分散分析と実験計画 (Variance analysis and the design of experiments)

Bernard Lamers

平成 15 年 2 月 21 日

1 実験計画について

- 物理や化学の実験を行うとき、初心者 (統計的手法を知らない研究者) はしばしば間違った考えにとらわれ、無駄な努力をすることが多い。
- 例：薬品の製作。
  - 収率 (理論上得られるはずの量の何%が実際に得られたか) を左右する因子として反応温度、反応圧力、溶剤などが考えられる。
  - 目標：反応温度 10℃上げたら収率をどれだけ変わるかを知ること。これを検査するために、他の条件 (反応温度など) は必ず一定としておいて、温度だけを 10℃動かさなければならないというような考え方をする人がいる。実はその人々が非常に無駄な努力を払っている。
- 本章の目標：実験計画法を習うことで統計的手法によっていかに効率良く数少ない実験回数で大きな情報知識が得られるかを認識すること。

2　因子とデータ構造

ある特定の**特性量**(characteristics) について得られた実験あるいは測定の結果は一般に一定ではなく、変動する。実験の結果を左右するものとしていくつかの因子が考えられる。これらの因子の水準は実験者によって制御できるものもあり、制御できないもの (測定誤差など) もある。

データの変動の原因を分析するには、ここで**構造模型**(structural model) を使います。

$$x = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \epsilon \tag{1}$$

- x: データとして得られる特性量
- μ: 因子の水準によらない定数
- α_i, β_j, γ_k:それぞれの因子 A, B, C がデータの変動に及ぼす影響を表す
- ϵ: 測定誤差

3　1 元配置の分散分析

1 元配置の分散分析に入る前に、いくつかの概念を説明する必要がある。

3.1　構造模型

一つだけの因子 A を考え、その状態 (水準) をいろいろ変えて比較する方法が 1 元配置法と言われる。因子の水準は k 個として、それらを A_1, A_2, $\cdots$, A_k とする。因子 A の水準が A_i のとき、**測定値**(measured value) が n_i 個あるとして、それらを $x_{ij}(j = 1, 2, \cdots, n_i)$ とする。

$$\begin{aligned} x_{ij} &= \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij} \\ i = 1, 2, \cdots, k; &\quad j = 1, 2, \cdots, n_i \end{aligned} \tag{2}$$

ただし、

$$\sum_{i=1}^{k} n_i \alpha_i = 0 \tag{3}$$

式 (3) は間接的に μ を適切に定める必要を表しています。例えば表 1 の場合、μ を勝手に 20 に定めると (3) が成り立たない。

状態	測定値の数	測定値
A_1	1	15
A_2	1	20
A_3	3	17, 28, 30

表 1: ある実験で得られた測定値

$$\mu = 20 : \sum_{i=1}^{k} n_i \alpha_i = 1 \times -5 + 1 \times 0 + 3 \times 5 = 10 \tag{4}$$

しかし、μ を適切の値 (表 1 の場合 22) に定めると、(3) が成り立つ。

$$\mu = 22 : \sum_{i=1}^{k} n_i \alpha_i = 1 \times -7 + 1 \times -2 + 3 \times 3 \tag{5}$$

$$= -7 + -2 + 9 = 0 \tag{6}$$

3.2 測定誤差に関する仮定

式 (2) の ϵ_{ij} は誤差を表す確率変数である。これについては次のことを仮定する。

- ϵ_{ij} は互いに独立である。
- ϵ_{ij} は同一の正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従う。(3.7 で紹介する分散分析における F-検定が正規分布を要求する)

3.3 中心効果 (central effect) と主効果 (main effect)

式 (2) の μ, α_i は定数とする。μ は**中心効果**、α_i は A_i による**主効果**と呼ばれる。

3.4　効果の推定

次のものも定義しましょう：

- 測定値の数の総和 (the total number of measured values):

$$N = \sum_{i=1}^{k} n_i \tag{7}$$

- 状態 A_i の測定値の平均 (the average measured value of state A_i):

$$\bar{x}_{i.} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} x_{ij} \tag{8}$$

