本資料は，学位論文「計測法・試験法比較のための統計的方法の研究」（三輪哲久著，東京大学，1984）に関して，国会図書館ではデジタル化の対象となっていないため，独自に LaTeX により組版したものである。誤字や数式の間違いは，そのまま再現されている。ただしページ数は，オリジナルの手書き原稿から大幅に縮小されており，ページ番号は一致していない。

本論文の主要な結果は，三輪 (1985) や Miwa (2004) などに発表されている。しかし，細かな数式展開や適用事例などは，学会講演会などの口頭発表にとどまっている部分もある。

三輪哲久 (1985). 線形校正における点推定量の平均２誤差にもとづく比較, 応用統計学, **14**, 83 – 93.

Tetsuhisa Miwa (2004). A normalising transformation of noncentral F variables with large noncentrality parameters, *COMPSTAT 2004 – Proceedings in Computational Statistics*, ed. Antoch, J., Physica-Verlag (ISBN 3-7908-1554-3), 1497 – 1501.

三輪哲久

計測法・試験法比較のための統計的方法の研究

三輪哲久

目 次

第1章　序論

1.1　研究の目的

計測とは，JIS「計測用語」[1] によれば，「何らかの目的をもって，事物を量的にとらえるための方法・手段を考究し，実施し，その結果を用いること。」と定義されている。工業生産の工程において，製品の品質を保証するためには，上記の定義の計測ということを抜きにして考えることはできない。特に，最近では，生産工程において，無人化・自動化が進み，その中の各段階で，信頼のおける計測技術や計測機器が求められている。それに答えて，新しい計測法とか計測機器が開発されている。このような状況において，計測法間の優劣を適切に比較することは重要な問題である。

また，工学研究，あるいは筆者の従事している農業技術研究の分野において，計測は最も基礎となる部分である。

本論文は，計測法とか，計測器がいくつか存在する場合に，それらの間の優劣を定量的に評価し，比較するための統計的方法を与えるものである。

1.2　本論文で取り扱う計測

“事物を量的にとらえるため” に，多くの場合，事物のもつ情報，あるいは信号を，他の取り扱いやすい信号[(注)]に変換することが行なわれる [2]。たとえば，「温度」とか「流量」とかを問題にするとき，温度計や流量計を用いて，「変位」とか「電圧」とかの取り扱いやすい信号に変換するのである。この場合，我々が観測する値は，対象のもつ物理量そのものでは無く，代用特性の値である。

このような計測においては，必ず「校正」という作業が必要となる。すなわち，JIS[1] の定義による「標準器，標準試料などを用いて，計測器の表す値とその真の値との関係を求めること」が必要である。校正は，目盛定めのように，一度行えばよい場合や，ある種の化学分析のように，毎回行わなければならない場合がある。

次に，我々が問題としている対象の測定を行い，先に校正により求めた “計測器の表す値とその真の値との関係” を用いて，その対象の持つ物理量の値を求めることになる。

計測器の表す値，すなわち代用特性の値と，その真の値との関係として，最も簡単なものは線形関係である。そして，実際にも，この線形関係を利用した計測が広く用いられている。それは，取り扱いが容易であることの他に，理論的に直線関係が成り立つような現象が多く存在し，計測に利用できるからである。本論文では，この直線関係が成り立つ計測について論じる。

計測において問題となるのは，ばらつきや偏り等の誤差が伴うことである。誤差は，校正のための計測においても，また，実際の対象の測定においても生じる可能性がある。

本論文で取り扱う計測は，上記の性質を持ったものである。すなわち，校正作業を伴い，また，測定において誤差が入りうるような計測を考える。

このとき，

[(注)] 取り扱いやすい信号とは，「基準との比較が容易なこと」，「伝送が容易なこと」，「増幅または再変換が容易なこと」の条件を満たすものをいう [2]。

(1) 誤差の伴う計測において，未知の値の最適な推定法は何か。

(2) 計測法の良さとは何か。

(3) 複数の計測法が考えられるとき，その優劣の比較を行うには，どのようにすれば良いか。

ということを問題にする。

計測法を比較しようとする試みは，従来からもなされている [3)]。しかし，統計的に正しい取り扱いがなされているとはいえない。

本論文においては，実際の計測に即した統計的モデルを設定する。そのもとで，計測法の良さを定量的に評価し，計測法間の優劣の比較を行うための有効な方法を提案する。

1.3 論文の構成

本論文は序論を含めて 5 章より成る。

第 2 章では，計測における統計的モデルを設定し，計測法の良さを定義する。

校正において，標準器，あるいは標準試料の持つ真の値を x，それを用いたときの計測器の表す値，すなわち代用特性値を y とすると，

$$y = \alpha + \beta x + \epsilon$$

の関係が成り立つものとする。これは，x と y との間に線形関係が成り立つことを想定している。ϵ は確率変数であり，平均 0，分散 σ_c^2 の正規分布に従うと仮定できる場合が多い。

真の値 x_0 が未知の試料についての代用特性の観測値を y_0 とすると，同様の線形関係

$$y_0 = \alpha + \beta x_0 + \epsilon'$$

が成り立つが，誤差 ϵ' の分散 σ_a^2 は，一般には，校正のときの分散 σ_c^2 とは異なる。

第 2 章では，まず，1 つの計測法に着目し，x_0 の推定に関する問題点を明らかにする。次に，推定量の平均 2 乗誤差を評価基準として，有効な推定量を提案する。

第 2 章の後半において，計測法の統計的な性質は，2 つの相対感度 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 のみによって特徴づけられることを示す。

第 3 章では，複数の計測法，あるいは計測器を比較するための実験の様式を述べる。そして，β^2/σ_c^2，および β^2/σ_a^2 を比較する問題は，非心 F 分布の非心度の比較の問題に帰着できることを示す。

第 4 章において，非心 F 分布の非心度に関する統計的推測について述べる。

非心度の比較に関して，現在広く用いられている方法 [3)] は極めて不正確であることを示し，その代案として，次の変数変換にもとづく方法を提案し，その有効性を証明した。すなわち，自由度 (ν_1, ν_2)，非心度 λ の非心 F 分布に従う統計量を F とし，変数変換

$$\tilde{g}(F) = \ln\left(F + \frac{\nu_2}{\nu_1} + \sqrt{F^2 + 2\,\frac{\nu_2}{\nu_1}F}\right)$$

を考える。λ，および ν_2 が大きいとき，この $\tilde{g}(F)$ の分布は，正規分布

$$N\Big(\tilde{g}\Big(1 + \frac{\lambda}{\nu_1}\Big),\ \frac{2}{\nu_2 - 1}\Big)$$

で近似できることを示す。この変換は，λ のかなり広い範囲で分散が安定化し，正規分布への近似も良い。

この変数変換を利用して，2 つの非心度の比較を正確に行う方法を示す。また，3 つ以上の計測法を比較するのに，多重比較を行いたい場合がある。このときにも，上記の変数変換による正規近似が，ただちに有効である。

第 5 章では，土壌抽出溶液中の鉄濃度定量のための 3 つの原子吸光分析装置比較に本論文の方法を適用した例を示す。

第 2 章　未知試料に関する推定法と計測法の優劣の評価

本章では，まず 1 つの計測法に着目し，実際の計測の手順に即した統計的モデルを設定する。次に，未知試料の真の値 x_0 の推定法について検討する。1 つの計測法の下でも，x_0 の推定法としては，いくつか考えられる。本章で，その統計的性質を明らかにする。最後に，計測法の良さを表す尺度を定義する。

2.1　計測の手順

表 2.1 に，原子吸光分析法による，土壌抽出溶液中の鉄 (Fe) の濃度の計測の例を示す。

表 2.1　校正にもとづく計測の例
— 原子吸光法による土壌抽出溶液中の鉄 (Fe) の濃度の計測 —

(1) 標準試料の測定

濃度 x (ppm)	記録紙の読み z (cm)	吸光度 y
0	0.06	0.0006
2	1.98	0.0202
5	5.08	0.0518
10	9.87	0.1007
15	14.75	0.1505
20	19.73	0.2013

吸光度 $y = 0.01020 \cdot z$

(2) 未知試料の測定

土壌の種類	繰り返し	記録紙の読み (cm)	吸光度
宝永石	1	8.84	0.0902
	2	8.58	0.0875
石炭媒	1	14.71	0.1501
	2	14.72	0.1502
非火山灰	1	17.85	0.1821
	2	17.73	0.1809
火山灰	1	12.69	0.1295
	2	12.55	0.1280
蛇紋岩	1	3.94	0.0402
	2	4.06	0.0414
試料ブランク	1	0.28	0.0029
	2	0.23	0.0022

我々が知りたいのは溶液中の Fe 濃度 x であるのに対して，観測される特性値 y は吸光度

$$-\log_{10}(I_t/I_0)$$

である。ここに，I_0 は入力光強度，I_t は透過光強度である。この計測法は，溶液中の Fe 濃度と吸光度との間に直線関係が成り立つという原理を利用している [4)]。

実際の計測は，(1) 校正直線の作成，(2) 濃度未知の試料の測定，の 2 つの手順からなる。

(1) 校正直線の作成

値が既知の標準試料 $x_1, \cdots, x_n$ を用意する。$x_1, \cdots, x_n$ の中には，同じものがあってもよい。各 x_i に対して代用特性値 y_i を測定し，n 組のデータ $(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$ を用いて校正直線を当てはめる。校正直線の求め方については，2.3 節，2.4 節で述べる。

表 2.1 の例では，Fe 濃度が $0, 2, 5, 10, 15, 20$ の 6 種類の標準試料を用意し，吸光度を測定している。ただし，この原子吸光分析装置では，観測値は，記録紙上にペンで書かれた値を読み取ったものである。記録紙上の長さを z (cm) とすると，吸光度 y は

$$y = 0.01020\, z$$

によって求められる。

(2) 未知試料の測定

次に，Fe 濃度が未知の試料について吸光度を測定し，先に求めた校正直線を用いて Fe 濃度を推定する。推定の方法については 2.3 節，および 2.4 節で述べる。

表 2.1 は，5 種類の土壌抽出溶液と，試料ブランク溶液（土壌から Fe を抽出するために用いた試料のみから成る溶液）について吸光度を推定したものである。各土壌について，2 回の繰り返し測定を行っている。

2.2 計測の数学モデル

2.2.1 校正直線作成のための測定

値が既知の標準試料 $x_1, \cdots, x_n$ に対する代用特性の測定値を $y_1, \cdots, y_n$ とする。このとき

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i \quad (i = 1, \cdots, n) \tag{2.2.1}$$

の関係が成り立つものと仮定する。ここに，α，β は未知の定数である。ϵ_i は，互いに独立に，平均が 0，分散が σ_c^2 の分布に従う確率変数であると仮定する。したがって，(2.2.1) 式のモデルは単回帰モデルである。

（注） 標準試料の持つ誤差について [5)]

標準試料を作成するときに誤差が加わる可能性がある。つまり，我々が値を x_i に設定したつもりでも，実際に作成された標準試料は，誤差が加わって

$$\xi_i = x_i + \tau_i \tag{2.2.2}$$

が真の値となるような場合である。このとき代用特性値 y に影響を与えるのは，未知の値 ξ_i であり

$$y_i = \alpha + \beta \xi_i + \epsilon_i \tag{2.2.3}$$

の関係が成り立つ。(2.2.2) 式を (2.2.3) 式に代入すれば

$$y_i = \alpha + \beta x_i + (\beta\tau_i + \epsilon_i) \tag{2.2.4}$$

の関係が得られる。ここで，τ_i についても，互いに独立に，平均 0，分散 σ_τ^2 の分布に従う確率変数であると仮定する。$\beta\tau_i + \epsilon_i$ を新たな誤差とみなせば，これは，互いに独立に，平均 0，分散一定の分布に従う確率変数である。(2.2.4) 式において，x_i は既知の定数であるから，これは，やはり単回帰モデルである。したがって，標準試料に誤差が存在する場合も，単回帰モデルとして取り扱うことができる。

2.2.2 未知試料の測定

真の値 x_0 が未知の試料について行なった k 回の観測値を $y_{01},\cdots,y_{0k}$ とする。このとき

$$y_{0j} = \alpha + \beta x_0 + \epsilon'_j \quad (j = 1,\cdots,k) \tag{2.2.5}$$

の関係が成り立つものとする。ϵ'_j は，互いに独立に，平均 0，分散 σ_a^2 の分布に従う確率変数である。

ここで，分散 σ_a^2 は，標準試料測定のときの分散 σ_c^2 とは，一般に異なると考えられる。たとえば，表 2.1 に示したような化学分析における計測では，サンプリング，試料の調整，対象成分の抽出，機器による測定等のいくつかの手順を経て，測定値が得られる。そして，各段階において，ばらつきの原因となる誤差が入り込む可能性がある。ある計測法について，上記のように何段階かの手順を経て計測が行われる場合，その計測法に固有の手順以後に生じる誤差は，その計測法に伴う誤差であるとみなすべきである。

2.3 古典的推定量の統計的性質

2.3 節，2.4 節で x_0 の推定法について検討する。

現場では，現在，最小 2 乗法により未知パラメータを推定して回帰式を求め，未知試料の測定値に対して，その回帰式を逆に解いて x_0 の値を推定する方法がとられている。この方法による推定量は，古典的推定量とよばれている。

2.3 節においては，まず，この推定法の統計的性質を明らかにする。

2.3.1 最小 2 乗法と最尤推定量

まず，標準試料を用いた (2.2.1) 式による測定データから，未知パラメータ α，β の最小 2 乗推定量 $\hat{\alpha}$，$\hat{\beta}$ を求める。ただし，

$$\begin{aligned}
\bar{x}. &= \sum_{i=1}^{n} x_i/n, \\
\bar{y}. &= \sum y_i/n, \\
\hat{\beta} &= \sum (x_i - \bar{x}.)(y_i - \bar{y}.) \Big/ \sum (x_i - \bar{x}.)^2, \\
\hat{\alpha} &= \bar{y}. - \hat{\beta}\bar{x}.
\end{aligned} \tag{2.3.1}$$

である。

校正直線は，回帰直線

$$\hat{y} = \hat{\alpha} + \hat{\beta}x = \bar{y}. + \hat{\beta}(x - \bar{x}.) \tag{2.3.2}$$

により与えられる。

古典的推定量 $\hat{x}_0$ は，未知試料の測定データ (2.2.5) に対して，(2.3.2) 式を逆に解いて，

$$\hat{x}_0 = \frac{\bar{y}_0. - \hat{\alpha}}{\hat{\beta}} = \bar{x}. + \frac{\bar{y}_0. - \bar{y}.}{\hat{\beta}} \tag{2.3.3}$$

により与えられる。ただし，

$$\bar{y}_0. = \sum_{j=1}^{k} y_{0j}/k \tag{2.3.4}$$

である。

校正のときに測定される代用特性値と，未知試料の測定における代用特性値に，同じ線形変換をほどこした値を用いても結果は同じである。たとえば，表 2.1 に示した例で，記録紙上の読みの値は物理的には意味を持たず，この値を定数倍した吸光度が意味を持つ値である。しかし，もとの記録紙上の読みを代用特性値 y として取り扱っても，x_0 の推定に関しては全く同じ結果を与える。

次に，誤差の分布に正規分布を仮定したときの，x_0 の推定量 (2.3.3) の性質について調べる。

対数尤度関数は

$$\begin{aligned}
&\ell(\alpha, \beta, \sigma_c^2, \sigma_a^2, x_0 \mid y_1, \cdots, y_n, y_{01}, \cdots, y_{0k}) \\
&\qquad = \text{const.} - \frac{n}{2}\ln\sigma_c^2 - \frac{1}{2}\sum(y_i - \alpha - \beta x_i)^2/\sigma_c^2 \\
&\qquad\qquad - \frac{k}{2}\ln\sigma_a^2 - \frac{1}{2}\sum(y_{0j} - \alpha - \beta x_0)^2/\sigma_a^2
\end{aligned} \tag{2.3.5}$$

である。各未知パラメータで偏微分すると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\ell}{\partial\alpha} &= \sum(y_i - \alpha - \beta x_i)/\sigma_c^2 + \sum(y_{0j} - \alpha - \beta x_0)/\sigma_a^2, \\
\frac{\partial\ell}{\partial\beta} &= \sum x_i(y_i - \alpha - \beta x_i)/\sigma_c^2 + \sum x_0(y_{0j} - \alpha - \beta x_0)/\sigma_a^2, \\
\frac{\partial\ell}{\partial\sigma_c^2} &= -\frac{n}{2}\frac{1}{\sigma_c^2} + \frac{1}{2\sigma_c^4}\sum(y_i - \alpha - \beta x_i)^2, \\
\frac{\partial\ell}{\partial\sigma_a^2} &= -\frac{k}{2}\frac{1}{\sigma_a^2} + \frac{1}{2\sigma_a^4}\sum(y_{0j} - \alpha - \beta x_0)^2, \\
\frac{\partial\ell}{\partial x_0} &= \beta\sum(y_{0j} - \alpha - \beta x_0)/\sigma_a^2
\end{aligned} \tag{2.3.6}$$

が得られる。これより，(2.3.3) 式の古典的推定量は最尤推定量であることがわかる。

(2.3.3) 式を変形すると，

$$\hat{x}_0 = \bar{x}. + \frac{(\bar{y}_0. - \bar{y}.)/\beta}{\hat{\beta}/\beta} \tag{2.3.7}$$

が得られる。この式の第 2 項の分子，分母について

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{E}[(\bar{y}_0. - \bar{y}.)/\beta] = x_0 - \bar{x}. \\
&\mathrm{V}[(\bar{y}_0. - \bar{y}.)/\beta] = \frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \\
&\mathrm{E}[\hat{\beta}/\beta] = 1 \\
&\mathrm{V}[\hat{\beta}/\beta] = \frac{1}{\sum(x_i - \bar{x}.)^2}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \\
&\mathrm{Cov}[(\bar{y}_0. - \bar{y}.)/\beta,\ \hat{\beta}/\beta] = 0
\end{aligned} \tag{2.3.8}
$$

が成り立つ。したがって正規性の仮定のもとでは，推定量 $\hat{x}_0$ の分布は，σ_c^2/β^2，σ_a^2/β^2 のみにもとづくことがわかる。

$\hat{x}_0$ の分布は，2 つの正規確率変数の比の分布である。したがって期待値は不確定であり，2 次のモーメントは無限大である。平均 2 乗誤差

$$
\mathrm{E}[(\hat{x}_0 - x_0)^2]
$$

も無限大である [6)]。

2.3.2 条件付分布とモーメント

(1) $\hat{\beta}$ に関する条件

前項で述べたようにモーメントが不確定，あるいは無限大となるのは，どのような $\hat{\beta}$ であっても無条件に採用するからである。しかし，実際の計測においては，$\hat{\beta}$ に何らかの条件が加わるのが普通である。ここでは，次のような実際的な条件を考える。すなわち，β に関する帰無仮説

$$
H_0\colon \beta = 0 \tag{2.3.9}
$$

が，検定の結果，棄却された場合にのみ (2.3.2) 式の校正直線を採用することにする。

検定のために，$\hat{\beta}$ とは独立に σ_c^2 の推定量 $\hat{\sigma}_c^2$ が利用でき，$\nu\hat{\sigma}_c^2/\sigma_c^2$ が自由度 ν の χ^2 分布に従うものとする。

通常は，回帰残差

$$
S_e = \sum(y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}x_i)^2 \tag{2.3.10}
$$

を利用して

$$
\hat{\sigma}_c^2 = \frac{S_e}{n-2} \tag{2.3.11}
$$

によって，σ_c^2 を推定する。このとき $\nu = n-2$ である。さらに，ある標準試料（値は未知でも良い）について，n' 回の繰り返し測定 $y'_1, \cdots, y'_{n'}$ を行ったとすれば，偏差平方和

$$
\begin{aligned}
S'_e &= \sum(y'_i - \bar{y}'.)^2, \\
\bar{y}'. &= \sum_{i=1}^{n'} y'_i/n'
\end{aligned} \tag{2.3.12}
$$

も σ_c^2 の推定に利用することができて，推定の精度を高めることができる。その意味で，ここでは一般に，$\hat{\sigma}_c^2$ の自由度を ν として議論を進める。

検定は，t 統計量

$$t = \frac{\hat{\beta}}{\hat{\sigma}_c/\sqrt{\sum(x_i - \bar{x}.)^2}} \tag{2.3.13}$$

を考え，

$$|t| > t_0 \tag{2.3.14}$$

すなわち

$$t^2 > t_0^2 \tag{2.3.15}$$

のときに帰無仮説 (2.3.9) を棄却するものとする。すなわち，(2.3.15) の条件が成り立つときのみ，(2.3.2) 式の校正直線を採用するものとする。ここで，t_0 は既知の正の定数であり，検定の水準によって決まる。

したがって，以下で $t^2 > t_0^2$ という条件付で $\hat{x}_0$ の分布を考えることにする。

(2) 条件付分布

$$u = \hat{\beta}/\beta, \tag{2.3.16}$$

$$v = (\bar{y}_0. - \bar{y}.)/\beta \tag{2.3.17}$$

とおくと，(2.3.7) 式は

$$\hat{x}_0 = \bar{x}. + \frac{v}{u} \tag{2.3.18}$$

と書きあらわすことができる。u，v，$\hat{\sigma}_c^2$ は互いに独立であり，次の確率分布に従う。

$$u \sim N\Big(1,\ \frac{1}{S_{xx}}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\Big), \tag{2.3.19}$$

$$v \sim N\Big(x_0 - \bar{x}.,\ \frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\Big), \tag{2.3.20}$$

$$\frac{\nu\,\hat{\sigma}_c^2}{\sigma_c^2} \sim \chi^2(\nu) \tag{2.3.21}$$

ただし，

$$S_{xx} = \sum(x_i - \bar{x}.)^2 \tag{2.3.22}$$

である。t 統計量の 2 乗は

$$\begin{aligned} t^2 &= \frac{\hat{\beta}^2}{\hat{\sigma}_c^2/S_{xx}} = \frac{(\hat{\beta}/\beta)^2}{\dfrac{\nu\,\hat{\sigma}_c^2}{\sigma_c^2}\dfrac{\sigma_c^2}{\nu\,S_{xx}\,\beta^2}} \\ &= \frac{\nu\,\eta^2\,u^2}{\chi^2} \end{aligned} \tag{2.3.23}$$

と書き表すことができる。ここで，

$$\chi^2 = \frac{\nu\,\hat{\sigma}_c^2}{\sigma_c^2}, \tag{2.3.24}$$

$$\eta^2 = S_{xx}\,\frac{\beta^2}{\sigma_c^2} = \sum (x_i - \bar{x}.)^2\,\frac{\beta^2}{\sigma_c^2} \tag{2.3.25}$$

