2 量的因子の 1 因子実験

2.2 非直線関係の場合

テキスト

芳賀敏郎（2014）医薬品開発のための統計解析
第２部　実験計画法　改訂版、サイエンティスト社、p.294

第２部　実験計画法

１因子実験・・・質的因子　1.1 繰り返し数が等しい場合、1.2 繰り返し数が異なる場合
1.3 多重比較、1.4 ばらつきを特性値とする実験
1.5 ノンパラメトリック検定
量的因子　2.1 直線関係の場合、**2.2 非直線関係の場合**
2.3 ダミー変数による質的因子の効果の推定

乱塊法・・・・・3.1 質的因子の乱塊法、3.2 量的因子の乱塊法、3.3 欠測値のある場合

共分散分析・・・4.1 共分散分析の目的、4.2 解析手順、4.3 医薬品開発における共分散分析の例

２因子実験・・・5.1 ２因子実験の基礎、5.2 質的因子×質的因子、5.3 質的因子×量的因子
5.4 質的因子×量的因子（変形）、5.5 量的因子×量的因子

多因子実験・・・6.1 多因子実験の基礎、6.2 スクリーニング計画、6.3 応答曲面計画

変量模型ほか・・7.1 １因子実験、7.2 枝分れ実験、7.3 乱塊法の拡張、7.4 経時データ、7.5 交差試験

2.1 非直線関係の場合

p.87

テキストの
該当ページ

（1）モデルの検討
（2）２次式モデルの解析
（3）JMP による解析
（4）中心化
（5）最適条件の推定
（6）モデルの妥当性の検討

使用するファイル
　Excelファイル：「DE改2-1因子(量).xlsm」
　JMPファイ：「2-1因子2.jmp」
　サイエンティスト社のホームページからダウンロード
JMP 10.0.2 の出力を表示

★プレゼンテーションの
スピーカーノートを、
PDF の注釈に変換してあります

（1）モデルの検討

量的因子の１因子実験
前節：x と y の関係が直線の場合
本節：x と y の関係が曲線の場合
（直線のモデルをあてはめて LOF が有意になった場合の対応）

x と y の関係が直線関係ではない場合の対応

p.87

●変数変換（対数変換）

x と y を変数変換して直線関係を導く

薬物投与量 x と薬効 y で、ある範囲内で $\log(x)$ と y の間に直線関係がある場合

医薬品の場合、投与量 x は等比級数的に変化させる場合が多い（第３部）

薬物投与量 x と薬効 y の間に以下の関係がある場合

$$y = ab^x, \qquad \ln(y) = \ln a + \ln b \cdot x, \qquad Y = A + Bx$$
$$y = ax^b, \qquad \ln(y) = \ln a + b \cdot \ln x, \qquad Y = A + bX$$

第１部 参照
§2.3 「対数変換と対数正規分布」
§4.1 「散布図」
第３部 参照
§1.3 「指数曲線のあてはめ」

●いろいろなモデルによる解析

変数変換しても直線関係にならない場合がある

$$y = ab^x + c \qquad y = ax^b + c$$

いろいろな式（モデル）をあてはめて解析（第３部）

データの裏にある専門分野の固有技術が必要（統計理論から助言できることは少ない）

●モデルが未知の場合

便宜的に、多項式を用いる（本節）

x と y の関係が直線関係ではない場合の対応

p.87

●変数変換（対数変換）

x と y を変数変換して直線関係を導く

薬物投与量 x と薬効 y で、ある範囲内で $\log(x)$ と y の間に直線関係がある場合

薬物投与量 x と薬効 y の間に以下の関係がある場合

$$y = ab^x, \qquad \ln(y) = \ln a + \ln b \cdot x, \qquad Y = A + Bx$$
$$y = ax^b, \qquad \ln(y) = \ln a + b \cdot \ln x, \qquad Y = A + bX$$

●いろいろなモデルによる解析

変数変換しても直線関係にならない場合がある

$$y = ab^x + c \qquad y = ax^b + c$$

いろいろな式（モデル）をあてはめて解析（第３部）

データの裏にある専門分野の固有技術が必要（統計理論から助言できることは少ない）

●モデルが未知の場合

便宜的に、多項式を用いる（本節）

モデルの検討

p.87

●多項式のあてはめ

2次式　$y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2$

3次式　$y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3$

...　$y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + \cdots$

連続関数であれば、どんな関数でも多項式で近似可能

連続変数であれば、どんな関数でも多項式で展開（テーラー展開）できるという定理を利用

多項式のあてはめは、理論モデルが未知の場合の**便宜的な手段**

（2） ２次式モデルの解析

多項式の中で最もシンプルな２次の多項式

2次式モデルの解析

p.88

●Excelファイルの読み込みと表示

Excel ファイル「DE改2-1因子(量).xls」、名前ボックスから「表示2.2.1」（Fig22_01）を選択

●データ

量的因子の１因子実験、４水準（0, 10, 20, 30）、繰り返し数５

●解析

（1）質的因子の１因子実験（分散分析）

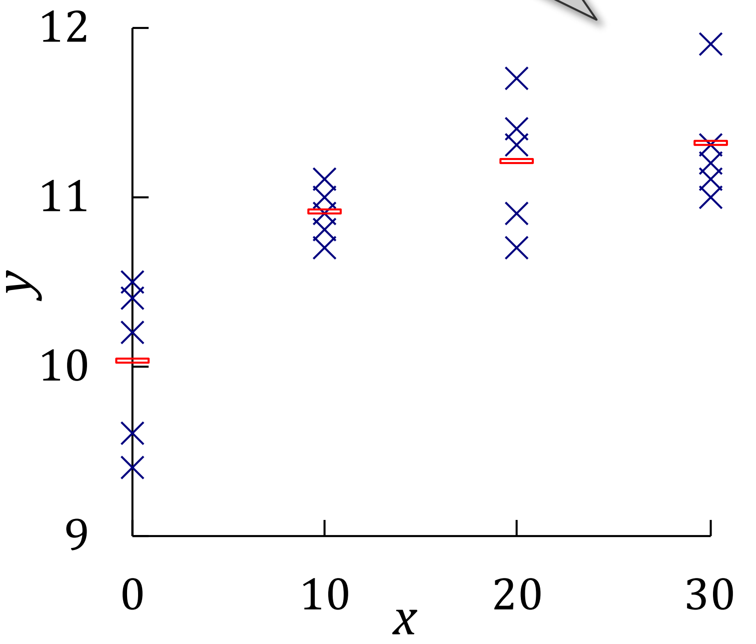
（2）回帰分析（１次式のあてはめ、２次式のあてはめ）

（3）両者の組合せ

水準	n	平均	データ 1	2	3	4	5
0	5	10.02	10.5	9.6	10.4	10.2	9.4
10	5	10.90	10.8	10.7	11.1	10.9	11.0
20	5	11.20	11.4	10.7	10.9	11.3	11.7
30	5	11.30	11.9	11.2	11.0	11.1	11.3
全体	20	10.86					
水準数	4						

表示2.2.1（一部）
データとグラフ

増加程度は徐々に低下
直線関係ではなさそう



2 次式モデルの解析

p.88

●質的因子の１因子実験（分散分析）

水準を質的因子とみなして分散分析

（前節 §2.1、§1.1）

水準間の平方和は 5.082

残差平方和は 2.208

全体の平方和は 7.290

F 比は 12.27、p 値は 0.0002 で高度に有意

水準間には有意差がある

表示2.2.1

データ

水準	n	平均	1	2	3	4	5
0	5	10.02	10.5	9.6	10.4	10.2	9.4
10	5	10.90	10.8	10.7	11.1	10.9	11.0
20	5	11.20	11.4	10.7	10.9	11.3	11.7
30	5	11.30	11.9	11.2	11.0	11.1	11.3
全体	20	10.86					
水準数	4						

残差

水準	標準偏差	効果	1	2	3	4	5
0	0.49	-0.84	0.48	-0.42	0.38	0.18	-0.62
10	0.16	0.04	-0.10	-0.20	0.20	0.00	0.10
20	0.40	0.34	0.20	-0.50	-0.30	0.10	0.50
30	0.35	0.45	0.60	-0.10	-0.30	-0.20	0.00

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			
(検算)	7.290	19			

水準間に
有意差あり

2次式モデルの解析

p.88

●回帰分析（２次式）

Excel による解析（グラフ［近似曲線の追加］）

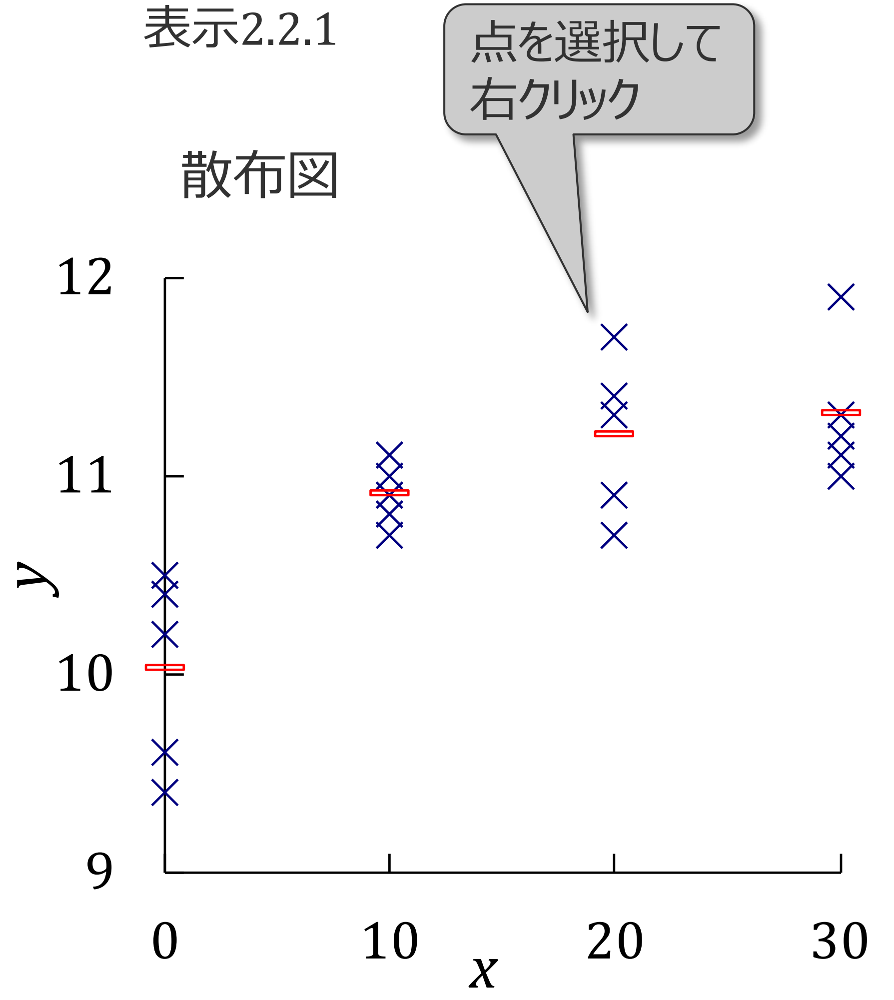
x と y の間に曲線関係があり、
多項式のあてはめを考える場合、
まずは「x の２次式」をあてはめる

$$y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2$$

データを縦に並べる
散布図を作成（第１部 §4.1）
グラフのプロットを選択して右クリック

x	y
0	10.5
0	9.6
0	10.4
0	10.2
0	9.4
10	10.8
10	10.7
10	11.1
10	10.9
10	11.0
20	11.4
20	10.7
20	10.9
20	11.3

表示2.2.1



2 次式モデルの解析

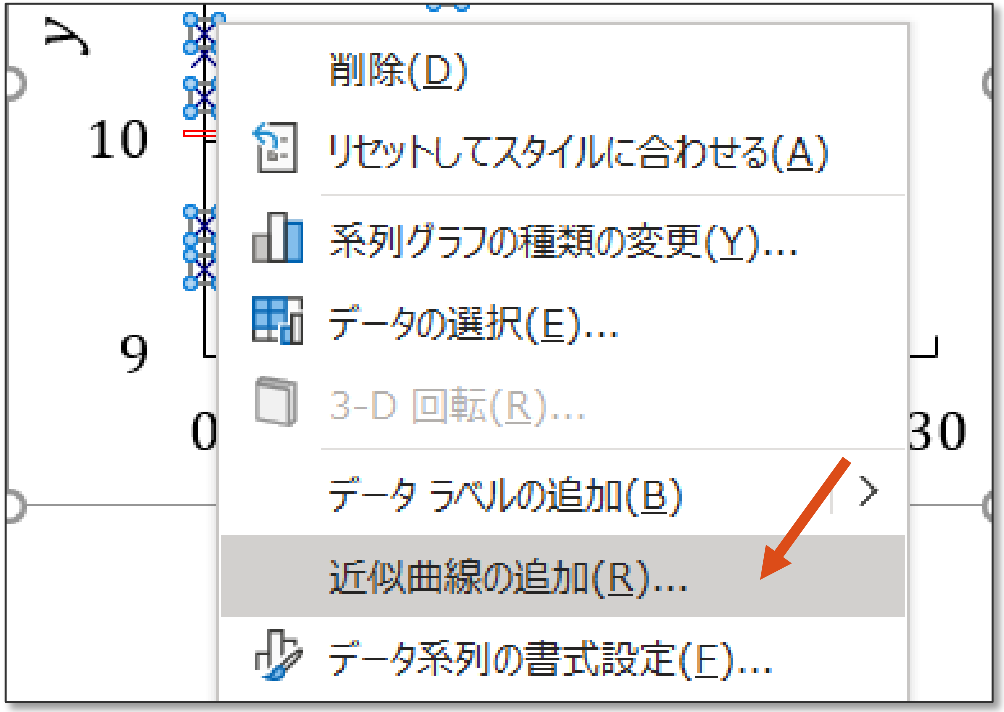
p.88

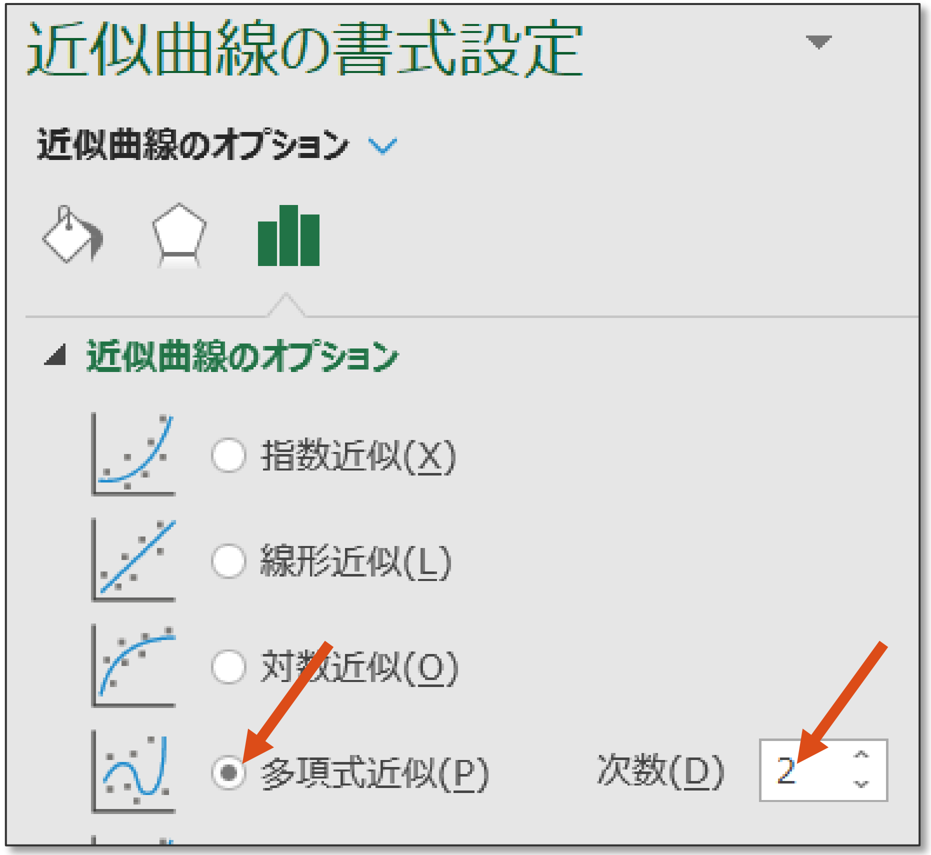
●回帰分析

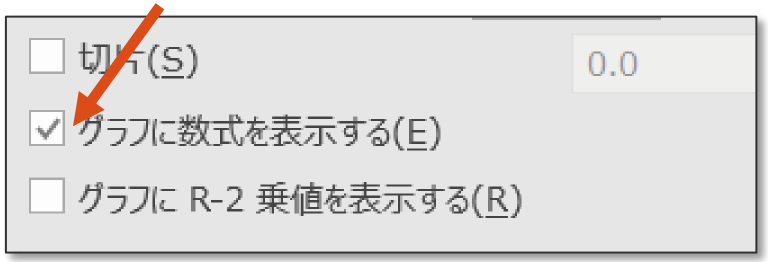
Excel による解析（グラフ）

グラフにプロットしたマークを選択して右クリック

［近似曲線の追加］＞［多項式近似］次数：2







2 次式モデルの解析

●回帰分析

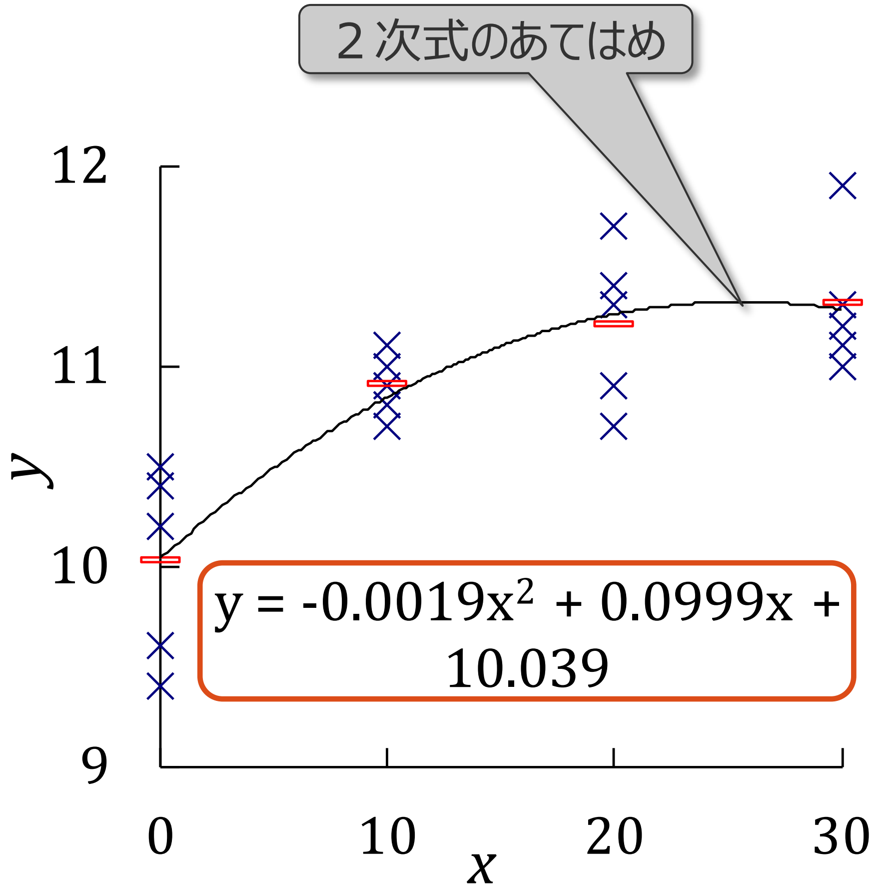
Excel による解析（グラフ）

$$y = 10.039 + 0.0999x - 0.0019x^2$$

切片　　1 次項　　2 次項

x	y
0	10.5
0	9.6
0	10.4
0	10.2
0	9.4
10	10.8
10	10.7
10	11.1
10	10.9
10	11.0
20	11.4
20	10.7
20	10.9
20	11.3

表示2.2.1



2次式モデルの解析

p.88

●回帰分析

LINEST関数による多項式のあてはめ（1次式と2次式）

表示2.2.2　LINEST関数用データと解析結果

（1次式）

x	x^2	y
0	0	10.5
0	0	9.6
0	0	10.4
0	0	10.2
0	0	9.4
10	100	10.8
10	100	10.7
10	100	11.1
10	100	10.9
10	100	11.0
20	400	11.4
20	400	10.7
20	400	10.9
20	400	11.3

x の範囲

y の範囲

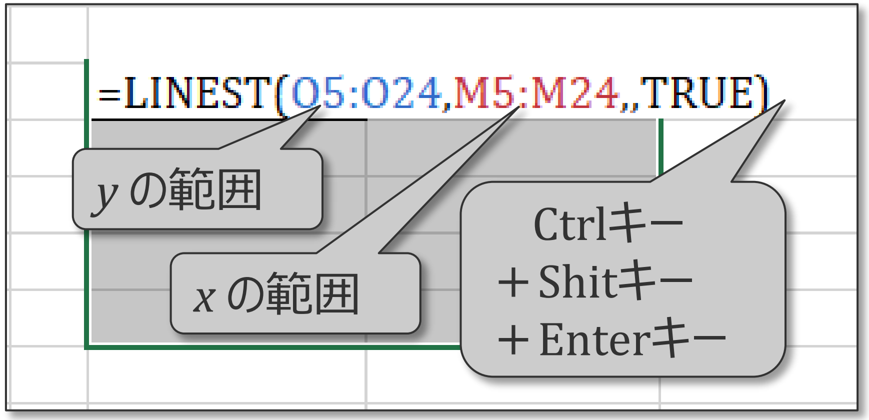
（2次式）

x	x^2	y
0	0	10.5
0	0	9.6
0	0	10.4
0	0	10.2
0	0	9.4
10	100	10.8
10	100	10.7
10	100	11.1
10	100	10.9
10	100	11.0
20	400	11.4
20	400	10.7
20	400	10.9
20	400	11.3

