5 ２因子実験

5.5 ２因子実験（量的因子×量的因子）

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

5.5 2因子実験（量的因子×量的因子）

p.196

テキストの
該当ページ

（1）モデル
（2）データと Excel による解析
（3）JMP による解析
（4）最適条件

使用するファイル
　Excel ファイル：「DE改5-2因子.xlsm」
　JMP ファイル：「5-2因子4.jmp」
　サイエンティスト社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

はじめに

●Excel ファイルの［コンテンツの有効化］

配布されているExcel ファイルでは、
スクロールバーとマクロを利用するため、
［コンテンツの有効化］を行う

［ファイル］＞［情報］＞［コンテンツの有効化］
＞［コンテンツの有効化］

p.196

（1）モデル

２因子実験（量的因子×量的因子）のモデル
応答曲面

p.196

モデル

●モデル

2 つの因子が共に量的因子（x_1、x_2）のとき、y は x_1 と x_2 の関数で表わされる

x1、x2：因子

前節までの表記

i	x_i	y_i
1	x_1	y_1
1	x_1	y_1
1	x_1	y_1
2	x_2	y_2
2	x_2	y_2
2	x_2	y_2

x_1 と x_2 は水準

i ：水準を示す添え字

本節の表記

x_1 と x_2 は因子

i	j	x_{1i}	x_{2i}	y_{ij}
1	1	x_{11}	x_{21}	y_{11}
1	2	x_{11}	x_{22}	y_{12}
2	1	x_{12}	x_{21}	y_{21}
2	2	x_{12}	x_{22}	y_{22}
3	1	x_{13}	x_{21}	y_{31}
3	2	x_{13}	x_{22}	y_{32}

ij：水準を示す添え字

モデル

p.196

●モデル

2 つの因子が共に量的因子（x_1、x_2）のとき、y は x_1 と x_2 の関数で表わされる

一般モデル

$$y_{ij} = b_0 + f_1(x_{1i}) + f_2(x_{2j}) + f_{12}(x_{1i}x_{2j}) \qquad (5.5.1)$$

交互作用項

近似モデル：２次の多項式による近似

f_1, f_2, f_{12} は一般には複雑な関数ではあるが、通常は 2 次の多項式による近似で十分

$$y_{ij} = b_0 + f_1(x_{1i}) + f_2(x_{2j}) + f_{12}(x_{1i}x_{2j}) \qquad (5.5.1)$$

$$= b_0 + b_1 x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + b_2 x_{2j} + b_{22} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

定数項　1次項　2次項　1次項　2次項　積項

y_{ij} がどのように変化するのか、パラメータと因子 x_{1i}、x_{2j} の水準を変えてy_{ij} を計算

モデル

p.196

●Excel によるグラフ化

近似モデル：２次の多項式による近似

$$y_{ij} = b_0 + b_1 x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + b_2 x_{2j} + b_{22} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

パラメータと因子 x_1、x_2 の水準を適当な数値に限定してy の変化を見る

限定条件　（組合せは膨大なので）

$b_0 = 0$ ・・・・・・固定

$b_1 = b_2 = 1$ ・・固定

$b_{11} = b_{22}$ ・・・・変化

b_{12} ・・・・・・・・変化

$0 \le x_1 \le 2$ ・・・変化

$0 \le x_2 \le 2$ ・・・変化

$$y_{ij} = x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + x_{2j} + b_{11} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

モデル

●Excel によるグラフ化

Excel ファイル「DE改5-2因子.xls」、名前ボックスから「表示5.5.1」（Fig55_01）を選択

$$y_{ij} = x_{1i} + b_{11}x_{1i}^2 + x_{2j} + b_{11}x_{2j}^2 + b_{12}x_{1i}x_{2j} \quad (5.5.2)$$

表示 5.5.1 x による y の変化（改変）

			x2	x1				
	b0	0.00		0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
	b1	1.00	0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
	b2	1.00	0.5	0.4	0.9	1.3	1.5	1.6
	b11	-0.25	1.0	0.8	1.3	1.7	2.0	2.2
	b22	-0.25	1.5	0.9	1.5	2.0	2.3	2.5
	b12	0.20	2.0	1.0	1.6	2.2	2.5	2.8
1次項	b1,b2							
2次項	b11	-0.25						
	=b22							
積項	b12	0.20						

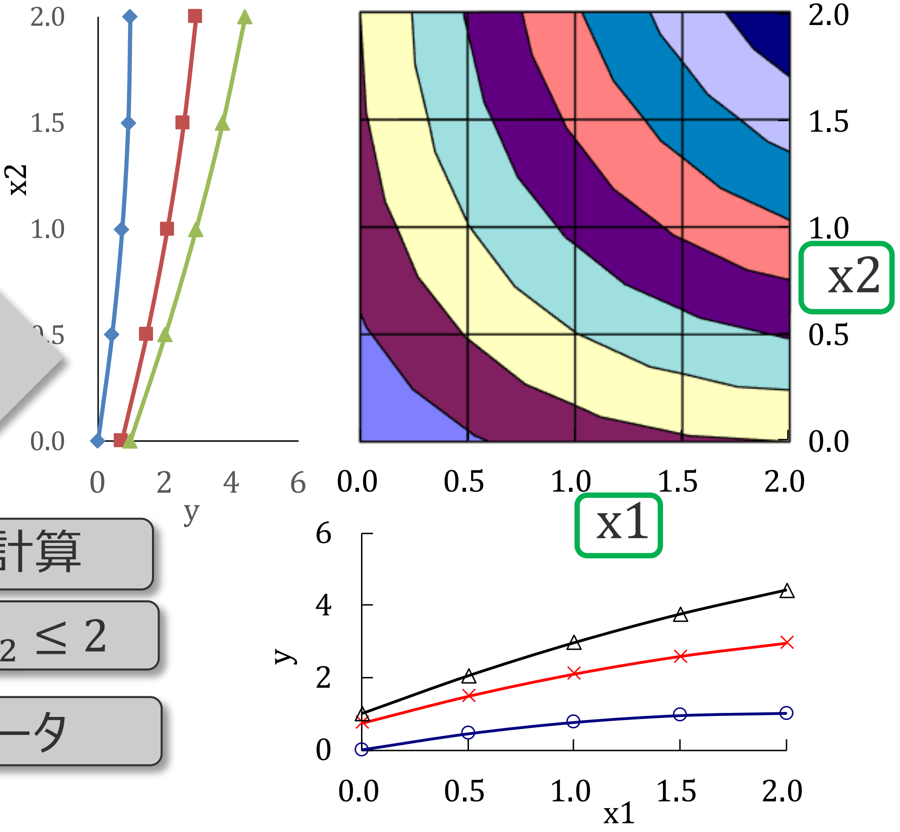
グラフ化

y_{ij} を計算

$0 \leq x_1, x_2 \leq 2$

パラメータ

表示 5.5.2 等高線と断面の形



モデル

●Excel によるグラフ化

$$y_{ij} = x_{1i} + b_{11}x_{1i}^2 + x_{2j} + b_{11}x_{2j}^2 + b_{12}x_{1i}x_{2j} \quad (5.5.2)$$

表示 5.5.1 x による y の変化（改変）

b0	0.00
b1	1.00
b2	1.00
b11	-0.25
b22	-0.25
b12	0.20

x2	x1 0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
0.5	0.4	0.9	1.3	1.5	1.6
1.0	0.8	1.3	1.7	2.0	2.2
1.5	0.9	1.5	2.0	2.3	2.5
2.0	1.0	1.6	2.2	2.5	2.8

1次項	b1,b2	
2次項	b11	-0.25
	=b22	
積項	b12	0.20

入力

入力

$b_0 = 0$ ・・・・・固定

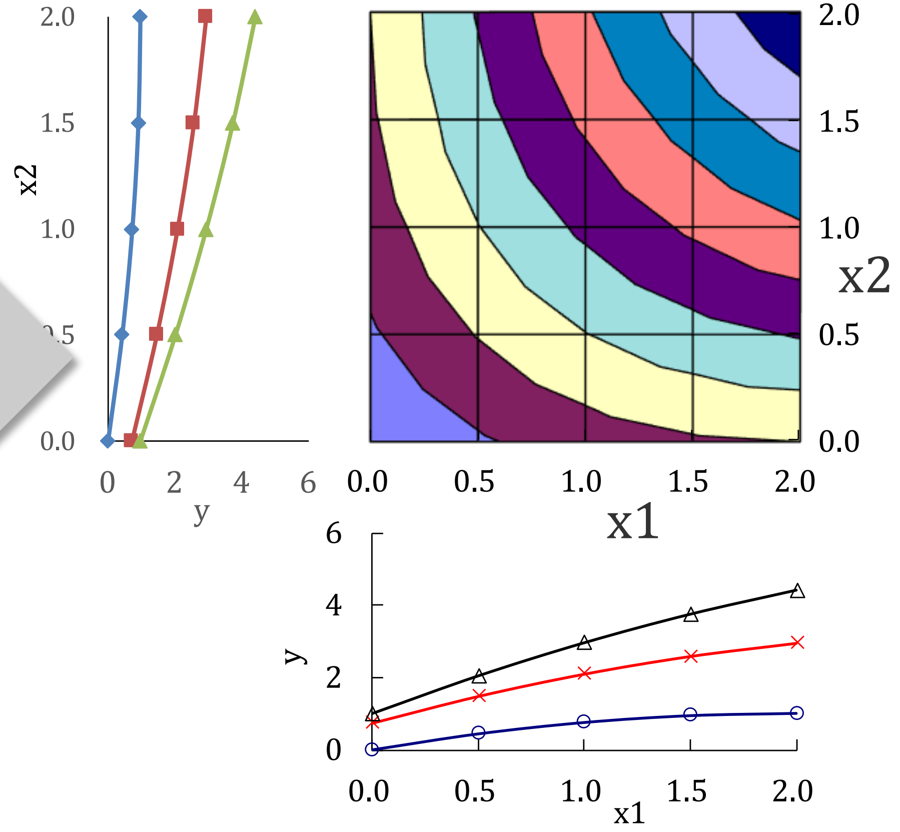
$b_1 = b_2 = 1$ ・・固定

$b_{11} = b_{22}$ ・・・・変化

b_{12} ・・・・・・・変化

グラフ化

表示 5.5.2 等高線と断面の形



モデル

p.196

●Excel によるグラフ化

$$y_{ij} = x_{1i} + b_{11}x_{1i}^2 + x_{2j} + b_{11}x_{2j}^2 + b_{12}x_{1i}x_{2j} \quad (5.5.2)$$

表示 5.5.1 x による y の変化（改変）

b0	0.00
b1	1.00
b2	1.00
b11	-0.25
b22	-0.25
b12	0.20

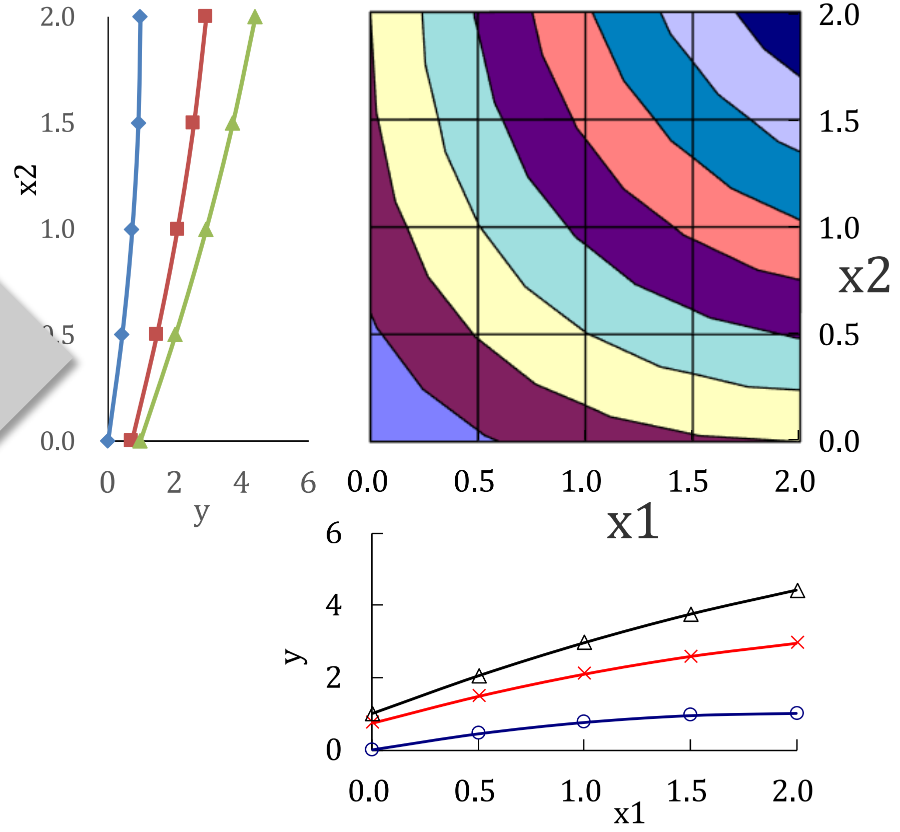
x2 \ x1	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
0.5	0.4	0.9	1.3	1.5	1.6
1.0	0.8	1.3	1.7	2.0	2.2
1.5	0.9	1.5	2.0	2.3	2.5
2.0	1.0	1.6	2.2	2.5	2.8

1次項	b1,b2	
2次項	b11	-0.25
	=b22	
積項	b12	0.20

ブラック枠のイエローの
２つのセルに数値を入力

グラフ化

表示 5.5.2 等高線と断面の形



モデル

p.196

●Excel によるグラフ化

スクロールバー
スクロールボックスを左右にドラック or スクロール矢印をクリック
b11：－0.5～＋0.5 、0.02 刻み（=b22）
b12：－2.5～＋2.5、0.05 刻み

5.5.2）

		x2	x1				
			0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
b0	0.00						
b1	1.00	0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
b2	1.00	0.5	0.4	0.9	1.3	1.5	1.6
b11	-0.25	1.0	0.8	1.3	1.7	2.0	2.2
b22	-0.25	1.5	0.9	1.5	2.0	2.3	2.5
b12	0.20	2.0	1.0	1.6	2.2	2.5	2.8

1次項	b1,b2	
2次項	b11	
	=b22	
積項	b12	

イエローのセルを空白にすると
スクロールバーが有効化

スクロールバーの形状

スクロール矢印「<」「>」の
表示かない場合
スクロールボックスの左側、
または右側をクリック

モデル

●Excel によるグラフ化

スクロールバー
スクロールボックスを左右にドラック or スクロール矢印をクリック
b11：－0.5～＋0.5 、0.02 刻み（=b22）
b12：－2.5～＋2.5、0.05 刻み

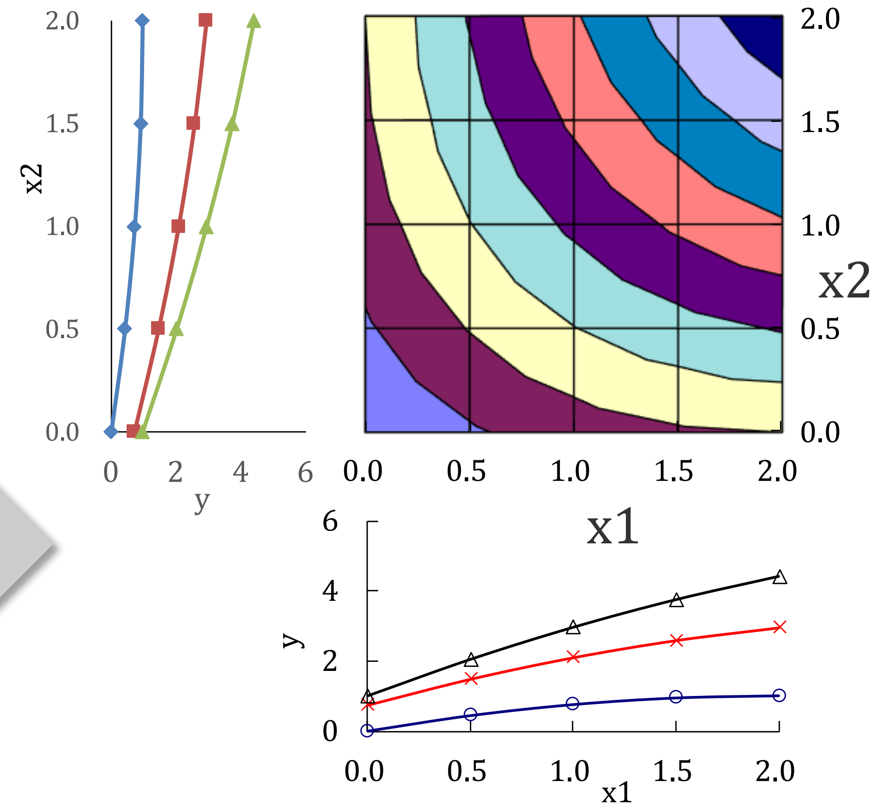
b0	0.00
b1	1.00
b2	1.00
b11	-0.25
b22	-0.25
b12	0.20

x2	x1				
	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
0.5	0.4	0.9	1.3	1.5	1.6
1.0	0.8	1.3	1.7	2.0	2.2
1.5	0.9	1.5	2.0	2.3	2.5
2.0	1.0	1.6	2.2	2.5	2.8

1次項	b1,b2	
2次項	b11	-0.25
	=b22	
積項	b12	0.20

ブラック枠のイエローのセルに
数値を入力
イエローのセルを空白にすると
スクロールバーが有効化

反映



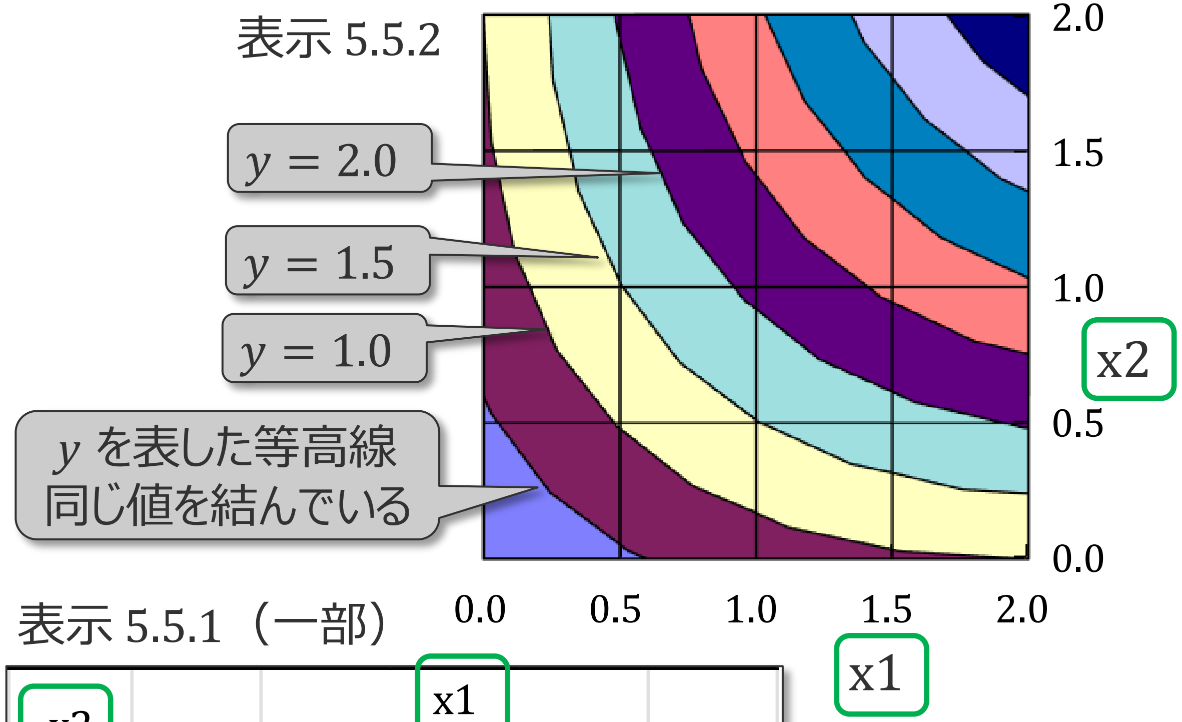
2 次項と積項の係数 $b_{11}(=b_{22}), b_{12}$ を変化させて、 y の変化を確認

設定する数値の目安 b_{11} ：－0.5～0.5
b_{12} ：－2.5～2.5

モデル

p.197

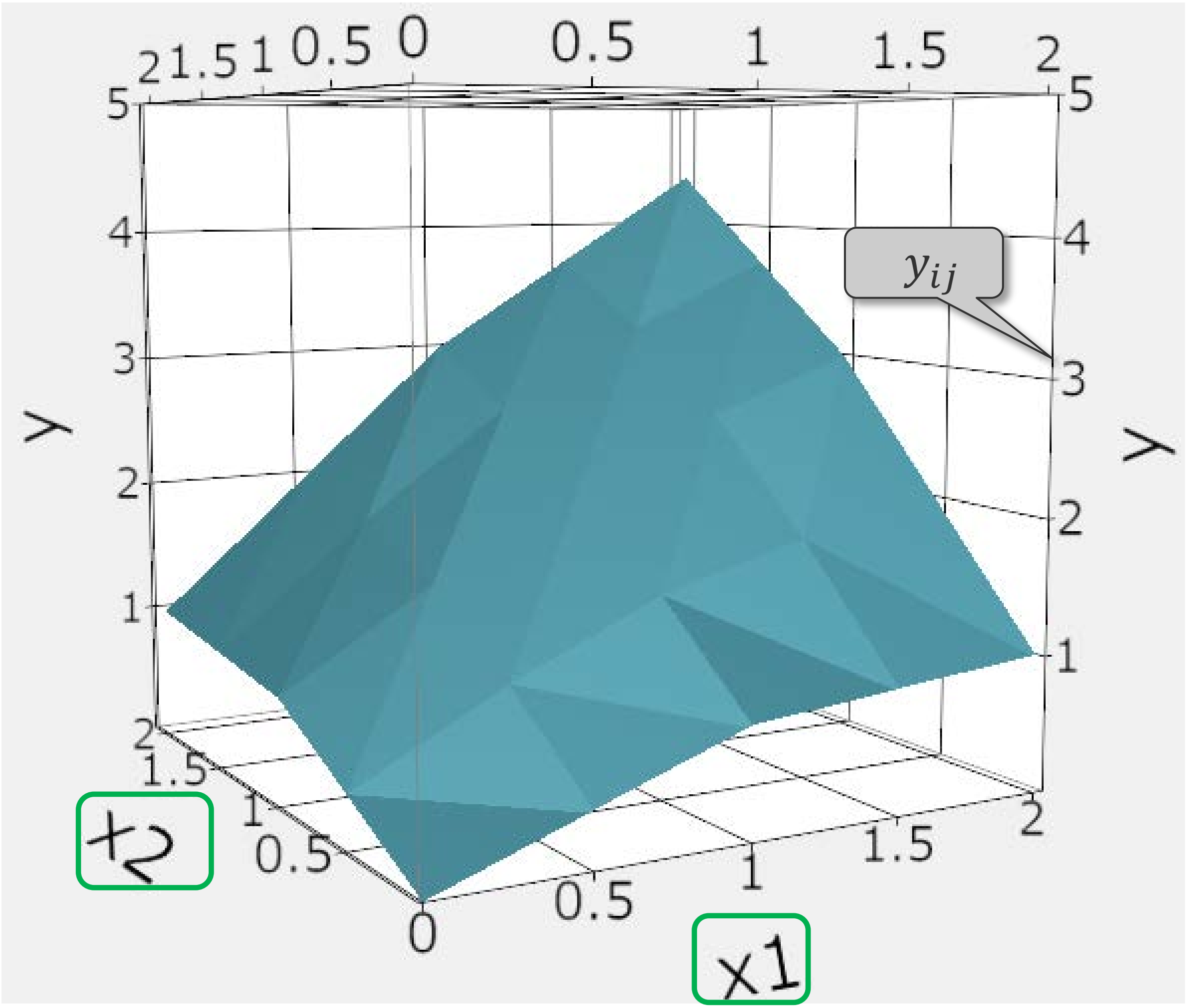
表示 5.5.2



表示 5.5.1（一部）

x2	x1				
	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
0.5	0.4	1.0	1.5	1.8	2.0
1.0	0.8	1.5	2.1	2.6	3.0
1.5	0.9	1.8	2.6	3.2	3.7
2.0	1.0	2.0	3.0	3.7	4.4