とおいた。

次に変数を $(u, \hat{\sigma}_c^2)$ から (u, t^2) に変換する。(2.3.23) 式より

$$du\,d\chi^2 = \nu\,\eta^2\,u^2\,\frac{1}{t^4}\,du\,dt^2 \tag{2.3.26}$$

であるから，u と t^2 の同時密度関数を $f(u, t^2)$ とすると，

$$\begin{aligned} &f(u,t^2)\,du\,dt^2 \\ &= \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-\frac{\eta^2\,(u-1)^2}{2}} \\ &\quad \times \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})}\Bigl(\frac{\nu\,\eta^2\,u^2}{2t^2}\Bigr)^{\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{\nu\,\eta^2\,u^2}{2t^2}}\,\frac{\nu\,\eta^2\,u^2}{2t^4}\,du\,dt^2 \end{aligned} \tag{2.3.27}$$

が得られる。v は，(u, t^2) とは独立である。(2.3.20) 式，(2.3.27) 式より，u，v，t^2 の同時分布も，未知パラメータとしては，σ_c^2/β^2，σ_a^2/β^2 のみしか含まないことがわかる。したがって，$t^2 > t_0^2$ という条件付きの $\hat{x}_0$ の分布も σ_c^2/β^2，σ_a^2/β^2 のみにしか依存しない。

(3) 条件付期待値と分散

$t^2 > t_0^2$ という条件付きでの $\hat{x}_0$ の期待値と分散を考える。v と (u, t^2) とは独立であるから，

$$\begin{aligned} \mathrm{E}[\hat{x}_0 \mid t^2 > t_0^2] &= \mathrm{E}\Bigl[\bar{x}. + \frac{v}{u}\ \Big|\ t^2 > t_0^2\Bigr] \\ &= \bar{x}. + \mathrm{E}[v]\cdot\mathrm{E}\Bigl[\frac{1}{u}\ \Big|\ t^2 > t_0^2\Bigr], \end{aligned} \tag{2.3.28}$$

$$\mathrm{E}\Bigl[\frac{v^2}{u^2}\ \Big|\ t^2 > t_0^2\Bigr] = \mathrm{E}[v^2]\cdot\mathrm{E}\Bigl[\frac{1}{u^2}\ \Big|\ t^2 > t_0^2\Bigr] \tag{2.3.29}$$

が成り立つ。したがって，$\hat{x}_0$ の期待値，分散を求めるには，$1/u$，$1/u^2$ の条件付期待値が求まればよい。そのために，次の積分

$$\begin{aligned} &\iint_{t^2 > t_0^2} \frac{1}{u^i} f(u,t^2)\,du\,dt^2 \\ &\quad = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-\frac{\eta^2\,(u-1)^2}{2}}\,\frac{1}{u^i}\,du \\ &\qquad \times \int_{t_0^2}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})}\Bigl(\frac{\nu\,\eta^2\,u^2}{2t^2}\Bigr)^{\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{\nu\,\eta^2\,u^2}{2t^2}}\,\frac{\nu\,\eta^2\,u^2}{2t^4}\,dt^2 \\ &\quad = \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-\frac{\eta^2\,(u-1)^2}{2}}\,\frac{1}{u^i}\,\gamma\Bigl(\frac{\nu}{2},\ c'\eta^2\,u^2\Bigr)\,du \\ &\qquad (i = 0, 1, 2, \cdots) \end{aligned} \tag{2.3.30}$$

を考える。ここで,

$$\gamma\Big(\frac{\nu}{2}, z\Big) = \int_0^z p^{\frac{\nu}{2}-1}\, e^{-p}\, dp, \tag{2.3.31}$$

$$c' = \nu/2t_0^2 \tag{2.3.32}$$

である。さらに

$$\varphi_i(u) = \frac{1}{u^i}\,\gamma\Big(\frac{\nu}{2},\ c'\eta^2\, u^2\Big) \tag{2.3.33}$$

とおけば,(2.3.30) 式の積分は

$$\frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2\,(u-1)^2}{2}} \cdot \varphi_i(u)\, du \tag{2.3.34}$$

と書き表すことができる。

(2.3.33) 式より

$$\lim_{u\to 0+} \varphi_i(u) = \begin{cases} 0 & i < \nu, \\ 2\,(\sqrt{c'}\,\eta)^\nu/i & i = \nu, \\ \infty & i > \nu, \end{cases} \tag{2.3.35}$$

$$\lim_{u\to 0-} \varphi_i(u) = (-1)^i \lim_{u\to 0+} \varphi_i(u), \tag{2.3.36}$$

$$\lim_{u\to \pm\infty} \varphi_i(u) = 0 \tag{2.3.37}$$

が成り立つ。したがって,$i \leqq \nu$ のときには (2.3.34) 式の積分が存在する。すなわち,$t^2 > t_0^2$ という条件の下では,$\hat{x}_0$ の ν 次までのモーメントが存在する。

次に,$\hat{x}_0$ の条件付期待値と分散について,η^2 が大きいときの近似値を求める。

$u > 0$ とすると

$$\begin{aligned}\varphi_i^{(k)}(u) =& \frac{2}{\nu}\,(\sqrt{c'}\,\eta)^\nu\, \frac{(\nu-i)!}{(\nu-i-k)!}\, e^{-c'\eta^2u^2} \\ &\cdot \big\{u^{\nu-i-k} + O(u^{\nu-i-k+2})\big\},\end{aligned} \tag{2.3.38}$$

$$\varphi_i^{(k)}(-u) = (-1)^{i+k}\,\varphi_i^{(k)}(u) \tag{2.3.39}$$

が成り立つ。したがって

$$\begin{aligned}&\lim_{u\to 0} \varphi_i^{(k)}(u) = 0, \quad k \leqq \nu - i - 1 \\ &\begin{cases} \displaystyle\lim_{u\to 0+} \varphi_i^{(\nu-i)}(u) = \frac{2}{\nu}\,(\sqrt{c'}\,\eta)^\nu\,(\nu-i)!, \\ \displaystyle\lim_{u\to 0-} \varphi_i^{(\nu-i)}(u) = (-1)^\nu\,\frac{2}{\nu}\,(\sqrt{c'}\,\eta)^\nu\,(\nu-i)! \end{cases}\end{aligned} \tag{2.3.40}$$

となる。したがって,$\varphi_i(u)$ の $\nu - i - 1$ 次までの導関数は全区間で存在する。また,$u = 1$ においては,$\nu - i$ 次の微分係数が存在する。したがって,$\varphi_i(u)$ は,$u = 1$ のまわりに,次式のように展開することができる [7)]。

$$\begin{aligned}\varphi_i(u) =& \varphi_i(1) + \varphi_i'(1)(u-1) + \frac{\varphi_i''(1)}{2!}(u-1)^2 + \cdots \\ &+ \frac{\varphi_i^{(\nu-i)}(1)}{(\nu-i)!}\,(u-1)^{\nu-i} + o\Big((u-1)^{\nu-i}\Big)\end{aligned} \tag{2.3.41}$$

一方，標準正規分布の k 次のモーメントを μ_k とすると

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2 (u-1)^2}{2}} \cdot (u-1)^k \, du = \frac{\mu_k}{\eta^k} \tag{2.3.42}$$

である。したがって，(2.3.41) 式を (2.3.34) 式に代入して

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2 (u-1)^2}{2}} \cdot \varphi_i(u) \, du \\ &= \sum_{k=0}^{\nu-i} \frac{\varphi_i^{(k)}(1)}{k!} \frac{\mu_k}{\eta^k} + o\Big(\frac{1}{\eta^{\nu-i}}\Big) \end{aligned} \tag{2.3.43}$$

が得られる。

標準正規分布のモーメントは

$$\begin{aligned} &\mu_{2m} = (2m-1)!! \\ &\mu_{2m+1} = 0 \end{aligned} \tag{2.3.44}$$

である。一方，$\varphi_i^{(k)}(1)$ を具体的に計算すると

$$\begin{aligned} \varphi_0(1) &= \Gamma\Big(\frac{\nu}{2}\Big) - e^{-c'\eta^2}\, (c'\eta^2)^{\frac{\nu}{2}-1} \Big\{1 + O\Big(\frac{1}{\eta^2}\Big)\Big\}, \\ \varphi_0^{(k)}(1) &= (-1)^{k-1}\, 2^k\, e^{-c'\eta^2}\, (c'\eta^2)^{\frac{\nu}{2}+k-1} \Big\{1 + O\Big(\frac{1}{\eta^2}\Big)\Big\}, \\ \varphi_i^{(k)}(1) &= (-1)^k \frac{(i-k+1)!}{(i-1)!}\, \Gamma\Big(\frac{\nu}{2}\Big) \\ &\qquad + (-1)^{k-1}\, 2^k\, e^{-c'\eta^2}\, (c'\eta^2)^{\frac{\nu}{2}+k-1} \Big\{1 + O\Big(\frac{1}{\eta^2}\Big)\Big\} \\ &\qquad (i = 1, 2, \cdots) \end{aligned} \tag{2.3.45}$$

が得られる。校正直線を求める測定においては，$\eta^2 = \sum (x_i - \bar{x}.)^2\, \beta^2 / \sigma_c^2$ は非常に大きな値をとる。したがって，(2.3.40) 式において，$e^{-c'\eta^2}$ を含む項は無視することができる。

(2.3.45) 式を (2.3.43) 式に代入すると，

$$\begin{aligned} &\iint_{t^2 > t_0^2} f(u, t^2)\, du\, dt^2 \\ &\qquad = \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2 (u-1)^2}{2}} \cdot \varphi_0(u)\, du \sim 1, \end{aligned} \tag{2.3.46}$$

$$\begin{aligned} &\iint_{t^2 > t_0^2} \frac{1}{u} f(u, t^2)\, du\, dt^2 \\ &\qquad = \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2 (u-1)^2}{2}} \cdot \varphi_1(u)\, du \\ &\qquad \sim 1 + \frac{1}{\eta^2} + \frac{3}{\eta^4} + \frac{15}{\eta^6} + \cdots, \end{aligned} \tag{2.3.47}$$

$$\begin{aligned} &\iint_{t^2 > t_0^2} \frac{1}{u^2} f(u, t^2)\, du\, dt^2 \\ &\qquad = \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2 (u-1)^2}{2}} \cdot \varphi_2(u)\, du \\ &\qquad \sim 1 + \frac{3}{\eta^2} + \frac{15}{\eta^4} + \frac{105}{\eta^6} + \cdots \end{aligned} \tag{2.3.48}$$

が得られる。したがって，

$$\mathrm{E}\Big[\frac{1}{u}\mid t^2>t_0^2\Big]\sim 1+\frac{1}{\eta^2}+\frac{3}{\eta^4}+\frac{15}{\eta^6}+\cdots, \tag{2.3.49}$$

$$\mathrm{E}\Big[\frac{1}{u^2}\mid t^2>t_0^2\Big]\sim 1+\frac{3}{\eta^2}+\frac{15}{\eta^4}+\frac{105}{\eta^6}+\cdots \tag{2.3.50}$$

である。

$\hat{x}_0$ の条件付期待値は (2.3.28) 式より

$$\begin{aligned}\mathrm{E}[\hat{x}_0\mid t^2>t_0^2]&=\bar{x}.+\mathrm{E}[v]\,\mathrm{E}\Big[\frac{1}{u}\mid t^2>t_0^2\Big]\\&=\bar{x}.+(x_0-\bar{x}.)\Big(1+\frac{1}{\eta^2}+\frac{3}{\eta^4}+\frac{15}{\eta^6}+\cdots\Big)\\&=x_0+(x_0-\bar{x}.)\Big(\frac{1}{\eta^2}+\frac{3}{\eta^4}+\frac{15}{\eta^6}+\cdots\Big)\end{aligned} \tag{2.3.51}$$

となる。この式の第 2 項は，偏りを示している。偏りは，$\eta^2=\sum(x_i-\bar{x}.)^2\,\beta^2/\sigma_c^2$ のみに依存している。すなわち，校正直線作成時のパラメータのみに依存しており，β^2/σ_c^2 の値が大きい程，偏りは小さくなる。

$\hat{x}_0$ の条件付分散は

$$\begin{aligned}&\mathrm{V}[\hat{x}_0\mid t^2>t_0^2]\\&\quad=\mathrm{E}\Big[\frac{v^2}{u^2}\mid t^2>t_0^2\Big]-\mathrm{E}\Big[\frac{v}{u}\mid t^2>t_0^2\Big]^2\\&\quad=\Big(\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2}+\frac{1}{n}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\Big)\Big\{1+\frac{3}{\eta^2}+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\Big\}\\&\qquad+\frac{(x_0-\bar{x}.)^2}{S_{xx}}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\Big\{1+\frac{8}{\eta^2}+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\Big\}\end{aligned} \tag{2.3.52}$$

である。分散は，σ_a^2/β^2，σ_c^2/β^2 の両方の値に依存し，これらの値が小さい程，分散も小さくなる。(2.3.52) 式からわかるように，分散の値は，標準資料の数 n や，未知試料の測定の繰り返し数 k にも依存する。2.2 節で述べたように，σ_a^2 は，σ_c^2 よりも大きいのが普通である。そして，繰り返し数 k があまり多くとれない場合には，$\hat{x}_0$ の分散は，主に σ_a^2/β^2 に左右される。

平均 2 乗誤差は

$$\begin{aligned}&\mathrm{MSE}[\hat{x}_0\mid t^2>t_0^2]=\mathrm{E}[(\hat{x}_0-x_0)^2\mid t^2>t_0^2]\\&\quad=\mathrm{V}[\hat{x}_0\mid t^2>t_0^2]+(\mathrm{E}[\hat{x}_0\mid t^2>t_0^2]-x_0)^2\\&\quad=\Big(\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2}+\frac{1}{n}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\Big)\Big\{1+\frac{3}{\eta^2}+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\Big\}\\&\qquad+\frac{(x_0-\bar{x}.)^2}{S_{xx}}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\Big\{1+\frac{9}{\eta^2}+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\Big\}\end{aligned} \tag{2.3.53}$$

で与えられる。

2.3.3　最尤推定量の偏り修正

古典的推定量，すなわち最尤推定量 $\hat{x}_0$ は，(2.3.51) 式に示されるような偏りを持つ。その第 1 項は

$$(x_0 - \bar{x}.)\frac{1}{\eta^2} = (x_0 - \bar{x}.)\,\frac{\sigma_c^2}{\beta^2\,S_{xx}} \tag{2.3.54}$$

である。(2.3.54) 式の未知パラメータに推定量を代入し，$\hat{x}_0$ から差し引いた

$$\begin{aligned}\hat{x}_0' &= \hat{x}_0 - (\hat{x}_0 - \bar{x}.)\,\frac{\hat{\sigma}_c^2}{\hat{\beta}^2\,S_{xx}}\\ &= \bar{x}. + \left(1 - \frac{\hat{\sigma}_c^2}{\hat{\beta}^2\,S_{xx}}\right)(\hat{x}_0 - \bar{x}.)\\ &= \bar{x}. + \frac{1}{\hat{\beta}}\left(1 - \frac{\hat{\sigma}_c^2}{\hat{\beta}^2\,S_{xx}}\right)(\bar{y}_0. - \bar{y}.)\end{aligned} \tag{2.3.55}$$

を考える。この推定量は，$\hat{\beta}$ の 3 乗が分母に現われているので，2.3.2(3) 項の議論により，$\nu \geqq 6$ のときに，$t^2 > t_0^2$ という条件つきで，分散，平均 2 乗誤差をもつ。

期待値，分散は

$$\mathrm{E}[\hat{x}_0' \mid t^2 > t_0^2]$$
$$= x_0 - (x_0 - \bar{x}.)\left\{\frac{3}{\eta^4} + O\!\left(\frac{1}{\eta^6}\right)\right\}, \tag{2.3.56}$$

$$\mathrm{V}[\hat{x}_0' \mid t^2 > t_0^2]$$
$$\begin{aligned}&= \left(\frac{1}{k}\,\frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n}\,\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\right)\left\{1 + \frac{1}{\eta^2} + O\!\left(\frac{1}{\eta^4}\right)\right\}\\ &\quad + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}}\,\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\left\{1 + \frac{1}{\eta^2}\left(2 + \frac{2}{\nu}\right) + O\!\left(\frac{1}{\eta^4}\right)\right\}\end{aligned} \tag{2.3.57}$$

で与えられる。平均 2 乗誤差も $1/\eta^2$ の項までは分散と同じである。

$1/\eta^2$ の項まで考えると，任意の x_0 に対して，偏りを修正した推定量 $\hat{x}_0'$ の方が，古典的推定量 $\hat{x}_0$ よりも平均 2 乗誤差が小さい。

Naszódi は，

$$x_0^* = \hat{x}_0 - (x_0^* - x_0)\,\frac{\sigma_c^2}{\hat{\beta}^2\,S_{xx}} \tag{2.3.58}$$

を x_0^* に関して解くことによって，

$$x_0^* = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + \dfrac{\sigma_c^2}{S_{xx}}}\,(\bar{y}_0. - \bar{y}.) \tag{2.3.59}$$

を提案している [8)]。

一般には，σ_c^2 は未知であるから，その推定量を代入すると

$$\tilde{x}_0^* = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + \dfrac{\hat{\sigma}_c^2}{S_{xx}}}\,(\bar{y}_0. - \bar{y}.) \tag{2.3.60}$$

が得られる。これは，後の 2.4 節で述べる一般化逆回帰推定量の特別な場合であり，その統計的性質については 2.4 節で述べる。

2.4 一般化逆回帰推定量の統計的性質

前節で，未知試料の真の値 x_0 の推定に関して，古典的推定量とよばれる通常用いられている推定量について，その特徴を明らかにした。

本節では，Krutchkoff による逆回帰推定量を拡張した一般化逆回帰推定量について，その統計的性質を検討する。

2.4.1 逆回帰推定量と一般化逆回帰推定量

2.2 節と同じモデルを考える。

Krutchkoff は

$$\tilde{x}'_0 = \bar{x}. + \tilde{\delta}' \, (\bar{y}_0. - \bar{y}.) \tag{2.4.1}$$

による逆回帰推定量を提案している [9]。ここに

$$\tilde{\delta}' = \frac{\sum(x_i - \bar{x}.)(y_i - \bar{y}.)}{\sum(y_i - \bar{y}.)^2} \tag{2.4.2}$$

である。

この推定量は，(2.2.1) 式のデータに対して，x の y に対する回帰式を形式に計算することによって求めることができる。

また，Halperin[10]，Dunsmore[11]，Hoadley[12] は，Bayes 推定量として，(2.4.1) 式の逆回帰推定量を導いている。

一方

$$\sum(y_i - \bar{y}.)^2 = \hat{\beta}^2 \, S_{xx} + S_e \tag{2.4.3}$$

の関係を利用すれば，

$$\begin{aligned}\tilde{\delta}' &= \frac{\sum(x_i - \bar{x}.)(y_i - \bar{y}.)}{\sum(y_i - \bar{y}.)^2} = \frac{\hat{\beta}\, S_{xx}}{\hat{\beta}^2 \, S_{xx} + S_e} \\ &= \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + \dfrac{S_e}{S_{xx}}}\end{aligned} \tag{2.4.4}$$

と書き表すことができる。ただし

$$\begin{aligned} S_{xx} &= \sum(x_i - \bar{x}.)^2, \\ S_e &= \sum(y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}x_i)^2, \\ \hat{\beta} &= \sum(x_i - \bar{x}.)(y_i - \bar{y}.)/S_{xx} \end{aligned} \tag{2.4.5}$$

である。

さらに，Halperin[10] は，(2.4.1) 式を拡張した一般化 Krutchkoff 推定量

$$\tilde{x}''_0 = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + \dfrac{1}{M}\,\dfrac{S_e}{S_{xx}}} \, (\bar{y}_0. - \bar{y}.) \tag{2.4.6}$$

を考えている。

Zaman は，

$$\hat{\beta} \sim N(\beta,\ \sigma_\beta^2) \tag{2.4.7}$$

のときに，$\delta = 1/\beta$ の推定量として，

$$\tilde{\delta} = \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + c\,\sigma_\beta^2} \tag{2.4.8}$$

を導いている [13)]。ここに，c は正の定数である。σ_β^2 に推定量 $\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]$ を代入することによって

$$\tilde{x}_0 = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + c\,\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]}\,(\bar{y}_0. - \bar{y}.) \tag{2.4.9}$$

が得られる。$\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]$ として

$$\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}] = \frac{1}{S_{xx}}\,\frac{S_e}{n-2} \tag{2.4.10}$$

を用いると，(2.4.9) 式は

$$\tilde{x}_0 = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + \dfrac{c}{n-2}\,\dfrac{S_e}{S_{xx}}}\,(\bar{y}_0. - \bar{y}.) \tag{2.4.11}$$

となり，(2.4.6) 式の一般化 Krutchkoff 推定量と同じものになる。

また，(2.3.60) 式の Naszódi の推定量は，(2.4.9) 式において，$c = 1$ とおいたものである。

以下では，(2.4.9) 式の推定量を一般化逆回帰推定量とよび，その性質を検討する。

なお，引用文献 8)∼12) においては，いずれも $\sigma_c^2 = \sigma_a^2$ の場合を取り扱っているが，2.2 節で述べたように，現実には，$\sigma_c^2 = \sigma_a^2$ とは限らない。したがって，以下でも $\sigma_c^2 = \sigma_a^2$ を仮定しないで議論を進める。

2.4.2　一般化逆回帰推定量のモーメント

(1) モーメントの存在性

ここでは，一般化逆回帰推定量

$$\tilde{x}_0 = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + c\,\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]}\,(\bar{y}_0. - \bar{y}.), \tag{2.4.12}$$

$$\frac{\nu\,S_{xx}\,\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]}{\sigma_c^2} \sim \chi^2(\nu) \tag{2.4.13}$$

を考える。

逆回帰推定量 ($\nu = c = n-2$) では，$n \geqq 4$ のときに，分散が存在する [6)]。

さらに，(2.4.12) 式の $\tilde{x}_0$ は，ν 次のモーメントまで存在することが次のようにして示される。

まず，(2.4.12) 式は

$$\tilde{x}_0 = \bar{x}. + \frac{\dfrac{\hat{\beta}}{\beta}}{\left(\dfrac{\hat{\beta}}{\beta}\right)^2 + \dfrac{\sigma_c^2}{\beta^2 S_{xx}} \dfrac{c}{\nu} \chi^2} \cdot \frac{1}{\beta} (\bar{y}_0. - \bar{y}.)$$

$$= \bar{x}. + \frac{u}{u^2 + \dfrac{c}{\nu\,\eta^2} \chi^2} \cdot v \tag{2.4.14}$$

と書き表すことができる。ただし

$$\begin{aligned} &\eta^2 = S_{xx}\,\beta^2/\sigma_c^2, \\ &u = \frac{\hat{\beta}}{\beta} \sim N\Big(1,\ \frac{1}{\eta^2}\Big), \\ &v = \frac{1}{\beta}(\bar{y}_0. - \bar{y}.) \sim N\Big(x_0 - \bar{x}.,\ \frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\Big), \\ &\chi^2 \sim \chi^2(\nu) \end{aligned} \tag{2.4.15}$$

で，u，v，χ^2 は互いに独立である。(2.4.14) 式，(2.4.15) 式より，一般化逆回帰推定量の分布も，傾きの 2 乗と分散との比 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 のみに依存することがわかる。

