1 非線形最小 2 乗法（基礎）

1.3 指数曲線のあてはめ

テキスト

芳賀敏郎（2016）医薬品開発のための統計解析

第 3 部　非線形モデル 改訂版、サイエンティスト社、p.288

第３部　非線形モデル

1. 非線形最小２乗法（基礎）

1.1 線形と非線形、1.2 非線形最小２乗法の基本的な考え方、**1.3 指数曲線のあてはめ**、

1.4 Emaxモデルとロジスティック曲線

2. 非線形最小２乗法（応用）

2.1 誤差を考慮した解析、2.2 効力比、2.3 併用効果（相乗・拮抗交換）、

2.4 モデルの探索（複数の曲線の同時あてはめ）、2.5 薬物動態の解析

3. 計数値の解析

3.1 ２項分布、3.2 割合の推定・検定と区間推定、3.3 割合の差の推定・検定と区間推定、

3.4 多項分布（名義尺度）、3.5 多項分布（順序尺度）、3.6 要因が複数の場合

4. ロジスティック回帰分析

4.1 復習、4.2 ロジスティック回帰分析（基本）、4.3 ロジスティック回帰分析（応用）

1.3 指数曲線のあてはめ

p.26

テキストの
該当ページ

（1）指数曲線
（2）半減期
（3）下限／上限がある場合の指数曲線
（4）繰り返しのある場合
（5）パワーモデル

補足　非線形回帰における平方和の分解と決定係数、分散分析表

使用するファイル
Excelファイル「改1非線形.xlsm」
JMPファイル「13-指数曲線.jmp」「13-指数曲線2.jmp」「演13-2.jmp」
サイエンティスト社ホームページからダウンロード

★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

JMP 10.0.2 の出力を表示

1.3 指数曲線のあてはめ

p.26

（1）指数曲線・・・・・・　　基本的な指数曲線モデルの概要

（2）半減期・・・・・・・　　基本的な指数曲線モデルの概要

（3）下限／上限がある場合の指数曲線

指数曲線モデルの拡張

Excel ソルバーによる解析

JMP［非線形回帰］による解析

（4）繰り返しのある場合

あてはまりの悪さ（LOF）

Excel ソルバーによる解析

JMP［非線形回帰］による解析

（5）パワーモデル

補足　非線形回帰における平方和の分解と決定係数、分散分析表

はじめに

p.26

● 課題1.3

細胞が１日に６％増加するものとするとき

（a）　１週間後には何倍になるか？

（b）　１％増殖するのに何時間かかるか？

（c）　６倍になるのは何日後か？

はじめに

●課題1.3

細胞が１日に６％増加するものとするとき

（a）　１週間後には何倍になるか？

１日で６％増殖するから１日で1.06倍、１週間は７日だから　0.06×7＝0.42、　1.42倍になる？

（b）　１％増殖するのに何時間かかるか？

１％は６％の 1/6、つまり１日（24時間）の1/6は４時間？

（c）　６倍になるのは何日後？

６倍は 600%、１日に 6%増加するから 600 /6＝100、100日後？

これらの回答は正しいであろうか

はじめに

p.26

●課題1.3

細胞が１日に６%増加するものとするとき

（a）　１週間後には何倍になるか？

１日で６%増殖するから１日で1.06倍、１週間は７日だから　0.06×7＝0.42、　1.42倍になる？

（b）　１%増殖するのに何時間かかるか？

１%は６%の1/6、つまり１日（24時間）の1/6は４時間？

（c）　６倍になるのは何日後？

６倍は600%、１日に6%増加するから600 /6＝100、100日後？

すべて誤り

はじめに

●課題1.3

細胞が１日に６%増加するものとするとき → 非線形モデルの１つ「指数曲線モデル」

次項以降のモデルの基礎

●指数曲線モデル

指数関数（exponential function）が含まれるモデル

指数関数は、指数部分に変数を含む関数

a^x （a は定数、 $a > 0, a \neq 1$、x は変数）

e^x （ $e = 2.71828$：ネイピア数、自然対数の底）、$e^x = \exp(x)$

エクスポネンシャル・エックス
（イーエックスピー・エックス）

指数関数と対数関数は密接な関係

第１部 §2.7(7) p.120、第３部 §1.5(4) p.60　参照

はじめに

- 指数関数と対数関数（自然対数、常用対数）

自然対数と指数関数とは逆の関数

$$y = \log_e x = \ln x \quad \leftrightarrow \quad x = e^y = \exp(y)$$

$$x = \ln\left(\exp(x)\right)\text{、}\quad x = \exp(\ln x)\text{、}\quad \ln e = 1$$

常用対数と逆の関係は 10 のべき乗

$$y = \log_{10} x = \log x \quad \leftrightarrow \quad x = 10^y$$

$$x = \log(10^x)\text{、}\quad x = 10^{\log x}\text{、}\quad \log 10 = 1$$

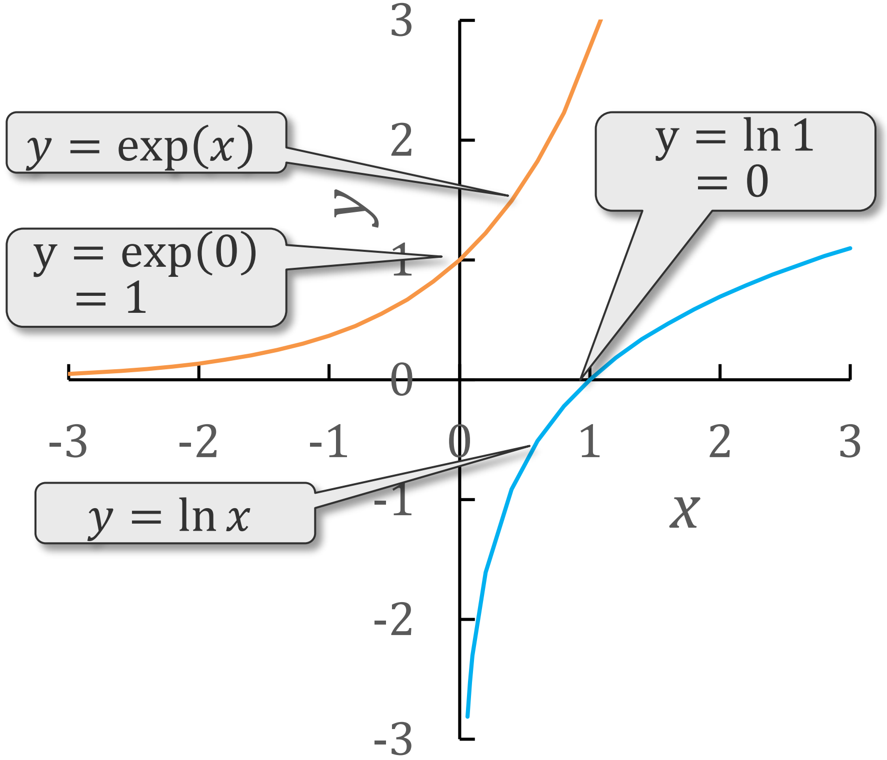
積の対数、べき乗の対数

$$\ln(xy) = \ln x + \ln y\text{、}\ln(x^a) = a \ln x$$

和の指数関数、積の指数関数

$$\exp(x + y) = \exp(x) \cdot \exp(y)\text{、}\exp(ax) = \left(\exp(x)\right)^a$$

指数関数と自然対数は逆の関係



$$b^a = \exp(a \times \ln b)$$

$$\ln(b^a) = \ln\left(\exp(a \times \ln b)\right)$$

$$a \times \ln b = a \times \ln b$$

はじめに

p.26

●指数法則、関連するExcel 関数と JMP 関数

指数法則（指数の計算方法、指数の関係）

$a \neq 0, b \neq 0$ のとき、

$$a^m \times a^n = a^{m+n}$$

$$(a^m)^n = a^{m \times n}$$

$$(ab)^m = a^m \times a^m$$

$$\frac{a^m}{a^n} = a^{m-n}$$

$$\left(\frac{b}{a}\right)^m = \frac{b^m}{a^m}$$

$$a^{-m} = \frac{1}{a^m}$$

Excel と JMP の指数関数、対数関数

		Excel 関数	JMP 関数
指数関数	exp(x)	=EXP(x)	EXP(x)
自然対数	ln(x)	=LN(x)	Log(x)
常用対数	log(x)	=LOG(x)	Log10(x)

p.26

（1） 指数曲線

指数曲線のモデルの基本的な形

指数曲線

p.26

● 指数曲線モデルの一般式

細胞が 1 日に 6% 増加する（課題1.3）

↓

x（日）が 1 増えるごとに y（細胞数）が 1.06 倍になる

↓

x が 1 増えるごとに y が b 倍になる（$b > 1$）

$x = 0$ のとき y の値が y_0（初期値）

$x = i$ のとき y の値を y_i とすると

$x = 0$,　$y_0 = y_0$

$x = 1$,　$y_1 = by_0 = b^1 y_0$

$x = 2$,　$y_2 = by_1 = b^2 y_0$

$x = 3$,　$y_3 = by_2 = b^3 y_0$

$x = 4$,　$y_4 = by_3 = b^4 y_0$

x が 1 増えるごとに y が 1.06 倍になる（課題 1.3）

$y_0 = 1$

$y_1 = 1.06 \times 1 \quad = 1 \times 1.06^1$

$y_2 = 1.06 \times 1.06 = 1 \times 1.06^2$

$y_3 = 1.06 \times 1.06^2 = 1 \times 1.06^3$

$y_4 = 1.06 \times 1.06^3 = 1 \times 1.06^4$

指数曲線

●指数曲線モデルの一般式

$x = 0,\quad y_0 = y_0$

$x = 1,\quad y_1 = by_0 = b^1 y_0$

$x = 2,\quad y_2 = by_1 = b^2 y_0$

$x = 3,\quad y_3 = by_2 = b^3 y_0$

・・・

$x = i - 1,\quad y_{i-1} = by_{i-2} = b^{i-1} y_0$

$x = i,\quad y_i = by_{i-1} = b \times b^{i-1} y_0 = b^i y_0$

$$y_x = y_0 b^x \qquad (1.3.1)$$

$$\log(y_x) = \log(y_0) + \log(b)\, x \qquad (1.3.2)$$

yは対数変換、xはそまま
自然対数、常用対数、どちらでも可

指数曲線

●課題1.3

細胞が１日に６%増加するものとするとき

（ａ） １週間後には何倍になるか？

当初の考え方

１日で６%増殖するから１日で1.06倍、

１週間は７日だから 0.06×7＝0.42、 1.42倍（誤り）

指数曲線モデルを使用

$y_0 = 1, \quad x = 7, \quad b = 1.06$

$y_7 = y_0 b^x$ （1.3.1）

$= 1 \times 1.06^7 = 1.504$

1.504 倍（正解）

$y_x = y_0 b^x$ （1.3.1）

$\log(y_x) = \log(y_0) + \log(b)x$ （1.3.2）

指数曲線

●課題1.3

細胞が１日に６%増加するものとするとき

（ｂ）１%増殖するのに何時間かかるか？

当初の考え方

１% は６% の 1/6、つまり１日（24時間）の 1/6 は４時間（誤り）

指数曲線モデルを使用

$y_0 = 1, \quad y_x = 1.01, \quad b = 1.06$

$\log(1.01) = \log(1) + \log(1.06)x$ （1.3.2）

$$x = \frac{\log(1.01) - \log(1)}{\log(1.06)} = \frac{\log(1.01) - 0}{\log(1.06)} = 0.1708$$

0.1708日（正解）
（4.10 時間）

$24 \times 0.1708 = 4.10$

$y_x = y_0 b^x$ （1.3.1）
$\log(y_x) = \log(y_0) + \log(b)x$ （1.3.2）

指数曲線

p.27

●課題1.3

細胞が１日に６%増加するものとするとき

（ｃ） ６倍になるのは何日後？

当初の考え方

６倍は600%、１日に6%増加、600 /6＝100、100日後（誤り）

指数曲線モデルを使用

$$y_0 = 1, \qquad y_x = 6, \qquad b = 1.06$$

$$\log(6) = \log(1) + \log(1.06)x \qquad (1.3.2)$$

$$x = \frac{\log(6) - \log(1)}{\log(1.06)} = \frac{\log(6) - 0}{\log(1.06)} = 30.7$$

30.7日（正解）

モデル式さえ理解していれば簡単に解ける

細胞の増殖ではロジスティック曲線などが適す（§1.4）

$$y_x = y_0 b^x \qquad (1.3.1)$$

$$\log(y_x) = \log(y_0) + \log(b)x \qquad (1.3.2)$$

指数曲線

●指数曲線モデルの特徴

xと共にyが増加するモデル

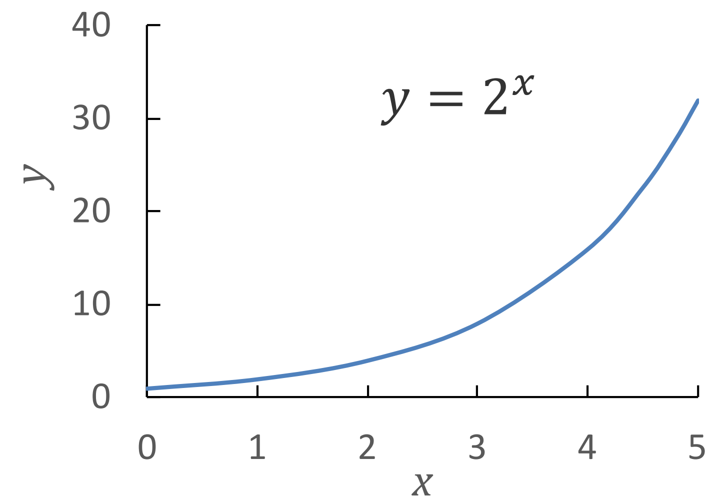
$$y_x = y_0 b^x \quad (b > 1) \qquad (1.3.1)$$

指数関数の定義
$b > 0, b \neq 1$

例　$y_0 = 1, b = 2$

$y_1 = 1 \times 2^1 = 2$

$y_2 = 1 \times 2^2 = 4$



xと共にyが減少するモデル

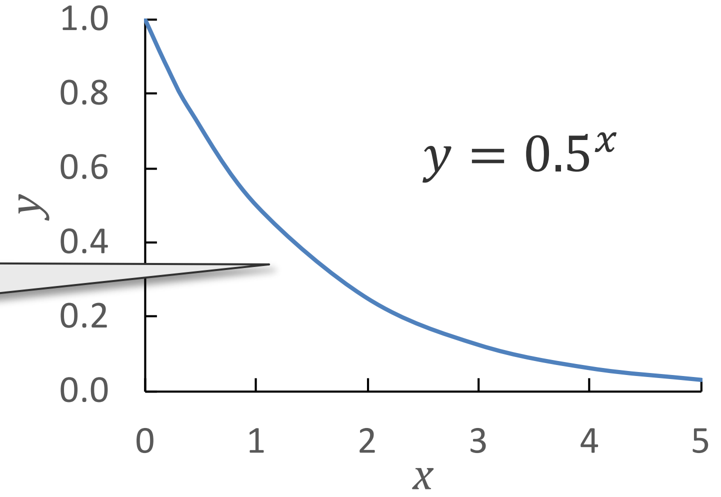
$$y_x = y_0 b^x \quad (0 < b < 1) \qquad (1.3.1)$$