- すべての状態の測定値の平均 (the average measured value of all states):

$$\begin{aligned} \bar{x}_{..} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} x_{ij} \qquad (9) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{k} n_i \bar{x}_{i.} \qquad (10) \end{aligned}$$

(2)、(3) より (8) の構造式は

$$\bar{x}_{i.} = \mu + \alpha_i + \bar{\epsilon}_{i.} \tag{11}$$

そして (10) の構造式は

$$\bar{x}_{..} = \mu + \bar{\epsilon}_{..} \tag{12}$$

になる。したがって、もし

$$\hat{\mu} = \bar{x}_{..}, \quad \hat{\alpha}_i = \bar{x}_{i.} - \hat{\mu}, \quad i = 1, \cdots, k \tag{13}$$

をそれぞれ μ,α_i の推定量と定めれば、これらの構造式は

$$\hat{\mu} = \mu + \bar{\epsilon}_{..}, \quad \hat{\alpha}_i = \alpha_i + \bar{\epsilon}_{i.} - \bar{\epsilon}_{..} \tag{14}$$

となり、これらは**不偏推定量**(unbiased estimator)(3.3 (p. 78) を参照) であることが分かる。

これらの分散は (15) になる。その証明はここで省略します。

$$V(\hat{\mu}) = \frac{\sigma^2}{N}, \quad V(\hat{\alpha}_i) = \frac{(N/n_i - 1)\sigma^2}{N}, \quad i = 1, \cdots, k \tag{15}$$

3.5 平方和 (Sum of squares)

因子 A の**平方和**(sum of squares) は S_A と書き、以下のように定義する。

$$S_A = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} \hat{\alpha}_i^2 \tag{16}$$

$$= \sum_{i=1}^{k} n_i (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})^2 \tag{17}$$

これに対して、データ全体の平方和は

$$S_T = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} (x_{ij} - \bar{x}_{..})^2 \tag{18}$$

です。また、

$$\hat{\epsilon}_{ij} = x_{ij} - \hat{\mu} - \hat{\alpha}_i \tag{19}$$

$$= x_{ij} - \bar{x}_{i.} \tag{20}$$

を**残差**(residual) と呼ぶが、この 2 乗和

$$S_E = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} \hat{\epsilon}_{ij}^2 \tag{21}$$

$$= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} (x_{ij} - \bar{x}_{i.})^2 \tag{22}$$

S_T, S_A と S_E の関係について、次の公式が重要です：

$$S_T = S_A + S_E \tag{23}$$

さて、S_A および S_E の**期待値**(expectation) は次のようになる。

$$E(S_A) = \sum_{i=1}^{k} n_i \alpha_i^2 + (k-1)\sigma^2, \quad E(S_E) = (N-k)\sigma^2 \tag{24}$$

3.6 不偏分散 (unbiased variance)

S_A、S_E の期待値はいずれも σ^2 の定数倍になるが、その定数のことをそれぞれ S_A、S_E の**自由度**(degree of freedom)ϕ_A、ϕ_E と呼ぶ。つまり、

$$\phi_A = k-1, \quad \phi_E = N-k \tag{25}$$

S_A、S_E をその自由度で割ったものを**不偏分散**(unbiased variance)V_A、V_E と呼ぶ。

$$V_A = \frac{S_A}{\phi_A}, \quad V_E = \frac{S_E}{\phi_E} \tag{26}$$

そうすると、

$$E(V_A) = \frac{\sum_i n_i \alpha_i^2}{(k-1)} + \sigma^2, \quad E(V_E) = \sigma^2 \tag{27}$$

となる。$E(V_E) = \sigma^2$ であるから、V_E をもって σ^2 の推定量とすれば、これは不偏推定となることが分かる。したがって、今後 σ^2 の推定量 $\hat{\sigma^2}$ を V_E に定めることにする。つまり、

$$\hat{\sigma^2} = V_E \tag{28}$$

3.7 分散分析 (variance analysis)