$\tilde{x}_0$ のモーメントの存在を調べるには,

$$\frac{u}{u^2 + \dfrac{c}{\nu\,\eta^2}\chi^2} \tag{2.4.16}$$

について検討すればよい。第 i 次のモーメントは

$$\mathrm{E}\left[\left(\frac{u}{u^2 + \dfrac{c}{\nu\,\eta^2}\chi^2}\right)^i\right] = \int_{-\infty}^{\infty} du \int_0^{\infty} d\chi^2 \left(\frac{u}{u^2 + \dfrac{c}{\nu\,\eta^2}\chi^2}\right)^i$$

$$\times \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2 (u-1)^2}{2}} \cdot \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})\, 2^{\frac{\nu}{2}}} \left(\chi^2\right)^{\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{\chi^2}{2}} \tag{2.4.17}$$

と書き表すことができる。変数を

$$\begin{cases} u = r\sin\theta \\ \dfrac{c}{\nu\,\eta^2}\chi^2 = r^2\,\cos^2\theta \end{cases} \tag{2.4.18}$$

に変換すると，(2.4.19) 式は

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_0^{\infty} dr\, 2 \cdot \frac{\nu\,\eta^2}{c}\, r^2\,\cos\theta \Big(\frac{r\,\sin\theta}{r^2}\Big)^i$$

$$\times \frac{\eta}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{\eta^2 (r\sin\theta - 1)^2}{2}} \cdot \frac{1}{\Gamma(\frac{\nu}{2})\, 2^{\frac{\nu}{2}}} \left(\frac{\nu\,\eta^2}{c}\, r^2 \cos^2\theta\right)^{\frac{\nu}{2}-1} \cdot e^{-\frac{\nu\,\eta^2 r^2 \cos^2\theta}{2c}}$$

$$= \text{const.} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta\, \cos^{\nu-1}\theta \cdot \sin^i\theta \int_0^{\infty} dr\, r^{\nu-i} \cdot e^{-\frac{\eta^2}{2}\left\{(r\sin\theta-1)^2 + \frac{\nu\, r^2}{c}\cos^2\theta\right\}} \tag{2.4.19}$$

となり，この積分は

$$\nu - i \geqq 0 \tag{2.4.20}$$

のときに有限の値をもつ。したがって，一般化逆回帰推定量 $\tilde{x}_0$ は，ν 次までのモーメントを持つ。

(2) 期待値，分散と平均 2 乗誤差

逆回帰推定量 (2.4.1) については，Shukura[14)]，Lwin ら [15)] が，期待値，分散の値を $1/n$ のオーダーまで求めている。ここでは，(2.4.12) 式の一般化逆回帰推定量について，$\eta^2 = S_{xx}\,\beta^2/\sigma_c^2$ が大きいところでの近似を求める。実際の計測においては，標準試料の測定回数 n については，常に大きいとは限らない。一方，η^2 の値は，非常に大きい。したがって，本節でも，2.3 節と同様に，$1/\eta^2$ で展開する。

まず，

$$\begin{aligned}
&\mathrm{E}\left[\frac{u}{u^2 + \dfrac{c}{\eta^2}\,\dfrac{\chi^2}{\nu}}\right] \\
&\qquad = 1 - \frac{c-1}{\eta^2} + \frac{1}{\eta^4}\left(c^2 - 6c + \frac{2c^2}{\nu} + 3\right) + O\Big(\frac{1}{\eta^6}\Big),
\end{aligned} \tag{2.4.21}$$

$$\begin{aligned}
&\mathrm{E}\left[\left(\frac{u}{u^2 + \dfrac{c}{\eta^2}\,\dfrac{\chi^2}{\nu}}\right)^2\right] \\
&\qquad = 1 - \frac{2c-3}{\eta^2} + \frac{1}{\eta^4}\left(3c^2 - 20c + \frac{6c^2}{\nu} + 15\right) + O\Big(\frac{1}{\eta^6}\Big),
\end{aligned} \tag{2.4.22}$$

が成り立つ。したがって，

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}[\tilde{x}_0] &= \bar{x}. + \mathrm{E}[v]\cdot\mathrm{E}\left[\frac{u}{u^2 + \dfrac{c}{\eta^2}\,\dfrac{\chi^2}{\nu}}\right] \\
&= \bar{x}. + (x_0 - \bar{x}.)\Big\{1 + \frac{1-c}{\eta^2} + \frac{1}{\eta^4}\left(c^2 - 6c + \frac{2c^2}{\nu} + 3\right) + O\Big(\frac{1}{\eta^6}\Big)\Big\} \\
&= x_0 + (x_0 - \bar{x}.)\Big\{\frac{1-c}{\eta^2} + \frac{1}{\eta^4}\left(c^2 - 6c + \frac{2c^2}{\nu} + 3\right) + O\Big(\frac{1}{\eta^6}\Big)\Big\}
\end{aligned} \tag{2.4.23}$$

が得られる。偏りの第 1 項は

$$(x_0 - \bar{x}.)\,\frac{1-c}{\eta^2} \tag{2.4.24}$$

であり，逆回帰推定量では，$c = n - 2$ であるから

$$-(x_0 - \bar{x}.)\,\frac{n-3}{\eta^2} \tag{2.4.25}$$

となる。$n \to \infty$ においてこの値は

$$-(x_0 - \bar{x}.)\,\frac{\sigma_c^2}{\beta^2\,s_{xx}} \tag{2.4.26}$$

に収束する。ただし，

$$s_{xx} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} S_{xx} < \infty \tag{2.4.27}$$

である。したがって，逆回帰推定量は，標準試料の測定を無限回繰り返したとしても，偏りは 0 とはならない [14)]。

次に，分散は

$$\begin{aligned}
\mathrm{V}[\tilde{x}_0] &= \mathrm{E}[v^2]\cdot \mathrm{E}\left[\left(\frac{u}{u^2+\dfrac{c}{\eta^2}\dfrac{\chi^2}{\nu}}\right)^2\right] - \mathrm{E}[v]^2\cdot \mathrm{E}\left[\frac{u}{u^2+\dfrac{c}{\eta^2}\dfrac{\chi^2}{\nu}}\right]^2 \\
&= \left(\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2}+\frac{1}{n}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\right)+\left\{1+\frac{3-2c}{\eta^2}+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\right\} \\
&\quad + \frac{(x_0-\bar{x}.)^2}{S_{xx}}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\left\{1+\frac{1}{\eta^2}\Big(\frac{2c^2}{\nu}-6c+8\Big)+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\right\}
\end{aligned} \tag{2.4.28}$$

となる。また，平均 2 乗誤差は

$$\begin{aligned}
\mathrm{MSE}[\tilde{x}_0] &= \mathrm{E}[(\tilde{x}_0 - x_0)^2] \\
&= \left(\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2}+\frac{1}{n}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\right)\left\{1+\frac{3-2c}{\eta^2}+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\right\} \\
&\quad + \frac{(x_0-\bar{x}.)^2}{S_{xx}}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\left\{1+\frac{1}{\eta^2}\Big(\frac{2c^2}{\nu}+c^2-8c+9\Big)+O\Big(\frac{1}{\eta^4}\Big)\right\}
\end{aligned} \tag{2.4.29}$$

で与えられる。

2.5　推定量に関する比較

2.3 節，2.4 節で，古典的推定量，および一般化逆回帰推定量の統計的性質を明らかにし，期待値，分散，平均 2 乗誤差を表す式を導いた。

本節において，各推定量の違いを検討し，一般化逆回帰推定量における係数 c の選択に関して，指針を与える。

2.5.1　偏り，分散，平均 2 乗誤差の比較

(1) 偏り

(2.3.3) 式の古典的推定量 $\hat{x}_0$，(2.4.12) 式の一般化逆回帰推定量 $\tilde{x}_0$ の偏りの 2 乗を，それぞれ，$\mathrm{B}[\hat{x}_0]^2$，$\mathrm{B}[\tilde{x}_0]^2$ と表すと，(2.3.51) 式，(2.4.23) 式より，

$$\mathrm{B}[\hat{x}_0]^2 - \mathrm{B}[\tilde{x}_0]^2 = (x_0-\bar{x}.)^2\left\{\frac{c\,(2-c)}{\eta^4}+\Big(\frac{1}{\eta^6}\Big)\right\} \tag{2.5.1}$$

となる。

したがって

$$0 < c < 2 \tag{2.5.2}$$

であれば，一般化逆回帰推定量の方が偏りが小さくなる。特に

$$c = 1 \tag{2.5.3}$$

とすると，(2.4.23) 式より，

$$\mathrm{B}[\tilde{x}_0]^2 = (x_0 - \bar{x}.)^2 \Big\{ \frac{1}{\eta^8} \Big(\frac{2}{\nu} - 2 \Big)^2 + \Big(\frac{1}{\eta^{10}} \Big) \Big\} \tag{2.5.4}$$

となり，偏りは，ほとんど無視できる。(2.4.29) 式に $c = 1$ を代入すると，平均 2 乗誤差は

$$\begin{aligned} &\Big(\frac{1}{k} \frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Big) \Big\{ 1 + \frac{1}{\eta^2} + O\Big(\frac{1}{\eta^4} \Big) \Big\} \\ &\qquad + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Big\{ 1 + \frac{1}{\eta^2} \Big(2 + \frac{2}{\nu} \Big) + O\Big(\frac{1}{\eta^4} \Big) \Big\} \end{aligned} \tag{2.5.5}$$

である。この値は，(2.3.55) 式による偏りを修正した最尤推定量 $\hat{x}_0'$ と，$1/\eta^2$ の項までは同じ平均 2 乗誤差を持つ。

Krutchkoff の逆回帰推定量では，$c = n - 2$ である。分散が存在する $n \geqq 4$ の場合には，(2.5.2) 式の条件は満足されない。したがって，逆回帰推定量の方が，古典的推定量よりも偏りが大きい。

(2) 分散

分散に関しては，(2.3.52) 式，(2.4.28) 式より

$$\begin{aligned} &\mathrm{V}[\hat{x}_0] - \mathrm{V}[\tilde{x}_0] \\ &\quad = \Big(\frac{1}{k} \frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Big) \Big\{ \frac{2c}{\eta^2} + O\Big(\frac{1}{\eta^4} \Big) \Big\} \\ &\qquad + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Big\{ \frac{1}{\eta^2} 2c \Big(3 - \frac{c}{\nu} \Big) + O\Big(\frac{1}{\eta^4} \Big) \Big\} \end{aligned} \tag{2.5.6}$$

である。したがって

$$0 < c < 3\nu + \frac{\nu}{\Delta(x_0)} \Big(\frac{1}{k} \frac{\sigma_a^2}{\sigma_c^2} + \frac{1}{n} \Big) \tag{2.5.7}$$

であれば，一般化逆回帰推定量の方が分散が小さい。ただし

$$\Delta(x_0) = \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}} \tag{2.5.8}$$

と置いた。逆回帰推定量では，$c = \nu = n - 2$ であり，(2.5.7) 式は満足されるので，逆回帰推定量の方が，古典的推定量よりも分散は小さい。

(3) 平均 2 乗誤差

平均 2 乗誤差については，(2.3.53) 式，(2.4.29) 式より

$$\begin{aligned} &\mathrm{MSE}[\hat{x}_0] - \mathrm{MSE}[\tilde{x}_0] \\ &\quad = \Big(\frac{1}{k} \frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Big) \Big\{ \frac{2c}{\eta^2} + O\Big(\frac{1}{\eta^4} \Big) \Big\} \\ &\qquad + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Big\{ \frac{1}{\eta^2} c \Big(8 - c\Big(1 + \frac{2}{\nu} \Big) \Big) + O\Big(\frac{1}{\eta^4} \Big) \Big\} \end{aligned} \tag{2.5.9}$$

が成り立つ。したがって

$$0 < c < \frac{2}{1+\dfrac{2}{\nu}}\left\{4 + \frac{1}{\Delta(x_0)}\left(\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\sigma_c^2} + \frac{1}{n}\right)\right\} \tag{2.5.10}$$

であれば，一般化逆回帰推定量の方が，古典的推定量よりも平均 2 乗誤差が小さくなる。特に

$$0 < c < \frac{8}{1+\dfrac{2}{\nu}} \tag{2.5.11}$$

とすれば，任意の x_0 に対して，一般化逆回帰推定量の方が，古典的推定量よりも平均 2 乗誤差が小さい。

最小の平均 2 乗誤差は

$$c = \frac{1}{1+\dfrac{2}{\nu}}\left\{4 + \frac{1}{\Delta(x_0)}\left(\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\sigma_c^2} + \frac{1}{n}\right)\right\} \tag{2.5.12}$$

のときに得られる。しかし，この中には，未知の値 σ_a^2/σ_c^2，$\Delta(x_0)$ が含まれているので，このままでは利用することはできない。

x_0 に関して，範囲が限られていて，

$$\Delta_{\max} = \max_{x_0}\Delta(x_0) = \max_{x_0}\frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}} \tag{2.5.13}$$

が有限の値を取り，分散に関して

$$\sigma_a^2 \geqq \sigma_c^2 \tag{2.5.14}$$

と仮定できるときには,

$$c_* = \frac{1}{1+\dfrac{2}{\nu}}\left\{4 + \frac{1}{\Delta_{\max}}\left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n}\right)\right\} \tag{2.5.15}$$

を使えば良い。さらに，x_0 に関する情報が全く無いときには,

$$c'_* = \frac{4}{1+\dfrac{2}{\nu}} \tag{2.5.16}$$

を使えば良い。

Krutchkoff の逆回帰推定量 $(c = \nu = n - 2)$ では，$n \leqq 8$ であれば，(2.5.11) 式が満足される。すなわち，$n \leqq 8$ のときには，逆回帰推定量は，任意の x_0 に対して，古典的推定量よりも平均 2 乗誤差は小さくなる。$n > 8$ のときには

$$(x_0 - \bar{x}.)^2 < \frac{2S_{xx}}{n-8}\left(\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\sigma_c^2} + \frac{1}{n}\right) \tag{2.5.17}$$

において，古典的推定量よりも平均 2 乗誤差が小さくなる。

2.5.2 推定量に関する考察

逆回帰推定量と古典的推定量に関しては，現在も論争が続けられている。
逆回帰推定量に対する主な反論は,

(i) 誤ったモデルにもとづくものである。

(ii) 漸近的に偏りがある（(2.4.26) 式参照)。

である。一方，擁護する立場は

(iii) $n \geqq 4$ のときに分散が存在する。

(iv) x_0 のある範囲内で平均 2 乗誤差が小さい。

ということである。
これに対して，古典的推定量に対する最大の反論は,

(v) モーメントが存在しない

ということであり，支持する立場からは

(vi) 最尤推定量である。

(vii) $\hat{\beta}$ に関して，何らかの打ち切りを行えば，漸近的に不偏である。

があげられている。
一般化逆回帰推定量に関しては，その性質はほとんど調べられていない。
Krutchkoff の逆回帰推定量は，(2.5.17) 式で表わされる x_0 の有限の範囲において，平均 2 乗誤差が，古典的推定量よりも小さくなる。しかし，この推定量は漸近的に $(n \to \infty)$ 偏りがあり，さらに $k \to \infty$ のときに，一致推定量にならない。すなわち，$n \to \infty$，$k \to \infty$ のときに

$$x_0 + (x_0 - \bar{x}.) \frac{1}{1 + \dfrac{\sigma_c^2}{\beta^2\, s_{xx}}} \tag{2.5.18}$$

に確率収束する。ただし,

$$s_{xx} = \lim_{n\to\infty} \frac{S_{xx}}{n} \tag{2.5.19}$$

である。また，(2.5.17) 式の範囲も，$n \to \infty$，$k \to \infty$ のときに 0 に近づく。したがって，逆回帰推定量は，n，および k が大きいときには有効とはいえない。
2.3 節で述べたように，現場においては，現在のところ，ほとんど古典的推定量 $\hat{x}_0$ が用いられている。そして，2.3.2 節で証明したように，$\hat{\beta}$ に関する極めて自然な条件付き分布を考えれば，$\hat{x}_0$ の期待値，分散が存在する。したがって，上記 (v) の反論は問題ない。
しかし，古典的推定量の偏りを修正した推定量 (2.3.55) 式，あるいは (2.3.60) 式の方が，偏り，分散ともに，古典的推定量よりも小さくなる。
さらに，(2.5.15) 式による係数 c_* を用いた一般化逆回帰推定量は，$1/\eta^2$ のオーダーまで考える限り，平均 2 乗誤差に関して最良の推定量を与える。しかも，この推定量は，$n \to \infty$,

$k \to \infty$ のときに，一致推定量となる。したがって，計測における x_0 の推定では，(2.5.15) 式の係数 c_* を用いた一般化逆回帰推定量が有効であるといえる。

ただし，いずれの推定量も，平均 2 乗誤差の第 1 項は共通で，

$$\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \left\{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}}\right\}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \tag{2.5.20}$$

である。推定量による違いは，$1/\eta^2$ に関する高次の項に現れてくる。したがって，η^2 が大きくなるにつれて，推定量による違いは小さくなる。

2.6　計測法の良さの尺度

2.3 節，2.4 節で示したように，x_0 に関する推定量の性質は，2 つの量 σ_c^2/β^2，σ_a^2/β^2 のみに依存する。いずれの推定量を用いる場合でも，平均 2 乗誤差に主に効くのは

$$\frac{1}{k}\frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \left\{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}}\right\}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \tag{2.6.1}$$

の項であり，σ_c^2/β^2，σ_a^2/β^2 の値が小さいほど精度がよくなる。したがって，その逆数をとって

$$\beta^2/\sigma_c^2,$$
$$\beta^2/\sigma_a^2$$

が計測法の良さを示しているといえる。

この，回帰係数の 2 乗と分散との比は，SN 比とよばれることがある [3)]。しかし，β^2 と σ_c^2 （あるいは σ_a^2 ）とは単位の異なる量であり，その比を SN 比とよぶのは適当ではない。

回帰係数 β は感度とよばれており，分散との相対的な値という意味で，ここでは，β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 を相対感度とよぶことにする。

相対感度 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 の単位は，測定対象 x の単位の逆数の 2 乗であり，代用特性値 y の単位は含まない。したがって，代用特性の単位が異なるような計測法間の比較が可能である。

2.7　モデルからのずれに対する検討

前節までは，誤差の分布に関して，

(1) 正規性

(2) 独立性

(3) 等分散性

を仮定して，議論を進めてきた。本節では，以上の仮定がくずれた場合に，推定量に与える影響について検討する。

2.7.1　非正規性の影響

まず，非正規性の影響について検討する。

モデルは今までと同様に，標準試料 $x_1, \cdots, x_n$ に対する測定データを

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i \quad (i = 1, \cdots, n) \tag{2.7.1}$$

とし，未知試料に対する測定データを

$$y_{0j} = \alpha + \beta x_0 + \epsilon'_j \quad (j = 1, \cdots, k) \tag{2.7.2}$$

とする。ただし，確率変数 ϵ_i は，互いに独立で，4 次までのモーメントを持つものとする。

$$\begin{aligned} \mathrm{E}[\epsilon_i] &= 0, \\ \mathrm{V}[\epsilon_i] &= \sigma_c^2, \\ \mathrm{E}[\epsilon_i^3] &= \mu_3, \\ \mathrm{E}[\epsilon_i^4] &= \mu_4 \end{aligned} \tag{2.7.3}$$

さらに，歪度，尖度を γ_3，γ_4 と表す。

$$\begin{aligned} \gamma_3 &= \mu_3/\sigma_c^3, \\ \gamma_4 &= \mu_4/\sigma_c^4 - 3 \end{aligned} \tag{2.7.4}$$

また，確率変数 ϵ'_j については,

$$\begin{aligned} \mathrm{E}[\epsilon'_j] &= 0, \\ \mathrm{V}[\epsilon'_j] &= \sigma_a^2 \end{aligned} \tag{2.7.5}$$

とする。

推定量の分布とか，モーメントの有無とかは，誤差分布の正確な形に依存するので，その知識無しに，推定量の性質を論ずることは困難である。したがって，ここでは，一般化逆回帰推定量

$$\tilde{x}_0 = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + c\,\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]}\,(\bar{y}_0. - \bar{y}.) \tag{2.7.6}$$

について，形式的に Taylor 展開して，モーメントを計算する。ただし，$\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]$ としては,

$$\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}] = \frac{\hat{\sigma}_c^2}{S_{xx}} = \frac{1}{S_{xx}}\,\frac{S_e}{n-2} \tag{2.7.7}$$

を用いるものとする。(2.7.6) 式を

$$\begin{aligned} \tilde{x}_0 &= \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}/\beta}{\left(\dfrac{\hat{\beta}}{\beta}\right)^2 + \dfrac{c}{\beta^2 S_{xx}}\,\dfrac{S_e}{n-2}}\,\frac{\bar{y}_0. - \bar{y}.}{\beta} \\ &= \bar{x}. + \frac{u}{u^2 + cz}\,v, \end{aligned} \tag{2.7.8}$$

$$
\begin{aligned}
u &= \hat{\beta}/\beta, \\
z &= \frac{1}{\beta^2 S_{xx}} \frac{S_e}{n-2}, \\
v &= (\bar{y}_0. - \bar{y}.)/\beta
\end{aligned}
$$

と書きなおして，u，z の期待値のまわりで Taylor 展開して項別に期待値をとると，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{E}[\tilde{x}_0] = x_0 + (x_0 - \bar{x}.)\Bigl\{ & \frac{1-c}{\eta^2} - \frac{1}{\eta^3} \frac{\xi_3 \gamma_3}{\sqrt{n}} \left(1 + \frac{3c}{n-2}\right) \\
& + \frac{1}{\eta^4} \left(\frac{2c^2}{n-2} + c^2 - 6c + 3 + A\gamma_4\right) + O\Bigl(\frac{1}{\eta^5}\Bigr)\Bigr\} \\
- \frac{\sqrt{S_{xx}}}{\sqrt{n}} \Bigl\{ & \frac{1-c}{\eta^3} \frac{\gamma_3}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\eta^4}\Bigl(1 + \frac{3c}{n-2}\Bigr) \frac{\xi_3 \gamma_4}{n} + O\Bigl(\frac{1}{\eta^5}\Bigr)\Bigr\}
\end{aligned} \tag{2.7.9}
$$

が得られる。ただし

$$
\begin{aligned}
\xi_3 &= \sqrt{n} \sum (x_i - \bar{x}.)^3 / \bigl\{\sum (x_i - \bar{x}.)^2\bigr\}^{3/2}, \\
\xi_4 &= n \sum (x_i - \bar{x}.)^4 / \bigl\{\sum (x_i - \bar{x}.)^2\bigr\}^{2},
\end{aligned} \tag{2.7.10}
$$

$$
\begin{aligned}
A =& \frac{c^2}{(n-2)^2} \left\{(n-3)\Bigl(1 - \frac{1}{n}\Bigr) + \frac{\xi_4}{n}\right\} \\
& - \frac{6c}{n-2} \left(1 - \frac{1}{n} - \frac{\xi_4}{n}\right) + \frac{\xi_4}{n}
\end{aligned} \tag{2.7.11}
$$