例　$y_0 = 1, b = 0.5$

$y_1 = 1 \times 0.5^1 = 0.5$

$y_2 = 1 \times 0.5^2 = 0.25$

これ以降
このモデルに限定



指数曲線

p.27

●指数曲線モデルの特徴

$y_x = 100 \times 0.9^x$

$0 < b < 1$

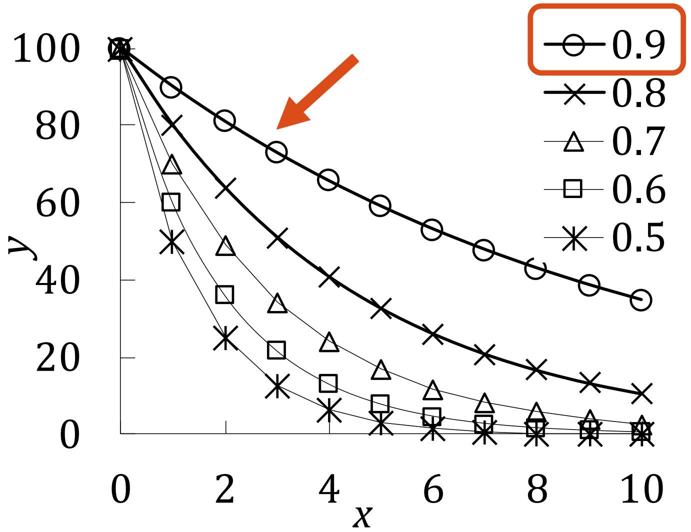
$y_0 = 100 \times 0.9^0 = 100$

$y_1 = 100 \times 0.9^1 = \ \ 90.0$

$y_2 = 100 \times 0.9^2 = \ \ 81.0$

$y_3 = 100 \times 0.9^3 = \ \ 72.9$

表示1.3.1



始点は $y_0 = 100$ （初期値）

x の増加とともに

y は公比 b で等比級数的に減少（$0 < b < 1$）

y はだんだん $y = 0$ に接近

b を 0.9 から小さくすると、減少の度合いは増加

指数曲線

●指数曲線モデルの特徴

$$y_x = y_0 b^x \qquad (0 < b < 1) \qquad (1.3.1)$$

$$\ln(y_x) = \ln(y_0) + \ln(b)\, x \qquad (1.3.3)$$

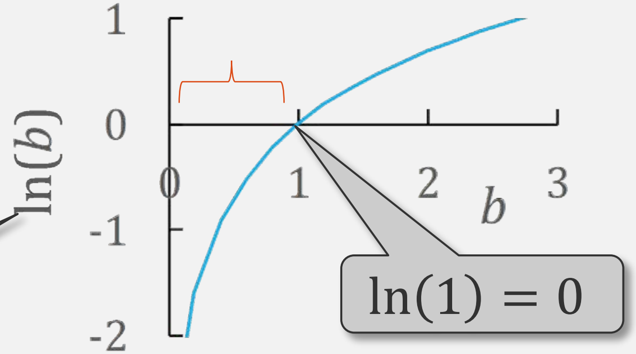
$$Y \quad = \quad Y_0 \quad + \quad Bx \qquad (1.3.4)$$

$$\ln(b) = B \quad (B < 0)$$

比例定数

これ以降、自然対数に限定

$0 < b < 1$
$\ln(b) = B < 0$

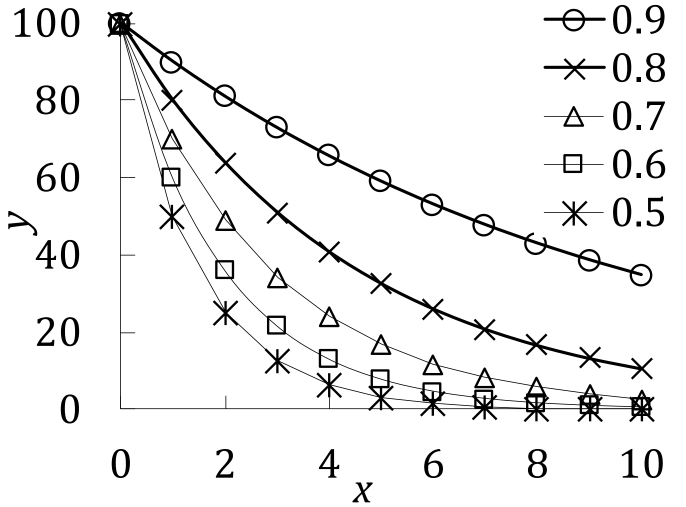


B

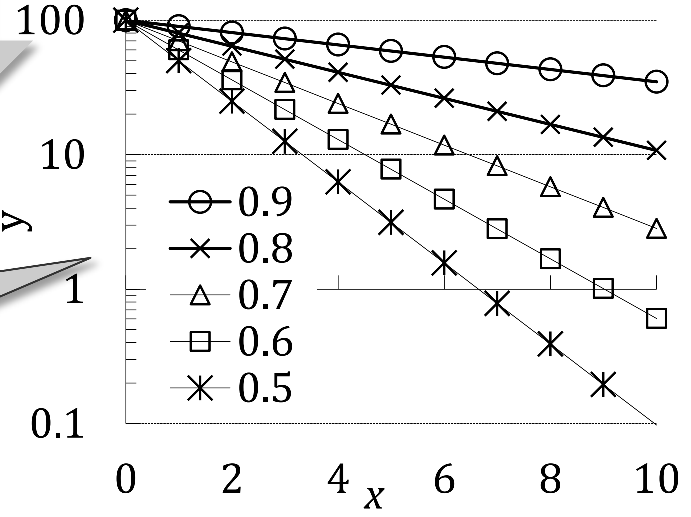
$\ln(1) = 0$

表示1.3.1

縦軸を対数目盛にすると直線になる



対数目盛



常用対数目盛り

指数曲線

●指数曲線モデルの特徴

$$y_x = y_0 b^x \qquad (0 < b < 1) \qquad (1.3.1)$$

$$\ln(y_x) = \ln(y_0) + \ln(b)\,x \qquad (1.3.3)$$

$$Y = Y_0 + Bx \qquad (1.3.4)$$

$$\ln(b) = B \quad (B < 0)$$

$$b = e^B$$

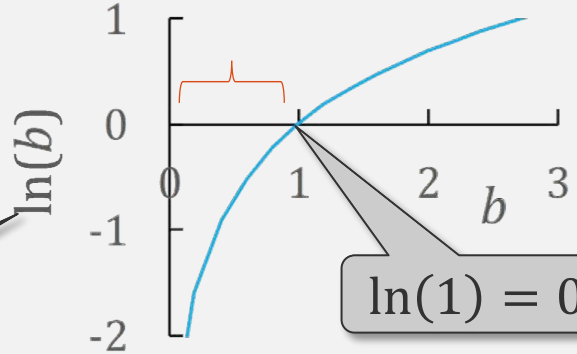
$$y_x = y_0 b^x = y_0 e^{Bx} = y_0 \exp(Bx) \qquad (1.3.5)$$

比例定数

これ以降、自然対数に限定

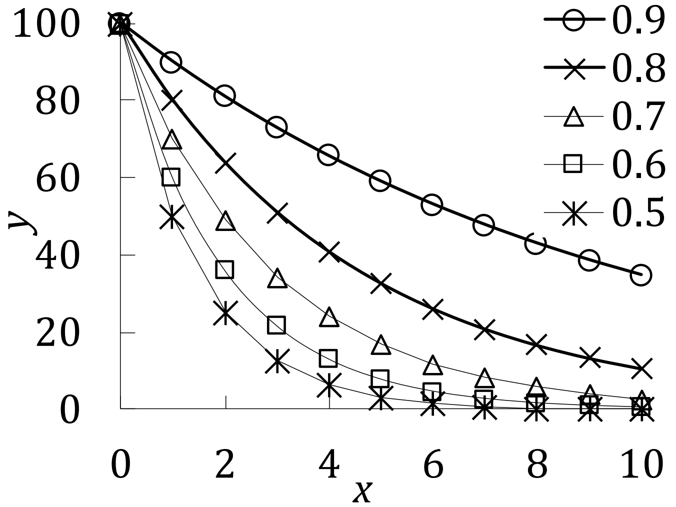
$0 < b < 1$

$\ln(b) = B < 0$

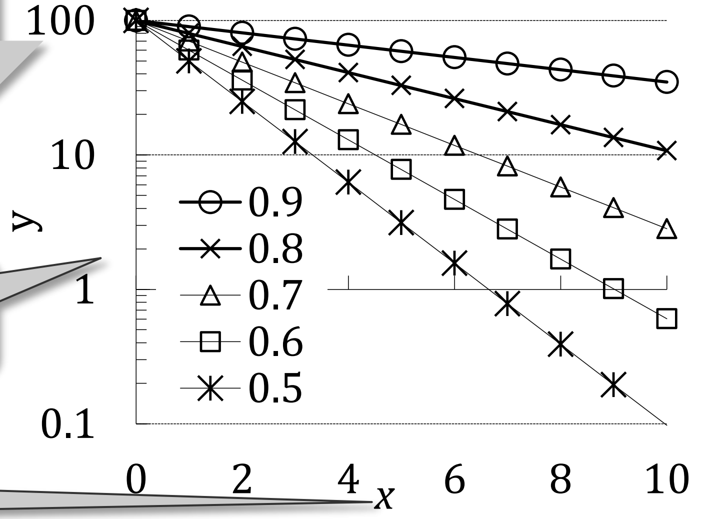


表示1.3.1

縦軸を対数目盛にすると直線になる



対数目盛



常用対数目盛り

通常の目盛り

指数曲線

●指数曲線モデルの特徴

$y_x = y_0 b^x \quad (0 < b < 1)$ (1.3.1) — 現在は、非線形回帰分析で直接解析する

$\ln(y_x) = \ln(y_0) + \ln(b)\,x$ (1.3.3)

$Y = Y_0 + Bx$ (1.3.4)

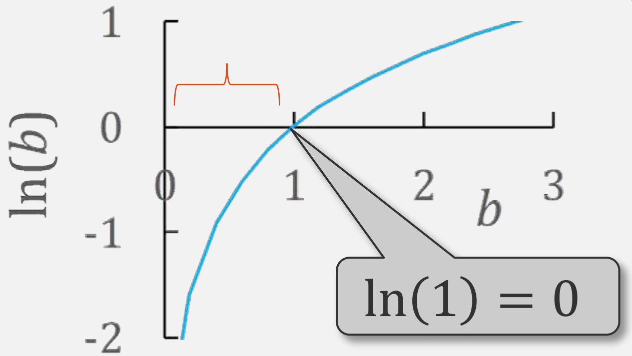
$\ln(b) = B \quad (B < 0)$

$b = e^B$

$y_x = y_0 b^x = y_0 b^{Bx} = y_0 \exp(Bx)$ (1.3.5) — 現在は、非線形回帰分析で直接解析する

パラメータ Y_0 と B に関して線形
非線形回帰分析が困難な時代のモデル変換
LINEST 関数、JMP の「モデルのあてはめ」で
解が求められる（過去の解析方法）

$0 < b < 1$
$\ln(b) = B < 0$



p.28

（2） 半減期

指数曲線モデルの変化の程度（減少する程度）
消失量、消失率、消失速度、消失速度定数

指数曲線モデルの変化の程度（減少する程度）

p.28

●事例 1

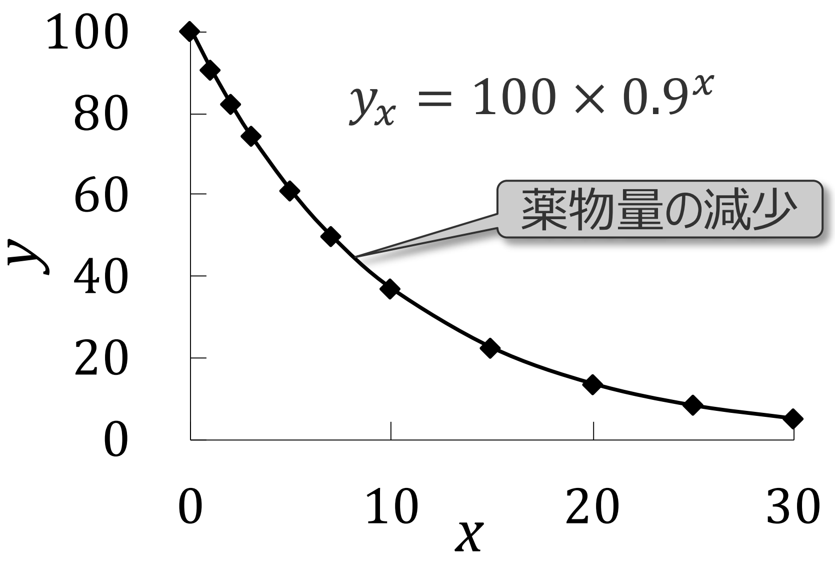
薬物を注射で血液中に投与すると、代謝や排泄により、
血液中の薬剤は投与直後から時間とともに徐々に消失する

$$y_x = y_0 \times b^x = y_0 \exp(Bx)$$
$$B = \ln(b) \qquad (1.3.5)$$

初期の血液中の薬物量を100 mg、単位時間に血液中の薬物量の10%が消失（消失率10%）
x 時間後の血液中の薬物量を y_x とする → 式(1.3.5)

$$y_0 = 100 \text{ mg}$$
$$y_1 = 100 \times 0.9^1 = 90 \text{ mg}$$
$$y_2 = 100 \times 0.9^2 = 81 \text{ mg}$$
$$y_x = 100 \times 0.9^x$$

$$B = \ln(b) = \ln(0.9) = -0.10536$$
$$y_x = y_0 \exp(Bx) = 100 \times \exp(-0.10536x)$$



指数曲線モデルの変化の程度（減少する程度）

p.29

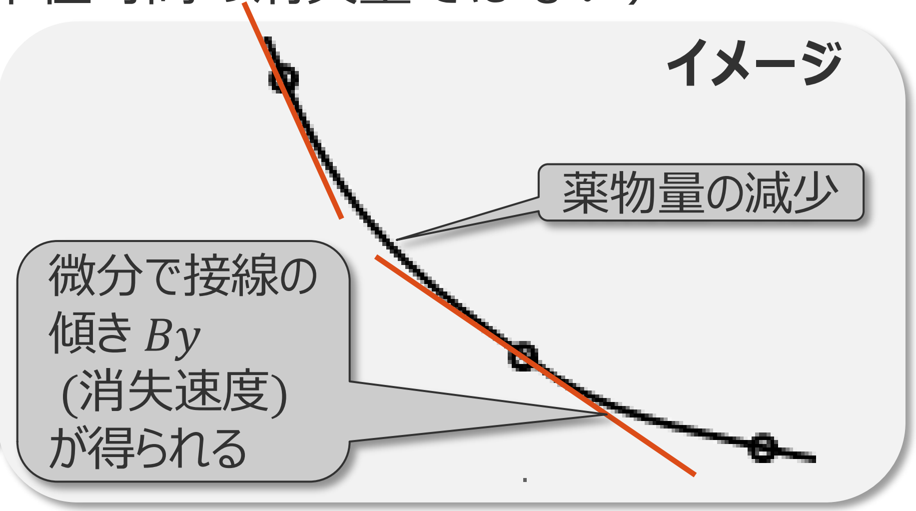
●消失量、消失率、消失速度、消失速度定数

時間 x における薬物の消失速度：式(1.3.5) を x で微分　（単位時間の消失量ではない）

$$y = y_0 b^x = y_0 \exp(Bx)$$

$$\frac{dy}{dx} = B y_0 \exp(Bx) = By \qquad (1.3.6)$$

消失速度



血液中の薬物量の10%が消失する場合

$$y_x = 100 \times 0.9^x = 100\exp(-0.1053x)$$

$B = \ln(0.9)$
$= -0.1053$

$$y_0 = 100, \qquad By = -0.1053 \times 100 = -10.536$$

$$y_1 = 90, \qquad By = -0.1053 \times 90 = -9.482$$

$$y_2 = 81, \qquad By = -0.1053 \times 81 = -8.534$$

血中の薬物量 y の減少に伴って消失速度は低下

$$y_x = y_0 \times b^x = y_0 \exp(Bx)$$

$$B = \ln(b) \qquad (1.3.5)$$

指数曲線モデルの変化の程度（減少する程度）

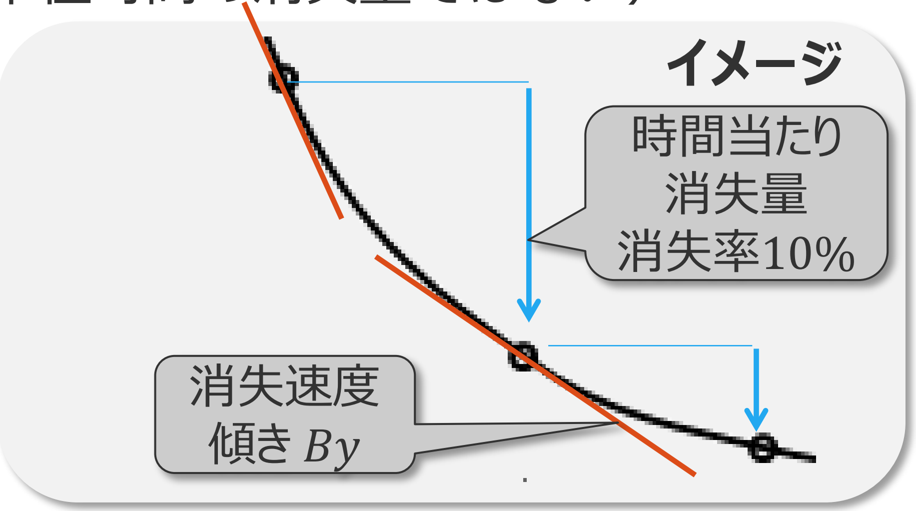
●消失量、消失率、消失速度、消失速度定数

時間 x における薬物の消失速度：式(1.3.5) を x で微分　（単位時間の消失量ではない）

$$y = y_0 b^x = y_0 \exp(Bx)$$

$$\frac{dy}{dx} = By_0 \exp(Bx) = By \qquad (1.3.6)$$

消失速度



血液中の薬物量の10%が消失する場合

$$y_x = 100 \times 0.9^x = 100\exp(-0.1053x)$$

$$y_0 = 100, \qquad By = -0.1053 \times 100 = -10.536$$

$$y_1 = 90, \qquad By = -0.1053 \times 90 = -9.482$$

$$y_2 = 81, \qquad By = -0.1053 \times 81 = -8.534$$

x=0 から 1 時間後の消失量と消失率
$100 - 90 = 10$,　$10/100 = 0.10$, 10%

x=1 から 1 時間後の消失量と消失率
$90 - 81 = 9$,　$9/90 = 0.10$, 10%

血中の薬物量 y の減少に伴って消失速度は低下

指数曲線モデルの変化の程度（減少する程度）

p.29

●消失量、消失率、消失速度、消失速度定数

時間 x における薬物の消失速度：式(1.3.5) を x で微分　（単位時間の消失量ではない）

$$y = y_0 b^x = y_0 \exp(Bx)$$

$$\frac{dy}{dx} = By_0 \exp(Bx) = By \qquad (1.3.6)$$

消失速度

血液中の薬物量の10%が消失する場合

$$y_x = 100 \times 0.9^x = 100\exp(-0.1053x)$$

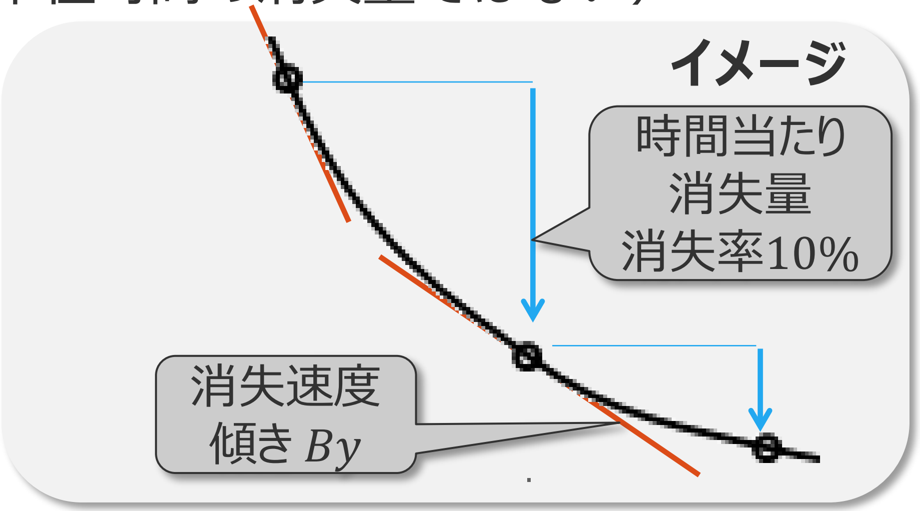
$y_0 = 100,\quad By = -0.1053 \times 100 = -10.536$