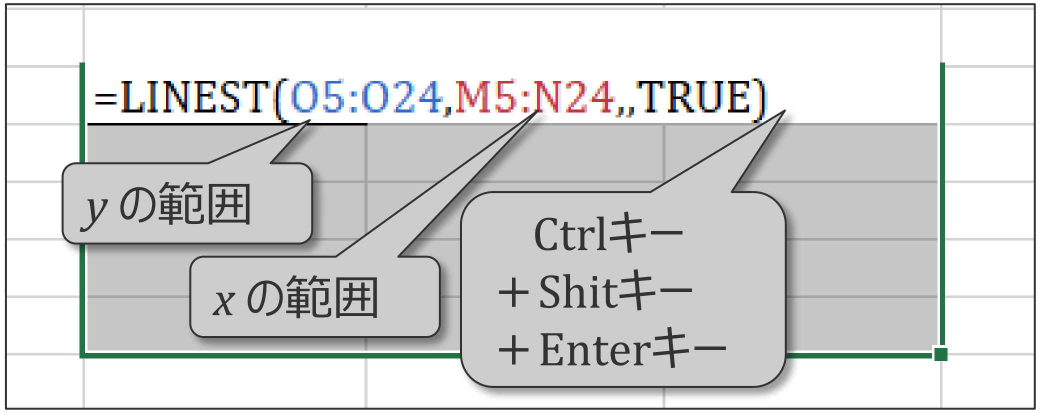
x の範囲

y の範囲

（1次式：5行2列を範囲指定）



（2次式：5行3列を範囲指定）



2 次式モデルの解析

p.89

●回帰分析

LINEST関数による多項式のあてはめ

（1 次式） $y = 10.234 + 0.0414x$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

（2 次式） $y = 10.039 + 0.0999x - 0.0019x^2$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示2.2.2

周囲のコメントと計算式をコピー

（1 次式）

	x	const	
回帰係数	0.0414	10.234	
その標準誤差	0.008	0.153	
寄与率	0.588	0.409	標準偏差
F 比	25.670	18	残差自由度
回帰平方和	4.285	3.005	残差平方和
t 値	5.067	66.946	
p 値	0.000	0.000	

並びに注意

（2 次式）

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.001	0.025	0.158
寄与率	0.692	0.363	#N/A
F 比	19.111	17	#N/A
回帰平方和	5.045	2.244	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

２次式モデルの解析

p.89

●回帰分析

LINEST関数による多項式のあてはめ

（１次式） $y = 10.234 + 0.0414x$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰１次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

（２次式） $y = 10.039 + 0.0999x - 0.0019x^2$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰２次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示2.2.2

（１次式）

	x	const	
回帰係数	0.0414	10.234	
その標準誤差	0.008	0.153	
寄与率	0.588	0.409	標準偏差
F 比	25.670	18	残差自由度
回帰平方和	4.285	3.005	残差平方和
t 値	5.067	66.946	
p 値	0.000	0.000	

（２次式）

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.001	0.025	0.158
寄与率	0.692	0.363	#N/A
F 比	19.111	17	#N/A
回帰平方和	5.045	2.244	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

2次式モデルの解析

p.89

●回帰分析（補足）

LINEST関数による多項式のあてはめ

(表示 4.3.6 第１部 §4.3 p.231)

（１次式） $\hat{y} = 10.234 + 0.0414x$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰１次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

（２次式） $\hat{y} = 10.039 + 0.0999x - 0.0019x^2$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰２次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

$y - \hat{y} = e$

（１次式）

i	x	y	y-hat	e
1	0	10.5	10.23	0.27
2	0	9.6	10.23	-0.63
3	0	10.4	10.23	0.17
・・・	・・・	・・・	・・・	・・・
18	30	11.0	11.48	-0.48
19	30	11.1	11.48	-0.38
20	30	11.3	11.48	-0.18
平均		10.855	10.855	0.000
平方和		7.290	4.285	3.005

（２次式）

i	x	y	y-hat	e
1	0	10.5	10.04	0.46
2	0	9.6	10.04	-0.44
3	0	10.4	10.04	0.36
・・・	・・・	・・・	・・・	・・・
18	30	11.0	11.28	-0.28
19	30	11.1	11.28	-0.18
20	30	11.3	11.28	0.02
平均		10.855	10.855	0.000
平方和		7.290	5.045	2.244

2次式モデルの解析

p.89

●回帰分析（補足）

LINEST関数による多項式のあてはめ

（表示 4.3.6 第１部　§4.3 p.231）

（１次式） $\hat{y} = 10.234 + 0.0414x$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰１次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

（２次式） $\hat{y} = 10.039 + 0.0999x - 0.0019x^2$

分散分析表

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰２次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

（１次式）

i	x	y	y-hat	e
1	0	10.5	10.23	0.27
2	0	9.6	10.23	-0.63
3	0	10.4	10.23	0.17
…	…	…	…	…
18	30	11.0	11.48	-0.48
19	30	11.1	11.48	-0.38
20	30	11.3	11.48	-0.18
平均		10.855	10.855	0.000
平方和		7.290	4.285	3.005

総平方和
回帰平方和
残差平方和

（２次式）

i	x	y	y-hat	e
1	0	10.5	10.04	0.46
2	0	9.6	10.04	-0.44
3	0	10.4	10.04	0.36
…	…	…	…	…
18	30	11.0	11.28	-0.28
19	30	11.1	11.28	-0.18
20	30	11.3	11.28	0.02
平均		10.855	10.855	0.000
平方和		7.290	5.045	2.244

2 次式モデルの解析

- 2 つの解析

質的因子の 1 因子実験（表示 2.2.1、一部）

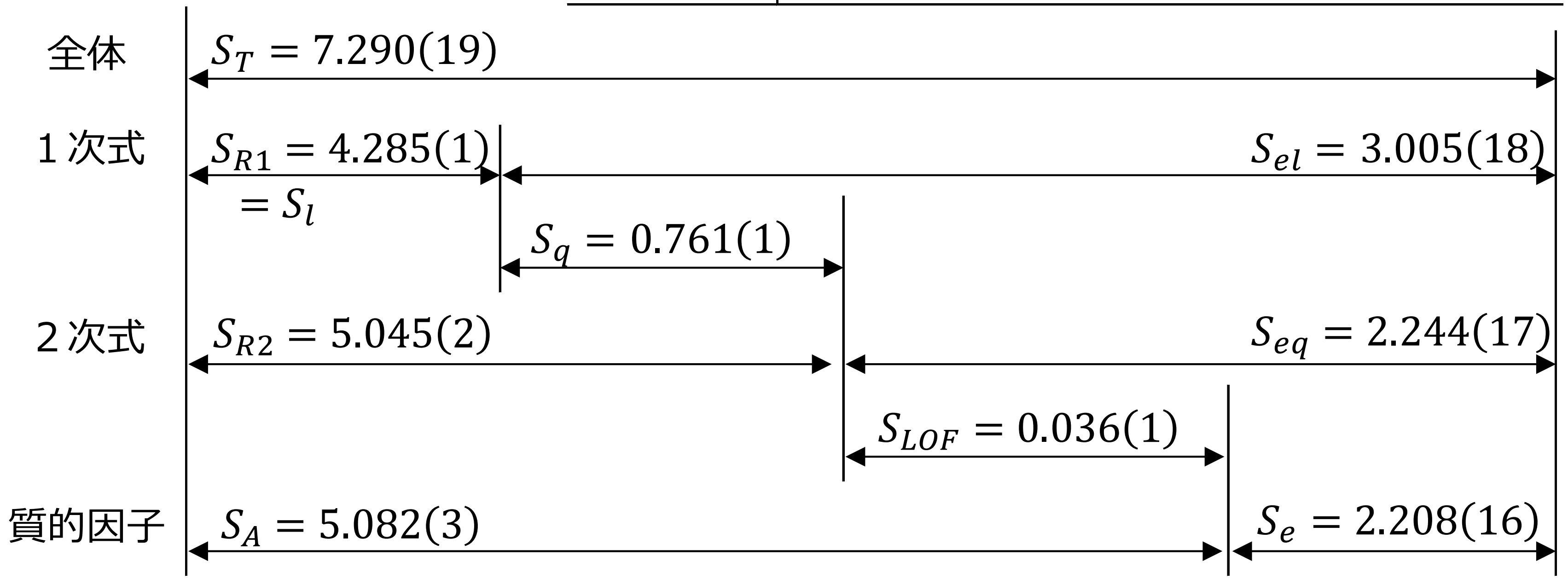
要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			

回帰分析
（表示 2.2.2 改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.3



2 次式モデルの解析

- 2 つの解析

質的因子の 1 因子実験（表示 2.2.1、一部）

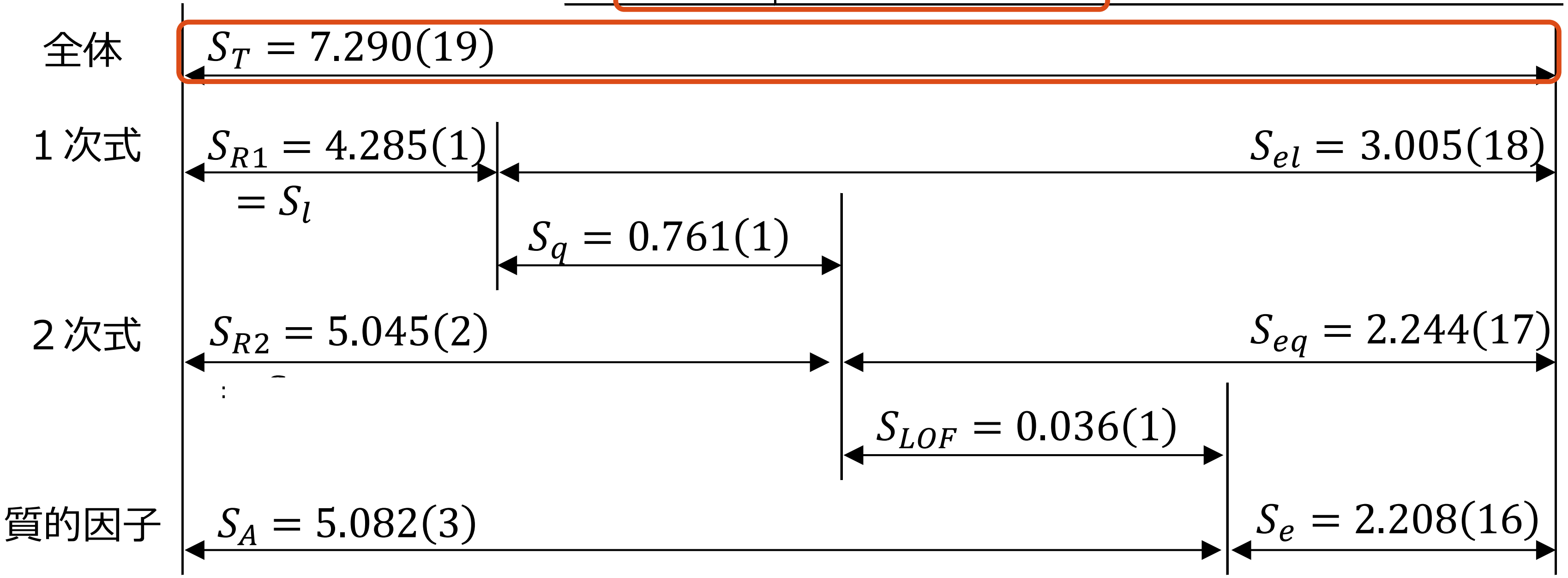
要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			

回帰分析
（表示 2.2.2 改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.3



2 次式モデルの解析

- 2 つの解析

質的因子の 1 因子実験（表示 2.2.1、一部）

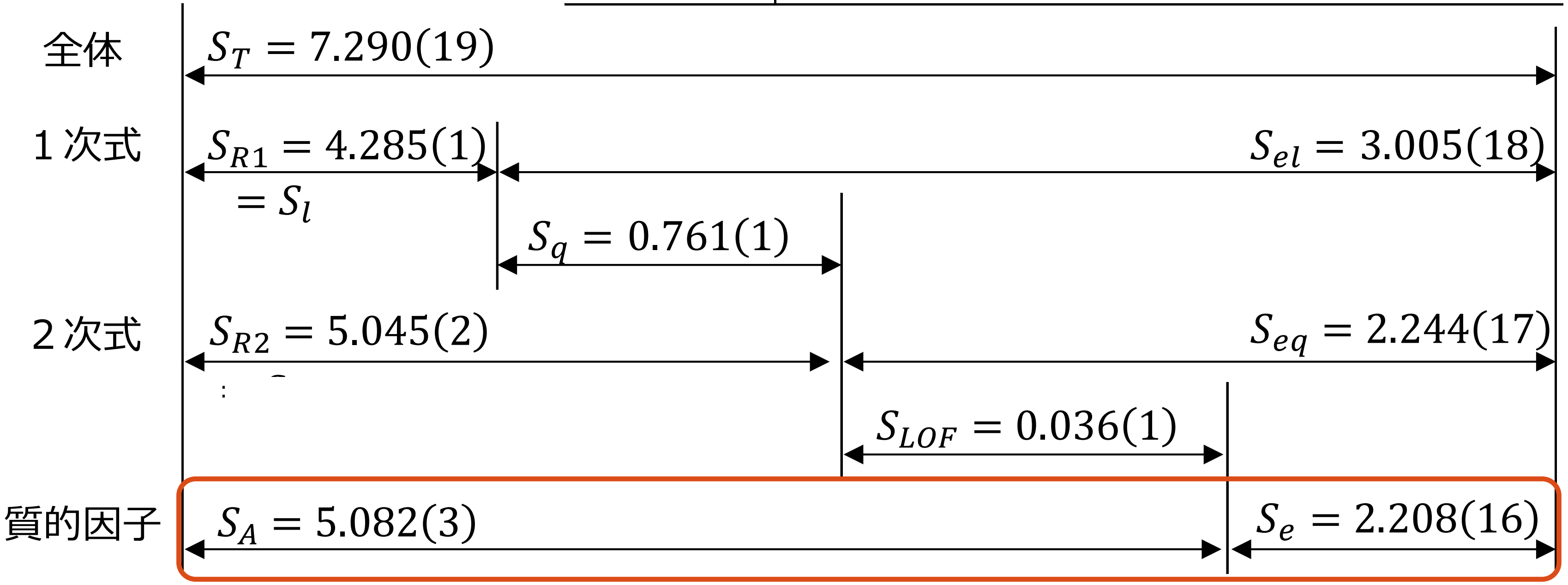
要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			

回帰分析
（表示 2.2.2 改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.3



2 次式モデルの解析

- 2 つの解析

質的因子の 1 因子実験（表示 2.2.1、一部）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			

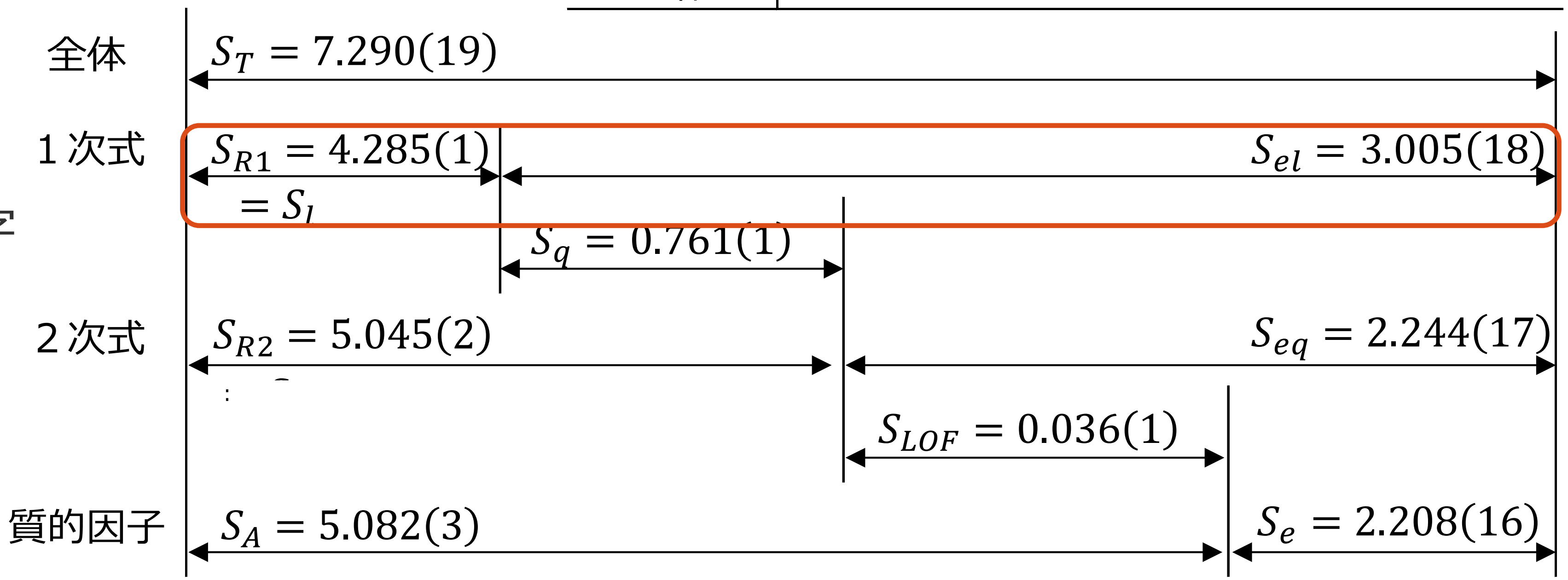
回帰分析

（表示 2.2.2 改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.3



S_l ：1 次（linear）の頭文字

S_q ：2 次（quadratic）の頭文字

2 次式モデルの解析

p.89

- 2 つの解析

質的因子の 1 因子実験（表示 2.2.1、一部）

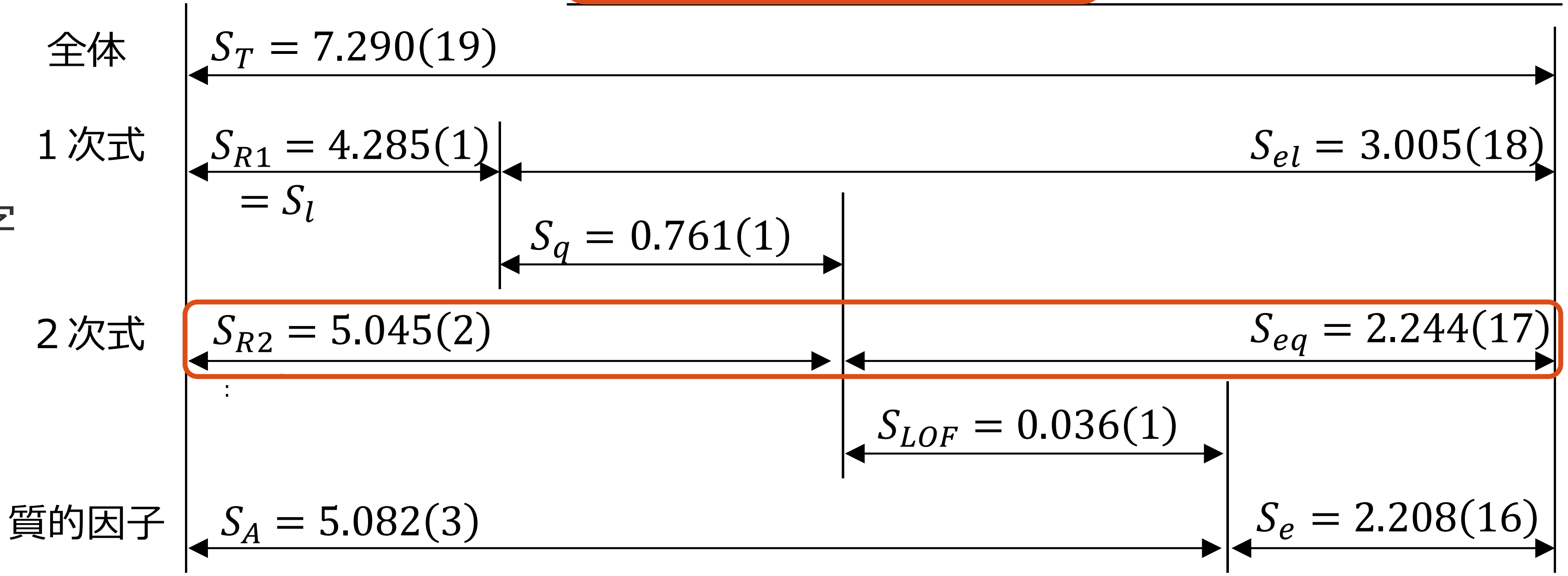
要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			