である。

平均 2 乗誤差は，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{MSE}[\tilde{x}_0] &= \mathrm{E}[(\tilde{x}_0 - x_0)^2] \\
&= \frac{1}{k} \frac{\sigma_a^2}{\beta^2} \left\{1 + \frac{3-2c}{\eta^2} + O\Bigl(\frac{1}{\eta^3}\Bigr)\right\} \\
&\quad + \frac{1}{n} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \left\{1 + \frac{3-2c}{\eta^2} \left(1 + \frac{\gamma_4}{n}\right) + O\Bigl(\frac{1}{\eta^3}\Bigr)\right\} \\
&\quad + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Bigl\{1 - \frac{2}{\eta} \frac{\xi_3 \gamma_3}{\sqrt{n}} \left(1 + \frac{c}{n-2}\right) \\
&\qquad\qquad + \frac{1}{\eta^2} \left(\frac{2c^2}{n-2} + c^2 - 8c + 9 + B\gamma_4\right) + O\Bigl(\frac{1}{\eta^3}\Bigr)\Bigr\} \\
&\quad - \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{\sqrt{n S_{xx}}} \frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \Bigl\{\frac{2-c}{\eta} \frac{\gamma_3}{\sqrt{n}} \\
&\qquad\qquad - \frac{1}{\eta^2} \frac{\xi_3 \gamma_4}{n} \left(3 + \frac{5c}{n-2}\right) + O\Bigl(\frac{1}{\eta^3}\Bigr)\Bigr\},
\end{aligned} \tag{2.7.12}
$$

$$
\begin{aligned}
B =& \frac{c^2}{(n-2)^2} \left\{(n-3)\Bigl(1 - \frac{1}{n}\Bigr) + \frac{\xi_4}{n}\right\} \\
& - \frac{8c}{(n-2)} \left(1 - \frac{1}{n} - \frac{\xi_4}{n}\right) + \frac{3\xi_4}{n}
\end{aligned} \tag{2.7.13}
$$

となる。

歪度 γ_3 に関しては $1/\sqrt{n}$，尖度 γ_4 に関しては $1/n$ のオーダーで平均 2 乗誤差に影響を与えている。したがって，n が非常に大きい場合には，歪度，尖度の影響は小さくなり，前節までの議論が適用できる。

n が大きく無く，歪度 γ_3 の影響が無視できない場合には,

$$\xi_3 = 0, \tag{2.7.14}$$

$$c = 2 \tag{2.7.15}$$

と選ぶことによって，平均 2 乗誤差から $1/\eta$ の項を消すことができる。

平均 2 乗誤差の最初の項は，正規性を仮定した場合と同じ

$$\frac{1}{k}\,\frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \left\{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}}\right\}\frac{\sigma_c^2}{\beta^2} \tag{2.7.16}$$

である。したがって，やはり β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 の大きい計測法が望ましいといえる。

2.7.2　相関の影響

誤差の分布が，相関を持つ正規分布である場合を考える。すなわち，(2.7.1) 式，(2.7.2) 式において，一様な相関

$$\begin{aligned} \mathrm{Cov}[\epsilon_i,\ \epsilon_{i'}] &= \sigma_c^2\,\rho_c \quad (i \neq i'), \\ \mathrm{Cov}[\epsilon'_j,\ \epsilon'_{j'}] &= \sigma_a^2\,\rho_a \quad (j \neq j') \end{aligned} \tag{2.7.17}$$

が存在するものとする。

このとき，(2.7.6) 式の一般化逆回帰推定量を構成している個々の統計量に関して,

$$\begin{aligned} \bar{y}_0. &\sim N\Big(\alpha + \beta x_0,\ \frac{\sigma_a^2}{k}\,[1 + (k-1)\rho_a]\Big), \\ \bar{y}. &\sim N\Big(\alpha + \beta \bar{x}.,\ \frac{1}{n}\,[1 + (n-1)\rho_c]\Big), \\ \hat{\beta} &\sim N\Big(\beta,\ \frac{\sigma_c^2\,(1-\rho_c)}{S_{xx}}\Big), \\ S_e &\sim \sigma_c^2\,(1-\rho_c)\,\chi^2(n-2) \end{aligned} \tag{2.7.18}$$

が成り立つ。したがって，2.4 節と同様の手順により,

$$\mathrm{E}[\tilde{x}_0] = x_0 + (x_0 - \bar{x}.)\left\{\frac{1-c}{\eta'^2} + O\Big(\frac{1}{\eta'^4}\Big)\right\}, \tag{2.7.19}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{MSE}[\tilde{x}_0] =& \mathrm{E}[(\tilde{x}_0 - x_0)^2] \\ =& \left\{\frac{1}{k}\,\frac{\sigma_a^2}{\beta^2}\,[1 + (k-1)\rho_a] + \frac{1}{n}\,\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\,[1 + (n-1)\rho_c]\right\} \\ & \times \left\{1 + \frac{3-2c}{\eta'^2} + O\Big(\frac{1}{\eta'^4}\Big)\right\} \\ & + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}}\,\frac{\sigma_c^2\,(1-\rho_c)}{\beta^2}\left\{1 + \frac{1}{\eta'^2}\left(\frac{2c^2}{n-2} + c^2 - 8c + 9\right)\right. \\ & \left. + O\Big(\frac{1}{\eta'^4}\Big)\right\}, \end{aligned} \tag{2.7.20}$$

$$\eta'^2 = \beta^2 \, S_{xx}/\sigma_c^2 \, (1-\rho_c) \tag{2.7.21}$$

が得られる。

係数 c は，(2.5.15) 式と同じ

$$c_* = \frac{1}{1+\dfrac{2}{n-2}} \Big\{ 4 + \frac{1}{\Delta_{\max}} \Big(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} \Big) \Big\} \tag{2.7.22}$$

を用いれば良い。

平均 2 乗誤差の最初の項は，

$$\begin{aligned} &\frac{1}{k}\,\frac{\sigma_a^2}{\beta^2}\,[1+(k-1)\rho_a] + \frac{1}{n}\,\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\,[1+(n-1)\rho_c] \\ &\quad + \frac{(x_0-\bar{x}.)^2}{S_{xx}}\,\frac{\sigma_c^2\,(1-\rho_c)}{\beta^2} \end{aligned} \tag{2.7.23}$$

で与えられる。相対感度 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 のほかに，2 つの相関係数 ρ_c，ρ_a が効いている。ρ_a については，小さい方が平均 2 乗誤差が小さくなる。ρ_c に関しては，x_0 の値に依存して効果が異なる。$(x_0-\bar{x}.)^2/S_{xx}$ が大きい場合には，ρ_c が大きい程，平均 2 乗誤差が小さくなる。しかし，$(x_0-\bar{x}.)^2/S_{xx}$ が大きいところ，すなわち，標準試料 $x_1, \cdots, x_n$ の範囲を大きくはずれた x_0 の値に関する推定を行うというのは，実際的でない。したがって

$$\frac{1}{n}\,\frac{\sigma_c^2}{\beta^2}\,[1+(n-1)\rho_c] \tag{2.7.24}$$

の項が効くので，この場合には，ρ_c の値は小さい程，平均 2 乗誤差は小さくなる。

2.7.3　不等分散性の影響

誤差の分散が一様でなく，x の値に応じて，変化している場合を考える。すなわち，(2.7.1) 式のモデルにおいて，誤差 ϵ_i は，互いに独立に，分散 σ_i^2 の正規分布に従うものとする。まず，次式のような，分散の重み付き平均を定義する。

$$\begin{aligned} \sigma_{(0)}^2 &= \textstyle\sum \sigma_i^2/n, \\ \sigma_{(1)}^2 &= \textstyle\sum \sigma_i^2\,(x_i-\bar{x}.)/\sqrt{n\,S_{xx}}, \\ \sigma_{(2)}^2 &= \textstyle\sum \sigma_i^2\,(x_i-\bar{x}.)^2/S_{xx}, \\ \tilde{\sigma}_{(0)}^4 &= \textstyle\sum \sigma_i^4/n, \\ \tilde{\sigma}_{(1)}^4 &= \textstyle\sum \sigma_i^4\,(x_i-\bar{x}.)/\sqrt{n\,S_{xx}}, \\ \tilde{\sigma}_{(2)}^4 &= \textstyle\sum \sigma_i^4\,(x_i-\bar{x}.)^2/S_{xx} \end{aligned} \tag{2.7.25}$$

さらに

$$\begin{aligned} \eta_{(0)}^2 &= \beta^2\,S_{xx}/\sigma_{(0)}^2, \\ \eta_{(1)}^2 &= \beta^2\,S_{xx}/\sigma_{(1)}^2, \\ \eta_{(2)}^2 &= \beta^2\,S_{xx}/\sigma_{(2)}^2, \\ \tilde{\eta}_{(0)}^4 &= \beta^4\,S_{xx}^2/\tilde{\sigma}_{(0)}^4, \\ \tilde{\eta}_{(1)}^4 &= \beta^4\,S_{xx}^2/\tilde{\sigma}_{(1)}^4, \\ \tilde{\eta}_{(2)}^4 &= \beta^4\,S_{xx}^2/\tilde{\sigma}_{(2)}^4 \end{aligned} \tag{2.7.26}$$

と置く。

以上の記号を用いれば，(2.7.6) 式の一般化逆回帰推定量の期待値，および分散は，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{E}[\hat{x}_0] = x_0 & \\
& + (x_0 - \bar{x}.) \left\{ \frac{1}{\eta^2_{(2)}} - \frac{c}{\eta^2_{(0)}} + \frac{c}{n-2} \left(\frac{1}{\eta^2_{(2)}} - \frac{1}{\eta^2_{(0)}} \right) + \cdots \right\} \\
& + \frac{\sqrt{S_{xx}}}{\sqrt{n}} \left\{ \frac{1}{\eta^2_{(1)}} + \cdots \right\},
\end{aligned} \tag{2.7.27}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{MSE}[\tilde{x}_0] &= \mathrm{E}[(\tilde{x}_0 - x_0)^2] \\
&= \frac{1}{k} \frac{\sigma_a^2}{\beta^2} \left\{ 1 + \frac{3}{\eta^2_{(2)}} - \frac{2c}{\eta^2_{(0)}} + \frac{2c}{n-2} \left(\frac{1}{\eta^2_{(0)}} - \frac{1}{\eta^2_{(2)}} \right) + \cdots \right\} \\
&\quad + \frac{1}{n} \frac{\sigma^2_{(0)}}{\beta^2} \left\{ 1 + \frac{3}{\eta^2_{(2)}} - \frac{2c}{\eta^2_{(0)}} + \frac{1}{\eta^2_{(1)}} \frac{\sigma^2_{(1)}}{\sigma^2_{(0)}} \right. \\
&\qquad\qquad \left. + \frac{2c}{n-2} \left(\frac{1}{\eta^2_{(2)}} + \frac{1}{\eta^2_{(0)}} - 2 \frac{\eta^2_{(0)}}{\tilde{\eta}^4_{(0)}} \right) + \cdots \right\} \\
&\quad + (x_0 - \bar{x}.)^2 \left\{ \frac{1}{\eta^2_{(2)}} + \frac{2c^2}{n-2} \frac{1}{\tilde{\eta}^4_{(0)}} + \frac{c^2}{\eta^4_{(0)}} - \frac{8c}{\eta^2_{(0)} \eta^2_{(2)}} + \frac{9}{\eta^4_{(2)}} \right. \\
&\qquad\qquad - \frac{8c}{n-2} \left(\frac{1}{\eta^2_{(2)} \eta^2_{(0)}} + \frac{2}{\tilde{\eta}^4_{(2)}} - \frac{3}{\eta^4_{(2)}} - 2 \frac{2}{\eta^4_{(1)}} \right) \\
&\qquad\qquad + \frac{2c^2}{n-2} \left(\frac{1}{\eta^4_{(0)}} - \frac{1}{\eta^2_{(0)} \eta^2_{(2)}} \right) \\
&\qquad\qquad \left. + \frac{2c^2}{(n-2)^2} \left\{ \frac{3}{\eta^4_{(0)}} + \frac{3}{\eta^4_{(2)}} - \frac{4}{\tilde{\eta}^4_{(2)}} - \frac{2}{\eta^2_{(0)} \eta^2_{(2)}} + \frac{2}{\eta^4_{(1)}} \right) + \cdots \right\} \\
&\quad + (x_0 - \bar{x}.) \frac{\sqrt{S_{xx}}}{\sqrt{n}} \frac{1}{\eta^2_{(1)}} \left\{ 2 + \frac{18}{\eta^2_{(2)}} - \frac{10c}{\eta^2_{(0)}} \right. \\
&\qquad\qquad \left. - \frac{10c}{n-2} \left(\frac{1}{\eta^2_{(0)}} - \frac{3}{\eta^2_{(2)}} + \frac{\eta^2_{(1)}}{\tilde{\eta}^4_{(1)}} \right) + \cdots \right\}
\end{aligned} \tag{2.7.28}
$$

と表すことができる。

係数 c の最適な値は，(2.7.25) 式で定義されるような，分散の各種の重み付き平均の値に依存する。また，平均 2 乗誤差の第 1 項は，

$$
\frac{1}{k} \frac{\sigma_a^2}{\beta^2} + \frac{1}{n} \frac{\sigma^2_{(0)}}{\beta^2} + \frac{(x_0 - \bar{x}.)^2}{S_{xx}} \frac{\sigma^2_{(2)}}{\beta^2} + \frac{(x_0 - \bar{x}.) \sqrt{S_{xx}}}{\sqrt{n}} \frac{\sigma^2_{(1)}}{\beta^2} \tag{2.7.28}
$$

と表され，この値も，分散の重み付き平均 $\sigma^2_{(0)}$，$\sigma^2_{(1)}$，$\sigma^2_{(2)}$ に依存する。したがって，標準試料 $x_i, \cdots, x_n$ の選び方に依存するので，計測法の良さを一般的に定義することは困難である。

第3章　計測法比較のための実験

前章で，計測法の性質は，相対感度 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 のみに依存することを示した。特に，推定量の偏りは β^2/σ_c^2 のみに依存し，分散は主に，β^2/σ_a^2 に依存する。そして，相対感度 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 の値が大きい程，優れた計測法である。

同一の対象に対して，いくつかの計測法が存在する場合，その優劣を定量的に評価したい。そのためには，実際の計測に先立って，相対感度を比較するための予備的な計測実験を行う必要がある。

本章では，相対感度比較のための予備的な実験の構成を示し，その分散分析における相対感度と非心度との関係について述べる。

3.1　β^2/σ_c^2 比較のための実験

いくつかの計測法に対して，校正時の相対感度 β^2/σ_c^2 に関する比較を行うためには，値が既知の標準試料 $x_1, \cdots, x_n$ を用意し，各計測法により計測を行う。

1つの計測法について，標準試料 $x_1, \cdots, x_n$ に対する測定値を $y_1, \cdots, y_n$ とすると

$$\begin{aligned} &y_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i \quad (i = 1, \cdots, n), \\ &\qquad \epsilon_i \sim n.i.i.d.(0,\ \sigma_c^2) \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

と書き表すことができる。これは，通常の単回帰分析モデルである。

$y_1, \cdots, y_n$ の同時確率密度関数は，

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(\sqrt{2\pi}\,\sigma_c)^n}\ \exp\Big[-\frac{1}{2}\ \textstyle\sum (y_i - \alpha - \beta x_i)^2/\sigma_c^2\Big] \\ &\qquad\qquad = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\,\sigma_c)^n}\ \exp\Big[-\frac{1}{2}\ \textstyle\sum (\alpha + \beta x_i)^2/\sigma_c^2\Big] \\ &\qquad\qquad\quad \times \exp\Big[-\frac{1}{2\sigma_c^2}\ \textstyle\sum y_i^2 + \dfrac{\alpha}{\sigma_c^2}\ \sum y_i + \dfrac{\beta}{\sigma_c^2}\ \sum x_i\, y_i\Big] \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

である。これは指数型分布であるから

$$\Big(\textstyle\sum y_i^2,\ \sum y_i,\ \sum x_i\, y_i\Big) \tag{3.1.3}$$

が，α，β，σ_c^2 の完備十分統計量である。あるいは，(3.1.3) と 1 対 1 に対応する

$$\begin{aligned} &\hat{\beta} = \textstyle\sum (x_i - \bar{x}.)(y_i - \bar{y}.)/\sum (x_i - \bar{x}.)^2, \\ &\hat{\alpha} = \bar{y}. - \hat{\beta}\,\bar{x}., \\ &S_e = \textstyle\sum (y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}\,x_i)^2 \end{aligned} \tag{3.1.4}$$

が完備十分統計量となり，未知パラメータに関する推測は，これらの統計量にもとづいて行えばよい。ただし，

$$\begin{aligned} &\bar{x}. = \textstyle\sum x_i/n, \\ &\bar{y}. = \textstyle\sum y_i/n \end{aligned} \tag{3.1.5}$$

である。

(3.1.1) 式のデータに対する分散分析表は，次のようになる。

表 3.1.1　分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比	分散の期待値
回帰	$\nu_1 = 1$	S_R	$V_R = S_R$	$F = V_R/V_e$	$\sigma_c^2 + S_{xx}\beta^2$
残差	$\nu_2 = n-2$	S_e	$V_e = S_e/\nu_2$		

$$S_R = \sum(\hat{\alpha} + \hat{\beta}\, x_i - \bar{y}.)^2,$$
$$S_{xx} = \sum(x_i - \bar{x}.)^2$$

表 3.1.1 の分散分析表において，分散比 F は自由度 $\nu_1 = 1$，$\nu_2 = n-2$ の非心 F 分布に従い，その非心度は，

$$\lambda = S_{xx} \cdot \beta^2/\sigma_c^2 \tag{3.1.6}$$

である。すなわち，非心度は，相対感度 β^2/σ_c^2 に S_{xx} を乗じたものである。標準試料に関しては，S_{xx} は既知であるから，相対感度に関する推測と，非心度に関する推測とは本質的に同じものである。

非心度に関する推測については，第 4 章で取り扱う。

3.2　β^2/σ_a^2 比較のための実験

未知試料測定のときの相対感度 β^2/σ_a^2 に関する比較について考える。

この場合には，前節で述べたような標準試料を用いることはできない。しかし，以下のような実験によって，いくつかの計測法の相対感度を比較することは可能である。

値が未知の試料 $A_1, \cdots, A_m$ を用意し，それぞれ r 回の繰り返し測定を行う。試料 A_i の未知の真の値を x_i とし，その第 j 番めの繰り返し測定値を y_{ij} とすると

$$\begin{aligned} y_{ij} &= \mu_i + \epsilon'_{ij} \\ &= \alpha + \beta x_i + \epsilon'_{ij} \\ &\quad (i = 1, \cdots, m;\ j = 1, \cdots, r), \\ \epsilon'_{ij} &\sim n.i.i.d.(0,\ \sigma_a^2) \end{aligned} \tag{3.2.1}$$

と書き表すことができる。

前節と同様に，

$$\begin{aligned} \bar{y}_i. &= \sum_{j=1}^{r} y_{ij}/r \quad (i = 1, \cdots, m), \\ S_e &= \sum\sum(y_{ij} - \bar{y}_i.)^2 \end{aligned} \tag{3.2.2}$$

が，未知母数 $\mu_1, \cdots, \mu_m$，σ_a^2 の完備十分統計量である。

この実験の分散分析表は，次のようになる。

表 3.2.1　分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比	分散の期待値
試料 A	$\nu_1 = m - 1$	S_A	$V_A = S_A/\nu_1$	$F = V_A/V_e$	$\sigma_a^2 + r\,\kappa_A^2$
誤差 e	$\nu_2 = m\,(r-1)$	S_e	$V_e = S_e/\nu_2$		

$$
\begin{aligned}
S_A &= r\sum(\bar{y}_i. - \bar{y}..)^2,\\
\bar{y}.. &= \sum\sum y_{ij}/mr,\\
\kappa_A^2 &= (\mu_i - \bar{\mu}.)^2/\nu_1\\
&= \beta^2 \sum(x_i - \bar{x}.)^2/\nu_1,\\
\bar{\mu}. &= \sum \mu_i/m,\\
\bar{x}. &= \sum x_i/m
\end{aligned}
$$

分散比 F は，自由度 $\nu_1 = m-1$，$\nu_2 = m\,(r-1)$ の非心 F 分布に従い，その非心度 λ は

$$
\lambda = \nu_1\,r\,\kappa_A^2/\sigma_a^2 = r\,\sum(x_i - \bar{x}.)^2\,\frac{\beta^2}{\sigma_a^2} \tag{3.2.2}
$$

である。標準試料を用いる実験の場合と同じように，非心度 λ は，相対感度 β^2/σ_a^2 の実数倍になっている。しかし，実際の試料 $A_i, \cdots, A_m$ を用いる実験では，$\sum(x_i - \bar{x}.)^2$ は未知であるから，非心度に関する推測と相対感度に関する推測とが同等というわけにはいかない。

いま，2 つの計測法があり，それぞれの相対感度を β_1^2/σ_{a1}^2，β_2^2/σ_{a2}^2 とする。同じ試料 $A_1, \cdots, A_m$ を用いて，2 つの計測法により測定を行なった場合の非心度を λ_1，λ_2 とする。この場合には，$\sum(x_i - \bar{x}.)^2$ が共通であるから

$$
\lambda_1 \lesseqqgtr \lambda_2 \quad\Longleftrightarrow\quad \frac{\beta_1^2}{\sigma_{a1}^2} \lesseqqgtr \frac{\beta_2^2}{\sigma_{a2}^2} \tag{3.2.3}
$$

の関係が成り立つ。

したがって，非心度の比較と，相対感度の比較とは同じ問題となる。

第 4 章　非心度に関する推測

第 2 章で，計測法の良さは，相対感度 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 のみに依存することを示した。また，第 3 章で相対感度を比較するための実験について述べた。そこでは，分散分析における非心度の比較が，相対感度の比較と同等であることを示した。

本章では，非心 F 分布の非心度に関する統計的推測について考察する。

計測法を取り扱う問題に出てくる非心度は，非常に大きな値をとる。つまり，我々は，非心度の大きいところでの比較とか推定を問題にしなければならない。

本章で，非心 F 統計量の変数変換を提案する。この方法は，いくつかの非心度に関する多重比較，あるいは非心度の区間推定へも適用できる。

4.1　非心 F 統計量の変数変換

我々が行いたいのは，いくつかの非心度の比較である。たとえば，2 つの計測法に対する非心度を λ_1，λ_2 とすると，帰無仮説 $H_0\colon \lambda_1 = \lambda_2$ に関する検定が問題となる。困難な点は，この仮説が複合仮説である点である。また，非心 F 分布の密度関数は無限級数の形でしか表現できないので，尤度比検定を構成することも困難である。さらに，3 つ以上の非心度の比較を行いたい場合もある。

以上の要求に答えるために，本節で非心 F 統計量の変数変換について考える。

4.1.1　非心 χ^2 分布のモーメント

後で必要となる非心 χ^2 分布，および中心 χ^2 分布のモーメントについて本項でまとめておく。

X_1 を自由度 ν_1，非心度 λ の非心 χ^2 分布に従う統計量とする。その r 次のキュムラントは

$$\begin{aligned}\kappa_r &= 2^{r-1}\,(r-1)!\,(\nu_1 + r\,\lambda)\\ &= 2^{r-1}\,(r-1)!\,(r\,\theta_1 - (r-1)\,\nu_1)\end{aligned} \tag{4.1.1}$$

