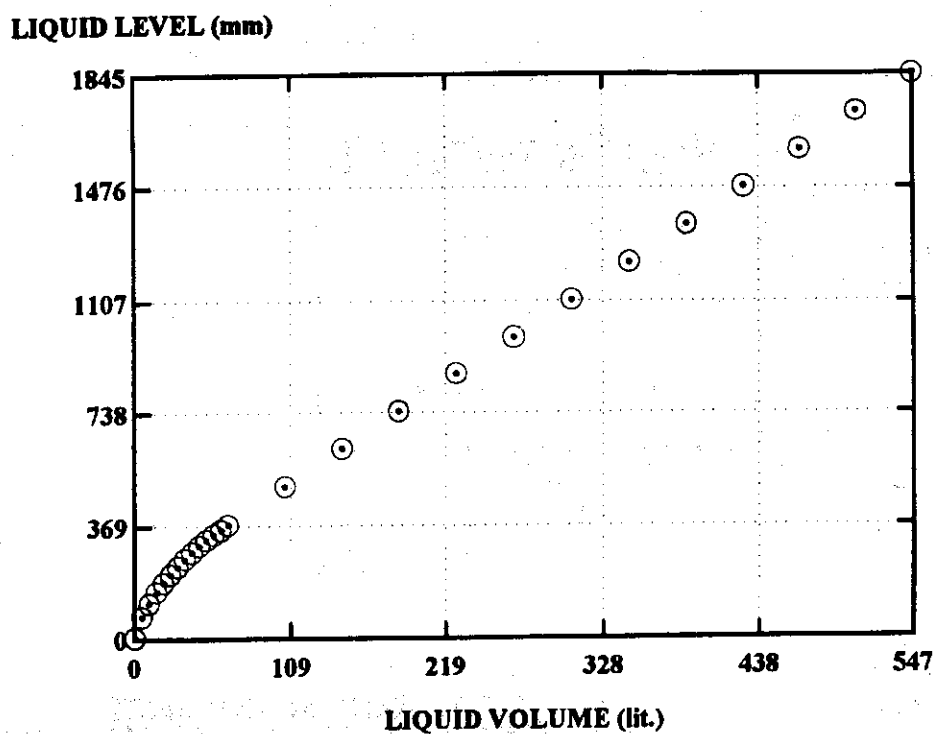


Fig.A.7 Hard copy of graph, printed with 600dpi page printer

A.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.A.5(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.A.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。

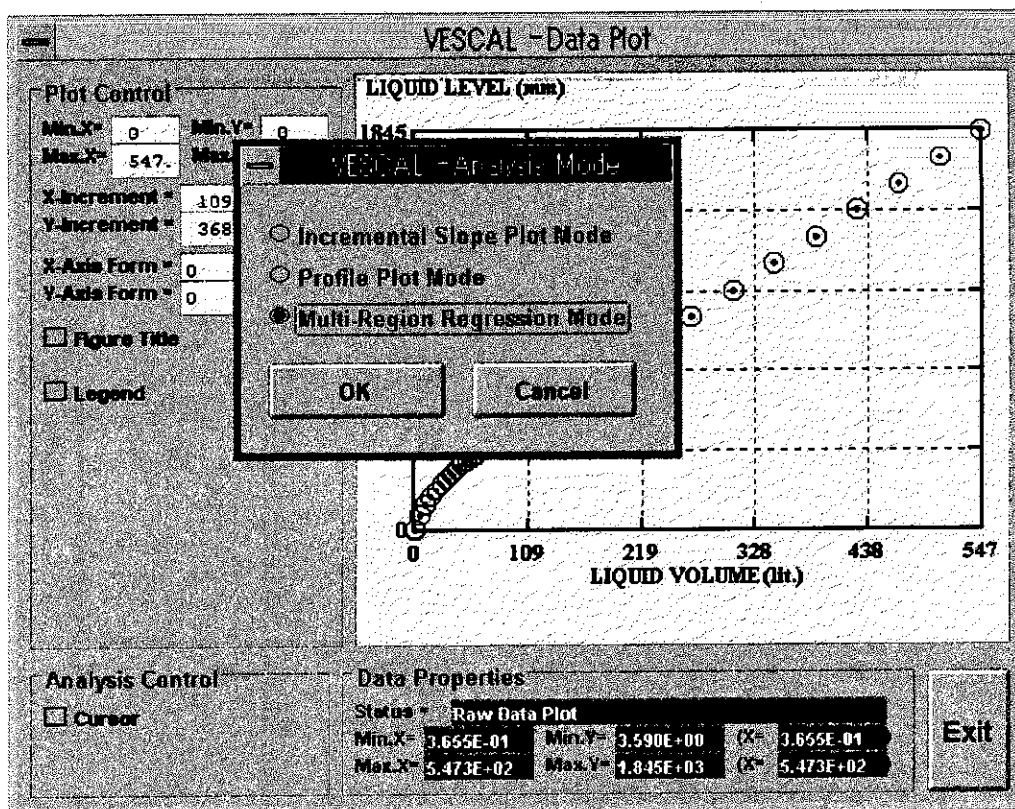


Fig.A.8 Screen view -VESCAL analysis setup

(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.A.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.A.10)。Fig.A.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。

