Demingの方法による重み付き回帰分析

Jan 29, 2009
Shigemitsu Shin

① 両座標 x, yに不確かさのある回帰直線（$y = a + bx$ ）についての解析

観測方程式 ： $F(x, y; a, b) = y - a - bx = 0$

求めようとする未知数 a, b の近似値をa_0, b_0 、その残差を A, B 、また、変数 x, y の最確値 $\hat{x}_i, \hat{y}_i (i = 1,2,3,\cdots,n)$ に対する観測値 x_i, y_i の残差をV_{xi}, V_{yi} とすると

$$A = a_0 - a, \quad B = b_0 - b$$

$$V_{xi} = x_i - \hat{x}_i, \quad V_{yi} = y_i - \hat{y}_i$$

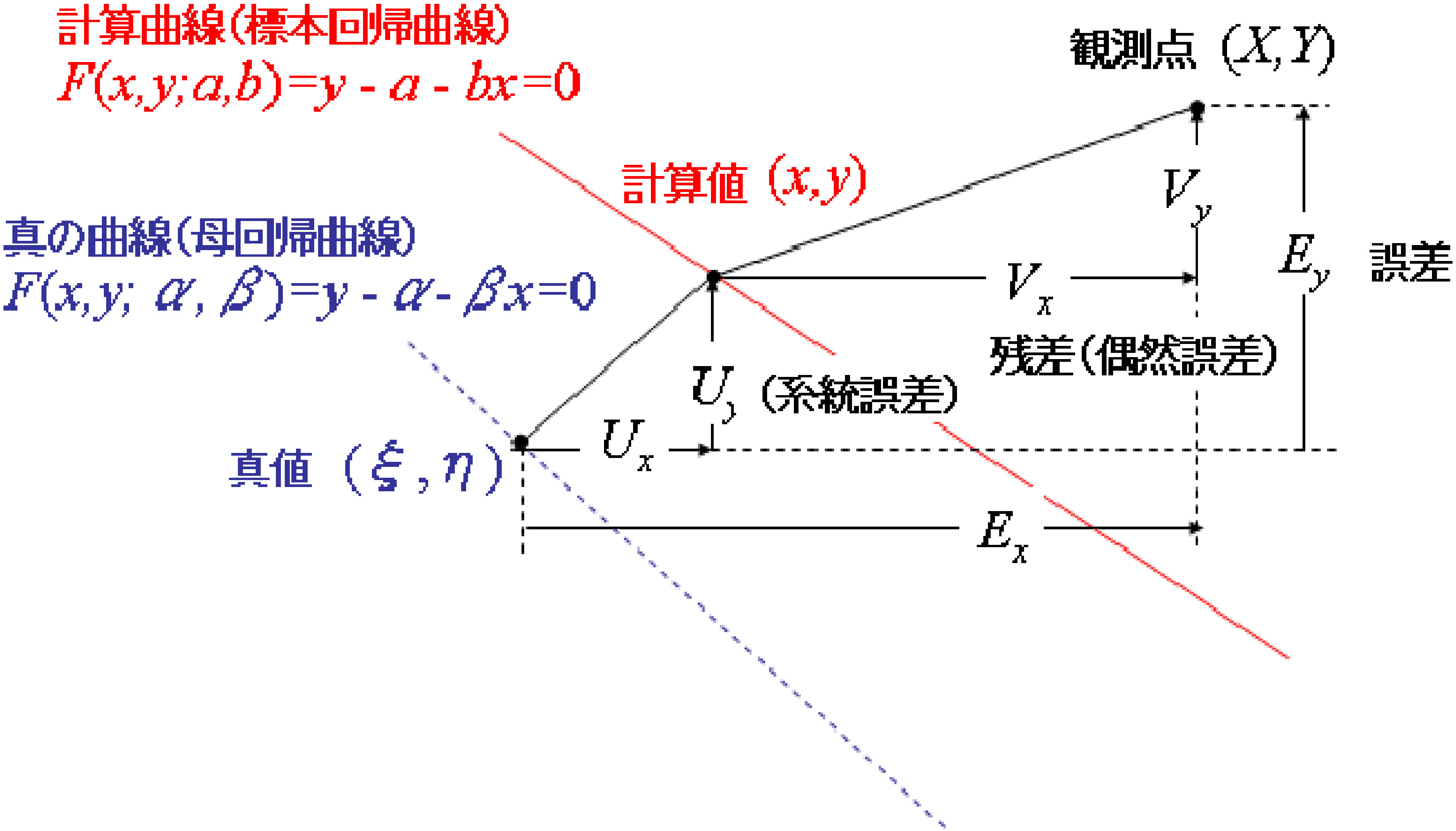
のような関係式（残差＝観測値－最確値）が得られる。これを上の観測方程式に代入し、残差は一般に小さいので１次までのテーラー展開（残差は小さいので２次以上の項は一般に無視できる）すれば

$$\begin{aligned} F(x, y; a, b) &= F(x_i, y_i; a_0, b_0) + (\partial F/\partial x)(\hat{x}_i - x_i) + (\partial F/\partial y)(\hat{y}_i - y_i) + (\partial F/\partial a)(a - a_0) + (\partial F/\partial b)(b - b_0) \\ &= F(x_i, y_i; a_0, b_0) - (\partial F/\partial x)V_{xi} - (\partial F/\partial y)V_{yi} - (\partial F/\partial a)A - (\partial F/\partial b)B = 0 \end{aligned}$$

あるいは

$$\begin{aligned} y - a - bx &= (y_i - a_0 - b_0 x_i) - b(\hat{x}_i - x_i) + (\hat{y}_i - y_i) - (a - a_0) - x(b - b_0) \\ &= (y_i - a_0 - b_0 x_i) + bV_{xi} - V_{yi} + A + Bx = 0 \end{aligned}$$

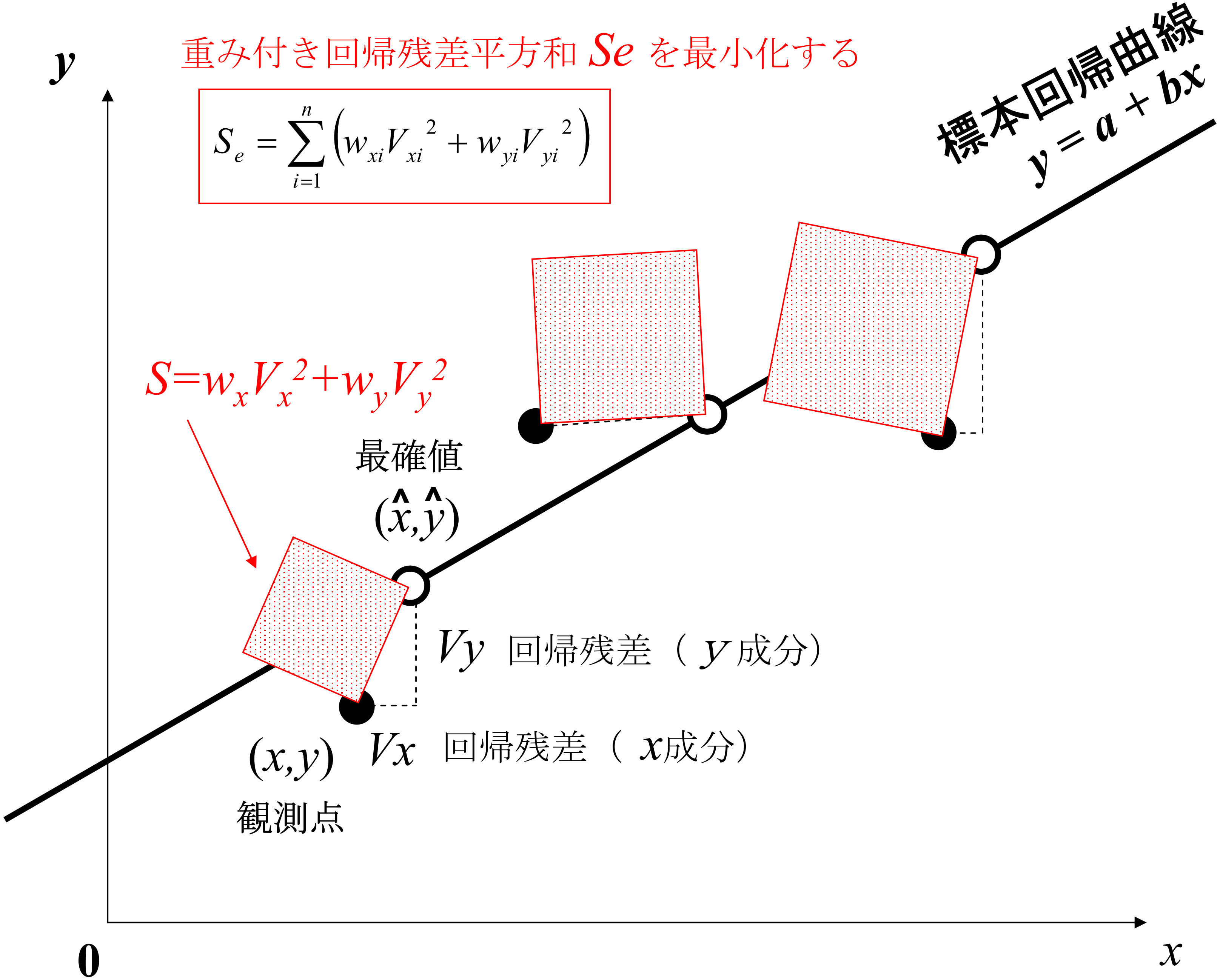
が得られる。



回帰曲線と観測値、計算値(推定値)、真値および残差の関係

重み付き回帰残差平方和 Se を最小化する

$$S_e = \sum_{i=1}^{n} \left(w_{xi} V_{xi}^{\ 2} + w_{yi} V_{yi}^{\ 2} \right)$$



ここで

$$F_{0i} = F(x_i, y_i; a_0, b_0) = y_i - a_0 - b_0 x_i$$

$$\partial F/\partial x = F_x = -b, \quad \partial F/\partial y = F_y = 1; \quad \partial F/\partial a = F_a = -1, \quad \partial F/\partial b = F_b = -x \equiv -x_i$$

のように置くと、観測方程式は

$$\boxed{G_i \equiv F_{0i} - F_x V_{xi} - F_y V_{yi} - F_a A - F_b B = 0}$$

のように書ける。いま観測値 $x_i, y_i (i = 1,2,3,\cdots,n)$ の重みを w_{xi}, w_{yi} とすれば、
重み付き回帰残差平方和 S_e は

$$S_e = \sum_{i=1}^{n} \left(w_{xi} V_{xi}{}^2 + w_{yi} V_{yi}{}^2 \right)^2$$

のようになる。そこで、回帰直線近似を行うためには、拘束条件 $G_i = 0$ の下で回帰残差平方和 S_e が最小になるようにすればよいので、Lagrangeの未定乗数 λ_i を用いて新しい関数

$$\boxed{g = \frac{1}{2} S_e - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i G_i}$$

