

# Bayesian Statistical Modeling on Actual Testing Data: A Proposal to Estimate Within-Laboratory Precision

氏 名 三宅 大輔

研究室名 計算システムズ生物学 研究室

主指導教員名（論文博士の場合は推薦教員名） 金谷重彦 教授

内容梗概（1ページ目に収めること）

定量分析において分析結果が信頼できることは重要である。信頼性のある結果を得るために、ISO/IEC 17025 : 2017 は認定試験所に分析法の性能評価を要求している。精度は測定におけるばらつきの指標であり、分析法の重要な性能特性の一つである。食品分析において室間精度はよく研究されているが、室内精度の予測に関する体系的な研究は少ない。現状、包括的に精度を推定できる実践的な方法はなく、試験所にとって分析法の性能評価における課題となっていた。一方、観測データに確率モデルを適用して現象を解釈又は予測する方法論として統計モデリングがある。マルコフ連鎖モンテカルロ法によるベイズ推定は化学測定にも応用可能であり、実際のテストデータの分布を表現することができる。そこで本研究では種々の統計モデリングを検討し、試験所の分析システム毎に精度を適切かつ簡便に推定する手法の開発を目指した。データには試験所における実際のテストで得られた二重分析の結果を用いた。検討においては先行研究、統計学上の理論及び観測された事象を組み入れながら手法を拡張し、最終的に階層ベイズモデルを構築した。回帰にはハミルトニアン・モンテカルロ法を用い、R 及び Stan により実装した。統計モデルの基本構造にはカイ二乗分布、予測子の固定効果部分には定数項及び濃度依存項を持つ非線形関数、ランダム効果の階層事前分布には対数正規分布を想定した。300 以上のインスタンスを解析することにより、想定したモデルに良好に適合する結果が得られた。同手法は幅広い測定原理に基づいた様々な分析対象物質に対して適用可能であった。推定結果は概ね Codex の基準の範囲内であったが、高感度検出器を用いた幾つかのケースでは同範囲を下回る標準偏差を示した。以上の結果を基に、試料タイプに関係なく、本モデルで予測した室内精度を実際の分析の現場における内部品質管理や不確かさの推定に利用することを提案した。研究の成果により、内部品質管理として日常的に実施されている二重分析のデータを用い、試験所における個別の分析システム毎に精度を正確かつ簡便に予測することができるようになる。