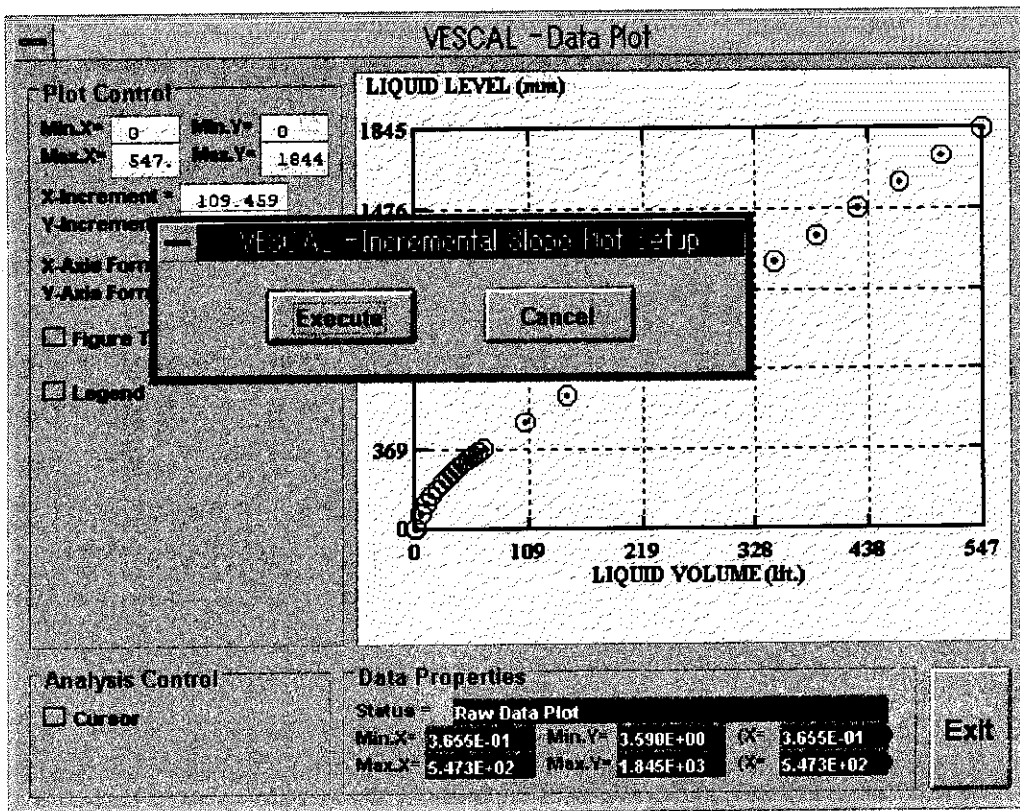


Fig.A.9 Screen view -VESCAL incremental slope plot setup

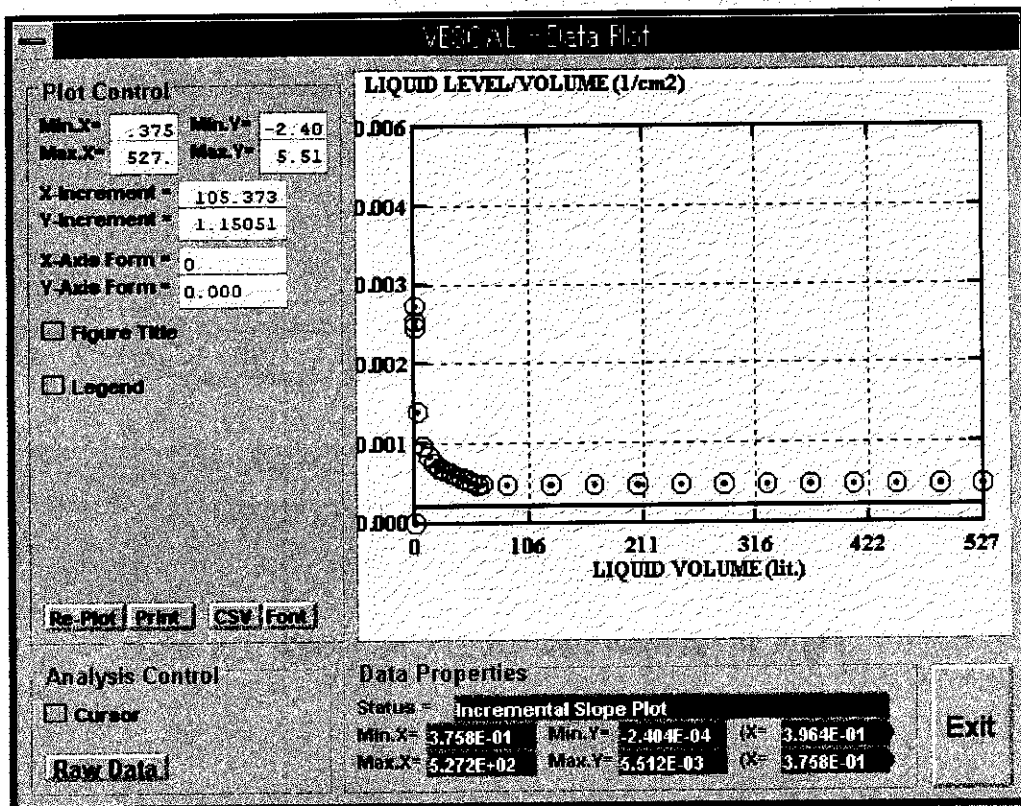


Fig.A.10 Screen view -VESCAL incremental slope plot

(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.A.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、各種統計検定のための有意水準: α (Significance Level) をキーボードから入力する。デフォルトでは、 $\alpha=0.05$ 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.A.12 の画面に表示される。Fig.A.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、統計検定の結果、標準偏差、重相関係数、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。また、Fig.A.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.A.13(1), Fig.A.13(2))。