を考え、この極値を求めることにする。

関数 g が極値をもつことから、変数に関して

$$\begin{cases} \partial g/\partial V_{xi} = \sum_{i=1}^{n} w_{xi} V_{xi} + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i F_x = 0 \\ \partial g/\partial V_{yi} = \sum_{i=1}^{n} w_{yi} V_{yi} + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i F_y = 0 \end{cases}$$

が得られ、未知数に関しては

$$\begin{cases} \partial g/\partial a = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i F_a = 0 \\ \partial g/\partial b = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i F_b = 0 \end{cases}$$

のようになるので、変数に関する上式を観測方程式に代入すれば

$$G_i \equiv F_{0i} + (F_x F_x / w_{xi} + F_y F_y / w_{yi}) \lambda_i - F_a A - F_b B = 0$$

が得られる。ここで

$$\boxed{L_i = 1/W_i = (F_x F_x / w_{xi} + F_y F_y / w_{yi})}$$

と置けば

$$\lambda_i = W_i (F_a A + F_b B - F_{0i})$$

となる。W_i は x, y の重みに対応する量なので<u>重み関数</u>と呼ぶことにする。

この式を未知数に関する上式に代入すれば

$$\boxed{\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_b F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_b W_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i-1}^{n} F_a F_{0i} W_i \\ \sum_{i-1}^{n} F_b F_{0i} W_i \end{pmatrix}}$$

のような未知数の残差に関する連立１次方程式が得られるので、未知数の残差を容易に求めることができる。すなわち

$$A = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \sum_{i-1}^{n} F_a F_{0i} W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i \\ \sum_{i-1}^{n} F_b F_{0i} W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_b W_i \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \sum_{i-1}^{n} -(y_i - a_0 - b_0 x_i) W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i W_i \\ \sum_{i-1}^{n} -x_i (y_i - a_0 - b_0 x_i) W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 W_i \end{vmatrix}$$

$$B = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_a W_i & \sum_{i-1}^{n} F_a F_{0i} W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_b F_a W_i & \sum_{i-1}^{n} F_b F_{0i} W_i \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} W_i & \sum_{i-1}^{n} -(y_i - a_0 - b_0 x_i) W_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i W_i & \sum_{i-1}^{n} -x_i (y_i - a_0 - b_0 x_i) W_i \end{vmatrix}$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_a W_i & \sum_{i-1}^{n} F_a F_b W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_b F_a W_i & \sum_{i-1}^{n} F_b F_b W_i \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i W_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 W_i \end{vmatrix}$$

となる。

また、重み関数 W_i は

$$W_i = 1/L_i = \frac{1}{\left(F_x F_x / w_{xi}\right) + \left(F_y F_y / w_{yi}\right)} = \frac{1}{\left\{(-b)^2 / w_{xi}\right\} + \left\{(1)^2 / w_{yi}\right\}} = \frac{1}{\left(b^2 / w_{xi}\right) + \left(1 / w_{yi}\right)}$$

のようになる。この行列式から算出される残差 A, B を

$$A = a_0 - a, \quad B = b_0 - b$$

に代入することにより、最確値 a, b を求めることができる。

このようにして求めた最確値 a, b の誤差分散 $\sigma_a{}^2, \sigma_b{}^2$ を見積もるためには、
残差 V_{xi}, V_{yi} を予め求めておく必要があるので

$$\lambda_i = W_i (F_a A + F_b B - F_{0i}) = W_i \left\{ - A - Bx_i - (y_i - a_0 - b_0 x_i) \right\} = W_i \left\{ (a_0 - A) + (b_0 - B) x_i - y_i \right\}$$

を

$$\begin{cases} \partial g / \partial V_{xi} = \sum_{i=1}^{n} w_{xi} V_{xi} + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i F_x = 0 \\ \partial g / \partial V_{yi} = \sum_{i=1}^{n} w_{yi} V_{yi} + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i F_y = 0 \end{cases}$$

に代入することにより、残差 V_{xi}, V_{yi} は

$$\begin{cases} V_{xi} = -\dfrac{W_i (F_a A + F_b B - F_{0i}) F_{xi}}{w_{xi}} = b \dfrac{W_i (F_a A + F_b B - F_{0i})}{w_{xi}} = \dfrac{bW_i \left\{ (a_0 - A) + (b_0 - B) x_i - y_i \right\}}{w_{xi}} = \dfrac{bW_i \left\{ a + bx_i - y_i \right\}}{w_{xi}} \\ V_{yi} = -\dfrac{W_i (F_a A + F_b B - F_{0i}) f_{yi}}{w_{yi}} = -\dfrac{W_i (F_a A + F_b B - F_{0i})}{w_{yi}} = -\dfrac{W_i \left\{ (a_0 - A) + (b_0 - B) x_i - y_i \right\}}{w_{yi}} = -\dfrac{W_i \left\{ a + bx_i - y_i \right\}}{w_{yi}} \end{cases}$$

となる。

したがって、

$$\boxed{S_e = \sum_{i=1}^{n}\left(w_{xi}V_{xi}{}^2 + w_{yi}V_{yi}{}^2\right)}$$

に上述の残差 V_{xi}, V_{yi} を入力すれば、回帰残差平方和 S_e が得られるので、誤差分散 $\sigma_e{}^2$ は

$$\sigma_e{}^2 = \frac{S_e}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(w_{xi}V_{xi}{}^2 + w_{yi}V_{yi}{}^2\right)}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left[w_{xi}\left(\frac{bW_i\{a+bx_i-y_i\}}{w_{xi}}\right)^2 + w_{yi}\left(\frac{W_i\{a+bx_i-y_i\}}{w_{yi}}\right)^2\right]}{n-2}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\left(bW_i\{a+bx_i-y_i\}\right)^2}{w_{xi}} + \frac{\left(W_i\{a+bx_i-y_i\}\right)^2}{w_{yi}}\right]}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{(bW_i)^2}{w_{xi}} + \frac{(W_i)^2}{w_{yi}}\right]\{a+bx_i-y_i\}^2}{n-2}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{b^2}{w_{xi}} + \frac{1}{w_{yi}}\right]W_i{}^2\{a+bx_i-y_i\}^2}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}W_i\{y_i-(a+bx_i)\}^2}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}W_i res^2}{n-2}$$

（ただし$res \equiv y_i - (a+bx_i)$とする）

となる。

最確値 a,b の誤差分散 $\sigma_a{}^2,\sigma_b{}^2$ は A,B の誤差分散 $\sigma_A{}^2,\sigma_B{}^2$ と等価と見なせるから、誤差分散 $\sigma_a{}^2,\sigma_b{}^2$ を求めるために正規方程式の係数行列 K の各要素 k_{aa},k_{bb}（最確値 a,b の重み w_a,w_b の逆数）は係数行列式の値 Δ と各要素の小行列式 Δ_{aa},Δ_{bb} （この場合は余因子と一致）を使うことにより

$$k_{aa}=\frac{\Delta_{aa}}{\Delta}=\frac{1}{\Delta}\left|\sum_{i=1}^{n}F_bF_bW_i\right|=\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}F_bF_bW_i=\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}(-x_i)^2W_i=\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i$$

$$k_{bb}=\frac{\Delta_{bb}}{\Delta}=\frac{1}{\Delta}\left|\sum_{i=1}^{n}F_aF_aW_i\right|=\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}F_aF_aW_i=\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}(-1)^2W_i=\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}W_i$$

$$\Delta=\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_iW_i\\ \sum_{i=1}^{n}X_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i\end{vmatrix}$$

となるので、求める最確値 a,b の誤差分散 $\sigma_a{}^2,\sigma_b{}^2$ は

$$\sigma_a{}^2=\sigma_0{}^2k_{aa}=\sigma_0{}^2\left\{\left(\frac{1}{\Delta}\right)\sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i\right\}$$

$$\sigma_b{}^2=\sigma_0{}^2k_{bb}=\sigma_0{}^2\left\{\left(\frac{1}{\Delta}\right)\sum_{i=1}^{n}W_i\right\}$$

$$\Delta=\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_iW_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i\end{vmatrix}$$

となる。

同様に、パラメータ a と b の共分散 $\sigma_{ab}{}^2$ は

$$k_{ab}=\frac{-\Delta_{ab}}{\Delta}=-\frac{1}{\Delta}\left|\sum_{i=1}^{n}\left(F_aF_bW_i\right)\right|=-\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}\left(F_aF_bW_i\right)=-\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}\left((-1)(-x_i)W_i\right)=-\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{n}x_iW_i$$

であるから

$$\boxed{\sigma_{ab}{}^2=\sigma_0{}^2k_{ab}=-\sigma_0{}^2\left\{\left(\frac{1}{\Delta}\right)\sum_{i=1}^{n}x_iW_i\right\}}$$

となる。

もし、上のようにして求められた残差 A,B が推定値 a,b に対して大き過ぎる場合には、ここで得られた推定値 a,b を新たな近似値 a_0,b_0 として正規方程式に代入して、新たな正規方程式を作り、よい推定値が得られるまで解を求めるという操作を繰り返す。Demingの方法は優れた方法であるため、収束はよく、通常その反復操作は１～２回程度で済むことが多い。

<u>重みの一般的な定義式</u>

もし観測値 x_i が n_i 個の観測値 $x_{ij}\ (j=1,2,3,\cdots,n_i)$ の平均値 $\bar{x}_{i.}$ である場合には、重み w_i は次式（右下）で定義する。

$\sigma_0{}^2$ は任意の係数であるが、

$\sigma_0{}^2=1$ とする場合が多い。

特に、$n_i=1$ の場合には $w_i=1/\sigma_i{}^2$ となる。

$$\boxed{w_i=\frac{\sigma_0{}^2}{\left(\dfrac{\sigma_i{}^2}{n_i}\right)}}$$

② 両座標 x, y に不確かさのある回帰係数が m 個の多項式

$$y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + \cdots + b_{m-1} x^{m-1}$$

で、$\left(x_j, y_j\right)$ の組が n 個ある場合の解析例

回帰残差分散 $\sigma_e{}^2$

$$\sigma^2(ext) = \sigma_e{}^2 = E\left[V_e\right] = E\left[\frac{S_e}{n-m}\right] = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(W_{xi}V_{xi}{}^2 + W_{yi}V_{yi}{}^2\right)}{n-m}\right] = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{n}\left\{W_{xi}\left(x_i - \hat{x}_i\right)^2 + W_{yi}\left(x_i - \hat{x}_i\right)^2\right\}}{n-m}\right]$$