$y_1 = 90,\quad By = -0.1053 \times 90 = -9.482$

$y_2 = 81,\quad By = -0.1053 \times 81 = -8.534$

x=0 から 1 時間後の消失量と消失率
$100 - 90 = 10,\quad 10/100 = 0.10, 10\%$

x=1 から 1 時間後の消失量と消失率
$90 - 81 = 9,\quad 9/90 = 0.10, 10\%$



血中の薬物量 y の減少に伴って消失速度 By は低下

B は時刻 x における変化率を表す消失速度定数（比例定数）

半減期

●事例２

初期の薬物量 $y_0 = 100$ mg、消失速度定数 $B = -0.1$、時間 $x = 0 \sim 30$ の血中の薬物量 y を計算

$$y_x = 100 \times \exp(-0.1x)$$

これまでの事例　$b = 0.9$

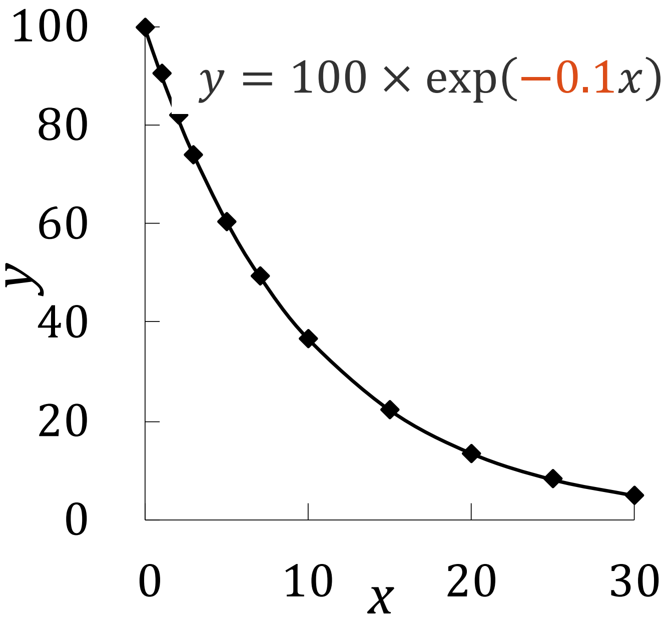
$y_x = 100 \times 0.9^x = 100\exp(-0.1053x)$

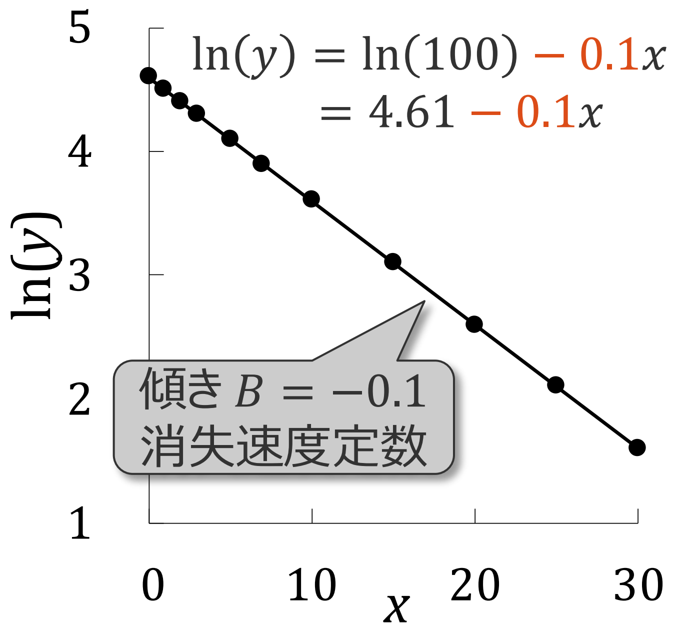
$$y_1 = 100 \times \exp(-0.1 \times 1) = 90.48$$

$y_1 = 100 \times 0.9 = 90$ の計算は誤り

表示1.3.2
静脈内投与後の
血液中薬物量の
時間推移

x	y	$\ln(y)$
0	100.00	4.605
1	90.48	4.505
2	81.87	4.405
3	74.08	4.305
5	60.65	4.105
7	49.66	3.905
10	36.79	3.605
15	22.31	3.105
20	13.53	2.605
25	8.21	2.105
30	4.98	1.605