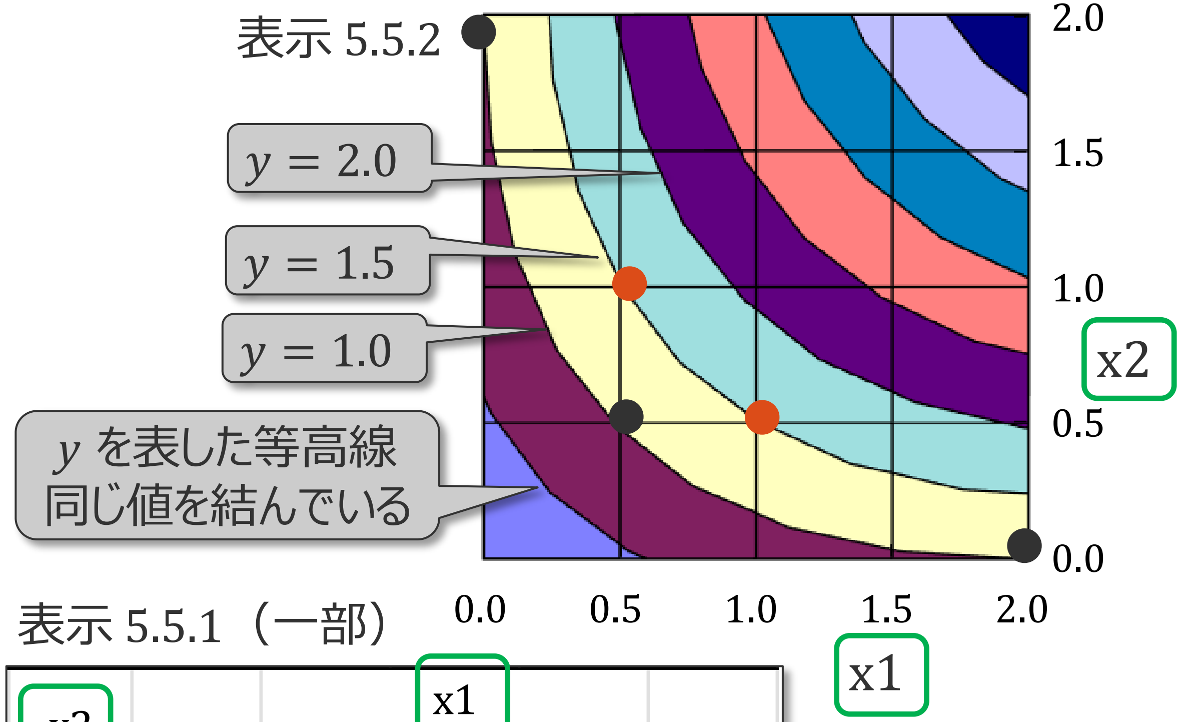
y_{ij}



3D グラフを真上から見ると左の等高線になる

モデル

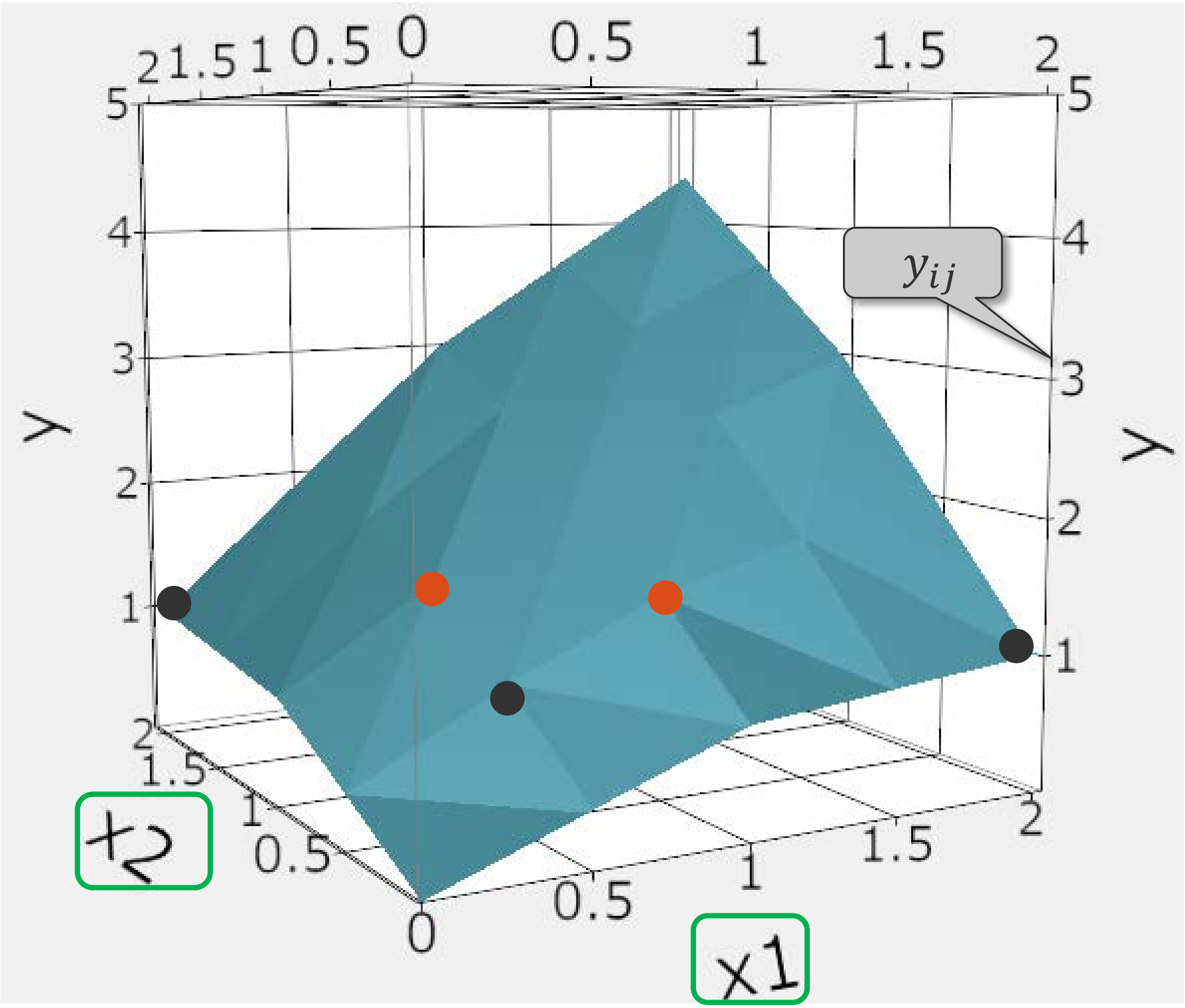
表示 5.5.2



表示 5.5.1（一部）

x2 \ x1	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
0.5	0.4	1.0	1.5	1.8	2.0
1.0	0.8	1.5	2.1	2.6	3.0
1.5	0.9	1.8	2.6	3.2	3.7
2.0	1.0	2.0	3.0	3.7	4.4

y_{ij}

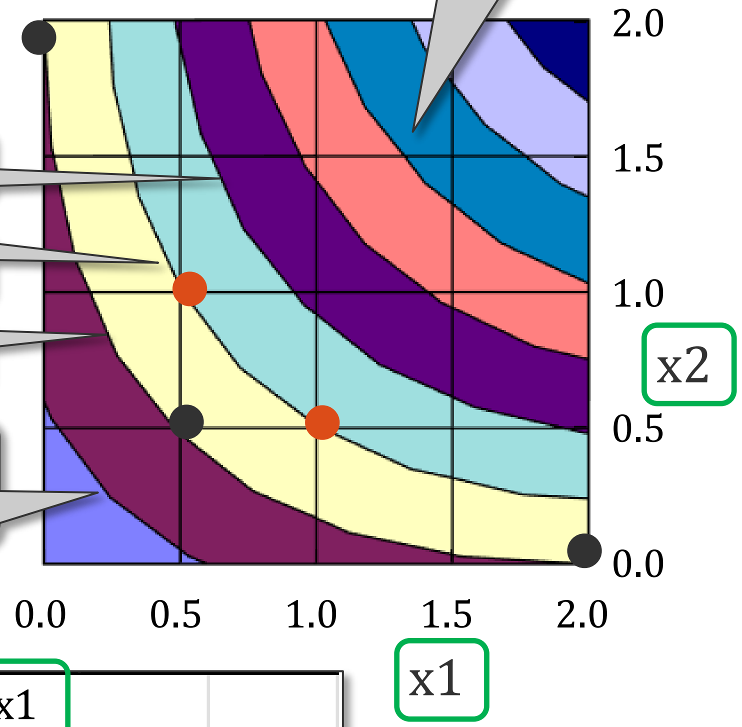


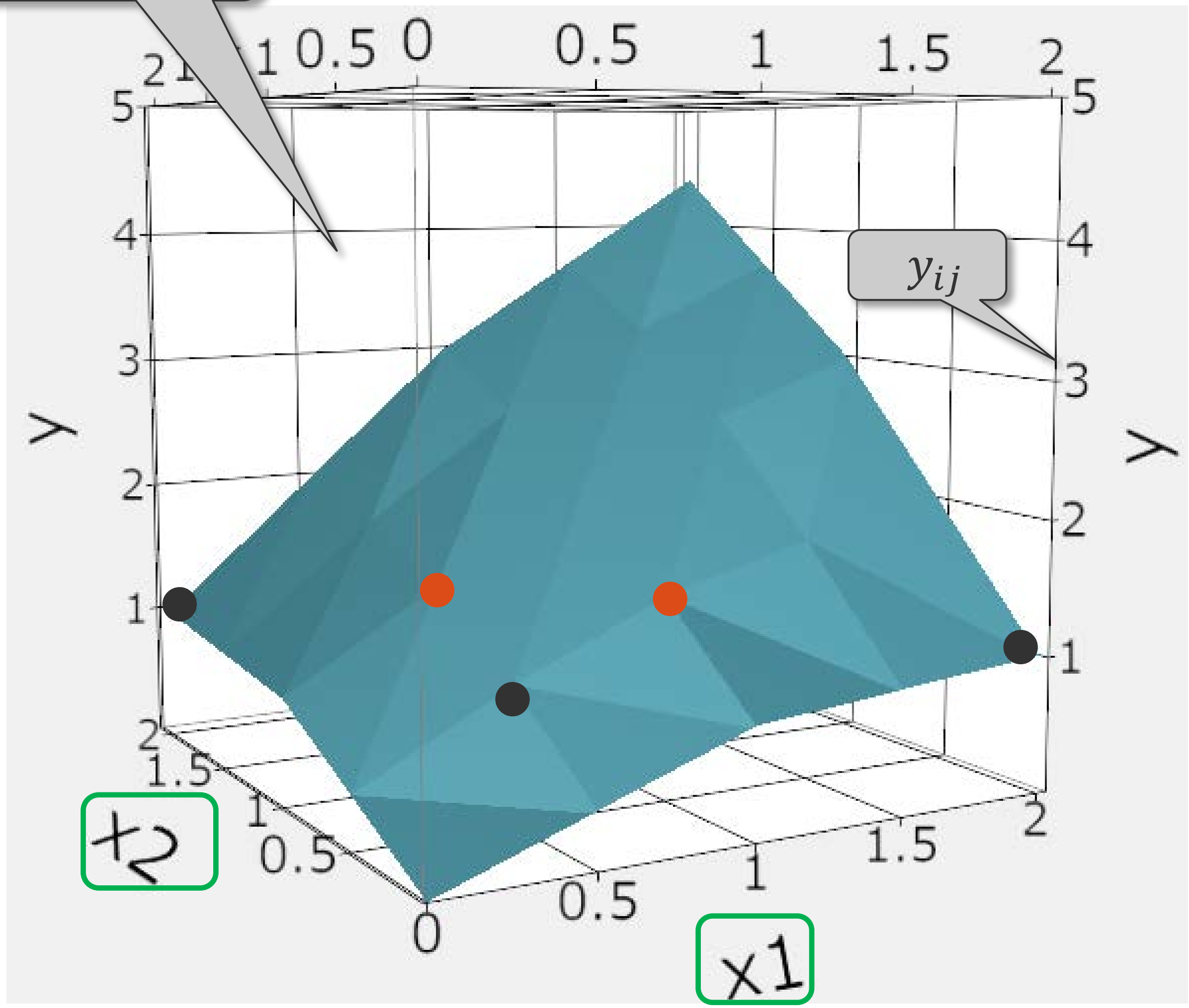
3D グラフを真上から見ると左の等高線になる

モデル

p.197

表示 5.5.2





表示 5.5.1（一部）

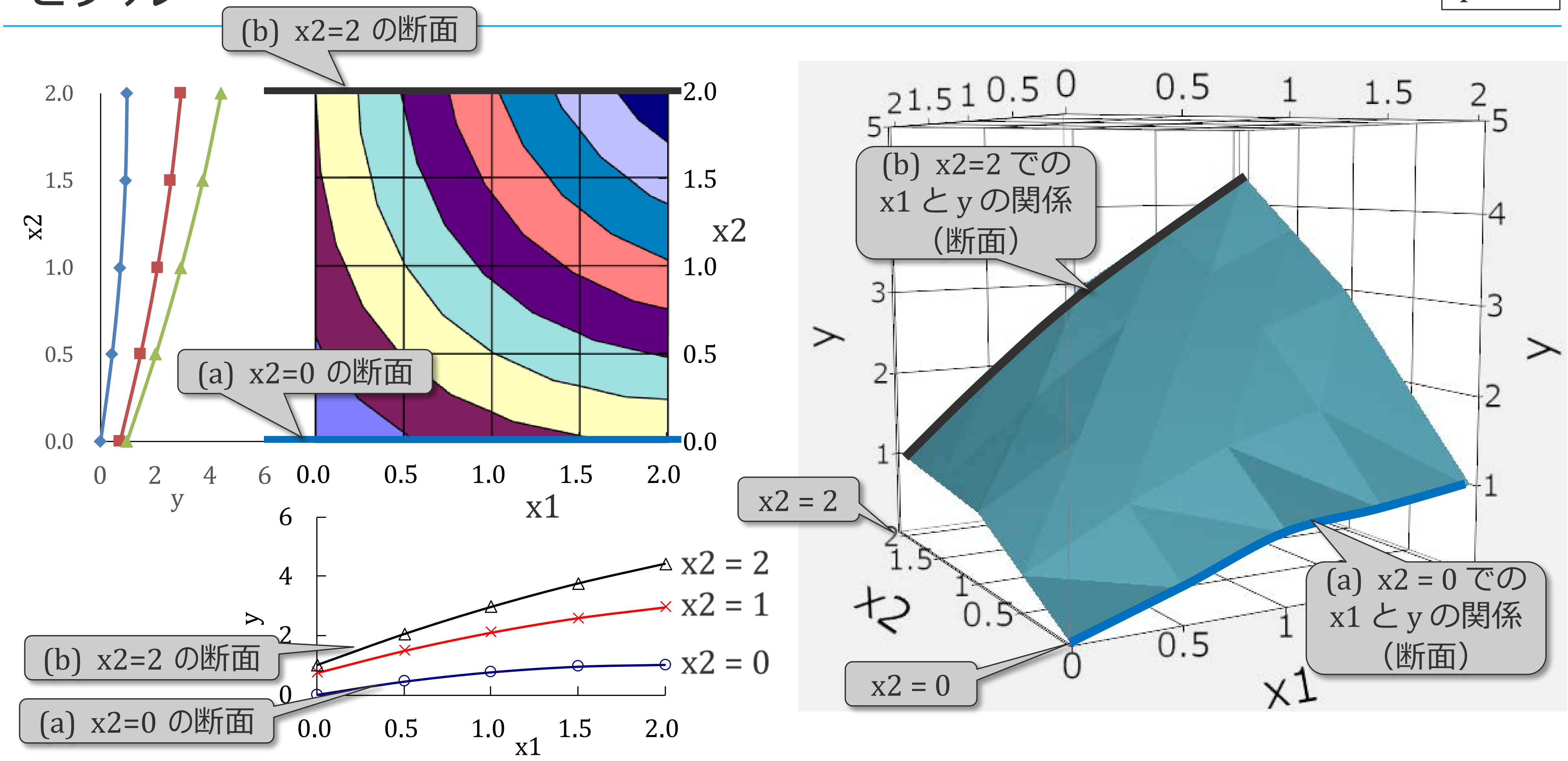
x2	x1				
	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
0.0	0.0	0.4	0.8	0.9	1.0
0.5	0.4	1.0	1.5	1.8	2.0
1.0	0.8	1.5	2.1	2.6	3.0
1.5	0.9	1.8	2.6	3.2	3.7
2.0	1.0	2.0	3.0	3.7	4.4

y_{ij}

応答曲面

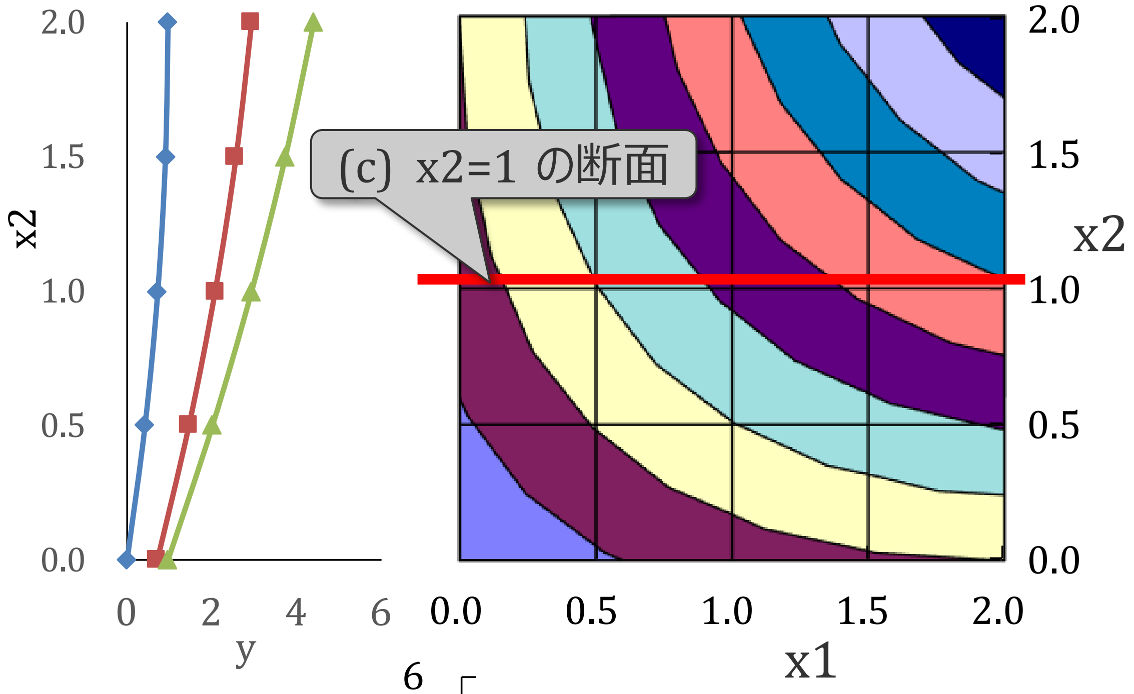
複数の x によって y が空間内でどのような変化するか図示したもの

モデル

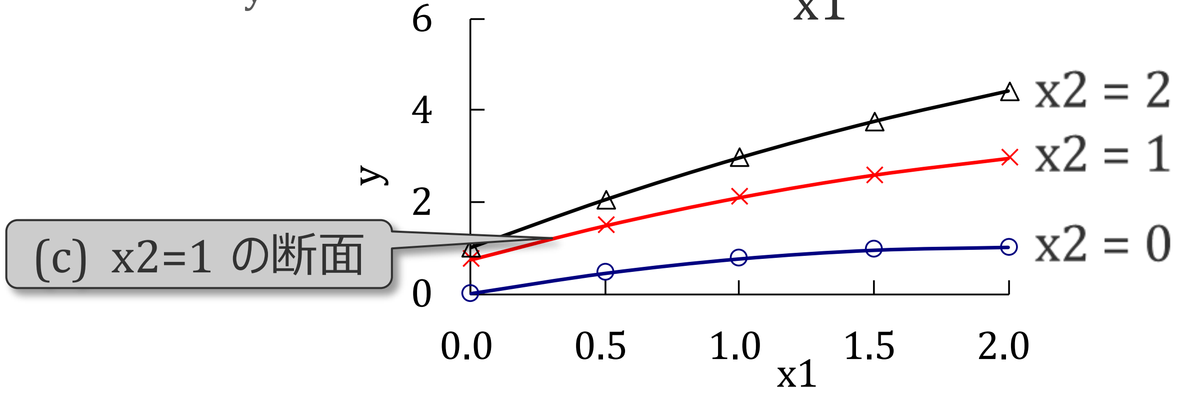

(b) x2=2 の断面
(a) x2=0 の断面
x2
y
x1
x2 = 2
x2 = 1
x2 = 0
(b) x2=2 での
x1 と y の関係
(断面)
(a) x2 = 0 での
x1 と y の関係
(断面)
x2 = 2
x2 = 0

モデル

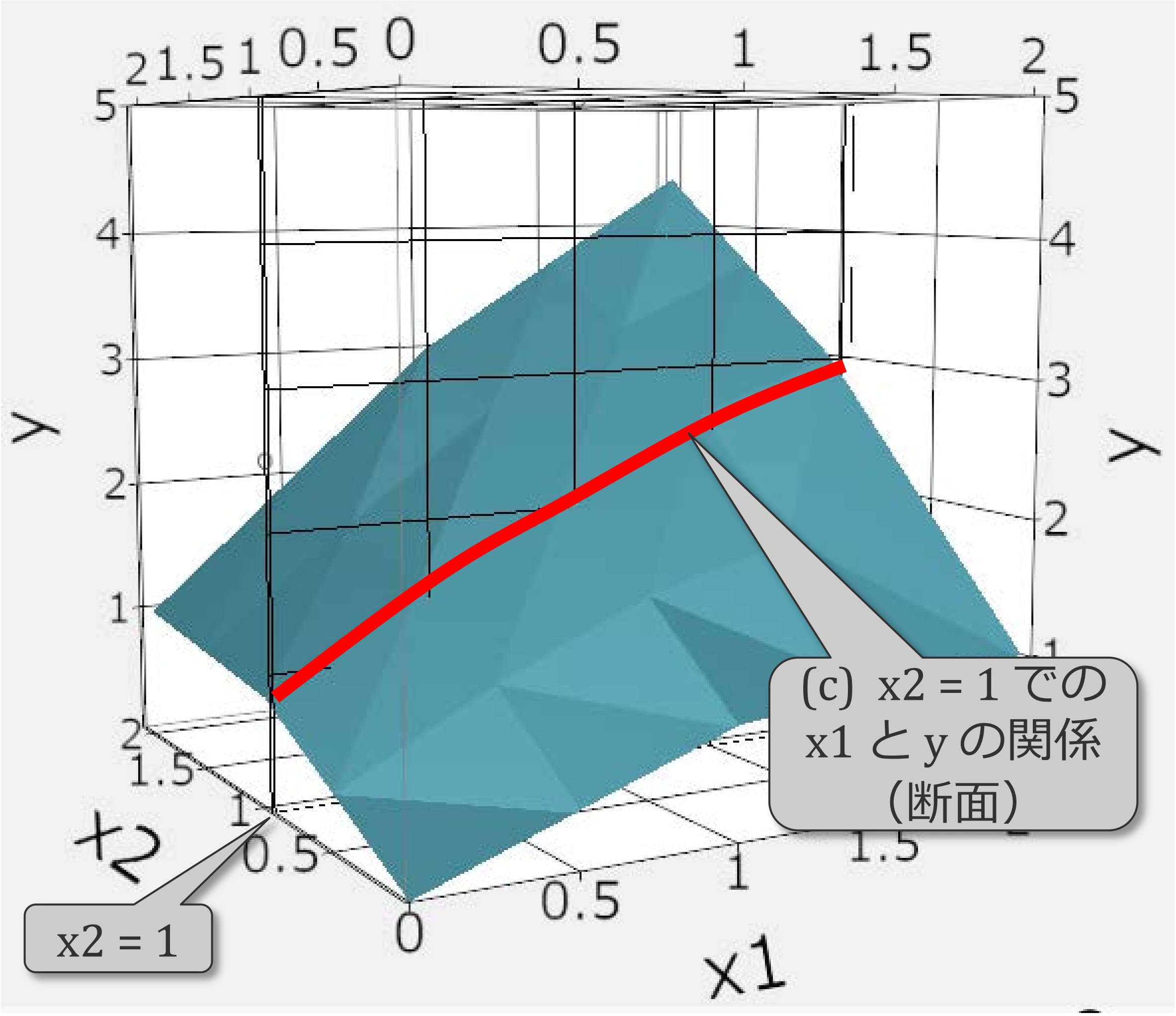
p.197



2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
x2
0
2
4
6
y
(c) x2=1 の断面
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
x1
x2