分散分析を行うため、因子 A の各状態 $A_1 \cdots A_k$ がデータの変動に影響を及ぼさない、つまり各状態 $A_1 \cdots A_k$ が及ぼす影響 $\alpha_1 \cdots \alpha_k$ が 0 である**帰無仮説**(null hypothesis) を検定する。

$$H_0 = \alpha_1 = \cdots = \alpha_k = 0 \tag{29}$$

H_0 が真なら、V_A と V_E はともにその期待値が σ^2 となるが、式 (27) から分かるように、H_0 から遠ざかると共に V_A は大きくなる傾向を持つ。従って、H_0 から遠ざかると共に

$$F = \frac{V_A}{V_E} \tag{30}$$

も大きくなる。

証明は省略するが、H_0 が真であれば、F は自由度 (ϕ_A, ϕ_E) の F-分布をする。以上のことから、次のように**有意水準**(significance level)α の検定方式が得られることが分かるだろう。

- $F > F_{\phi_E}^{\phi_A}(\alpha)$ なら、H_0 を否定する。
- $F < F_{\phi_E}^{\phi_A}(\alpha)$ なら、H_0 を採択する。

以上の分析をしばしば、**分散分析表**(variance analysis table) と呼ばれる表 2 のような形でまとめて書くことが多い。

要因	平方和	自由度	不変分散	F 値	F-分布%点
A	S_A	$\phi_A = k - 1$	$V_A = S_A/\phi_A$	V_A/V_E	$F_{\phi_E}^{\phi_A}(\alpha)$
誤差	S_E	$\phi_E = N - k$	$V_E = S_E/\phi_E$		
計	S_T	$\phi_T = N - 1$			

表 2: 1 元配置分散分析表

3.8 適用例

適用例として演習問題 5.2.3(p. 164) を取り上げる。

帰無仮説 H_0：4 人の間に差がない。

$$
\begin{aligned}
\text{中心効果 } \hat{\mu} &= \frac{335.5}{20} = 16.775 \\
\text{主効果} & \\
\hat{\alpha_1} &= \frac{84.3}{5} - 16.775 = 16.86 - 16.775 = 0.085 \\
\hat{\alpha_2} &= \frac{85.1}{5} - 16.775 = 17.02 - 16.775 = 0.245 \\
\hat{\alpha_3} &= \frac{82}{5} - 16.775 = 16.4 - 16.775 = -0.375 \\
\hat{\alpha_4} &= \frac{84.1}{5} - 16.775 = 16.82 - 16.775 = 0.045 \\
S_A &= 5 \times (0.085)^2 + 5 \times (0.245)^2 + 5 \times (-0.375)^2 + 5 \times (0.045)^2 \\
&= 1.0495 \\
S_E &= (16.7 - 16.86)^2 + (-0.06)^2 + (0.44)^2 + (-0.26)^2 + (0.04)^2 \\
&+ (16.8 - 17.02)^2 + (-0.52)^2 + (0.48)^2 + (-0.12)^2 + (0.38)^2 \\
&+ (16.0 - 16.4)^2 + (0.4)^2 + 0 + (0.1)^2 + (-0.1)^2 \\
&+ (16.9 - 16.82)^2 + (-0.12)^2 + (-0.02)^2 + (0.38)^2 + (-0.32)^2 \\
&= 1.6404
\end{aligned}
$$

要因	平方和	自由度	不偏分散	F 値	F-分布%点
A	1.0495	3	0.3498	3.4122 $<$	$F_{16}^{3}(0.01) = 5.292$
誤差	1.6404	16	0.1025		
計	2.69	19			

F-値 (3.4122) は $F_{16}^{3}(0.01)$ より小さいので、有意水準 0.01 で H_0 を採択することになる。つまり、有意水準 0.01 で 4 人の間に差がないということになる。