のことを外部分散（external variance）$\sigma^2(ext)$ と呼ぶのに対し、次のような内部分散（internal variance）$\sigma^2(\mathrm{int})$ と呼ばれる分散があり、不確かさのある回帰分析を行うときの重み w の簡易計算をする際の観測値1個あたりの平均的な分散の推定値 σ^2 として用いることもある。

たとえば、(x_i, y_i) の組が n 個あり、それらがそれぞれ $n_{xi}\ (i = 1,2,3,\cdots,n)$ あるいは $n_{yi}\ (i = 1,2,3,\cdots,n)$ 個の観測値の平均値 $\bar{x}_{i.}$ あるいは $\bar{y}_{i.}$ であり、それぞれの標本分散（不偏分散ではない）が $s_{xi}{}^2$ あるいは $s_{yi}{}^2$ で表される場合には

$$\sigma_x{}^2(\mathrm{int}) = E\left[\frac{n_{x1}s_{x1}{}^2 + n_{x2}s_{x2}{}^2 + n_{x3}s_{x3}{}^2 + \cdots + n_{xn}s_{xn}{}^2}{\left(n_{x1} + n_{x2} + n_{x3} + \cdots + n_{xp}\right) - n}\right] = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{n} n_{xi}s_{xi}{}^2}{\sum_{i=1}^{n} n_{xi} - n}\right] = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n_{xi}}\left(x_{ij} - \bar{x}_{i.}\right)^2}{N_x - n}\right]$$

あるいは

$$\sigma_y^{\ 2}(\text{int}) = E\left[\frac{n_{y1}s_{y1}^{\ \ 2} + n_{y2}s_{y2}^{\ \ 2} + n_{y3}s_{y3}^{\ \ 2} + \cdots + n_{yn}s_{yn}^{\ \ 2}}{(n_{y1} + n_{y2} + n_{y3} + \cdots + n_{yn}) - n}\right] = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{n} n_{yi}s_{yi}^{\ \ 2}}{\sum_{i=1}^{n} n_{yi} - n}\right] = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n_{xi}}\left(y_{ij} - \bar{y}_{i.}\right)^2}{N_y - n}\right]$$

となります。このような分散を内部分散（internal variance）$\sigma_x^{\ 2}(\text{int})$　あるいは $\sigma_y^{\ 2}(\text{int})$　と言い、重みを

$$w_{xi} = \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_{xi}^{\ \ 2}}{n_{xi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_x^{\ 2}}{n_{xi}}\right)}, \qquad w_{yi} = \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_{yi}^{\ \ 2}}{n_{yi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_y^{\ 2}}{n_{yi}}\right)}$$

（ここで、簡単のために、$\sigma_{xi}^{\ \ 2}$や$\sigma_{yi}^{\ \ 2}$はiによらず一定の母分散$\sigma_x^{\ 2}$や$\sigma_y^{\ 2}$であると仮定する）

のように定義したときには、$\sigma_x^{\ 2}(\text{int})$ は母分散 $\sigma_x^{\ 2}$ のよい推定値となっており、通常 $\sigma_0^{\ 2} \equiv \sigma_x^{\ 2} = \sigma_x^{\ 2}(\text{int})$ あるいは $\sigma_y^{\ 2} = \sigma_y^{\ 2}(\text{int})$ とおいて回帰分析を進めることになる。

このように簡便法を適用すれば、回帰分析における両軸座標の重みは次のように簡単になる。

$$w_{xi} = \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_{xi}^{\ \ 2}}{n_{xi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_x^{\ 2}}{n_{xi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_x^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_x^{\ 2}}{n_{xi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_x^{\ 2}(\text{int})}{\left(\dfrac{\sigma_x^{\ 2}(\text{int})}{n_{xi}}\right)} = n_{xi}$$

$$w_{yi} = \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_{yi}^{\ \ 2}}{n_{yi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_0^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_y^{\ 2}}{n_{yi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_x^{\ 2}}{\left(\dfrac{\sigma_y^{\ 2}}{n_{yi}}\right)} \equiv \frac{\sigma_x^{\ 2}(\text{int})}{\left(\dfrac{\sigma_y^{\ 2}(\text{int})}{n_{yi}}\right)} = n_{yi}\left(\frac{\sigma_x^{\ 2}(\text{int})}{\sigma_y^{\ 2}(\text{int})}\right)$$

重み付き回帰分析（Deming法）を行う実例：Demingの著書の例題（W. E. Deming, “Statistical Adjustment of Data”, Dover Publications, Inc., Paperback, New York, p. 218 (1984), ISBN 0-486-64685-8）

$$y = a + bx + cx^2$$

観測点の番号 i	x 座標				y 座標			
	真値（cm）	観測値 $\bar{x}_{i.}$	データ数 n_{xi}	標本分散 s_{xi}^2	真値（lb）	観測値 $\bar{y}_{i.}$	データ数 n_{yi}	標本分散 s_{yi}^2
1	−2	−2.28	5	0.0.154	0.11	0.129	10	0.00447
2	−1	−1.13	6	0.152	0.15	0.131	9	0.00177
3	0	−0.44	7	0.202	0.20	0.198	8	0.00264
4	1	1.44	8	0.315	0.25	0.247	7	0.00182
5	2	1.90	9	0.176	0.31	0.312	6	0.00105
6	3	2.93	10	0.124	0.38	0.380	5	0.00100
7	4	3.81	7	0.307	0.45	0.441	7	0.00294
8	5	5.07	4	0.032	0.53	0.529	12	0.00286
9	6	6.11	10	0.343	0.61	0.590	4	0.00015
10	7	7.17	9	0.016	0.70	0.728	4	0.00082
11	8	7.83	7	0.176	0.79	0.791	7	0.00244
12	9	9.32	5	0.154	0.89	0.922	5	0.00442

（注）真の値のプロットから得られる多項式曲線に式： $y = 0.2 + 0.05x + 0.003x^2$

題意より内部分散は

$$\sigma_x{}^2(\mathrm{int}) = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{12} n_{xi} s_{xi}{}^2}{\sum_{i=1}^{12} n_{xi} - 12}\right] = E\left[\frac{n_{x1}s_{x1}{}^2 + n_{x2}s_{x2}{}^2 + n_{x3}s_{x3}{}^2 + \cdots + n_{x12}s_{x12}{}^2}{(n_{x1} + n_{x2} + n_{x3} + \cdots + n_{x12}) - 12}\right]$$

$$= E\left[\frac{5\times0.154 + 6\times0.152 + 7\times0.202 + 8\times0.315 + 9\times0.176 + 10\times0.124 + 7\times0.307 + 4\times0.032 + 10\times0.343 + 9\times0.016 + 7\times0.176 + 5\times0.154}{(5+6+7+8+9+10+7+4+10+9+7+5) - 12}\right]$$

$$= E\left[\frac{0.77 + 0.912 + 1.414 + 2.52 + 1.584 + 1.24 + 2.149 + 0.128 + 3.43 + 0.144 + 1.232 + 0.77}{(87) - 12}\right]$$

$$= E\left[\frac{16.293}{75}\right] = E[0.21724] = 0.217$$

および

$$\sigma_y{}^2(\mathrm{int}) = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{12} n_{yi} s_{yi}{}^2}{\sum_{i=1}^{12} n_{yi} - 12}\right] = E\left[\frac{n_{y1}s_{y1}{}^2 + n_{y2}s_{y2}{}^2 + n_{y3}s_{y3}{}^2 + \cdots + n_{y12}s_{y12}{}^2}{(n_{y1} + n_{y2} + n_{y3} + \cdots + n_{y12}) - 12}\right]$$

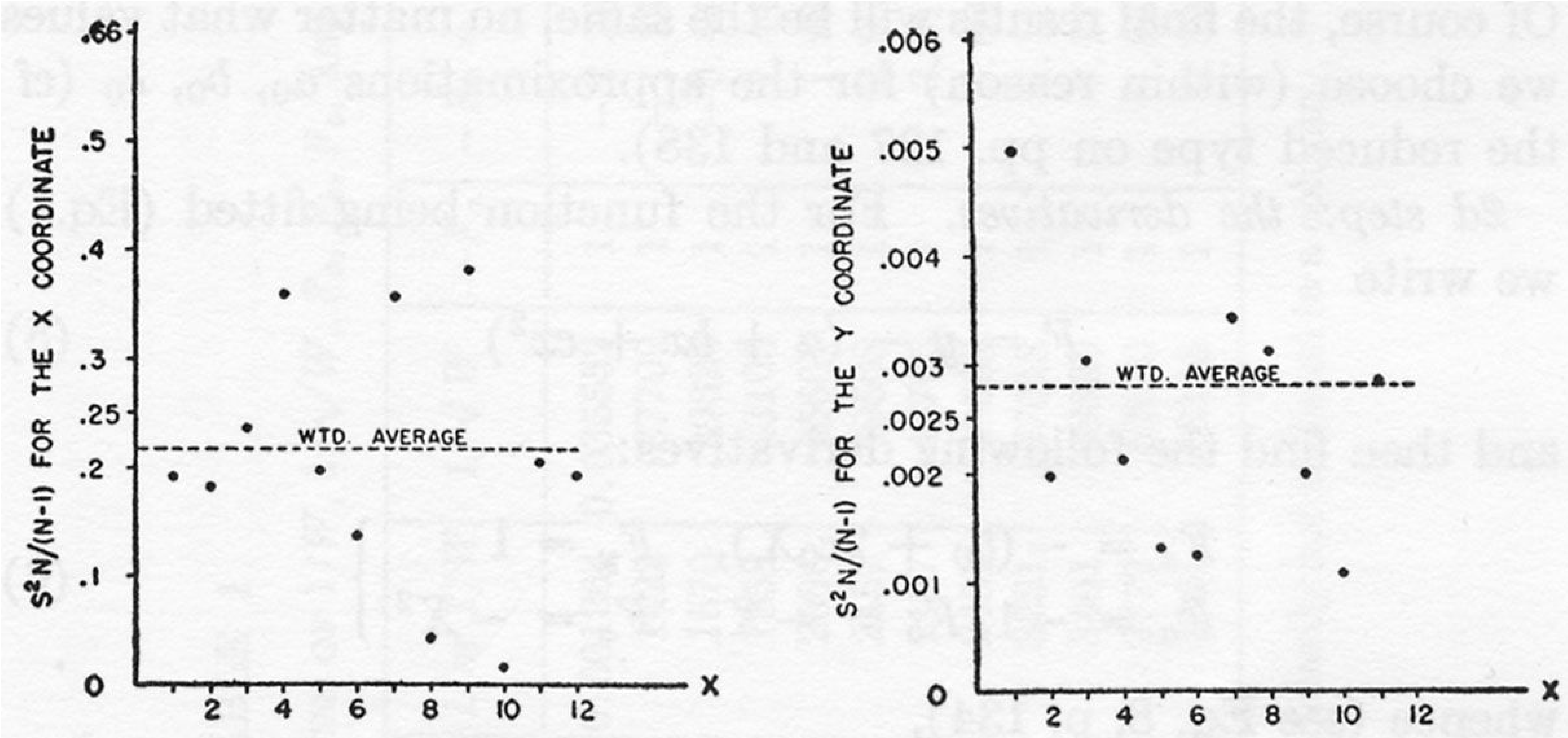
$$= E\left[\frac{10\times0.00447 + 9\times0.00177 + 8\times0.00264 + 7\times0.00182 + 6\times0.00105 + \cdots + 7\times0.00244 + 5\times0.00442}{(10+9+8+7+6+5+7+12+4+4+7+5) - 12}\right]$$