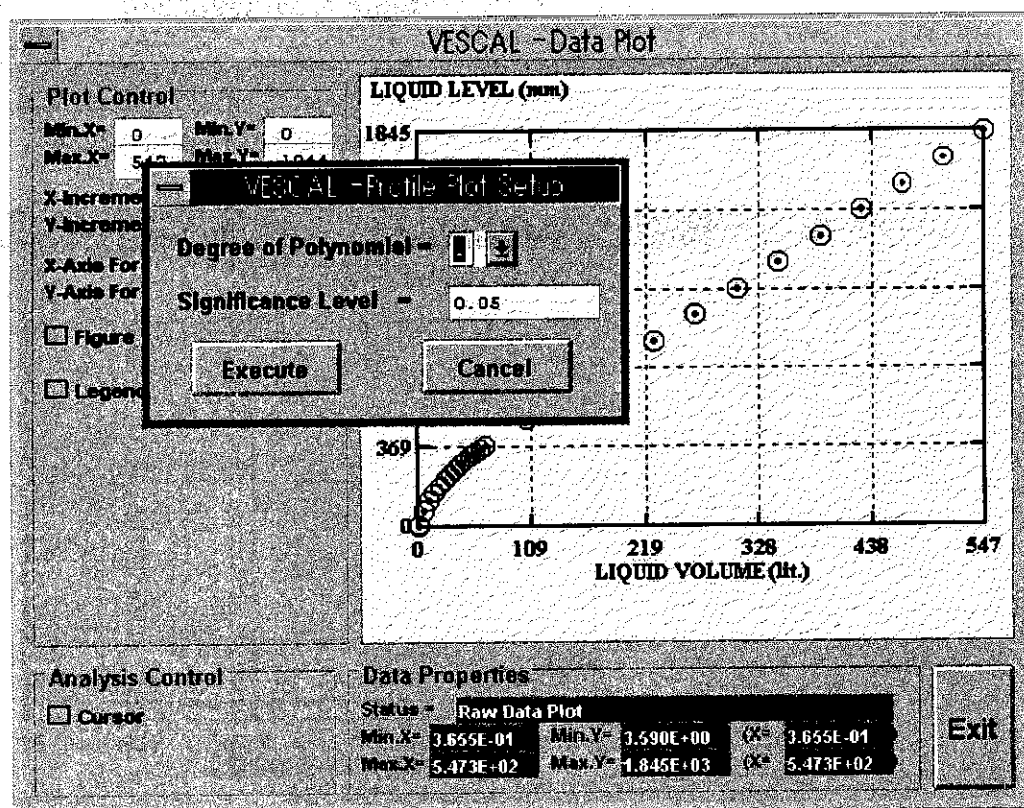


Fig.A.11 Screen view -VESCAL profile plot setup

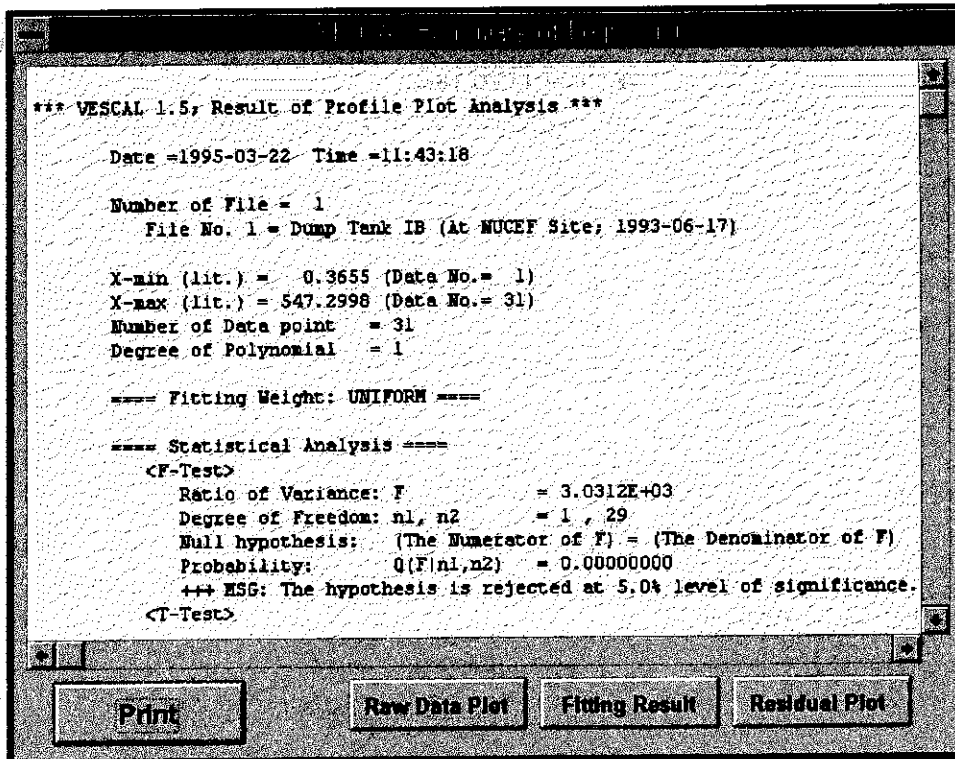


Fig.A.12 Screen view -VESCAL summary results of profile plot analysis

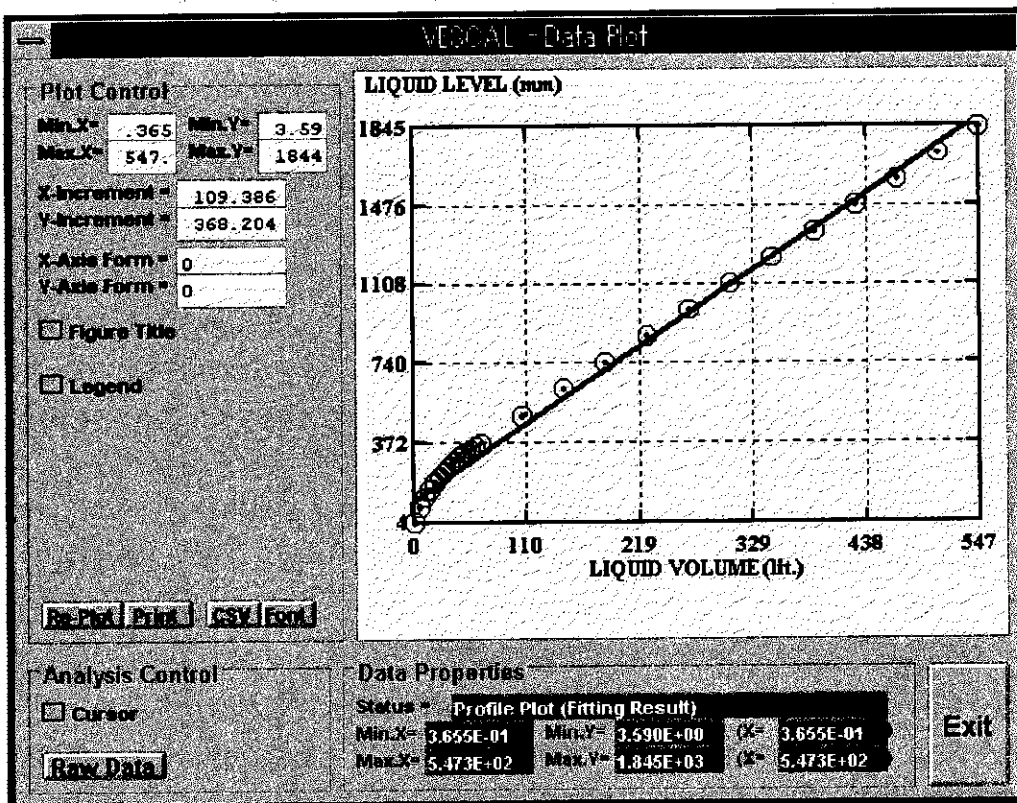


Fig.A.13(1) Screen view -VESCAL profile plot (1)