である。ただし，

$$\mathrm{E}[X_1] = \kappa_1 = \nu_1 + \lambda = \theta_1 \tag{4.1.2}$$

とおく。具体的に 4 次までのキュムラントは

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= \theta_1,\\ \kappa_2 &= 2(\nu_1 + 2\lambda) = 2(2\theta_1 - \nu_1),\\ \kappa_3 &= 8(\nu_1 + 3\lambda) = 8(3\theta_1 - 2\nu_1),\\ \kappa_4 &= 48(\nu_1 + 4\lambda) = 48(4\theta_1 - 3\nu_1)\end{aligned} \tag{4.1.3}$$

である。

平均値まわりの r 次のモーメントを

$$\psi_r = \mathrm{E}[(X_1 - \theta_1)^r] \tag{4.1.4}$$

とすると

$$\begin{aligned} \psi_2 &= \kappa_2 = 2(2\theta_1 - \nu_1), \\ \psi_3 &= \kappa_3 = 8(3\theta_1 - 2\nu_1), \\ \psi_4 &= \kappa_4 + 3\,\kappa_2^2 \\ &= 12\,\{4\theta_1^2 + (16 - 4\nu_1)\,\theta_1 + \nu_1^2 - 12\nu_1\} \end{aligned} \tag{4.1.5}$$

である。一般に

$$\begin{aligned} \psi_{2m} &= 4^m\,(2m-1)!!\,\theta_1^m \left\{1 + O\Big(\frac{1}{\theta_1}\Big)\right\}, \\ \psi_{2m+1} &= 2\cdot 4^m \cdot m \cdot (2m+1)!!\,\theta_1^m \left\{1 + O\Big(\frac{1}{\theta_1}\Big)\right\} \end{aligned} \tag{4.1.6}$$

が成り立つ。

X_2 を，自由度 ν_2 の χ^2 分布に従う統計量とする。r 次のキュムラントを κ'_r とすると

$$\begin{aligned} \kappa'_1 &= \nu_2 = \theta_2, \\ \kappa'_2 &= 2\nu_2 = 2\theta_2, \\ \kappa'_3 &= 8\nu_2 = 8\theta_2, \\ \kappa'_4 &= 48\nu_2 = 48\theta_2 \end{aligned} \tag{4.1.7}$$

$$\kappa'_r = 2^{r-1}\,(r-1)!\,\theta_2 \tag{4.1.8}$$

である。また，平均値まわりの r 次のモーメントをを

$$\tau_r = \mathrm{E}[(X_2 - \theta_2)^r]$$

とすると，

$$\begin{aligned} \tau_2 &= 2\theta_2, \\ \tau_3 &= 8\theta_2, \\ \tau_4 &= 12\theta_2^2 + 48\theta_2, \end{aligned} \tag{4.1.9}$$

$$\begin{aligned} \tau_{2m} &= 2^m\,(2m-1)!!\,\theta_2^m \left\{1 + O\Big(\frac{1}{\theta_2}\Big)\right\}, \\ \tau_{2m+1} &= \frac{1}{3}\,2^{m+2}\,m\,(2m+1)!!\,\theta_2^m \left\{1 + O\Big(\frac{1}{\theta_2}\Big)\right\} \end{aligned} \tag{4.1.10}$$

である。

4.1.2 変数変換

前項のように，X_1 は自由度 ν_1，非心度 λ の非心 χ^2 分布に従い，X_2 は自由度 ν_2 の χ^2 分布に従うものとする。X_1 と X_2 の関数 $h(X_1, X_2)$ を考える。以下で，λ が大きいときに，$h(X_1, X_2)$ の分散が，未知の λ の値に依存しないような関数を求める。

$h(X_1, X_2)$ を各変数の期待値 $\mathrm{E}[X_1] = \theta_1$，$\mathrm{E}[X_2] = \theta_2$ のまわりに Taylor 展開すると

$$h(X_1, X_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{i=0}^{k} \binom{k}{i} h_{i,k-1} \cdot (X_1 - \theta_1)^i \cdot (X_2 - \theta_2)^{k-i} \tag{4.1.11}$$

が得られる。ただし

$$h_{ij} = \left. \frac{\partial^{i+j}\, h(X_1, X_2)}{\partial X_1^i\, \partial X_2^j} \right|_{X_1=\theta_1, X_2=\theta_2} \tag{4.1.12}$$

である。

したがって

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}[h(X_1, X_2)] = h_{00}& \\
&+ \frac{1}{2!}\,(\psi_2\, h_{20} + \tau_2\, h_{02}) \\
&+ \frac{1}{3!}\,(\psi_3\, h_{30} + \tau_3\, h_{03}) \\
&+ \frac{1}{4!}\,(\psi_4\, h_{40} + 6\,\psi_2\,\tau_2\, h_{22} + \tau_4\, h_{04}) \\
&+ \cdots
\end{aligned} \tag{4.1.13}$$

となる。ただし

$$\begin{aligned}
\psi_i &= \mathrm{E}[(X_1 - \theta_1)^i], \\
\tau_i &= \mathrm{E}[(X_2 - \theta_2)^i]
\end{aligned} \tag{4.1.14}$$

である。また，分散は

$$\begin{aligned}
\mathrm{V}[h(X_1, X_2)] &= \mathrm{E}[h^2(X_1, X_2)] - \mathrm{E}[h(X_1, X_2)]^2 \\
&= \psi_2\, h_{10}^2 + \tau_2\, h_{01}^2 \\
&\quad + \tau_3\, h_{01}\, h_{02} + \tau_4 \left(\frac{1}{3}\, h_{01}\, h_{03} + \frac{1}{4}\, h_{02}^2 \right) - \frac{1}{4}\,\tau_2^2\, h_{02}^2 \\
&\quad + \psi_2\,\tau_2\,(h_{11}^2 + h_{10}\, h_{12} + h_{01}\, h_{21}) \\
&\quad + \psi_2\,\tau_3 \left(h_{11}\, h_{12} + \frac{1}{2}\, h_{02}\, h_{21} + \frac{1}{3}\, h_{10}\, h_{13} + \frac{1}{2}\, h_{01}\, h_{22} \right) \\
&\quad + \psi_2\,\tau_4 \left(\frac{1}{4}\, h_{12}^2 + \frac{1}{6}\, h_{21}\, h_{03} + \frac{1}{3}\, h_{11}\, h_{13} + \frac{1}{12}\, h_{10}\, h_{14} \right. \\
&\qquad\qquad \left. + \frac{1}{6}\, h_{01}\, h_{23} + \frac{1}{4}\, h_{02}\, h_{22} \right) \\
&\quad - \frac{1}{4}\,\psi_2\,\tau_2^2\, h_{02}\, h_{22} \\
&\quad + \cdots
\end{aligned} \tag{4.1.15}$$

となる。

ここで，関数として，

$$h(\theta_1, \theta_2) = g(\theta_1/\theta_2) \tag{4.1.16}$$

の形のものを考える。

$$u = \theta_1/\theta_2 \tag{4.1.17}$$

とおくと，h の導関数は

$$\begin{aligned}\frac{\partial^{i+j}\, h(\theta_1,\theta_2)}{\partial\theta_1^i\,\partial\theta_2^j} = \frac{(-1)^j}{\theta_1^i\,\theta_2^j}\Big\{&u^{i+j}\,g^{(i+j)} + a_{j-1}^{i,j}\,u^{i+j-1}\,g^{(i+j-1)} \\ &+\cdots + a_1^{i,j}\,u^{i+1}\,g^{(i+1)} + a_0^{i,j}\,u^i\,g^{(i)}\Big\}\end{aligned} \tag{4.1.18}$$

と表すことができる。ただし，$a_k^{i,j}$ $(k = 0,\cdots,j)$ は定数で，次の漸化式より求まる。

$$a_0^{0,0} = 1$$

$$\begin{cases} a_j^{i+1,j} = 1, \\ a_k^{i+1,j} = (k+1)\,a_{k+1}^{i,j} + a_k^{i,j} \quad (k = 0,\cdots,j-1), \end{cases} \tag{4.1.19}$$

$$\begin{cases} a_{j+1}^{i,j+1} = 1, \\ a_k^{i,j+1} = (i+j+k)\,a_k^{i,j} + a_{k-1}^{i,j} \quad (k = 1,\cdots,j), \\ a_0^{i,j+1} = (i+j)\,a_0^{i,j} \end{cases} \tag{4.1.20}$$

次に分散の式 (4.1.15) を考える。

$$h_{10} = \frac{1}{\theta_1}\,u\,g'(u) = \frac{1}{\theta_2}\,g'(u) \tag{4.1.21}$$

$$h_{01} = -\frac{1}{\theta_2}\,u\,g'(u) \tag{4.1.22}$$

より，(4.1.15) 式の最初の 2 項は

$$\begin{aligned}&\psi_2\,h_{10}^2 + \tau_2\,h_{01}^2 \\ &\qquad = 2(2\theta_1 - \nu_1)\,\frac{1}{\theta_2^2}\,g'(u)^2 + 2\theta_2\,\frac{1}{\theta_2^2}\,u^2\,g'(u)^2 \\ &\qquad = \frac{2}{\theta_2}\,g'(u)^2\,(u^2+2u) - \frac{2\nu_1}{\theta_2^2}\,g'(u)^2\end{aligned} \tag{4.1.23}$$

となる。ここで

$$g'(u) = (u^2+2u)^{-1/2} \tag{4.1.24}$$

となるように選べば，(4.1.23) 式の第 1 項は $2/\theta_2$ となり，$u = \theta_1/\theta_2 = (\nu_1+\lambda)/\nu_2$ の値に依存しない。すなわち，未知母数 λ の値に依存しない。

(4.1.24) 式を解けば

$$g(u) = \ln(u + 1 + \sqrt{u^2+2u}) \tag{4.1.25}$$

を得る。したがって，以下で，関数

$$g\Big(\frac{X_1}{X_2}\Big) = \ln\bigg(\frac{X_1}{X_2} + 1 + \sqrt{\Big(\frac{X_1}{X_2}\Big)^2 + 2\,\frac{X_1}{X_2}}\,\bigg) \tag{4.1.26}$$

による変換を考える。あるいは，非心 F 統計量

$$F = \frac{X_1/\nu_1}{X_2/\nu_2} \tag{4.1.27}$$

を用いて

$$\begin{aligned}\tilde{g}(F) &= \ln\Big(F + \frac{\nu_2}{\nu_1} + \sqrt{F^2 + 2\,\frac{\nu_2}{\nu_1}\,F}\Big) \\ &= \ln\Big(\frac{\nu_2}{\nu_1}\Big) + g\Big(\frac{X_1}{X_2}\Big)\end{aligned} \tag{4.1.28}$$

を考える。

次に，(4.1.26) 式による変換について，分散 (4.1.15) 式の他の項を評価する。

$g(u)$ の i 次の導関数は

$$\begin{aligned}g^{(i)}(u) = (u^2+2u)^{-(2i-1)/2} \times \{&c^i_{i-1}\,u^{i-1} + c^i_{i-2}\,u^{i-2} + \\ &\cdots + c^i_1\,u + c^i_0\}\end{aligned} \tag{4.1.29}$$

と書き表すことができる。ただし c^i_k $(k=0,\cdots,i-1)$ は定数で，次の漸化式より求まる。

$$\begin{aligned}&c^1_0 = 1, \\ &\begin{cases} c^{i+1}_i = -i\,c^i_{i-1}, \\ c^{i+1}_k = -(2i-2k-1)\,c^i_k - (2i-k)\,c^i_{k-1} \quad (k=1,\cdots,i-1), \\ c^{i+1}_0 = -(2i-1)\,c^i_0 \end{cases}\end{aligned} \tag{4.1.30}$$

(4.1.29) 式，(4.1.30) 式より

$$g^{(i)}(u) = (-1)^{i-1}\,(i-1)!\,\frac{1}{u^i}\Big\{1 + O\Big(\frac{1}{u}\Big)\Big\} \tag{4.1.31}$$

が得られる。したがって，(4.1.18) 式より

$$h_{ij} = O\Big(\frac{1}{\theta^i_1\,\theta^j_2}\Big) \tag{4.1.32}$$

である。

(4.1.15) 式において，τ_3，τ_4，τ_2^2 を含む項は $1/\theta_2^2$ のオーダーである。

$$h_{02} = \frac{1}{\theta_2^2}\,\frac{u^2\,(u+3)}{(u^2+2u)^{3/2}}, \tag{4.1.33}$$

$$h_{03} = -\frac{1}{\theta_2^3}\,\frac{u^3\,(2u^2+10u+15)}{(u^2+2u)^{5/2}} \tag{4.1.34}$$

より，

$$\begin{aligned}&\tau_2\,h_{01}\,h_{02} + \tau_4\left(\frac{1}{3}\,h_{01}\,h_{03} + \frac{1}{4}\,h_{02}^2\right) - \frac{1}{4}\,\tau_2^2\,h_{02}^2 \\ &\qquad = \frac{2}{\theta_2^2}\Big\{1 + o\Big(\frac{1}{u}\Big)\Big\} + \frac{4}{\theta_2^3}\Big\{11 - \frac{8}{u} + o\Big(\frac{1}{u}\Big)\Big\}\end{aligned} \tag{4.1.35}$$

が得られる。

次に (4.1.15) 式の $\psi_2\,\tau_2$ を含む項については,

$$h_{11}^2 = \frac{1}{\theta_1^2\,\theta_2^2}\,\frac{u^4}{(u^2+2u)^3}, \tag{4.1.36}$$

$$h_{10}\,h_{12} = \frac{1}{\theta_1^2\,\theta_2^2}\,\frac{3u^4}{(u^2+2u)^3}, \tag{4.1.37}$$

$$h_{01}\,h_{21} = -\frac{1}{\theta_1^2\,\theta_2^2}\,\frac{u^4\,(2u+1)}{(u^2+2u)^3} \tag{4.1.38}$$

より,

$$\begin{aligned}&\psi_2\,\tau_2\,(h_{11}^2 + h_{10}\,h_{12} + h_{01}\,h_{21})\\ &\qquad = -\frac{16}{\theta_1\,\theta_2}\Bigl(1-\frac{\nu_1}{2\theta_1}\Bigr)\Bigl\{\frac{1}{u}+o\Bigl(\frac{1}{u}\Bigr)\Bigr\}\end{aligned} \tag{4.1.39}$$

となる。

(4.1.15) 式において，$\psi_2\,\tau_3$，$\psi_2\,\tau_4$，$\psi_2\,\tau_2^2$ を含む項は，$1/\theta_1\,\theta_2^2$ のオーダーである。また，(4.1.23) 式で残っていた第 2 項は，$1/\theta_1^2$ のオーダーである。

したがって，確率変数 $\tilde{g}(F)$ の分散は

$$\begin{aligned}\mathrm{V}[\tilde{g}(F)] &= \frac{2}{\theta_2} + \frac{2}{\theta_2^2} + O\Bigl(\frac{1}{\theta_2^3}\Bigr)\\ &\quad + O\Bigl(\frac{1}{\theta_1\,\theta_2^2}\Bigr) + O\Bigl(\frac{1}{\theta_1^2}\Bigr)\end{aligned} \tag{4.1.40}$$

と表すことができる。

変数変換 (4.1.28) は，分散から，$1/\theta_1$ のオーダーの項を消すように決められたものである。ところが，この変換によると，うまく $1/\theta_1\,\theta_2$ のオーダーの項も消えてしまう。従って，分散の安定している範囲はかなり広い。

4.1.3　極限分布のモーメント

次に $\lambda \to \infty$ $(\theta_1 \to \infty)$ のときの極限分布について調べる。まず,

$$\begin{aligned}&g(X_1/X_2) - g(\theta_1/\theta_2)\\ &\qquad = \ln\frac{\dfrac{X_1/\theta_1}{X_2} + \dfrac{1}{\theta_1} + \sqrt{\Bigl(\dfrac{X_1/\theta_1}{X_2}\Bigr)^2 + 2\,\dfrac{1}{\theta_1}\,\dfrac{X_1/\theta_1}{X_2}}}{\dfrac{1}{\theta_2} + \dfrac{1}{\theta_1} + \sqrt{\dfrac{1}{\theta_2^2} + 2\,\dfrac{1}{\theta_1\,\theta_2}}}\end{aligned} \tag{4.1.41}$$

を考える。ここで

$$\mathrm{E}[X_1/\theta_1] = 1, \tag{4.1.42}$$

$$\mathrm{V}[X_1/\theta_1] = \frac{2}{\theta_1^2}\,(2\theta_1 - \nu_1) \to 0 \quad (\theta_1 \to \infty) \tag{4.1.43}$$

であるから，X_1/θ_1 は 1 に確率収束する。したがって，$g(X_1/X_2) - g(\theta_1/\theta_2)$ は

$$\ln\,(\theta_2/X_2) = \ln\,\theta_2 - \ln\,X_2 \tag{4.1.44}$$

に法則収束する。

したがって，極限分布の平均値まわりのモーメントは，$-\ln\,X_2$ について考えればよい。

$-\ln\,X_2$ の特性関数は

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \mathrm{E}[e^{-i\,t\,\ln X_2}]\\ &= 2^{-i\,t}\,\frac{\Gamma\Big(\dfrac{\nu_2}{2}-i\,t\Big)}{\Gamma\Big(\dfrac{\nu_2}{2}\Big)}\end{aligned} \tag{4.1.45}$$

である。キュムラント母関数は

$$\begin{aligned}\kappa(t) &= \ln\,\phi(t)\\ &= -i\,t\,\ln 2 + \ln\,\Gamma\Big(\frac{\nu_2}{2}-i\,t\Big) - \ln\,\Gamma\Big(\frac{\nu_2}{2}\Big)\end{aligned} \tag{4.1.46}$$

であり，その導関数は

$$\kappa'(t) = -i\,\ln\,2 - i\,\psi\Big(\frac{\nu_2}{2}-i\,t\Big), \tag{4.1.47}$$

$$\kappa^{(r)}(t) = (-i)^r\,\psi^{(r-1)}\,\Big(\frac{\nu_2}{2}-i\,t\Big) \tag{4.1.48}$$

である。ただし $\psi(z)$ はディ・ガンマ関数

$$\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z) \tag{4.1.49}$$

である。

以上より，キュムラントは

$$\kappa_1 = -\ln\,2 - \psi(\nu_2/2), \tag{4.1.50}$$

$$\kappa_r = \kappa^{(r)}(0)/i^r = (-1)^i\,\psi^{(r-1)}(\nu_2/2) \tag{4.1.51}$$

のように求められる。

ディ・ガンマ関数の漸近展開より

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= -\ln\,\nu_2 + \frac{1}{\nu_2} + \frac{1}{3\nu_2^2} + o\Big(\frac{1}{\nu_2^2}\Big)\\ &= -\ln\,\nu_2 + \frac{3}{3\nu_2-1} + o\Big(\frac{1}{\nu_2^2}\Big),\end{aligned} \tag{4.1.52}$$

$$\begin{aligned}\kappa_2 = \psi'(\nu_2/2) &= \frac{2}{\nu_2} + \frac{2}{\nu_2^2} + o\Big(\frac{1}{\nu_2^2}\Big)\\ &= \frac{2}{\nu_2-1} + o\Big(\frac{1}{\nu_2^2}\Big),\end{aligned} \tag{4.1.53}$$

$$\kappa_3 = -\psi''(\nu_2/2) = \frac{4}{\nu_2^2} + \frac{8}{\nu_2^3} + o\Big(\frac{1}{\nu_2^3}\Big), \tag{4.1.54}$$

$$\kappa_4 = \psi'''(\nu_2/2) = \frac{16}{\nu_2^3} + \frac{48}{\nu_2^4} + o\Big(\frac{1}{\nu_2^4}\Big) \tag{4.1.55}$$

のように表される。

歪度と尖度は

$$\gamma_3 = \frac{\kappa_3}{\kappa_2^{3/2}} = \sqrt{\frac{2}{\nu_2}}\left\{1 + \frac{1}{2\nu_2} + o\Big(\frac{1}{\nu_2}\Big)\right\} \tag{4.1.56}$$

$$\gamma_4 = \frac{\kappa_4}{\kappa_2^2} = \frac{4}{\nu_2}\left\{1 + \frac{1}{\nu_2} + o\Big(\frac{1}{\nu_2}\Big)\right\} \tag{4.1.57}$$

となる。

したがって，確率変数 $\tilde{g}(F)$ は正規分布

$$N\bigg(\tilde{g}\Big(1 + \frac{\lambda}{\nu_1}\Big) + \frac{3}{3\nu_2 - 1},\ \frac{2}{\nu_2 - 1}\bigg) \tag{4.1.58}$$

に近似的に従う。

4.1.4　シミュレーションによる検討

表 4.1.1 (1) – (4) に，いくつかの ν_1，ν_2，ϕ $(= \lambda/\nu_1)$ に対して，シミュレーションにより，$\tilde{g}(F)$ のモーメントを計算した結果を示す。

分散に関しては，いずれの自由度においても，$\phi = \lambda/\nu_1$ の値が 10 あたりで，極限値 $2/(\nu_2 - 1)$ に安定している。

表 4.1.2 (1)，(2) に，いくつかの統計量を用いて，シミュレーションにより正規性の検定を行った結果を示す。ここでは，$\nu_1 = 5$，$\nu_2 = 20$ として，いくつかの ϕ に対して計算を行った結果を示すが，他の自由度についても結果は同様であった。

表 4.1.2 (1) では，

$$z = \frac{\tilde{g}(F) - \tilde{g}\Big(1 + \dfrac{\lambda}{\nu_1}\Big) - \dfrac{3}{3\nu_2 - 1}}{\sqrt{\dfrac{2}{\nu_2 - 1}}} \tag{4.1.59}$$

に対して，標準正規分布を帰無仮説とした。検定方式としては，標本歪度，標本尖度，Geary の検定，Kolmogorov-Smirnov 検定，Neyman のスムーズ・テストを行った。ϕ の値が 10 以上で，正規分布によく適合している。ただし，歪度については，有意となっている場合が多い。これは，(4.1.56) 式に示したように，$\lambda \to \infty$ の極限においても歪度は 0 にならず，一定の値をもつからである。

(4.1.56) 式，(4.1.57) 式の歪度 γ_3，尖度 γ_4 を用いて，Cornish-Fisher 展開を行うと

$$\begin{aligned} z' &= z - \frac{\gamma_3}{6}(z^2 - 1) - \frac{\gamma_4}{24}(z^3 - 3z) \\ &\quad + \frac{\gamma_3^2}{36}(4z^3 - 7z) \\ &= z - \frac{1}{6}\sqrt{\frac{2}{\nu_2}}(z^2 - 1) + \frac{1}{18\,\nu_2}(z^3 + 2z) \end{aligned} \tag{4.1.60}$$