$$= E\left[\frac{0.0447 + 0.01593 + 0.02112 + 0.01274 + 0.0063 + 0.005 + 0.02058 + 0.03432 + 0.0006 + 0.00328 + 0.01708 + 0.0221 + 0.20375}{(84) - 12}\right]$$

$$= E\left[\frac{0.20375}{72}\right] = E[0.0028299] = 0.00283$$

となる。

観測値1個当たりの標準誤差平方の推定値（不偏分散） σ²



W. E. Deming, “Statistical Adjustment of Data”, Dover Publications, Inc., Paperback, New York, p. 221 (1984), ISBN 0-486-64685-8）

（WTD. AVERAGEが内部分散σ²(int)に相当する）

題意より観測方程式を

$$F(x,y;a,b,c)=y-a-bx-cx^2=0$$

と定義する。すると残差について

$$A=a_0-a,\quad B=b_0-b,\qquad C=c_0-c$$

$$V_{xi}=x_i-\hat{x}_i,\quad V_{yi}=y_i-\hat{y}_i$$

のような関係式（残差＝観測値－最確値）が得られます。これを上の観測方程式に代入し、残差は一般に小さいものと見なして１次までのテーラー展開（２次以上の項は無視）すれば

$$\begin{aligned}F(x,y;a,b,c)&=F(x_i,y_i;a_0,b_0,c_0)+(\partial F/\partial x)(\hat{x}_i-x_i)+(\partial F/\partial y)(\hat{y}_i-y_i)+(\partial F/\partial a)(a-a_0)+(\partial F/\partial b)(b-b_0)+(\partial F/\partial c)(c-c_0)\\&=F(x_i,y_i;a_0,b_0.c_0)-(\partial F/\partial x)V_{xi}-(\partial F/\partial y)V_{yi}-(\partial F/\partial a)A-(\partial F/\partial b)B-(\partial F/\partial c)C=0\end{aligned}$$

あるいは

$$\begin{aligned}y-a-bx-cx^2&=(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^2)-b(\hat{x}_i-x_i)+(\hat{y}_i-y_i)-(a-a_0)-x(b-b_0)-x^2(c-c_0)\\&=(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^2)+bV_{xi}-V_{yi}+A+Bx+Cx^2=0\end{aligned}$$

のような式が得られます。ここで、簡単のために

$$F_{0i}=F(x_i,y_i;a_0,b_0,c_0)=y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^2$$

$$\partial F/\partial x=F_x=-b-2cx,\quad \partial F/\partial y=F_y=1;\quad \partial F/\partial a=F_a=-1,\quad \partial F/\partial b=F_b=-x\equiv -x_i,\quad \partial F/\partial c=F_c=-x^2\equiv -x_i^2$$

のように置くと、観測方程式は

$$G_i\equiv F_{0i}-F_xV_{xi}-F_yV_{yi}-F_aA-F_bB-F_cC=0$$

のように書ける。

いま観測値 $x_i, y_i (i=1,2,3,\cdots,n)$ の重みを w_{xi}, w_{yi} とすれば、重み付き回帰残差平方和 S_e は

$$S_e = \sum_{i=1}^{n}\left(w_{xi}V_{xi}{}^2 + w_{yi}V_{yi}{}^2\right)^2$$

のようになる。したがって、この回帰残差平方和 S_e が最小になるように正規方程式（行列表現）を求めれば

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_b F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_c F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_c W_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i-1}^{n} F_a F_{0i} W_i \\ \sum_{i-1}^{n} F_b F_{0i} W_i \\ \sum_{i-1}^{n} F_c F_{0i} W_i \end{pmatrix}$$

のような未知数 a,b,c の残差 A,B,C を行列計算から容易に求めることができる。
すなわち

$$A = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i-1}^{n} F_a F_{0i} W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_c W_i \\ \sum_{i-1}^{n} F_b F_{0i} W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_c W_i \\ \sum_{i-1}^{n} F_c F_{0i} W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_c W_i \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i-1}^{n} -(y_i - a_0 - b_0 x_i - c_0 x_i{}^2)W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i \\ \sum_{i-1}^{n} -x_i(y_i - a_0 - b_0 x_i - c_0 x_i{}^2)W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^3 W_i \\ \sum_{i-1}^{n} -x_i{}^2(y_i - a_0 - b_0 x_i - c_0 x_i{}^2)W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^3 W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^4 W_i \end{vmatrix}$$

$$B=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}F_aF_aW_i & \sum_{i-1}^{n}F_aF_{0i}W_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_cW_i\\ \sum_{i=1}^{n}F_bF_aW_i & \sum_{i-1}^{n}F_bF_{0i}W_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_cW_i\\ \sum_{i=1}^{n}F_cF_aW_i & \sum_{i-1}^{n}F_cF_{0i}W_i & \sum_{i-1}^{n}F_aF_{0i}W_i\end{vmatrix}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i-1}^{n}-(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^{\,2})W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i-1}^{n}-x_i(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^{\,2})W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,3}W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i & \sum_{i-1}^{n}-x_i^{\,2}(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^{\,2})W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,4}W_i\end{vmatrix}$$

$$C=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}F_aF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_bW_i & \sum_{i-1}^{n}F_aF_{0i}W_i\\ \sum_{i=1}^{n}F_bF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_bW_i & \sum_{i-1}^{n}F_bF_{0i}W_i\\ \sum_{i=1}^{n}F_cF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_cF_bW_i & \sum_{i-1}^{n}F_cF_{0i}W_i\end{vmatrix}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i & \sum_{i-1}^{n}-(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^{\,2})W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i & \sum_{i-1}^{n}-x_i(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^{\,2})W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,3}W_i & \sum_{i-1}^{n}-x_i^{\,2}(y_i-a_0-b_0x_i-c_0x_i^{\,2})W_i\end{vmatrix}$$

$$\Delta=\begin{vmatrix}\sum_{i-1}^{n}F_aF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_cW_i\\ \sum_{i-1}^{n}F_bF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_cW_i\\ \sum_{i-1}^{n}F_cF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_cF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_cF_cW_i\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,3}W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,3}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^{\,4}W_i\end{vmatrix}$$

となる。また、重み関数 W_i は

$$W_i=1/L_i=\frac{1}{\left(F_xF_x/w_{xi}\right)+\left(F_yF_y/w_{yi}\right)}=\frac{1}{\left\{(-b-2cx_i)^2/w_{xi}\right\}+\left\{(1)^2/w_{yi}\right\}}=\frac{1}{\left\{\left(b^2+4bcx_i+4c^2x_i^{\,2}\right)/w_{xi}\right\}+\left(1/w_{yi}\right)}$$

となる。

この行列式から算出される残差 A,B,Cを

$$A = a_0 - a, \quad B = b_0 - b, \qquad C = c_0 - c$$

に代入することにより、最確値 a,b,c を求めることができる。

求められた残差 A,B,Cが a,b,c に対して大き過ぎる場合には、ここで得られた推定値 a,b,c を新たな近似値 a_0,b_0,c_0 として正規方程式に代入して、よい推定値が得られるまで解を求めるという操作を繰り返す。このようにして行列計算した回帰係数 a,b,c（最確値）の誤差分散の推定値 $\hat{\sigma}_a{}^2,\hat{\sigma}_b{}^2,\hat{\sigma}_c{}^2$は、正規方程式の係数行列 K

$$\boxed{K = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_b F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_c F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_c W_i \end{pmatrix}}$$

の各要素 k_{aa},k_{bb},k_{cc}（回帰係数 a,b,cの重みw_a,w_b,w_c の逆数）は係数行列式の値 Δと各要素の小行列式 $\Delta_{aa},\Delta_{bb},\Delta_{cc}$ を使うことにより

$$k_{aa}=\frac{\Delta_{aa}}{\Delta}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}F_bF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_cW_i\\ \sum_{i=1}^{n}F_cF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_cF_cW_i\end{vmatrix}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^3W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i{}^3W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^4W_i\end{vmatrix}$$

$$k_{bb}=\frac{\Delta_{bb}}{\Delta}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}F_aF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_cW_i\\ \sum_{i=1}^{n}F_cF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_cF_cW_i\end{vmatrix}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^4W_i\end{vmatrix}$$

$$k_{cc}=\frac{\Delta_{cc}}{\Delta}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}F_aF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_bW_i\\ \sum_{i=1}^{n}F_bF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_bW_i\end{vmatrix}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_iW_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i\end{vmatrix}$$

$$\Delta=\begin{vmatrix}\sum_{i-1}^{n}F_aF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_aF_cW_i\\ \sum_{i-1}^{n}F_bF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_bF_cW_i\\ \sum_{i-1}^{n}F_cF_aW_i & \sum_{i=1}^{n}F_cF_bW_i & \sum_{i=1}^{n}F_cF_cW_i\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}\sum_{i=1}^{n}W_i & \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_iW_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^3W_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i{}^2W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^3W_i & \sum_{i=1}^{n}x_i{}^4W_i\end{vmatrix}$$