しかし、$F_{16}^{3}(0.05)$ は 3.24 であるので、有意水準 0.05 の場合、F-値が $F_{16}^{3}(0.05)$ より大きい。従って、有意水準 0.05 でかろうじて H_0 を否定しなければならないことになる。

4　2元配置分散分析

特性値(sample characteristic) が二つの因子 A、B に影響されるような実験を 2 元配置実験という。因子 A の水準を $A_1, A_2, \cdots, A_p$、因子 B の水準を $B_1, B_2, \cdots, B_q$ とし、水準の組合せ (A_i, B_j) のもとで実験を r 回繰り返し、その測定値を x_{ijk} としよう。k は繰り返し番号である。2 因子以上の多元配置では構造模型として、中心効果、主効果の他に交互作用効果なる新たな効果を考える場合がある。

交互作用という概念を例で明らかにしよう。たとえば、ある化学反応で 2 種の触媒の収率に及ぼす影響の差は、低温では目立たないが、高温でははっきり出てくるということがしばしば起こる。この場合、触媒という因子と温度という因子には交互作用があることになる。また、2 種の良否は熟練工が操作すると、悪い機械は腕でカバーするため、あまり目立たないが、未熟な工員が操作すると顕著に現れるという例がある。この場合も、機械という因子 (良い機械と悪い機械という水準がある) と工員という因子には交互作用があり、その効果が製品の良否に影響を与えることになる。

以上のように二つの因子 A、B があるとき、A の水準が特性値に及ぼす効果の差が B のどの水準にあるかによって異なる場合、A と B の間には交互作用が存在することになる。このような観点からある 2 因子間に交互作用があるか否かは、実験する前から、技術的、直観的に分かる場合が多いのである。

ここではまず交互作用効果がない場合の 2 元配置分散分析を考える。後でこの方法を交互作用効果がある場合の 2 元配置分散分析方法に拡張する。

4.1　交互作用のない場合

表 5.6(p. 167) は交互作用がない場合の 2 元配置分散分析表である。表で使われているシンボルの定義は 5.3.1 節の (1)–(14) に書いてある。

早速例を見てみよう。

例 1(p.168):

- $H_0(A)$: 因子 A の各状態 A_1, A_2, A_3, A_4 が及ぼす影響 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha 3, \alpha 4$ が 0 である。

- $H_0(B)$：因子 B の各状態 B_1, B_2, B_3 が及ぼす影響 $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ が 0 である。

[解](p. 169) の通り、$H_0(A)$ も $H_0(B)$ も採択しなければならない。したがって、A、B 両因子とも有意差は認められない。

演習問題 5.3.A.3(p. 173)

- 誤差の平方和 S_E : $S_T = S_A + S_B + S_E$
  $S_E = S_T - S_A - S_B = 41.2 - 14.6 - 20.5 = 6.1$
- A の自由度 ϕ_A : $\phi_A = p - 1 = 4 - 1 = 3$
- B の自由度 ϕ_B : $\phi_B = q - 1 = 3 - 1 = 2$
- 誤差の自由度 ϕ_E : $\phi_E = (p-1)(q-1)$
  $= 3 \times 2 = 6$
- A の不偏分散 V_A : $V_A = S_A/\phi_A$
  $= 14.6/3 = 4.87$
- B の不偏分散 V_B : $V_B = S_B/\phi_B$
  $= 20.5/2 = 10.25$
- 誤差の不偏分散 V_E : $V_E = S_E/\phi_E$
  $= 6.1/6 = 1.02$
- A の F-値: $F_A = V_A/V_E$
  $= 4.87/1.02 = 4.79$
- B の F-値: $F_B = V_B/V_E$
  $= 10.25/1.02 = 10.08$

