



ともに挑む。つぎを創る。

# 不確かさに関するQ&A 総合討論

産業技術総合研究所 計量標準総合センター  
田中秀幸

NATIONAL INSTITUTE OF  
ADVANCED  
INDUSTRIAL  
SCIENCE &  
TECHNOLOGY

# いつもありがとうございます。

- いつも貴重なお話をいただき、大変ありがとうございます。
- これからの皆様のご健康、ご多幸をお祈り申し上げます。
- いつも不確かさに関する最新情報をご提供していただき、ありがとうございます。これからもよろしく願います。
- 不確かさクラブの運営、いつも大変ありがとうございます。
- いつもお世話になりありがとうございます。
- 毎年、新たな発見があり楽しみにしております。よろしく願います。
- いつもタイムリーな話題を届けていただき、ありがとうございます。当日はよろしく願います。
- いつもお世話になります。お忙しい中、総会を開催していただきありがとうございます。
- 総会では、測定不確かさに関する最新の動向を知ることができ、毎回大変有意義に聴講させていただいております。
- **毎回多くの皆様のご参加誠にありがとうございます。**

- RMP関係のご講演、誠にありがとうございます。今回の講演への参加で理解を深められればと思います。
- JCGM活動の進捗状況を教えていただければ幸いです。
- 久しぶりの参加で、最新情報に興味があります。よろしく願いいたします。
- 毎年田中様のJCGM-WG1出席報告を楽しみにさせていただいております。
- 標準物質関連以外で変化点があれば教えてください。
- IAFとILACが統合されるそうですが、従来のilac-MRAの認定シンボルマークは、今後も引き続き継承されるのでしょうか？
- **いかがでしたでしょうか？ 十分な情報を得られましたでしょうか？**

Q:いつも貴重な話題提供ありがとうございます。AIの性能向上が目覚ましい今日この頃ですが、AIを不確かさ評価に役立てるようなヒントはありますか。

Q:「AIの不確かさ」のような研究の動向などを知りたいです。  
不確かさ解析へのAIの応用・援用事例なども知りたいと思っています。

A:ChatGPTで不確かさの例題を解いてみましょう。

簡易的なバネばかりを作成した。目盛りにはものさしを取り付け、長さを読み取れるようにした。このとき、分銅をバネばかりに取り付け、そのときの長さの指示値を記録した。この結果に一次式を当てはめた校正を行う。

繰返し回数	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
分銅(x/g)	0	20	40	60	80	100	120	140	160	180
長さ(y/mm)	8	19	32	39	51	64	72	78	84	90

表：分銅の質量とばねの伸びの関係

このとき、ある品物（測定対象物）をこのバネばかりに取り付けたところ、53 mmを指した（測定1回）。この品物の質量とその不確かさ（校正作業に伴う不確かさのみ考え、その他の不確かさは無視してよい）を求めよ

模範解答

傾き

$$\hat{\beta} = 0.465$$

切片

$$\hat{\alpha} = 11.836$$

残差標準偏差

$$\hat{\sigma}_e = 3.775$$

$$l = 1$$

$$n = 10$$

$$y_0 = 85$$

$$\bar{y} = 53.7$$

$$\sum (x_i - \bar{x})^2 = 33000$$

標準不確かさ

$$u(x_0) = 8.5$$

$$\text{測定値 } x_0 = \frac{y_0 - \hat{\alpha}}{\hat{\beta}} = 88.5$$

$$u^2(x_0) = \frac{\hat{\sigma}_e^2}{\hat{\beta}^2} \left\{ \frac{1}{l} + \frac{1}{n} + \frac{(y_0 - \bar{y})^2}{\hat{\beta}^2 \sum (x_i - \bar{x})^2} \right\}$$

## AIの回答

校正データに一次式  $y = ax + b$  を当てはめて求めます。  
( $x$ : 質量[g]、 $y$ : 長さ[mm])

## 1. 最小二乗法による校正式

平均値

$$\bar{x} = 90, \quad \bar{y} = 53.7$$

傾き

$$a = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2} = \frac{15350}{33000} = 0.465$$

切片

$$b = \bar{y} - a\bar{x} = 53.7 - 0.465 \times 90 = 11.84$$

したがって校正式

$$y = 0.465x + 11.84$$

## 2. 測定値から質量を求める

測定値

$$y = 53 \text{ mm}$$

校正式を逆にして

$$x = \frac{y - b}{a}$$

$$x = \frac{53 - 11.84}{0.465}$$

$$x \approx 88.5 \text{ g}$$

## 3. 校正による不確かさ

回帰残差から標準偏差

$$s = \sqrt{\frac{\sum e_i^2}{n - 2}} = \sqrt{\frac{113.9}{8}} = 3.77 \text{ mm}$$