回帰分析
（表示 2.2.2 改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.3



S_l ：1 次（linear）の頭文字

S_q ：2 次（quadratic）の頭文字

2 次式モデルの解析

p.89

- 2 つの解析

表示 2.2.1（一部）

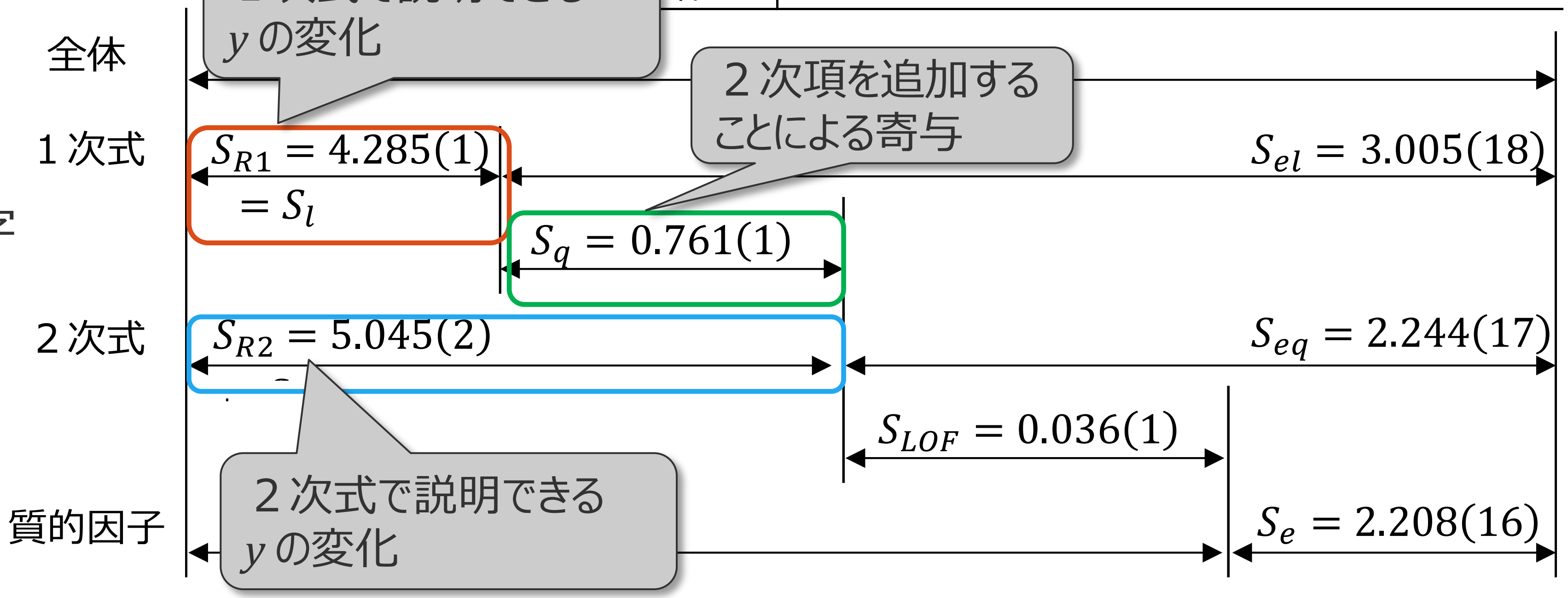
要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.2（改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.3



S_l：1 次（linear）の頭文字

S_q：2 次（quadratic）の頭文字

2 次式モデルの解析

p.89

● 2 つの解析

表示 2.2.1（一部）

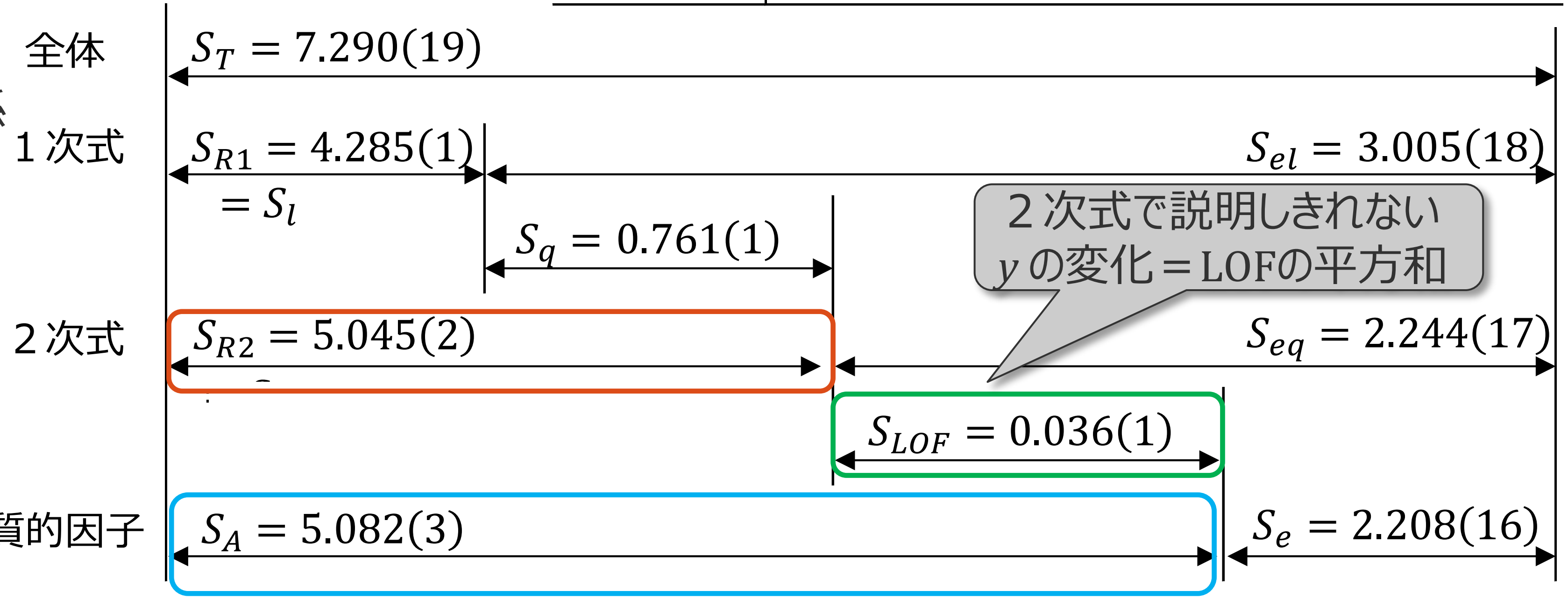
要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
水準間	5.082	3	1.694	12.27	**0.0002**
残差	2.208	16	0.138	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.2（改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 1 次式	4.285	1	4.285	25.67	**0.0001**
残差	3.005	18	0.167	1.00	
全体	7.290	19			