半減期

●血中の薬物量、放射能の減衰

放射性原子の放射能の減衰曲線を表わす場合にも利用

減衰速度を表すのに半減期 x_{50}（$y = y_0/2$ になる x）を用いる（単位は hr, day など）

$$y_x = y_0 b^x = y_0 \exp(Bx) \qquad (1.3.5)$$

$$y_0/2 = y_0 \exp(Bx_{50})$$

$y = y_0/2$ になる xを x_{50} とする

$$0.5 = \exp(Bx_{50}) = e^{Bx_{50}}$$

$\ln(e^{Bx_{50}}) = Bx_{50} \times \ln e = Bx_{50}$

$$\ln(0.5) = Bx_{50}$$

$$x_{50} = \ln(0.5)/B \qquad (1.3.7)$$

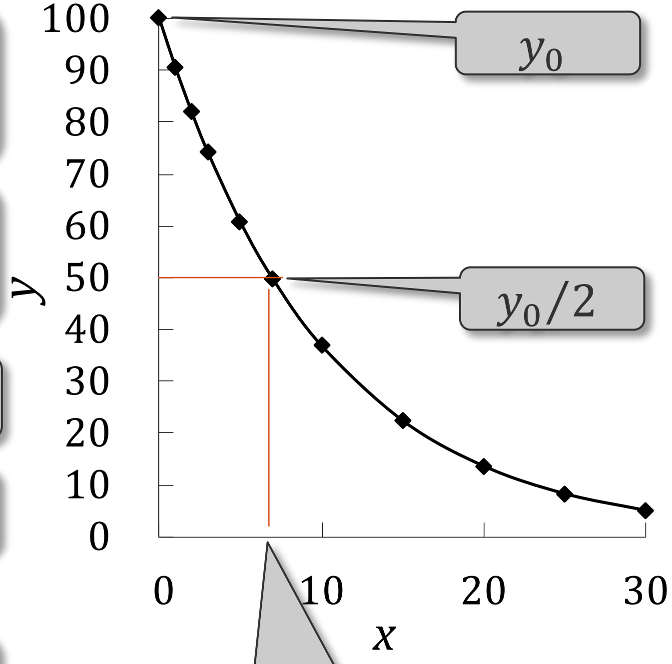
消失速度定数のみで算出

$$B = \ln(0.5)/x_{50}$$

式（1.3.5）に代入

$$y = y_0 \exp\left(\ln(0.5) \times \frac{x}{x_{50}}\right) \qquad (1.3.8)$$

半減期 x_{50} を直接求められるモデル式



$x_{50} = \ln(0.5)/B$

半減期

●血中の薬物量、放射能の減衰

放射性原子の放射能の減衰曲線を表わす場合にも利用

減衰速度を表すのに半減期 x_{50}（$y = y_0/2$ になる x）を用いる（単位は hr, day など）

$$y_x = y_0 b^x = y_0 \exp(Bx) \qquad (1.3.5)$$

$$y_0/2 = y_0 \exp(Bx_{50})$$

$$0.5 = \exp(Bx_{50}) = e^{Bx_{50}}$$

$$\ln(0.5) = Bx_{50}$$

$$x_{50} = \ln(0.5)/B \qquad (1.3.7)$$

$$B = \ln(0.5)/x_{50}$$

$$y = y_0 \exp\left(\ln(0.5) \times \frac{x}{x_{50}}\right) \qquad (1.3.8)$$

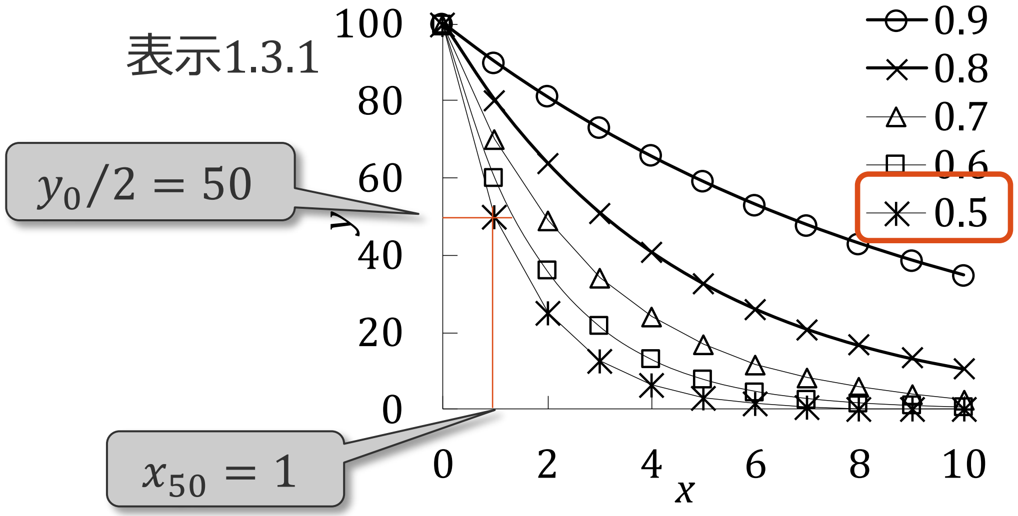
$b = 0.5$ のとき

$B = \ln(b) = \ln(0.5)$

$x_{50} = \ln(0.5)/\ln(0.5) = 1$ （1.3.7）

すなわち、$b = 0.5$ のとき半減期は 1

表示1.3.1



半減期

●血中の薬物量、放射能の減衰

放射性原子の放射能の減衰曲線を表わす場合にも利用

減衰速度を表すのに半減期 x_{50}（$y = y_0/2$ になる x）を用いる

$$y_x = y_0 b^x = y_0 \exp(Bx) \qquad (1.3.5)$$

$$y_0/2 = y_0 \exp(Bx_{50})$$

$$0.5 = \exp(Bx_{50}) = e^{Bx_{50}}$$

$$\ln(0.5) = Bx_{50}$$

$$x_{50} = \ln(0.5)/B \qquad (1.3.7)$$

$$B = \ln(0.5)/x_{50}$$

$$y = y_0 \exp\left(\ln(0.5) \times \frac{x}{x_{50}}\right) \qquad (1.3.8)$$

消失速度定数 B を正の値とする場合

$$y_x = y_0 b^x = y_0 \exp(-Bx) \qquad (1.3.5)$$

$$y_0/2 = y_0 \exp(-Bx_{50})$$

$$0.5 = \exp(-Bx_{50}) = e^{-Bx_{50}}$$

$$\ln(0.5) = -Bx_{50}, \quad \ln 2 = Bx_{50}$$

$$x_{50} = \ln(2)/B = 0.693/B \qquad (1.3.7)$$

$$B = \ln(2)/x_{50}$$

$$y = y_0 \exp\left(-\ln(2) \times \frac{x}{x_{50}}\right) \qquad (1.3.8)$$

（3）下限／上限のある場合の指数曲線

指数曲線モデルの拡張（実用的なモデル）

Excel ソルバーによる解析

JMP［非線形回帰］による解析

下限／上限のある場合の指数曲線

p.31

●事例３

高血圧患者に降圧剤を投与すると、血圧が低下して正常血圧（y_∞）に近づく
投与後の時間の経過と血圧の変化を考える　　　　　　　　　　（0 に近づくのではない）

$$y = y_0 b^x \qquad (1.3.3)$$

$$= y_0 \exp(\ln(b)\, x)$$

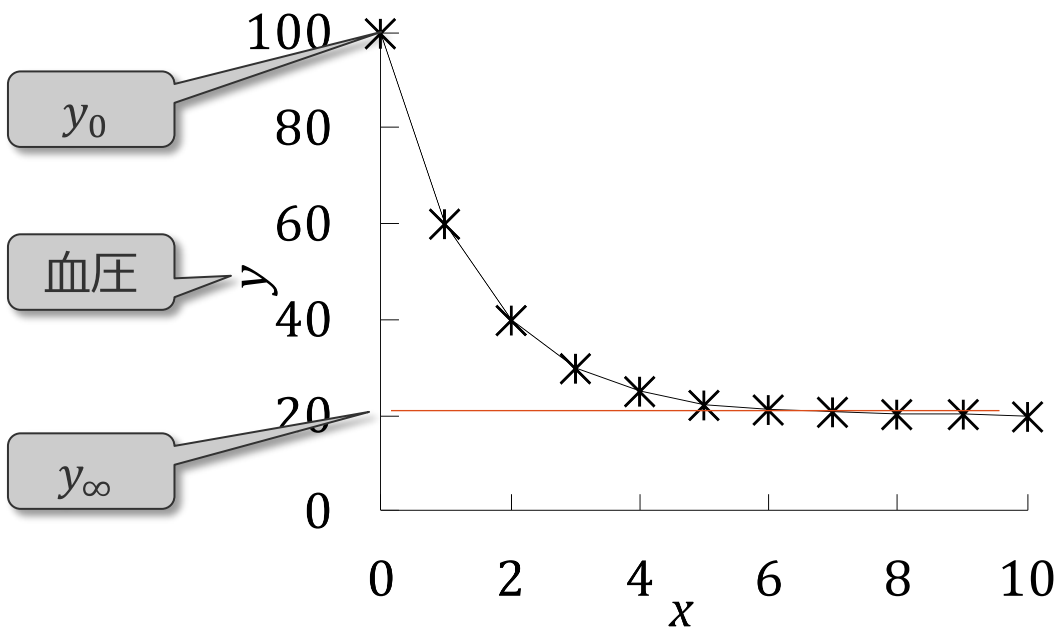
$$= y_0 \exp(Bx) \qquad (1.3.5)$$

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty) b^x$$

$$= y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(\ln(b)\, x)$$

$$= y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

$$0 < b < 1 \qquad \ln(b) = B < 0$$



下限／上限のある場合の指数曲線

p.31

●モデルの特徴

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

$y_\infty = 0$ の場合

$$y = 0 + (y_0 - 0)\exp(Bx)$$
$$= y_0\exp(Bx) \qquad (1.3.5)$$

$x = 0$ の場合

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty) \times 1 = y_0$$

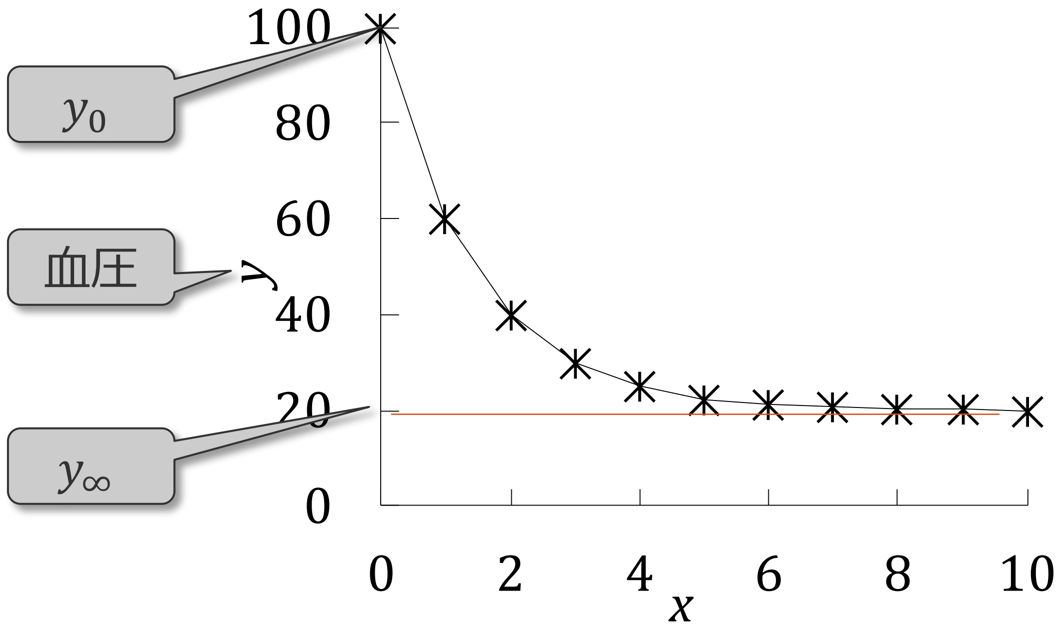
$x = \infty$ の場合

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty) \times 0 = y_\infty$$

$\exp(0) = e^0 = 1$

$\exp(Bx) = \exp(-0.9x) = e^{-0.9x} = \dfrac{1}{e^{0.9x}}$

$x \to \infty \qquad \exp(Bx) \to 0$



下限／上限のある場合の指数曲線

●モデルの特徴

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

$$(B < 0)$$

$y_\infty > y_0$

$y = 70 + (30 - 70)\exp(\ln(0.5)\,x)$ □

$y = 70 + (30 - 70)\exp(\ln(0.8)\,x)$ △

$y_\infty < y_0$

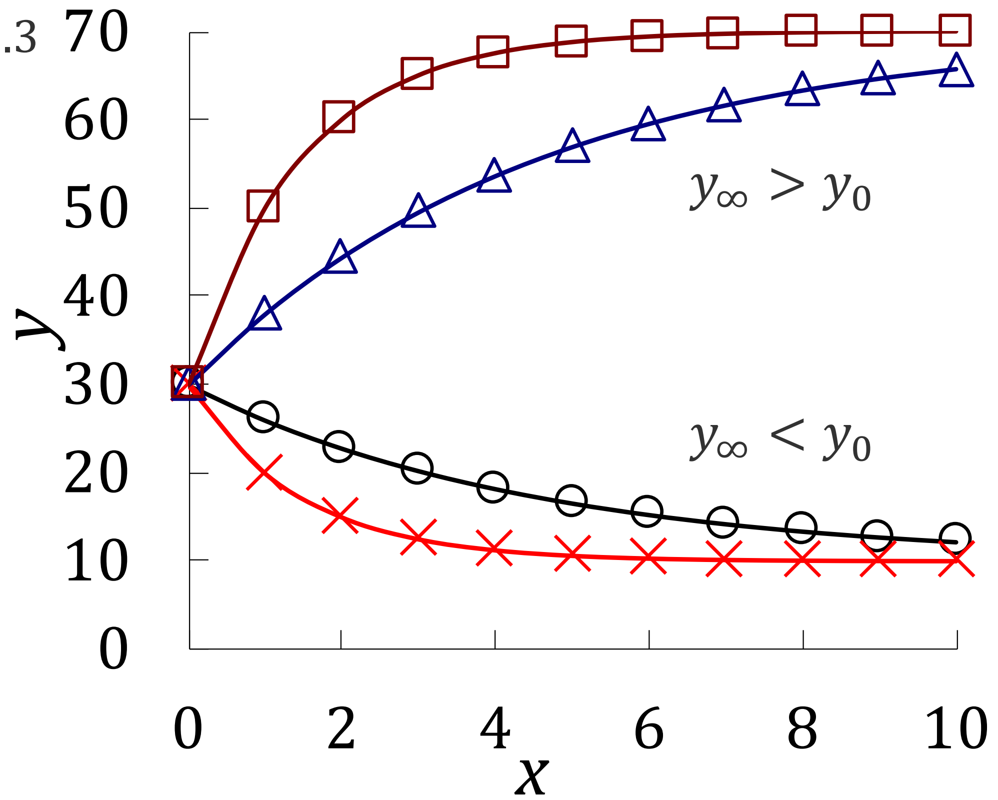
$y = 10 + (30 - 10)\exp(\ln(0.8)\,x)$ ○

$y = 10 + (30 - 10)\exp(\ln(0.5)\,x)$ ×

x の増加とともに y が初期値から減少または増加して、ある値に近づいていく現象に適用できる

適用範囲はかなり広い

表示 1.3.3



下限／上限のある場合の指数曲線

p.31

●半減期

b = 0.5 のとき半減期は $x_{50} = 1$
（p.30）

$y_\infty > y_0$

$y = 70 + (30 - 70)\exp(\ln(0.5)\,x)$ □

$$50 = \frac{30 + 70}{2} = \frac{y_0 + y_\infty}{2}$$

$y_\infty < y_0$

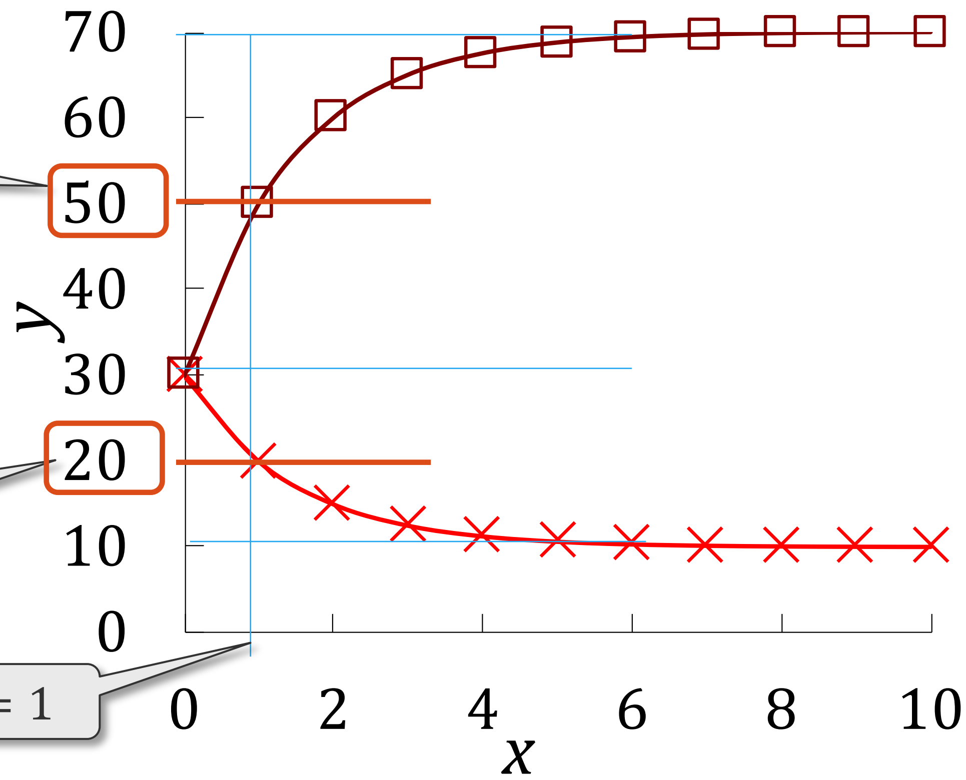
$y = 10 + (30 - 10)\exp(\ln(0.5)\,x)$ ×

$$20 = \frac{30 + 10}{2} = \frac{y_0 + y_\infty}{2}$$

したがって、

半減期 x_{50} は $y = (y_0 + y_\infty)/2$ になる x の値

表示 1.3.3



下限／上限のある場合の指数曲線

●指数曲線のモデル式

$y = y_0 b^x$ （1.3.1）・・・基本形、減少

$y = y_0 \exp(Bx)$ （1.3.5）・・・基本形、減少

$y = y_0 \exp\left(\ln(0.5) \times \dfrac{x}{x_{50}}\right)$ （1.3.8）・・・半減期をパラメータから推定可、減少

$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx)$ （1.3.9）・・・上限と下限を設定、減少・増加に対応

何を知りたいかによって，式の形を工夫する

ただし、$(0 < b < 1)$ $(B < 0)$

これらのモデルは、ExcelのソルバーJMP［非線形回帰］で解く

（式（1.3.9）は両辺を対数変換しても線形モデルにならないので、非線形回帰でないと解けない）

下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

p.32

● Excelファイルの読み込みと表示

Excel ファイル「改1非線形.xlsm」、名前ボックスから「表示1.3.4」（Fig13_04）を選択

● データ

２変数の観測値（７点）

x が大きくなると y の値が飽和し，上限があるように見える

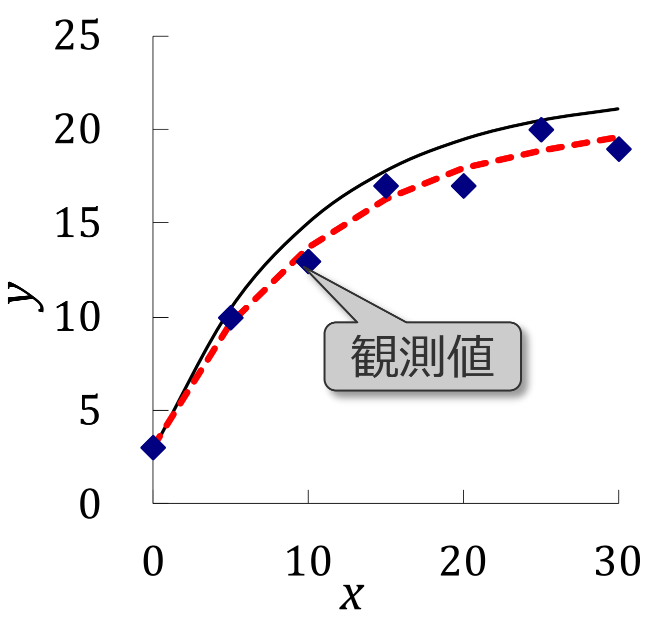
x と y の間には，指数曲線モデルがあてはまると思われる

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

表示1.3.4 データとソルバーによる解（指数曲線のあてはめ）

	J	K	L	M	N
6	x	y	yhat	yhat	
7	0	3.0	3.00	3.07	
8	5	10.0	10.48	9.62	
9	10	13.0	15.01	13.72	
10	15	17.0	17.76	16.28	
11	20	17.0	19.43	17.89	
12	25	20.0	20.44	18.90	
13	30	19.0	21.05	19.53	
14					
15		yinf	22.000	20.580	
16		y0	3.000	3.072	
17		B	-0.100	-0.094	
18		S	15.157	3.466	
19			初期値	結果	

O



下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

p.32

●Exce ソルバーによる解析

前節（§1.2）で説明してきた非線形回帰と同じ手順

「Excelソルバーによる回帰式の解析」 p.7

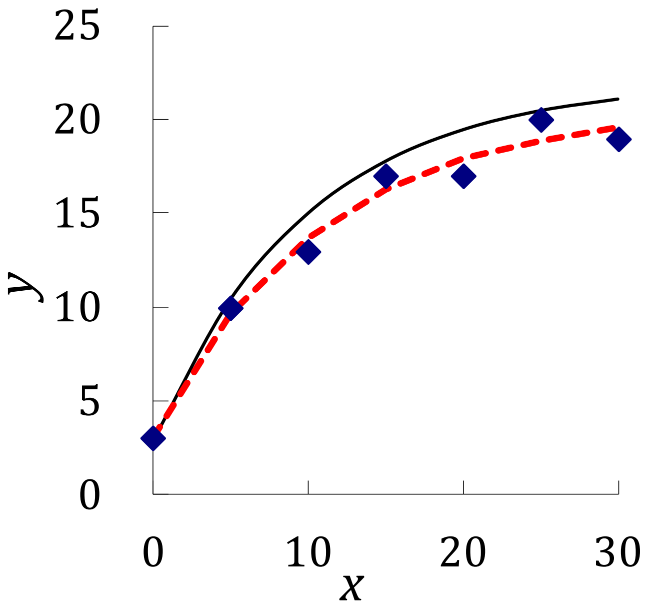
「ソルバーによる逆推定の解析」 p.13

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の２乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

表示1.3.4 データとソルバーによる解（指数曲線のあてはめ）

	J	K	L	M	N
6	x	y	yhat	yhat	
7	0	3.0	3.00	3.07	
8	5	10.0	10.48	9.62	
9	10	13.0	15.01	13.72	
10	15	17.0	17.76	16.28	
11	20	17.0	19.43	17.89	
12	25	20.0	20.44	18.90	
13	30	19.0	21.05	19.53	
14					
15		yinf	22.000	20.580	
16		y0	3.000	3.072	
17		B	-0.100	-0.094	
18		S	15.157	3.466	
19			初期値	結果	

O



下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

(1) モデル式の選択

モデル式

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

(2) パラメータ初期値の設定

$y_0 = y0 = 3$

infinity

$y_\infty = yinf = 22$

$10 = 22 + (3 - 22)\exp(B \times 5)$

$\exp(5B) = (10 - 22)/(3 - 22)$

$= 0.6316$

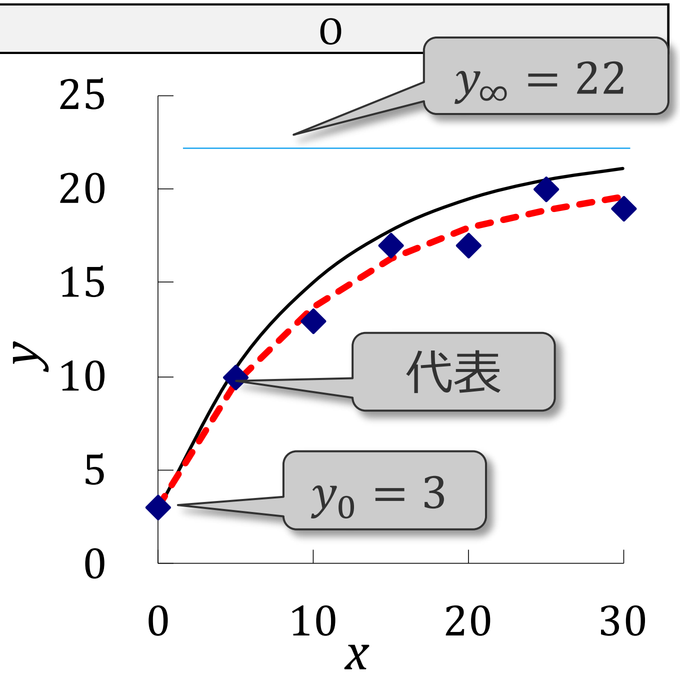
$B = \ln(0.6316)/5 = -0.1$

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値 − 予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

表示1.3.4 データとソル

	J	K	L	M	N
6	x	y	yhat	yhat	
7	0	3.0	3.00	3.07	
8	5	10.0	10.48	9.62	
9	10	13.0	15.01	13.72	
10	15	17.0	17.76	16.28	
11	20	17.0	19.43	17.89	
12	25	20.0	20.44	18.90	
13	30	19.0	21.05	19.53	
14					
15		yinf	22.000	20.580	
16		y0	3.000	3.072	
17		B	-0.100	-0.094	
18		S	15.157	3.466	
19			初期値	結果	

初期値



下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力

モデル式

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \quad (1.3.9)$$

予測値 $\hat{y}$ の計算式

パラメータ（L15:L17）を使って

y の予測値 $\hat{y}$ を L 列（L7:L13）に計算

セル L7

=L\$15 +(L\$16 – L\$15) * EXP(L\$17*\$J7)

$= y_\infty + (y_0 - y_\infty) \times \exp(B \times x)$

グラフによる初期値の確認

モデルの曲線が観測点と大きく外れる場合

初期値を修正

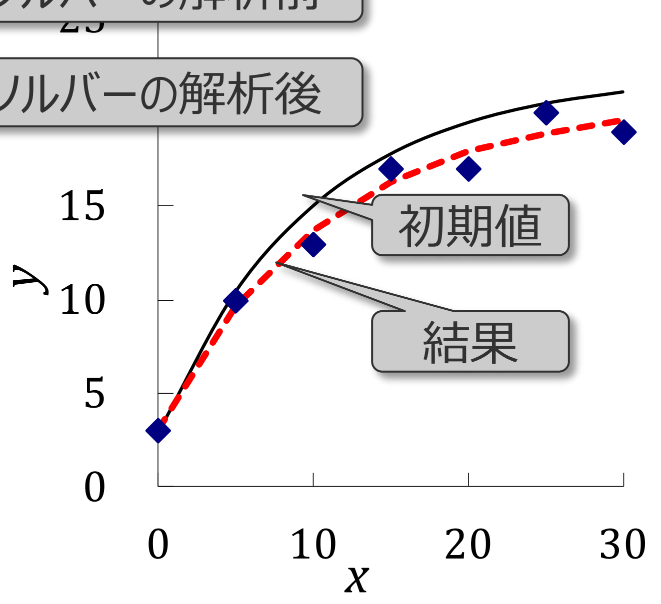
(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

表示1.3.4 データとソル

	J	K	L	M	N
6	x	y	yhat	yhat	
7	0	3.0	3.00	3.07	
8	5	10.0	10.48	9.62	
9	10	13.0	15.01	13.72	
10	15	17.0	17.76	16.28	
11	20	17.0	19.43	17.89	
12	25	20.0	20.44	18.90	
13	30	19.0	21.05	19.53	
14					
15		yinf	22.000	20.580	
16		y0	3.000	3.072	
17		B	-0.100	-0.094	
18		S	15.157	3.466	
19			初期値	結果	

ソルバーの解析前

ソルバーの解析後



下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

p.33

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の２乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