が得られる。この z' について正規性の検定を行った結果を表 4.1.2 (2) に示す。(4.1.60) 式を用いれば実用上は十分である。

表 4.1.1　(1) シミュレーションによるモーメントの計算
（10000 回の反復）

$\nu_1 = 1$

ν_2	ϕ	$\bar{x}.$	V	$\sqrt{b_1}$	b_2
	0	2.679 (0.003)	0.088 (0.002)	1.248	5.018
	10	3.687 (0.005)	0.230 (0.003)	0.343	3.237
	20	4.138 (0.005)	0.227 (0.004)	0.413	3.498
10	30	4.443 (0.005)	0.225 (0.003)	0.431	3.282
	40	4.676 (0.005)	0.218 (0.003)	0.447	3.393
	50	4.869 (0.005)	0.223 (0.003)	0.432	3.363
	70	5.164 (0.005)	0.222 (0.004)	0.463	3.564
	100	5.490 (0.005)	0.230 (0.004)	0.441	3.378
	0	3.252 (0.002)	0.040 (0.001)	1.093	4.263
	10	3.983 (0.003)	0.108 (0.002)	0.218	3.240
	20	4.338 (0.003)	0.105 (0.002)	0.198	3.104
20	30	4.597 (0.003)	0.104 (0.002)	0.272	3.270
	40	4.795 (0.003)	0.106 (0.002)	0.303	3.389
	50	4.955 (0.003)	0.104 (0.002)	0.289	3.224
	70	5.225 (0.003)	0.105 (0.002)	0.272	3.064
	100	5.514 (0.003)	0.106 (0.002)	0.299	3.207
	0	3.869 (0.001)	0.0192 (0.0004)	1.091	4.281
	10	4.392 (0.002)	0.0519 (0.0008)	0.165	3.123
	20	4.660 (0.002)	0.0522 (0.0008)	0.173	3.146
40	30	4.858 (0.002)	0.0527 (0.0008)	0.217	3.196
	40	5.018 (0.002)	0.0505 (0.0007)	0.145	3.059
	50	5.155 (0.002)	0.0525 (0.0008)	0.173	3.030
	70	5.374 (0.002)	0.0521 (0.0008)	0.185	3.060
	100	5.633 (0.002)	0.0515 (0.0007)	0.207	3.042

$\phi = \lambda / \nu_1$

$\sqrt{b_1} = \sqrt{n}\, \sum (x_i - \bar{x}.)^3 / \left\{\sum (x_i - \bar{x}.)^2\right\}^{3/2}$

$b_2 = n\, \sum (x_i - \bar{x}.)^4 / \left\{\sum (x_i - \bar{x}.)^2\right\}^2$

$\bar{x}.$，V 欄のかっこ内の数字は標準誤差を示す。

表 4.1.1 (2) シミュレーションによるモーメントの計算

$\nu_1 = 2$

ν_2	ϕ	$\bar{x}.$	V	$\sqrt{b_1}$	b_2
	0	2.205 (0.003)	0.114 (0.002)	0.949	4.305
	10	3.489 (0.005)	0.222 (0.003)	0.443	3.471
	20	4.011 (0.005)	0.223 (0.003)	0.412	3.334
10	30	4.346 (0.005)	0.218 (0.003)	0.426	3.303
	40	4.600 (0.005)	0.218 (0.003)	0.427	3.326
	50	4.800 (0.005)	0.221 (0.003)	0.472	3.399
	70	5.108 (0.005)	0.219 (0.003)	0.481	3.425
	100	5.453 (0.005)	0.225 (0.004)	0.499	3.530
	0	2.713 (0.002)	0.050 (0.001)	0.758	3.513
	10	3.679 (0.003)	0.106 (0.002)	0.268	3.221
	20	4.121 (0.003)	0.104 (0.002)	0.296	3.191
20	30	4.421 (0.003)	0.103 (0.002)	0.282	3.224
	40	4.646 (0.003)	0.108 (0.002)	0.318	3.151
	50	4.835 (0.003)	0.106 (0.002)	0.343	3.360
	70	5.123 (0.003)	0.107 (0.002)	0.330	3.185
	100	5.442 (0.003)	0.102 (0.002)	0.303	3.142
	0	3.282 (0.002)	0.0238 (0.0004)	0.743	3.557
	10	3.993 (0.002)	0.0515 (0.0008)	0.188	3.179
	20	4.340 (0.002)	0.0507 (0.0008)	0.175	3.216
40	30	4.591 (0.002)	0.0508 (0.0008)	0.192	3.229
	40	4.787 (0.002)	0.0512 (0.0007)	0.180	3.110
	50	4.947 (0.002)	0.0512 (0.0007)	0.212	3.095
	70	5.209 (0.002)	0.0503 (0.0007)	0.198	3.169
	100	5.496 (0.002)	0.0508 (0.0008)	0.257	3.160

表 4.1.1　(3) シミュレーションによるモーメントの計算

$\nu_1 = 5$

ν_2	ϕ	$\bar{x}.$	V	$\sqrt{b_1}$	b_2
	0	1.673 (0.004)	0.135 (0.002)	0.745	3.974
	10	3.331 (0.005)	0.221 (0.003)	0.445	3.491
	20	3.920 (0.005)	0.218 (0.003)	0.451	3.352
10	30	4.283 (0.005)	0.223 (0.004)	0.497	3.480
	40	4.548 (0.005)	0.222 (0.003)	0.452	3.326
	50	4.761 (0.005)	0.217 (0.003)	0.489	3.566
	70	5.082 (0.005)	0.227 (0.004)	0.521	3.470
	100	5.429 (0.005)	0.222 (0.003)	0.440	3.455
	0	2.063 (0.002)	0.058 (0.001)	0.585	3.564
	10	3.412 (0.003)	0.106 (0.002)	0.319	3.142
	20	3.938 (0.003)	0.105 (0.002)	0.302	3.154
20	30	4.278 (0.003)	0.103 (0.002)	0.337	3.189
	40	4.539 (0.003)	0.104 (0.002)	0.314	3.172
	50	4.743 (0.003)	0.107 (0.002)	0.375	3.269
	70	5.059 (0.003)	0.104 (0.002)	0.317	3.141
	100	5.388 (0.003)	0.103 (0.002)	0.313	3.194
	0	2.559 (0.002)	0.0263 (0.0004)	0.469	3.195
	10	3.595 (0.002)	0.0508 (0.0008)	0.249	3.153
	20	4.052 (0.002)	0.0506 (0.0007)	0.199	3.036
40	30	4.365 (0.002)	0.0519 (0.0008)	0.218	3.175
	40	4.597 (0.002)	0.0513 (0.0007)	0.222	3.076
	50	4.788 (0.002)	0.0516 (0.0008)	0.259	3.176
	70	5.080 (0.002)	0.0506 (0.0007)	0.205	3.014
	100	5.408 (0.002)	0.0523 (0.0008)	0.232	3.098

表 4.1.1　(4) シミュレーションによるモーメントの計算

$\nu_1 = 10$

ν_2	ϕ	$\bar{x}.$	V	$\sqrt{b_1}$	b_2
	0	1.357 (0.004)	0.151 (0.003)	0.658	3.746
	10	3.265 (0.005)	0.219 (0.003)	0.501	3.480
	20	3.869 (0.005)	0.218 (0.003)	0.492	3.520
10	30	4.260 (0.005)	0.221 (0.003)	0.457	3.465
	40	4.536 (0.005)	0.220 (0.004)	0.496	3.550
	50	4.744 (0.005)	0.221 (0.003)	0.439	3.266
	70	5.071 (0.005)	0.217 (0.003)	0.434	3.310
	100	5.409 (0.005)	0.215 (0.003)	0.433	3.245
	0	1.659 (0.003)	0.063 (0.001)	0.530	3.543
	10	3.289 (0.003)	0.105 (0.002)	0.362	3.240
	20	3.867 (0.003)	0.106 (0.002)	0.321	3.218
20	30	4.231 (0.003)	0.103 (0.002)	0.304	3.178
	40	4.506 (0.003)	0.107 (0.002)	0.312	3.196
	50	4.710 (0.003)	0.105 (0.002)	0.303	3.111
	70	5.030 (0.003)	0.106 (0.002)	0.291	3.098
	100	5.377 (0.003)	0.103 (0.002)	0.303	3.236
	0	2.073 (0.002)	0.0286 (0.0004)	0.398	3.210
	10	3.397 (0.002)	0.0506 (0.0007)	0.158	3.007
	20	3.924 (0.002)	0.0518 (0.0008)	0.273	3.271
40	30	4.261 (0.002)	0.0502 (0.0007)	0.200	3.049
	40	4.517 (0.002)	0.0521 (0.0008)	0.217	3.130
	50	4.721 (0.002)	0.0508 (0.0007)	0.212	3.051
	70	5.034 (0.002)	0.0516 (0.0008)	0.278	3.207
	100	5.369 (0.002)	0.0511 (0.0007)	0.204	3.110

表 4.1.2 (1) 正規性の検定

（期待値と標準偏差で規準化した統計量）

$\nu_1 = 5$，$\nu_2 = 20$，標本の大きさ $n = 100$ 　　　　$*$ は 5% 有意

$\phi = \lambda/\nu_1$	標本	$\sqrt{b_1}$	b_2	G	D	ψ_1^2	ψ_2^2
	1	0.135	2.460	0.822	0.194*	5.667*	26.280*
	2	0.042	2.548	0.795	0.138*	4.275*	7.553*
0	3	0.669*	3.041	0.799	0.231*	14.355*	16.535*
	4	0.437	2.878	0.828	0.247*	21.184*	24.840*
	5	0.153	2.849	0.799	0.199*	5.676*	19.036*
	1	0.443	3.434	0.804	0.104	1.412	3.884
	2	0.353	4.053	0.764	0.056	0.223	0.396
10	3	0.378	2.938	0.821	0.102	2.132	2.205
	4	0.627*	3.909	0.750*	0.129	0.793	2.395
	5	−0.016	2.564	0.798	0.068	0.140	0.788
	1	0.817*	4.835*	0.763	0.073	0.932	1.017
	2	0.193	3.502	0.781	0.094	1.382	2.137
20	3	0.364	3.226	0.784	0.081	0.191	3.260
	4	0.589*	3.170	0.810	0.089	0.463	3.467
	5	0.591*	3.403	0.785	0.072	0.606	0.644
	1	0.361	2.828	0.808	0.063	0.006	0.265
	2	0.050	3.010	0.781	0.051	0.027	0.751
30	3	0.058	2.508	0.826	0.062	0.085	2.273
	4	0.191	2.579	0.811	0.125	4.218*	4.870
	5	0.085	3.433	0.813	0.101	1.079	1.560
	1	0.396	2.754	0.814	0.164*	2.436	5.225
	2	0.335	2.837	0.786	0.148*	4.603*	4.628
40	3	0.164	3.172	0.787	0.060	0.152	1.206
	4	−0.079	2.895	0.806	0.084	0.964	1.041
	5	−0.079	2.225*	0.838	0.081	0.454	0.713
	1	0.034	3.127	0.795	0.073	0.008	2.133
	2	0.332	2.621	0.825	0.136*	5.009*	5.115
50	3	0.300	2.718	0.832	0.134*	3.093	4.091
	4	0.350	2.871	0.789	0.066	0.019	0.865
	5	0.351	2.596	0.815	0.054	0.016	0.111
	1	0.243	3.773	0.758*	0.134	0.568	5.244
	2	0.366	2.495	0.817	0.095	0.226	0.466
70	3	0.615*	3.838	0.776	0.110	1.006	1.814
	4	0.434	3.023	0.783	0.069	0.044	0.163
	5	0.756*	3.770	0.776	0.108	0.736	3.832
	1	0.035	2.622	0.811	0.111	0.834	1.794
	2	0.556*	3.888	0.763	0.177*	8.154*	8.655*
100	3	0.680*	3.463	0.793	0.091	0.620	1.394
	4	0.030	2.836	0.808	0.034	0.000	0.020
	5	0.049	2.530	0.814	0.069	0.191	1.622

$$\sqrt{b_1} = \sqrt{n}\,\sum(z_i - \bar{z}.)^3/\left\{\sum(z_i - \bar{z}.)^2\right\}^{3/2}, \quad b_2 = n\,\sum(z_i - \bar{z}.)^4/\left\{\sum(z_i - \bar{z}.)^2\right\}^2$$

$$G = \sum|z_i - \bar{z}.|/\sqrt{n\,\sum(z_i - \bar{z}.)^2}$$

$$D = \max_z |\Phi(z) - F_n(z)|, \quad F_n(z)\text{: 標本分布関数}$$

$$\psi_1^2 = \frac{1}{n}\left\{\sum\sqrt{3}\,(2u_i - 1)\right\}^2, \quad u_i = \Phi(z_i)$$

$$\psi_2^2 = \frac{1}{n}\left[\left\{\sum\sqrt{3}\,(2u_i - 1)\right\}^2 + \left\{\sum\sqrt{5}\,(6u_i^2 - 6u_i + 1)\right\}^2\right]$$

表 4.1.2　(2) 正規性の検定

（Cornish-Fisher 展開により修正した統計量）

$\nu_1 = 5$, $\nu_2 = 20$, $n = 100$

$\phi = \lambda/\nu_1$	標本	$\sqrt{b_1}$	b_2	G	D	ψ_1^2	ψ_2^2
	1	0.872*	4.449*	0.802	0.204*	11.721*	19.473
	2	0.207	2.729	0.817	0.126	1.310	10.009
0	3	0.318	2.576	0.820	0.141*	2.413	6.495*
	4	0.266	2.674	0.825	0.144*	0.957	15.521*
	5	0.192	2.420	0.826	0.154*	9.017*	10.787
	1	0.407	4.402*	0.790	0.060	0.103	0.848
	2	−0.094	2.897	0.802	0.085	1.706	1.736
10	3	−0.070	2.606	0.804	0.089	2.140	2.948
	4	−0.010	2.681	0.797	0.075	0.115	0.652
	5	0.240	4.022	0.775	0.097	2.370	2.880
	1	−0.147	3.100	0.815	0.084	0.530	0.824
	2	−0.608*	4.510*	0.733*	0.083	0.110	5.623
20	3	−0.063	2.764	0.816	0.069	0.010	0.618
	4	−0.984*	4.825*	0.762	0.124	0.435	5.477
	5	0.259	2.774	0.804	0.111	1.808	2.557
	1	0.117	3.024	0.793	0.056	0.058	0.160
	2	−0.097	2.663	0.778	0.065	0.012	0.053
30	3	−0.020	2.743	0.799	0.102	1.061	1.088
	4	0.446	3.759	0.777	0.133	4.092*	4.140
	5	−0.273	3.211	0.774	0.133	2.376	5.968
	1	0.025	2.378	0.815	0.096	0.735	4.333
	2	0.153	2.496	0.810	0.053	0.021	0.799
40	3	0.211	2.877	0.801	0.089	0.675	1.244
	4	−0.396	2.726	0.818	0.069	0.017	0.547
	5	0.471*	4.749*	0.760	0.069	0.499	0.689
	1	0.173	2.877	0.792	0.097	2.355	2.632
	2	−0.030	2.991	0.776	0.124	2.784	2.891
50	3	0.290	3.453	0.753*	0.109	1.652	2.148
	4	−0.104	2.627	0.796	0.060	0.044	0.481
	5	−0.519*	3.344	0.783	0.083	0.613	0.654
	1	−0.032	2.401	0.828	0.114	2.648	5.700
	2	−0.147	2.432	0.828	0.067	0.012	0.146
70	3	0.360	2.721	0.820	0.092	0.818	1.701
	4	−0.013	2.791	0.794	0.061	0.384	0.471
	5	0.043	3.123	0.780	0.072	0.070	0.458
	1	0.340	3.240	0.784	0.041	0.047	0.428
	2	0.258	2.490	0.838	0.082	0.000	2.076
100	3	−0.037	2.952	0.821	0.081	0.113	3.484
	4	0.039	3.075	0.786	0.059	0.117	1.125
	5	0.177	2.188*	0.838	0.094	0.796	2.042

4.2 非心度の比較

自由度 (ν_1, ν_2) の 2 つの独立な非心 F 統計量 F_1，F_2 を考える。それぞれの非心度を λ_1，λ_2 とする。本節で，帰無仮説

$$H_0\colon \lambda_1 = \lambda_2$$

に関する検定を考える。

4.2.1 変数変換を用いる方法

F_1，F_2 に (4.1.28) 式の変換 $\tilde{g}$ をほどこすと，4.1 節で述べたように，

$$\tilde{g}(F_1) \sim N\left(\tilde{g}\left(1 + \frac{\lambda_1}{\nu_1}\right) + \frac{3}{3\nu_2 - 1},\ \frac{2}{\nu_2 - 1}\right) \tag{4.2.1}$$

$$\tilde{g}(F_2) \sim N\left(\tilde{g}\left(1 + \frac{\lambda_2}{\nu_1}\right) + \frac{3}{3\nu_2 - 1},\ \frac{2}{\nu_2 - 1}\right) \tag{4.2.2}$$

と近似することができる。したがって，帰無仮説

$$H_0\colon \lambda_1 = \lambda_2 \tag{4.2.3}$$

のもとで，

$$\tilde{g}(F_1) - \tilde{g}(F_2) \sim N\left(0,\ \frac{4}{\nu_2 - 1}\right) \tag{4.2.4}$$

となる。

両側対立仮説

$$H_1\colon \lambda_1 \neq \lambda_2 \tag{4.2.5}$$

に対しては

$$\left|\tilde{g}(F_1) - \tilde{g}(F_2)\right| > u_{\alpha/2}\sqrt{\frac{4}{\nu_2 - 1}} \tag{4.2.6}$$

のときに，帰無仮説 (4.2.3) を棄却すればよい。ただし $u_{\alpha/2}$ は標準正規分布の両側 100α パーセント点である。

$\tilde{g}(1 + \lambda/\nu_1)$ は λ に関する単調増加関数であるから，片側対立仮設

$$H_1\colon \lambda_1 > \lambda_2 \tag{4.2.7}$$

に対しては

$$\tilde{g}(F_1) - \tilde{g}(F_2) > u_{\alpha}\sqrt{\frac{4}{\nu_2 - 1}} \tag{4.2.8}$$

のときに，帰無仮説 (4.2.3) を棄却すればよい。

第 4.1.3 項で示したように，非心度が大きいところで，変換統計量 $\tilde{g}(F)$ の歪度，尖度ともに正の値をとる。したがって，Cornish-Fisher 展開の高次の項を用いて，より精確な検定を行うことができる。すなわち，

$$Z = \frac{\tilde{g}(F_1) - \tilde{g}(F_2)}{\sqrt{\dfrac{4}{\nu_2 - 1}}} \tag{4.2.9}$$

とおくと，Z の歪度は 0，尖度は

$$\frac{1}{2}\,\gamma_4 = \frac{2}{\nu_2}\left\{1 + \frac{1}{\nu_2} + o\Big(\frac{1}{\nu_2}\Big)\right\} \tag{4.2.10}$$

である。Cornish-Fisher 展開の $1/\nu_2$ のオーダーの項まで用いると，

$$\begin{aligned} U &= Z - \frac{1}{24}\,\frac{\gamma_4}{2}\,(Z^3 - 3Z) \\ &= Z - \frac{1}{12\,\nu_2}\,(Z^3 - 3Z) \end{aligned} \tag{4.2.11}$$

が得られる。両側検定に対しては

$$|U| > u_{\alpha/2} \tag{4.2.12}$$

のときに，片側検定に対しては

$$U > u_\alpha \tag{4.2.13}$$

のときに，それぞれ帰無仮説を棄却すればよい。

表 4.2.1 (1) – (4) に，いくつかの自由度について，H_0: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ のもとでの，両側検定の危険率をシミュレーションにより計算した結果を示す。$\phi = \lambda/\nu_1$ の値が 10 くらいから，危険率の値は 5% の近くに安定している。ただし，(4.2.6) 式による検定は危険率が 5% を超える場合の方が多いが，これは，変換統計量の尖度が正であるためである。Cornish-Fisher 展開による修正を行えば，この点は改善されている。

表 4.2.1　(1) シミュレーションによる危険率の計算
（10000 回反復）
帰無仮説が 5% 水準で棄却された回数 /10000

$\nu_1 = 1$

		変数変換を用いる方法		従来の方法
ν_2	$\phi = \lambda/\nu_1$	I	II	
	0	0.0079	0.0074	0.1143
	10	0.0552	0.0535	0.1531
	20	0.0512	0.0496	0.1429
10	30	0.0529	0.0514	0.1099
	40	0.0528	0.0513	0.0945
	50	0.0552	0.0541	0.0898
	70	0.0502	0.0487	0.0735
	100	0.0513	0.0492	0.0649
	0	0.0047	0.0047	0.1349
	10	0.0553	0.0543	0.2321
	20	0.0472	0.0467	0.2273
20	30	0.0526	0.0517	0.1905
	40	0.0502	0.0497	0.1535
	50	0.0501	0.0488	0.1444
	70	0.0541	0.0534	0.1127
	100	0.0566	0.0559	0.0931
	0	0.0036	0.0036	0.1574
	10	0.0490	0.0487	0.3279
	20	0.0519	0.0516	0.3451
40	30	0.0535	0.0530	0.2886
	40	0.0478	0.0476	0.2474
	50	0.0488	0.0479	0.2103
	70	0.0509	0.0505	0.1758
	100	0.0503	0.0499	0.1408

I:　標準偏差で規準化しただけのもの

II:　Cornish-Fisher 展開を用いて修正したもの

表 4.2.1　(2) シミュレーションによる危険率の計算

$\nu_1 = 2$

		変数変換を用いる方法		従来の方法
ν_2	$\phi = \lambda/\nu_1$	I	II	
	0	0.0103	0.0098	0.0884
	10	0.0512	0.0500	0.1158
	20	0.0511	0.0494	0.0916
10	30	0.0498	0.0483	0.0780
	40	0.0526	0.0505	0.0700
	50	0.0518	0.0507	0.0644
	70	0.0467	0.0455	0.0592
	100	0.0487	0.0463	0.0566
	0	0.0071	0.0070	0.1186
	10	0.0497	0.0490	0.1971
	20	0.0492	0.0480	0.1506
20	30	0.0552	0.0548	0.1177
	40	0.0521	0.0511	0.1021
	50	0.0476	0.0470	0.0953
	70	0.0521	0.0516	0.0769
	100	0.0500	0.0494	0.0713
	0	0.0047	0.0046	0.1368
	10	0.0466	0.0463	0.3018
	20	0.0503	0.0498	0.2376
40	30	0.0494	0.0489	0.1891
	40	0.0448	0.0444	0.1573
	50	0.0511	0.0505	0.1365
	70	0.0485	0.0481	0.1103
	100	0.0490	0.0489	0.0965