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

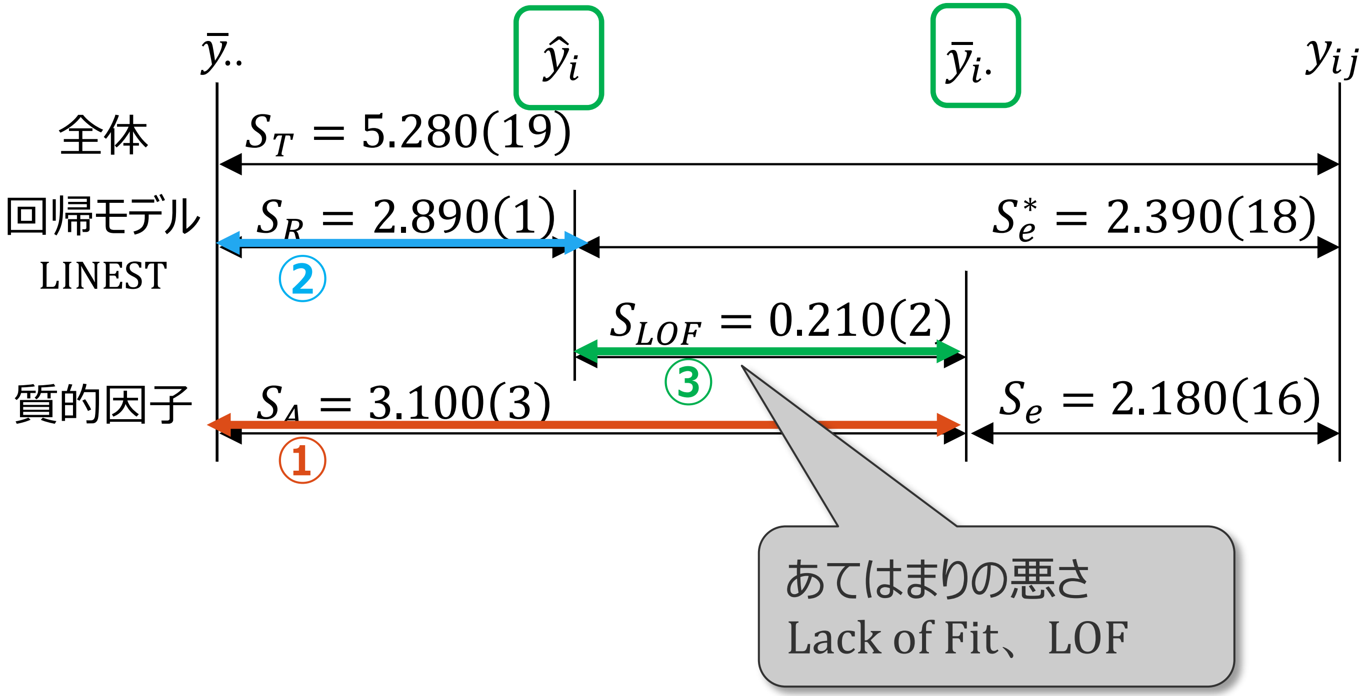
表示 2.2.3
平方和の関係



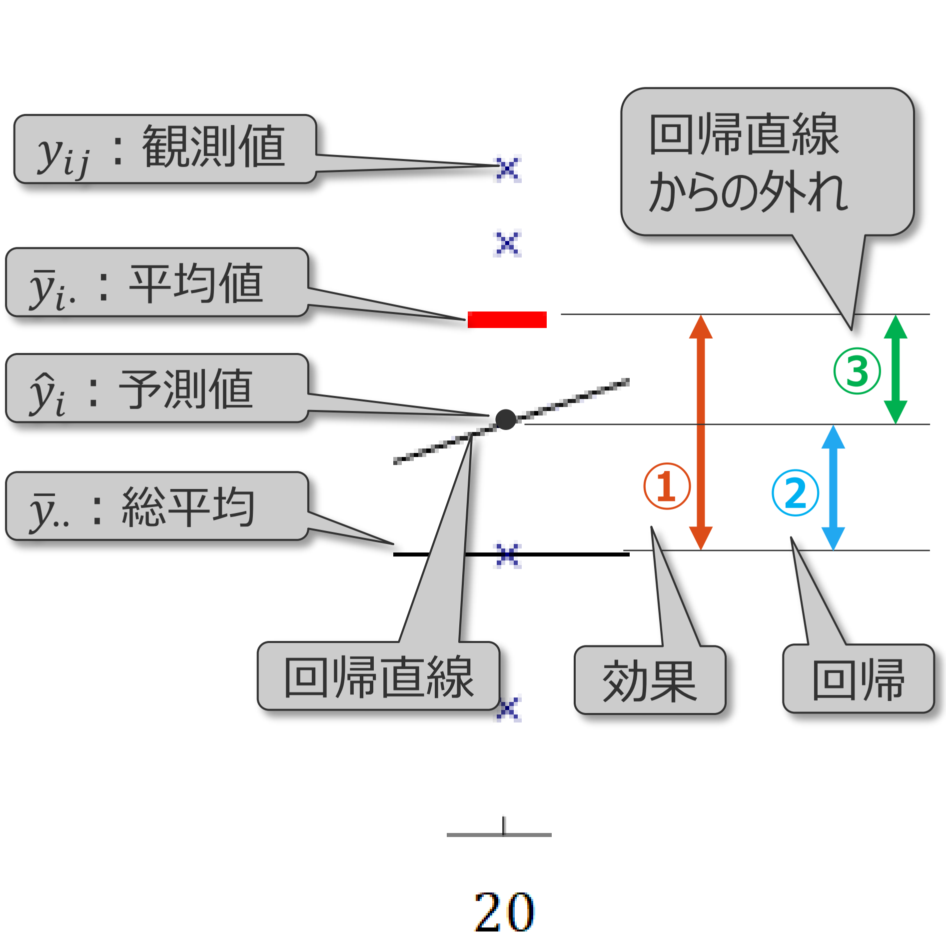
LOF：あてはまりの悪さ
（Lack of Fit）

2 次式モデルの解析

● 1 次式モデルの場合（参考）



表示 2.1.2



（§4.3 p.231）

2次式モデルの解析

p.89

●分散分析表　表示 2.2.4

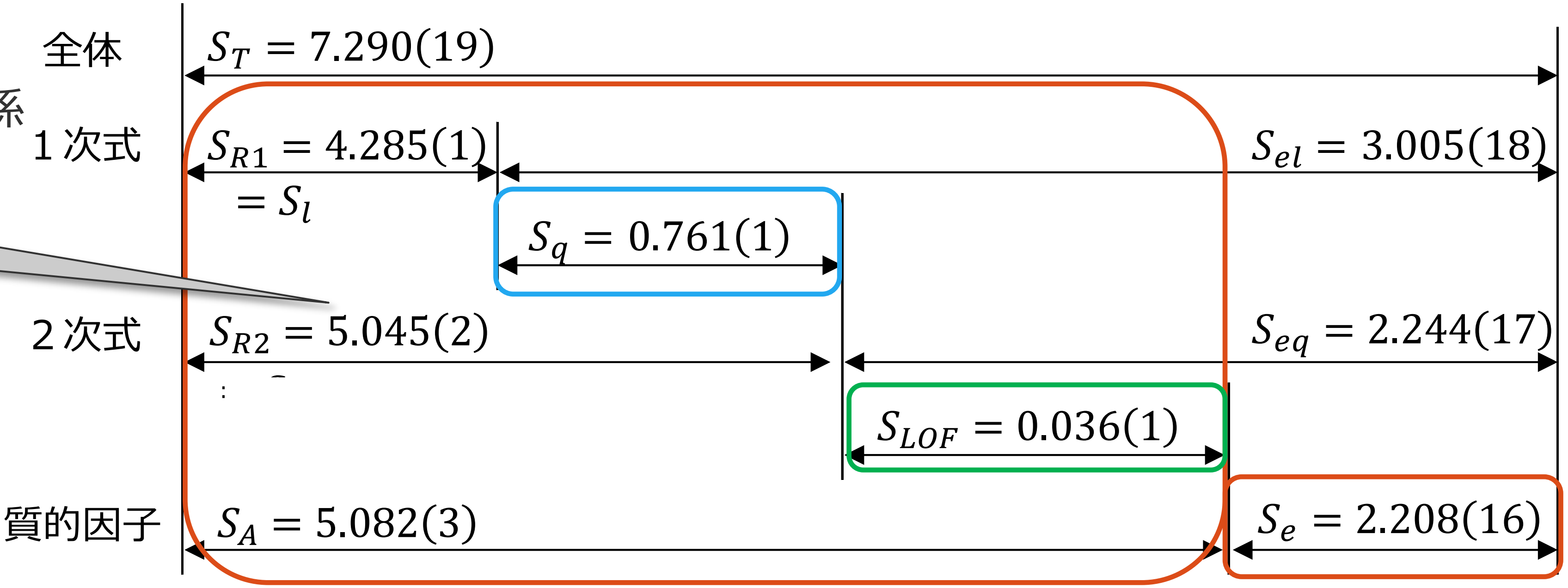
2次項の追加が寄与する部分

2次式で説明しきれない部分

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

表示 2.2.3
平方和の関係

2次式の回帰平方和



2 次式モデルの解析

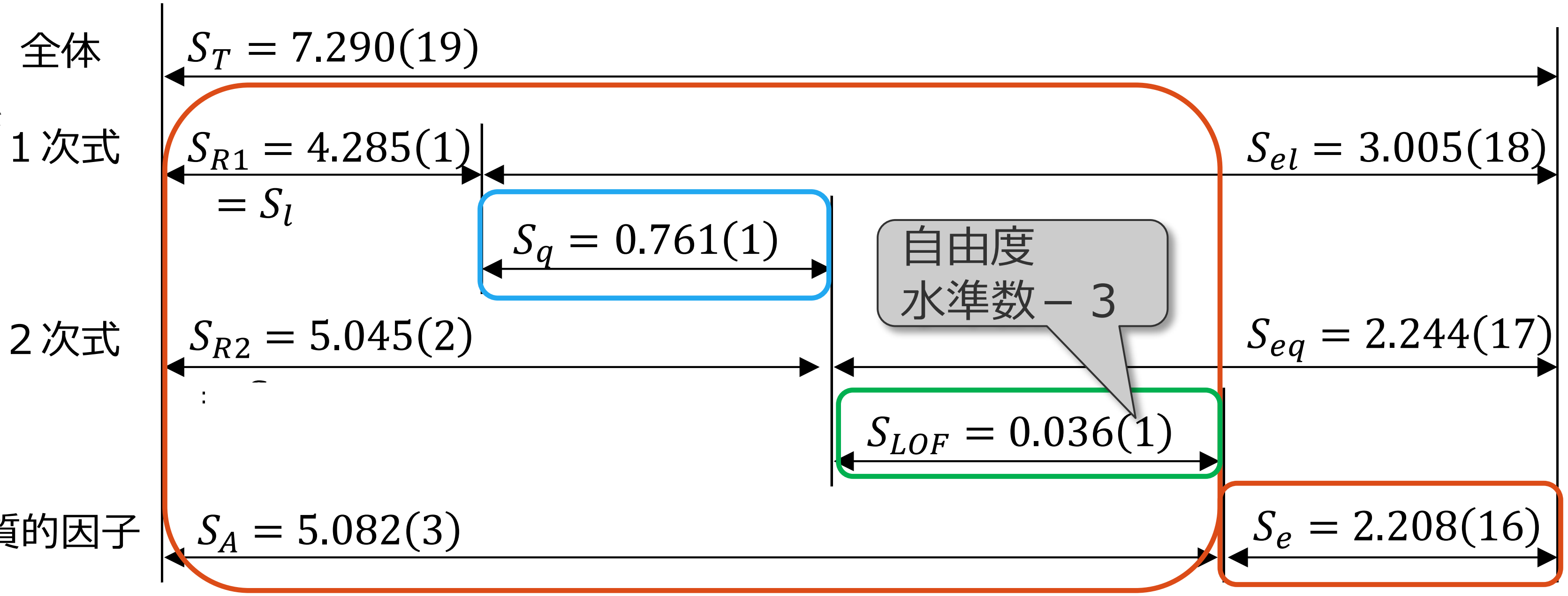
●分散分析表　　表示 2.2.4

2 次項の追加が寄与する部分

2 次式で説明しきれない部分

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

表示 2.2.3
平方和の関係



2 次式モデルの解析

p.90

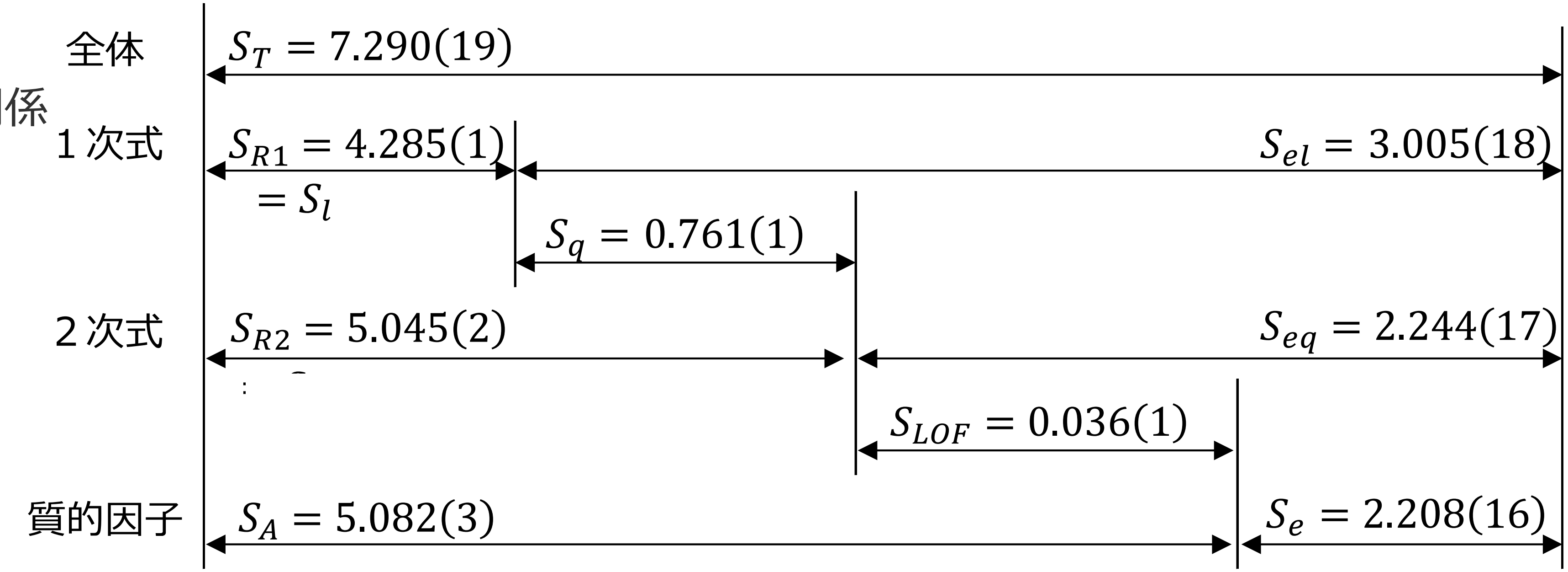
●分散分析表

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

F 比の分母

表示 2.2.3
平方和の関係



2 次式モデルの解析

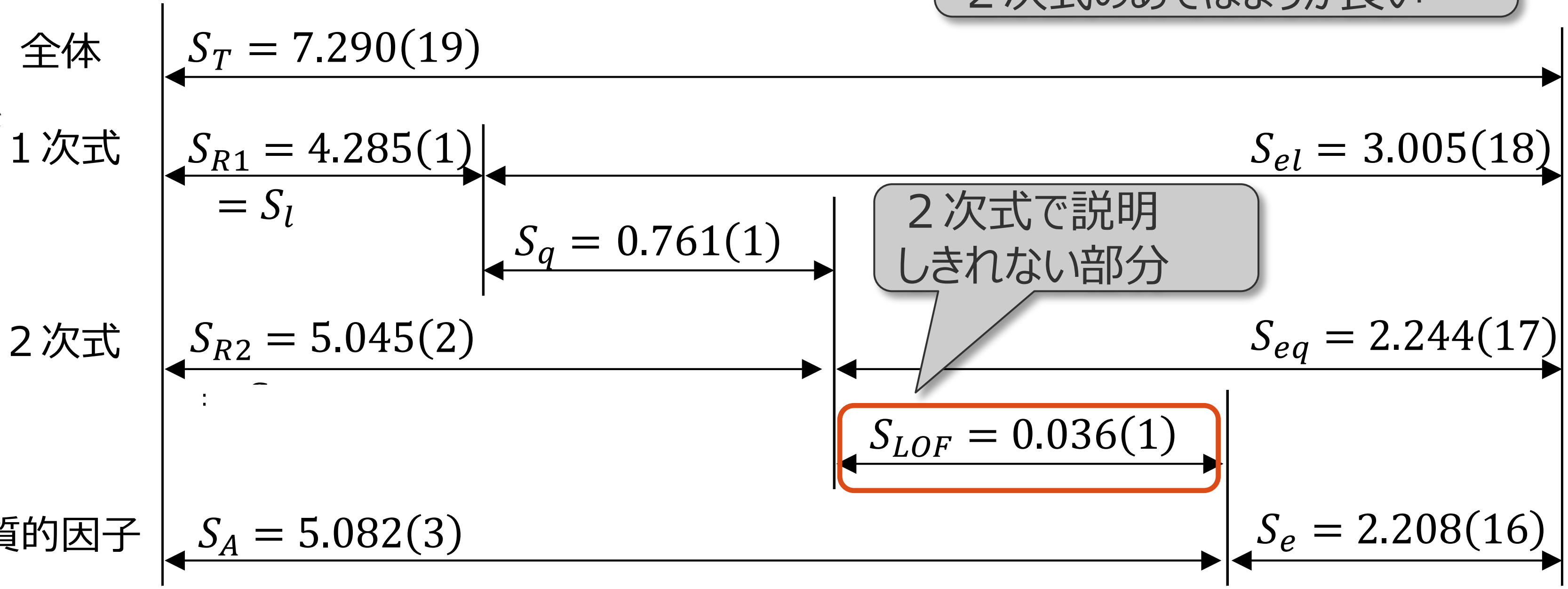
●分散分析表

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132				

p値は 0.20 よりもかなり大きい
2 次式のあてはまりが良い

表示 2.2.3
平方和の関係



2 次式モデルの解析

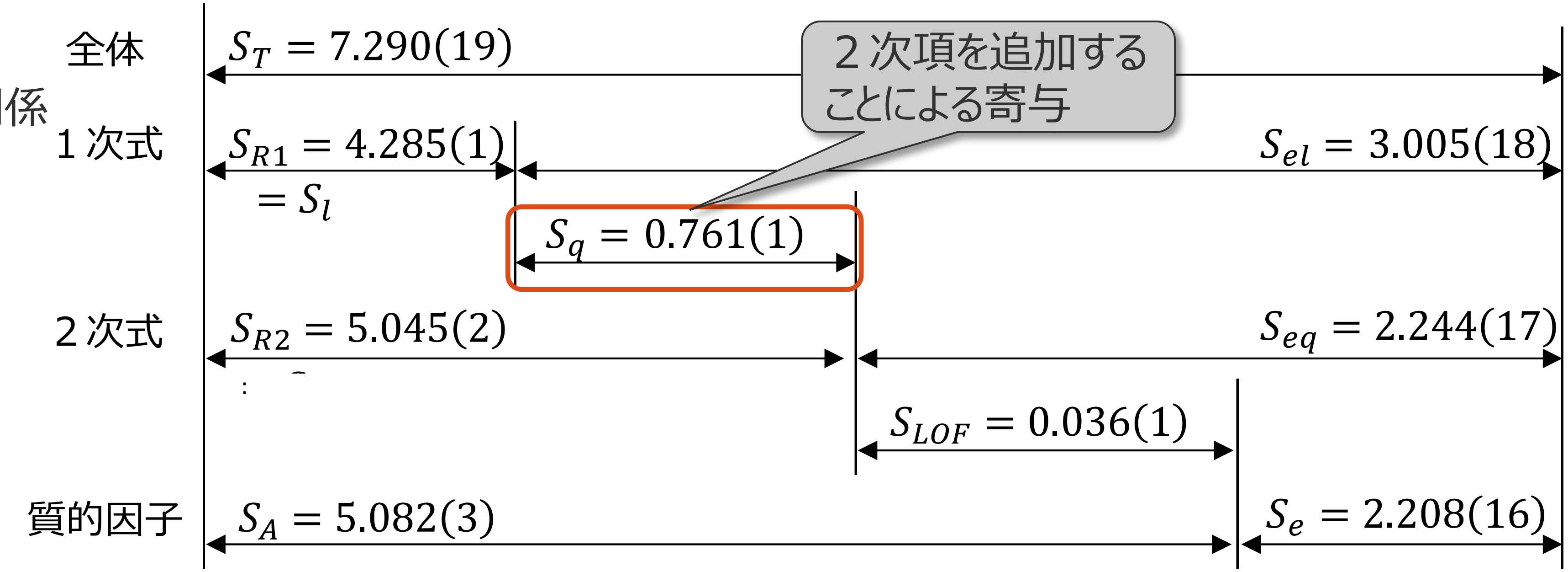
- 分散分析表

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	$\boxed{0.761}$	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132				

p値は 0.05 よりも小さい
確かに直線関係ではない

表示 2.2.3
平方和の関係



2 次式モデルの解析

p.90

●分散分析表　表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

F 比の分母

LOF が有意ではないので、
残差とLOFを併合（残差*）
これを分母として F 検定
検定精度が高まる

表示 2.2.3
平方和の関係

全体　$S_T = 7.290(19)$

1 次式　$S_{R1} = 4.285(1) = S_l$　$S_{el} = 3.005(18)$

$S_q = 0.761(1)$

2 次式　$S_{R2} = 5.045(2)$　$S_{eq} = 2.244(17)$

$S_{LOF} = 0.036(1)$

質的因子　$S_A = 5.082(3)$　$S_e = 2.208(16)$

2次式モデルの解析

- 回帰係数の検定

  t 検定と F 検定の関係

  2次の回帰係数

  p 値は一致

  t 値の２乗と F 比は一致

  $-2.40^2 = 5.76$

  $t(\nu)^2 = F(1,\nu)$

  $p = \mathrm{T.DIST.2T}(\mathrm{ABS}(-2.400), 17) = 0.028$

  $p = 1 - \mathrm{F.DIST}(5.76,1,16,\mathrm{TRUE}) = 0.028$

  1次の回帰係数

  p 値は不一致、t値の２乗とF比は不一致

  $3.928^2 = 15.45 \neq 32.46$

  $p = \mathrm{T.DIST.2T}(\mathrm{ABS}(3.928), 17) = 0.001$

  $p = 1 - \mathrm{F.DIST}(32.46,1,16,\mathrm{TRUE}) = 0.000$

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

不一致

一致

2次項

1次項

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.001	0.025	0.158
寄与率	0.692	0.363	#N/A
F 比	19.111	17	#N/A
回帰平方和	5.045	2.244	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

２次式モデルの解析

p.90

●LOF 利用に必要な水準数

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	$\boxed{1}$	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

水準数３の場合、LOF の自由度は 0（LOF の自由度は、水準数－3）
２次式の当てはまりの判断が不可

２次式が予想される場合は、少なくとも４水準以上，できれば５水準以上が望ましい

2 次式モデルの解析

p.90

●LOF の判断

（α = 0.05 → α = 0.20）

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

1 次式をあてはめたときの LOF
0.761 + 0.036 = 0.797

1 次式をあてはめたときの LOF の平方和（2 次項の分が LOF になる）：0.761+0.036 = 0.797

F 比　(0.797 / 2)　/　0.138 = 　2.886、 p 値　=1-F.DIST(2.886, 2, 16, TRUE) = 0.0851

α=0.05で LOF は有意ではない → 1 次式のモデルがあてはまっている？

しかし、これまでの解析では、 2 次式のあてはまりが良かった（結果が不一致）

モデル選択の基準を α = 0.05 ではなく α = 0.20 にすると適切なモデルを選択できる可能性がある

p.90

（3）JMP による解析

多項式（２次式）のあてはめ

JMP ［二変量の関係］

p.90

●JMPファイルの読み込みと表示

JMP ファイル「2-1因子2.jmp」を読み込み

●データ

表示 2.2.1 と同じデータ

量的因子の１因子実験、４水準（0, 10, 20, 30）、繰り返し５

水準の列名は「x」、観測値の列名は「y」

●解析

前章 §1.1 p.30と同様に解析

［分析］＞［二変量の関係］

X：「x」、 Y：「y」

散布図により曲線関係を確認

表示2.2.1 データとグラフ

水準	n	平均	データ 1	2	3	4	5
0	5	10.02	10.5	9.6	10.4	10.2	9.4
10	5	10.90	10.8	10.7	11.1	10.9	11.0
20	5	11.20	11.4	10.7	10.9	11.3	11.7
30	5	11.30	11.9	11.2	11.0	11.1	11.3
全体	20	10.86					
水準数	4						

縦に並べる

列名

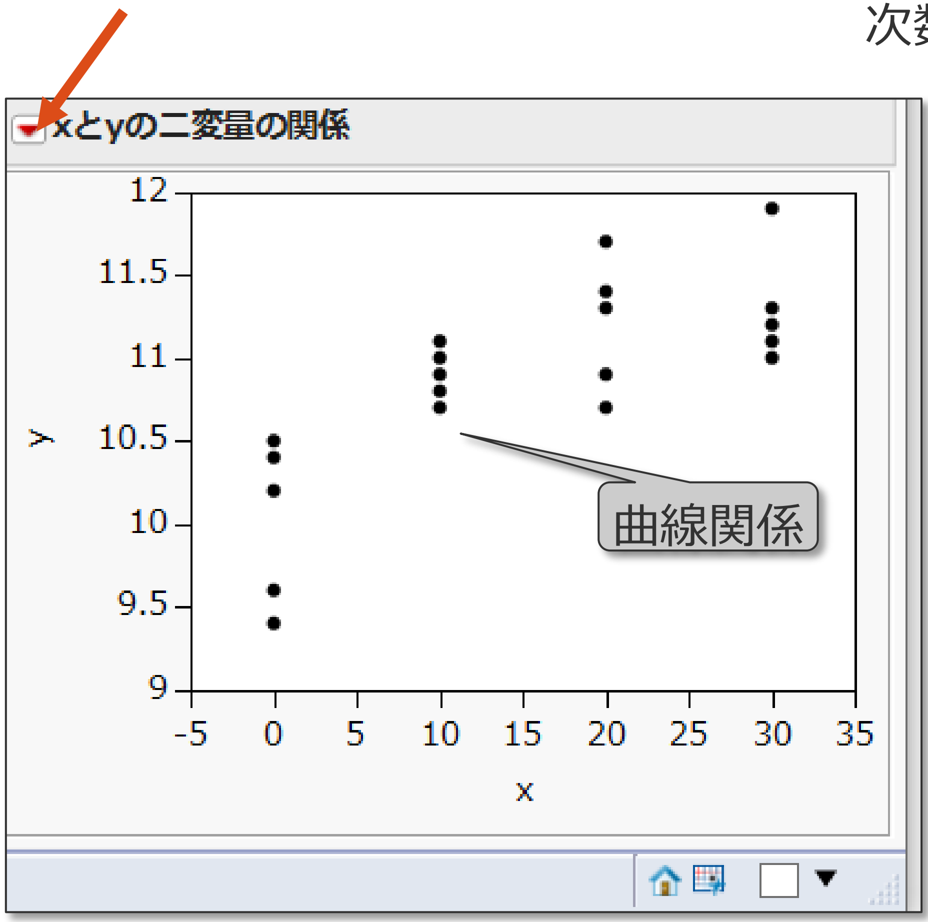
	x	y
1	0	10.5
2	0	9.6
3	0	10.4
4	0	10.2
5	0	9.4
6	10	10.8
7	10	10.7
8	10	11.1
9	10	10.9
10	10	11
11	20	11.4
12	20	10.7
13	20	10.9
14	20	11.3
15	20	11.7
16	30	11.9
17	30	11.2
18	30	11
19	30	11.1
20	30	11.3