- fitting result -

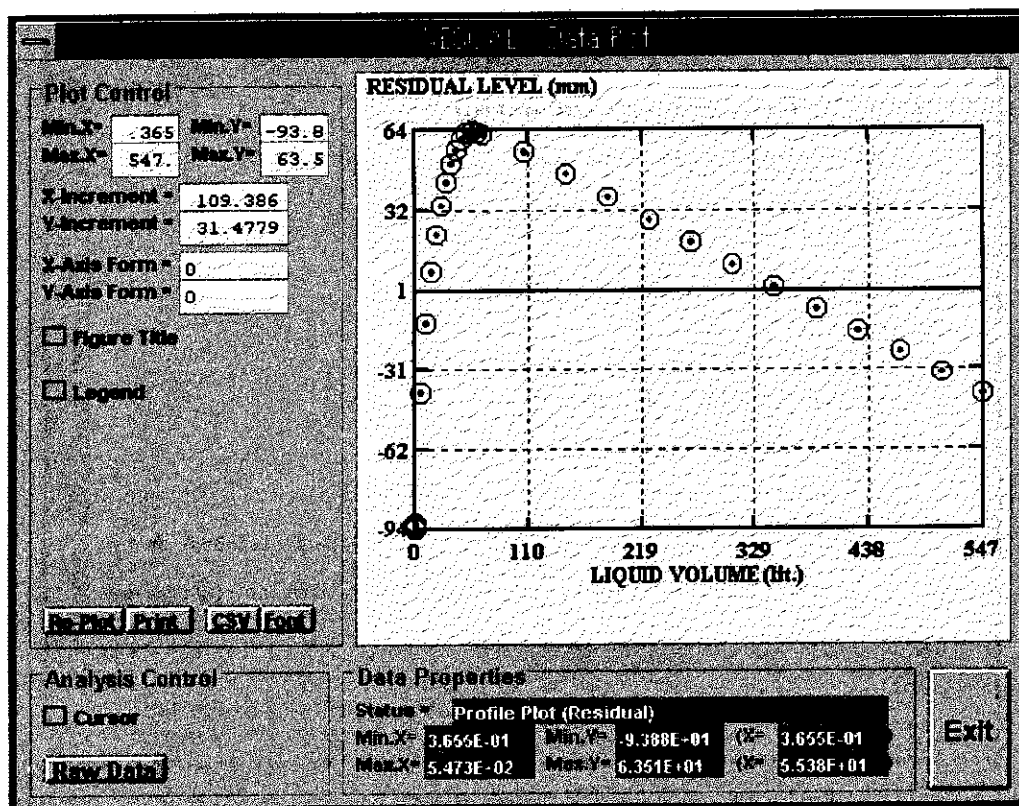


Fig.A.13(2) Screen view -VESCAL profile plot (2)
- residual plot -

(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.A.14 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。なお、独立変数に体積を指定している場合には、多項式次数選択用のドロップダウンリストに "X" という項目が追加される。本文中で説明した非線型モデルを適用する場合には、この "X" を選択する。また、"Select->" ボタンをクリックするとパラメータ γ 、 β に関するチェックボックスが表示され、このチェックボックスをクリアすると、パラメータ γ 、 β を強制的にゼロとする。

領域境界 (X値)、有意水準 α 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、後述する残差プロット時に残差値とあわせて回帰曲線によって計算される従属変数推定値のパーセンテージをプロットできる。

また、独立変数に体積を指定している場合には、フィッティングの重みとして

データ点毎の液位誤差分散の逆数、又はデータ点に依存しない均一な重みのいずれかが選択できる。デフォルトの設定は前者である。なお、独立変数に液位を指定している場合には、常に均一の重み付けとなる。

さらに、独立変数に体積を指定している場合には、"Inverse Estimation" チェックボックスをチェックすると、一次式もしくは平方根関数を指定した領域について逆関数を計算する。

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.A.15 の画面に表示される。この画面は基本的に Fig.A.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関数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.A.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。プリンタへの出力例を Fig.A.16 に示す。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.A.18(1), Fig.A.18(2))。