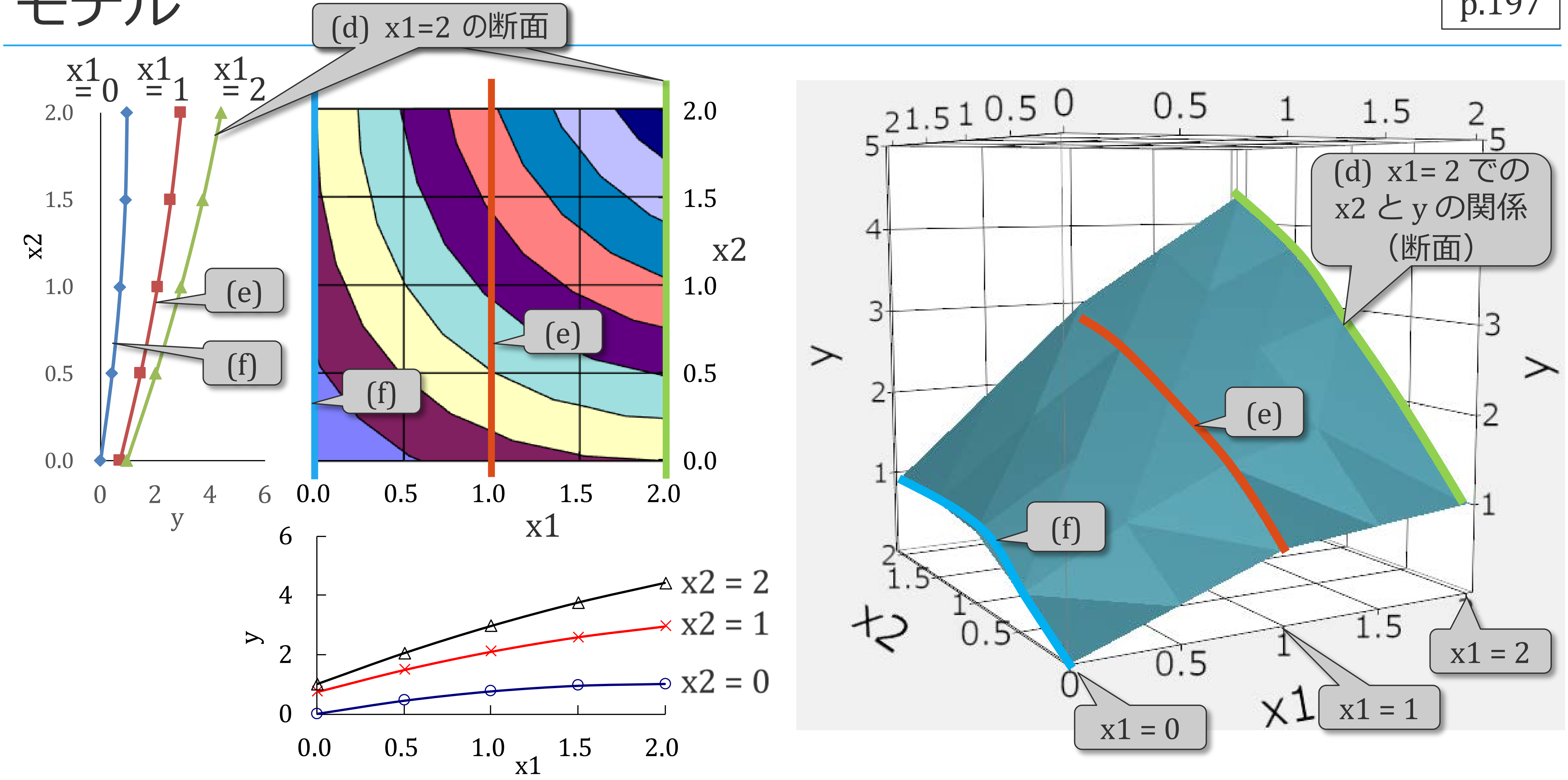
6
4
2
0
y
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
x1
x2 = 2
x2 = 1
x2 = 0
(c) x2=1 の断面



y
x2
x1
(c) x2 = 1 での
x1 と y の関係
(断面)
x2 = 1

モデル

p.197

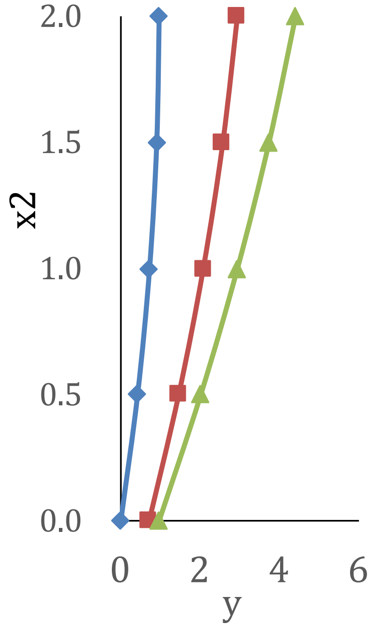


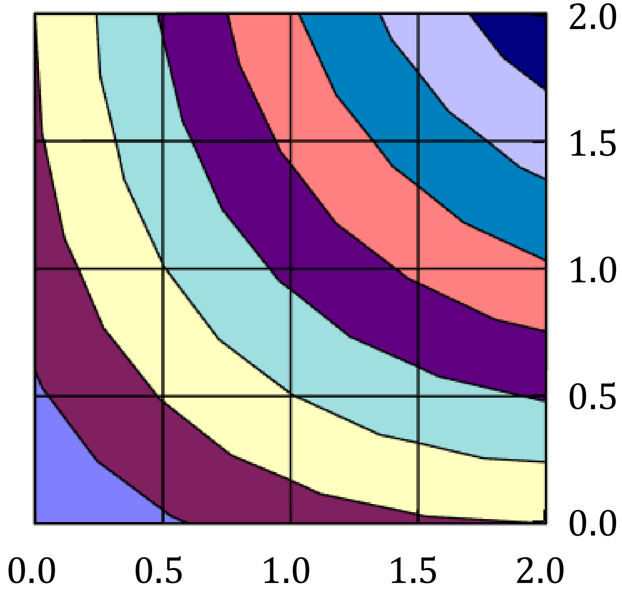
(d) x1=2 の断面
x1 = 0
x1 = 1
x1 = 2
x2
y
(e)
(f)
x1
x2 = 2
x2 = 1
x2 = 0
(d) x1= 2 での
x2 と y の関係
(断面)
x1 = 0
x1 = 1
x1 = 2

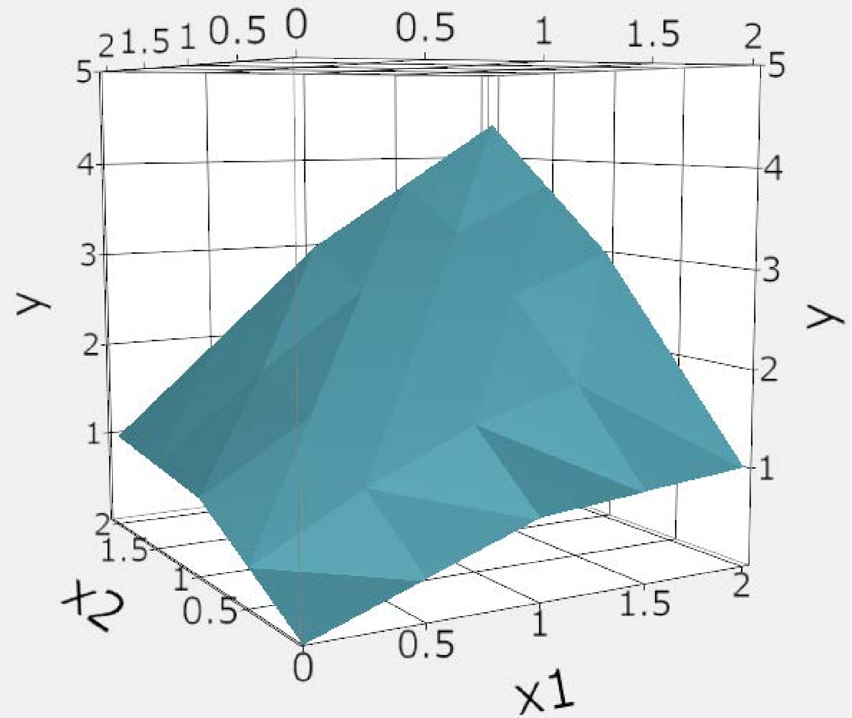
モデル

●応答曲面

表示 5.5.2



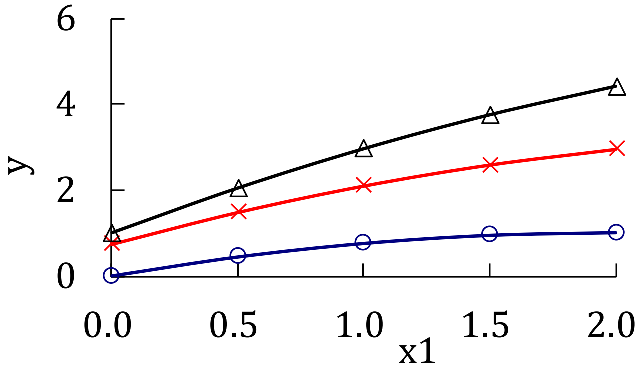




表示 5.5.1（一部）

	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
	b11	-0.25
	b22	-0.25
	b12	0.60
1次項	b1,b2	
2次項	b11	-0.25
	=b22	
積項	b12	0.60

デフォルトの設定



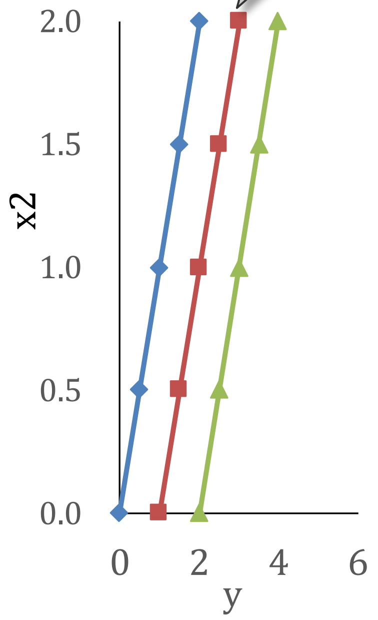
$$y_{ij} = x_{1i} - 0.25x_{1i}^2 + x_{2j} - 0.25x_{2j}^2 + 0.60x_{1i}x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

モデル

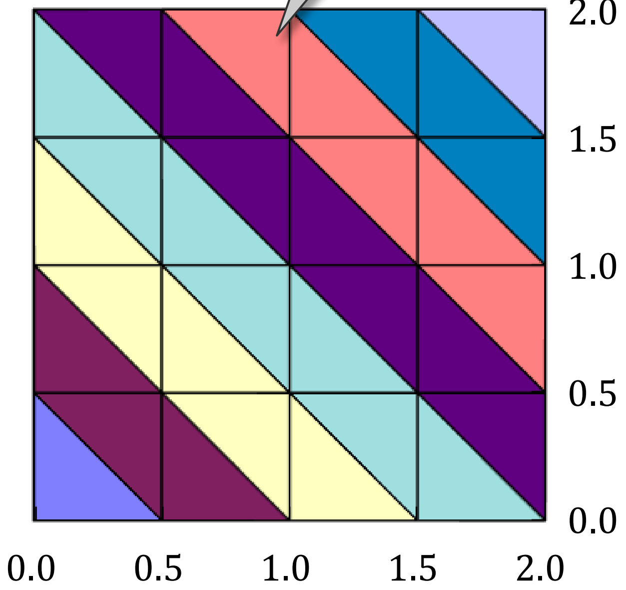
●応答曲面

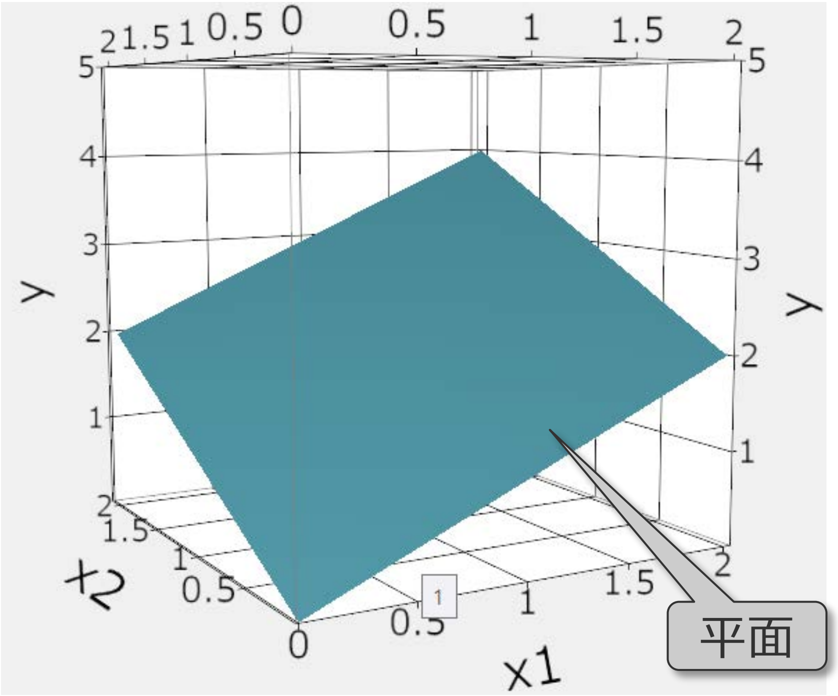
表示 5.5.2

平行な直線



平面



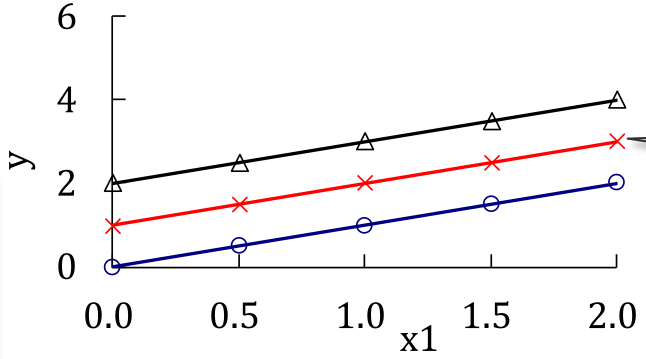


平面

表示 5.5.1（一部）

	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
>	b11	0.00
	b22	0.00
>	b12	0.00
1次項	b1,b2	
2次項	b11	0.00
	=b22	
積項	b12	0.00

b11 = 0
b12 = 0
２次項なし
積項なし
１次式のみ



平行な直線

$$y_{ij} = x_{1i} + x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

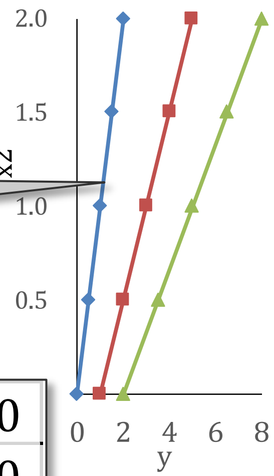
１次式

モデル

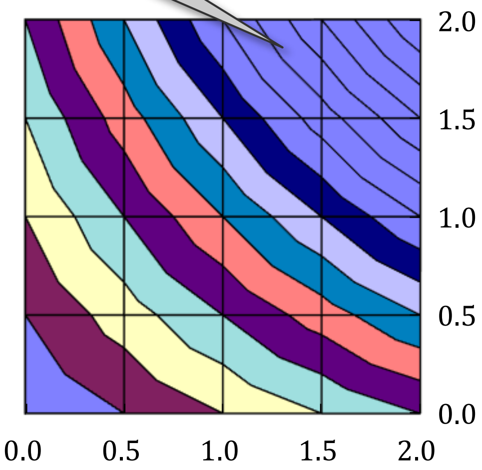
p.197

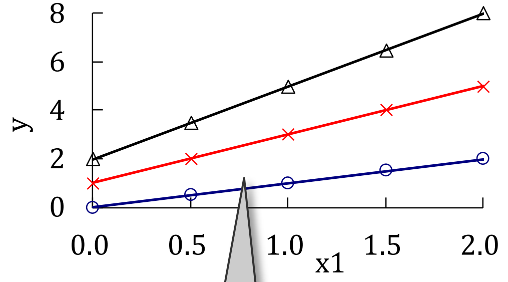
●応答曲面

直線



ゆがみ





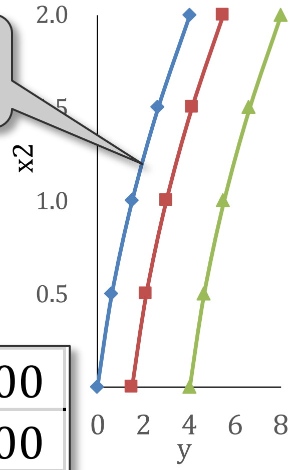
直線

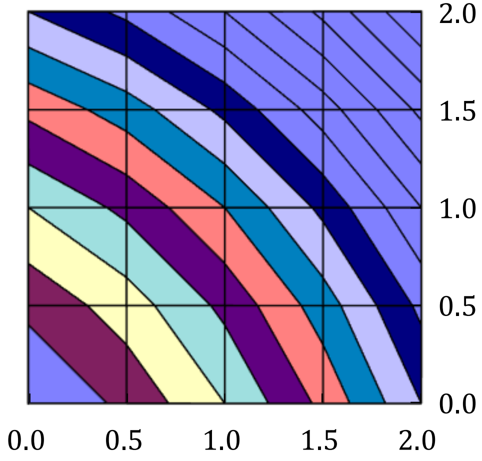
表示 5.5.1（一部）

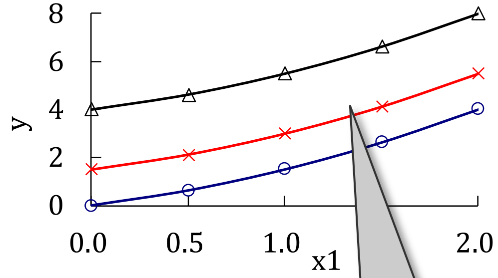
	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
>	b11	0.00
	b22	0.00
>	b12	1.00
1次項	b1,b2	
2次項	b11	0.00
	=b22	
積項	b12	1.00

b11 = 0
b12 = 1
２次項なし
積項あり

平行な
２次曲線







表示 5.5.1（一部）

	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
>	b11	0.50
>	b22	0.50
	b12	0.00
1次項	b1,b2	
2次項	b11	0.50
	=b22	
積項	b12	0.00

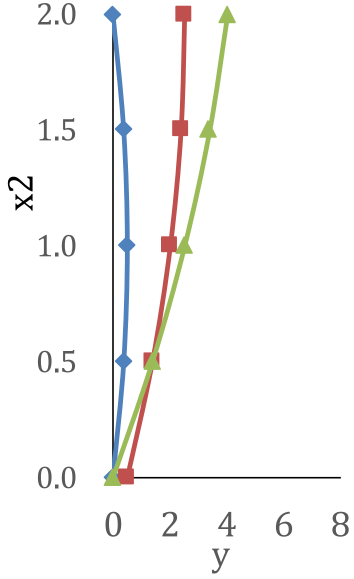
b11 = 0.5
b12 = 0
２次項あり
積項なし

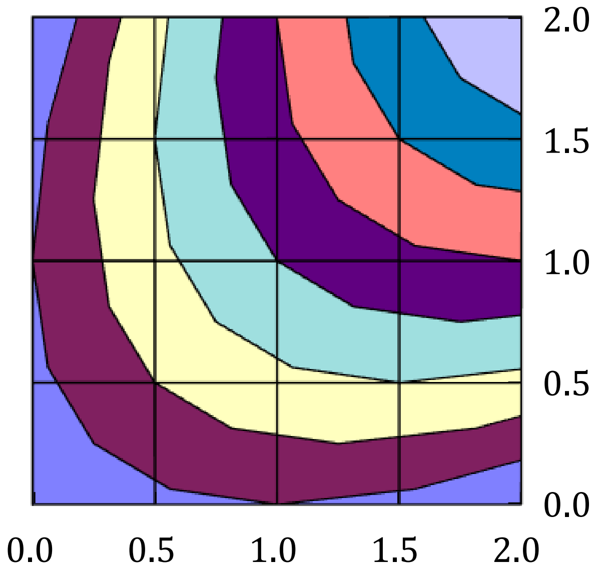
平行な
２次曲線

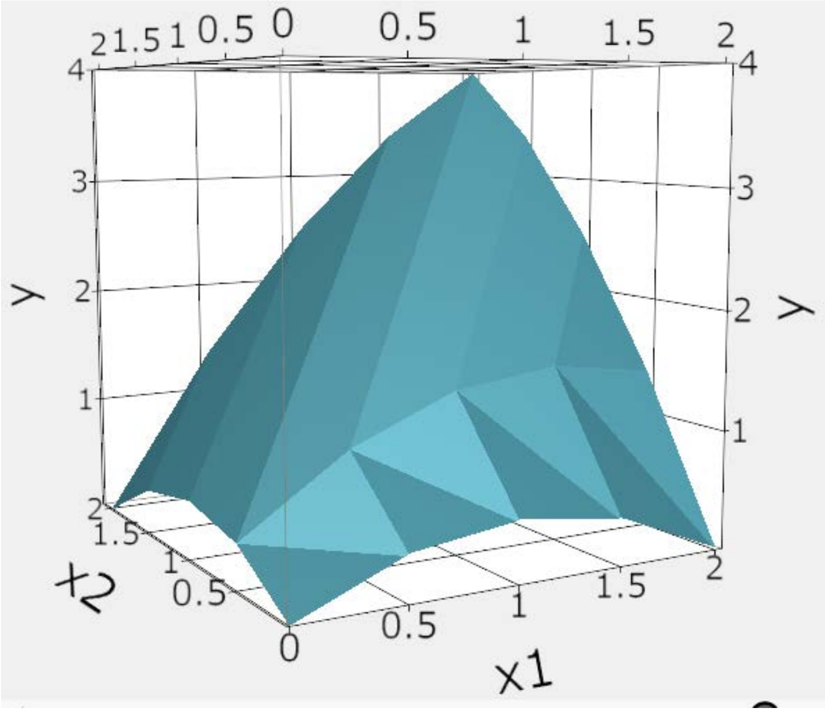
モデル

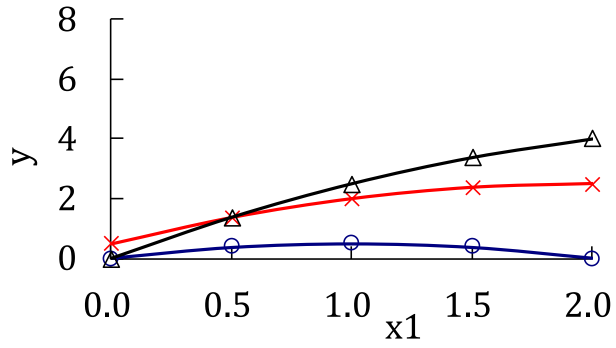
●応答曲面

表示 5.5.2









表示 5.5.1（一部）

	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
	b11	-0.50
	b22	-0.50
	b12	1.00
1次項	b1,b2	
2次項	b11	-0.50
	=b22	
積項	b12	1.00