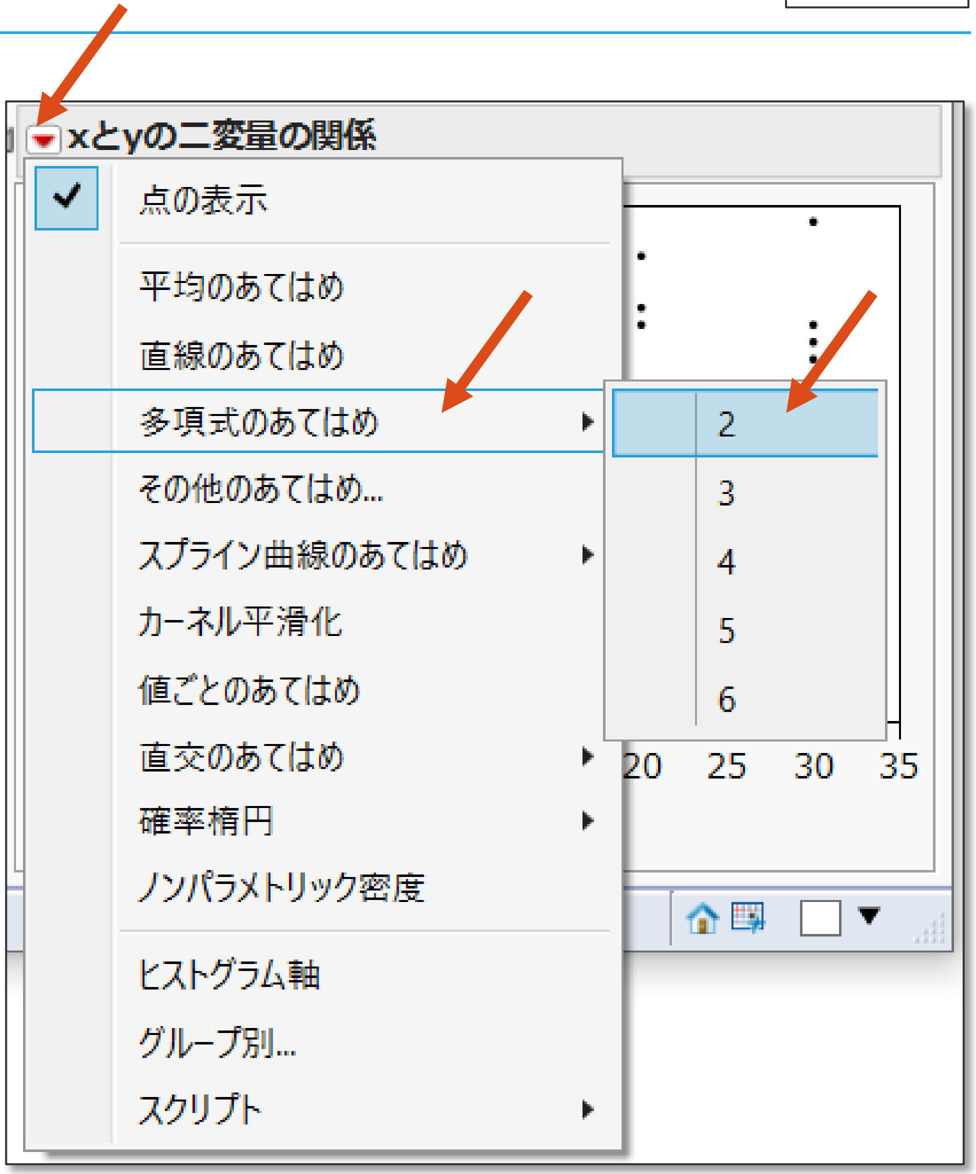
JMP ［二変量の関係］

p.91

●散布図と多項式のあてはめ

▼＞［多項式のあてはめ］＞［2］
次数を選択

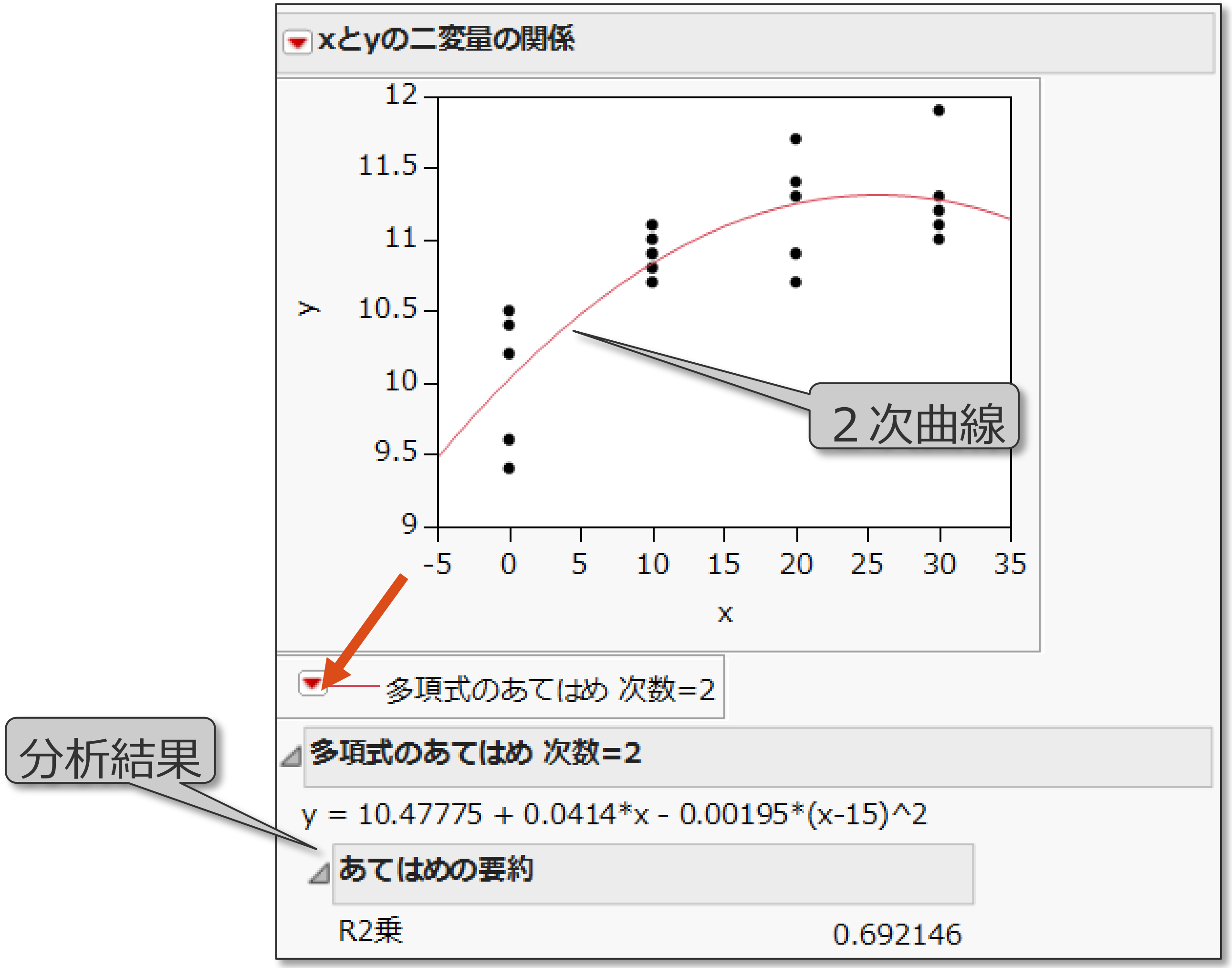


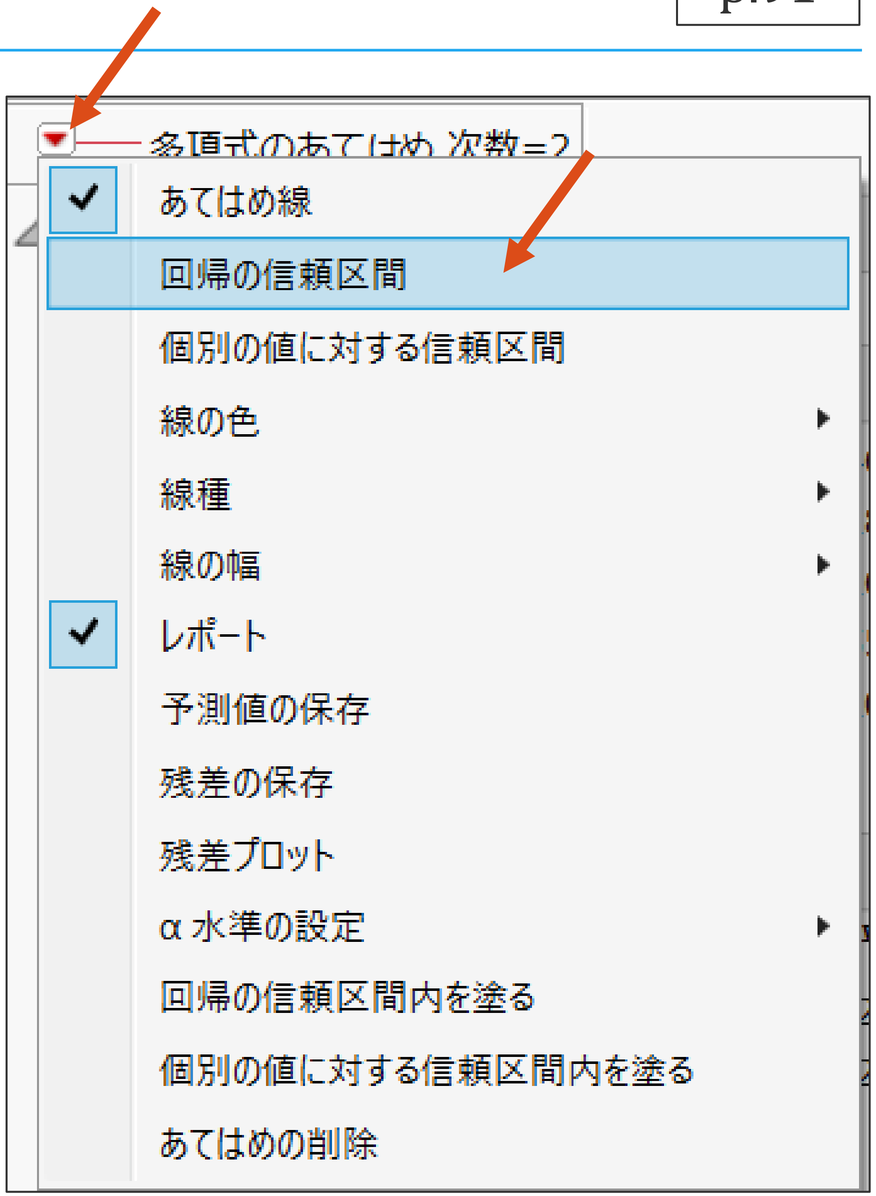


JMP ［二変量の関係］

p.91

●散布図と多項式のあてはめ





JMP ［二変量の関係］

●回帰の信頼区間（95%CI）

母平均 η の 95% 信頼区間

1 次式のあてはめ（第 1 部 §4.4 p.239）

$\bar{x}$ の位置で信頼区間の区間幅が最小

$\bar{x}$ から離れるに従って区間幅が広くなる

さらに遠くでは直線に接近

2 次式のあてはめ（右の図）

信頼区間の幅が最小となるのは 2 か所

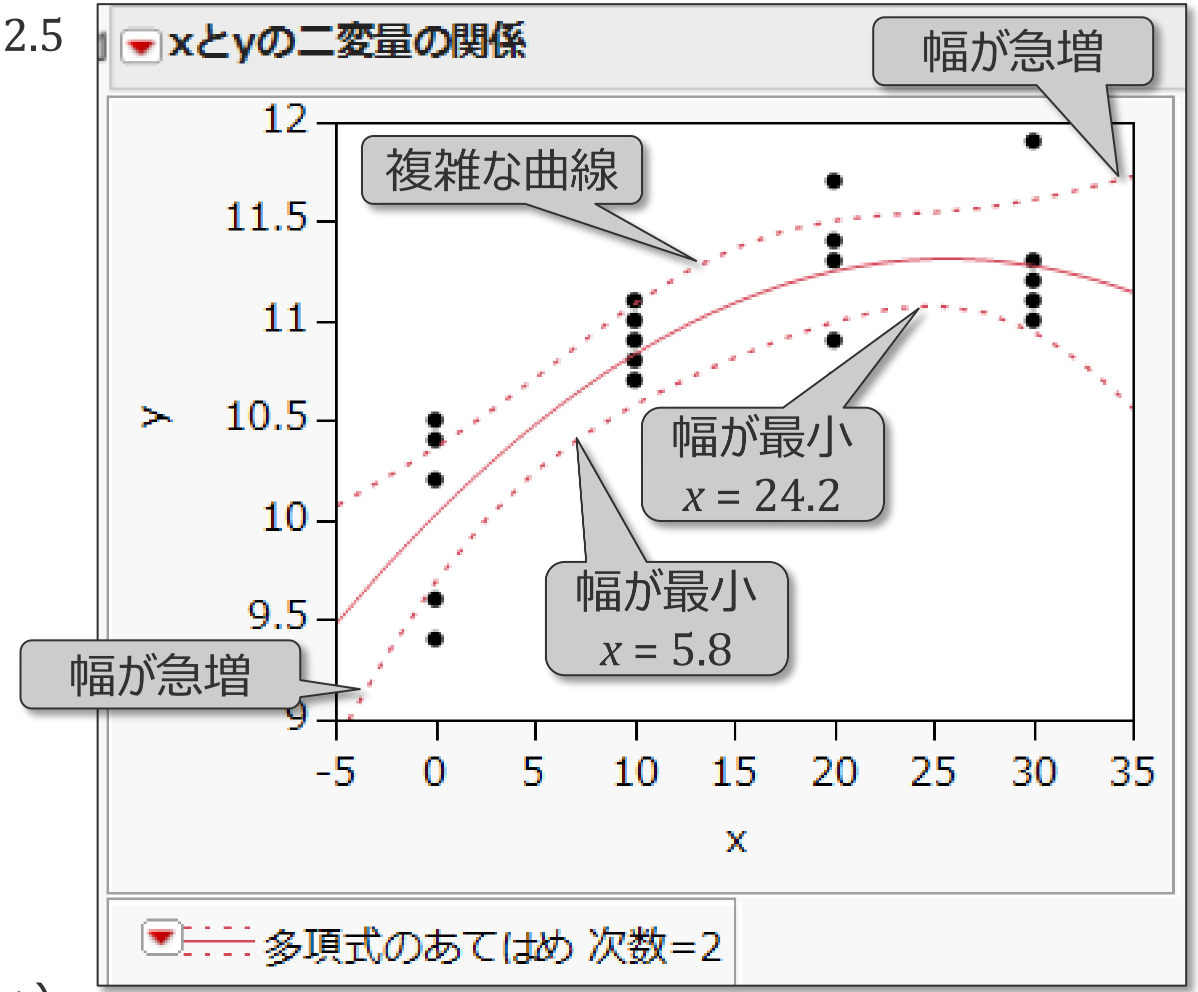
そこからさらに $\bar{x}$ から離れるに従って

区間幅は急速に増加、2 次曲線に接近

実験の範囲を大きく外れた x について

y を予測（外挿）するのは危険（精度が低い）

表示2.2.5



JMP ［二変量の関係］

●回帰の信頼区間の幅（補足）

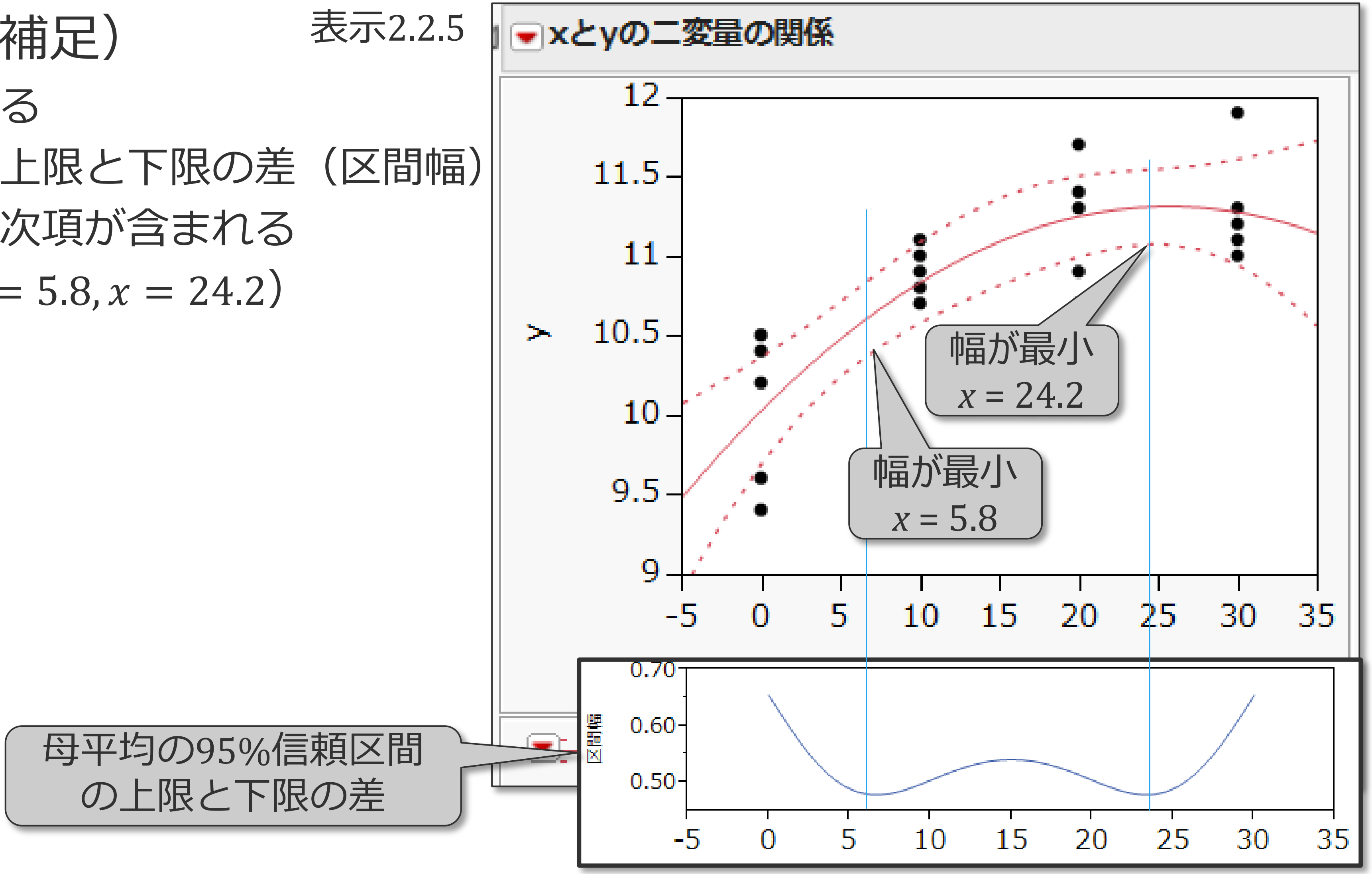
２次式のあてはめにおける

母平均の95%信頼区間の上限と下限の差（区間幅）

信頼区間の式の中には４次項が含まれる

最短の場所が２か所（$x = 5.8, x = 24.2$）

表示2.2.5



JMP ［二変量の関係］

p.91

●回帰式

Excel の結果（表示 2.2.1）

$$\hat{y} = 10.04 + 0.0999x - 0.00195x^2$$

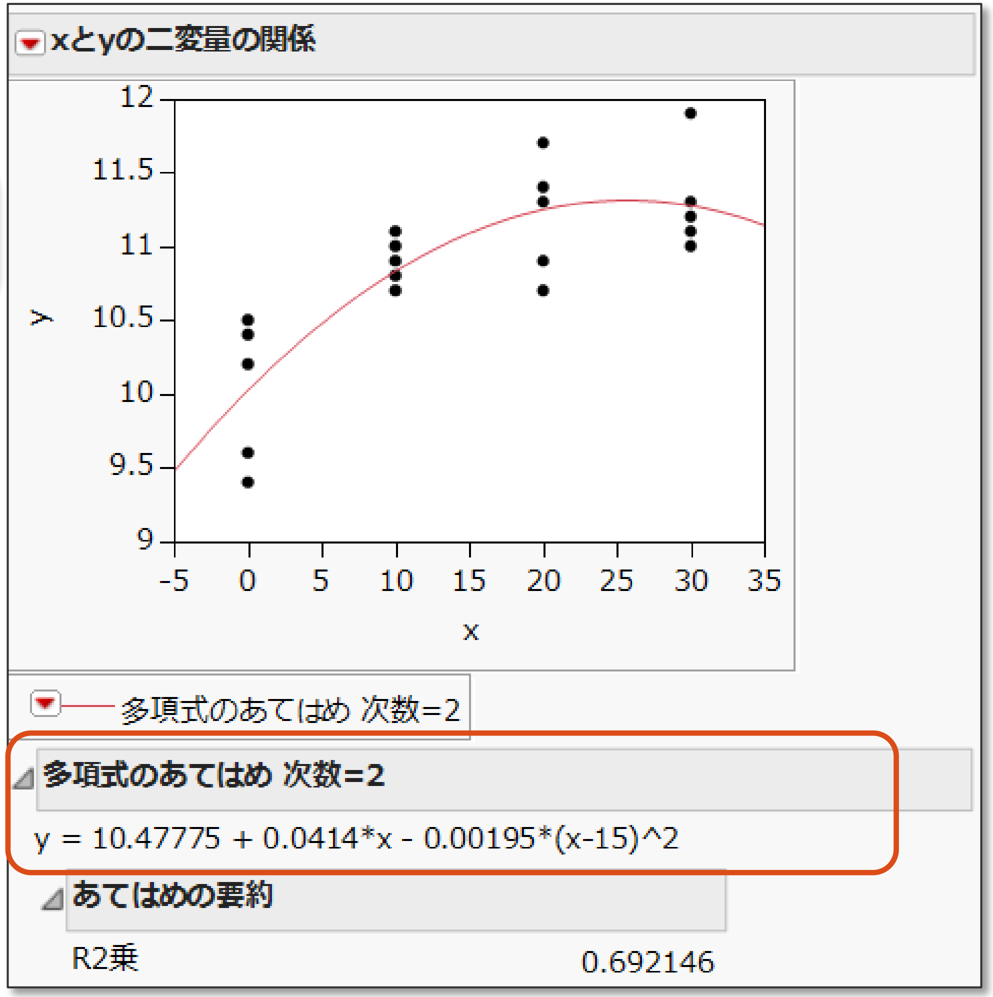
JMP の結果（表示 2.2.5）・・・中心化

平均値
$\sum x_{ij}/N = 15$

$$\hat{y} = 10.48 + 0.041x - 0.00195(x - 15)^2$$
$$= 10.48 + 0.041x - 0.00195(x^2 - 30x + 15^2)$$
$$= 10.04 + 0.0999x - 0.00195x^2$$

Excelで得られた回帰式とJMPで得られた回帰式は、
表現方法が異なるが、両者は一致
JMP の式の意味はこの後で説明

表示2.2.5



JMP ［二変量の関係］

● ［あてはめの要約］

表示2.2.2

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.001	0.025	0.158
寄与率	0.692	0.363	#N/A
F 比	19.111	17	#N/A
回帰平方和	5.045	2.244	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

あてはめの要約

R2乗	0.692146
自由度調整R2乗	0.655928
誤差の標準偏差(RMSE)	0.363326
Yの平均	10.855
オブザベーション(または重みの合計)	20

$$R^2 = \frac{S_R}{S_T} = \frac{4.285 + 0.761}{7.290} = 0.692$$

$$R^{*2} = 1 - \frac{S_e/\nu_e}{S_T/\nu_T}$$

$$= 1 - \frac{2.244/17}{7.29/19} = 0.656$$

（前節 §2.1 参照）

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

JMP ［二変量の関係］

p.91

- ［分散分析］

  モデルの F 比と p 値

  ＝ 2 次式の回帰平方和の F 比と p 値

分散分析

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
モデル	2	5.0454000	2.52270	19.1105
誤差	17	2.2441000	0.13201	p値(Prob>F)
全体(修正済み)	19	7.2895000		<.0001*

表示 2.2.2

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
回帰 2 次式	5.045	2	2.523	19.11	**0.0000**
残差	2.244	17	0.132	1.00	
全体	7.290	19			

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

JMP ［二変量の関係］

p.91

- ［あてはまりの悪さ（LOF）］

LOF の p 値は 0.616 ＞ 0.20

→　よくあてはまっている

あてはまりの悪さ(LOF)

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
あてはまりの悪さ(LOF)	1	0.0361000	0.036100	0.2616
純粋誤差	16	2.2080000	0.138000	p値(Prob>F)
合計誤差	17	2.2441000		0.6160

最大R2乗

0.6971

最大 R2 乗

純粋誤差

$$R^2 = 1 - \frac{S_e}{S_T}$$

$$= \frac{S_{R+}S_{LOF}}{S_T}$$

$$= \frac{4.285 + 0.761 + 0.036}{7.290}$$

$$= 0.6971$$

（R2乗：0.6921）

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

JMP［二変量の関係］

- ［パラメータの推定値］

一致しない

表示2.2.2（一部）

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.001	0.025	0.158
寄与率	0.692	0.363	#N/A
F 比	19.111	17	#N/A
回帰平方和	5.045	2.244	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

パラメータ推定値

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob>|t|)
切片	10.47775	0.169687	61.75	<.0001*
x	0.0414	0.007267	5.70	<.0001*
(x-15)^2	-0.00195	0.000812	-2.40	0.0281*

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

2 次項の t 値、p 値は一致

t 値の 2 乗値は F 比 5.76 と一致

$-2.40^2 = 5.76 \quad t(\nu)^2 = F(1,\nu)$

1 次項の t 値、p 値は一致しない

JMP ［二変量の関係］

- ［パラメータの推定値］

一致しない

中心化

表示2.2.2（一部）

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.001	0.025	0.158
寄与率	0.692	0.363	#N/A
F 比	19.111	17	#N/A
回帰平方和	5.045	2.244	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

パラメータ推定値

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob>|t|)
切片	10.47775	0.169687	61.75	<.0001*
x	0.0414	0.007267	5.70	<.0001*
(x-15)^2	-0.00195	0.000812	-2.40	0.0281*

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

2 次項の t 値、p 値は一致

t 値の 2 乗値は F 比 5.76 と一致

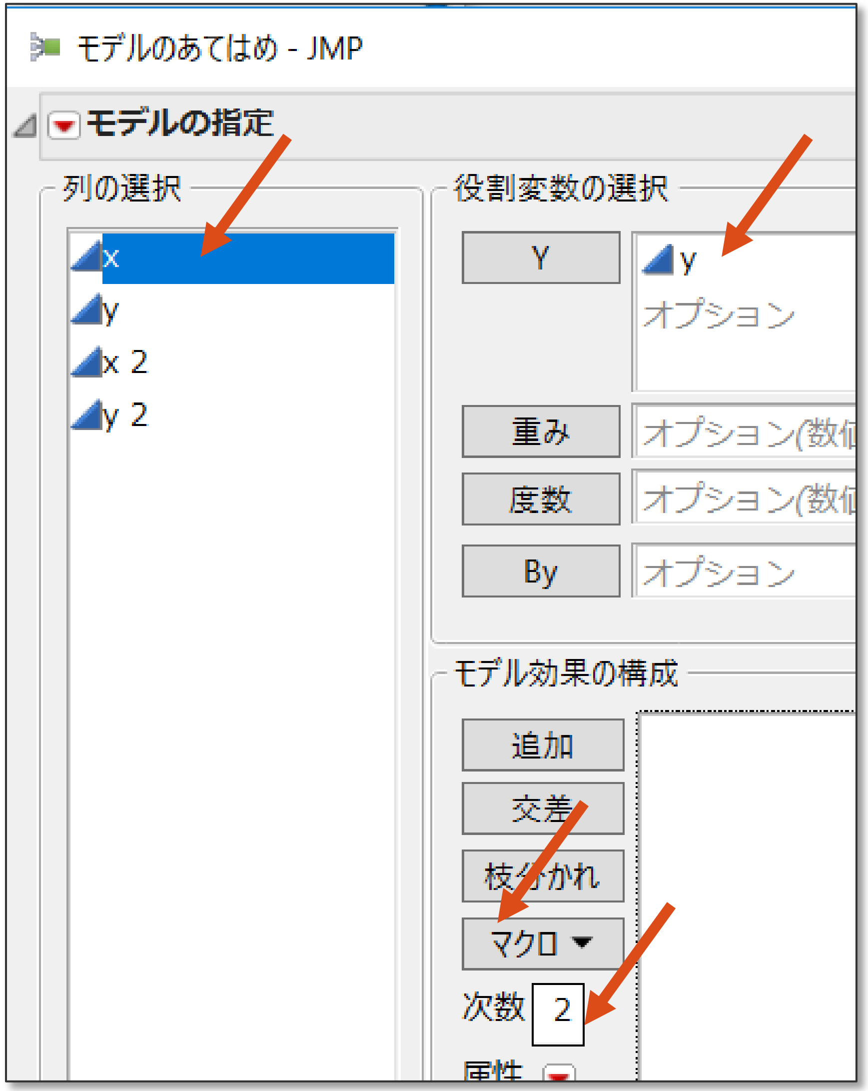
$-2.40^2 = 5.76 \qquad t(\nu)^2 = F(1,\nu)$