質量への伝播

$$u(x) = \frac{s}{a}$$

$$u(x) = \frac{3.77}{0.465} \approx 8.1 \text{ g}$$

(測定1回なのでこの値をそのまま使用)

## 4. 最終結果

$$x = (88.5 \pm 8.1) \text{ g}$$

(標準不確かさ)

ただし、

必要なら、この問題でよく出る

- 逆回帰の不確かさの厳密式
- レポートで満点を取る書き方(式の並べ方)も説明できます。

と言ってくる。

傾きのばらつきが入っていない!

「逆回帰の不確かさの厳密式で解いてください。」としてみる。

校正式

$$y = ax + b$$

を最小二乗法で求め、その**逆回帰(inverse regression)**による不確かさを計算します。

## 1. 回帰直線

データ数

$$n = 10$$

平均

$$\bar{x} = 90, \bar{y} = 53.7$$

$$S_{xx} = \sum (x_i - \bar{x})^2 = 33000$$

$$S_{xy} = \sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = 15350$$

傾き

$$a = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = 0.46515$$

切片

$$b = \bar{y} - a\bar{x} = 11.836$$

校正式

$$y = 0.46515x + 11.836$$

## 2. 測定値から質量

測定値

$$y_0 = 53$$

$$x_0 = \frac{y_0 - b}{a}$$

$$x_0 = \frac{53 - 11.836}{0.46515}$$

$$x_0 = 88.50 \text{ g}$$

### 3. 回帰の残差標準偏差

残差平方和

$$\sum (y_i - \hat{y}_i)^2 = 113.88$$

$$s = \sqrt{\frac{113.88}{n-2}}$$

$$s = 3.77 \text{ mm}$$

### 4. 逆回帰の不確かさ(厳密式)

逆回帰の標準不確かさ

$$u(x_0) = \frac{s}{|a|} \sqrt{\frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

ここで

•測定回数  $m = 1$

あまりこういう書き方はしないが正解

計算

$$\frac{1}{m} = 1$$

$$\frac{1}{n} = 0.1$$

$$(x_0 - \bar{x})^2 = (88.5 - 90)^2 = 2.25$$

$$\frac{2.25}{33000} = 0.000068$$

$$\sqrt{1.100068} = 1.049$$

$$\frac{s}{a} = \frac{3.77}{0.46515} = 8.11$$

$$u(x_0) = 8.11 \times 1.049$$

$$u(x_0) = 8.51 \text{ g}$$

### 5. 最終結果

$$x = (88.5 \pm 8.5) \text{ g}$$

(標準不確かさ)

しっかり解けているが、ちょっと心配

Q:最近デジタルレファレンスマテリアルの導入が進んでいると思うが分析の不確かさに影響しますか。

A:現状デジタルレファレンスマテリアル、と呼ばれているものは、NMR等にて用いられるスペクトルライブラリーに代わるものという認識です。NMIJにおいても結構使える印象、という話もあるようです。

Q:最近の大学でのレクチャはございますか。学生にも学んでほしいです

A:現在私が受け持っているのは、筑波大学の理学部系大学院生向けを1コマと東京理科大学部生向けを4コマというところですか。筑波大学も東京理科大学も半期の授業を計測標準で分担して、いろいろな分野を教える、という感じですか。その中に不確かさが含まれている、ということです。

Q:、MCMをどのような場合に適用できるのか(すべきなのか)、いまいち判然としておりません。私の理解力の問題なのだろうとお恥ずかしながら感じてはいますが、同様の所感を持っている人は他にもいらっしゃるかもしれないと思ひまして、GUMとMCMの典型的な使い分けや、それぞれの利と不利等、具体的な例を用いて教えて頂けましたら嬉しく思います。

Q: 不確かさ評価方法が「モンテカルロ法」に変更されるは、どうなったのでしょうか？

A:不確かさ評価がモンテカルロ法にすべて置き換わることはないでしょう。あくまでも通常の不確かさ評価が行えないときにでも適用できる汎用性が高い方法だということです。(JCGM WG1ではモンテカルロ法のことをGold Standardと言っています。つまり、最も一般性が高い手法である、ということです。)