$b11 = -0.5$
$b12 = 1$
２次項あり
積項あり

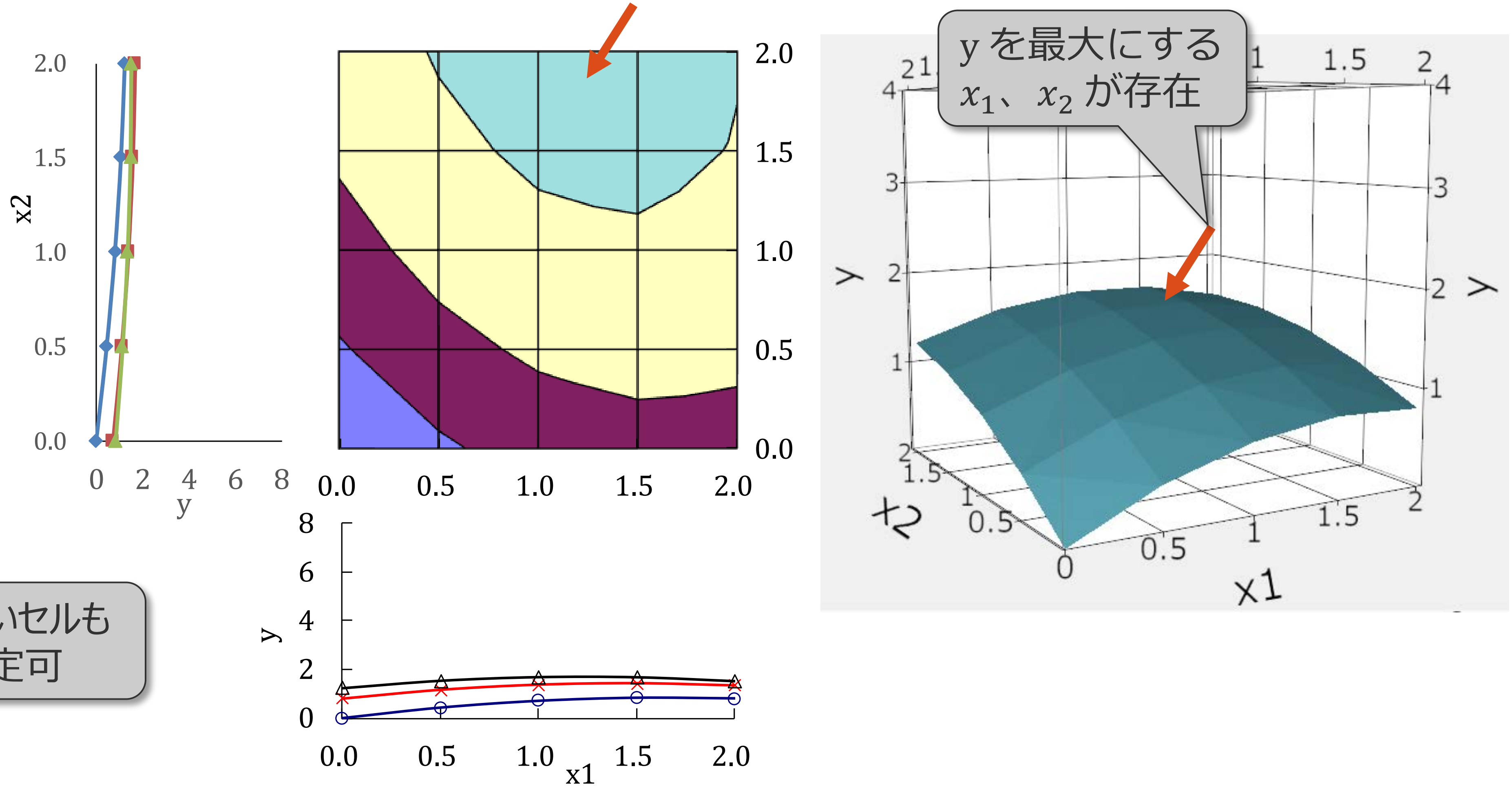
$$y_{ij} = x_{1i} - 0.50x_{1i}^2 + x_{2j} - 0.50x_{2j}^2 + x_{1i}x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

モデル

p.197

●応答曲面

表示 5.5.2



表示 5.5.1（一部）

	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
	b11	-0.19
	b22	-0.30
	b12	-0.13
1次項	b1,b2	1
2次項	b11	-0.19
	=b22	-0.3
積項	b12	-0.13

白いセルも
設定可

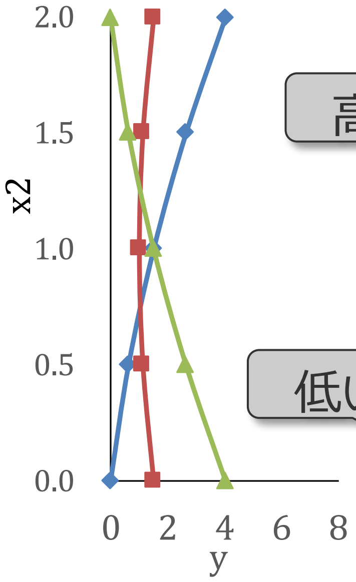
$$y_{ij} = x_{1i} - 0.19x_{1i}^2 + x_{2j} - 0.30x_{2j}^2 - 0.13x_{1i}x_{2j} \quad (5.5.2)$$

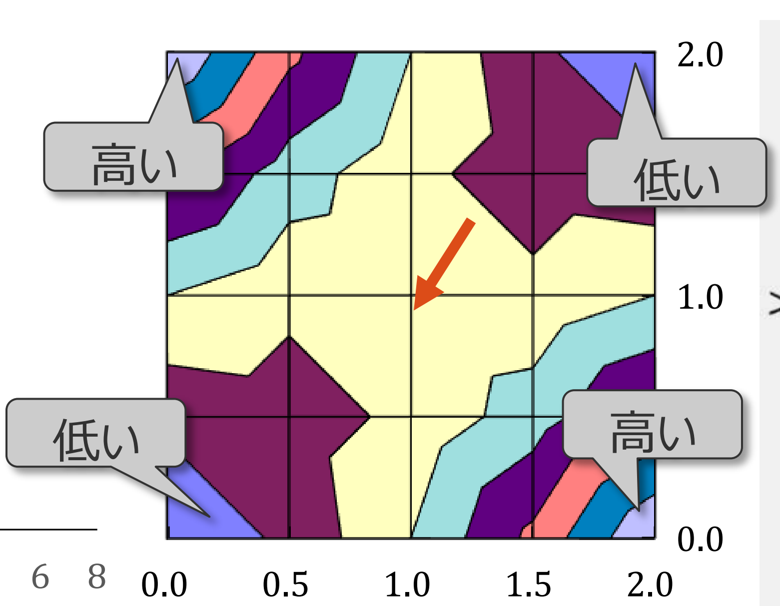
モデル

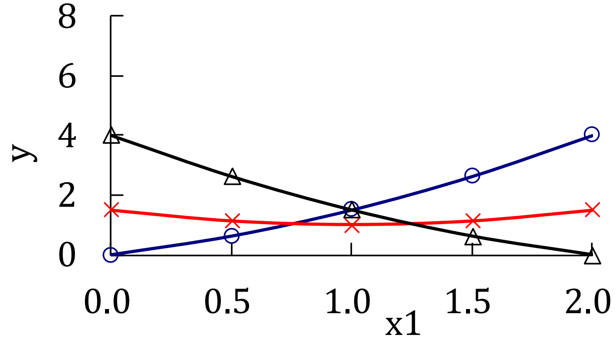
p.197

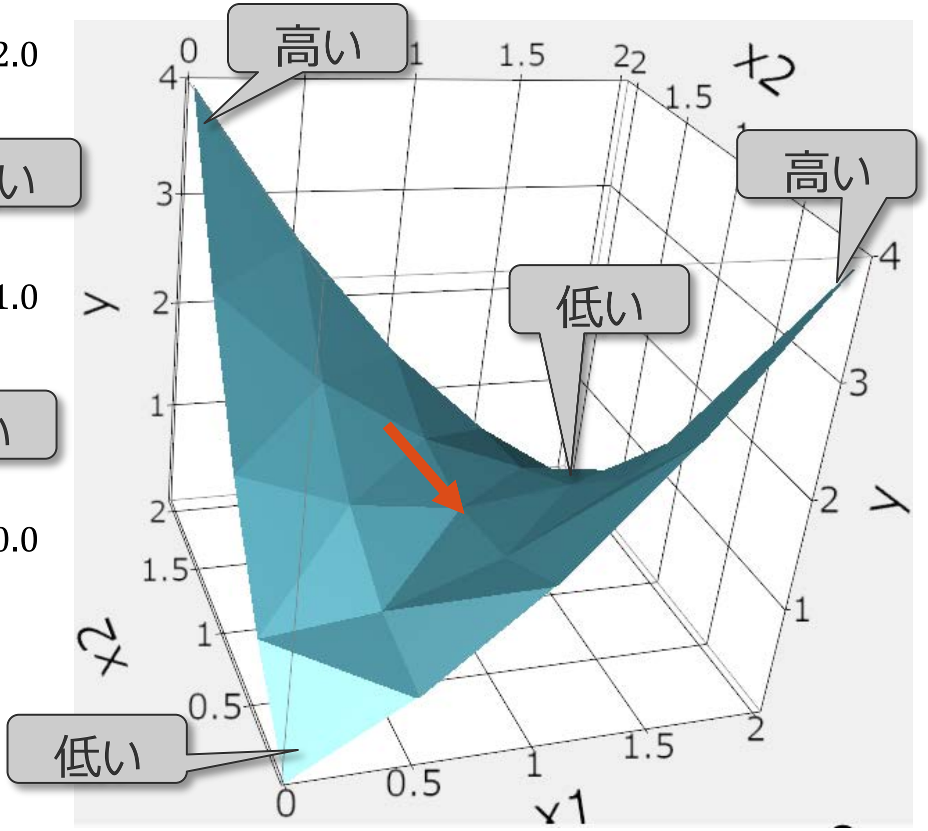
●応答曲面

表示 5.5.2









鞍点（あんてん、くらてん）

表示 5.5.1（一部）

	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
	b11	0.50
	b22	0.50
	b12	-2.00
1次項	b1,b2	
2次項	b11	0.50
	=b22	
積項	b12	-2.00

b11 = 0.5
b12 = −2
|2次項|
<< |積項|

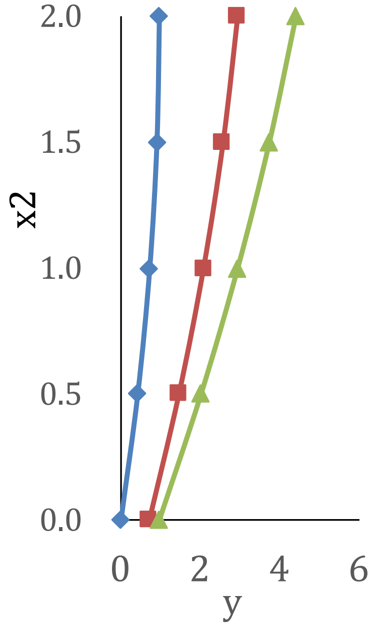
$$y_{ij} = x_{1i} + 0.50x_{1i}^2 + x_{2j} + 0.50x_{2j}^2 - 2.00x_{1i}x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

モデル

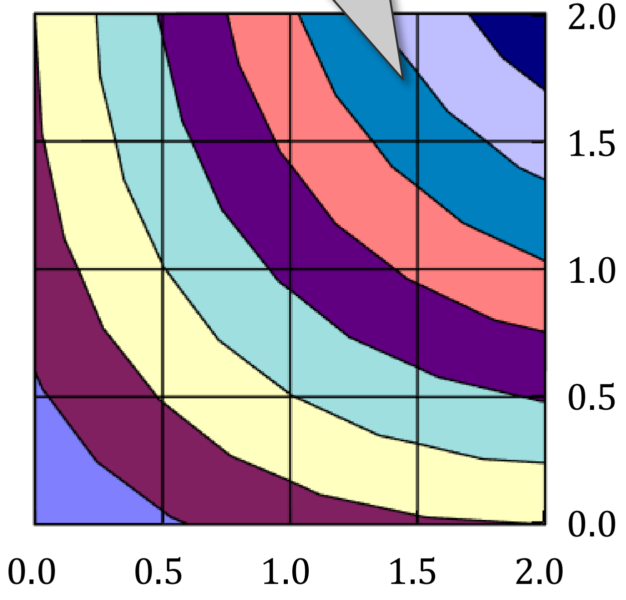
p.197

●応答曲面

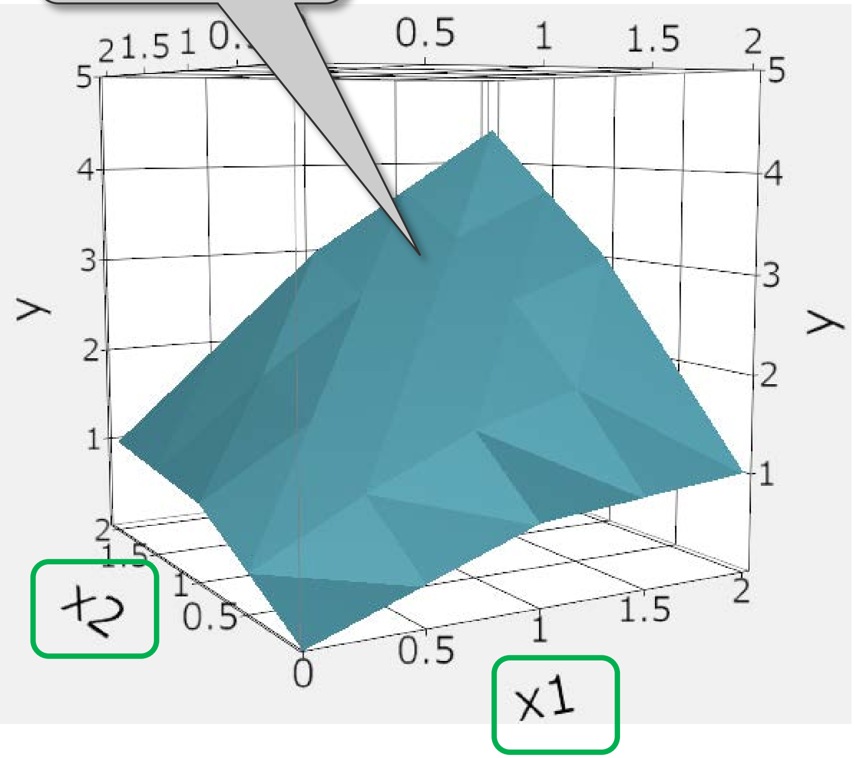
表示 5.5.2

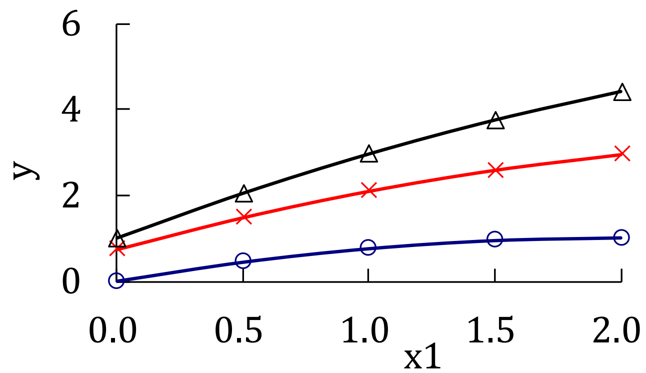


応答曲面
(等高線)



応答曲面
(3Dグラフ)





表示 5.5.1（一部）

	b0	0.00
	b1	1.00
	b2	1.00
	b11	-0.25
	b22	-0.25
	b12	0.60
1次項	b1,b2	
2次項	b11	-0.25
	=b22	
積項	b12	0.60

２次式のモデルが不適当な場合、
→ 第３部「非線形モデル」

$$y_{ij} = x_{1i} - 0.25x_{1i}^2 + x_{2j} - 0.25x_{2j}^2 + 0.60x_{1i}x_{2j} \quad (5.5.2)$$

p.198

（2）データとExcel による解析

２次の多項式からなる近似モデルを
実際のデータにあてはめ

データ

p.198

●目的

2 つの量的因子A, B の実験で，繰り返しのあるデータを，式(5.5.2) のモデルで解析

$$y_{ij} = b_0 + b_1 x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + b_2 x_{2j} + b_{22} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

● データ

因子A, B の水準数

因子A：$a = 3$（$x_1 = 0, 2.4$）

因子B：$b = 4$（$x_2 = 0, 1, 2, 3$）

繰り返し数　$n = 2$

観測値 y （計算手順を示すためだけの人工データ）

表示 5.5.3 2 因子実験（量×量）の
データと基本解析（一部）

A＼B	0	1	2	3
0	10.0	11.6	11.6	12.0
	10.3	12.2	12.2	11.5
2	11.3	12.1	12.4	10.1
	11.5	12.9	11.0	11.8
4	10.9	10.5	10.4	8.0
	11.3	10.8	11.0	7.5

$a = 3$

$b = 4$

観測値 y_{ij}

●水準の取り方

水準数 a, b は少なくとも 3，できれば 4 か 5 が望ましい

目的とする応答曲面を得るために、適切な水準の組合せを選ぶ（§5.6(1) 参照）

Excel による解析

p.198

●質的因子の手順による基本解析

表示 5.5.3

質的因子と見なす

A＼B	0	1	2	3
0	10.0	11.6	11.6	12.0
	10.3	12.2	12.2	11.5
2	11.3	12.1	12.4	10.1
	11.5	12.9	11.0	11.8
4	10.9	10.5	10.4	8.0
	11.3	10.8	11.0	7.5

残差

A＼B	0	1	2	3
0	-0.2	-0.3	-0.3	0.3
	0.2	0.3	0.3	-0.3
2	-0.1	-0.4	0.7	-0.9
	0.1	0.4	-0.7	0.9
4	-0.2	-0.2	-0.3	0.3
	0.2	0.2	0.3	-0.3

平均	0	1	2	3	平均
0	10.2	11.9	11.9	11.8	11.43
2	11.4	12.5	11.7	11.0	11.64
4	11.1	10.7	10.7	7.8	10.05
平均	10.88	11.68	11.43	10.15	11.04

11.883 +8.311 +12.958 = 33.151

	平方和	自由度	平均平方	*F* 比
AB	33.151	11	3.014	9.71
A	11.883	2	5.941	19.14
B	8.311	3	2.770	8.92
A*B	12.958	6	2.160	6.96
e	3.725	12	0.310	
T	36.876	23		
検算	36.876	23		

応答曲面の作図

総平均

効果	0	1	2	3	主効果
0	-1.12	-0.17	0.08	1.21	0.39
2	-0.08	0.22	-0.33	0.20	0.60
4	1.20	-0.05	0.25	-1.41	-0.99
主効果	-0.15	0.65	0.40	-0.89	11.04

交互作用

繰り返し誤差（JMP：純粋誤差）

繰り返し誤差を求める(§5.2、§5.3　参照)

Excel による解析

p.198

●Excel による等高線の作成（Excel 2016）

（Excelヒント p.262　参照）

表示 5.5.3（一部）

平均	0	1	2	3	平均
0	10.2	11.9	11.9	11.8	11.43
2	11.4	12.5	11.7	11.0	11.64
4	11.1	10.7	10.7	7.8	10.05
平均	10.88	11.68	11.43	10.15	11.04