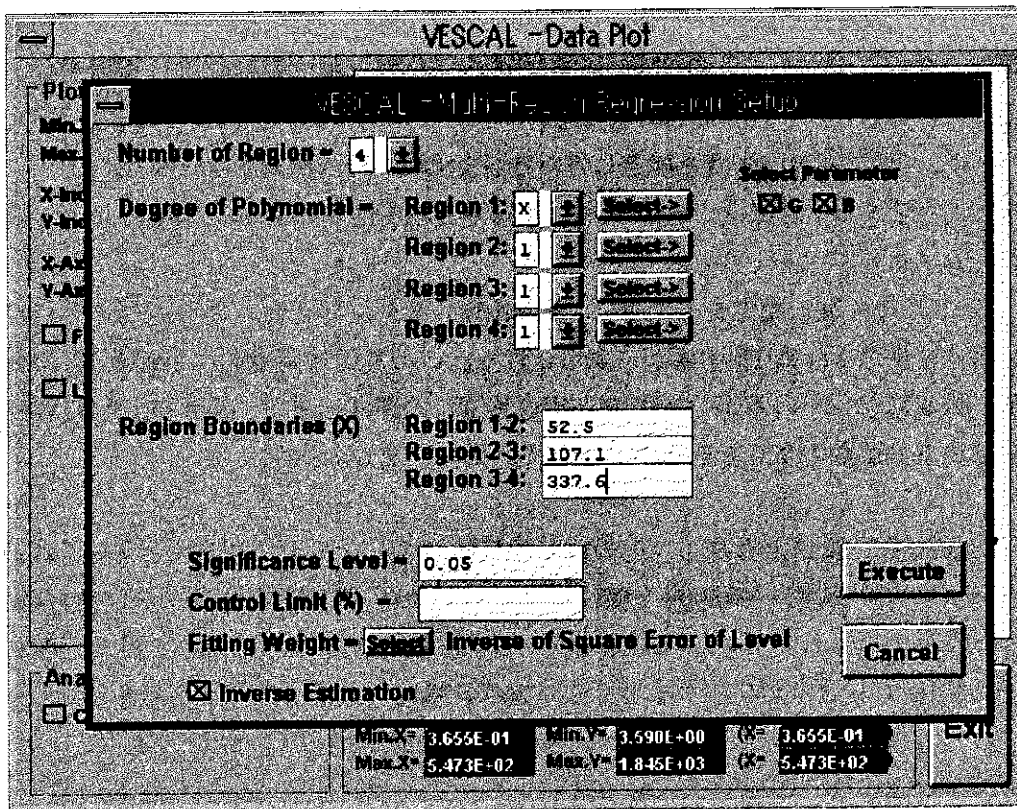


Fig.A.14 Screen view -VESCAL multi-region regression setup

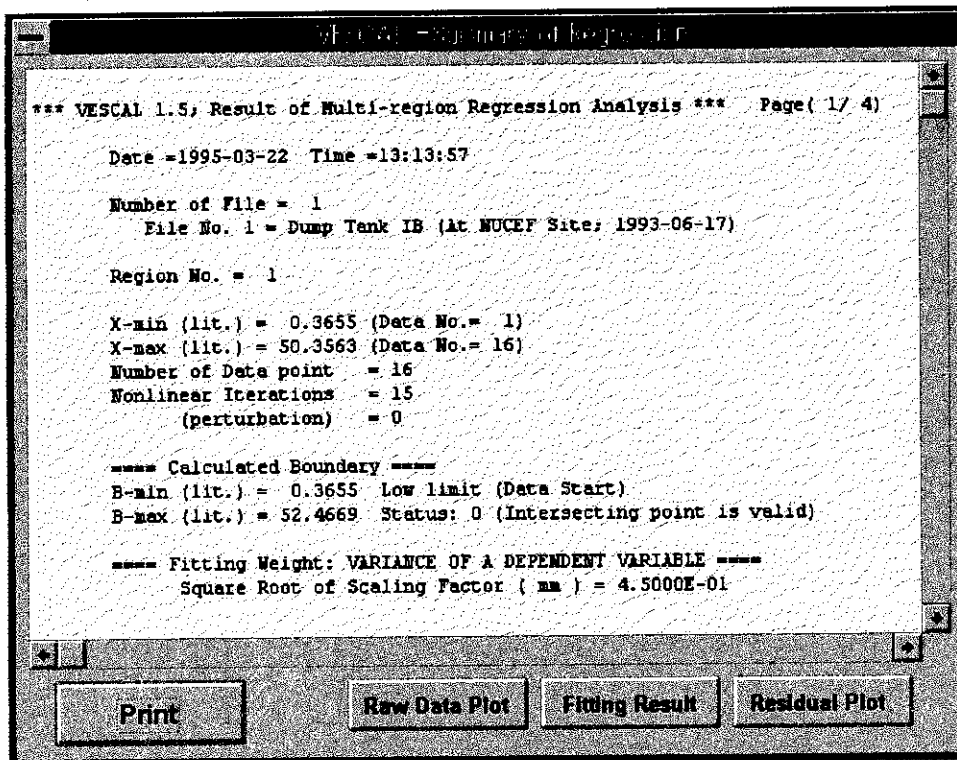


Fig.A.15 Screen view -VESCAL summary results of multi-region regression

*** VESCAL 1.5; Result of Multi-region Regression Analysis *** Page(1/ 4)

Date -1995-03-27 Time -17:20:33

Number of File = 1
File No. 1 = Dump Tank IB (At NUCEF Site; 1993-06-17)

Region No. = 1

X-min (lit.) = 0.3655 (Data No.= 1)
X-max (lit.) = 50.3563 (Data No.= 16)
Number of Data point = 16
Nonlinear Iterations = 15
{perturbation} = 0

==== Calculated Boundary ====

B-min (lit.) = 0.3655 Low limit (Data Start)
B-max (lit.) = 52.4669 Status: 0 (Intersecting point is valid)

==== Fitting Weight: VARIANCE OF A DEPENDENT VARIABLE ====
Square Root of Scaling Factor (mm) = 4.5000E-01

==== Statistical Analysis ====

<Chi-Square-Test>

Chi-Square: C2 = 1.0177E+01
Degree of Freedom: n = 13
Null hypothesis: The $[Y_i - f(X_i)] / \text{Sigma}_i$ is distributed as the Gauss distribution.
Probability: $Q(C2|n)$ = 0.67937195
+++ MSG: The hypothesis is not rejected at 5.0% level of significance. +++

<F-Test>

Ratio of Variance: F = 7.1938E+05
Degree of Freedom: n1, n2 = 2, 13
Null hypothesis: (The Numerator of F) = (The Denominator of F)
Probability: $Q(F|n1, n2)$ = 0.00000000
+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<T- or U-Test>

+++ MSG: Gauss distribution (mean: zero, variance: unity) is selected. +++
Null hypothesis: (True value of parameter) = 0
Probability 1-A(u) is printed below
+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<Standard Deviation (mm)>