(5) 残差の２乗和 S の設定

残差 e の列を作らずにセル L18、M18で直接計算

SUMSQ 関数を配列数式として使用

$$S = \sum_{i=1}^{7} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

配列数式の入力（第１部　§1.4 ）

L18 に{ }を付けないで式を入力

式を入力後、CtrlとShiftを押しながら

Enter を押す → 式が { } で囲まれる

（テキスト脚注を参照）

セルL18：配列数式
{= SUMSQ($K7:$K13－L7:L13)}
y 列　　yhat 列

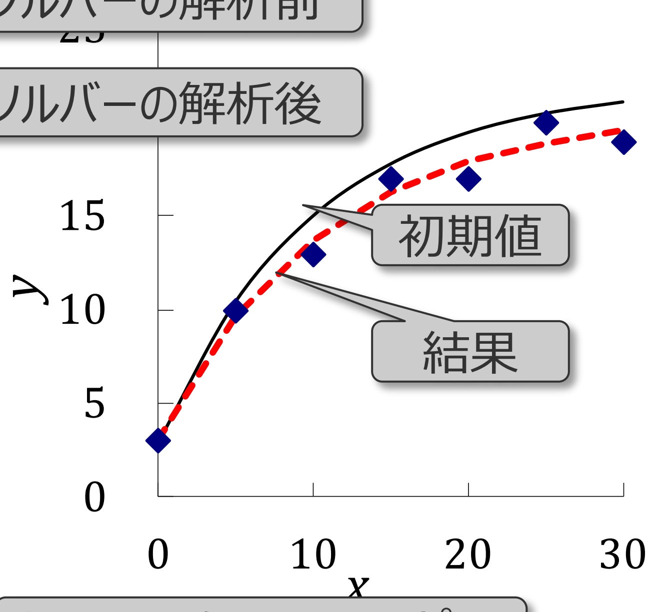
表示1.3.4 データとソル

	J	K	L	M	N
6	x	y	yhat	yhat	
7	0	3.0	3.00	3.07	
8	5	10.0	10.48	9.62	
9	10	13.0	15.01	13.72	
10	15	17.0	17.76	16.28	
11	20	17.0	19.43	17.89	
12	25	20.0	20.44	18.90	
13	30	19.0	21.05	19.53	
14					
15		yinf	22.000	20.580	
16		y0	3.000	3.072	
17		B	-0.100	-0.094	
18		S	15.157	3.466	
19					

初期値　結果

ソルバーの解析前

ソルバーの解析後



セル L18を M18 にコピー

下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

(5) 残差の 2 乗和 S の設定

残差 e の列を作らずにセル L18、M18で直接計算

SUMSQ 関数を配列数式として使用

$$S = \sum_{i=1}^{7} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

配列数式の入力（第 1 部　§1.4 ）

L18 に{ }を付けないで式を入力

式を入力後、CtrlとShiftを押しながら

Enter を押す → 式が { } で囲まれる

（テキスト脚注を参照）

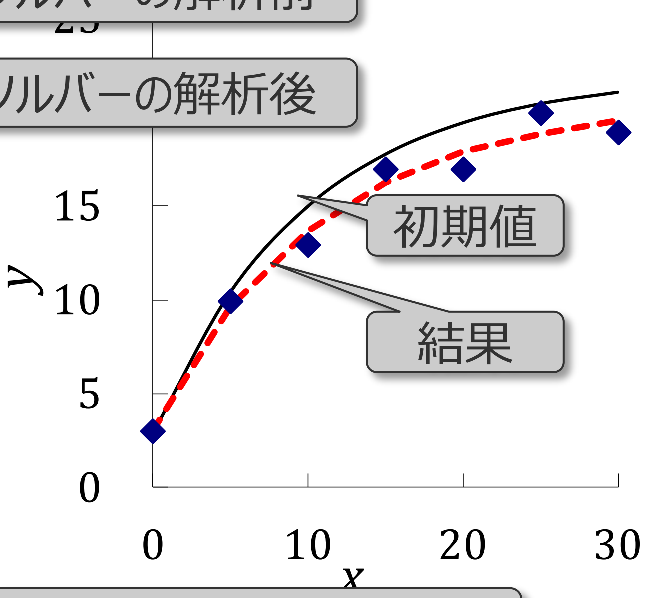
ブログ
「Excel のスピルと配列数式」
参照

表示1.3.4 データとソル

	J	K	L	M	N
6	x	y	yhat	yhat	
7	0	3.0	3.00	3.07	
8	5	10.0	10.48	9.62	
9	10	13.0	15.01	13.72	
10	15	17.0	17.76	16.28	
11	20	17.0	19.43	17.89	
12	25	20.0	20.44	18.90	
13	30	19.0	21.05	19.53	
14					
15		yinf	22.000	20.580	
16		y0	3.000	3.072	
17		B	-0.100	-0.094	
18		S	15.157	3.466	
19			初期値	結果	

ソルバーの解析前

ソルバーの解析後



セル L18を M18 にコピー

下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

（6）S を最小にするパラメータを推定

ソルバーの実習の準備

セル M15:M17 に初期値を入力

yinf=22, y0=3, B=-0.1

（または、

セル M15:M17 に L15:L17 をコピー）

↓

L列 とM列は同じになる

ソルバーの実行

［目的セルの設定］：M18

［目標値］：最小値

［変数セルの変更］：M15:M17

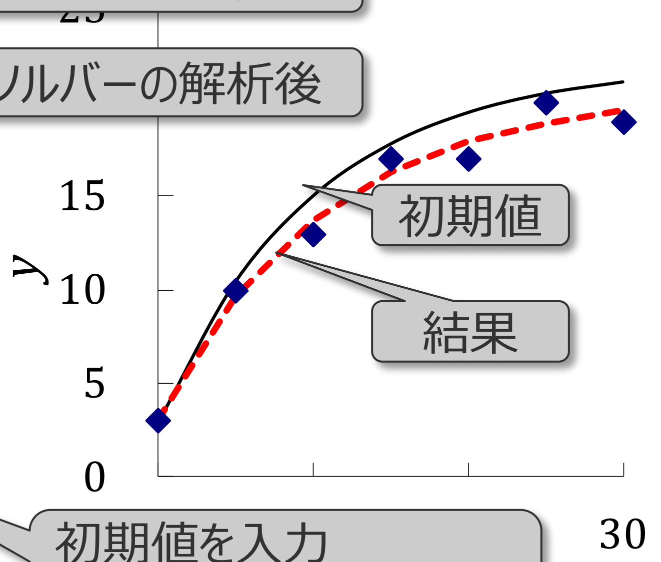
（1）モデル式（計算式）の選択
（2）パラメータ初期値の設定
（3）予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
（4）残差 e（観測値－予測値）の設定
（5）残差の 2 乗和 S の設定
（6） S を最小にするパラメータを推定

表示1.3.4 データと

	J	K	L	M
6	x	y	yhat	yhat
7	0	3.0	3.00	3.07
8	5	10.0	10.48	9.62
9	10	13.0	15.01	13.72
10	15	17.0	17.76	16.28
11	20	17.0	19.43	17.89
12	25	20.0	20.44	18.90
13	30	19.0	21.05	19.53
14				
15		yinf	22.000	20.580
16		y0	3.000	3.072
17		B	-0.100	-0.094
18		S	15.157	3.466
19			初期値	結果

ソルバーの解析前

ソルバーの解析後



初期値を入力
yinf=22, y0=3, B=-0.1

下限／上限のある場合の指数曲線：Excel ソルバー

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

（6）S を最小にするパラメータを推定

モデル式

$$y = y_{\infty} + (y_0 - y_{\infty})\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

得られたパラメータとモデルの推定式

$$y = 20.58 + (3.072 - 20.580)\exp(-0.094x)$$
$$= 20.580 - 17.508\exp(-0.094x)$$

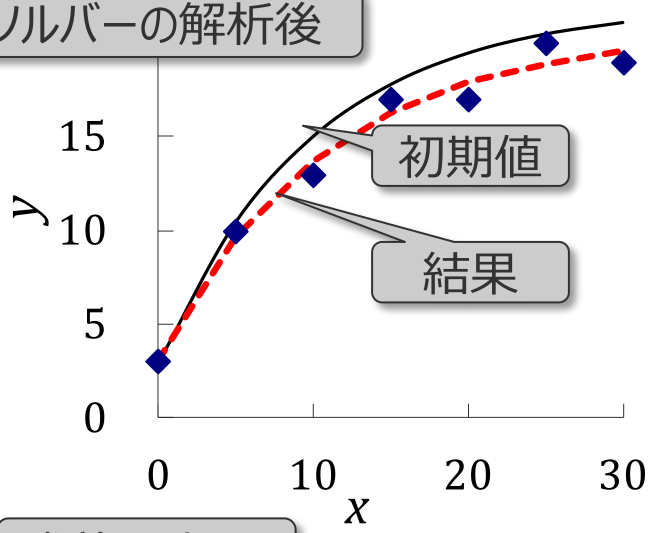
表示1.3.4 データとソル

	J	K	L	M	N
6	x	y	yhat	yhat	
	0	3.0	3.00	3.07	
	5	10.0	10.48	9.62	
	10	13.0	15.01	13.72	
	15	17.0	17.76	16.28	
11	20	17.0	19.43	17.89	
12	25	20.0	20.44	18.90	
13	30	19.0	21.05	19.53	
14					
15		yinf	22.000	20.580	
16		y0	3.000	3.072	
17		B	-0.100	-0.094	
18		S	15.157	3.466	
19			初期値	結果	

ソルバーの解析前

ソルバーの解析後

残差平方和



下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

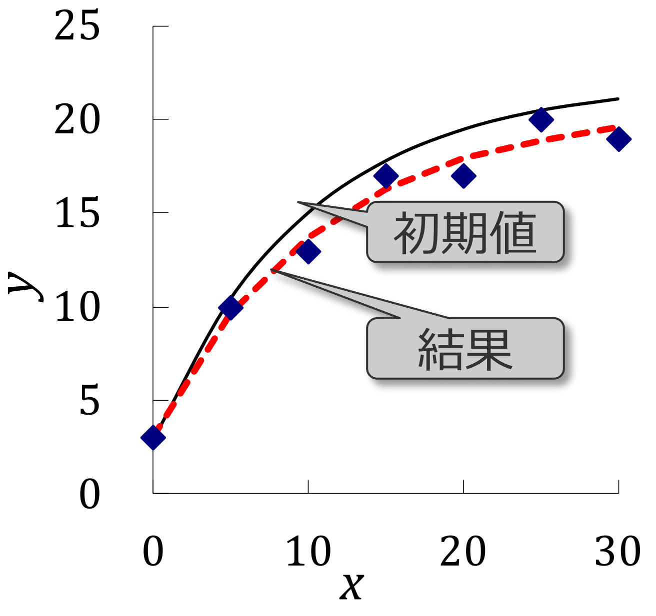
● JMP データテーブルの作成

新規に JMP のデータテーブルを作成し、
表示1.3.4 の観測値を入力（「13-指数曲線.jmp」）

	x	y
1	0	3
2	5	10
3	10	13
4	15	17
5	20	17
6	25	20
7	30	19

表示1.3.4 データとソル

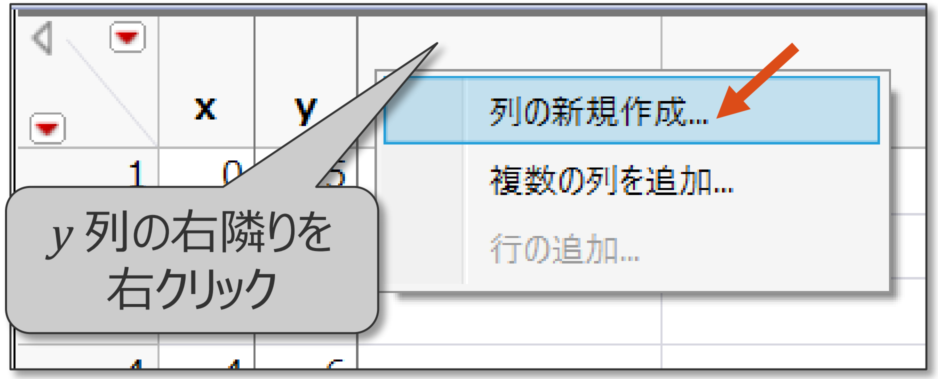
	J	K	L	M	N	O
6	x	y	yhat	yhat		
7	0	3.0	3.00	3.07		
8	5	10.0	10.48	9.62		
9	10	13.0	15.01	13.72		
10	15	17.0	17.76	16.28		
11	20	17.0	19.43	17.89		
12	25	20.0	20.44	18.90		
13	30	19.0	21.05	19.53		
14						
15		yinf	22.000	20.580		
16		y0	3.000	3.072		
17		B	-0.100	-0.094		
18		S	15.157	3.466		
19			初期値	結果		

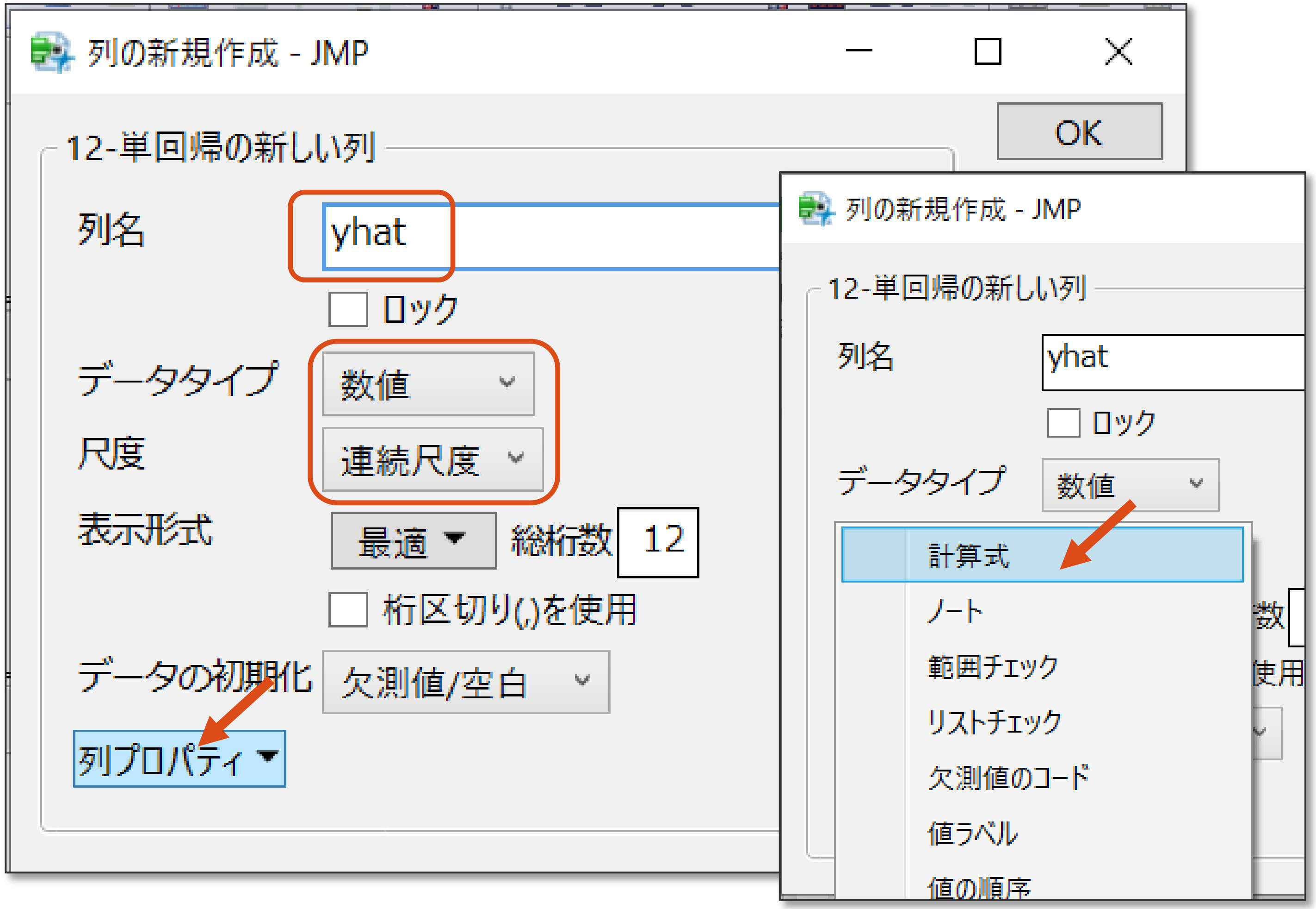


下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.34

（3）予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力





(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値 – 予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