有利不利の話をする、通常の不確かさの伝播側がモンテカルロ法を上回ることは数学的には全くないでしょう。

ただし、モンテカルロ法を試験所認定の分野に適用するときにはいろいろと問題があります。

## 問題点1

### JIS Q17025:2018

7.11.2 データの収集、処理、記録、報告、保管又は検索に使用されるラボラトリ情報マネジメントシステムは、導入の前に、ラボラトリによって、ラボラトリ情報マネジメントシステム内のインターフェースが適正に機能していることを含め、機能性の妥当性を確認しなければならない。ラボラトリ情報マネジメントシステムは、ラボラトリによるソフトウェアの設定変更又は市販の既製ソフトウェアの変更を含め、変更が行われる場合には、使用前に承認し、文書化し、妥当性を確認しなければならない。

- MCMはコンピュータ上で行うシミュレーションの一種であるので、その際に用いられたソフトウェアの妥当性が必ず確認されていなければならないが、どのように、又は、どの程度確認されていれば良い、ということにするのか？

- ある標準器を校正したときの結果が、非対称の確率分布を持つ場合、その標準器を用いて下位の測定器の校正を行ったときの不確かさはどうなるのか？

下位の測定器の校正の不確かさが、標準器の不確かさより十分大きな場合は今まで通りで問題ない。

標準器の不確かさが、下位の測定器の校正の不確かさの主要因の一つであった場合には？

そのような校正証明書をもらった下位の事業者はどうすれば良いのか？

**Purpose:** This NIST Certified Reference Material is intended for use as a primary standard for quantitative nuclear magnetic resonance (qNMR) methods.

**Description:** A unit of NIST PS1 consists of two vials, each containing approximately 500 mg of purified crystalline benzoic acid.

**Certified Values:** Certified values, valid for use of quantities  $\geq 5$  mg, are provided in Table 1. A NIST certified value is a value for which NIST has the highest confidence in that all known or suspected sources of bias have been accounted for. Confidence in the certified values was achieved through acidimetric titration and qNMR primary measurement procedures.

Table 1. Certified Values for Benzoic Acid in NIST PS1

Values are metrologically traceable to the International System of Units (SI) mole and kilogram.

	Mass fraction, g/g <sup>(a,b,c)</sup>	Specific amount, mol/kg <sup>(a,b,c)</sup>
Benzoic Acid <sup>d</sup>	0.99992 -0.00006 +0.00004	8.1880 -0.0005 +0.0004

- Values are expressed as  $x - U_{L_{95\%}} + U_{H_{95\%}}$ , where  $x$  denotes the certified value and  $U_{L_{95\%}}$  and  $U_{H_{95\%}}$  indicate the low and high boundaries of a 95% coverage interval for the true value of the measurand.
- The standard uncertainty may be approximated as  $u(x) = U_{L_{95\%}} / 2$ .
- If a Monte Carlo method, as described in the GUM Supplement 1 [1], is employed to propagate the uncertainty of the certified value, this may be accomplished via “The NIST Uncertainty Machine” (<https://uncertainty.nist.gov/>) [2], whereby the certified mass fraction is assigned a beta distribution, Beta (Shape1, Shape2), with parameters Shape1=88873.7, Shape2=7.11. The assignment for the certified specific amount may be derived from this distribution using the molar mass ( $M$ ) of benzoic acid.
- The value of  $M$  was evaluated empirically through stable isotope relative abundance measurements as 122.12204 g/mol with an associated standard uncertainty  $u(M) = 0.00019$  g/mol.

## NISTの標準物質

上下限が異なる包含区間。  
これが受け入れられるか？

標準不確かさが欲しいときは、下側の包含区間の値を2で割る。

Q:〇〇について教えてほしい。不確かさの講習を当社向けに行ってほしい・・・

A:自社向けに不確かさ評価についての指導や、社で行っている測定の不確かさ評価法を確立してほしい、不確かさ評価結果のレビュー等を行ってほしい、という依頼がたまにあります。これらは「産総研技術コンサルティング制度」にて承ります。金額は数十万円からスタートです。詳細は以下にあります。

<https://www.aist-solutions.co.jp/solutions/consulting/>  
不確かさ評価に関する技術コンサルのご相談は、  
[uncertainty-club-ml@aist.go.jp](mailto:uncertainty-club-ml@aist.go.jp)  
までどうぞ。

第19回不確かさクラブ総会は以上で終了です。  
どうもありがとうございました。