平均値の表の「値」を
空いているセルにコピー

空白

	0	1	2	3
0	10.2	11.9	11.9	11.8
2	11.4	12.5	11.7	11.0
4	11.1	10.7	10.7	7.8

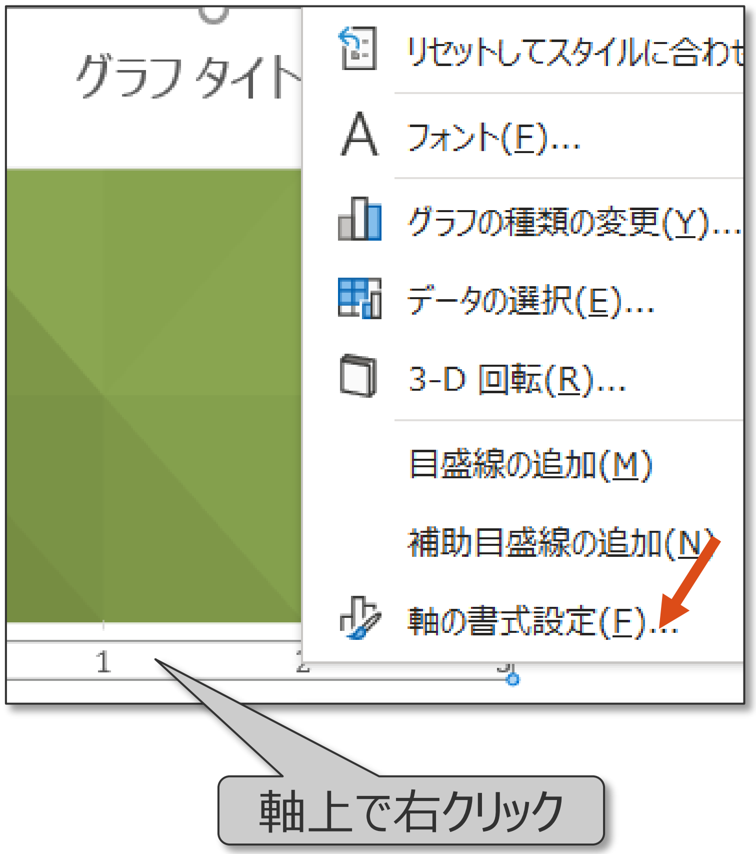
範囲指定

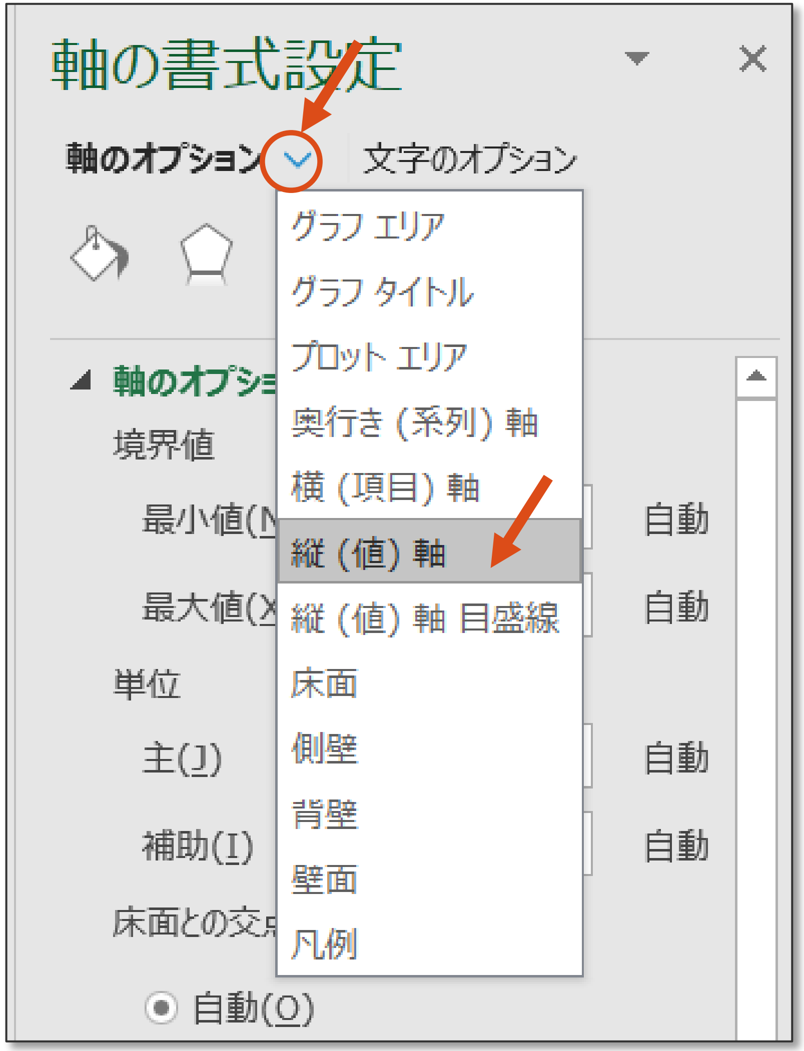
［挿入］＞［グラフ］＞［すべてのグラフ］
＞［等高線］＞［等高線］

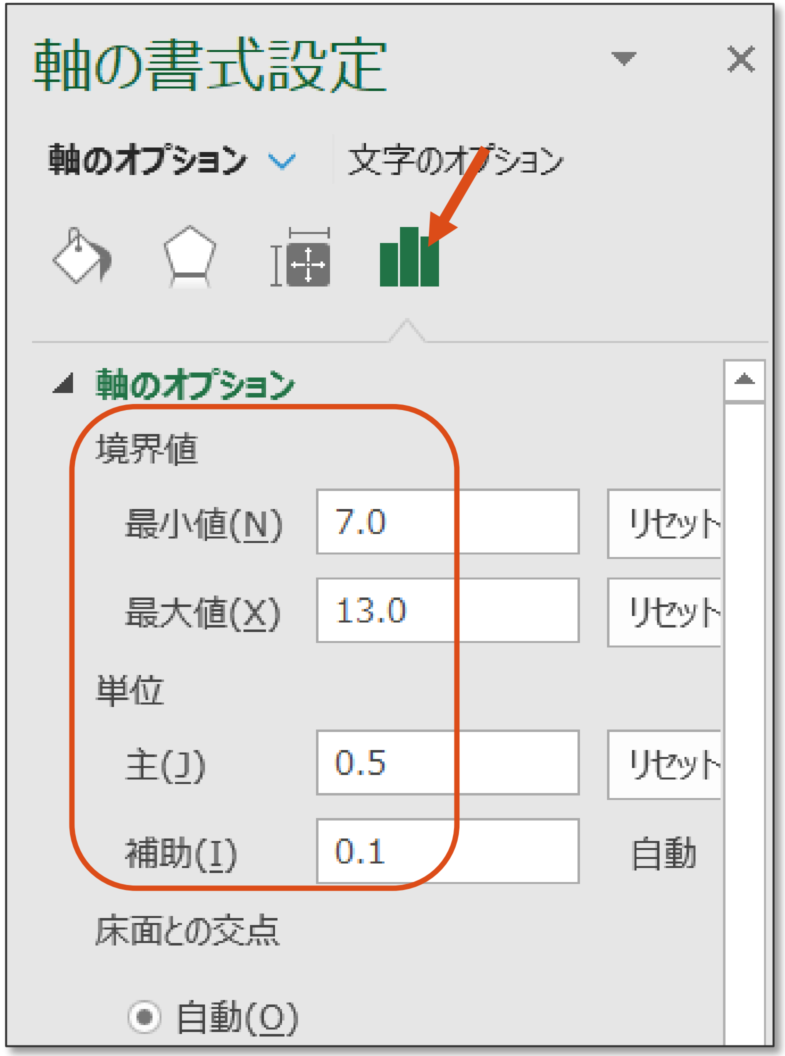
Excel による解析

p.198

●Excel による等高線の作成







Excel による解析

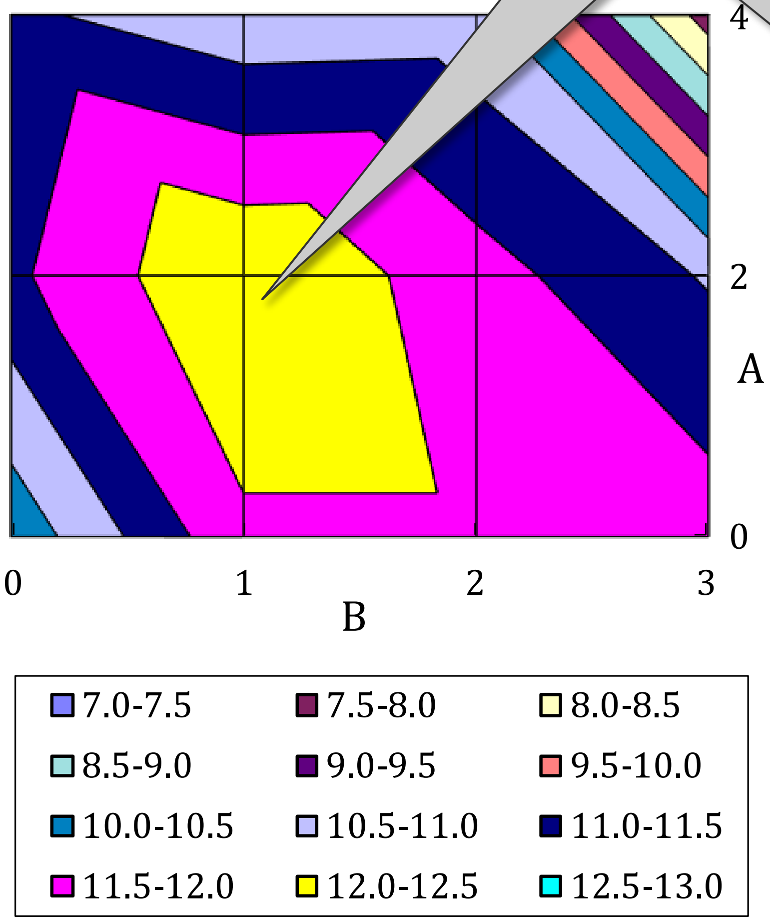
p.198

●Excel による等高線の作成

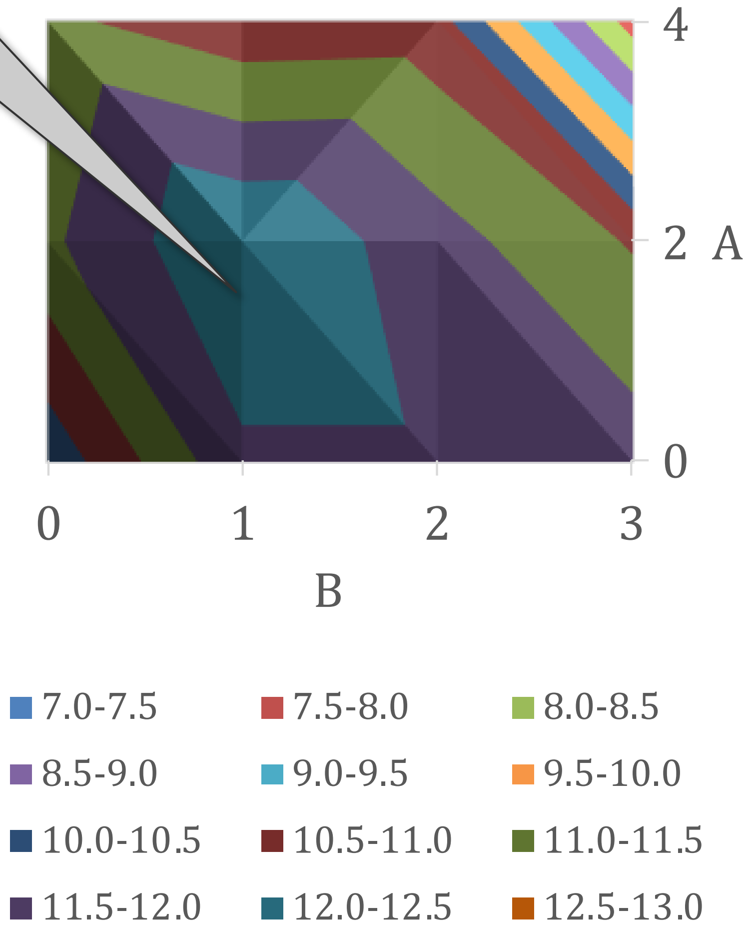
等高線は楕円に近い
↓
y が最大になる
x_1、x_2 の組合せが
存在する
↓
推定

y が最大になる
ポイント

表示 5.5.3（Excel 2003）



Excel 2016 で描いた等高線



Excel による解析

p.199

●LINEST 関数による解析

JMP に合わせて、中心化（平均を引いた値の２乗）を行って LINEST 関数で解析

$$y_{ij} = b_0 + b_1 x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + b_2 x_{2j} + b_{22} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

表示 5.5.4 LINEST 関数による解析のためのデータ表（分割して横に表示）

x1	x2	(x1-2)^2	(x1-2)(x2-1.5)	(x2-1.5)^2	y
0	0	4.0	3.0	2.25	10.0
0	0	4.0	3.0	2.25	10.3
[illegible]	0	[illegible]	0.0	2.25	11.3
[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	11.5
4	0	4.0	-3.0	2.25	10.9
4	0	4.0	-3.0	2.25	11.3
0	1	4.0	1.0	0.25	11.6
0	1	4.0	1.0	0.25	12.2
2	1	0.0	0.0	0.25	12.1
2	1	0.0	0.0	0.25	12.9
4	1	4.0	-1.0	0.25	10.5
4	1	4.0	-1.0	0.25	10.8

１次項
２次項
積項
２次項

x1	x2	(x1-2)^2	(x1-2)(x2-1.5)	(x2-1.5)^2	y
0	2	4.0	-1.0	0.25	11.6
0	2	4.0	-1.0	0.25	12.2
2	2	0.0	0.0	0.25	12.4
2	2	0.0	0.0	0.25	11.0
4	2	4.0	1.0	0.25	10.4
4	2	4.0	1.0	0.25	11.0
0	3	4.0	-3.0	2.25	12.0
0	3	4.0	-3.0	2.25	11.5
2	3	0.0	0.0	2.25	10.1
2	3	0.0	0.0	2.25	11.8
4	3	4.0	3.0	2.25	8.0
4	3	4.0	3.0	2.25	7.5

Excel による解析

p.199

●LINEST 関数による解析

JMP に合わせて、中心化（平均を引いた値の２乗）を行って LINEST 関数で解析

$$y_{ij} = b_0 + b_1 x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + b_2 x_{2j} + b_{22} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

（§2.2(3)(4) 参照）

表示 5.5.4 LINEST 関数による解析のためのデータ表

x1	x2	(x1-2)^2	(x1-2)(x2-1.5)	(x2-1.5)^2	y
0	0	4.0	3.0	2.25	10.0
0	0	4.0	3.0	2.25	10.3
[illegible]	0	[illegible]	0.0	2.25	11.3
[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	11.5
4	0	4.0	-3.0	2.25	10.9
4	0	4.0	-3.0	2.25	[illegible]
0	1	4.0	1.0	0.25	11.6
0	1	4.0	1.0	0.25	12.2
2	[illegible]	0.0	0.0	0.25	12.1
2	1	0.0	0.0	0.25	12.9
4	1	4.0	-1.0	0.25	10.5
4	1	4.0	-1.0	0.25	10.8

１次項　２次項　積項　２次項

中心化
$(x_1 - 2.0)^2$
$(x_1 - 2.0)(x_2 - 1.5)$
$(x_2 - 1.5)^2$

Excel による解析

ブログ
「Excel のスピルと配列数式」
参照

●LINEST 関数による解析

5 行 6 列を範囲指定、=LINEST(y の範囲, x の範囲, , TRUE) を入力、Shift+Ctrl+Enter キーで実行

(§2.2 、第 1 部 §4.3)

$$y_{ij} = b_0 + b_1 x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + b_2 x_{2j} + b_{22} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j} \qquad (5.5.2)$$

表示 5.5.4 LINEST 関数による解析のためのデータ表（分割して横に表示）

x の範囲　y の範囲

x1	x2	(x1-2)^2	(x1-2)(x2-1.5)	(x2-1.5)^2	y
0	0	4.0	3.0	2.25	10.0
0	0	4.0	3.0	2.25	10.3
2	0	0.0	0.0	2.25	11.3
2	0	0.0	0.0	2.25	11.5
4	0	4.0	-3.0	2.25	10.9
4	0	4.0	-3.0	2.25	11.3
0	1	4.0	1.0	0.25	11.6
0	1	4.0	1.0	0.25	12.2
2	1	0.0	0.0	0.25	12.1
2	1	0.0	0.0	0.25	12.9
4	1	4.0	-1.0	0.25	10.5
4	1	4.0	-1.0	0.25	10.8

x1	x2	(x1-2)^2	(x1-2)(x2-1.5)	(x2-1.5)^2	y
0	2	4.0	-1.0	0.25	11.6
0	2	4.0	-1.0	0.25	12.2
2	2	0.0	0.0	0.25	12.4
2	2	0.0	0.0	0.25	11.0
4	2	4.0	1.0	0.25	10.4
4	2	4.0	1.0	0.25	11.0
0	3	4.0	-3.0	2.25	12.0
0	3	4.0	-3.0	2.25	11.5
2	3	0.0	0.0	2.25	10.1
2	3	0.0	0.0	2.25	11.8
4	3	4.0	3.0	2.25	8.0
4	3	4.0	3.0	2.25	7.5

Excel による解析

5行2列に出力
出力の周囲のコメントは
過去に用いた部分から
コピー (§2.2 、第1部 §4.3)

●LINEST 関数による解析

表示 5.5.5 LINEST 関数による解

	(x2-1.5)^2	(x1-2)*(x2-1.5)	(x1-2)^2	x2	x1	const	
回帰係数	-0.521	-0.370	-0.225	-0.245	-0.344	13.344	
その標準誤差	0.115	0.063	0.061	0.103	0.071	0.323	
寄与率	0.845	0.564	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	標準偏差
F 比	19.566	18	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	残差自由度
回帰平方和	31.146	5.731	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	残差平方和
t 値	-4.522	-5.865	-3.684	-2.378	-4.874	41.317	
p 値	0.0003	0.0000	0.0017	0.0287	0.0001	0.0000	

回帰平方和＋残差平方和
31.146 + 5.731 = 36.876

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_{1i} + b_{11} x_{1i}^2 + b_2 x_{2j} + b_{22} x_{2j}^2 + b_{12} x_{1i} x_{2j}$$
$$= 13.344 - 0.344x_1 - 0.245x_2 - 0.2225(x_1 - 2.0)^2 - 0.370(x_1 - 2.0)(x_2 - 1.5) - 0.521(x_2 - 1.5)^2 \quad (5.5.3)$$

Excel による解析

p.200

●LINEST 関数による解析

表示 5.5.5 LINEST 関数による解

	(x2-1.5)^2	(x1-2)*(x2-1.5)
回帰係数	-0.521	-0.370
その標準誤差	0.115	0.063
寄与率	0.845	0.564
F 比	19.566	18
回帰平方和	31.146	5.731
t 値	-4.522	-5.865
p 値	0.0003	0.0000

表示 5.5.3 質的因子×質的因子とみなして解析

	平方和	自由度	平均平方	*F* 比
AB	33.151	11	3.014	9.71
A	11.883	2	5.941	19.14
B	8.311	3	2.770	8.92
A*B	12.958	6	2.160	6.96
e	3.725	12	0.310	
T	36.876	23		

回帰平方和＋残差平方和
31.146 + 5.731 = 36.876

p.200

（3）JMP による解析

JMP による解析

p.200

●JMPファイルの読み込みと表示

JMP ファイル「5-2因子4.jmp」を読み込み

●データ

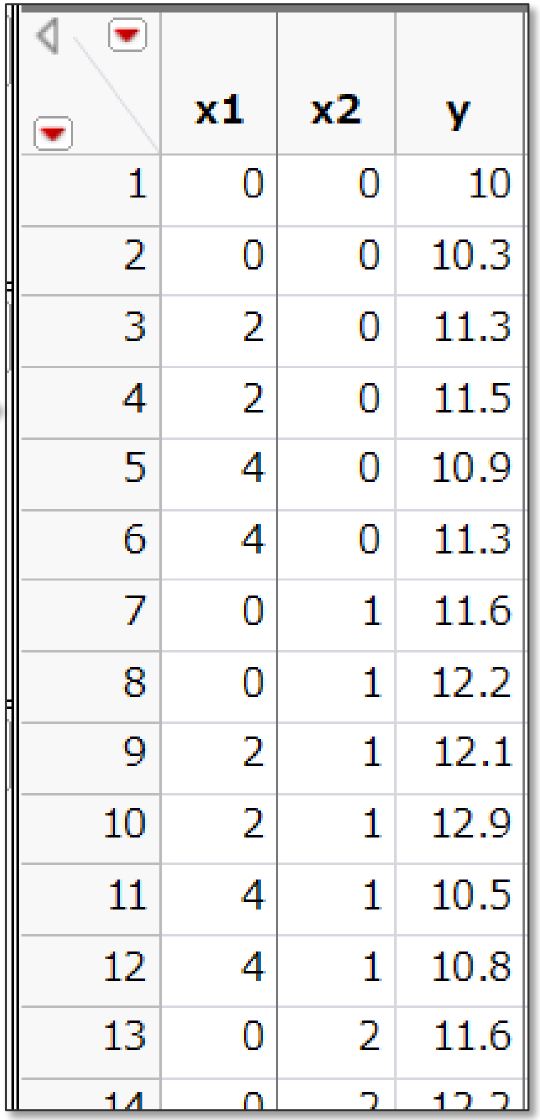
表示 5.5.3 のデータ

因子　：「$x1$」「$x2$」・・・連続尺度

観測値：「y」・・・連続尺度

表示 5.5.3

A＼B	0	1	2	3
0	10.0	11.6	11.6	12.0
	10.3	12.2	12.2	11.5
2	11.3	12.1	12.4	10.1
	11.5	12.9	11.0	11.8
4	10.9	10.5	10.4	8.0
	11.3	10.8	11.0	7.5



	x1	x2	y
1	0	0	10
2	0	0	10.3
3	2	0	11.3
4	2	0	11.5
5	4	0	10.9
6	4	0	11.3
7	0	1	11.6
8	0	1	12.2
9	2	1	12.1
10	2	1	12.9
11	4	1	10.5
12	4	1	10.8
13	0	2	11.6

JMP による解析

●JMPファイルの読み込みと表示

JMP ファイル「5-2因子4.jmp」を読み込み

●データ

表示 5.5.3 のデータ

因子　：「$x1$」「$x2$」・・・連続尺度

観測値：「y」・・・・・・・連続尺度

●解析

［分析］>［モデルのあてはめ］

［役割変数の選択、Y］：「y」

［モデル効果の構成］：「$x1$」「$x2$」を選択して

［マクロ］>［応答曲面］を選択

［強調点］：［最小レポート］

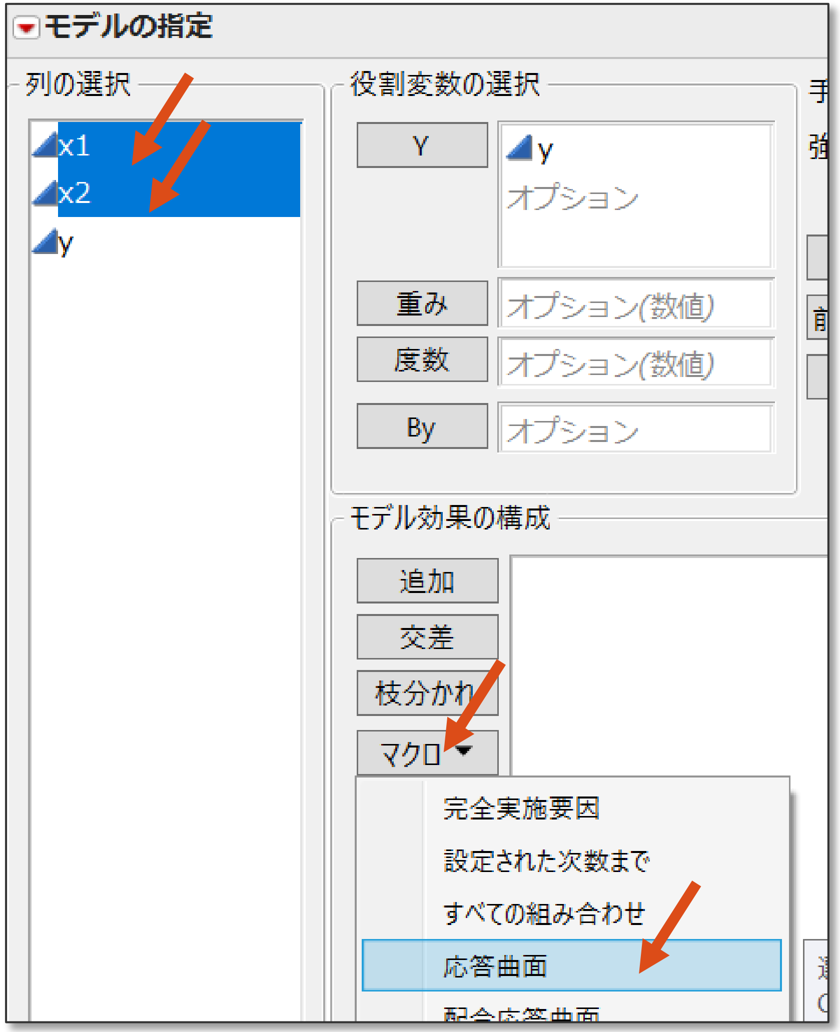
LINEST 関数で用意した
２乗の列、積の列は不要
JMP 内部で処理される

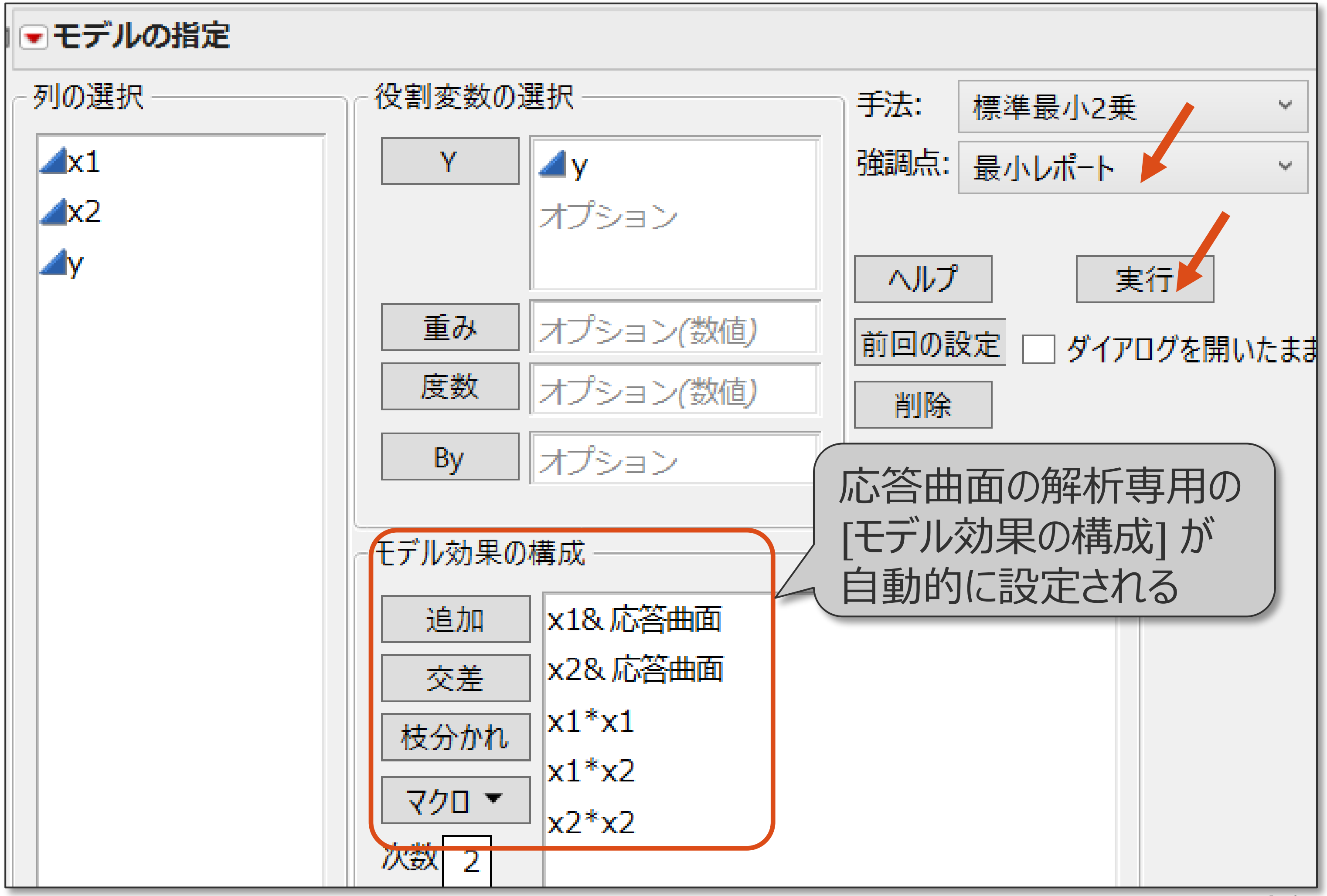
	x1	x2	y
1	0	0	10
2	0	0	10.3
3	2	0	11.3
4	2	0	11.5
5	4	0	10.9
6	4	0	11.3
7	0	1	11.6
8	0	1	12.2
9	2	1	12.1
10	2	1	12.9
11	4	1	10.5
12	4	1	10.8
13	0	2	11.6