（3）予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力

計算式エディタで、モデル式を入力

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx)$$

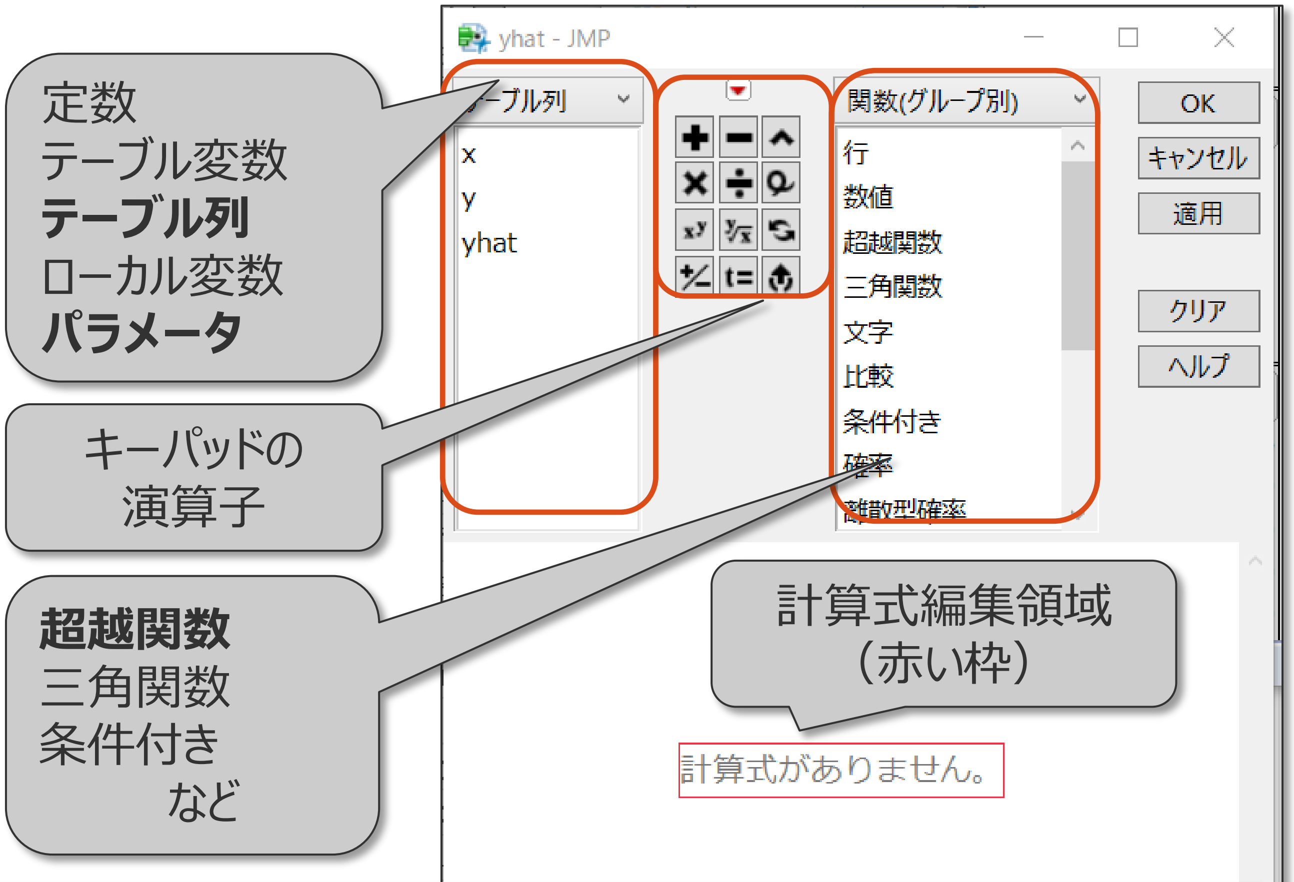
y0、yinf、Bは［パラメータ］で新規作成
同時に初期値を入力
（y0=3、yinf=22、B=－0.1）

x は［テーブル列］から選択

演算子「＋」「－」「×」は
キーパッドから選択

exp は超越関数から選択

計算式エディタ

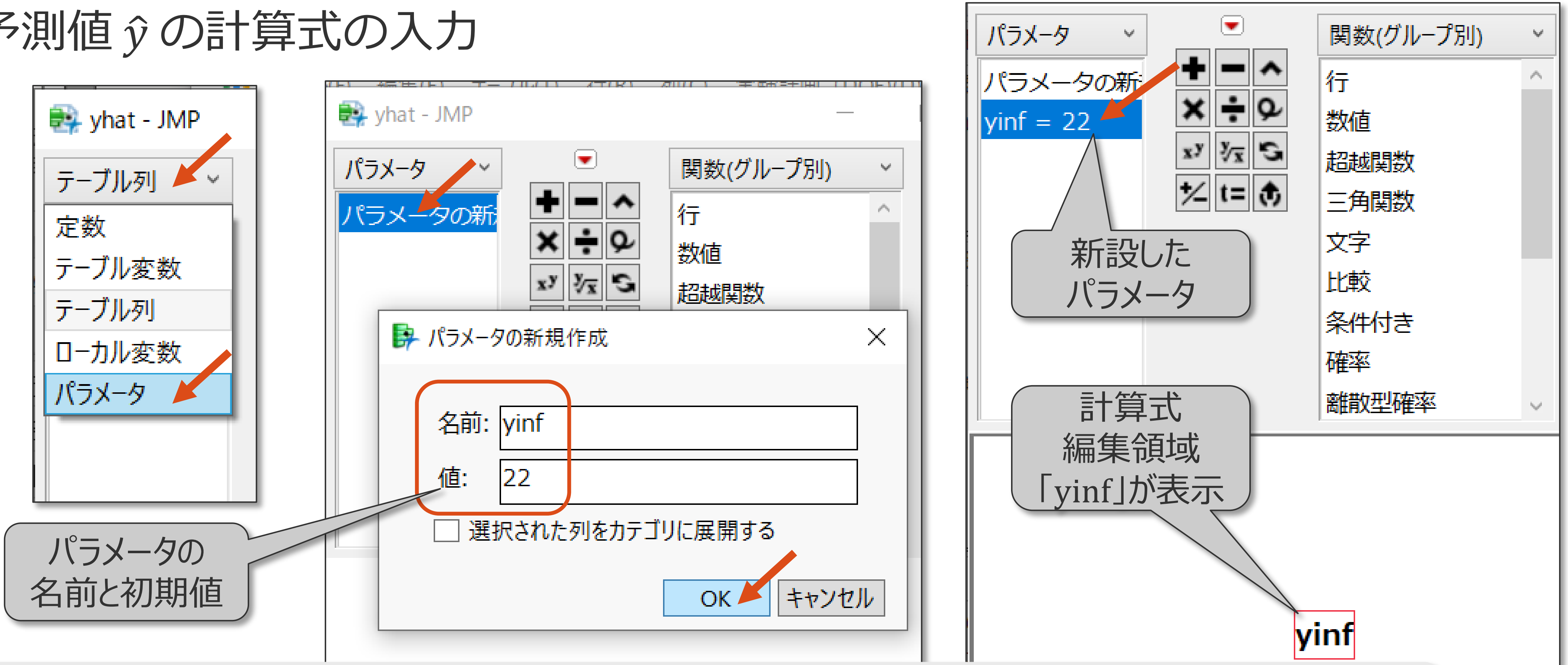


「パラメータ」、yinf、+、(、)、「パラメータ」、y0、－、yinf、(y0－yinf)の範囲をクリック、範囲が赤枠で囲まれる、×、「超越関数」、Exp、()、「パラメータ」、B、×、「テーブル列」、x

下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.34

（3）予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力



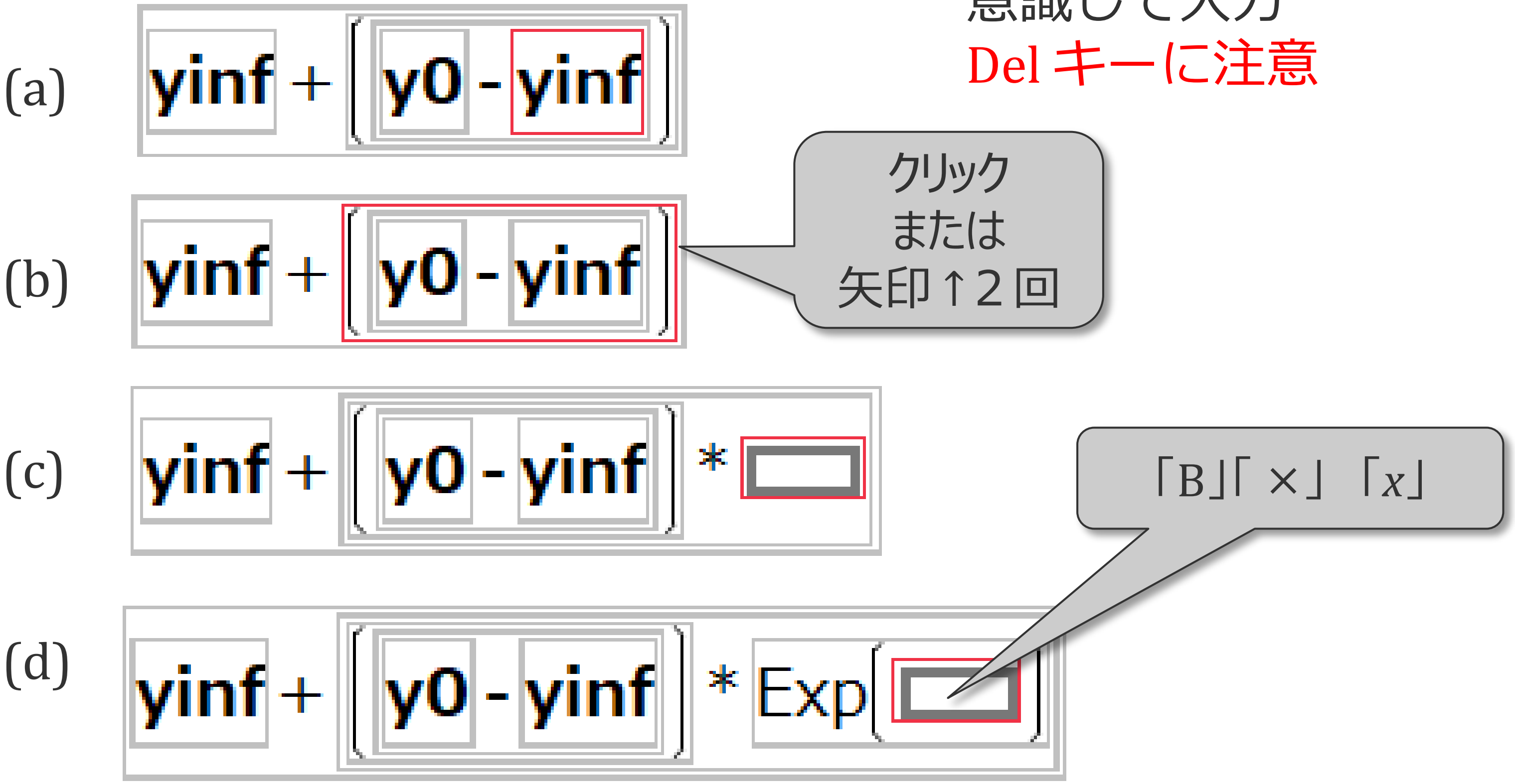
「パラメータ」、yinf、+、(、)、「パラメータ」、y0、－、yinf、(y0－yinf)の範囲をクリック、
範囲が赤枠で囲まれる、×、「超越関数」、Exp、()、「パラメータ」、B、×、「テーブル列」、x

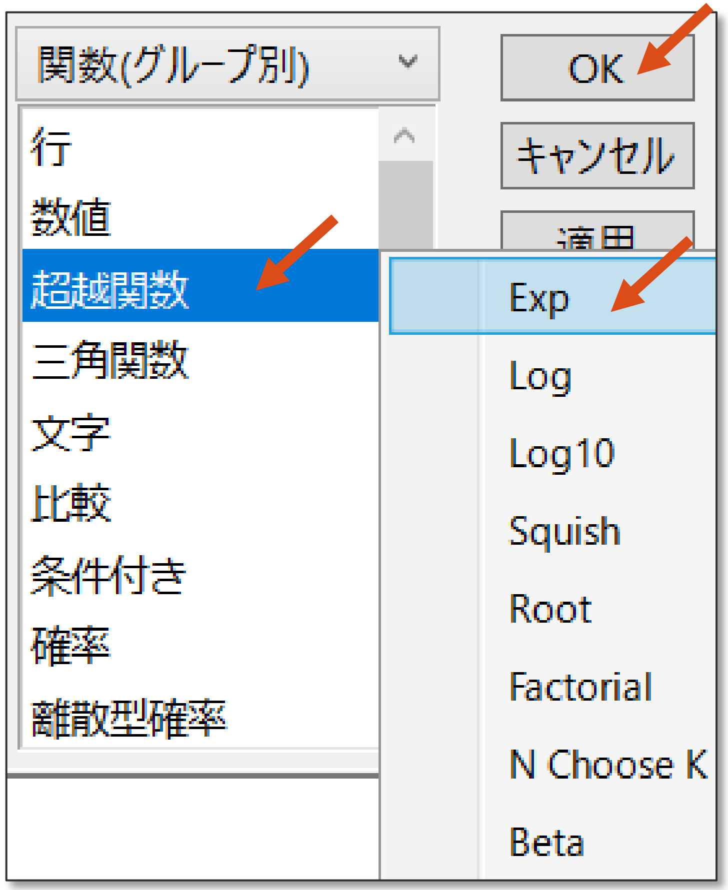
下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.34

（3）予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力

編集領域（赤枠）を
意識して入力
Del キーに注意

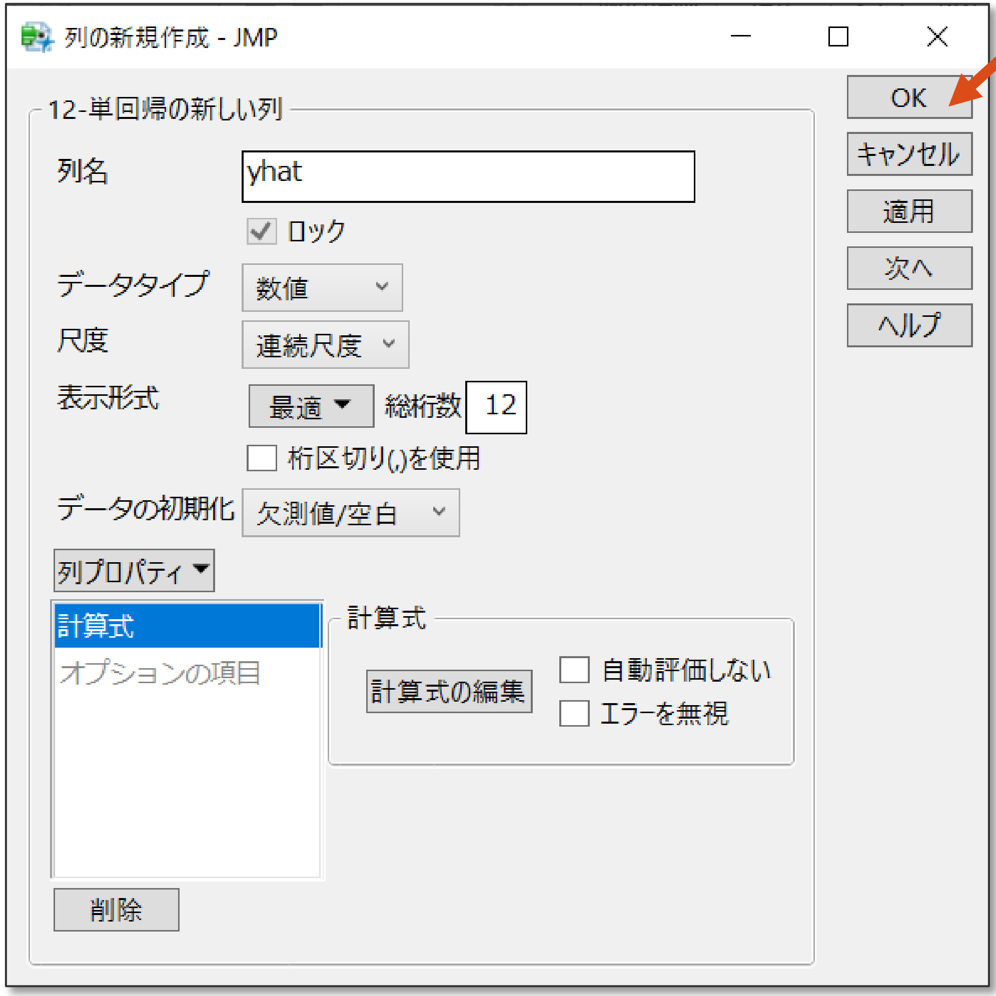




「パラメータ」、yinf、+、(、)、「パラメータ」、y0、−、yinf、(y0 − yinf)の範囲をクリック、範囲が赤枠で囲まれる、×、「超越関数」、Exp、()、「パラメータ」、B、×、「テーブル列」、x

下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力



計算式が入力された予測値 $\hat{y}$ の列が作成
JMPの「**予測式列**」

	x	y	yhat
1	0	3	3
2	5	10	10.475917465
3	10	13	15.010290618
4	15	17	17.760526957
5	20	17	19.428629619
6	25	20	20.440385026
7	30	19	21.054045701

計算式と初期値によって計算された値

$$\mathbf{yinf} + (\mathbf{y0} - \mathbf{yinf}) * \mathrm{Exp}(\mathbf{B} * x)$$

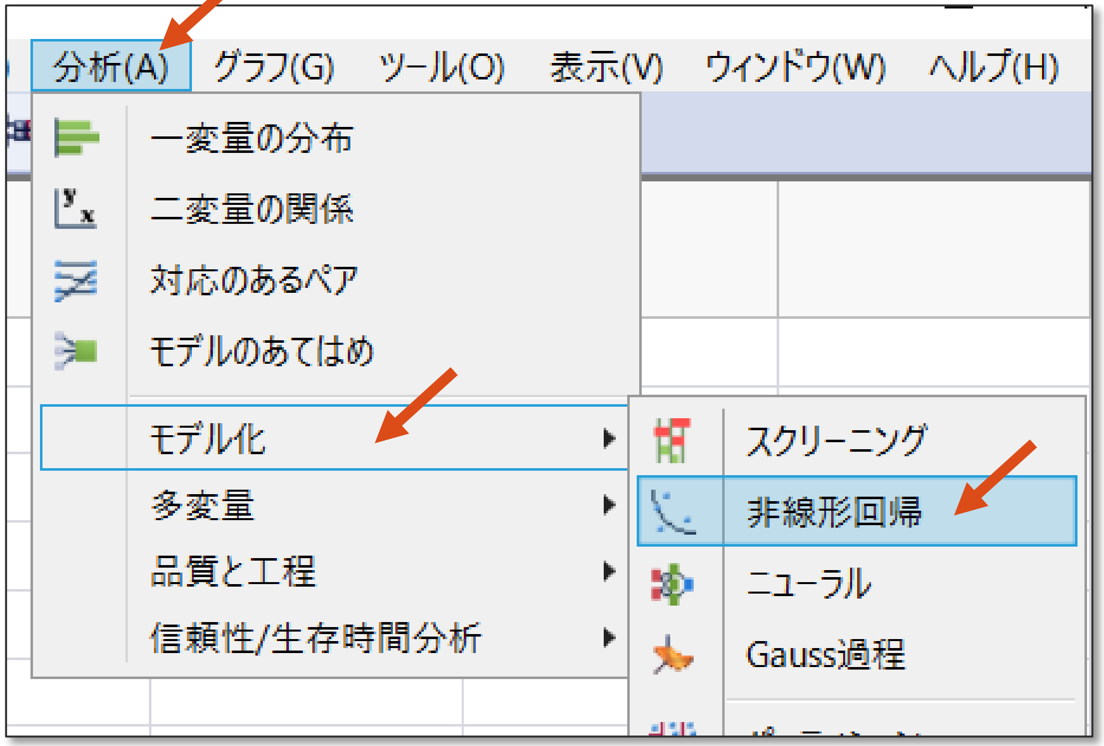
下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.34