となるので、

$$\hat{\sigma}_a{}^2 = \sigma_0{}^2 k_{aa} = \sigma_0{}^2 \left[\left(\frac{1}{\Delta} \right) \left\{ \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i \sum_{i=1}^{n} x_i{}^4 W_i - \sum_{i=1}^{n} x_i{}^3 W_i \sum_{i=1}^{n} x_i{}^3 W_i \right\} \right]$$

$$\hat{\sigma}_b{}^2 = \sigma_0{}^2 k_{bb} = \sigma_0{}^2 \left[\left(\frac{1}{\Delta} \right) \left\{ \sum_{i=1}^{n} W_i \sum_{i=1}^{n} x_i{}^4 W_i - \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i \right\} \right]$$

$$\sigma_c{}^2 = \sigma_0{}^2 k_{cc} = \sigma_0{}^2 \left[\left(\frac{1}{\Delta} \right) \left\{ \sum_{i=1}^{n} W_i \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i - \sum_{i=1}^{n} x_i W_i \sum_{i=1}^{n} x_i W_i \right\} \right]$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^3 W_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i{}^2 W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^3 W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i{}^4 W_i \end{vmatrix}$$

となる。同様に、パラメータ a と b の共分散の推定値 $\hat{\sigma}_{ab}$ 、b と c の共分散の推定値 $\hat{\sigma}_{bc}$ 、および c と a の共分散の推定値 $\hat{\sigma}_{ca}$ は次式

$$k_{ab} = \frac{-\Delta_{ab}}{\Delta} = -\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_b F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_c F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_c W_i \end{vmatrix} = -\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,3} W_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,4} W_i \end{vmatrix}$$

$$k_{bc} = \frac{-\Delta_{bc}}{\Delta} = -\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_c F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_b W_i \end{vmatrix} = -\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i W_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,3} W_i \end{vmatrix}$$

$$k_{ca} = \frac{\Delta_{ca}}{\Delta} = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_b F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_c W_i \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,3} W_i \end{vmatrix}$$

から

$$\hat{\sigma}_{ab} = \sigma_0^{\,2} k_{ab} = -\sigma_0^{\,2}\left[\left(\frac{1}{\Delta}\right)\left\{\sum_{i=1}^{n} x_i W_i \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,4} W_i - \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,3} W_i\right\}\right]$$

$$\hat{\sigma}_{bc} = \sigma_0^{\,2} k_{bc} = -\sigma_0^{\,2}\left[\left(\frac{1}{\Delta}\right)\left\{\sum_{i=1}^{n} W_i \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,3} W_i - \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i \sum_{i=1}^{n} x_i W_i\right\}\right]$$

$$\hat{\sigma}_{ca} = \sigma_0^{\,2} k_{ca} = \sigma_0^{\,2}\left[\left(\frac{1}{\Delta}\right)\left\{\sum_{i=1}^{n} x_i W_i \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,3} W_i - \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} W_i\right\}\right]$$

となる。

正規方程式の
係数行列

$$K = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} F_a F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_a F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_b F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_b F_c W_i \\ \sum_{i=1}^{n} F_c F_a W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_b W_i & \sum_{i=1}^{n} F_c F_c W_i \end{pmatrix}$$

係数行列の
逆行列

$$K^{-1} = \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{w_a} & \frac{1}{w_{ab}} & \frac{1}{w_{ac}} \\ \frac{1}{w_{ba}} & \frac{1}{w_b} & \frac{1}{w_{bc}} \\ \frac{1}{w_{ca}} & \frac{1}{w_{cb}} & \frac{1}{w_c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sigma_a{}^2}{\sigma_0{}^2} & \frac{\sigma_{ab}}{\sigma_0{}^2} & \frac{\sigma_{ac}}{\sigma_0{}^2} \\ \frac{\sigma_{ba}}{\sigma_0{}^2} & \frac{\sigma_b{}^2}{\sigma_0{}^2} & \frac{\sigma_{bc}}{\sigma_0{}^2} \\ \frac{\sigma_{ca}}{\sigma_0{}^2} & \frac{\sigma_{cb}}{\sigma_0{}^2} & \frac{\sigma_c{}^2}{\sigma_0{}^2} \end{pmatrix}$$

回帰係数の分散・共分散行列

$$\begin{pmatrix} \sigma_a{}^2 & \sigma_{ab} & \sigma_{ac} \\ \sigma_{ba} & \sigma_b{}^2 & \sigma_{bc} \\ \sigma_{ca} & \sigma_{cb} & \sigma_c{}^2 \end{pmatrix} = \sigma_0{}^2 K^{-1} = \sigma_0{}^2 \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{pmatrix} = \sigma_0{}^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{w_a} & \frac{1}{w_{ab}} & \frac{1}{w_{ac}} \\ \frac{1}{w_{ba}} & \frac{1}{w_b} & \frac{1}{w_{bc}} \\ \frac{1}{w_{ca}} & \frac{1}{w_{cb}} & \frac{1}{w_c} \end{pmatrix}$$

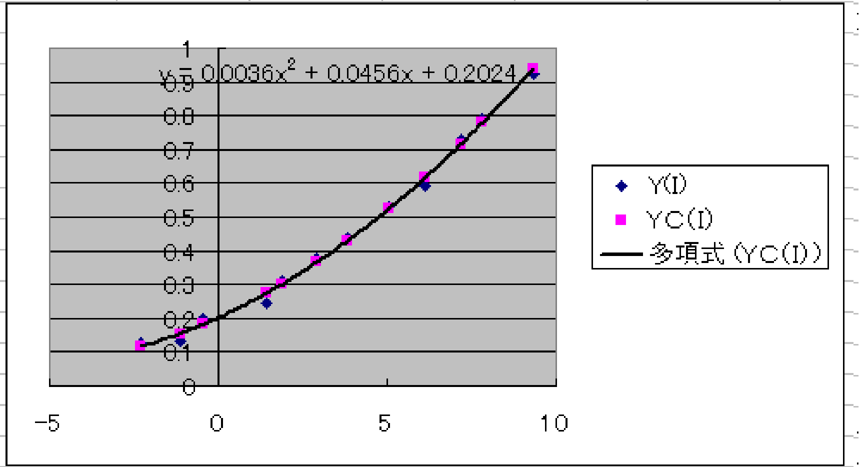
deming_example.xlsによる計算結果

経験値から求めたσ^2　SIGMAX2 = 0.25　SIGMAY2 = 0.0025

****************** 計算結果 **

σx^2=[Σ{NX(I)SX(I)^2}]/{ΣNX(I)−ND}	0.25	←	Xの内部誤差分散
σy^2=[Σ{NY(I)SY(I)^2}]/{ΣNY(I)−ND}	0.0025	←	Yの内部誤差分散
σ0^2≡σx^2	0.25	←	重みの任意係数(たとえばX(I)の重みWX(I)をWX(I)=σ0^2/{σx^2/NX(I)}と定義した場合)

Iteration =	5		
σ^2(ext) =	0.1905605	←	回帰残差分散(外部誤差分散)
σ(ext) =	0.4365324	←	回帰残差=√(外部誤差分散)



係数行列の逆行列 R(J, K)	0.0002683	4.246E-06	-6.15E-06
	4.246E-06	6.17E-05	-8.2E-06
	-6.15E-06	-8.2E-06	1.427E-06
分散/共分散行列 σ0^2 * R(J, K)	6.706E-05	1.061E-06	-1.54E-06
	1.061E-06	1.542E-05	-2.05E-06
	-1.54E-06	-2.05E-06	3.567E-07

回帰係数		標準偏差		
AK(1) ≡ b0 =	0.2023604	0.0081893	←	σ(b0)
AK(2) ≡ b1 =	0.0455962	0.0039274	←	σ(b1)
AK(3) ≡ b2 =	0.0035939	0.0005972	←	σ(b2)

回帰残差 DEV(I)

I	X(I)	Y(I)	XC(I)	YC(I)	DEV(I) = Y(I) − YC(I)
1	-2.28	0.129		0.1170835	0.0119165
2	-1.13	0.131		0.1554257	-0.024426
3	-0.44	0.198		0.1829938	0.0150062
4	1.44	0.247		0.2754711	-0.028471
5	1.9	0.312		0.301967	0.010033
6	2.93	0.38		0.3668103	0.0131897
7	3.81	0.441		0.428251	0.012749
8	5.07	0.529		0.5259135	0.0030865
9	6.11	0.59		0.6151203	-0.02512
10	7.17	0.728		0.7140427	0.0139573
11	7.83	0.791		0.7797157	0.0112843
12	9.32	0.922		0.9394903	-0.01749

deming_example.xlsによる計算結果

SIGMAX2 = 0.21724
SIGMAY2 = 0.0028299

***************** 計算結果 ***					
σx^2=[Σ{NX(I)SX(I)^2}]/{ΣNX(I)-N(I)}	0.21724	← Xの内部誤差分散			
σy^2=[Σ{NY(I)SY(I)^2}]/{ΣNY(I)-N(I)}	0.0028299	← Yの内部誤差分散			
σ0^2≡σx^2	0.21724	← 重みの任意係数(たとえばX(I)の重みWX(I)をWX(I)=σ0^2/{σx^2/NX(I)}と定義した場合)			
Iteration =	5				
σ^2(ext) =	0.1544611	← 回帰残差分散(外部誤差分散)			
σ(ext) =	0.3930153	← 回帰残差=√(外部誤差分散)			
係数行列の逆行列 R(J, K)	0.0003316	2.337E-06	-7.14E-06		
	2.337E-06	7.569E-05	-9.98E-06		
	-7.14E-06	-9.98E-06	1.712E-06		
分散/共分散行列 σ0^2 * R(J, K)	7.203E-05	5.077E-07	-1.55E-06		
	5.077E-07	1.644E-05	-2.17E-06		
	-1.55E-06	-2.17E-06	3.719E-07		
回帰係数			標準偏差		
AK(1) ≡ b0 =	0.2024311		0.0084872	← σ(b0)	
AK(2) ≡ b1 =	0.0456888		0.0040551	← σ(b1)	
AK(3) ≡ b2 =	0.0035793		0.0006099	← σ(b2)	
回帰残差 DEV(I)					
I	X(I)	Y(I)	XC(I)	YC(I)	DEV(I) = Y(I) - YC(I)
1	-2.28	0.129		0.116867	0.012133
2	-1.13	0.131		0.155373	-0.024373
3	-0.44	0.198		0.1830209	0.0149791
4	1.44	0.247		0.2756449	-0.028645
5	1.9	0.312		0.302161	0.009839
6	2.93	0.38		0.367027	0.012973
7	3.81	0.441		0.4284625	0.0125375
8	5.07	0.529		0.5260782	0.0029218
9	6.11	0.59		0.6152114	-0.025211
10	7.17	0.728		0.7140262	0.0139738
11	7.83	0.791		0.7796156	0.0113844
12	9.32	0.922		0.9391548	-0.017155