JMP による解析

●モデル効果の構成

「$x1$」「$x2$」を選択して［マクロ］＞［応答曲面］





JMP による解析

p.200

●分散分析表

表示 5.5.3　質的因子×質的因子と見なして解析

	平方和	自由度	平均平方	F比
AB	33.151	11	3.014	9.71
A	11.883	2	5.941	19.14
B	8.311	3	2.770	8.92
A*B	12.958	6	2.160	6.96
e	3.725	12	0.310	
T	36.876	23		

表示 5.5.5

	(x2-1.5)^2	(x2-1.5)
回帰係数	-0.521	-0.370
その標準誤差	0.115	0.063
寄与率	0.845	0.564
F比	19.566	18
回帰平方和	31.146	5.731

表示 5.5.6 JMP の出力（1）

分散分析

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
モデル	5	31.145667	6.22913	19.5660
誤差	18	5.730583	0.31837	p値(Prob>F)
全体(修正済み)	23	36.876250		<.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)	6	2.0055833	0.334264	1.0768
純粋誤差	12	3.7250000	0.310417	p値(Prob>F)
合計誤差	18	5.7305833		0.4279

JMPによる解析

p.200

●分散分析表

表示 5.5.3　質的因子×質的因子と見なして解析

	平方和	自由度	平均平方	F比
AB	33.151	11	3.014	9.71
A	11.883	2	5.941	19.14
B	8.311	3	2.770	8.92
A*B	12.958	6	2.160	6.96
e	3.725	12	0.310	
T	36.876	23		

表示 5.5.5

	(x2-1.5)^2	(x2-1.5)
回帰係数	-0.521	-0.370
その標準誤差	0.115	0.063
寄与率	0.845	0.564
F比	19.566	18
回帰平方和	31.146	5.731

表示 5.5.6 JMPの出力（1）

分散分析

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
モデル	5	31.145667	6.22913	19.5660
誤差	18	5.730583	0.31837	p値(Prob>F)
全体(修正済み)	23	36.876250		<.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)	6	2.0055833	0.334264	1.0768
純粋誤差	12	3.7250000	0.310417	p値(Prob>F)
合計誤差	18	5.7305833		0.4279

JMP による解析

p.200

●パラメータ推定値

表示 5.5.5

定数項

	(x2-1.5)^2	(x1-2)*(x2-1.5)	(x1-2)^2	x2	x1	1
回帰係数	-0.521	-0.370	-0.225	-0.245	-0.344	13.344
その標準誤差	0.115	0.063	0.061	0.103	0.071	0.323
寄与率	0.845	0.564	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A
F比	19.566	18	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A
回帰平方和	31.146	5.731	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A
t 値	-4.522	-5.865	-3.684	-2.378	-4.874	41.317
p 値	0.0003	0.0000	0.0017	0.0287	0.0001	0.0000

JMPの結果と
LINEST 関数の結果は
一致

表示 5.5.6

パラメータ推定値

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob>|t|)
切片	13.343542	0.322952	41.32	<.0001*
x1	-0.34375	0.07053	-4.87	0.0001*
x2	-0.245	0.103015	-2.38	0.0287*
(x1-2)*(x1-2)	-0.225	0.061081	-3.68	0.0017*
(x1-2)*(x2-1.5)	-0.37	0.063084	-5.87	<.0001*
(x2-1.5)*(x2-1.5)	-0.520833	0.115175	-4.52	0.0003*

いずれのパラメータも
有意水準 0.05 で有意
　→ 設定した項に意味がある

JMP による解析

p.202

●推定されたモデル式

$$\hat{y} = 13.344 - 0.344x_1 - 0.245x_2$$
$$-0.2225(x_1 - 2.0)^2 - 0.370(x_1 - 2.0)(x_2 - 1.5) - 0.521(x_2 - 1.5)^2 \quad (5.5.3)$$

●有意でなかった項の取り扱い

多項式から意味のない項を除いて式をあてはめる

「モデルの指定」画面で，[モデル効果の構成] から不要の項を削除

除く基準として，p 値が0.05 以上とするよりも，p 値が0.20 以上位に設定するのが良い

高次の項を残して，その下位の項を除くのは好ましくない

例：x_1^2 項を残して x_1 項を除くことはしない

（4）最適条件

JMP の機能を使って
y を最大、最小にするx_1, x_2を求める

最適条件

- y を最大とする x_1、x_2

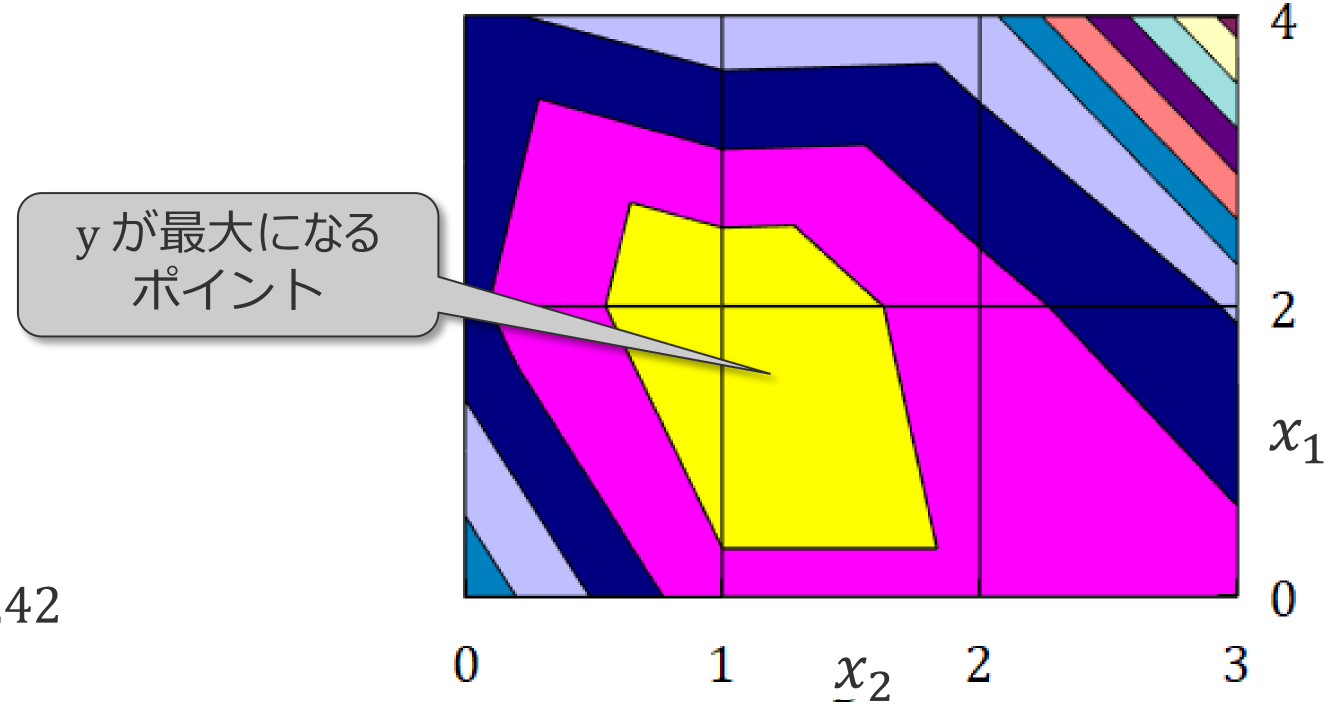
式(5.5.3) を x_1、x_2 で偏微分して 0 と置いた 2 元連立方程式を解く

$$\hat{y} = 13.344 - 0.344x_1 - 0.245x_2$$
$$-0.2225(x_1 - 2.0)^2 - 0.370(x_1 - 2.0)(x_2 - 1.5) - 0.521(x_2 - 1.5)^2 \qquad (5.5.3)$$

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = -0.344 - 2 \times 0.225(x_1 - 2.0)$$
$$-0.370(x_2 - 1.5) = 0$$

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} = -0.245 - 0.370(x_1 - 2.0)$$
$$-2 \times 0.521(x_2 - 1.5) = 0$$

$$x_1 = 1.194, \qquad x_2 = 1.551, \qquad \hat{y} = 12.42$$



最適条件

p.201

- JMP による解

予測式の係数（パラメータ）が表示

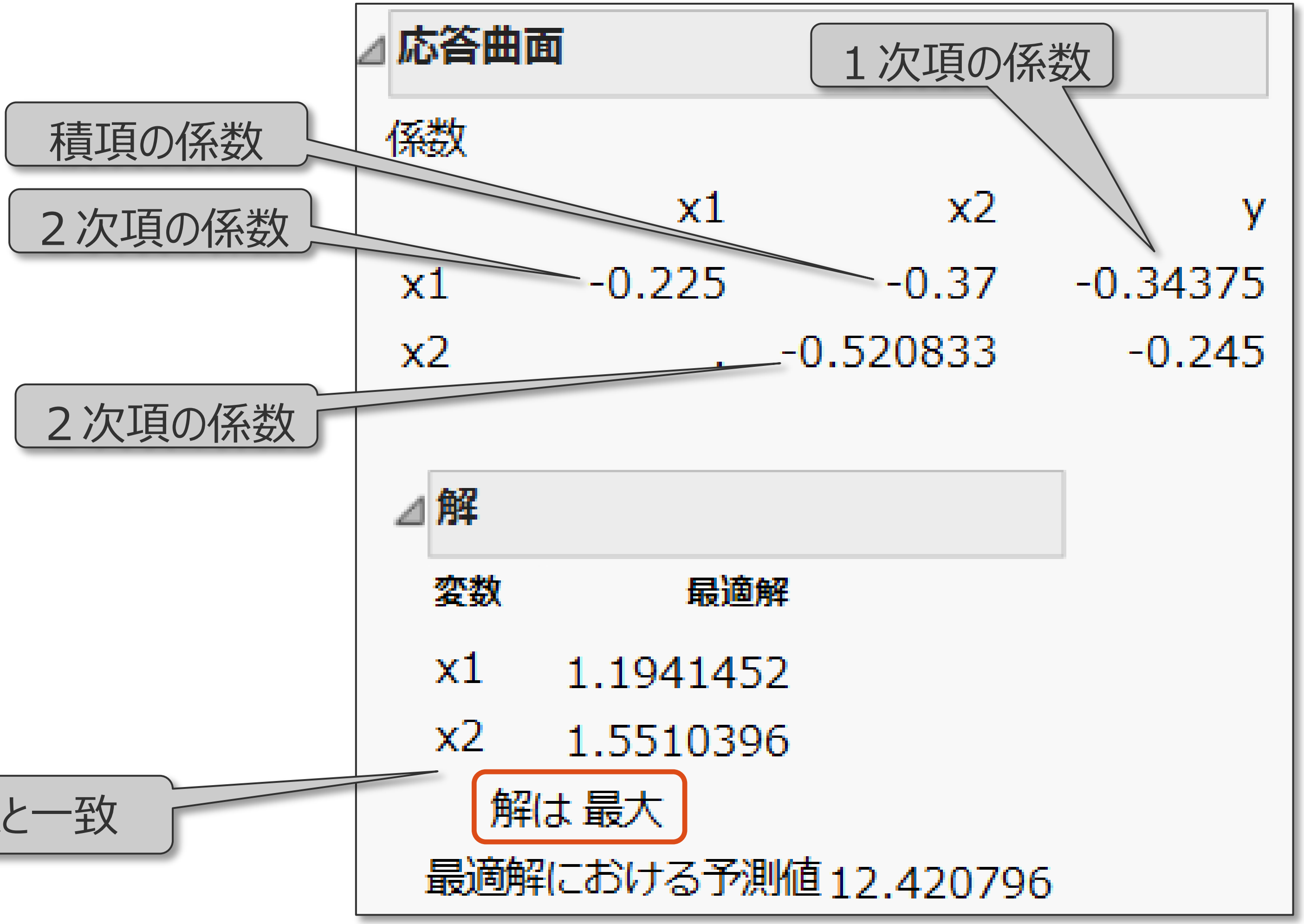
$$\hat{y} = 13.344 - 0.344x_1 - 0.245x_2$$
$$-0.225(x_1 - 2.0)^2$$
$$-0.370(x_1 - 2.0)(x_2 - 1.5)$$
$$-0.521(x_2 - 1.5)^2 \qquad (5.5.3)$$