With Weight = 3.9816E-01
Without Weight = 3.9816E-01

<Multiple Correlation>

With Weight = 0.99999548
Without Weight = 0.99999548

==== Estimated Parameters ====

Initial Parameters

Gamma (mm) = -7.1401E+01
Beta (mm²) = +4.5965E+03
Alpha (mm²/lit.) = +3.0136E+03

Estimated Parameters

Parameter	Value	1-A(u)
Gamma (mm)	-(7.1109 +/- 0.1133)E+01	0.00000000
Beta (mm ²)	+(4.5510 +/- 0.1737)E+03	0.00000000
Alpha (mm ² /lit.)	+(3.0092 +/- 0.0173)E+03	0.00000000

u(a) = 1.9600E+00

a: Significance Level (%) = 5.0

==== Inverse Estimation ====

Covariance Matrix of Calibration Function: Alpha(a); Beta(b); Gamma(g)

Cov_aa (mm ⁴ /lit. ²)	= +3.0029E+02	Cov_bb (mm ⁴)	= +3.0184E+04
Cov_gg (mm ²)	= +1.2832E+00	Cov_ab (mm ⁴ /lit.)	= +2.8900E+03
Cov_ag (mm ³ /lit.)	= -1.9288E+01	Cov_bg (mm ³)	= -1.9429E+02

Measurement Function = $A \cdot X^2 + B \cdot X + C$; X(mm) = 4.06 - 331.92

A (lit./mm²) = +(3.3231 +/- 0.0191)E-04

B (lit./mm) = +(4.7261 +/- 0.0488)E-02

C (lit.) = +(1.6797 +/- 0.1015)E-01

Covariance Matrix of Measurement Function: A(A); B(B); C(C)

Cov_AA (lit. ² /mm ⁴)	= +3.6621E-12	Cov_BB (lit. ² /mm ²)	= +2.3823E-07
Cov_CC (lit. ²)	= +1.0293E-04	Cov_AB (lit. ² /mm ³)	= -8.9483E-10
Cov_AC (lit. ² /mm ²)	= +7.2452E-09	Cov_BC (lit. ² /mm)	= -2.2915E-06

Fig.A.16 Example of printout of data analysis

*** VESCAL 1.5; Result of Multi-region Regression Analysis *** Page(2/ 4)

Date =1995-03-27 Time =17:20:33

Number of File = 1

File No. 1 = Dump Tank IB (At NUCEF Site; 1993-06-17)

Region No. = 2

X-min (lit.) = 55.3804 (Data No.= 17)

X-max (lit.) = 105.4717 (Data No.= 20)

Number of Data point = 4

Degree of Polynomial = 1

==== Calculated Boundary ====

B-min (lit.) = 52.4669 Status: 0 (Intersecting point is valid)

B-max (lit.) = 107.0874 Status: 0 (Intersecting point is valid)

==== Fitting Weight: VARIANCE OF A DEPENDENT VARIABLE =====

Square Root of Scaling Factor (mm) = 4.5000E-01

==== Statistical Analysis =====

<Chi-Square-Test>

Chi-Square: C2 = 5.4028E-01

Degree of Freedom: n = 2

Null hypothesis: The $[Y_i - f(X_i)] / \text{Sigma}_i$ is distributed as the Gauss distribution.

Probability: Q(C2|n) = 0.76327083

+++ MSG: The hypothesis is not rejected at 5.0% level of significance. +++

<F-Test>

Ratio of Variance: F = 2.7677E+05

Degree of Freedom: n1, n2 = 1, 2

Null hypothesis: (The Numerator of F) = (The Denominator of F)

Probability: Q(F|n1,n2) = 0.00000361

+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<T- or U-Test>

+++ MSG: Gauss distribution (mean: zero, variance: unity) is selected. +++

Null hypothesis: (True value of parameter) = 0

Probability 1-A(u) is printed below

+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<Standard Deviation (mm)>

With Weight = 2.3389E-01

Without Weight = 2.3389E-01

<Multiple Correlation>

With Weight = 0.99999639

Without Weight = 0.99999639

==== Estimated Parameters =====

Degree	Coefficient	1-A(u)
0 (mm)	+(1.6919 +/- 0.0084)E+02	0.00000000
1 (mm /lit.)	+(3.1017 +/- 0.0113)E+00	0.00000000

u(a) = 1.9600E+00

a: Significance Level (%) = 5.0

==== Inverse Estimation =====

Covariance Matrix of Calibration Function: Slope(1); Intercept(0)

Cov_11 (mm²/lit.²) = +1.2867E-04 Cov_00 (mm²) = +7.1152E-01

Cov_10 (mm²/lit.) = -9.2217E-03

Measurement Function = A*X+B; X(mm) = 331.92 - 501.34

A (lit./mm) = +(3.2241 +/- 0.0118)E-01

B (lit.) = -(5.4547 +/- 0.0467)E+01

Covariance Matrix of Measurement Function: A(A); B(B)

Cov_AA (lit.²/mm²) = +1.3903E-06 Cov_BB (lit.²) = +2.1833E-01

Cov_AB (lit.²/mm) = -5.4426E-04

Fig.A.16 Example of printout of data analysis (cont.)

*** VESCAL 1.5; Result of Multi-region Regression Analysis *** Page(3/ 4)

Date =1995-03-27 Time =17:20:33

Number of File = 1
File No. 1 = Dump Tank IB (At NUCEF Site; 1993-06-17)

Region No. = 3

X-min (lit.) = 145.7567 (Data No.= 21)
X-max (lit.) = 306.7767 (Data No.= 25)
Number of Data point = 5
Degree of Polynomial = 1

==== Calculated Boundary ====
B-min (lit.) = 107.0874 Status: 0 (Intersecting point is valid)
B-max (lit.) = 337.5730 Status: 0 (Intersecting point is valid)

==== Fitting Weight: VARIANCE OF A DEPENDENT VARIABLE ====
Square Root of Scaling Factor (mm) = 4.6403E-01

==== Statistical Analysis ====

<Chi-Square-Test>
Chi-Square: C2 = 4.0806E-02
Degree of Freedom: n = 3
Null hypothesis: The $[Y_i - f(X_i)] / \text{Sigma}_i$ is distributed as the Gauss distribution.
Probability: $Q(C2/n)$ = 0.99783439
+++ MSG: The hypothesis is not rejected at 5.0% level of significance. +++