（6）残差の２乗和 S を最小にするパラメータを推定

（4）残差の e の設定、（5）残差の２乗和 S の設定は、 JMP 内部で自動設定される

［分析］＞［モデル化］＞［非線形回帰］

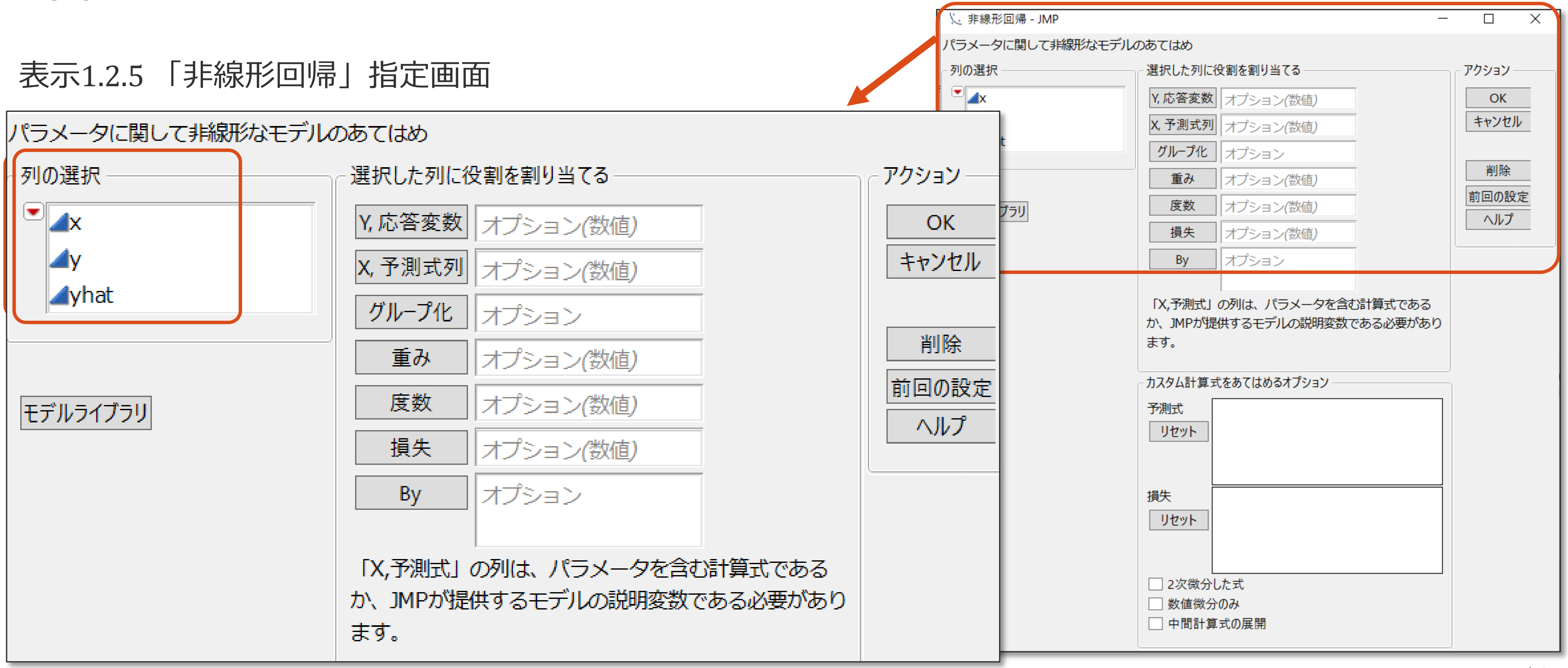


(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値 – 予測値）の設定
(5) 残差の２乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

（6）残差の２乗和 S を最小にするパラメータを推定

表示1.2.5 「非線形回帰」指定画面



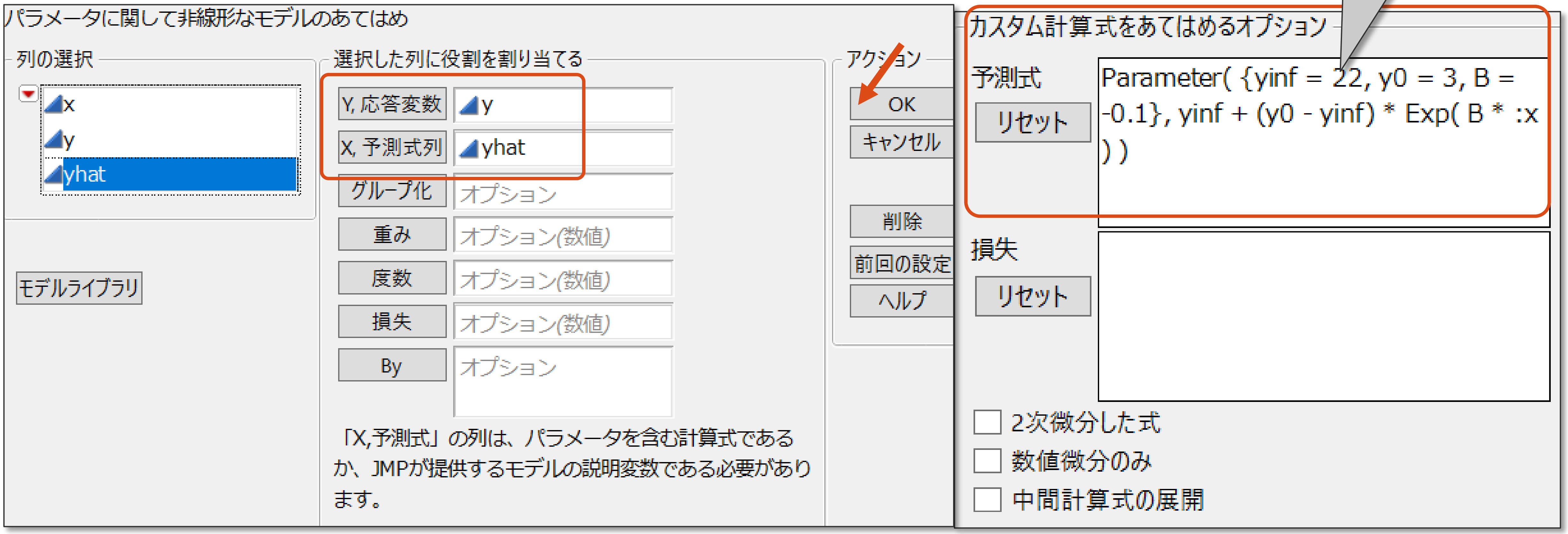
下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

（6）残差 e の 2 乗和 S を最小にするパラメータを推定

表示1.2.5 「非線形回帰」指定画面

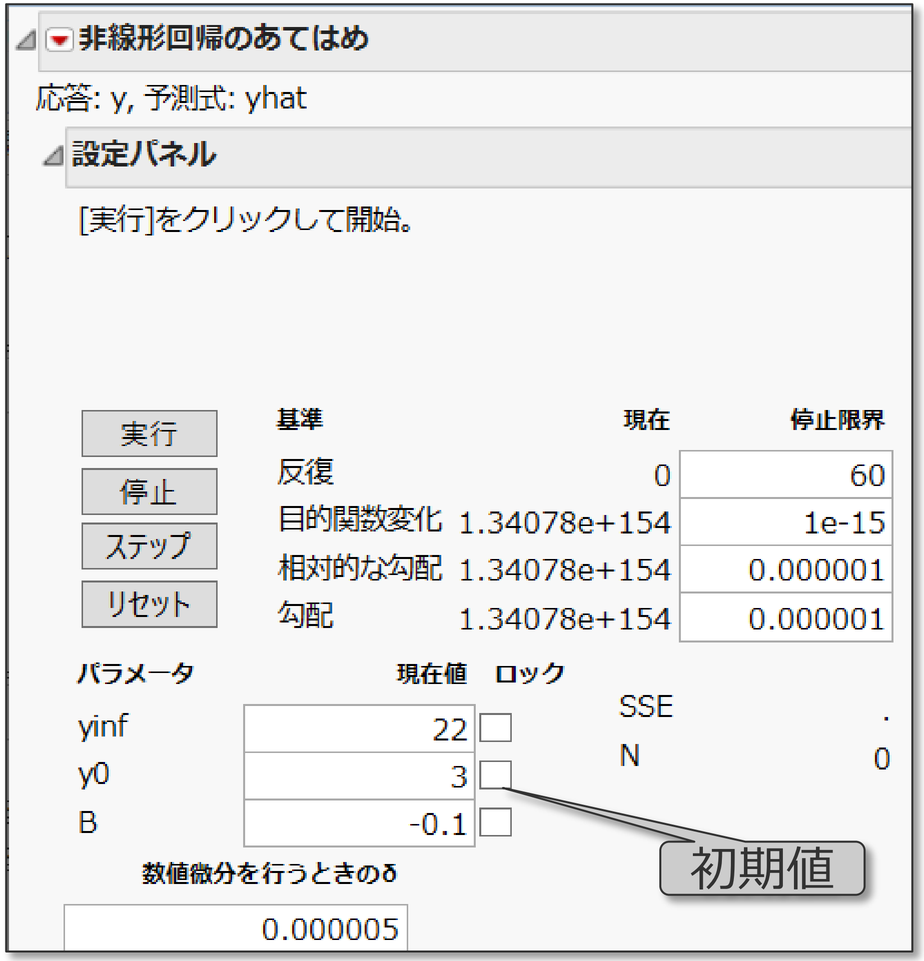
応答変数：観測値 y の列を設定
予測式列：予測値 $\hat{y}$ の列を設定

モデル式（予測式）
JMP の表現方法



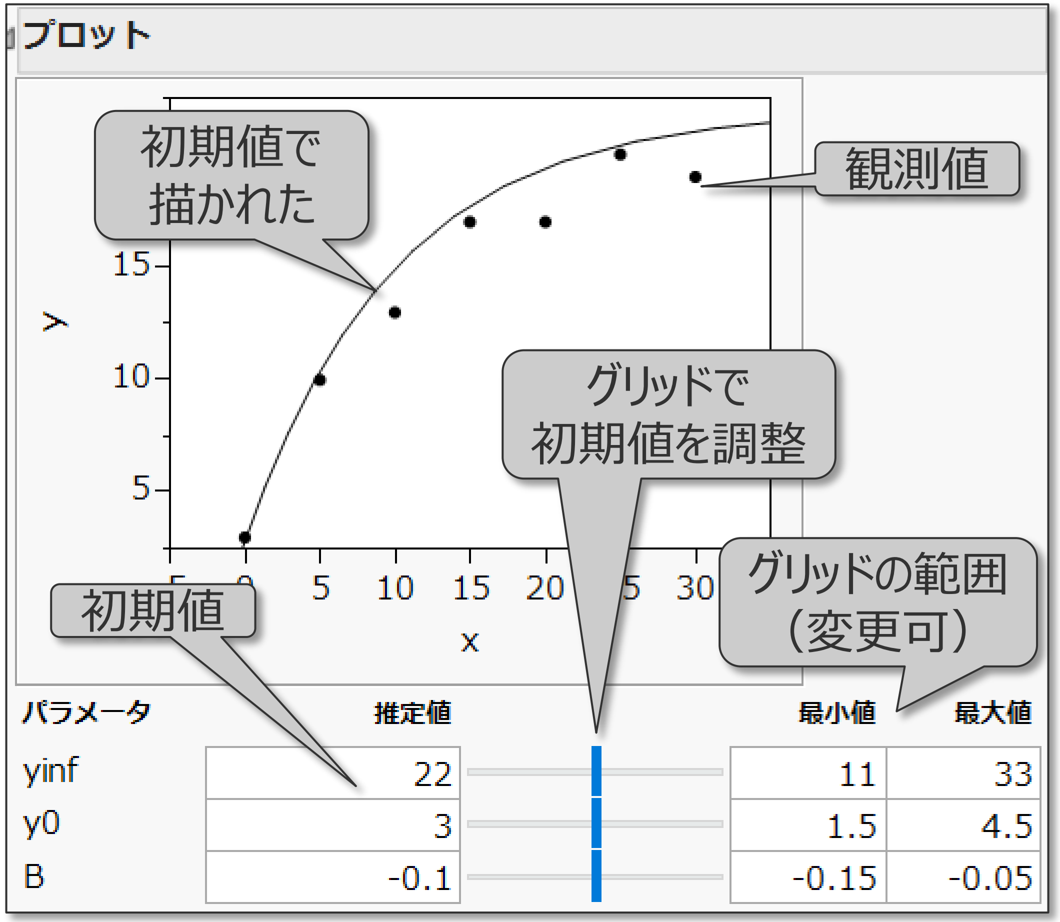
下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