1 次項の t 値、p 値は一致しない

JMP ［モデルのあてはめ］

p.92

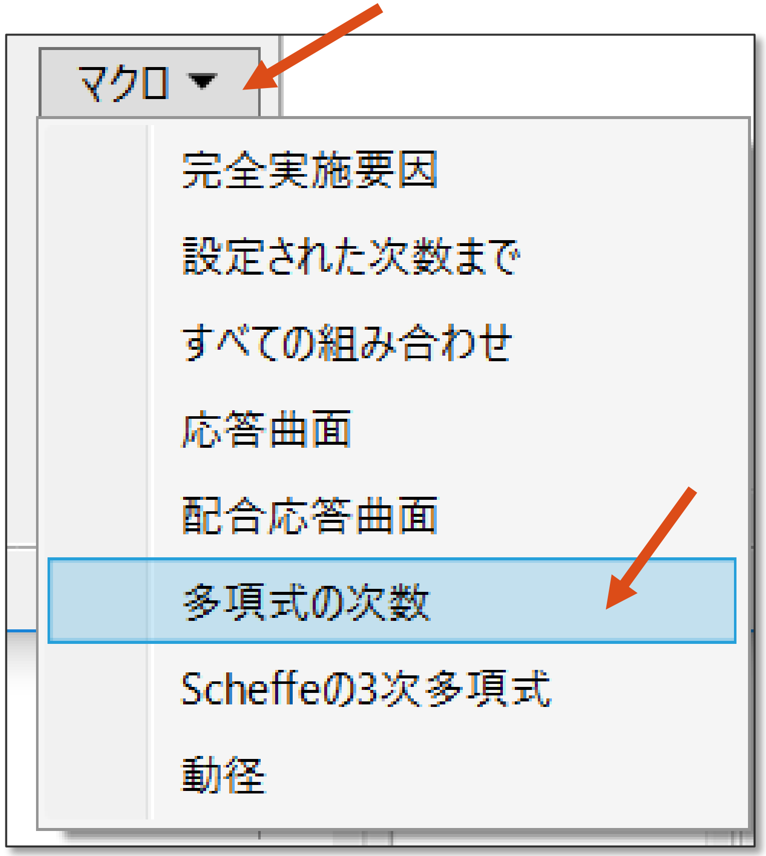
- ［モデルのあてはめ］
  - ［分析］＞［モデルのあてはめ］
  - ［モデル効果の構成］で２次式を指定する方法
    - ［列の選択］で「x」を選択
    - ［次数］で［2］を指定
    - ［マクロ］＞［多項式の次数］を選択

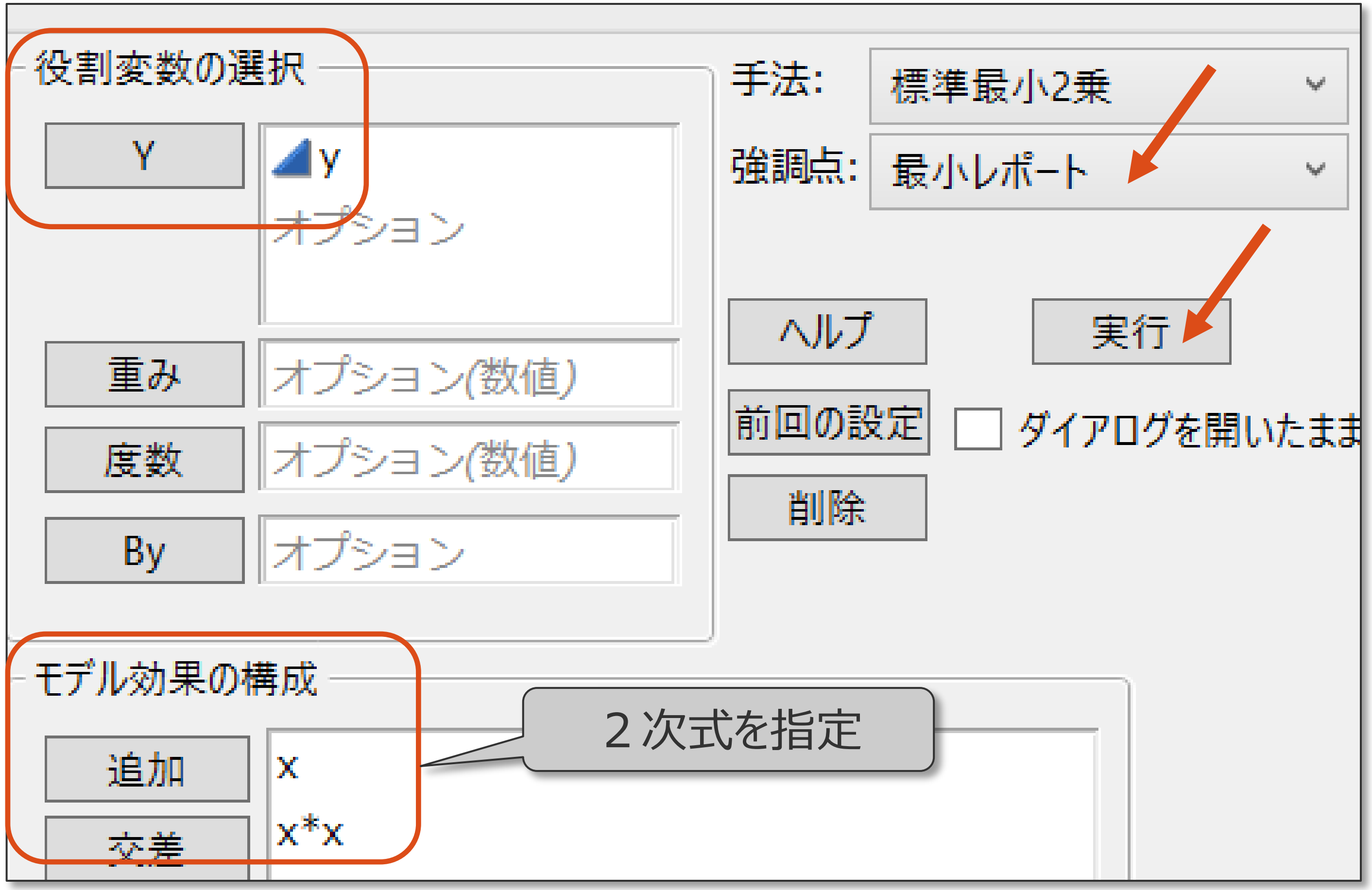


JMP ［モデルのあてはめ］

- ［モデルのあてはめ］

  ２次式を指定



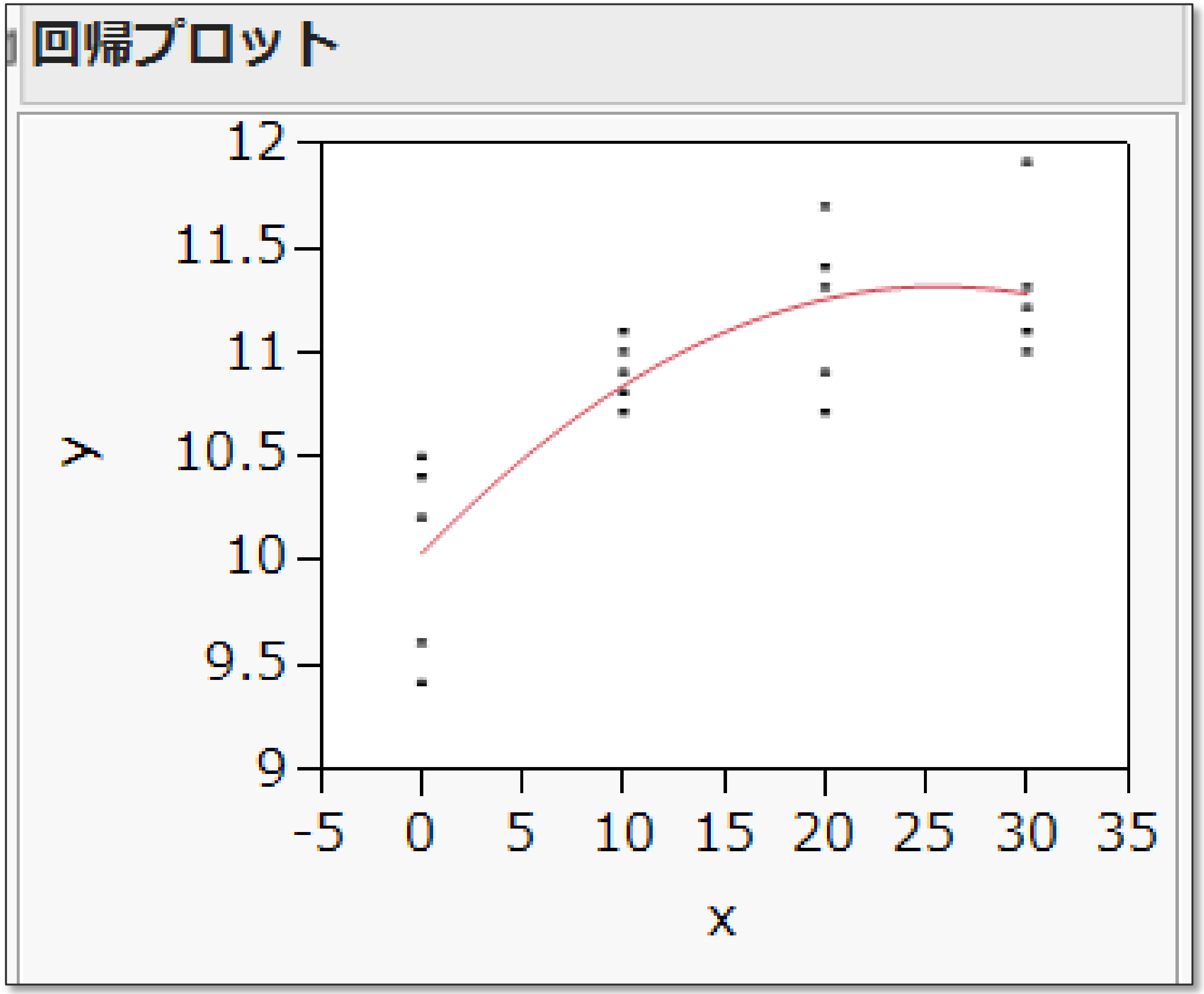


JMP ［モデルのあてはめ］

●散布図

［二変量の関係］のような
信頼区間の曲線は描けない

［列の保存］で信頼区間の値と計算式を
データテーブルに保存
これから信頼区間のグラフを描画
（§2.1 p 85）



JMP ［モデルのあてはめ］

p.92

- ［あてはめの要約］［分散分析］［あてはまりの悪さ（LOF）］

［二変量の関係］と同じ出力結果

表示 2.2.6

あてはめの要約

R2乗	0.692146
自由度調整R2乗	0.655928
誤差の標準偏差(RMSE)	0.363326
Yの平均	10.855
オブザベーション(または重みの合計)	20

分散分析

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
モデル	2	5.0454000	2.52270	19.1105
誤差	17	2.2441000	0.13201	p値(Prob>F)
全体(修正済み)	19	7.2895000		<.0001*

あてはまりの悪さ(LOF)

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
あてはまりの悪さ(LOF)	1	0.0361000	0.036100	0.2616
純粋誤差	16	2.2080000	0.138000	p値(Prob>F)
合計誤差	17	2.2441000		0.6160
				最大R2乗

JMP ［モデルのあてはめ］

p.92

● ［パラメータ推定値］［効果の検定］

［パラメータ推定値］
　［二変量の関係］と同様の出力結果

［効果の検定］
残差* を分母とする F 検定
モデルの１次と２次の有功性を判断
　［二変量の関係］では出力なし
x の平方和と x*x の平方和は
１次と２次の平方和に一致
　（常に成立するわけではない）

表示 2.2.6

パラメータ推定値

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob>|t|)
切片	10.47775	0.169687	61.75	<.0001*
x	0.0414	0.007267	5.70	<.0001*
(x-15)*(x-15)	-0.00195	0.000812	-2.40	0.0281*

効果の検定

要因	パラメータ数	自由度	平方和	F値	p値(Prob>F)
x	1	1	4.2849000	32.4599	<.0001*
x*x	1	1	0.7605000	5.7611	0.0281*

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

LOF を残差に併合

JMP ［モデルのあてはめ］

p.92

●分散分析の関係

［分散分析］

モデルのあてはまり

LOF を含んだ誤差を分母としてF検定

［あてはまりの悪さ］

モデルの適合度合いを判断

純粋誤差を分母とし F 検定

［効果の検定］

モデルの１次と２次の有効性を判断

LOF を含んだ誤差を分母としてF検定

合計がモデルの平方和と常に一致するわけではない

表示 2.2.6

合計誤差

分散分析

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
モデル	2	5.0454000	2.52270	19.1105
誤差	17	2.2441000	0.13201	p値(Prob>F)
全体(修正済み)	19	7.2895000		<.0001*

あてはまりの悪さ(LOF)

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
あてはまりの悪さ(LOF)	1	0.0361000	0.036100	0.2616
純粋誤差	16	2.2080000	0.138000	p値(Prob>F)
合計誤差	17	2.2441000		0.6160

効果の検定

要因	パラメータ数	自由度	平方和	F値	p値(Prob>F)
x	1	1	4.2849000	32.4599	<.0001*
x*x	1	1	0.7605000	5.7611	0.0281*

JMP［モデルのあてはめ］

p.93

●演習 2.2.1（中心化）

Excel ファイル「DE改2-1因子(量).xls」、名前ボックスから「表示2.2.2」（Fig22_02）を選択

このシートをコピーして作業用のシートを作成

LINEST 関数の出力結果を、下にのコピー（値）

x^2 の列を中心化した $(x-15)^2$ の列に修正

LINEST 関数の結果の内容が自動的に変わる

（表示2.4.5 p.105）

$\sum x_{ij}/N = \bar{x}$ =15

=x^2

=(x-15)^2

表示2.2.2（一部）

x	x^2	y
0	0	10.5
0	0	9.6
0	0	10.4
0	0	10.2
0	0	9.4
10	100	10.8
10	100	10.7
10	100	11.1
10	100	10.9
10	100	11.0
20	400	11.4
20	400	10.7
20	400	10.9
20	400	11.3

表示2.4.5（一部）

x	(x-15)^2	y
0	225	10.5
0	225	9.6
0	225	10.4
0	225	10.2
0	225	9.4
10	25	10.8
10	25	10.7
10	25	11.1
10	25	10.9
10	25	11.0
20	25	11.4
20	25	10.7
20	25	10.9
20	25	11.3

JMP ［モデルのあてはめ］

●演習 2.2.1（中心化）

（1）表示 2.2.2（x を y に回帰）

	x	const	
回帰係数	0.0414	10.234	切片
その標準誤差	0.008171	0.1529	その標準誤差
寄与率	0.587818	0.4086	標準偏差
F 比	25.67004	18	残差自由度
回帰平方和	4.2849	3.0046	残差平方和
t 値	5.067	66.946	
p 値	0.000	0.000	

元の結果

（2）表示 2.2.2（ x と x^2 を y に回帰）

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.000812	0.0254	0.1583702
寄与率	0.692146	0.3633	#N/A
F 比	19.11051	17	#N/A
回帰平方和	5.0454	2.2441	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

LINEST関数の結果を比較

（1）x を y に回帰（表示2.2.2）

（2）x と x^2 を y に回帰（表示2.2.2）

（3）x と (x-15)^2 を y に回帰

（表示 2.2.2 を修正、表示2.4.5）

修正した結果

（3）表示 2.4.5（ x と (x-15)^2 を y に回帰）

(x-15)^2	x	const	
-0.00195	0.0414	10.478	切片
0.000812	0.007267	0.1697	その標準誤差
0.692146	0.363326	#N/A	標準偏差
19.11051	17	#N/A	残差自由度
5.0454	2.2441	#N/A	残差平方和
-2.400	5.697	61.747	
0.028	0.000	0.000	

JMP ［モデルのあてはめ］

p.105

●演習 2.2.1（中心化）

（3）x と (x-15)^2 を y に回帰

中心化

パラメータ推定値

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob>|t|)
切片	10.47775	0.169687	61.75	<.0001*
x	0.0414	0.007267	5.70	<.0001*
(x-15)^2	-0.00195	0.000812	-2.40	0.0281*

一致しない

（2）表示 2.2.2（ x と x^2 を y に回帰）

	x^2	x	const
回帰係数	-0.00195	0.0999	10.039
その標準誤差	0.000812	0.0254	0.1583702
寄与率	0.692146	0.3633	#N/A
F 比	19.11051	17	#N/A
回帰平方和	5.0454	2.2441	#N/A
t 値	-2.400	3.928	63.389
p 値	0.028	0.001	0.000

（3）表示 2.4.5（ x と (x-15)^2 を y に回帰）

一致

(x-15)^2	x	const	
-0.00195	0.0414	10.478	切片
0.000812	0.007267	0.1697	その標準誤差
0.692146	0.363326	#N/A	標準偏差
19.11051	17	#N/A	残差自由度
5.0454	2.2441	#N/A	残差平方和
-2.400	5.697	61.747	
0.028	0.000	0.000	

JMP［モデルのあてはめ］

●演習 2.2.1（中心化）

$(x - 15)^2$ に修正した計算結果

表示 2.4.5

(x-15)^2	x	const	
-0.00195	0.0414	10.478	切片
0.000812	0.007267	0.1697	その標準誤差
0.692146	0.363326	#N/A	標準偏差
19.11051	17	#N/A	残差自由度
5.0454	2.2441	#N/A	残差平方和
-2.400	5.697	61.747	
0.028	0.000	0.000	

パラメータ推定値

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob>|t|)
切片	10.47775	0.169687	61.75	<.0001*
x	0.0414	0.007267	5.70	<.0001*
(x-15)^2	-0.00195	0.000812	-2.40	0.0281*

表示 2.2.4

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値	F 比*	p 値*
水準間	5.082	3	1.694	12.27	0.000		
1次	4.285	1	4.285	31.05	0.000	32.46	0.000
2次	0.761	1	0.761	5.51	0.032	5.76	0.028
LOF	0.036	1	0.036	0.26	0.616		
残差	2.208	16	0.138	1.00			
全体	7.290	19					
残差*	2.244	17	0.132			1.00	

スライド46 の再比較

1 次項の t 値 5.697 の 2 乗値は

F 比 32.46 と一致

$$5.697^2 = 32.46$$

$$t(\nu)^2 = F(1, \nu)$$

p.93

（4）中心化

中心化

p.91

●回帰式

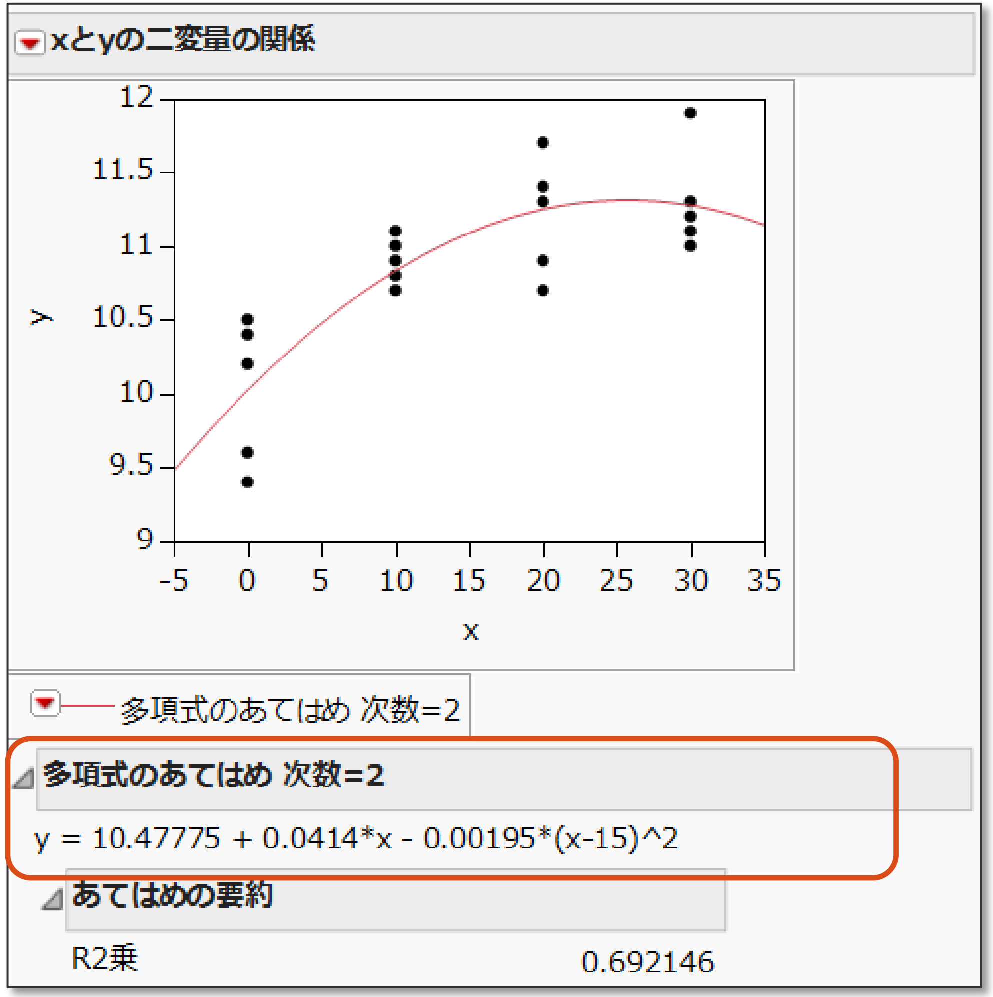
Excel の結果（表示 2.2.1）

$$\hat{y} = 10.04 + 0.0999x - 0.00195x^2$$

JMP の結果（表示 2.2.5）・・・中心化

平均値
$\sum x_{ij}/N = 15$

$$\hat{y} = 10.48 + 0.041x - 0.00195(x-15)^2$$
$$= 10.48 + 0.041x - 0.00195(x^2 - 30x + 15^2)$$
$$= 10.04 + 0.0999x - 0.00195x^2$$