<F-Test>
Ratio of Variance: F = 5.1131E+07
Degree of Freedom: n1, n2 = 1, 3
Null hypothesis: (The Numerator of F) = (The Denominator of F)
Probability: $Q(F/n1, n2)$ = 0.00000000
+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<T- or U-Test>
+++ MSG: Gauss distribution (mean: zero, variance: unity) is selected. +++
Null hypothesis: (True value of parameter) = 0
Probability 1-A(u) is printed below
+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<Standard Deviation (mm)>
With Weight = 5.4118E-02
Without Weight = 5.4367E-02

<Multiple Correlation>
With Weight = 0.99999997
Without Weight = 0.99999997

==== Estimated Parameters ====

Degree	Coefficient	1-A(u)
0 (mm)	+(1.7508 +/- 0.0085)E+02	0.00000000
1 (mm /lit.)	+(3.0467 +/- 0.0037)E+00	0.00000000

u(a) = 1.9600E+00
a: Significance Level (%) = 5.0

==== Inverse Estimation ====

Covariance Matrix of Calibration Function: Slope(1); Intercept(0)
Cov_11 (mm2/lit.2) = +1.3351E-05 Cov_00 (mm2) = +7.2102E-01
Cov_10 (mm2/lit.) = -3.0086E-03
Measurement Function = A*X+B; X(mm) = 501.34 - 1203.56
A (lit./mm) = +(3.2823 +/- 0.0039)E-01
B (lit.) = -(5.7465 +/- 0.0346)E+01
Covariance Matrix of Measurement Function: A(A); B(B)
Cov_AA (lit.2/mm2) = +1.5495E-07 Cov_BB (lit.2) = +1.1968E-01
Cov_AB (lit.2/mm) = -1.3351E-04

Fig.A.16 Example of printout of data analysis (cont.)

```

*** VESCAL 1.5; Result of Multi-region Regression Analysis *** Page( 4/ 4)

Date =1995-03-27 Time =17:20:33

Number of File = 1
File No. 1 = Dump Tank IB (At NUCEF Site; 1993-06-17)

Region No. = 4

X-min (lit.) = 346.8885 (Data No.= 26)
X-max (lit.) = 547.2998 (Data No.= 31)
Number of Data point = 6
Degree of Polynomial = 1

==== Calculated Boundary ====
B-min (lit.) = 337.5730 Status: 0 (Intersecting point is valid)
B-max (lit.) = 547.2998 High limit (Data End)

==== Fitting Weight: VARIANCE OF A DEPENDENT VARIABLE ====
Square Root of Scaling Factor ( mm ) = 4.8679E-01

==== Statistical Analysis ====
<Chi-Square-Test>
Chi-Square: C2 = 1.1688E-01
Degree of Freedom: n = 4
Null hypothesis: The {Y_i-f(X_i)}/Sigma_i is distributed as the Gauss distribution.
Probability: Q(C2|n) = 0.99835756
+++ MSG: The hypothesis is not rejected at 5.0% level of significance. +++

<F-Test>
Ratio of Variance: F = 3.8033E+07
Degree of Freedom: n1, n2 = 1, 4
Null hypothesis: (The Numerator of F) = (The Denominator of F)
Probability: Q(F|n1,n2) = 0.00000000
+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<T- or U-Test>
+++ MSG: Gauss distribution (mean: zero, variance: unity) is selected. +++
Null hypothesis: (True value of parameter) = 0
Probability 1-A(u) is printed below
+++ MSG: The hypothesis is rejected at 5.0% level of significance. +++

<Standard Deviation ( mm )>
With Weight = 8.3211E-02
Without Weight = 8.3194E-02

<Multiple Correlation>
With Weight = 0.99999995
Without Weight = 0.99999995

==== Estimated Parameters ====
Degree Coefficient 1-A(u)
0 ( mm ) +{1.7168 +/- 0.0130}E+02 0.00000000
1 ( mm /lit.) +{3.0567 +/- 0.0029}E+00 0.00000000

u(a) = 1.9600E+00
a: Significance Level (%) = 5.0

==== Inverse Estimation ====
Covariance Matrix of Calibration Function: Slope(1); Intercept(0)
Cov_11 (mm2/lit.2) = +8.4243E-06 Cov_00 (mm2) = +1.7017E+00
Cov_10 (mm2/lit.) = -3.7421E-03
Measurement Function = A*X+B; X(mm) = 1203.56 - 1844.64
A (lit./mm) = +(3.2715 +/- 0.0031)E-01
B (lit.) = -(5.6165 +/- 0.0480)E+01
Covariance Matrix of Measurement Function: A(A); B(B)
Cov_AA (lit.2/mm2) = +9.6493E-08 Cov_BB (lit.2) = +2.2996E-01
Cov_AB (lit.2/mm) = -1.4759E-04

```

Fig.A.16 Example of printout of data analysis (cont.)

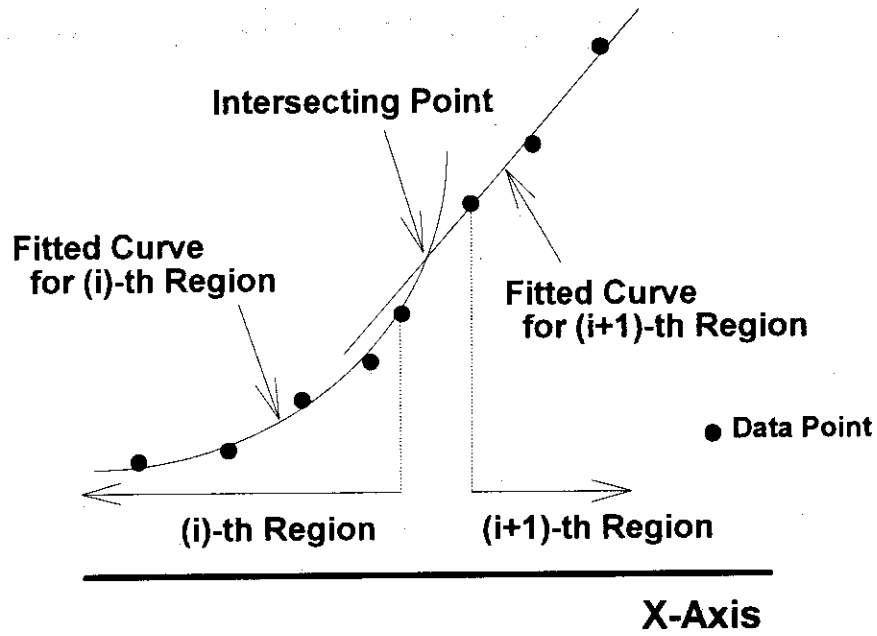


Fig.A.17 Summary of relationship between (i)-th and (i+1)-th region function (Status-0)