解が表示

「最大」、「最小」、「鞍点」

そのときの x1、x2、y の値

表示 5.5.7 JMPの出力（2）



代数的に解いた結果と一致

最適条件

●鞍点（あんてん, くらてん）

（saddle point）

表示5.5.1、5.5.2 の事例

$b_{11} = b_{22} = 0.5, b_{12} = -2.0$

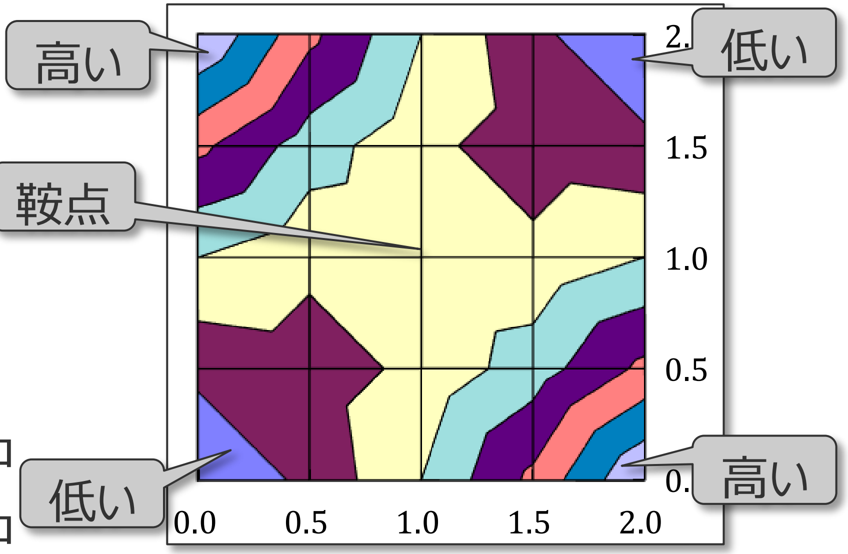
等高線の断面の形

左上から右下に切ると下に凸

右上から左下に切ると上に凸

中心のポイントが「鞍点」

JMP では、「解は鞍点」と表示

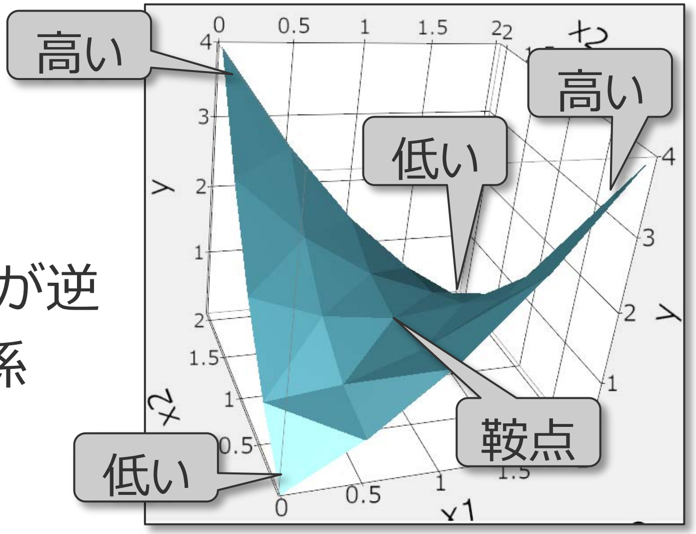


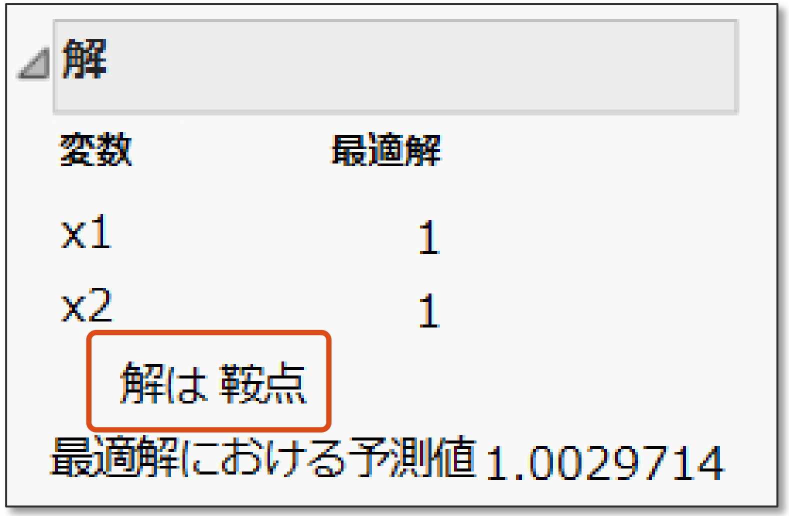
鞍点になる条件

（1） 2 乗項の係数 b_{11}, b_{22} の符号が逆

（2）積項の係数 b_{11}, b_{22}, b_{12} の関係

$$|b_{12}| > 2 \times \sqrt{b_{11} b_{22}}$$





解

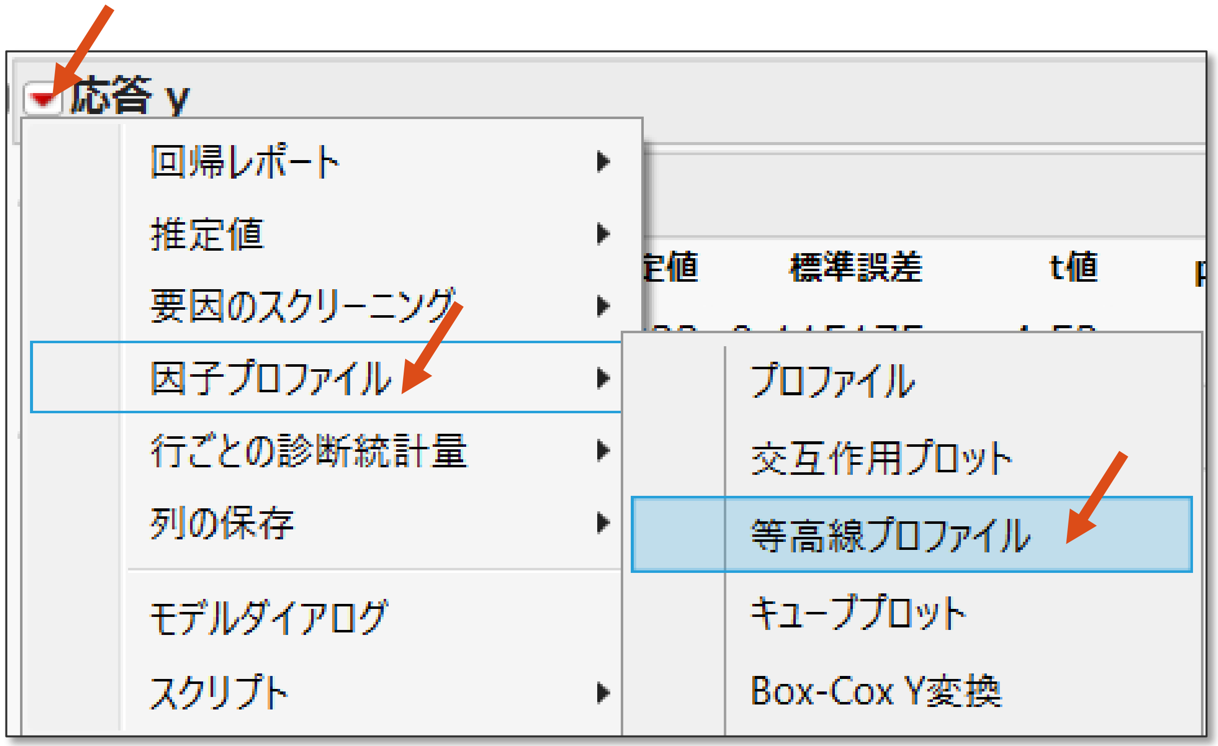
変数	最適解
x1	1
x2	1

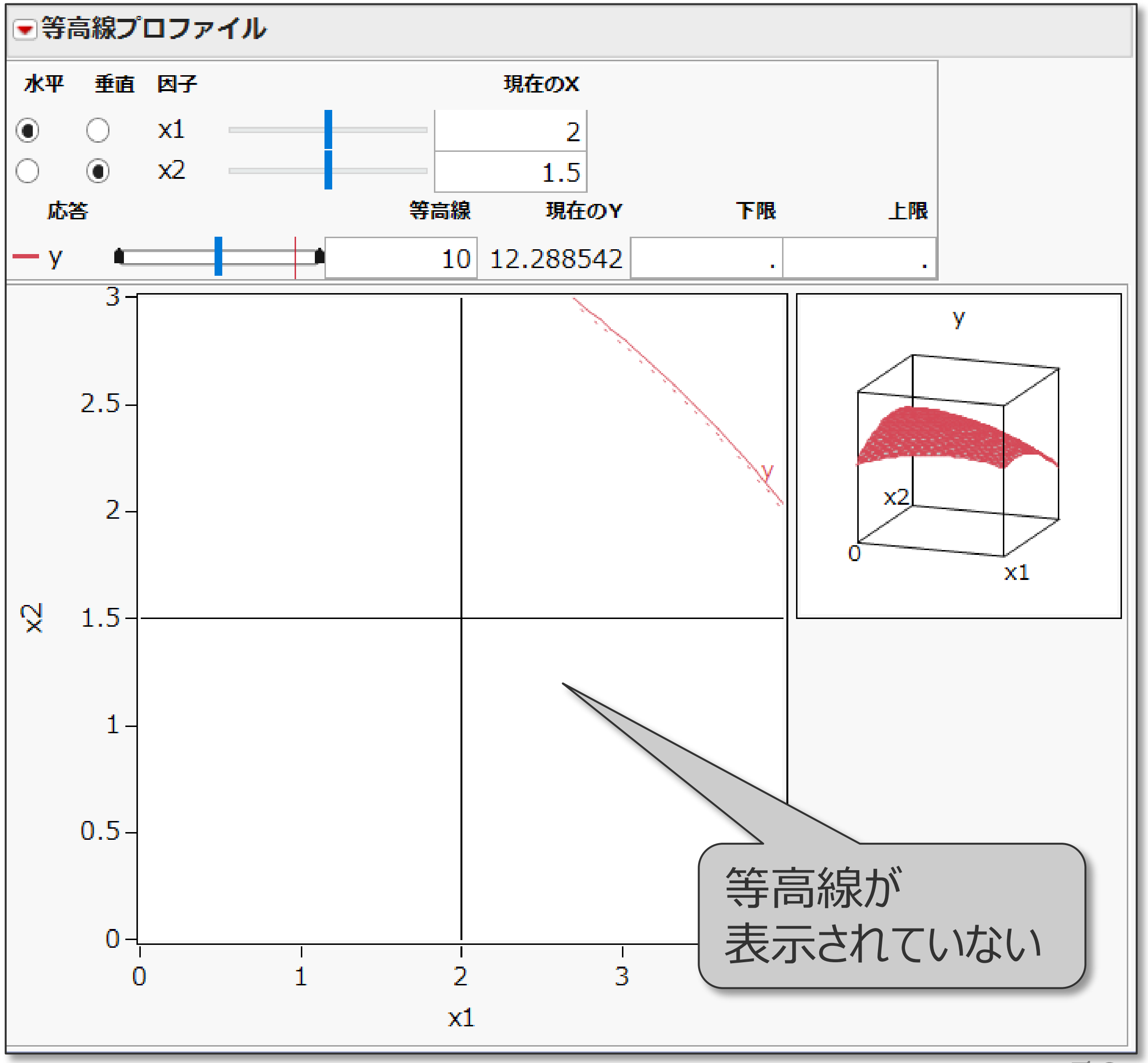
解は 鞍点

最適解における予測値 1.0029714

最適条件

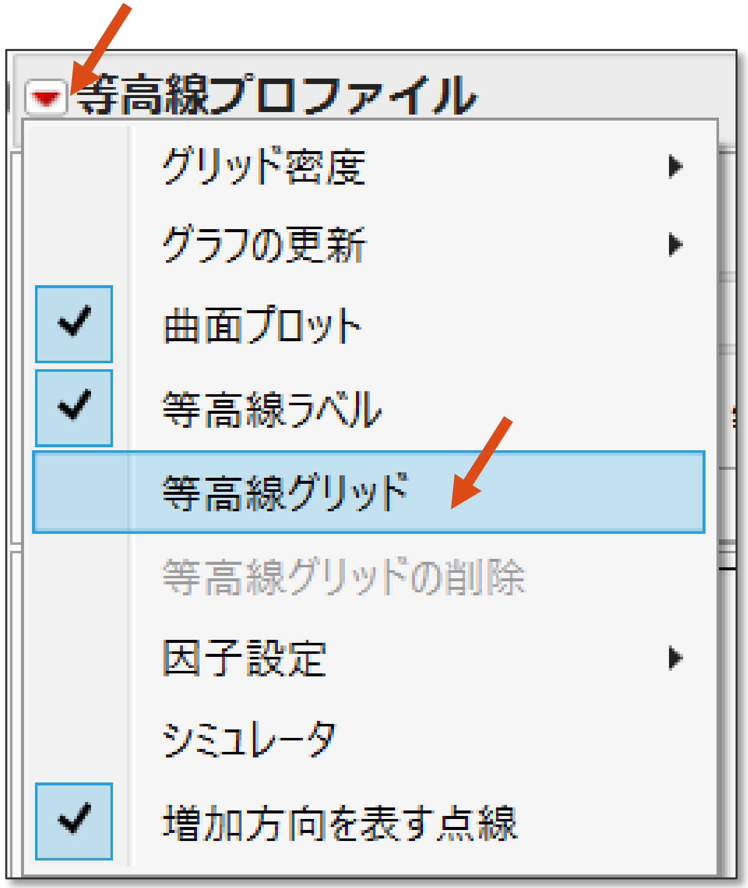
- JMP［等高線プロファイル］　　初期画面
  - ▼オプション＞［因子プロファイル］
  - ＞［等高線プロファイル］
  - 初期画面に調整を加える