Fitting4_3.xlsによる計算結果

ND =	12	←観測値 (X,Y) の数				
MM =	3	←パラメータ bj の数				

I	X(I)	UX(I)	Y(I)	UY(I)
1	-2.28	0.124097	0.129	0.066858
2	-1.13	0.389872	0.131	0.042071
3	-0.44	0.449444	0.198	0.051381
4	1.44	0.561249	0.247	0.042661
5	1.9	0.419524	0.312	0.032404
6	2.93	0.352136	0.38	0.031623
7	3.81	0.554076	0.441	0.054222
8	5.07	0.178885	0.529	0.053479
9	6.11	0.585662	0.59	0.012247
10	7.17	0.126491	0.728	0.028636
11	7.83	0.419524	0.791	0.049396
12	9.32	0.392428	0.922	0.066483

σ0^2 = 1

(重みが1に相当する分散であるが、通常任意の定数でよい)

回帰係数	近似値	収束条件
b1	1	0.0000001
b2	1	0.0000001
b3	1	0.0000001

****************************** 計算結果 **

Iteration = 5

回帰残差平方和 SSD = Σ[WX(I)(X(I)obs-X(I)calc)^2+WY(I)(Y(I)obs-Y(I)calc)^2] と回帰残差分散 σ^2 = SSD/(ND-MM)

SSD =	1.288454
σ^2 =	0.143162

係数行列の逆行列 R(j, k) : 回帰係数の誤差分散(対角要素) u(bj)^2 と共分散(非対角要素) u(bj, bk)

0.000443	-7.6E-05	1.37E-06
-7.6E-05	0.000119	-1.5E-05
1.37E-06	-1.5E-05	2.18E-06

回帰係数bjとその分散σ^2(bj)と標準偏差σ(bj)および共分散σ(bj,k)

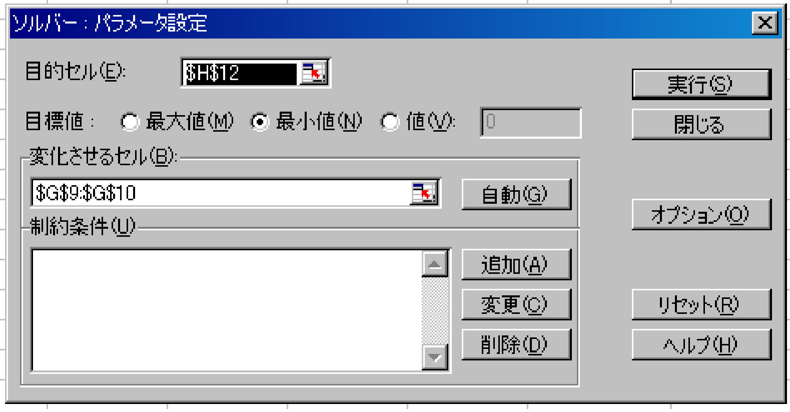
b1 =	0.200403	σ^2(b1) =	0.000443	σ(b1) =	0.021046
b2 =	0.04827	σ^2(b2) =	0.000119	σ(b2) =	0.010894
b3 =	0.003351	σ^2(b3) =	2.18E-06	σ(b3) =	0.001477
		σ(b1,2) =	-7.6E-05		
		σ(b1,3) =	1.37E-06		
		σ(b2,1) =	-7.6E-05		
		σ(b2,3) =	-1.5E-05		
		σ(b3,1) =	1.37E-06		
		σ(b3,2) =	-1.5E-05		

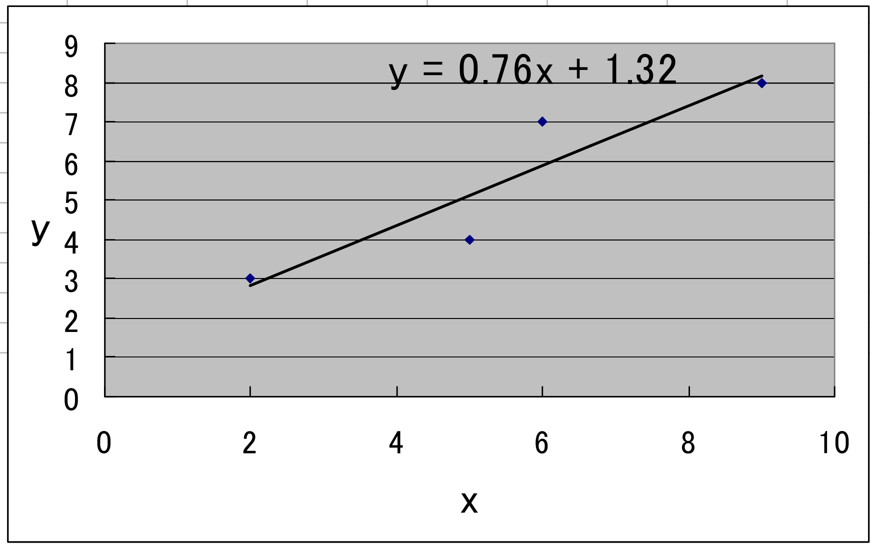
不確かさのある回帰分析をExcelのソルバーで行った結果

xi	yi	uxi	uyi	wxi=1/uxi^2	wyi=1/uyi^2	Wi=1/[(b1^2/wxi)+(1/wyi)]	(yi-b0-b1xi)^2	Wi*(yi-b0-b1xi^2)^2
2	3	1	1	1	1	0.603006	0.115514	0.069656
5	4	1	1	1	1	0.603006	1.197504	0.722102
6	7	1	1	1	1	0.603006	1.197496	0.722097
9	8	1	1	1	1	0.603006	0.115517	0.069658

回帰直線 y = b0 + b1 ＊x （ソルバーによる算出結果）

重みなし		重みつき	
b0 =	1.32	b0 =	1.0373394
b1 =	0.76	b1 =	0.8113932
S = Σ(yi-b0-b1xi)^2 =	2.626032	S = ΣWi*(yi-b0-b1xi)^2=	1.583512
σ^2 = S/(4-2) =	1.313016	σ^2 = S/(n-m) =	0.791756
σ =	1.145869	σ =	0.889807

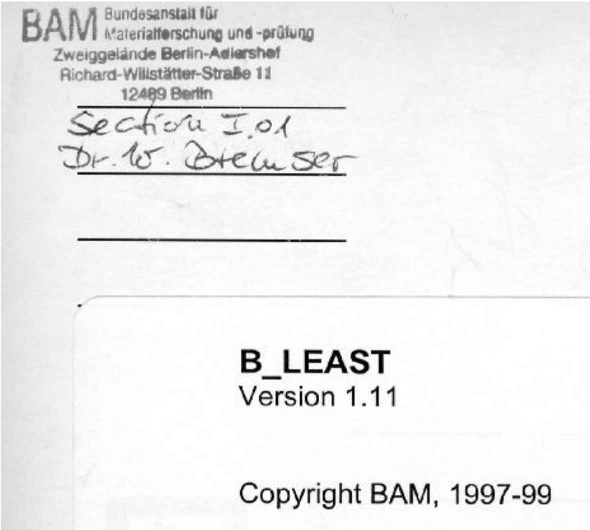




POLYNOM_kojima.xlsによる計算結果

このプログラムでは観測方程式の偏微分係数行列の要素である $F_{b_j} = \left(\partial F/\partial b_j\right) = -x^j, (j = 0,1,2,\ldots,M-1)$ や $F_x = \left(\partial F/\partial x\right) = -\sum (j-1) b_{(j-1)} x^{(j-2)}, (j = 2,\ldots,M-1)$ の x の値としては逐次計算の初期値（近似値）として観測値（$x(i)$）を用いますが、次回からは次々と求まる最確値（$xc(i)$）を順次用いて回帰分析を行っている。

******************************** 計算結果 ************************************									Goodness-of-fit Γ（Γ≦2）=	0.559559109
回帰係数(bi)と標準偏差u(bi)					XX(i)	YY(i)	← 最確値		|XX(i)-XD(i)|/SX(i)	|YY(i)-YD(i)|/SY(i)
b0 =	0.199842	u(b0) =	0.020989		-2.27754	0.107346			0.01980262	0.323875696
b1 =	0.048283	u(b1) =	0.01079		-1.1864	0.1473			0.144658409	0.387433388
b2 =	0.003368	u(b2) =	0.001471		-0.38344	0.181824			0.125853544	0.314827549
					1.255602	0.265777			0.32855034	0.440132084
					1.952161	0.306935			0.124333758	0.156322674
					2.982501	0.373808			0.149093942	0.195819995
					3.850897	0.435723			0.073810832	0.09731519
					5.068101	0.531059			0.010616215	0.038505915
					5.782287	0.591643			0.559559109	0.134139661
					7.184064	0.720544			0.111189036	0.260366696
					7.857734	0.787201			0.066108552	0.076904357
					9.264872	0.936294			0.140478909	0.214999756
Variance-Covariance Matrix and Standard Deviations of Regression Coefficients										
0.000441	-7.4E-05	1.1E-06	0.020989							
-7.4E-05	0.000116	-1.5E-05		0.01079						
1.1E-06	-1.5E-05	2.16E-06			0.001471					
回帰残差平方和 SSD =			1.297417							
回帰残差分散 σ^2 = SSD/(n-2)			0.129742							
回帰残差の標準偏差 σ =			0.360197							
Iteration =			4							


BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
Zweiggelände Berlin-Adlershof
Richard-Willstätter-Straße 11
12489 Berlin

Section I.01
Dr. W. Bremser

B_LEAST
Version 1.11

Copyright BAM, 1997-99

Data set: data

The calibration data set is:

-2.280E+00	1.241E-01	1.290E-01	6.686E-02
-1.130E+00	3.899E-01	1.310E-01	4.207E-02
-4.400E-01	4.494E-01	1.980E-01	5.138E-02
1.440E+00	5.612E-01	2.470E-01	4.266E-02
1.900E+00	4.195E-01	3.120E-01	3.240E-02
2.930E+00	3.521E-01	3.800E-01	3.162E-02
3.810E+00	5.541E-01	4.410E-01	5.422E-02
5.070E+00	1.789E-01	5.290E-01	5.348E-02
6.110E+00	5.857E-01	5.900E-01	1.225E-02
7.170E+00	1.265E-01	7.280E-01	2.864E-02
7.830E+00	4.195E-01	7.910E-01	4.940E-02
9.320E+00	3.924E-01	9.220E-01	6.648E-02