表 4.2.1　(3) シミュレーションによる危険率の計算

$\nu_1 = 5$

		変数変換を用いる方法		従来の方法
ν_2	$\phi = \lambda/\nu_1$	I	II	
10	0	0.0144	0.0139	0.0650
	10	0.0508	0.0490	0.0759
	20	0.0511	0.0482	0.0657
	30	0.0469	0.0458	0.0565
	40	0.0510	0.0496	0.0547
	50	0.0518	0.0508	0.0512
	70	0.0517	0.0496	0.0522
	100	0.0518	0.0508	0.0481
20	0	0.0098	0.0096	0.0851
	10	0.0468	0.0462	0.1175
	20	0.0534	0.0522	0.0927
	30	0.0497	0.0489	0.0740
	40	0.0474	0.0465	0.0693
	50	0.0506	0.0496	0.0610
	70	0.0501	0.0496	0.0610
	100	0.0536	0.0530	0.0525
40	0	0.0071	0.0071	0.1062
	10	0.0487	0.0484	0.1863
	20	0.0516	0.0514	0.1279
	30	0.0476	0.0473	0.1070
	40	0.0528	0.0520	0.0917
	50	0.0491	0.0490	0.0873
	70	0.0490	0.0486	0.0757
	100	0.0482	0.0478	0.0698

表 4.2.1　(4) シミュレーションによる危険率の計算

$\nu_1 = 10$

		変数変換を用いる方法		従来の方法
ν_2	$\phi = \lambda/\nu_1$	I	II	
10	0	0.0221	0.0218	0.0476
	10	0.0520	0.0511	0.0638
	20	0.0558	0.0538	0.0546
	30	0.0504	0.0494	0.0520
	40	0.0500	0.0472	0.0506
	50	0.0504	0.0492	0.0492
	70	0.0517	0.0499	0.0507
	100	0.0489	0.0468	0.0460
20	0	0.0130	0.0128	0.0640
	10	0.0504	0.0494	0.0820
	20	0.0514	0.0510	0.0644
	30	0.0529	0.0520	0.0641
	40	0.0525	0.0519	0.0577
	50	0.0484	0.0479	0.0564
	70	0.0509	0.0502	0.0571
	100	0.0538	0.0527	0.0525
40	0	0.0105	0.0104	0.0819
	10	0.0457	0.0453	0.1235
	20	0.0470	0.0466	0.0927
	30	0.0522	0.0518	0.0777
	40	0.0495	0.0492	0.0733
	50	0.0512	0.0508	0.0673
	70	0.0517	0.0510	0.0643
	100	0.0532	0.0527	0.0578

4.2.2 従来の方法

ここで，従来用いられている方法[3]について検討する。

F を自由度 ν_1，ν_2，非心度 λ の非心 F 統計量とする。λ の点推定量 $\hat{\lambda}$，信頼区間 $\hat{\lambda}_L \leqq \lambda \leqq \hat{\lambda}_U$ を次式により計算する。

$$\hat{\lambda} = \nu_1 (F - 1), \tag{4.2.14}$$

$$\hat{\lambda}_L = \nu_1 \left\{ \frac{F}{F(f, \nu_2; \alpha/2)} - 1 \right\}, \tag{4.2.15}$$

$$\hat{\lambda}_U = \nu_1 \left\{ F \times F(\nu_2, f; \alpha/2) - 1 \right\} \tag{4.2.16}$$

ただし，$F(f, \nu_2; \alpha/2)$ は，自由度 f，ν_2 の F 分布の上側 $100 \cdot \alpha/2$ パーセント点であり，f としては，

$$f = \nu_1 F^2 \tag{4.2.17}$$

を用いる。推定量 (4.2.14)，(4.2.15)，(4.2.16) の性質については，第 4.4 節でふれる。

F_1，F_2 を前項と同じように，自由度が ν_1，ν_2 で，非心度がそれぞれ λ_1，λ_2 の非心 F 分布に従う統計量であるとする。λ_1，λ_2 の点推定量 $\hat{\lambda}_1$，$\hat{\lambda}_2$，区間推定量 $[\hat{\lambda}_{1L}, \hat{\lambda}_{1U}]$，$[\hat{\lambda}_{2L}, \hat{\lambda}_{2U}]$ を (4.2.14) ∼ (4.2.16) 式を用いて計算し，その対数を

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_1 &= \log\, \hat{\lambda}_1 \\ \hat{\eta}_{1L} &= \log\, \hat{\lambda}_{1L} \\ \hat{\eta}_{1U} &= \log\, \hat{\lambda}_{1U} \\ \hat{\eta}_2 &= \log\, \hat{\lambda}_2 \\ \hat{\eta}_{2L} &= \log\, \hat{\lambda}_{2L} \\ \hat{\eta}_{2U} &= \log\, \hat{\lambda}_{2U} \end{aligned} \tag{4.2.18}$$

とする。

いま，仮に $\hat{\eta}_1 < \hat{\eta}_2$ とする。このとき

$$\begin{aligned} d_1 &= \hat{\eta}_{1U} - \hat{\eta}_1 \\ d_2 &= \hat{\eta}_2 - \hat{\eta}_{2L} \end{aligned} \tag{4.2.19}$$

を計算し，

$$\hat{\eta}_2 - \hat{\eta}_1 > \sqrt{d_1^2 + d_2^2}$$

が成り立てば，帰無仮説 $H_0\colon \lambda_1 = \lambda_2$ を棄却する。

前掲の表 4.2.1 (1) – (4) に，この方法による危険率をシミュレーションにより計算した結果を示す。危険率は 5% よりかなり高くなっている。これは，(4.2.15) 式，(4.2.16) 式による信頼区間が狭いためである。さらに，従来の方法だと，危険率が未知の値 λ に依存して変化している。

4.2.3 いくつかの非心度に関する比較

2 つの非心度に関する，第 4.2.1 項で述べた変数変換を用いる検定は，そのまま，3 つ以上の非心度に関する比較の問題に拡張できる。

F_i $(i = 1, \cdots, p)$ が，自由度 ν_1，ν_2，非心度 λ_i の非心 F 分布に従う p 個の統計量であるとする。各 F_i に，(4.1.28) 式の変換をほどこすと，ϕ_i $(= \lambda_i/\nu_1)$ が大きいところで，

$$\tilde{g}(F_i) \sim N\left(\tilde{g}\left(1 + \frac{\lambda_i}{\nu_1}\right) + \frac{3}{3\nu_2 - 1},\ \frac{2}{\nu_2 - 1}\right) \tag{4.2.20}$$

が成り立つ。したがって，正規統計量に対する多重比較の手法がそのまま適用できる。ここでは，そのいくつかについて述べる。

(1) 非心度の一様性の検定

帰無仮説

$$H_0\colon \lambda_1 = \cdots = \lambda_p \tag{4.2.21}$$

に対しては

$$\sum_{i=1}^{p} \left(\tilde{g}(F_i) - \bar{\tilde{g}}\right)^2 > \frac{2}{\nu_2 - 1} \cdot \chi^2(p-1; \alpha) \tag{4.2.22}$$

のときに帰無仮説 (4.2.21) を棄却すればよい。ただし

$$\bar{\tilde{g}} = \sum \tilde{g}(F_i) \ / \ p \tag{4.2.23}$$

であり，$\chi^2(p-1;\alpha)$ は，自由度 $p-1$ の χ^2 分布の上側 100α パーセント点である。

あるいは，p 個の標準正規確率変数の範囲の分布の上側 100α パーセント点を $q(p,\infty;\alpha)$ として

$$\max_{i,j} \left|\tilde{g}(F_i) - \tilde{g}(F_j)\right| > \sqrt{\frac{2}{\nu_2 - 1}} \cdot q(p, \infty; \alpha) \tag{4.2.24}$$

のときに帰無仮説 (4.2.21) を棄却することにしてもよい。この方法は，非心度の対比較に関しても適用できる。すなわち，$\binom{p}{2}$ とおりの対のうち，

$$\left|\tilde{g}(F_i) - \tilde{g}(F_j)\right| > \sqrt{\frac{2}{\nu_2 - 1}} \cdot q(p, \infty; \alpha) \tag{4.2.25}$$

が成り立つ対については $\lambda_i = \lambda_j$ を棄却する。

(2) 対照との比較

p 個の計測法のうちの 1 つ，たとえば第 1 番めは対照となる計測法であり，他の $p-1$ 個の計測法は，対照との比較についてのみ興味がある場合は，Dunnett の方法 [16)] が使える。

両側検定では

$$\left|\tilde{g}(F_i) - \tilde{g}(F_1)\right| > \sqrt{\frac{4}{\nu_2 - 1}}\, d''(p-1, \infty; \alpha) \quad (i = 2, \cdots, p) \tag{4.2.26}$$

のときに，$\lambda_i = \lambda_1$ を棄却し，$\lambda_i \neq \lambda_1$ を採択する。

片側検定では

$$\tilde{g}(F_i) - \tilde{g}(F_1) > \sqrt{\frac{4}{\nu_2 - 1}}\, d'(p-1, \infty; \alpha) \quad (i = 2, \cdots, p) \tag{4.2.27}$$

のときに，$\lambda_i = \lambda_1$ を棄却し，$\lambda_i > \lambda_1$ を採択する。

ここで，$d''(p-1, \infty; \alpha)$，$d'(p-1, \infty; \alpha)$ は，それぞれ，Dunnett の両側，片側検定のための 100α パーセント点である。

4.3 モデルからのずれが検定に与える影響

前節で考察した非心度に関する検定は，誤差分布として，独立な正規分布を仮定している。本節で，その仮定がくずれた場合に，検定へ与える影響について検討する。

4.3.1 非正規性の影響

(1) 校正のときの相対感度の比較

(3.1.1) 式のモデルにおいて，確率変数 ϵ_i は独立に分布し，4 次までのモーメントを持つものとする。その歪度，尖度を γ_3，γ_4 と表す。

$$\begin{aligned} &\mathrm{E}[\epsilon_i] = 0, \\ &\mathrm{V}[\epsilon_i] = \sigma_c^2, \\ &\gamma_3 = \mathrm{E}[\epsilon_i^3]/\sigma_c^3, \\ &\gamma_4 = \mathrm{E}[\epsilon_i^4]/\sigma_c^4 - 3 \end{aligned} \tag{4.3.1}$$

回帰の平方和 S_R，誤差平方和 S_e

$$S_R = \hat{\beta}^2\, S_{xx}, \tag{4.3.2}$$

$$S_e = \sum (y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}\, x_i)^2 \tag{4.3.3}$$

に関して，期待値，分散，共分散は，

$$\begin{aligned} &\mathrm{E}[S_R/\sigma_c^2] = 1 + \frac{\beta^2\, S_{xx}}{\sigma_c^2} = 1 + \lambda, \\ &\mathrm{V}[S_R/\sigma_c^2] = 2 + 4\,\lambda + 4\,\frac{\beta\,\sqrt{S_{xx}}}{\sigma_c}\,\frac{\xi_3\,\gamma_3}{\sqrt{n}} + \frac{1}{n}\,\xi_4\,\gamma_4 \\ &\mathrm{E}[S_e/\sigma_c^2] = n - 2 = \nu_2, \\ &\mathrm{V}[S_e/\sigma_c^2] = 2\,\nu_2 + \gamma_4 \left\{(n-3)\left(1 - \frac{1}{n}\right) + \frac{\xi_4}{n}\right\}, \\ &\mathrm{Cov}\left[\frac{S_R}{\sigma_c^2}, \frac{S_e}{\sigma_c^2}\right] = -2\,\frac{\beta\,\sqrt{S_{xx}}}{\sigma_c}\,\frac{\xi_3\,\gamma_3}{\sqrt{n}} + \gamma_4\left(1 - \frac{1}{n} - \frac{\xi_4}{n}\right) \end{aligned} \tag{4.3.4}$$

で与えられる。

ここで，(4.1.26) 式による変換

$$g\left(\frac{S_R}{S_e}\right) = \ln\left(\frac{S_R}{S_e} + 1 + \sqrt{\left(\frac{S_R}{S_e}\right)^2 + 2\,\frac{S_R}{S_e}}\right) \tag{4.3.5}$$

を考える。

$$\mathrm{V}\left[\frac{S_R}{\sigma_c^2\,(1+\lambda)}\right] = \frac{1}{(1+\lambda)^2}\,\mathrm{V}\left[\frac{S_R}{\sigma_c^2}\right] \to 0 \quad (\lambda \to \infty) \tag{4.3.6}$$

であるから，4.1.3 項の議論と全く同様にして，

$$g(S_R/S_e) - g\big((1+\lambda)/\nu_2\big) \tag{4.3.7}$$

は，$\lambda \to \infty$ のときに

$$-\ln\big(S_e/\nu_2\,\sigma_c^2\big) \tag{4.3.8}$$

に法則収束する。したがって，

$$\begin{aligned} \tilde{g}(F) &= \ln\left(F + \frac{\nu_2}{\nu_1} + \sqrt{F^2 + 2\,\frac{\nu_2}{\nu_1}\,F}\right) \\ &= g\left(\frac{S_R}{S_e}\right) - \ln(\nu_1/\nu_2), \\ &\qquad\quad F = \frac{S_R/\nu_1}{S_e/\nu_2}, \\ &\qquad\quad \nu_1 = 1 \end{aligned} \tag{4.3.9}$$

の分散は，$\lambda \to \infty$ の極限において

$$\mathrm{V}[\tilde{g}(F)] = \frac{1}{\nu_2}\,(2+\gamma_4) + O\left(\frac{1}{\nu_2^2}\right) \tag{4.3.10}$$

と表される。

$\gamma_4 > 0$ の場合は，正規分布の場合よりも分散が大きくなる。したがって，正規分布を仮定して，水準 α の検定を行うと，実際には，帰無仮説を棄却する危険率は，α より高くなる。

(2) 未知試料測定のときの相対感度の比較

(3.2.1) 式のモデルにおいて，誤差 ϵ'_{ij} は，互いに独立に同じ分布に従い，そのモーメントが

$$\begin{aligned} &\mathrm{E}[\epsilon'_{ij}] = 0 \\ &\mathrm{V}[\epsilon'_{ij}] = \sigma_a^2 \\ &\mathrm{E}[{\epsilon'_{ij}}^3]/\sigma_a^3 = \gamma'_3 \\ &\mathrm{E}[{\epsilon'_{ij}}^4]/\sigma_a^4 - 3 = \gamma'_4 \end{aligned} \tag{4.3.11}$$

であるとする。

表 3.2.1 における試料間平方和 S_A，誤差平方和 S_e，

$$S_A = r \sum (\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2, \tag{4.3.12}$$
$$S_e = \sum (y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2 \tag{4.3.13}$$

の期待値，分散，共分散は，

$$\begin{aligned}
&\mathrm{E}[S_A/\sigma_a^2] = m - 1 + \frac{r\,S_{xx}\,\beta^2}{\sigma_a^2} = \nu_1 + \lambda, \\
&\mathrm{V}[S_A/\sigma_a^2] = 2\nu_1 + 4\lambda + \frac{(m-1)^2}{r\,m}\,\gamma_4', \\
&\mathrm{E}[S_e/\sigma_a^2] = m\,(r-1) = \nu_2, \\
&\mathrm{V}[S_e/\sigma_a^2] = 2\nu_2 + \frac{m\,(r-1)^2}{r}\,\gamma_4', \\
&\mathrm{Cov}[S_A/\sigma_a^2,\ S_e/\sigma_a^2] = \frac{(r-1)\,(m-1)}{r}\,\gamma_4'
\end{aligned} \tag{4.3.14}$$

である。この場合にも

$$\mathrm{V}[S_A/\sigma_a^2\,(\nu_1 + \lambda)] \to 0 \quad (\lambda \to \infty) \tag{4.3.15}$$

であるから，全く同様の議論によって

$$\tilde{g}(F) = \ln\left(F + \frac{\nu_2}{\nu_1} + \sqrt{F^2 + 2\,\frac{\nu_2}{\nu_1}\,F}\right), \qquad F = \frac{S_A/\nu_1}{S_e/\nu_2} \tag{4.3.16}$$

の分散は，$\lambda \to \infty$ の極限において

$$\mathrm{V}[\tilde{g}(F)] = \frac{1}{\nu_2}\left(2 + \frac{r-1}{r}\,\gamma_4'\right) + O\left(\frac{1}{\nu_2^2}\right) \tag{4.3.17}$$

と表される。

検定における尖度 γ_4' の影響についても，校正のときの相対感度 β^2/σ_c^2 の比較の場合と同様である。

4.3.2 相関の影響

(1) 校正のときの相対感度の比較

(3.1.1) 式のモデルにおいて，誤差 ϵ_i は，互いに独立に，相等しい相関を持つ正規分布に従うものとする。すなわち

$$\begin{aligned}
&\mathrm{E}[\epsilon_i] = 0, \\
&\mathrm{V}[\epsilon_i] = \sigma_c^2, \\
&\mathrm{Cov}[\epsilon_i,\ \epsilon_{i'}] = \sigma_c^2\,\rho_c \quad (i \neq i')
\end{aligned} \tag{4.3.18}$$

であるとする。

このとき，回帰の平方和 S_R，誤差平方和 S_e は，

$$\begin{aligned} &S_R \sim \sigma_c^2\,(1-\rho_c)\,\chi^2(1,\lambda), \\ &S_e \sim \sigma_c^2\,(1-\rho_c)\,\chi^2(n-2) \end{aligned} \tag{4.3.19}$$

の分布に従う。ただし，非心度 λ は

$$\lambda = \frac{\beta^2}{\sigma_c^2\,(1-\rho_c)}\,S_{xx} \tag{4.3.20}$$

である。

非心 F 統計量

$$\begin{aligned} F &= \frac{S_R/\nu_1}{S_e/\nu_2}, \\ \nu_1 &= 1 \end{aligned} \tag{4.3.21}$$

の変数変換

$$\tilde{g}(F) = \ln\left(F + \frac{\nu_2}{\nu_1} + \sqrt{F^2 + 2\,\frac{\nu_2}{\nu_1}\,F}\right), \tag{4.3.22}$$

については，近似的に

$$\tilde{g}(F) \sim N\!\left(\tilde{g}\left(1+\frac{\lambda}{\nu_1}\right) + \frac{3}{3\,\nu_2-1},\ \frac{2}{\nu_2-1}\right) \tag{4.3.23}$$

が成り立つ。

相関係数 ρ_c が，異なる計測法間においても等しいならば，非心度に関する比較と，相対感度 β^2/σ_c^2 に関する比較とは同等である。

しかし，実際には，計測法が異なれば，相関係数 ρ_c も異なると思われる。この場合には，相対感度の比較の問題を，非心度の比較の問題に帰着することはできない。したがって，第 3 章で述べた相対感度を比較するための実験においては，誤差が相関を持たないようにすることが重要である。

(2) 未知試料測定のときの相対感度の比較

(3.2.1) 式のモデルにおいて，誤差 ϵ'_{ij} が，互いに相等しい相関を持つものとする。

$$\begin{aligned} &\mathrm{E}[\epsilon_{ij}] = 0, \\ &\mathrm{V}[\epsilon_{ij}] = \sigma_a^2, \\ &\mathrm{Cov}[\epsilon_{ij},\ \epsilon_{i'j'}] = \sigma_a^2\,\rho_a \end{aligned} \tag{4.3.24}$$

試料間平方和 S_A，誤差平方和 S_e は，

$$\begin{aligned} &S_A \sim \sigma_a^2\,(1-\rho_a)\,\chi^2(m-1,\lambda), \\ &S_e \sim \sigma_a^2\,(1-\rho_a)\,\chi^2(m\,(r-1)) \end{aligned} \tag{4.3.25}$$

の分布に従う。非心度 λ は

$$\lambda = \frac{r\,\beta^2}{\sigma_a^2\,(1-\rho_a)}\,S_{xx} \tag{4.3.26}$$

である。この値は，相関係数 ρ_a に依存するので，校正のときの相対感度 β^2/σ_c^2 の比較の場合と同じ注意が，この場合にも当てはまる。

4.4 非心度の推定

4.4.1 非心度の点推定

校正のときの相対感度 β^2/σ_c^2 に関する実験の分散分析表（表 3.1.1）において，非心度は，

$$\lambda = \frac{\nu_1\, S_{xx}\, \beta^2}{\sigma_c^2} \tag{4.4.1}$$

であった。この分子，分母にそれぞれ不偏推定量を代入して

$$\hat{\lambda}' = \nu_1 \frac{V_R - V_e}{V_e} = \nu_1\,(F-1) \tag{4.4.2}$$

が非心度の推定量として従来は用いられている [3)]。未知試料測定時の相対感度 β^2/σ_a^2 に関する実験においても同様に，非心度

$$\lambda = \nu_1 \frac{r\, \kappa_A^2}{\sigma_a^2} \tag{4.4.3}$$

の分子，分母にそれぞれの不偏推定量を代入すると，

$$\hat{\lambda}' = \nu_1 \frac{V_A - V_e}{V_e} = \nu_1\,(F-1) \tag{4.4.4}$$

となる。

一方，自由度 ν_1，ν_2，非心度 λ の非心 F 分布に従う統計量 F の期待値は

$$\mathrm{E}[F] = \frac{\nu_2\,(\nu_1+\lambda)}{\nu_1\,(\nu_2-2)} \tag{4.4.5}$$

である。これを λ に関して解いて，

$$\hat{\lambda} = \nu_1 \left(\frac{\nu_2-2}{\nu_2}\, F - 1\right) \tag{4.4.6}$$

が λ の不偏推定量として得られる。これは，完備十分統計量にもとづく不偏推定量であるから，最小分散不偏推定量である。

従来の推定量 (4.4.2)，(4.4.4) は，不偏推定量を拡大したものであるから，偏りがあり，分散も大きくなっている。

4.4.2 非心度の信頼区間

前項と同様に，自由度 ν_1，ν_2，非心度 λ の非心 F 分布に従う統計量を F とする。非心度 λ の信頼率 $1-\alpha$ の信頼区間 $[\hat{\lambda}_L,\ \hat{\lambda}_U]$ を考える。

(1) 正確な信頼区間

自由度 ν_1，ν_2，非心度 λ の非心 F 分布の上側 100α パーセント点を $F(\nu_1,\nu_2,\lambda;\alpha)$ として，

$$\begin{aligned} &F(\nu_1,\nu_2,\hat{\lambda}_L;\alpha/2) = F, \\ &F(\nu_1,\nu_2,\hat{\lambda}_U;1-\alpha/2) = F \end{aligned} \tag{4.4.7}$$

を $\hat{\lambda}_L$，$\hat{\lambda}_U$ に関して解けば，信頼率 $1-\alpha$ の信頼区間 $[\hat{\lambda}_L,\ \hat{\lambda}_U]$ が求まる。

次に，実用的な見地から，信頼区間を求めるためのいくつかの近似的な方法について考える。

(2) Patnaik の近似

自由度 ν_1，非心度 λ の非心 χ^2 分布に従う確率変数を X_1 とする。

$$c = \frac{\nu_1 + 2\,\lambda}{\nu_1 + \lambda} \tag{4.4.8}$$

$$f = \frac{(\nu_1 + \lambda)^2}{\nu_1 + 2\,\lambda} \tag{4.4.9}$$

とおくと，X_1/c が自由度 f の χ^2 分布で近似できる。したがって

$$\frac{\nu_1}{c\,f}\,F = \frac{\nu_1}{\nu_1 + \lambda}\,F \tag{4.4.10}$$

が近似的に自由度 f，ν_2 の F 分布に従う [17)]。これより

$$\Pr\left\{\frac{1}{F(\nu_2, f; \alpha/2)} \leqq \frac{\nu_1}{\nu_1 + \lambda}\,F \leqq F(f, \nu_2; \alpha/2)\right\} \fallingdotseq 1 - \alpha \tag{4.4.11}$$