Excelで得られた回帰式とJMPで得られた回帰式は、表現方法が異なるが、両者は一致

x^2 ではなく、$(x-\bar{x})^2$ を用いることを中心化という

JMP では中心化を用いるのが標準（指定を解除可）

中心化

p.94

●中心化と回帰分析

表示 2.2.7（左）

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

中心化

$\bar{x}=3$

回帰式	モデルの平方和
$\hat{y}=-1.90+1.70x$	$S_M=28.90$
$\hat{y}=\ \ 2.60-2.16x+0.64x^2$	$S_M=34.69$
$\hat{y}=-3.19+1.70x+0.64(x-3)^2$	$S_M=34.69$
$\hat{y}=\ \ 1.91+0.64(x-3)^2$	$S_M=\ \ 5.79$

LINEST 関数で 1 次式をあてはめた結果

	x	const
回帰係数	1.7	-1.9
その標準誤差	0.44347	1.47083
寄与率	0.83046	1.40238
F 比	14.6949	3
回帰平方和	28.9	5.9

LINEST 関数で、１次式、２次式（中心化なし）、２次式（中心化あり）をあてはめて、回帰式と回帰平方和 S_R（モデルの平方和 S_M）を比較

中心化

●中心化と回帰分析

表示 2.2.7（左）

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

中心化

回帰式 **モデルの平方和**

$\hat{y} = -1.90 + 1.70x$ $S_M = 28.90$

$\boxed{\hat{y} = \quad 2.60 - 2.16x + 0.64x^2 \qquad S_M = 34.69}$

$\hat{y} = -3.19 + 1.70x + 0.64(x-3)^2$ $S_M = 34.69$

$\hat{y} = \quad 1.91 + 0.64(x-3)^2$ $S_M = \ \ 5.79$

LINEST 関数で 2 次式をあてはめた結果、中心化なし

	x^2	x	const
回帰係数	0.64286	-2.1571	2.60
その標準誤差	0.06389	0.39071	0.5127
寄与率	0.99672	0.23905	#N/A
F 比	303.5	2	#N/A
回帰平方和	34.6857	0.11429	#N/A

LINEST 関数で、１次式、２次式（中心化なし）、２次式（中心化あり）をあてはめて、回帰式と回帰平方和（モデルの平方和）を比較

中心化

●中心化と回帰分析

中心化

表示 2.2.7（左）

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

書き換え

LINEST 関数の x の範囲指定は連続している必要がある

x	$(x-\bar{x})^2$	y
1	4	1
2	1	1
3	0	2
4	1	4
5	4	8

回帰式	モデルの平方和
$\hat{y} = -1.90 + 1.70x$	$S_M = 28.90$
$\hat{y} = 2.60 - 2.16x + 0.64x^2$	$S_M = 34.69$
$\hat{y} = -3.19 + 1.70x + 0.64(x-3)^2$	$S_M = 34.69$
$\hat{y} = 1.91 + 0.64(x-3)^2$	$S_M = 5.79$

LINEST 関数で 2 次式をあてはめた結果、中心化あり

	(x-3)^2	x	const
回帰係数	0.64286	1.7	-3.1857
その標準誤差	0.06389	0.07559	0.2814
寄与率	0.99672	0.23905	#N/A
F 比	303.5	2	#N/A
回帰平方和	34.6857	0.11429	#N/A

中心化

p.94

●中心化と回帰分析

中心化

表示 2.2.7（左）	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

回帰式	モデルの平方和
$\hat{y}=-1.90+1.70x$	$S_M=28.90$
$\hat{y}=\ \ 2.60-2.16x+\boxed{0.64x^2}$	$S_M=34.69$
$\hat{y}=-3.19+1.70x+\boxed{0.64(x-3)^2}$	$S_M=34.69$
$\hat{y}=\ \ 1.91+0.64(x-3)^2$	$S_M=\ \ 5.79$

中心化

2 次項の回帰係数はいずれの場合も同じ値 ＋0.64

1 次項の回帰係数は異なる

1 次式： ＋1.70

2 次式：x^2 のとき　　－2.16（1 次式と異なる、x とx^2 の相関係数が0.981 ）

$(x-3)^2$ のとき＋1.70（1 次式と等しい、x と$(x-3)^2$ の相関係数が0.000）

中心化

p.94

●中心化と回帰分析

表示 2.2.7（左）

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

中心化

直交

回帰式

$$\hat{y} = -1.90 \boxed{+ 1.70x}$$
$$\hat{y} = \quad 2.60 \boxed{- 2.16x} + 0.64x^2$$
$$\hat{y} = -3.19 \boxed{+ 1.70x} + 0.64(x-3)^2$$
$$\hat{y} = \quad 1.91 + 0.64(x-3)^2$$

モデルの平方和

$$S_M = 28.90$$
$$S_M = 34.69$$
$$S_M = 34.69$$
$$S_M = \ 5.79$$

説明変数が直交していると
説明変数の回帰係数は
独立して求められる
→ 1 次の係数は変わらない

中心化

2 次項の回帰係数はいずれの場合も同じ値 ＋0.64

1 次項の回帰係数は異なる

1 次式：＋1.70

2 次式：x^2 のとき　－2.16（1 次式と異なる、x と x^2 の相関係数が 0.981 ）

$(x-3)^2$ のとき ＋1.70（1 次式と等しい、x と $(x-3)^2$ の相関係数が 0.000）

説明変数間の
相関係数が 0
2 つの変数は
直交している

中心化

p.94

●中心化と回帰分析

中心化

表示 2.2.7（左）

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

直交

回帰式

$\hat{y} = -1.90 + 1.70x$

$\hat{y} = 2.60 - 2.16x + \boxed{0.64x^2}$

$\hat{y} = -3.19 + 1.70x + \boxed{0.64(x-3)^2}$

$\hat{y} = 1.91 \boxed{+ 0.64(x-3)^2}$

モデルの平方和

$\boxed{S_M = 28.90}$

$S_M = 34.69$

$\boxed{S_M = 34.69}$

$\boxed{S_M = 5.79}$

個々の説明変数の
回帰による平方和の和
5.79+28.90 = 34.69

2 次項の回帰係数はいずれの場合も同じ値 ＋0.64

1 次項の回帰係数は異なる

1 次式：＋1.70

2 次式：x^2 のとき　－2.16（1 次式と異なる、x と x^2 の相関係数が0.981）

$(x-3)^2$ のとき＋1.70（1 次式と等しい、x と $(x-3)^2$ の相関係数が0.000）

説明変数間の
相関係数が 0
2 つの変数は
直交している

中心化

●x の分布が非対称の場合

表示 2.2.7（左）

x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
1	1	4	1
2	4	1	1
3	9	0	2
4	16	1	4
5	25	4	8
1.000	0.981	0.000	

x との相関係数（最終行）

直交

回帰式

$$\hat{y} = -1.90 \boxed{+\ 1.70x}$$
$$\hat{y} = \quad 2.60 - 2.16x + 0.64x^2$$
$$\hat{y} = -3.19 \boxed{+\ 1.70x} + 0.64(x-3)^2$$
$$\hat{y} = \quad 1.91 + 0.64(x-3)^2$$

中心化して回帰係数は一致

モデルの平方和

$S_M = 28.90$

$S_M = 34.69$

$S_M = 34.69$

$S_M = 5.76$

表示 2.2.7（右）

x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
1.0	1.00	4.00	1
2.0	4.00	1.00	1
3.0	9.00	0.00	2
3.5	12.25	0.25	2
5.5	30.25	6.25	6
1.000	0.975	0.365	

x との相関係数（最終行）

直交していない

中心化しても回帰係数は一致しない

$$\hat{y} = -2.73 \boxed{+\ 2.04x}$$
$$\hat{y} = \quad 2.32 - 1.89x + 0.60x^2$$
$$\hat{y} = -3.05 \boxed{+\ 1.69x} + 0.60(x-3)^2$$
$$\hat{y} = \quad 1.14 + 0.98(x-3)^2$$

$S_M = 48.02$

$S_M = 57.19$

$S_M = 57.19$

$S_M = 28.63$

中心化

p.94

●x の分布が非対称の場合

表示 2.2.7（左）

x の分布が左右対称

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

回帰式

$$\hat{y} = -1.90 + 1.70x$$
$$\hat{y} = 2.60 - 2.16x + 0.64x^2$$
$$\hat{y} = -3.19 + 1.70x + 0.64(x-3)^2$$
$$\hat{y} = 1.91 + 0.64(x-3)^2$$

モデルの平方和

$$\boxed{S_M = 28.90}$$
$$S_M = 34.69$$
$$S_M = 34.69$$
$$\boxed{S_M = 5.76}$$

5.79+28.90 = 34.69

表示 2.2.7（右）

x の分布が左右非対称

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1.0	1.00	4.00	1
	2.0	4.00	1.00	1
	3.0	9.00	0.00	2
	3.5	12.25	0.25	2
	5.5	30.25	6.25	6
x との相関係数	1.000	0.975	0.365	

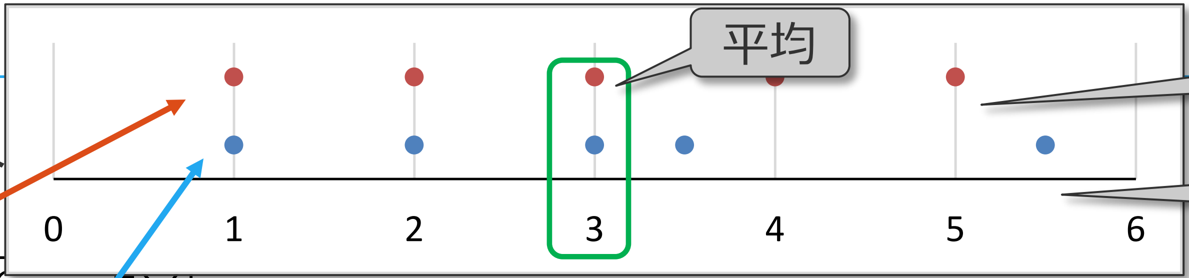
$$\hat{y} = -2.73 + 2.04x$$
$$\hat{y} = 2.32 - 1.89x + 0.60x^2$$
$$\hat{y} = -3.05 + 1.69x + 0.60(x-3)^2$$
$$\hat{y} = 1.14 + 0.98(x-3)^2$$

$$\boxed{S_M = 48.02}$$
$$S_M = 57.19$$
$$S_M = 57.19$$
$$\boxed{S_M = 28.63}$$

28.63+48.02 ≠ 57.19

中心化

●x の分布が非対称の場合



平方和

表示 2.2.7（左）

x の分布が左右対称

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

$\hat{y} = -1.90 + 1.70x$ 　 $S_M = 28.90$

$\hat{y} = 2.60 - 2.16x + 0.64x^2$ 　 $S_M = 34.69$

$\hat{y} = -3.19 + 1.70x + 0.64(x-3)^2$ 　 $S_M = 34.69$

$\hat{y} = 1.91 + 0.64(x-3)^2$ 　 $S_M = 5.76$

5.79+28.90 = 34.69

表示 2.2.7（右）

x の分布が左右非対称

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1.0	1.00	4.00	1
	2.0	4.00	1.00	1
	3.0	9.00	0.00	2
	3.5	12.25	0.25	2
	5.5	30.25	6.25	6
x との相関係数	1.000	0.975	0.365	

$\hat{y} = -2.73 + 2.04x$ 　 $S_M = 48.02$

$\hat{y} = 2.32 - 1.89x + 0.60x^2$ 　 $S_M = 57.19$

$\hat{y} = -3.05 + 1.69x + 0.60(x-3)^2$ 　 $S_M = 57.19$

$\hat{y} = 1.14 + 0.98(x-3)^2$ 　 $S_M = 28.63$

28.63+48.02 ≠ 57.19

中心化

p.94

●x の分布が非対称の場合

表示 2.2.7（左）

x の分布が左右対称

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1	1	4	1
	2	4	1	1
	3	9	0	2
	4	16	1	4
	5	25	4	8
x との相関係数	1.000	0.981	0.000	

表示 2.2.7（右）

x の分布が左右非対称

	x	x^2	$(x-\bar{x})^2$	y
	1.0	1.00	4.00	1
	2.0	4.00	1.00	1
	3.0	9.00	0.00	2
	3.5	12.25	0.25	2
	5.5	30.25		
x との相関係数	1.000	0.975		