Fit type: y vs x

Calibration: Linear case/Quadratic model function

```
コマンド プロンプト - b_least
Calibration: Linear case/Quadratic model function

 a0            a1            a2            SSD
 2.00E-01      4.32E-02      3.69E-03      3.94E+00
 2.00E-01      4.83E-02      3.37E-03      1.30E+00

Results of ISO 6143 method for parameters a0, a1, a2, (a3):
 1.9984E-01    4.8283E-02    3.3681E-03

Parameter standard deviations/covariances:
u(a0)   u(a1)   u(a2)   : 2.089E-02   1.065E-02   1.465E-03
cov(a0,a1)  cov(a0,a2) :-7.161E-05   7.283E-07
cov(a1,a2)             :-1.424E-05

Remaining SSD is:          1.2974
Goodness-of-fit measure:   0.5596
Convergence reached after     35 iterations.

   [m] - main menu      [s] - save & exit      [f] - fit other model function

1Help   2       3       4       5       6       7Dos    8       9       0Exit
```

$goodness - of - fit\ :$

$$\Gamma = \max imum \quad of \quad \left|\hat{x}_i - x_i\right| / u(x_i) \quad and \quad \left|\hat{y}_i - y_i\right| / u(y_i)$$

$$\Gamma \leq 2$$

Results of ISO 6143 method:

a0	a1	a2
1.9984E-01	4.8283E-02	3.3681E-03

Parameter standard deviations/covariances:
u(a0)   u(a1)   u(a2)   : 2.089E-02   1.065E-02   1.465E-03
cov(a0,a1) cov(a0,a2) :-7.161E-05   7.283E-07
cov(a1,a2)   :-1.424E-05

Remaining SSD is: 1.2974
Weighted distances:

#	x-value	x-dist.	y-dist.
1.00E+00	-2.28E+00	-1.98E-02	3.24E-01
2.00E+00	-1.13E+00	1.45E-01	-3.87E-01
3.00E+00	-4.40E-01	-1.26E-01	3.15E-01
4.00E+00	1.44E+00	3.29E-01	-4.40E-01
5.00E+00	1.90E+00	-1.24E-01	1.56E-01
6.00E+00	2.93E+00	-1.49E-01	1.96E-01
7.00E+00	3.81E+00	-7.38E-02	9.73E-02
8.00E+00	5.07E+00	1.06E-02	-3.85E-02
9.00E+00	6.11E+00	5.60E-01	-1.34E-01
1.00E+01	7.17E+00	-1.11E-01	2.60E-01
1.10E+01	7.83E+00	-6.61E-02	7.69E-02
1.20E+01	9.32E+00	1.40E-01	-2.15E-01

Goodness-of-fit measure: 0.5596

次に、このようにして得られた標本の回帰曲線を使って、ある x の値を与えた時、y の値の<u>予測値</u>がどのような値になり、またその<u>標準不確かさ</u>（標準偏差）$u(y)$ がどの程度であるかを予測してみることにする。予測される y の値そのものは回帰曲線の式

$$y = a + bx + cx^2$$

と回帰係数の値

$$a = 0.19984$$

$$b = 0.048283$$

$$c = 0.0033681$$

の値を使っての x 値から求められる。一方、予測値 y の標準不確かさ（標準偏差）$u(y)$ は回帰曲線の式に不確かさの伝播則（誤差伝播則）を適用することにより、次式

$$\begin{aligned}
u^2(y) &= \left\{\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)u(x) + \left(\frac{\partial y}{\partial a}\right)u(a) + \left(\frac{\partial y}{\partial b}\right)u(b) + \left(\frac{\partial y}{\partial c}\right)u(c)\right\}^2 \\
&= \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 u^2(x) + \left(\frac{\partial y}{\partial a}\right)^2 u^2(a) + \left(\frac{\partial y}{\partial b}\right)^2 u^2(b) + \left(\frac{\partial y}{\partial c}\right)^2 u^2(c) + 2\left\{\left(\frac{\partial y}{\partial a}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial b}\right)u(a,b) + \left(\frac{\partial y}{\partial b}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial c}\right)u(b,c) + \left(\frac{\partial y}{\partial c}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial a}\right)u(c,a)\right\} \\
&= (b + 2cx)^2 u^2(x) + u^2(a) + x^2u^2(b) + x^4u^2(c) + 2\left\{xu(a,b) + x^3u(b,c) + x^2u(c,a)\right\} \\
&= (b + 2cx)^2 \hat{\sigma}_x{}^2 + \hat{\sigma}_a{}^2 + x^2\hat{\sigma}_b{}^2 + x^4\hat{\sigma}_c{}^2 + 2\left\{x\hat{\sigma}_{ab} + x^3\hat{\sigma}_{bc} + x^2\hat{\sigma}_{ca}\right\}
\end{aligned}$$

が得られるので、この式に $x, \hat{\sigma}_x{}^2, a, b, c, \hat{\sigma}_a{}^2, \hat{\sigma}_b{}^2, \hat{\sigma}_c{}^2, \hat{\sigma}_{ab}, \hat{\sigma}_{bc}, \hat{\sigma}_{ca}$ の値を代入して求めることができる。

このような予測の場合とは逆に、あるy 値からx の値とその不確かさを予測したいことがある。これを一般に統計用語で<u>逆推定</u>と言う。逆推定の場合は
上記回帰曲線の式をx について解いた式

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4c(a-y)}}{2c}$$

を使って、<u>逆推定値</u> xとその<u>標準不確かさ</u>（標準偏差）$u(x)$ を求めることができる。
$u(x)$ は上式に不確かさの伝播則（誤差伝播即）を適用して得られる式

$$u^2(x) = \left\{ \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right) u(y) + \left(\frac{\partial x}{\partial a}\right) u(a) + \left(\frac{\partial x}{\partial b}\right) u(b) + \left(\frac{\partial x}{\partial c}\right) u(c) \right\}^2$$

$$= \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)^2 u^2(y) + \left(\frac{\partial x}{\partial a}\right)^2 u^2(a) + \left(\frac{\partial x}{\partial b}\right)^2 u^2(b) + \left(\frac{\partial x}{\partial c}\right)^2 u^2(c) + 2\left\{ \left(\frac{\partial x}{\partial a}\right)\left(\frac{\partial x}{\partial b}\right) u(a,b) + \left(\frac{\partial x}{\partial b}\right)\left(\frac{\partial x}{\partial c}\right) u(b,c) + \left(\frac{\partial x}{\partial c}\right)\left(\frac{\partial x}{\partial a}\right) u(c,a) \right\}$$

$$= \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)^2 \hat{\sigma}_y{}^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial a}\right)^2 \hat{\sigma}_a{}^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial b}\right)^2 \hat{\sigma}_b{}^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial c}\right)^2 \hat{\sigma}_c{}^2 + 2\left\{ \left(\frac{\partial x}{\partial a}\right)\left(\frac{\partial x}{\partial b}\right) \hat{\sigma}_{ab} + \left(\frac{\partial x}{\partial b}\right)\left(\frac{\partial x}{\partial c}\right) \hat{\sigma}_{bc} + \left(\frac{\partial x}{\partial c}\right)\left(\frac{\partial x}{\partial a}\right) \hat{\sigma}_{ca} \right\}$$

から計算により求めらる。

③ x 座標間に相関のある重み付き回帰分析（ ISO 6143:2001(E)）

ISO 6143:2001(E)によれば、x,y 座標共に不確かさのある重み付き回帰分析において、x 座標間に相関がある場合については、回帰係数の誤差分散 $u(b_k,b_l)$ のうち純分散の項（ $k=l$ ）は係数行列の逆行列の要素として求められるが、共分散の項（ $k\neq l$ ）は通常のDeming法では求めることができないため、ある任意の変数（z）によるある関数（F）の偏微分 $(\partial F/\partial z)$ と標準不確かさ $u(z)$ の積が一般的に次式

$$\left(\frac{\partial F}{\partial z}\right)u(z)=\Delta F_z=F\left[z+\frac{u(z)}{2}\right]-F\left[z-\frac{u(z)}{2}\right]$$

で近似できることから、Deming法で求められる n 個の観測値の組 x_i,y_i の最確値 $\hat{x}_i,\hat{y}_i$（最小二乗曲線に乗っている計算値）に最初は $u/2$ を加え、次に$u/2$ を引いた値をそれぞれ求めると、$4n$ 組の値が得られるので、これらから得られる上式と次式

$$u(b_k,b_l)=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial b_k}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial b_l}{\partial x_i}\right)u^2(x_i)+\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial b_k}{\partial y_i}\right)\left(\frac{\partial b_l}{\partial y_i}\right)u^2(y_i)+\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\left[\left(\frac{\partial b_k}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial b_l}{\partial xj}\right)+\left(\frac{\partial b_l}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial b_k}{\partial x_j}\right)\right]u(x_i,x_j)$$

から回帰係数の誤差分散（ $u(b_k,b_l)$ ）を共分散項まで含めて計算できる。

$4n$ 個の x, y 座標データ

$$\left[(xc_i \pm u(x_i)/2, yc_i), \{xc_j, yc_j (j \neq i)\}\right] \quad \text{および} \quad \left[(xc_i, yc_i \pm u(y_i)/2), \{xc_j, yc_j (j \neq i)\}\right]$$

↓

$4n$ 組の回帰係数： $bc_{k,x\pm,i}$ および $bc_{k,y\pm,i}$

↓

n 組の偏微分係数：

$$\Delta bc_{k,i} / \Delta x_i = (bc_{k,x+,i} - bc_{k,x-,i}) / u(x_i) \equiv \partial b_k / \partial x_i$$