  したがって、表 (ロ) は表 3 の通りになります。

4.2 交互作用のある場合

表 5.9(p. 172) は交互作用がある場合の 2 元配置分散分析表である。表で使われているシンボルの定義は 5.3.2 節の (15)–(25) に書いてある。

要因	平方和	自由度	不偏分散	F-値
A	14.6	3	4.87	4.79
B	20.5	2	10.25	10.08
誤差	6.1	6	1.02	
計	41.2			

表 3: ブランクが埋まっている表 (ロ)

さて、2 元配置で交互作用がある場合、繰り返し数 r が 2 以上とならないと分析ができない。

交互作用がある 2 元配置分散分析の例を取り上げよう。

演習問題 5.3.A.4

- 中心効果 $\hat{\mu} = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{q} \sum_{k=1}^{r} \frac{x_{ijk}}{pqr}$
  $= \frac{473.6}{24} = 19.73$
- 主効果：
  - $\hat{\alpha_1} = \frac{148.2}{8} - 19.73 = 18.53 - 19.73 = -1.21$
  - $\hat{\alpha_2} = \frac{161.8}{8} - 19.73 = 20.23 - 19.73 = 0.49$
  - $\hat{\alpha_3} = \frac{163.6}{8} - 19.73 = 20.45 - 19.73 = 0.72$
  - $\hat{\beta_1} = \frac{124.3}{6} - 19.73 = 20.72 - 19.73 = 0.98$
  - $\hat{\beta_2} = \frac{107.6}{6} - 19.73 = 17.93 - 19.73 = -1.8$
  - $\hat{\beta_3} = \frac{124.3}{6} - 19.73 = 20.72 - 19.73 = 0.98$
  - $\hat{\beta_4} = \frac{117.4}{6} - 19.73 = 19.57 - 19.73 = -0.17$
- 平方和：
  - $S_A = qr \sum_i \hat{\alpha_i}^2$
    $= 4 \times 2 \times ((-1.21)^2 + (0.49)^2 + (0.72)^2)$
    $= 8 \times 2.22 = 17.78$
  - $S_B = pr \sum_j \hat{\beta_j}^2$
    $= 3 \times 2 \times ((0.98)^2 + (-1.8)^2 + (0.98)^2 + (-0.17)^2)$
    $= 6 \times 5.19 = 31.14$

- $S_{A\times B}$:
  $(\hat{\alpha\beta})_{ij} = \bar{x}_{ij.} - \hat{\mu} - \hat{\alpha}_i - \hat{\beta}_j$ ですので

  $(\hat{\alpha\beta})_{11} = \bar{x}_{11.} - \hat{\mu} - \hat{\alpha}_1 - \hat{\beta}_1$

  $= ((19.8 + 20.9)/2) - 19.73 - (-1.21) - 0.98 = 0.85$

  $(\hat{\alpha\beta})_{12}$ から $(\hat{\alpha\beta})_{34}$ は同様に計算する。
  $S_{A\times B} = r\sum_i\sum_j(\hat{\alpha\beta})^2_{ij}$
  $= 2 \times ((20.35 - 19.73 - (-1.21) - 0.98)^2 + \cdots)$
  $= 2 \times ((0.85)^2 + \cdots)$
  ≈ 10.21

- $S_E = \sum_i\sum_j\sum_k \hat{\epsilon}^2_{ij.}$
  ≈ 57.83

要因	平方和	自由度	不偏分散	F-値	$F(0.05)$	$F(0.01)$
A	17.78	2	8.89		3.89	6.93
B	31.14	3	10.38		3.49	5.95
$A \times B$		6			3.00	4.82
誤差		12				
計		23				

5　多元配置の分散分析

因子の数が多い場合も効果の推定および分散分析はほぼ同様に行える。5.3.3(p. 174) は 3 元配置について結果だけを述べておくが、これの形式的拡張で 4 因子以上の場合にも対応できる。

6　後書き

電卓だけで、分散分析を行うことがかなり時間がかかる。Excel 等の計算表ソフトはお勧めである。