中心化しても
回帰係数は一致しない

回帰式　　**モデルの平方和**

$\hat{y} = -1.90 + 1.70x$　　$S_M = 28.90$

$\hat{y} = 2.60 - 2.16x + 0.64x^2$　　$S_M = 34.69$

$\hat{y} = -3.19 + 1.70x + 0.64(x-3)^2$　　$S_M = 34.69$

$\hat{y} = 1.91 + 0.64(x-3)^2$　　$S_M = 5.76$

$-1.89 - 2.04 = -3.93$

$\hat{y} = -2.73 \boxed{+ 2.04x}$　　$S_M = 48.02$

$\hat{y} = 2.32 - 1.89x + 0.60x^2$　　$S_M = 57.19$

$\hat{y} = -3.05 \boxed{+ 1.69x +} 0.60(x-3)^2$　　$S_M = 57.19$

$\hat{y} = 1.14 + 0.98(x -$ … .63

$1.69 - 2.04 = -0.35$

1 次式と 2 次式で、1次項の回帰係数は
中心化した方が より近い値になっている

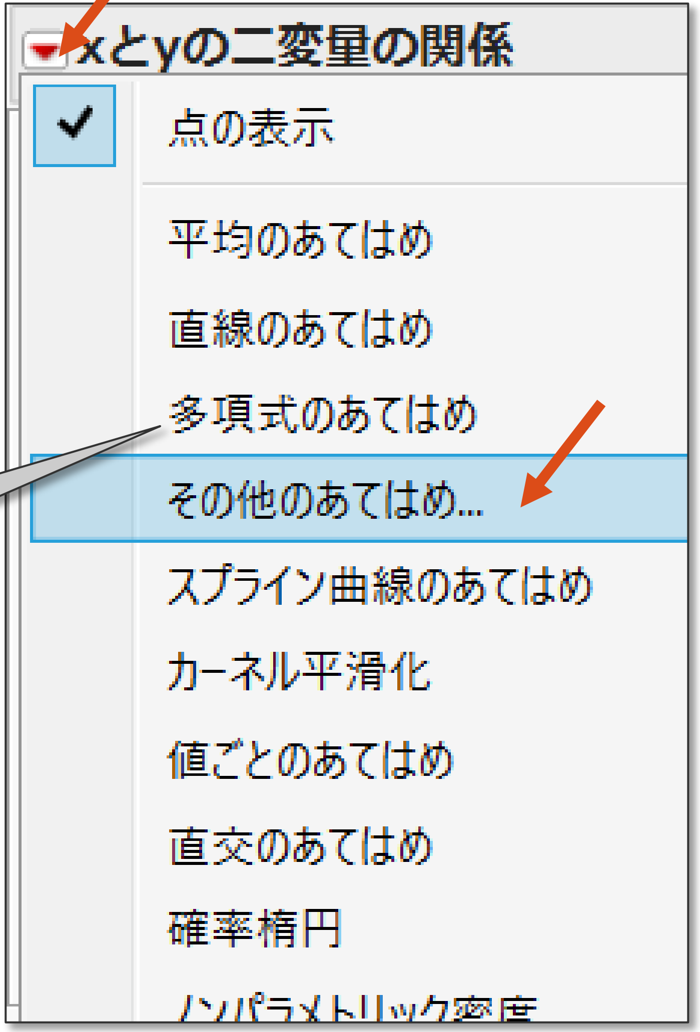
中心化

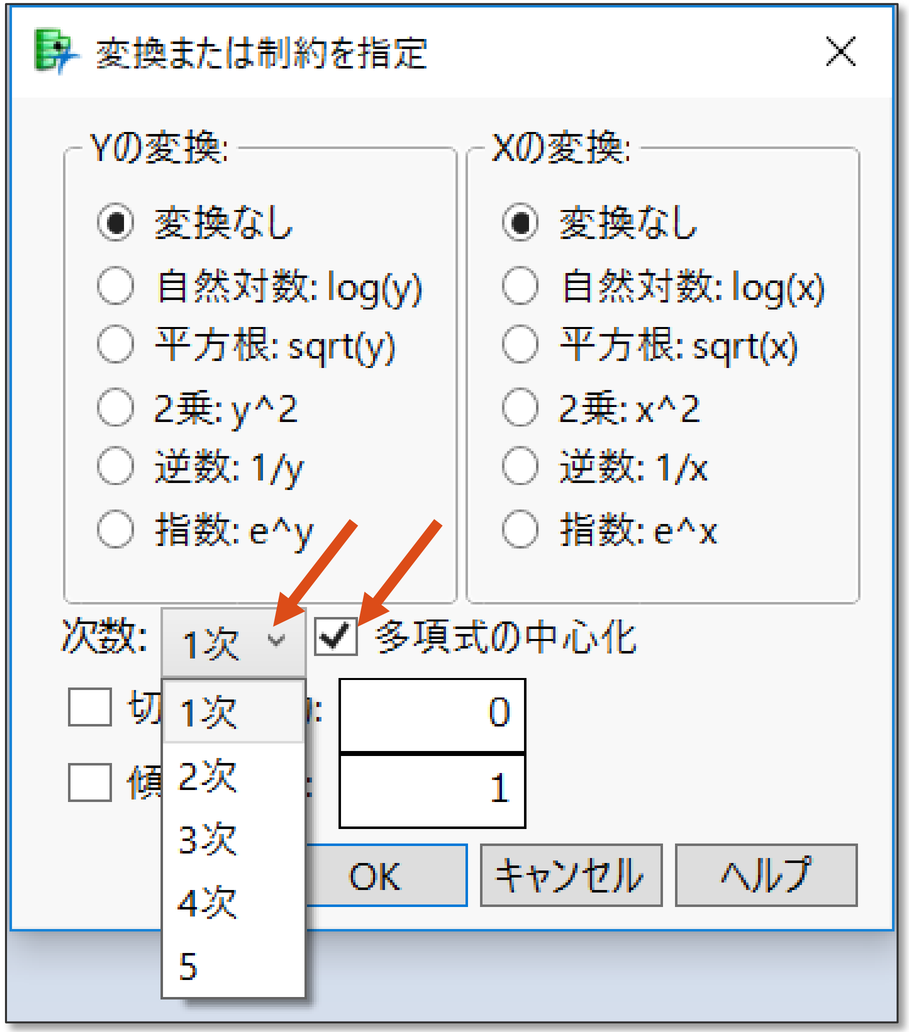
p.95

●JMPの中心化を解除

［二変量の関係］
▼>［その他のあてはめ］
>［次数］の選択
［多項式の中心化］の
チェックを外す

［多項式のあてはめ］ではない



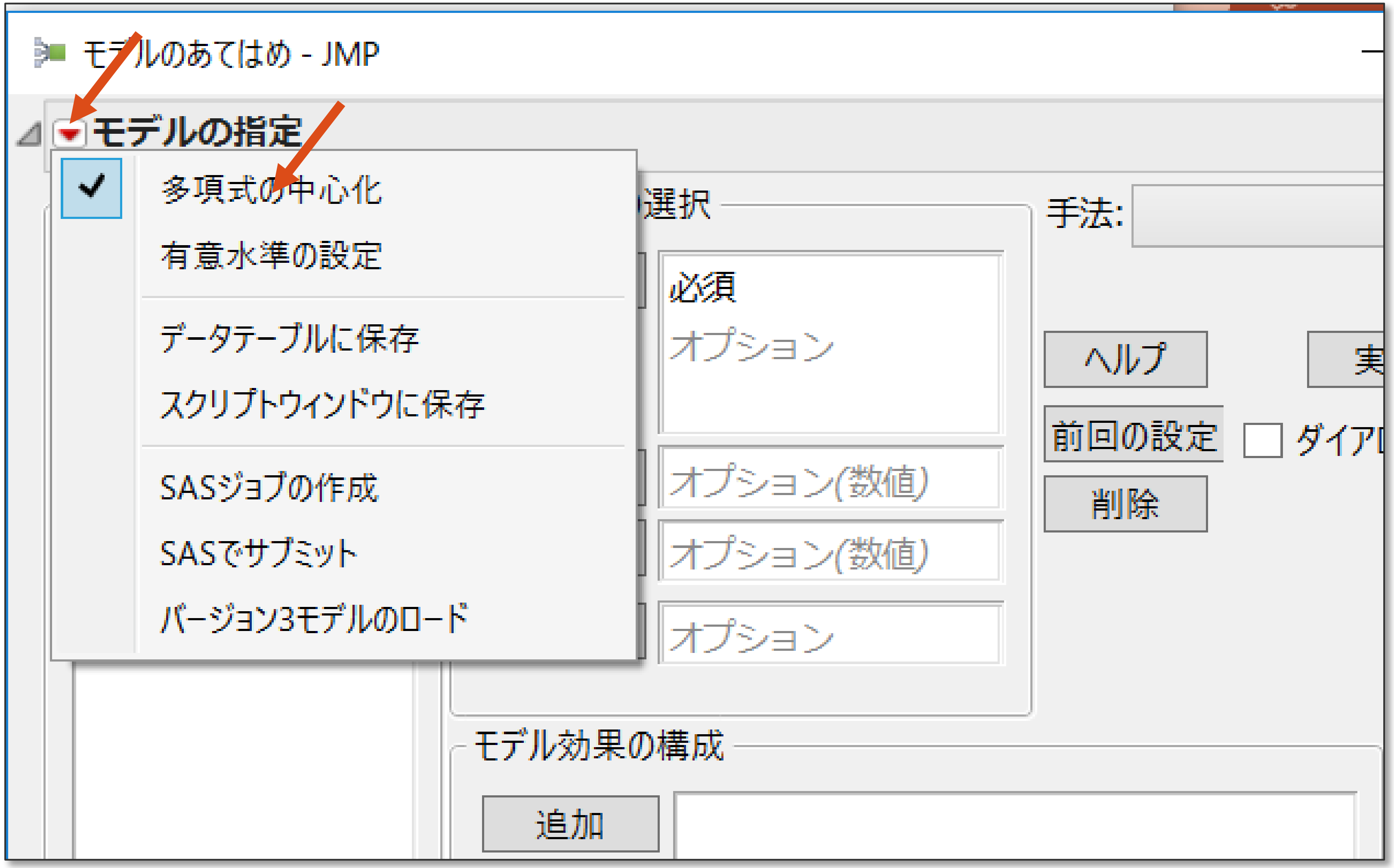


中心化

p.95

●JMPの中心化

［モデルのあてはめ］
▼＞［多項式の中心化］の
チェックを外す



p.95

（5）最適条件の推定

最適条件の推定

p.95

- 2次式からの最適条件の算出

薬の投与量 x と薬効 y の間に2次式をあてはめた

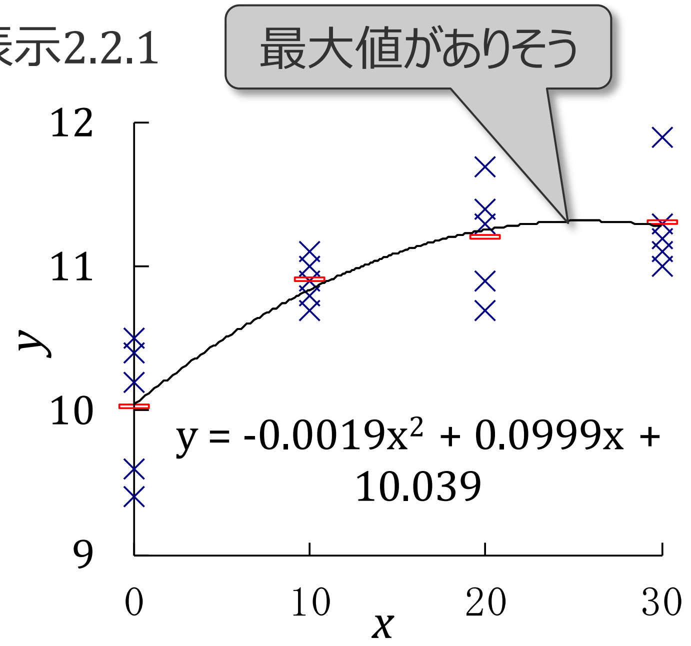
$$\begin{aligned}\hat{y} &= b_0 + b_1 x + b_2 x^2 \\ &= 10.039 + 0.0999x - 0.00195x^2 \qquad (2.2.1)\end{aligned}$$

薬効 y を最大にする投与量 x_{opt} を求めるには、
式(2.2.1)を微分して0と置く

$$\frac{d\hat{y}}{dx} = b_1 + 2b_2 x_{opt} = 0$$

$$x_{opt} = \frac{-b_1}{2b_2} = \frac{-0.0999}{2 \times (-0.00195)} = 25.62 \qquad (2.2.2)$$

表示2.2.1



そのときの y の値

$$\hat{y}_{opt} = b_0 + b_1 x_{opt} + b_2 x_{opt}^2 = b_0 + b_1\left(\frac{-b_1}{2b_2}\right) + b_2\left(\frac{-b_1}{2b_2}\right)^2$$

$$= b_0 - b_1^2/4b_2 = 10.039 - 0.0999^2/\left(4 \times (-0.00195)\right) = 11.32 \qquad (2.2.3)$$

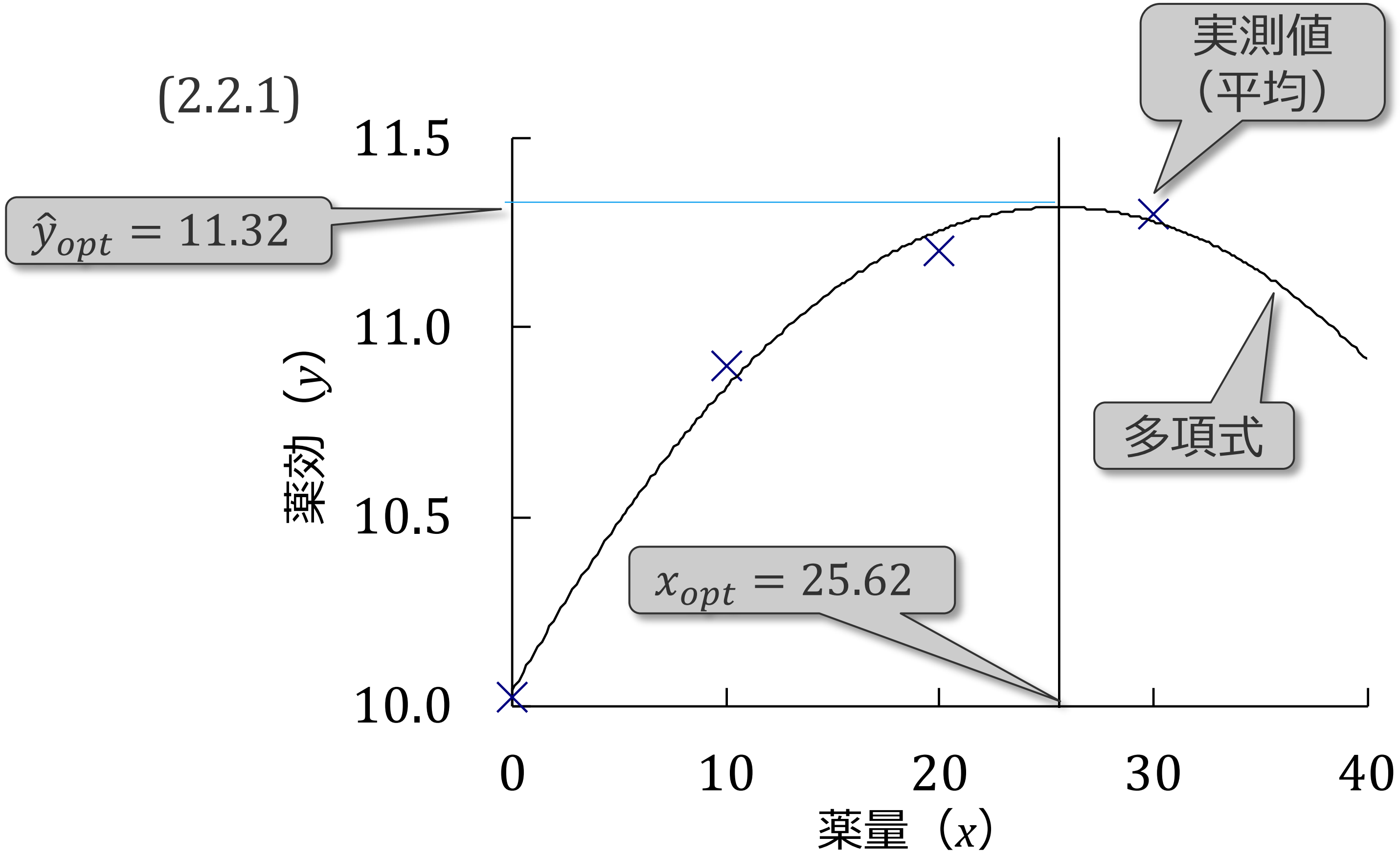
最適条件の推定

●最適条件の推定値

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x + b_2 x^2$$
$$= 10.039 + 0.0999x - 0.00195x^2 \qquad (2.2.1)$$

$$x_{opt} = 25.62$$
$$\hat{y}_{opt} = 11.32$$

表示2.2.8 2 次式のモデルと真のモデル



p.96

（6）モデルの妥当性の検討

モデルの妥当性の検討

p.96

●多項式（２次式）のモデル

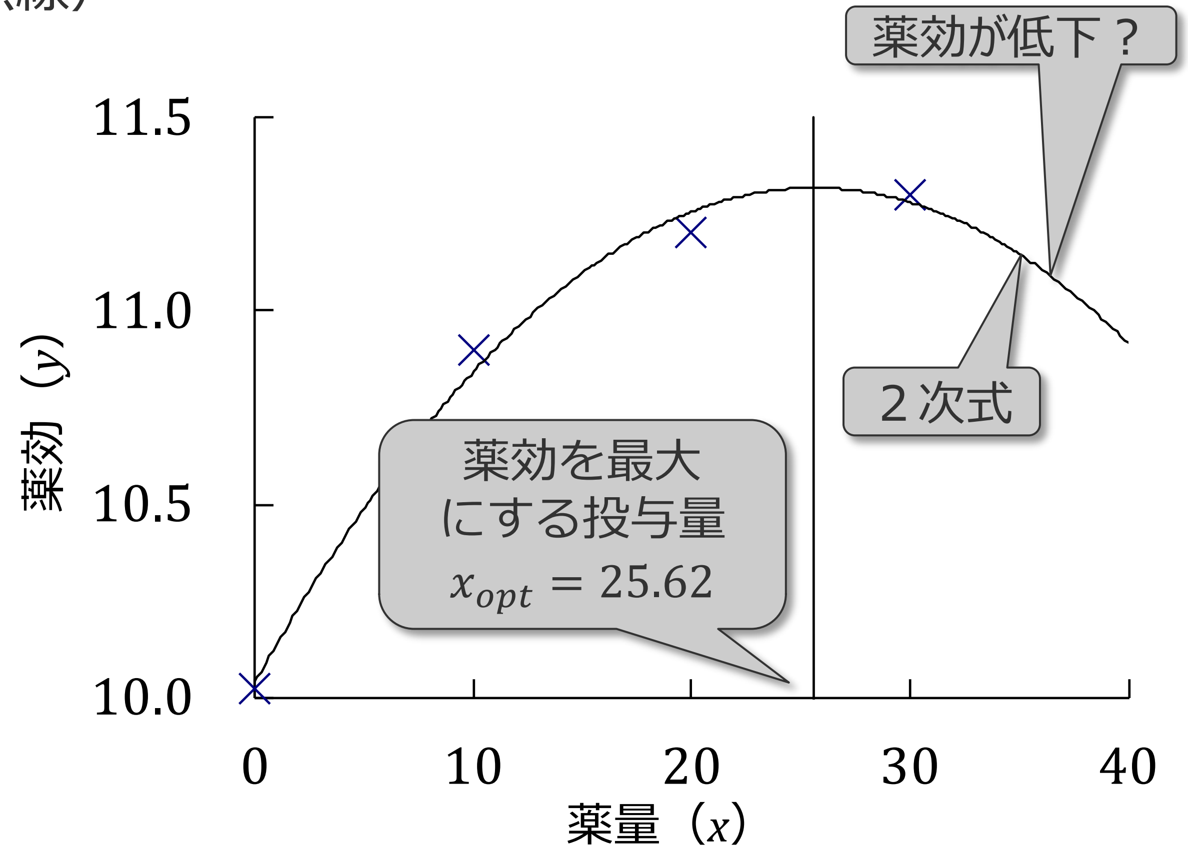
データにフィット、LOF は有意ではない（α=0.20）

薬効を最大にする投与量 x_{opt} を算出（右図の黒線）

それ以上投与すると薬効が低下

→　投与量が多すぎると薬効が低下？

表示2.2.8 ２次式のモデルと真のモデル



モデルの妥当性の検討

p.96

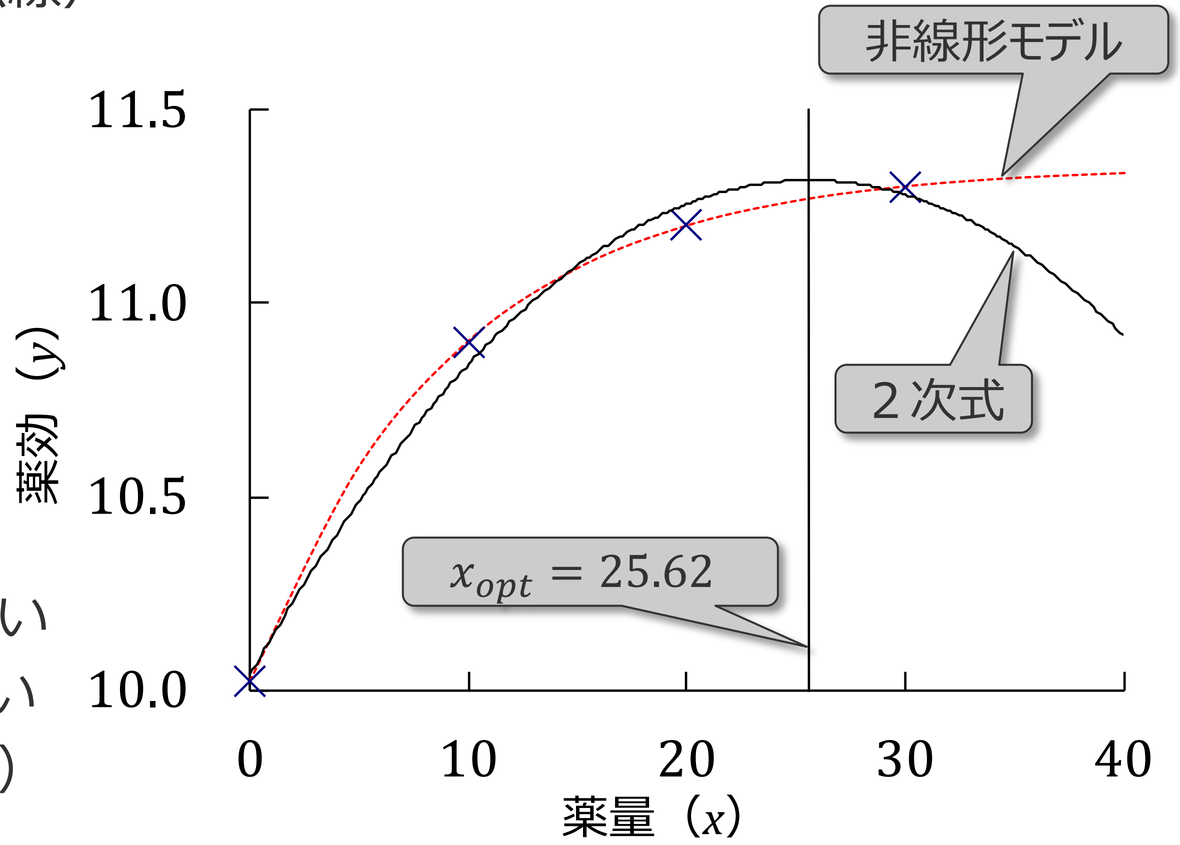
●多項式（２次式）のモデル

データにフィット、LOF は有意ではない（α=0.20）
薬効を最大にする投与量 x_{opt} を算出（右図の黒線）
それ以上投与すると薬効が低下
→　投与量が多すぎると薬効が低下？

●非線形モデル

投与量が増すと上限値に接近するモデル
（右図の赤線、$y_{\max}$ = 11.35 に接近する曲線）
データにフィット
生化学的，薬物動態学的に妥当である場合が多い
このモデルは通常の最小2 乗法では求められない
（第３部「非線形モデル」で詳しく取り上げる）

表示2.2.8 ２次式のモデルと真のモデル



モデルの妥当性の検討

p.96

●多項式（2 次式）のモデル

データにフィット、LOF は有意ではない（α=0.20）

薬効を最大にする投与量 x_{opt} を算出（右図の黒線）

それ以上投与すると薬効が低下

→　投与量が多すぎると薬効が低下？

●非線形モデル

投与量が増すと上限値に接近するモデル

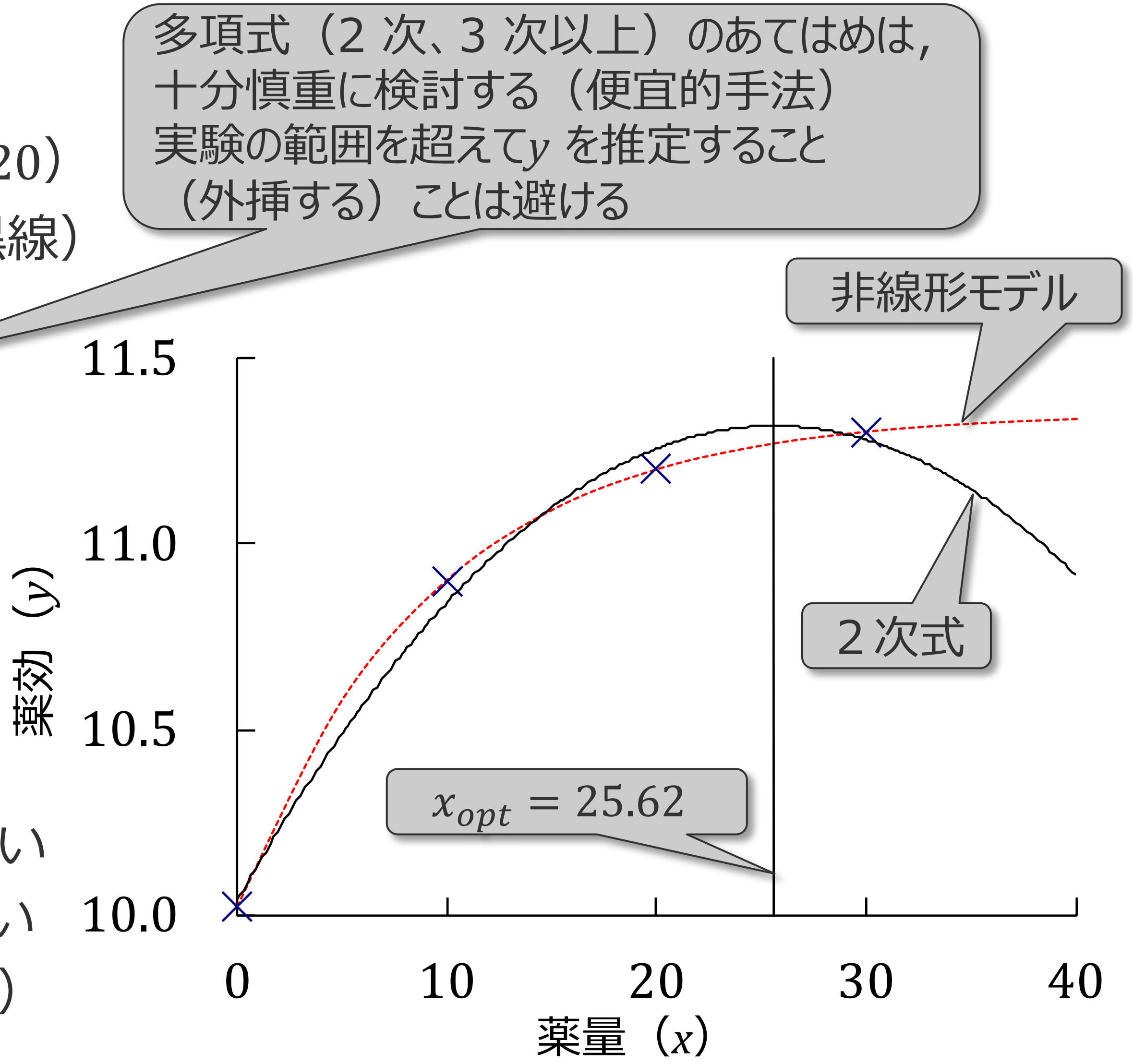
（右図の赤線、$y_{\max}$ = 11.35 に接近する曲線）

データにフィット

生化学的，薬物動態学的に妥当である場合が多い

このモデルは通常の最小2 乗法では求められない

（第３部「非線形モデル」で詳しく取り上げる）



まとめ

p.96

●量的因子の１因子実験

　因子の影響が直線的ではない場合に２次式（多項式）をあてはめる

　これは便宜的な対応であることを十分理解して用いる

●さらなる発展

　第３部「非線形モデル」で、非線形回帰分析を詳しく取り上げる

● 作成	片瀬雅彦
● 監修	松本一彦、長谷文雄
● 作成時期	2019年8月3日
● 改訂	2020年3月14日、2023年9月16日