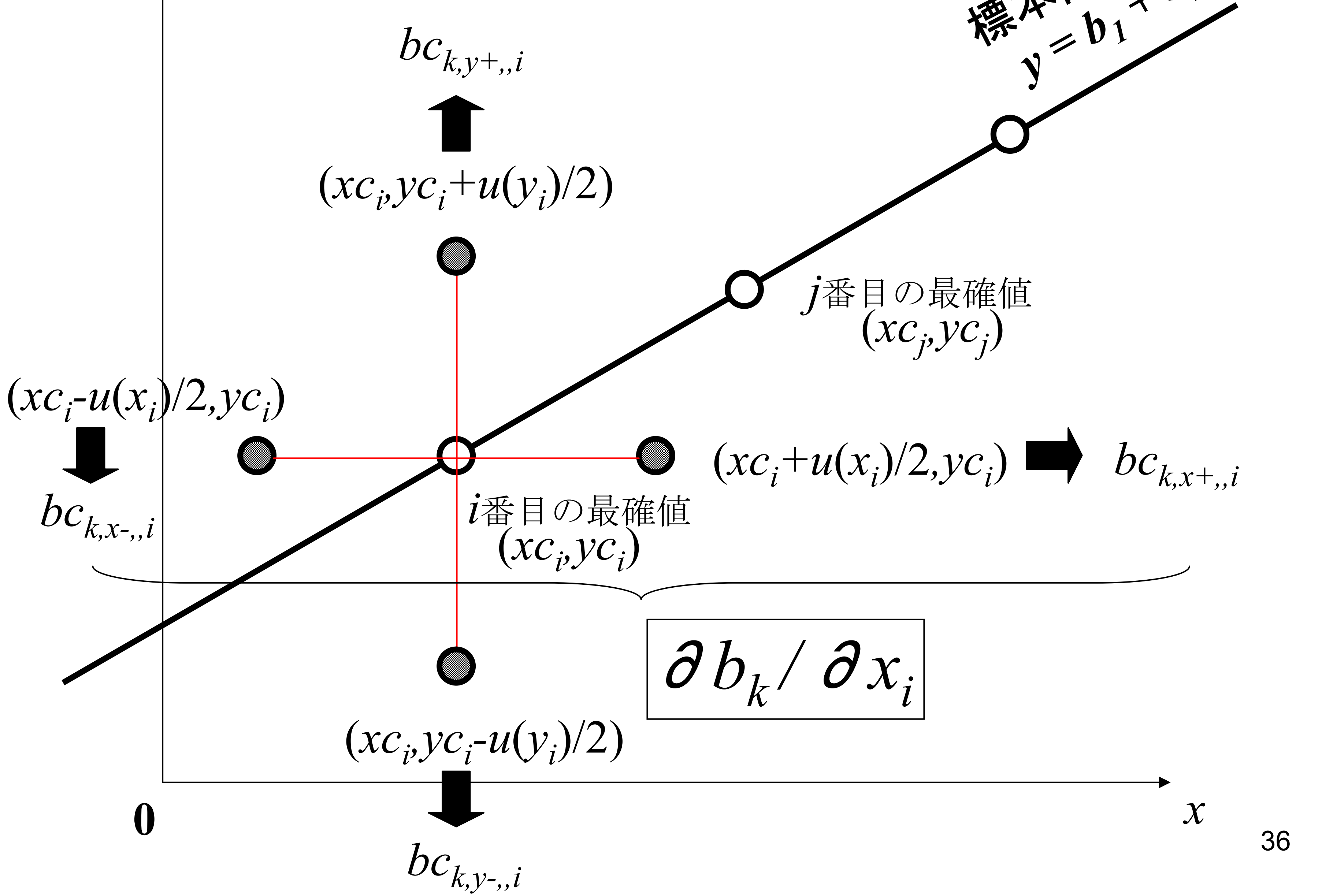
$$\Delta bc_{k,i} / \Delta y_i = (bc_{k,y+,i} - bc_{k,y-,i}) / u(y_i) \equiv \partial b_k / \partial y_i$$

↓

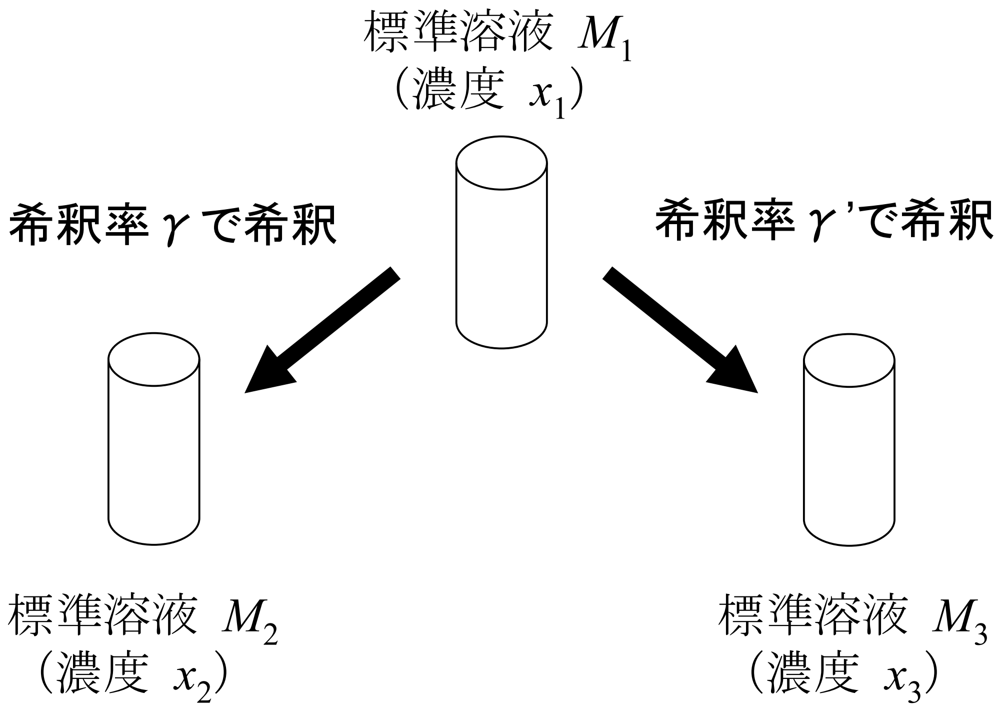
$$u(b_k, b_l) = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial b_k}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial b_l}{\partial x_i}\right) u^2(x_i) + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial b_k}{\partial y_i}\right)\left(\frac{\partial b_l}{\partial y_i}\right) u^2(y_i) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} \left[\left(\frac{\partial b_k}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial b_l}{\partial xj}\right) + \left(\frac{\partial b_l}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial b_k}{\partial x_j}\right)\right] u(x_i, x_j)$$

（注： k, l は回帰係数の個数）

観測データの個数（ $i,j=1,2,3,\ldots,n$ ）
回帰係数の個数（ $l=1,2,3,\ldots,m$ ）



（参考）　x 座標間に相関がある場合の相関の共分散の求め方



相関がある変数 x_i と x_j 間の共分散は

$$u(x_i, x_j) = \left(\frac{\partial x_i}{\partial p}\right)\left(\frac{\partial x_j}{\partial p}\right)u^2(p) + \left(\frac{\partial x_i}{\partial q}\right)\left(\frac{\partial x_j}{\partial q}\right)u^2(q) + \left(\frac{\partial x_i}{\partial r}\right)\left(\frac{\partial x_j}{\partial r}\right)u^2(r) + \cdots\cdots$$

ここで、$p, q, r, \ldots$ は相関のある変数間の共通のパラメータ

標準M_2の濃度　x_2 は

$$x_2 = \gamma x_1$$

となる。すなわち、標準 M_1 の濃度 x_1 の不確かさは標準M_2 の濃度 x_2 に伝搬していることになる。したがってそれぞれの標準溶液の濃度の誤差分散は

$$u^2(x_1) = \left[u(x_1)\right]^2$$

$$u^2(x_2) = \left(\frac{\partial x_2}{\partial \gamma}\right)^2 \left[u(\gamma)\right]^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial x_1}\right)^2 \left[u(x_1)\right]^2 = x_1^{\ 2}\left[u(\gamma)\right]^2 + \gamma^2\left[u(x_1)\right]^2$$

となる。一方、濃度　x_1 と濃度 x_2 間の共分散は、$x_2 = \gamma x_1$ の関係式に誤差伝搬則を適用することにより

$$u(x_1, x_2) = \left(\frac{\partial x_1}{\partial \gamma}\right)\left(\frac{\partial x_2}{\partial \gamma}\right)\left[u(\gamma)\right]^2 + \left(\frac{\partial x_1}{\partial x_1}\right)\left(\frac{\partial x_2}{\partial x_1}\right)\left[u(x_1)\right]^2$$

$$= 0 \cdot x_1 \cdot \left[u(\gamma)\right]^2 + 1 \cdot \gamma \cdot \left[u(x_1)\right]^2$$

$$= \gamma\left[u(x_1)\right]^2$$

同様にして標準 M_3 の濃度 x_3 は

$$x_3 = \gamma' x_1$$

となるから、濃度 x_3 の誤差分散および濃度 x_1 と濃度 x_3 間の共分散は

$$u^2(x_3) = \left(\frac{\partial x_3}{\partial \gamma'}\right)^2 \left[u(\gamma')\right]^2 + \left(\frac{\partial x_3}{\partial x_1}\right)^2 \left[u(x_1)\right]^2 = x_1{}^2\left[u(\gamma')\right]^2 + \gamma'^2\left[u(x_1)\right]^2$$

$$u(x_1, x_3) = \left(\frac{\partial x_1}{\partial \gamma'}\right)\left(\frac{\partial x_3}{\partial \gamma'}\right)\left[u(\gamma')\right]^2 + \left(\frac{\partial x_1}{\partial x_1}\right)\left(\frac{\partial x_3}{\partial x_1}\right)\left[u(x_1)\right]^2$$

$$= 0 \cdot x_1 \cdot \left[u(\gamma')\right]^2 + 1 \cdot \gamma' \cdot \left[u(x_1)\right]^2$$

$$= \gamma'\left[u(x_1)\right]^2$$

となる。また濃度 x_2 と濃度 x_3 間の共分散は

$$x_2 = \gamma x_1$$

$$x_3 = \gamma' x_1 = \gamma'\left(\frac{x_2}{\gamma}\right) = \left(\frac{\gamma'}{\gamma}\right) x_2$$

の関係式に誤差分散の伝搬則を適用することにより

$$
\begin{aligned}
u(x_2, x_3) &= \left(\frac{\partial x_2}{\partial \gamma'}\right)\left(\frac{\partial x_3}{\partial \gamma'}\right)[u(\gamma')]^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial \gamma}\right)\left(\frac{\partial x_3}{\partial \gamma}\right)[u(\gamma)]^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial x_2}\right)\left(\frac{\partial x_3}{\partial x_2}\right)[u(x_2)]^2 \\
&= 0 \cdot x_1 \cdot [u(\gamma')]^2 + x_1 \cdot \left(-\frac{\gamma'}{\gamma^2}\right) x_2 \cdot [u(\gamma)]^2 + 1 \cdot \left(\frac{\gamma'}{\gamma}\right) \cdot [u(x_2)]^2 \\
&= x_1 \cdot \left(-\frac{\gamma'}{\gamma^2}\right)(\gamma x_1) \cdot [u(\gamma)]^2 + \left(\frac{\gamma'}{\gamma}\right) \cdot \left\{x_1{}^2 [u(\gamma)]^2 + \gamma^2 [u(x_1)]^2\right\} \\
&= -\left(\frac{\gamma'}{\gamma}\right) x_1{}^2 [u(\gamma)]^2 + \left(\frac{\gamma'}{\gamma}\right) x_1{}^2 [u(\gamma)]^2 + \left(\frac{\gamma'}{\gamma}\right) \gamma^2 [u(x_1)]^2 \\
&= \gamma\gamma' [u(x_1)]^2
\end{aligned}
$$

となる。