が成り立つ。これを λ に関して解くと，

$$\Pr\left\{\nu_1\left(\frac{F}{F(f, \nu_2; \alpha/2)} - 1\right) \leqq \lambda \leqq \nu_1\left(F \times F(\nu_2, f; \alpha/2) - 1\right)\right\}$$
$$\fallingdotseq 1 - \alpha \tag{4.4.12}$$

が得られる。ただし，(4.4.12) 式における F 分布のパーセント点で，自由度 f は未知パラメータ λ に依存している。したがって，(4.4.12) 式において，連立方程式

$$\nu_1\left(\frac{F}{F(f, \nu_2; \alpha/2)} - 1\right) = \lambda \tag{4.4.13}$$

$$f = \frac{(\nu_1 + \lambda)^2}{\nu_1 + 2\,\lambda} \tag{4.4.9}$$

を解くことによって，信頼下限 $\hat{\lambda}_L$ を求めることができる。信頼上限 $\hat{\lambda}_U$ についても同様である。

(4.4.12) 式において，f として $\nu_1 \times F^2$ を用いるのが従来のやり方 [3)] である。これは f の値を大きく見積っていることになり，そのため信頼区間は狭くなる。

(3) Paulson の近似

Patnaik の近似と，F 分布に対する Paulson の近似 [18)] を組みあわせると

$$u = \frac{\left(1 - \dfrac{2}{9\,\nu_2}\right)\left(\dfrac{\nu_1}{\nu_1 + \lambda}\,F\right)^{\frac{1}{3}} - \left(1 - \dfrac{2}{9\,f}\right)}{\sqrt{\dfrac{2}{9\,\nu_2}\left(\dfrac{\nu_1}{\nu_1 + \lambda}\,F\right)^{\frac{2}{3}} + \dfrac{2}{9\,f}}} \tag{4.4.14}$$

が標準正規分布で近似できる。したがって，(4.4.14) 式の右辺を $\pm u_{\alpha/2}$ とおいて λ に関して解くことによって，λ の信頼限界を得ることができる。$u_{\alpha/2}$ は標準正規分布の両側 100α パーセント点である。

(4) 平方根近似

χ^2 分布の平方根が正規分布により近似できることを用いると

$$u = \frac{\sqrt{F\left(1 - \dfrac{1}{2\,\nu_2}\right)} - \sqrt{c\left(\dfrac{f}{\nu_1} - \dfrac{1}{2\,\nu_1}\right)}}{\sqrt{\dfrac{1}{2\,\nu_2}\,F + \dfrac{c}{2\,\nu_1}}} \tag{4.4.15}$$

が標準正規分布により近似できる [19)]。Paulson の近時の場合と同様に (4.4.15) 式の右辺を $\pm u_{\alpha/2}$ とおいて λ に関して解けば λ の信頼限界が得られる。

(5) 変数変換を用いる方法

以上までに述べた 3 つの近似的な方法は，最初の非心 F 分布の確率を計算する場合よりは簡単ではあるが，解析的に解くことはできず，反復計算が必要である。

ここで，第 4.1 節で述べた変数変換を用いる方法を考える。これは解析的に解くことができる。

自由度 ν_1，ν_2，非心度 λ の非心 F 統計量 F に (4.1.28) 式の変換

$$\tilde{g}(F) = \ln\left(F + \frac{\nu_2}{\nu_1} + \sqrt{F^2 + 2\,\frac{\nu_2}{\nu_1}\,F}\right) \tag{4.4.16}$$

をほどこすと，近似的に

$$\tilde{g}(F) \sim N\left(\tilde{g}\left(1 + \frac{\lambda}{\nu_1}\right) + \frac{3}{3\,\nu_2 - 1},\ \frac{2}{\nu_2 - 1}\right) \tag{4.4.17}$$

である。したがって，

$$z = \frac{\tilde{g}(F) - \tilde{g}\left(1 + \dfrac{\lambda}{\nu_1}\right) - \dfrac{3}{3\,\nu_2 - 1}}{\sqrt{\dfrac{2}{\nu_2 - 1}}} \tag{4.4.18}$$

は標準正規分布で近似できる。(4.4.18) 式の右辺を $u_{\alpha/2}$ とおいて λ に関して解けば，信頼下限 $\hat{\lambda}_L$ を求めることができる。これは容易に計算することができて

$$\hat{\lambda}_L = \nu_1 \left\{\frac{1}{2\,c}\left(\frac{\nu_2}{\nu_1} - c\right)^2 - 1\right\} \tag{4.4.19}$$

により与えられる。ここで

$$c = \exp\left\{\tilde{g}(F) - \frac{3}{3\,\nu_2 - 1} - u_{\alpha/2}\sqrt{\frac{2}{\nu_2 - 1}}\right\} \tag{4.4.20}$$

である。

ν_2 がそれほど大きくない場合には，$u_{\alpha/2}$ のかわりに，Cornish-Fisher 展開により

$$u'_{\alpha/2} = u_{\alpha/2} + \frac{1}{6}\sqrt{\frac{1}{\nu_2}}\,(u_{\alpha/2}^2 - 1), \tag{4.4.21}$$

$$u''_{\alpha/2} = u_{\alpha/2} + \frac{1}{6}\sqrt{\frac{1}{\nu_2}}\,(u_{\alpha/2}^2 - 1) + \frac{1}{18\,\nu_2}\,(u_{\alpha/2}^3 - 4\,u_{\alpha/2}) \tag{4.4.22}$$

等を用いれば精度はさらによくなる。

以上の議論において，$u_{\alpha/2}$ のかわりに $-u_{\alpha/2}$ を用いれば (4.4.19) 式より信頼上限 $\hat{\lambda}_U$ が求まる。

(6) 数値例による検討

表 4.4.1 に, 本節で述べた方法を用いて信頼区間を計算した結果を示す。ここでは, $\nu_1 = 5$, $\nu_2 = 20$ として，F が与えられたときの信頼限界を計算した。

観測値 F の広い範囲にわたって，Patnaik の近似と，Paulson の近似は良い結果を与えている。

平方根近似は，F の小さいところでは良い近似を与えるが，F が大きくなるに従って精度は悪くなる。

逆に，変数変換を用いるものは，F の値が小さいところでは近似が悪いが，F が大きいところでは良い近似を与える。計測法に関する実験では，F の値は大きくなるので，変数変換による近似は十分，実用的である。

表 4.4.1　信頼区間の計算
F が与えられたときの $\phi = \lambda/\nu_1$ の 95% の信頼限界を与える。

$\nu_1 = 5$, $\nu_2 = 20$　　上側の値: 信頼下限，下側の値: 信頼上限

F	正確な区間	変数変換を用いる方法 I	II	III	従来の方法	Patnaik の近似	Paulson の近似	平方根近似
2	0	0	0	0	0	0	0	0
	4.67	4.53	4.13	4.13	3.93	4.49	4.50	4.66
5	0.59	0.41	0.27	0.27	1.32	0.58	0.58	0.59
	10.21	10.42	9.72	9.72	8.10	10.07	10.07	10.15
10	2.67	2.59	2.30	2.30	3.76	2.65	2.64	2.59
	18.98	19.68	18.53	18.52	16.36	18.88	18.88	18.82
20	7.23	7.39	6.84	6.85	8.57	7.21	7.20	6.98
	36.21	37.82	35.80	35.79	33.30	36.15	36.15	35.83
50	21.44	22.31	21.03	21.04	22.97	21.43	21.40	20.59
	87.58	91.82	87.23	87.21	84.46	87.55	87.55	86.46
100	45.35	47.41	44.93	44.94	46.96	45.35	45.27	43.49
	173.05	181.63	172.78	172.73	169.83	173.02	173.03	170.66
200	93.26	97.69	92.83	92.85	94.92	93.30	93.11	89.36
	343.92	361.17	343.80	343.70	340.61	343.85	343.92	338.99
500	237.09	248.63	236.61	236.67	238.81	237.18	236.71	227.05
	856.50	899.71	856.80	856.56	853.01	856.27	856.51	843.92
1000	476.84	500.23	476.27	476.41	478.62	476.98	476.08	456.57
	1710.77	1797.25	1711.78	1711.30	1707.00	1710.28	1710.80	1685.44

I　: 期待値と標準偏差を用いて正規近似したもの
II　: 歪度を用いて修正したもの
III : 歪度，尖度を用いて修正したもの

第 5 章　適用例

前章までに述べた非心度に関する比較のための手法の適用例として，本章で，3 台の原子吸光分析装置の性能の比較について考える。

第 2 章，例 1 で述べたように，原子吸光法による溶液中の金属成分の濃度の計測は，溶液中の金属濃度と吸光度との間に直線関係が成り立つという原理を利用している。

本章では，溶液中の鉄濃度の計測を対象とする。

(1) 校正のときの相対感度の比較

まず，校正直線作成のときの相対感度 β^2/σ_c^2 を比較するために，3.1 節で述べたように，値が既知の標準試料を 5 つ用意する。ここでは，モデルの直線性からのずれの検定も行えるように，それぞれの装置で，同一試料について 4 回ずつの繰り返し測定を行った。その結果を表 5.1 に示す。装置 M_1，M_3 については，記録紙上にペンで書かれた値を読みとったものである。装置 M_2 では，吸光度が直接表示される。

表 5.2 (1) – (3) に，各装置ごとの分散分析表を示す。いずれの装置においても，直線性からのずれは有意とはならなかった。したがって，ここで用いた標準試料の範囲内ににおいては，2.2 節で考えたモデルが成り立つものと考えることができる。

3 つの装置の対比較を行うために，第 4 章で提案した変数変換を用いる。そのために，分散分析表から F 値を求める。上述したように，この範囲では直線性が成り立つと思われるので，誤差平方和としては，試料内平方和と，回帰からのずれの平方和をプールしたものを用いた。各 F の値を (4.1.28) 式によって変換すると，

$$
\begin{aligned}
\tilde{g}(F_1) &= 12.196, \\
\tilde{g}(F_2) &= 12.293, \\
\tilde{g}(F_3) &= 12.781
\end{aligned}
$$

となる。

最大と最小との差は

$$\tilde{g}(F_3) - \tilde{g}(F_1) = 0.585$$

である。一方，対比較のための判定基準は，(4.2.25) 式より，10% 水準でも，

$$q(3, \infty; 0.10)\sqrt{\frac{2}{\nu_2 - 1}} = 0.995$$

である。したがって，標準試料の測定においては，3 つの装置の間に差があるとはいえない。

表 5.1　3 台の原子吸光装置による，標準試料溶液中の鉄 (Fe) 濃度測定データ

装置 標準試料	M_1 記録紙の読み (cm)	M_2 吸光度	M_3 記録紙の読み (cm)
2 ppm	1.99	0.023	1.75
	1.94	0.024	1.76
	2.04	0.023	1.77
	1.98	0.023	1.78
5 ppm	4.91	0.058	4.39
	4.73	0.057	4.40
	4.84	0.058	4.38
	4.81	0.059	4.39
10 ppm	9.71	0.116	8.73
	9.53	0.116	8.71
	9.71	0.115	8.79
	9.64	0.116	8.71
15 ppm	14.51	0.172	13.02
	14.40	0.173	13.12
	14.57	0.170	12.95
	14.48	0.172	13.21
20 ppm	19.55	0.228	17.29
	19.23	0.229	17.34
	19.48	0.227	17.30
	19.37	0.227	17.34

表 5.2 (1) 装置 M_1 の分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比
回帰	1	799.04	799.04	9.901×10^{4}
誤差	18	1.4527×10^{-1}	8.0706×10^{-3}	
直線からのずれ	3	0.2839×10^{-1}	9.4630×10^{-3}	1.214
試料内	15	1.1688×10^{-1}	7.7922×10^{-3}	

$\tilde{g}(F_1) = 12.196$

(2) 装置 M_2 の分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比
回帰	1	0.11003	0.11003	1.091×10^{5}
誤差	18	1.8153×10^{-5}	1.0085×10^{-6}	
直線からのずれ	3	0.7149×10^{-5}	2.3829×10^{-6}	3.248
試料内	15	1.1005×10^{-5}	0.7336×10^{-6}	

$\tilde{g}(F_2) = 12.293$

(3) 装置 M_3 の分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比
回帰	1	$6.3773\ 10^{2}$	$6.3773\ 10^{2}$	1.776×10^{5}
誤差	18	6.4621×10^{-2}	3.5901×10^{-3}	
直線からのずれ	3	1.8692×10^{-2}	6.2307×10^{-3}	2.035
試料内	15	4.5929×10^{-2}	3.0619×10^{-2}	

$\tilde{g}(F_3) = 12.781$

(2) 未知試料測定のときの相対感度の比較

次に，実際の土壌抽出溶液中の Fe 濃度の測定における相対感度 β^2/σ_a^2 の比較を行う。そのために，3.2 節でで述べたように，値が未知の実際の試料を 6 つ用意した。各試料に対して，前項と同じ 3 台の分析装置で，それぞれ 4 回ずつの繰り返し測定を行った結果を表 5.3 に示す。

表 5.4 (1) – (3) は，各装置ごとの分散分析表である。各 F の値を (4.1.28) 式によって変換すると

$$
\begin{aligned}
\tilde{g}(F_1) &= 10.160,\\
\tilde{g}(F_2) &= 10.761,\\
\tilde{g}(F_3) &= 9.725
\end{aligned}
$$

が得られる。

対比較のための判定基準は，(4.2.25) 式より，5%，10% の水準に対して，

$$
\begin{aligned}
q(3,\infty;0.05)\sqrt{\frac{2}{18-1}} &= 1.137\\
q(3,\infty;0.10)\sqrt{\frac{2}{18-1}} &= 0.995
\end{aligned}
$$

である。

$$
\tilde{g}(F_2) - \tilde{g}(F_1) = 1.036
$$

であるから，10% の水準で装置 M_2 と M_3 との間には，性能に違いがあるといえる。

(2.6.1) 式からわかるように，推定量の精度は，標準試料の測定回数 n，未知試料の測定回数 k に依存する。もし，n，k が同じであれば，未知試料測定のときの相対感度の良い装置 M_2 が総合的には優れているといえる。

表 5.3　3 台の原子吸光装置による，土壌抽出溶液中の
Fe 濃度測定データ

装置 土壌の種類	M_1 記録紙の読み (cm)	M_2 吸光度	M_3 記録紙の読み (cm)
宝永石	8.93	0.097	7.44
	8.60	0.098	7.65
	8.58	0.099	7.52
	8.72	0.097	7.45
石灰煤	15.04	0.168	12.67
	14.81	0.168	12.40
	14.78	0.166	12.74
	14.98	0.166	12.69
非火山灰	18.19	0.203	15.60
	17.83	0.203	15.35
	18.09	0.203	15.13
	18.07	0.205	15.46
火山灰	12.58	0.144	10.86
	12.65	0.143	10.84
	12.67	0.144	10.60
	12.70	0.143	10.79
蛇紋岩	3.96	0.045	3.19
	4.03	0.046	3.28
	4.09	0.044	3.30
	3.87	0.045	3.22
試料ブランク	0.22	0.001	0.17
	0.30	0.003	0.23
	0.38	0.004	0.32
	0.18	0.002	0.34

表 5.4　(1) 装置 M_1 の分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比
試料間	5	911.71	182.34	12915.0
誤差	18	0.25413	0.014119	

$\tilde{g}(F_1) = 10.160$

(2) 装置 M_2 の分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比
試料間	5	0.11618	0.023236	23563.0
誤差	18	0.17750×10^{-4}	0.98611×10^{-6}	

$\tilde{g}(F_2) = 10.761$

(3) 装置 M_3 の分散分析表

変動因	自由度	平方和	分散	F 比
試料間	5	662.89	132.58	8363.3
誤差	18	0.28534	0.015852	

$\tilde{g}(F_3) = 9.725$

まとめ

本研究の目的は，計測における推定量の性質を明らかにし，次に，複数の計測法間の優劣を正確に行うための統計的手法を求めることであった。得られた結果を要約すると以下のようになる。

(1) まず，本研究においては，測定対象の真の値と観測される代用特性値との間に線形関係のモデルを仮定した。すなわち，標準試料 $x_1, \cdots, x_n$ を用いた校正直線作成のためのデータを

$$y_i = \alpha + \beta\, x_i + \epsilon_i$$

とし，真の値 x_0 が未知の試料に対する測定データを

$$y_{0j} = \alpha + \beta\, x_0 + \epsilon'_j$$

とする。ここで，ϵ_i，ϵ'_j は，期待値が 0 で，分散が，それぞれ σ_c^2，σ_a^2 の確率変数である。

(2) x_0 の推定に関しては，現在もなお，論争が続けられている。第 2 章において，各推定法の性質を明らかにした。

現場では，パラメータ α，β の最小 2 乗推定量 $\hat{\alpha}$，$\hat{\beta}$ を使った回帰直線を利用する方法（古典的推定量）が用いられているが，正規分布の仮定のもとでは，モーメントが存在しない。しかし，$\hat{\beta}$ に関して，t_0 を正の定数として，

$$\left|\ \hat{\beta}\ /\ \sqrt{\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]}\ \right| > t_0$$

という条件のもとで，期待値，分散が存在することを証明した。

さらに，一般化逆回帰推定量

$$\tilde{x}_0 = \bar{x}. + \frac{\hat{\beta}}{\hat{\beta}^2 + c\,\hat{\mathrm{V}}[\hat{\beta}]}\,(\bar{y}_0. - \bar{y}.)$$

について，定数 c をある範囲内にとれば，古典的推定量よりも，平均 2 乗誤差が小さくなることを示した。

次に，いずれの推定法を用いる場合でも，計測法の性質は，2 つの相対感度 β^2/σ_c^2，β^2/σ_a^2 のみに依存し，これらの値が大きい程，推定の精度が良くなることを示した。

(3) いくつかの計測法が存在するときには，相対感度を比較することにより，各計測法の優劣を比較することができる。第 3 章において，相対感度を比較するための実験を述べ，相対感度の比較は，非心 F 分布の非心度を比較する問題と同値であることを示した。

(4) 非心 F 分布の非心度に関する推測については，現在まで，有効な方法は，ほとんど知られていない。本論文において，自由度 (ν_1, ν_2)，非心度 λ の非心 F 分布に従う統計量 F に対して，変数変換

$$\tilde{g}(F) = \ln\Bigl(F + \frac{\nu_2}{\nu_1} + \sqrt{F^2 + 2\,\frac{\nu_2}{\nu_1}\,F}\Bigr)$$

を提案した。$\tilde{g}(F)$ の分布は

$$N\biggl(\tilde{g}\Bigl(1+\frac{\lambda}{\nu_1}\Bigr),\ \frac{2}{\nu_2-1}\biggr)$$

で近似できる。特に，分散の安定性が良く，正規性の近似も実用上十分である。

この変数変換を用いることにより，2 つの非心度が等しいという帰無仮説

$$H_0\colon \lambda_1=\lambda_2$$

は，標準正規分布の上側 $100\,\alpha/2$ パーセント点 $u_{\alpha/2}$ を用いて，

$$\bigl|\ \tilde{g}(F_1)-\tilde{g}(F_2)\ \bigr| > u_{\alpha/2}\sqrt{\frac{2\times 2}{\nu_2-1}}$$

のときに，α の水準で棄却される。

さらに，この変数変換は，3 つ以上の非心度に関して，多重比較の手法を適用する場合に非常に有効である。従来までは，3 つ以上の非心度に対して，多重比較の手法を適用することは不可能であった。

(5) 第 5 章において，土壌抽出中の鉄の定量のための 3 つの原子吸光分析装置の比較に本論文の方法を適用した。3 台の装置は，標準試料の測定に際しては差は認められないが，未知試料の測定においては，多重比較の意味で，10% 水準で有意差があることがわかった。

以上により，本論文の方法は，非心度の比較，計測法の比較に関して有効であり，その適用範囲は広いと思われる。

謝辞

本研究を進めるにあたり，懇篤なる御指導を賜り，また常に激励頂いた奥野忠一教授（現東京理科大学教授），廣津千尋助教授に心から感謝の意を表します。

第 5 章適用例のデータを得るにあたり，多大の御協力を頂いた農業環境技術研究所環境資源部，木方展治技官に厚く感謝いたします。

参考文献

[1] JIS Z 8103 (1978). 計測用語.

[2] 寺尾満 (1966). 工業計測, オーム社.

[3] 日本規格協会 SN 比マニュアル分科会編 (1972). 試験・測定法比較研究のための SN 比マニュアル, 日本規格協会.

[4] JIS K 0121 (1970). 原子吸光分析法通則.

[5] Kendall, M. G. and Stuart, A. (1979). *The Advanced Theory of Statistics*, Vol. 2, London, Griffin.

[6] Williams, E. J. (1969). A Note on Regression Methods in Calibration, *Technometrics*, 11, 189 - 192.

[7] 高木貞治 (1961). 解析概論, 岩波書店.

[8] Naszódi, L. J. (1978). Elimination of the Bias in the Course of Calibration, *Technometrics*, 20, 201 - 205.

[9] Krutchkoff, R. G. (1967). Classical and Inverse Regression Methods of Calibration, *Technometrics*, 9, 425 - 439.

[10] Halperin, M. (1970). On Inverse Estimation in Linear Regression, *Technometrics*, 12, 727 - 736.

[11] Dunsmore, I. R. (1968). A Baysian Approach to Calibration, *J. R. Statist. Soc.*, Ser. B, 30, 396 - 405.

[12] Hoadley, A. B. (1970). A Bayesian Look at Inverse Linear Regression, *J. Am. Statist. Assoc.*, 65, 356 - 369.

[13] Zaman, A. (1981). Estimators without Moments: The Case of the Reciprocal of a Normal Mean, *J. Econometrics*, 15, 289 - 298.

[14] Shukura, G. K. (1972). On the Problem of Calibration, *Technometrics*, 14, 547 - 553.

[15] Lwin, T. and Maritz, J. S. (1982). An Analysis of the Linear-Calibration Controversy from the Perspective of Compound Estimation, *Tedhnometrics*, 24, 235 - 242.

[16] Dunnett, C. W. (1955). A Multiple Comparisons Procedures for Comparing Several Treatments with a Control, *J. Am. Statist. Assoc.*, 60, 575 - 583.

[17] Patnaik, P. B. (1949). The Noncentral χ^2 and F-distributions and their Applications, *Biometrika*, 36, 202 - 232.

[18] Paulson, E. (1942). An Approximate Normalization of the Analysis of Variance Distribution, *Ann. Math. Statist.*, 13, 233 - 235.

[19] 竹内啓 (1975). 確率分布と統計解析, 日本規格協会.

[20] 奥野忠一・三輪哲久 (1977). 計測における実験計画法 [I], 計測と制御, 16, 928 - 935.

[21] 三輪哲久・奥野忠一 (1978). 計測における実験計画法 [II], 計測と制御, 17, 181 - 189.

[22] 三輪哲久・奥野忠一 (1978). 計測における実験計画法 [III], 計測と制御, 17, 332 - 339.

[23] 三輪哲久 (1979). SN 比に関する推測について, 日本品質管理学会第 9 回年次大会研究発表要旨集, 37 - 40.