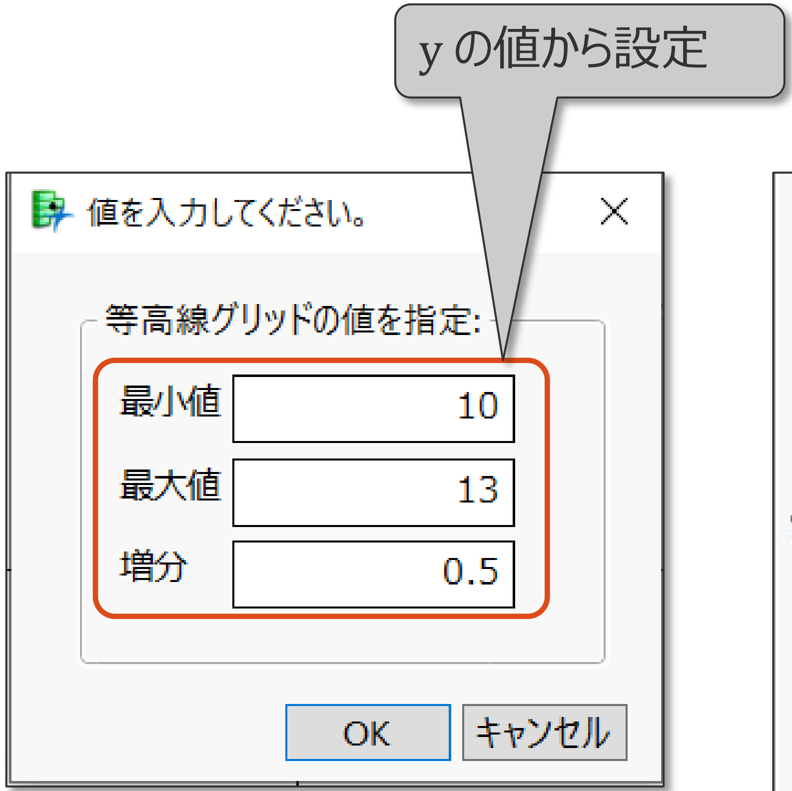


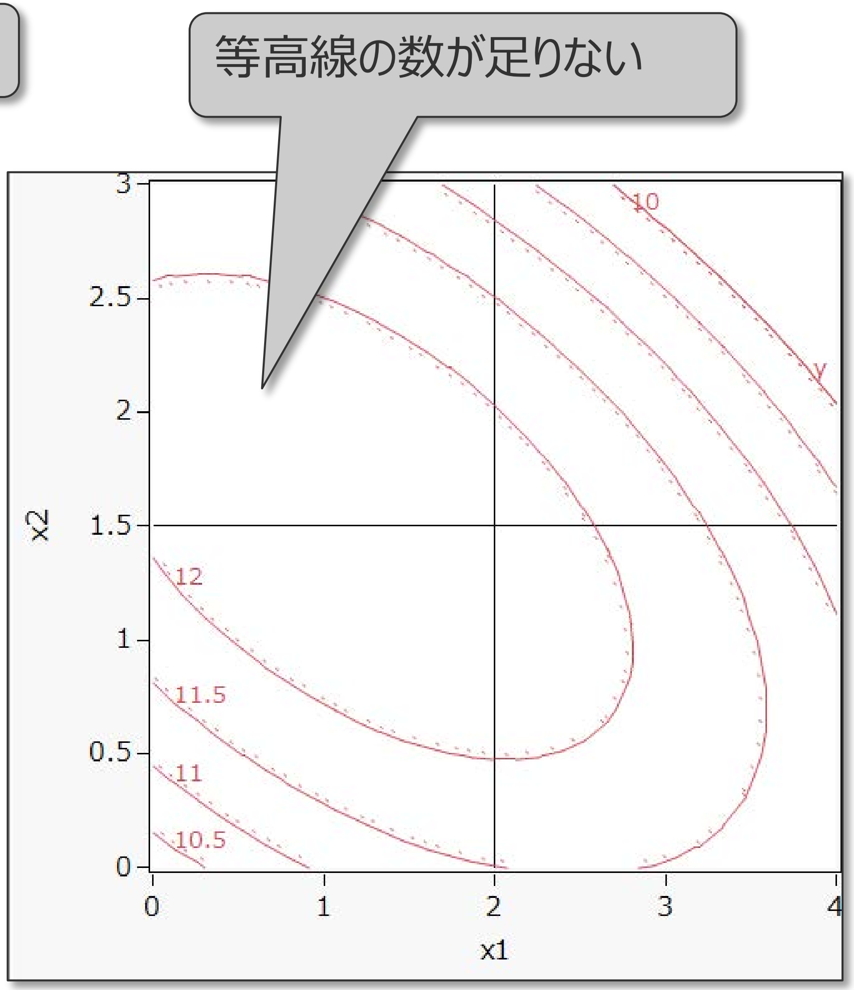


最適条件

- JMP［等高線プロファイル］







最適条件

p.202

- JMP［等高線プロファイル］

  等高線の追加　（最大値は12.43 →　y = 12.3）

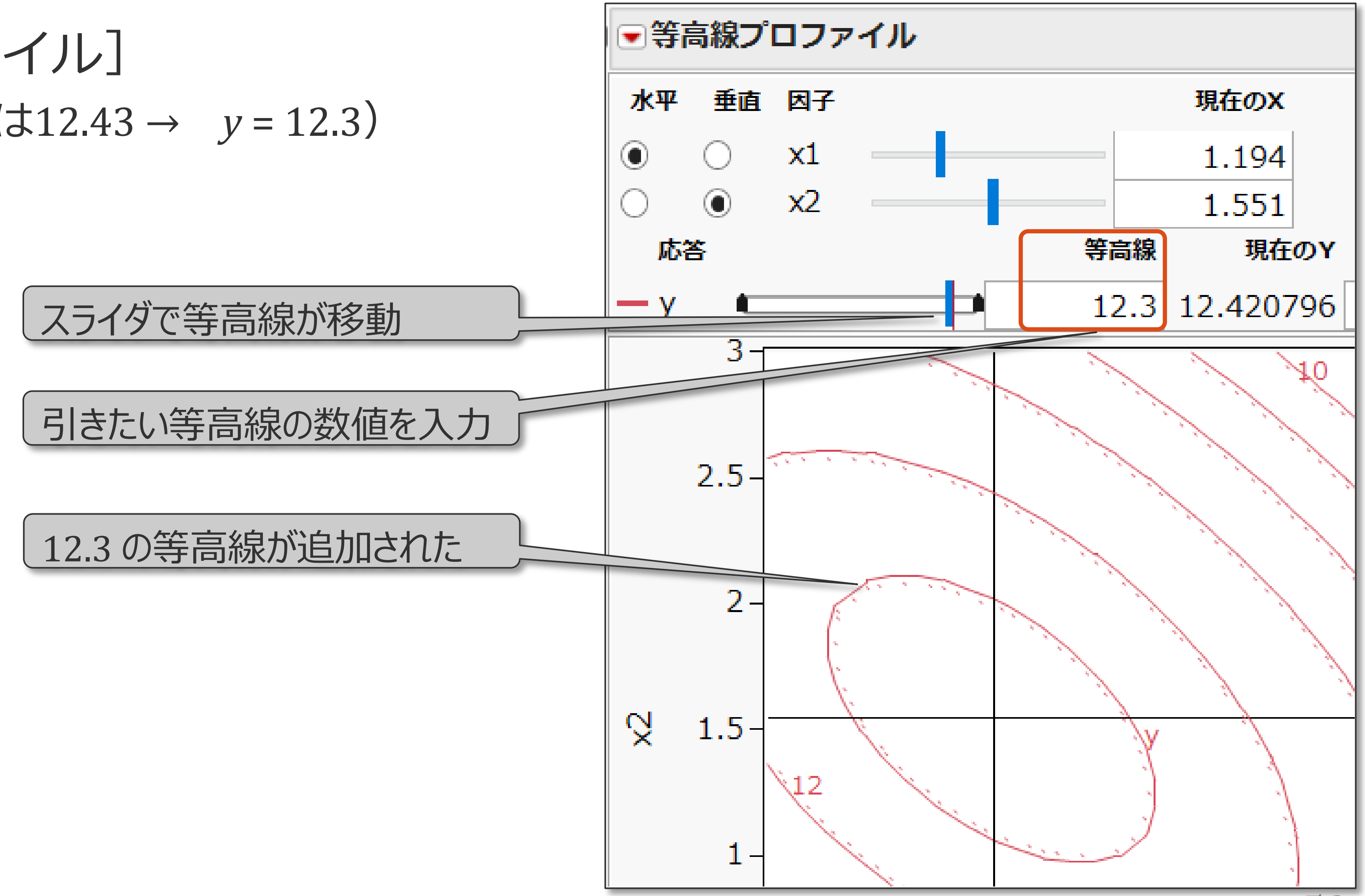
  追加した等高線の移動

「解は最大」

x_1 ＝　1.194

x_2 ＝　1.551

$\hat{y}$　＝ 12.42



最適条件

- JMP［等高線プロファイル］
  予測値の計算と表示

「解は最大」

$x_1 = \ 1.194$

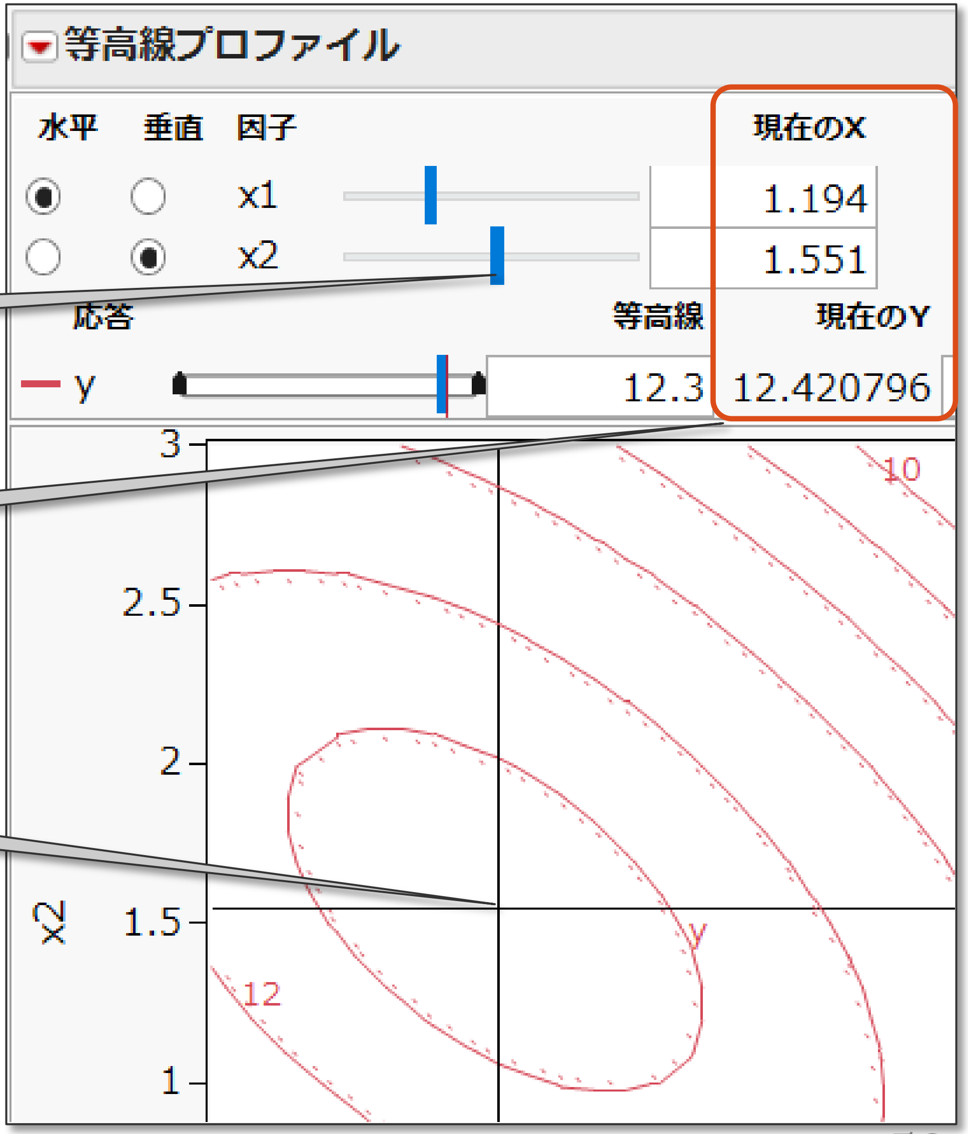
$x_2 = \ 1.551$

$\hat{y} \ = 12.42$

スライダで x1, x2 を変化させる

x1, x2 を入力すると y を計算

x1, x2 の位置に十字が移動



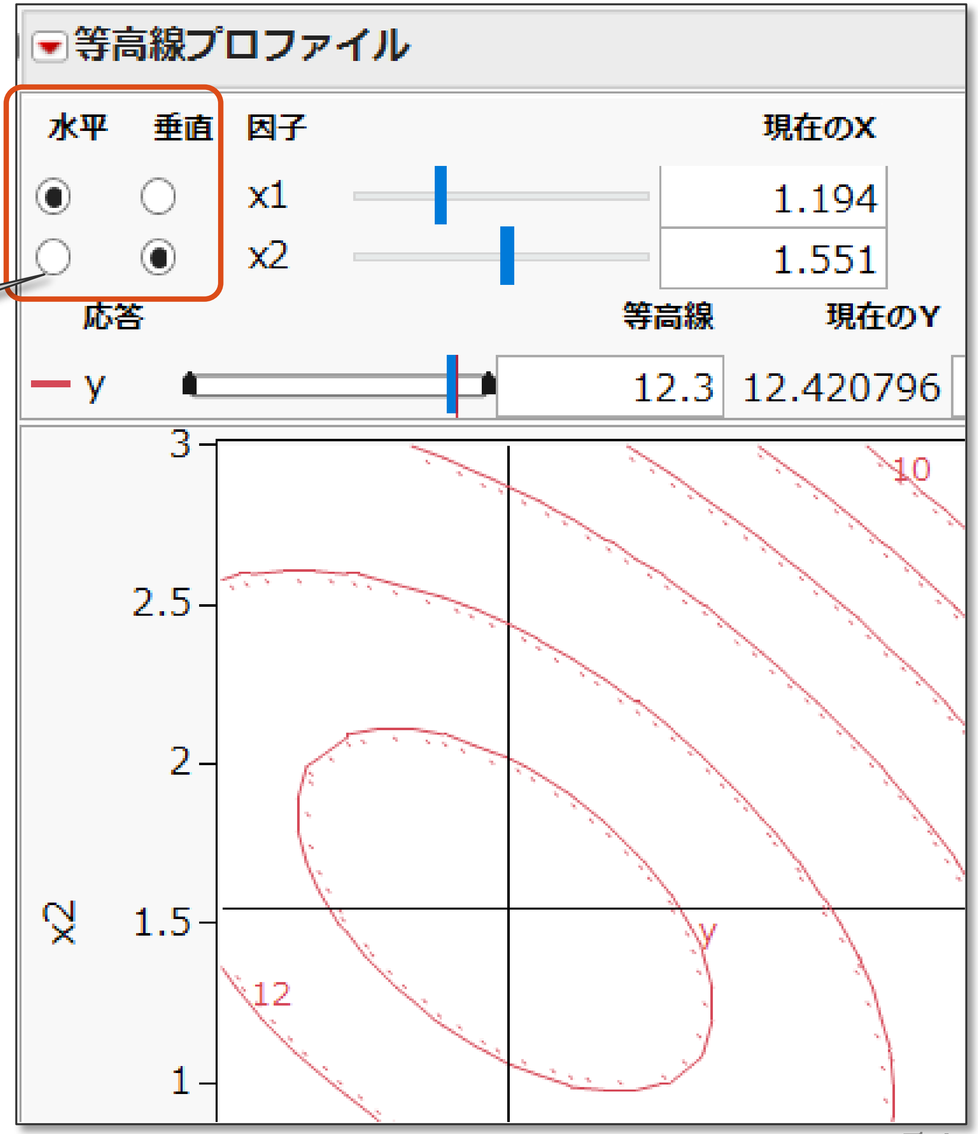
最適条件

- JMP［等高線プロファイル］

  3因子以上（x1, x2, x3・・・）の場合

  任意の2因子を取り出して関係を解析

3因子以上の場合、
2因子の軸を選択

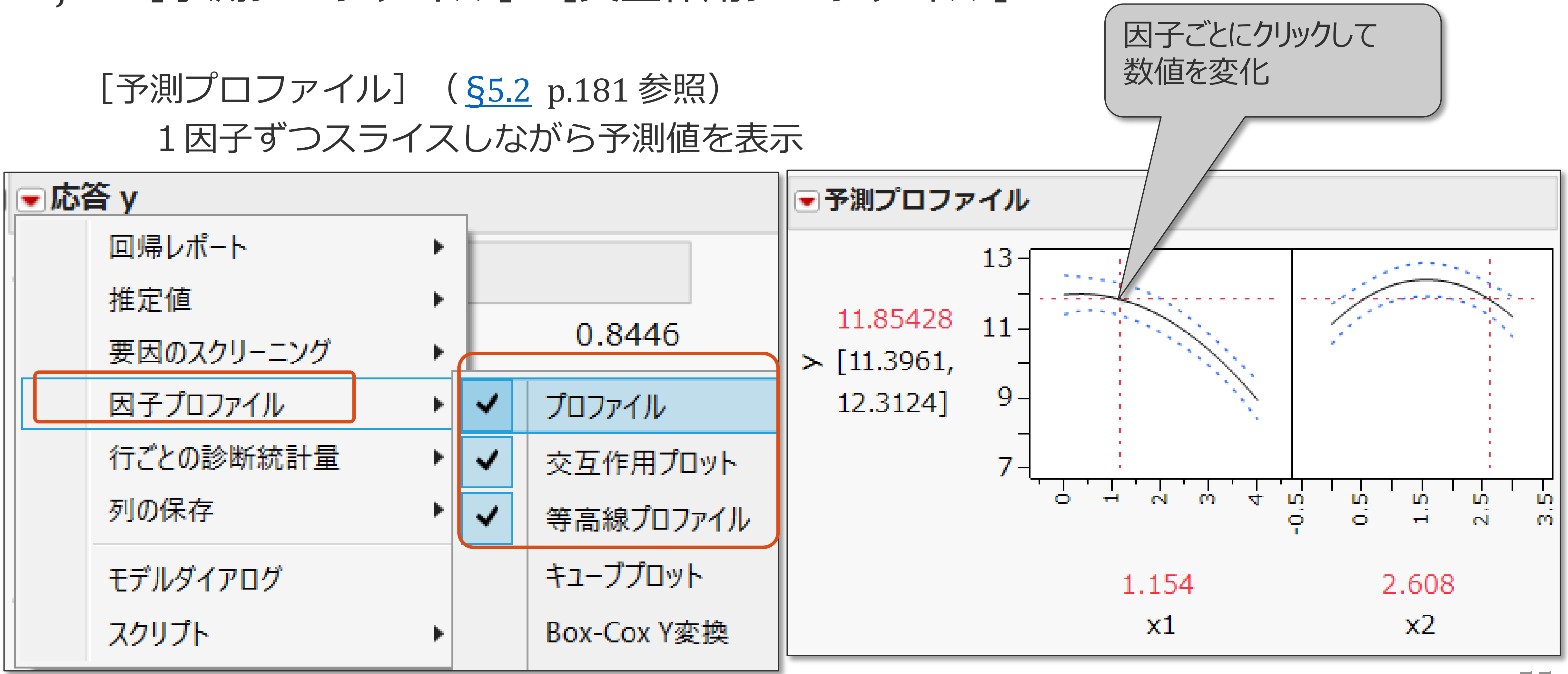


最適条件

p.202

- JMP［予測プロファイル］［交互作用プロファイル］

［予測プロファイル］（§5.2 p.181 参照）
1因子ずつスライスしながら予測値を表示



p.202

補足

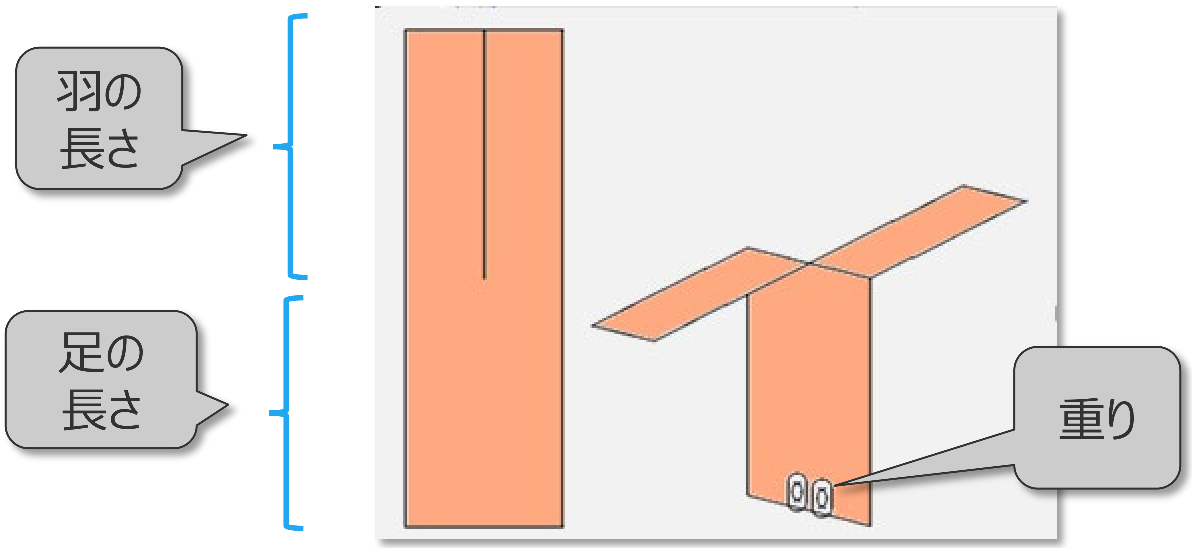
紙ヘリコプター実験
反応温度と反応時間の実験（§5.6 補遺）

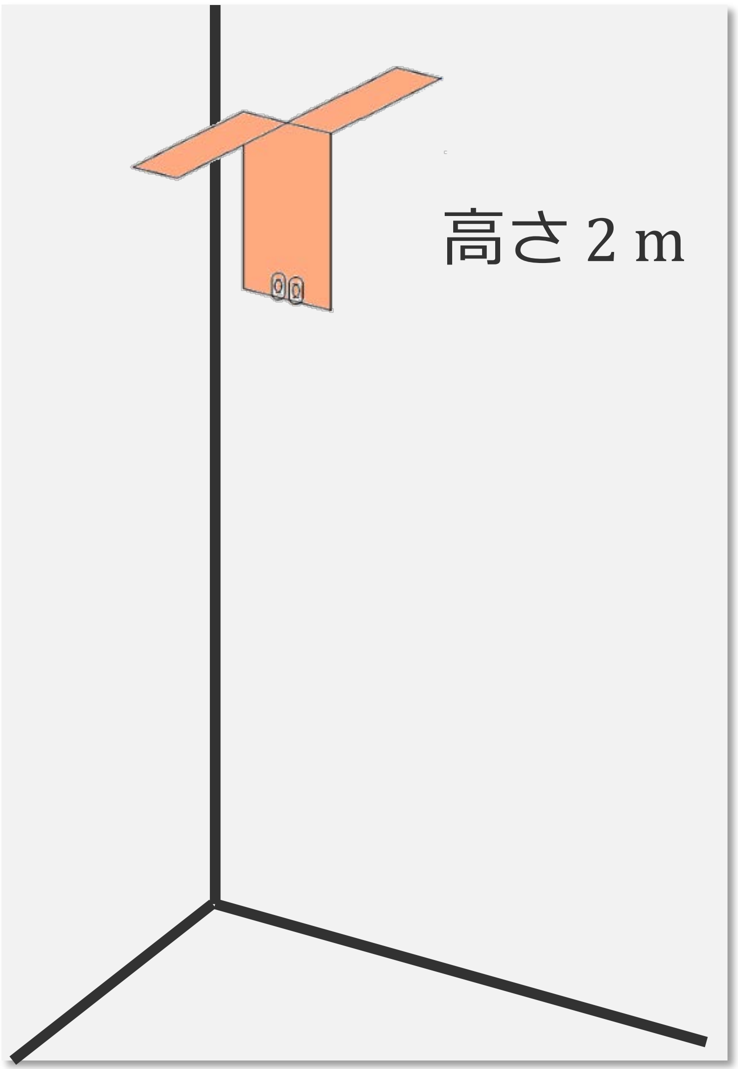
紙ヘリコプター実験

p.202

●実験内容

紙ヘリコプター実験（第1部§1、§5.1）で、
「羽の長さ」と「足の長さ」の２要因を考える
滞空時間が長くなるようにしたい
それぞれの最適値をどのように推定するか？
ただし、紙の全長は自由、羽の長さと足の長さは独立





紙ヘリコプター実験

p.203

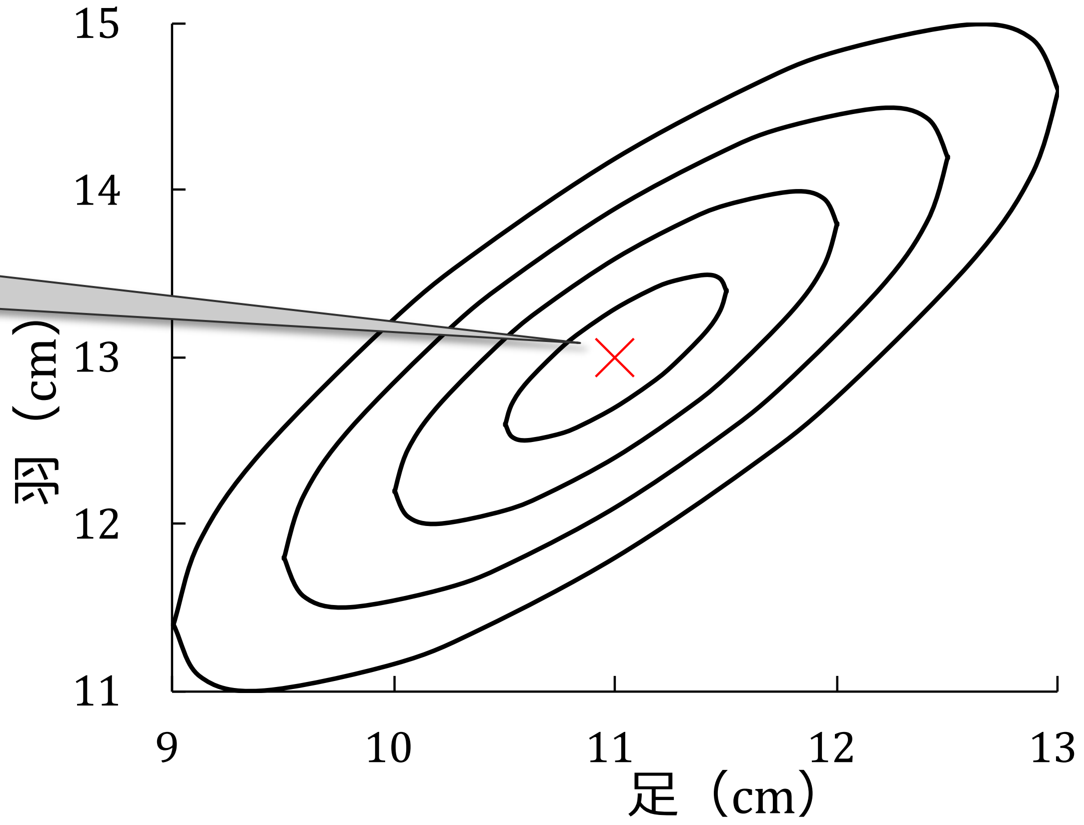
●実験内容

紙ヘリコプターの羽の長さと足の長さには、
表示5.5.8 の関係があるとする

最適値を求める 2 つの方法を考える

「羽の長さ」と「足の長さ」の
最適値をどう推定するか

表示 5.5.8 紙ヘリコプターの滞空時間の等高線

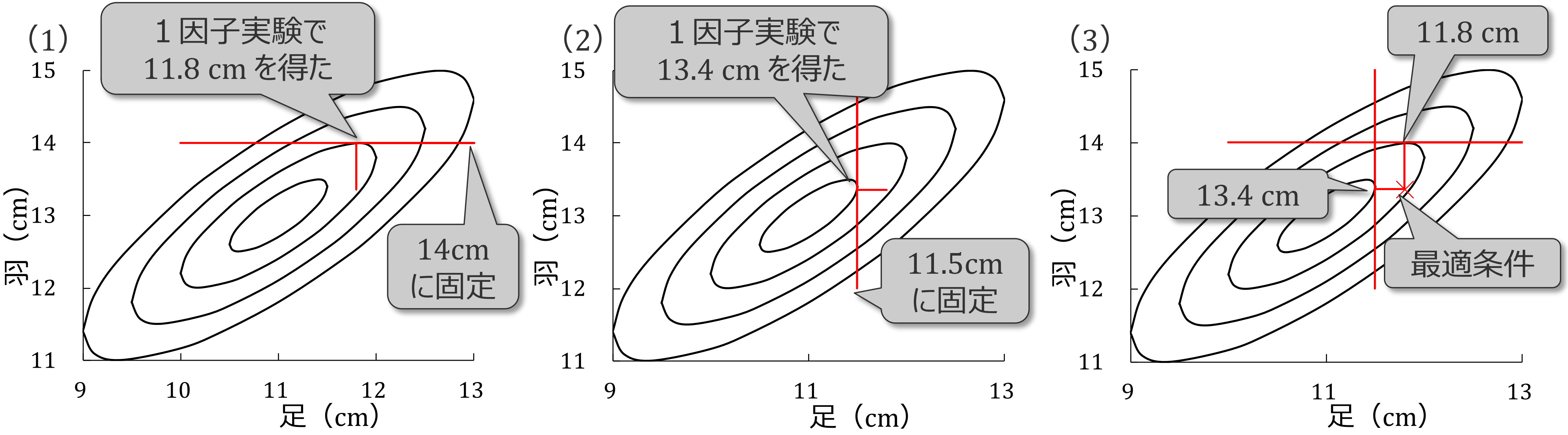


紙ヘリコプター実験

p.203

●方法１

（1）羽の長さを 14 cm に固定して、１因子実験で最適な足の長さ 11.8 cm を得た
（2）全く独立に，足の長さを 11.5 cm に固定し、１因子実験で最適な羽の長さ 13.4 cm を得た
（3） 2 つの結果から、×の位置が最適条件であると推定した

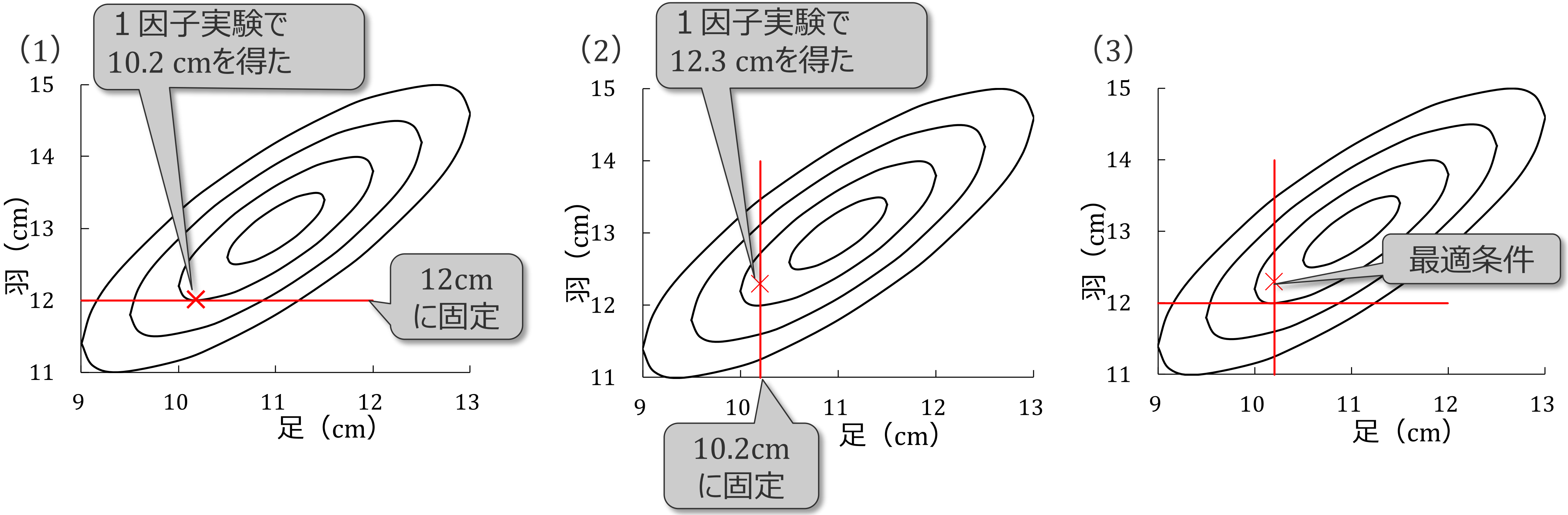


紙ヘリコプター実験

p.203

●方法２

（1）羽の長さを 12 cm に固定して、１因子実験で最適な足の長さ 10.2 cm を得た
（2）足の長さを最適値 10.2 cm に固定して、１因子実験で最適な羽の長さ 12.3 cm を得た
（3）この結果から、×の位置が最適条件であると推定した

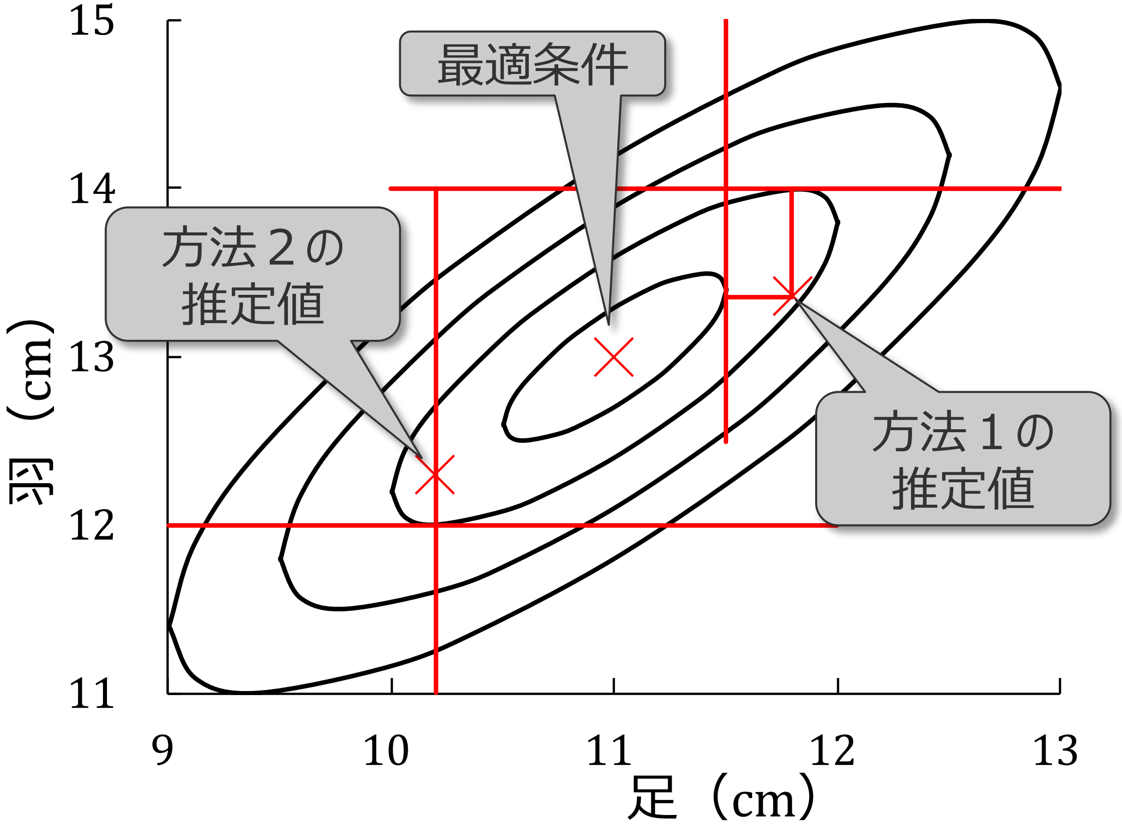


紙ヘリコプター実験

●交互作用を考慮した方法

方法１、方法２からも、本当の最適条件は得られない

２因子実験を適用しないと正しい推定はできない



紙ヘリコプター実験

p.205

- 2 因子実験：水準組合せの工夫（交互作用を小さくする方法）

  「羽の長さ」と「足の長さ」の２因子実験（量的因子×量的因子）の設定方法

表示 5.6.2 紙ヘリコプターの２因子実験

「×印」の組合わせは、
羽と足のバランスが悪く滞空時間が短い
（事前情報）

羽の長さ（cm）	足の長さ（cm） 8	10	12	14
10	○	○	×	×
12	○	○	○	×
14	×	○	○	○
16	×	×	○	○

全長（足の長さ＋翼の長さ）と
全長に対する足の割合を因子に取る
（事前情報を生かした設定）

全長（cm）	足／全長（割合） 0.40	0.45	0.50	0.55
18	○	○	○	○
22	○	○	○	○
26	○	○	○	○
30	○	○	○	○

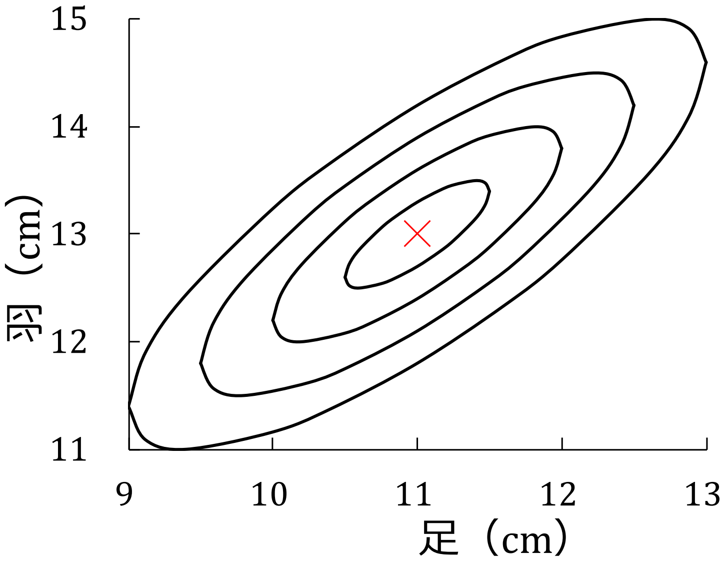
紙ヘリコプター実験

- ２因子実験：水準組合せの工夫

  実験対象についての固有技術や予備知識をフルに使って
  適切な因子と水準を取り上げることは極めて重要

「交互作用を含まないモデルがあてはめられるように
因子と水準組合せを設定できることが実験計画法のプロ」
（田口玄一氏の言葉）

表示 5.5.8
紙ヘリコプターの
滞空時間の等高線



表示 5.6.2（右）

全長 (cm)	足／全長（割合） 0.40	0.45	0.50	0.55
18	○	○	○	○
22	○	○	○	○
26	○	○	○	○
30	○	○	○	○

羽の長さ (cm)	足の長さ（cm） 7	8	9	10	11	12	13	14	15	17
18						○				
17								○		
16				○						
15									○	
14						○				○
13			○				○			
12				○				○		
11	○				○					
10		○				○				
9			○							
8				○						

反応温度と反応時間の実験

p.204

● 2因子実験（量的因子×量的因子）

因子　　：因子A：反応温度、因子B：反応時間

事前情報：高温時は最適反応時間が短かく、低温時は最適反応時間が長い

水準組合せ

高温度・長時間，低温度・短時間の組合せ
反応の進み過ぎ，または，反応不十分で，
不満足な結果となることが予見

温度が低いときは時間を延ばす
温度が高いときは時間を縮める

表示 5.6.1
２つの因子の
水準組合せ法

反応温度と反応時間の実験

p.204

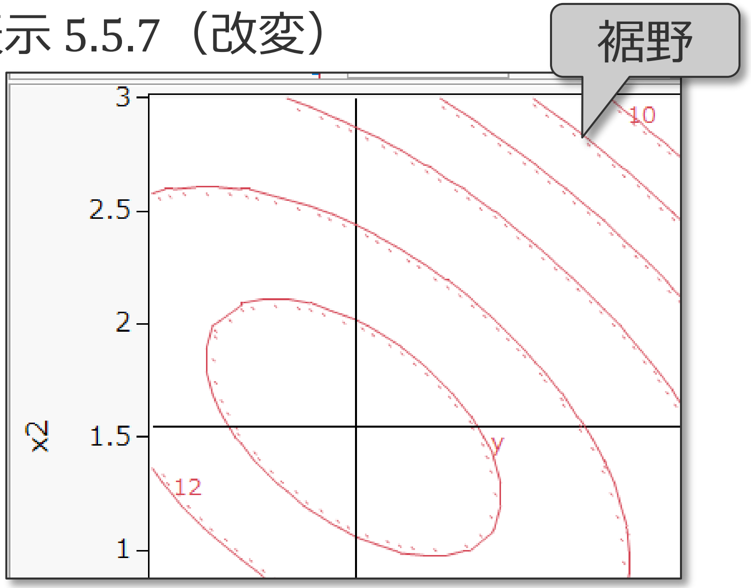
- 2 因子実験（量的因子×量的因子）

応答曲面に2 次曲面をあてはめるのは近似
どのような曲面でも，極めて狭い範囲では平面があてはまり，
範囲を少し広げると2 次曲面があてはまる

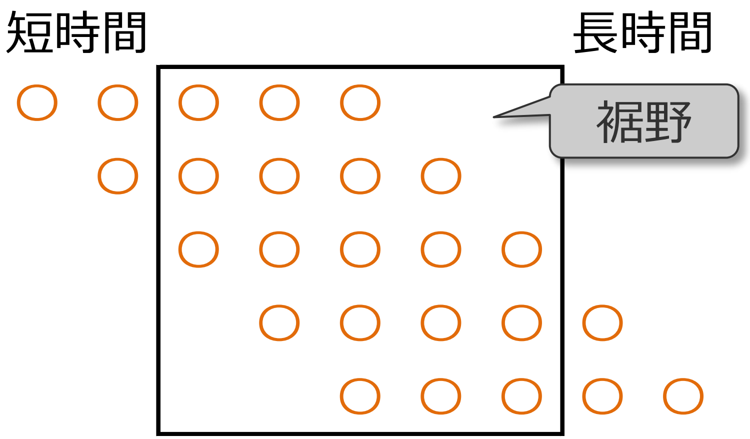
範囲を広げると2 次曲面のあてはまりが悪くなる
あてはまりが悪くなるのは，等高線の「裾野」の部分の影響
この部分があると、2 次曲面では十分に近似できない危険あり
裾野の部分を外した水準組合せ（表示5.6.1 右）を利用
従来の著書には解説されていなかった
JMP などの統計ソフトを使えば無理なく解析可能

適切な水準と組合せを選べるかは，
実験者の腕（固有技術の質と量，実験計画法の基礎知識）次第

表示 5.5.7（改変）



表示 5.6.1 2（右）



まとめ

p.203

●量的因子×量的因子の２因子実験：応答曲面モデルのあてはめ

実験計画の中で大きな位置を占める

例えば、温度や時間などの量的因子を複数水準で実験し、最適条件を探索

JMP では、応答曲面解析のための強力なツールが提供されている

● 作成	片瀬雅彦
● 監修	松本一彦、長谷文雄
● 作成時期	2019年11月1日
● 改訂	2020年10月5日、2024年1月6日