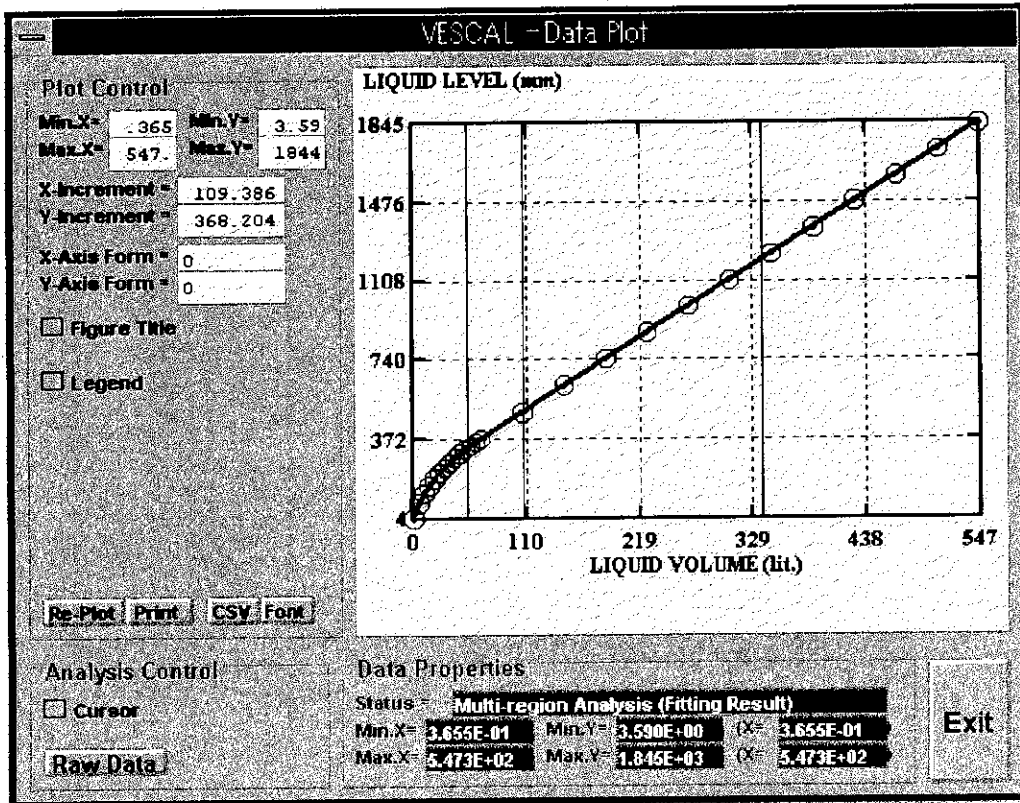


Fig.A.18(1) Screen view -VESCAL multi-region regression analysis (1)
- fitting result -

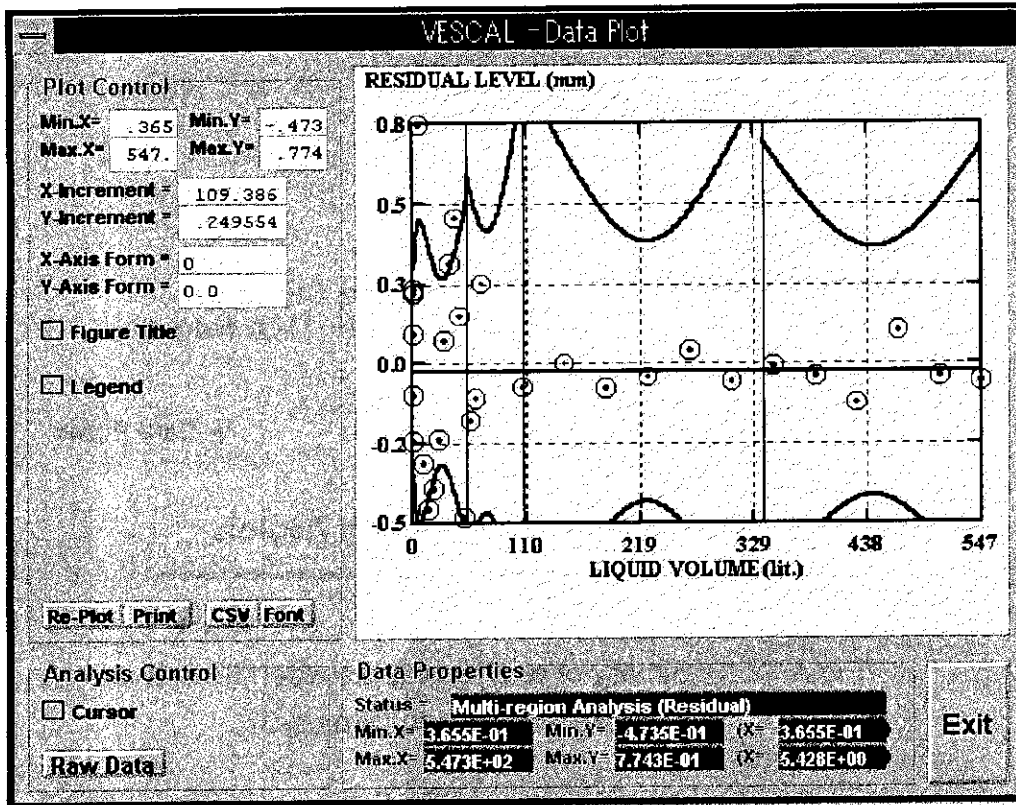


Fig.A.18(2) Screen view -VESCAL multi-region regression analysis (2)
- residual plot -