（6）残差 e の 2 乗和 S を最小にするパラメータを推定



初期値の調整

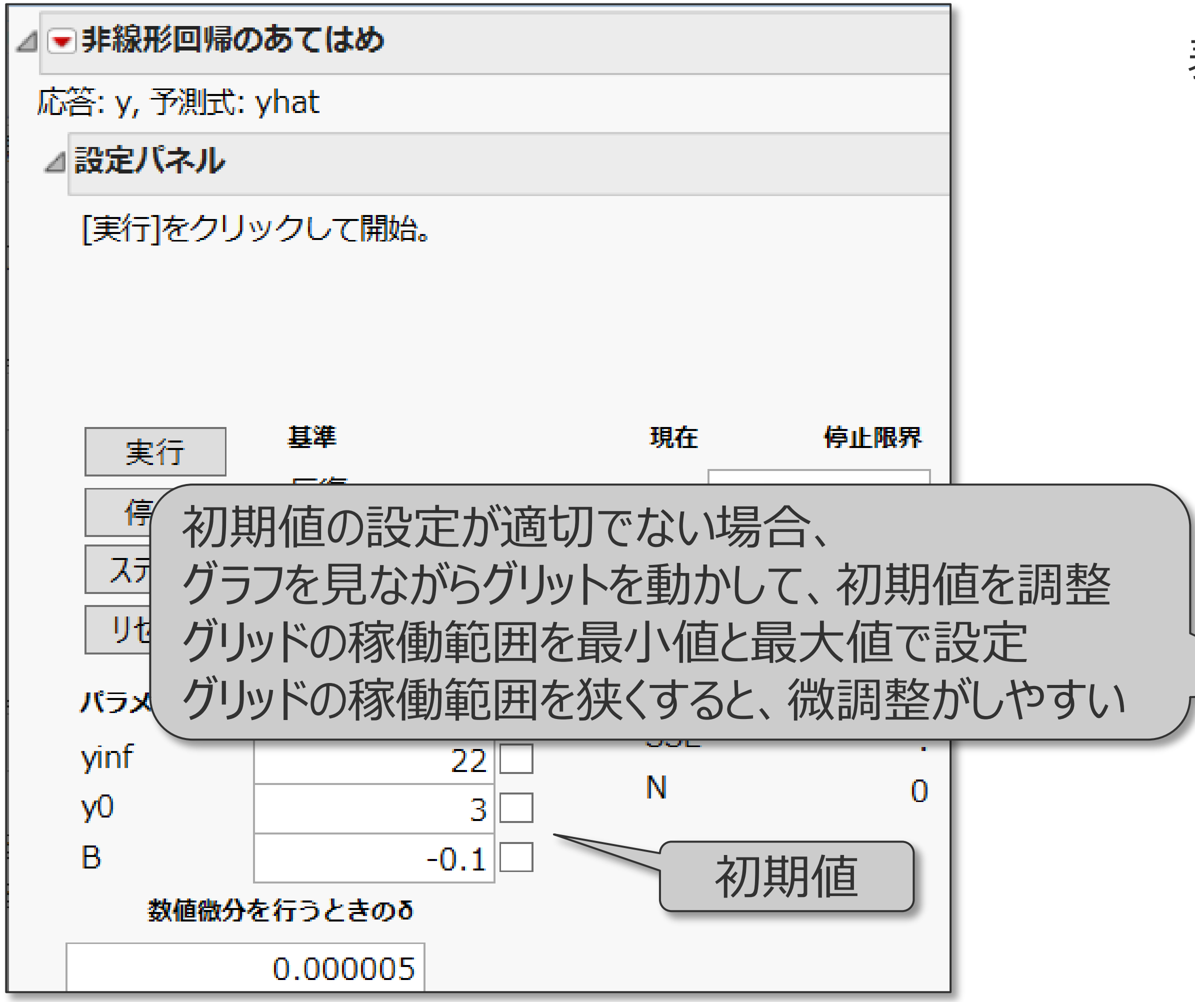
表示1.2.7　「非線形回帰のあてはめ」設定パネル



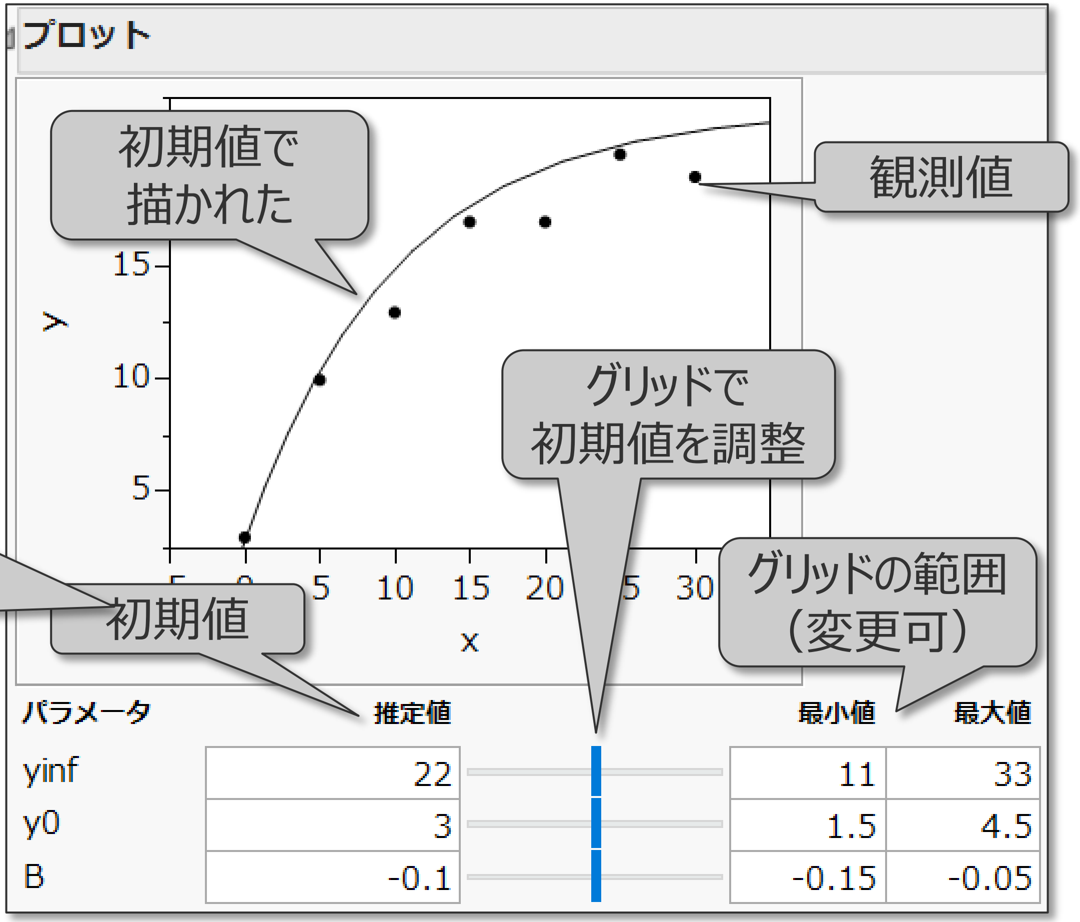
下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

（6）残差 e の 2 乗和 S を最小にするパラメータを推定

初期値の調整



表示1.2.7 「非線形回帰のあてはめ」設定パネル

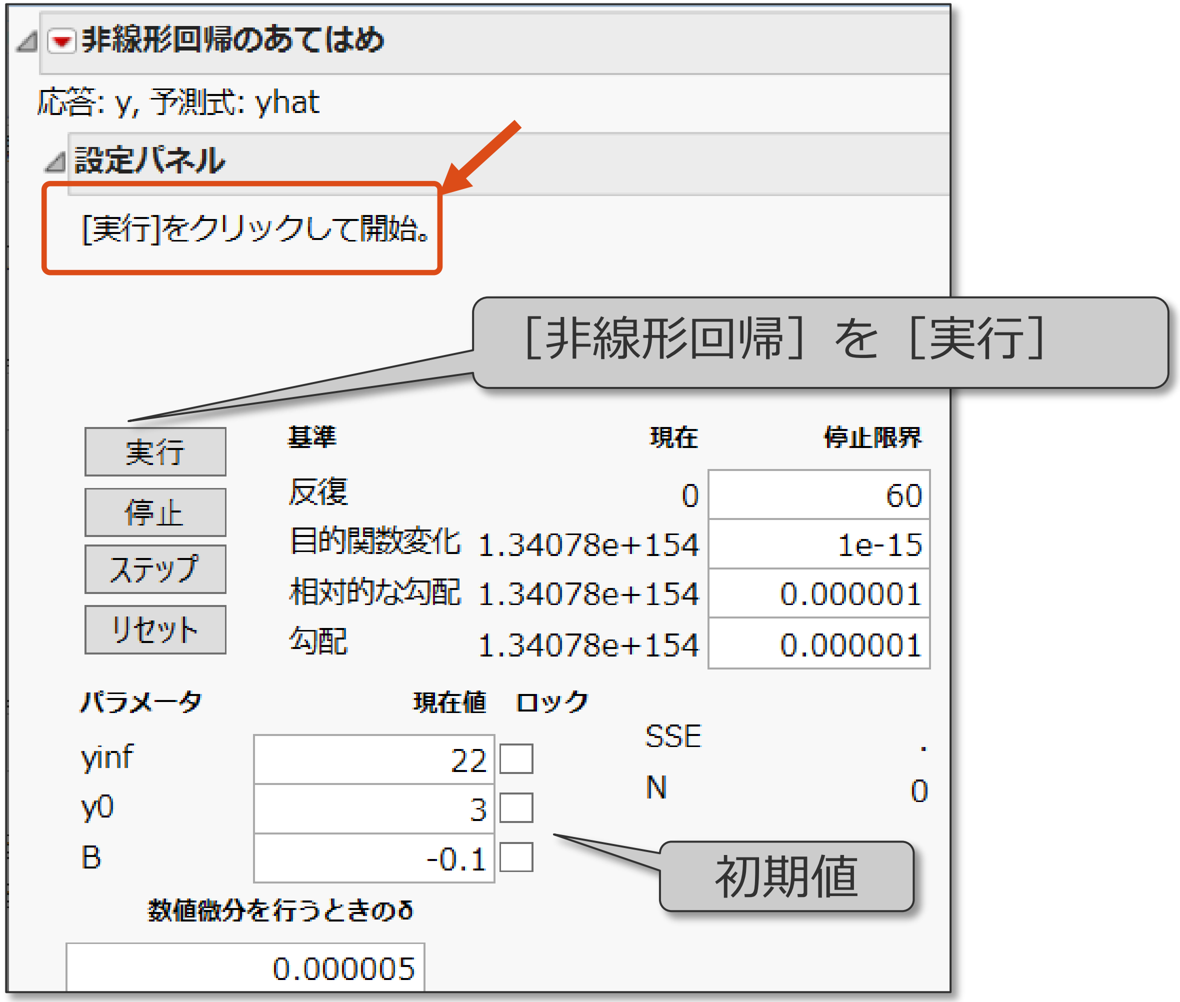


下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

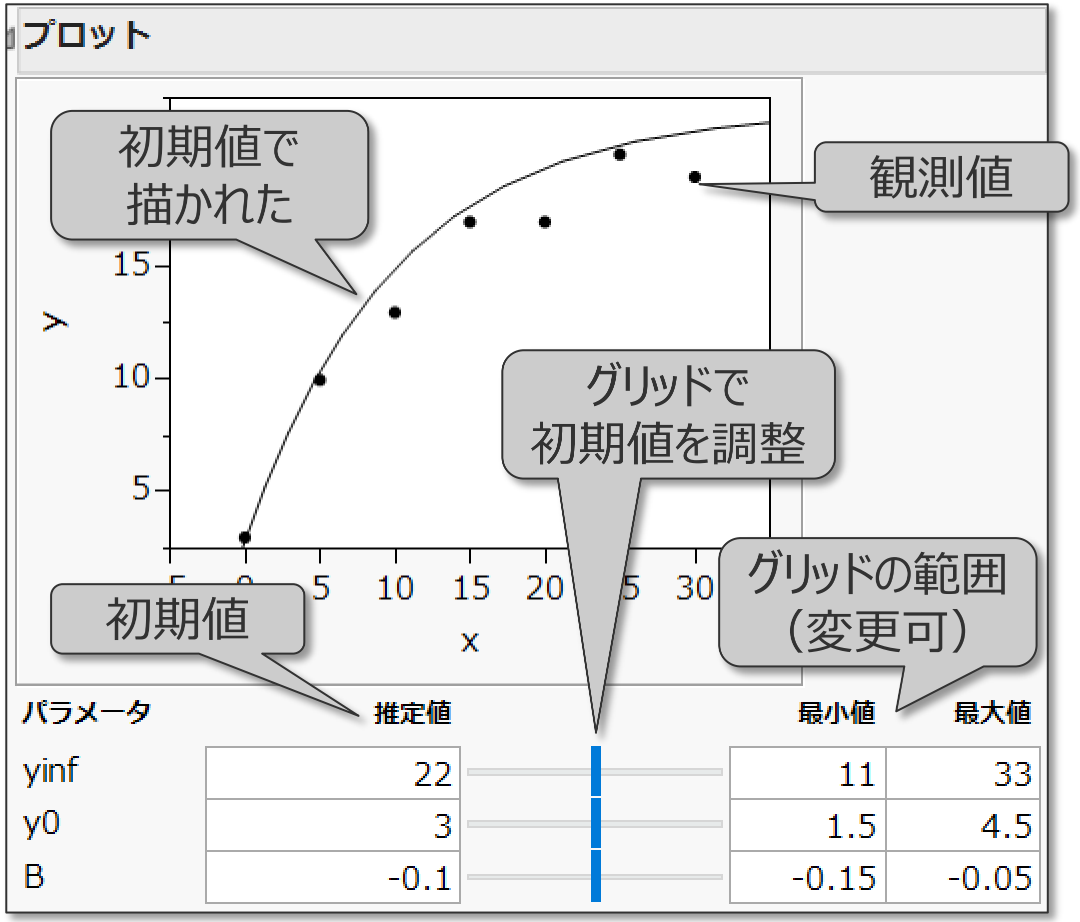
p.34

（6）残差 e の２乗和 S を最小にするパラメータを推定

初期値の調整



表示1.2.7　「非線形回帰のあてはめ」設定パネル

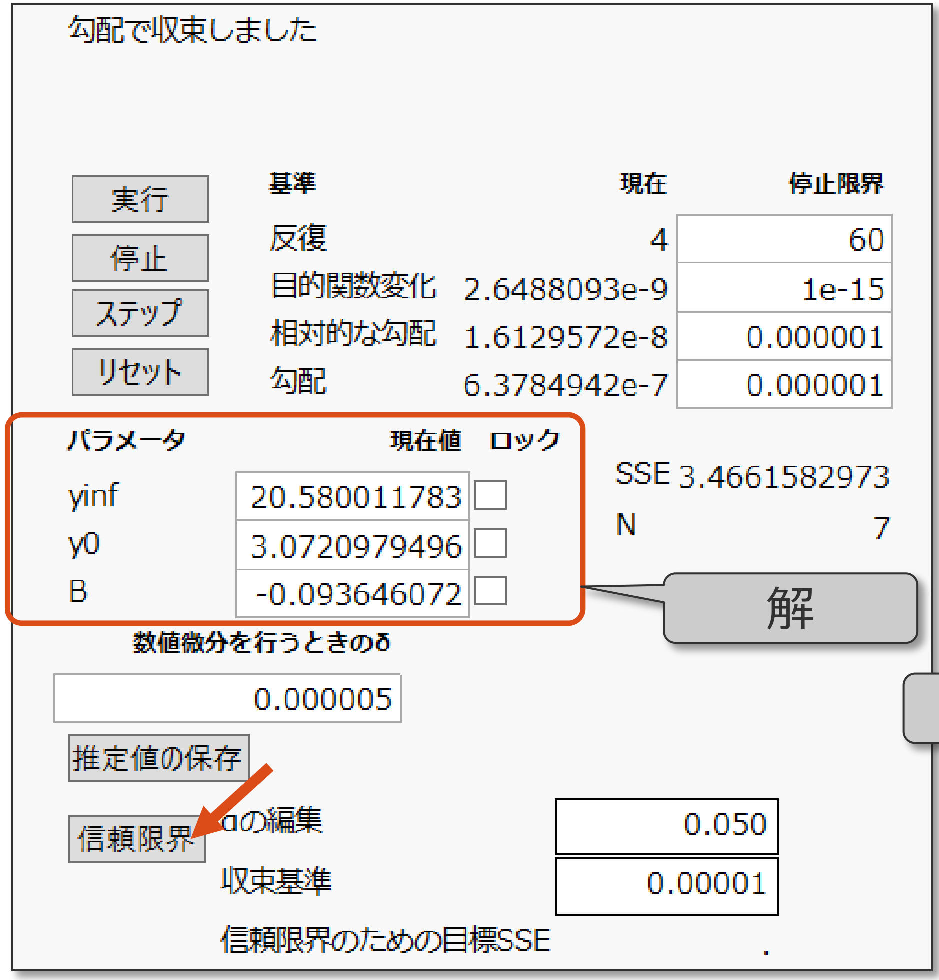


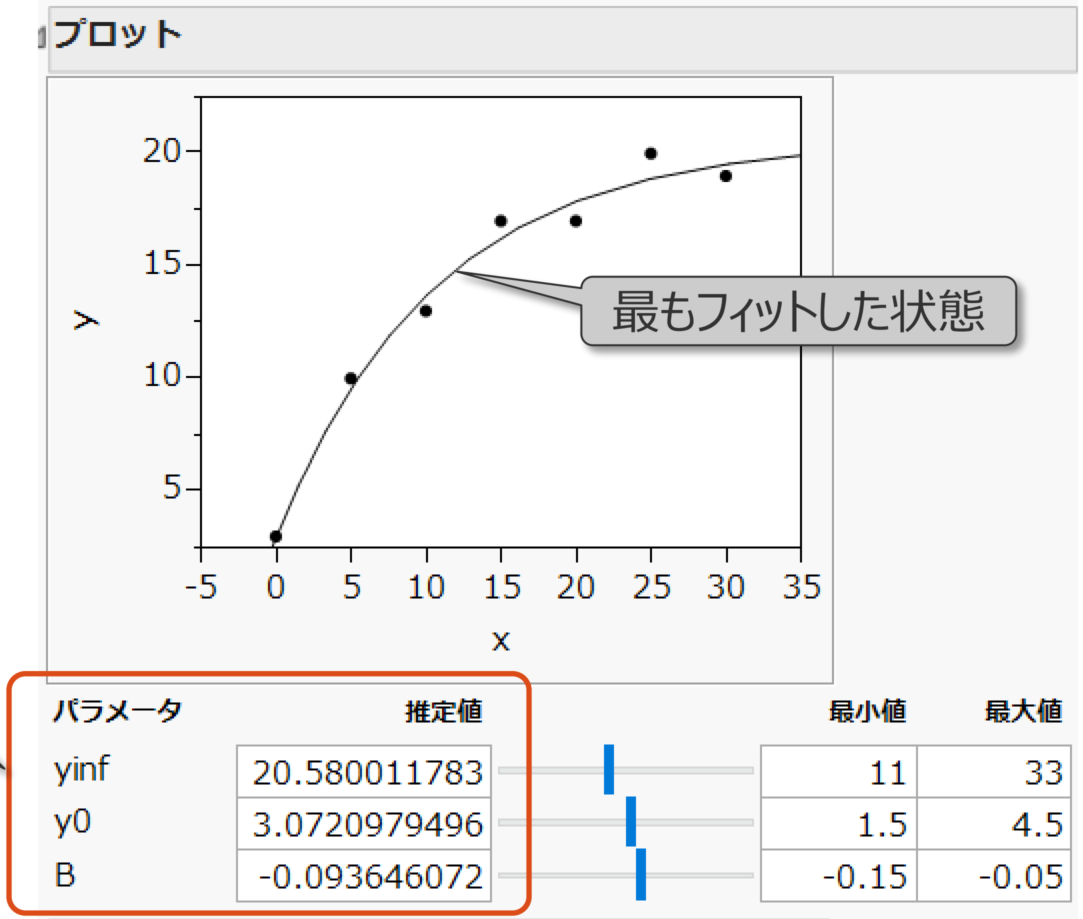
下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.34

（6）残差 e の2乗和 S を最小にするパラメータを推定

［非線形回帰］が完了





下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.35

●解析結果

SSE（Sum of Square Error）　残差平方和：$S = S_e = 3.466$

DFE（Degree of Freedom Error）　残差平方和の自由度：観測値の個数 7 − パラメータ数 3 = 4

MSE（Mean Square Error）　平均平方：3.466 / 4 = 0.8665

RMSE（Root Mean Square Error）　平均平方の平方根、残差の標準偏差：$\sqrt{0.8665} = 0.9309$

表示1.3.4

10	15	17.0	17.76	16.28
11	20	17.0	19.43	17.89
12	25	20.0	20.44	18.90
13	30	19.0	21.05	19.53
14				
15	yinf		22.000	20.580
16	y0		3.000	3.072
17	B		-0.100	-0.094
18	S		15.157	3.466
19			初期値	結果

SSE

逐次計算に用いられた方法

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
3.4661582973	4	0.8665396	0.9308811

パラメータ	推定値	近似標準誤差
yinf	20.580011783	1.21770143
y0	3.0720979496	0.89541956
B	-0.093646072	0.0187746

解法: 数値 Gauss-Newton

下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

●解析結果

MSE、RMSE
　モデルのあてはまりの良さを
　示す指標
　線形回帰で出力された R2 乗値は
　示されない（末尾参照）

近似標準偏差、信頼限界、
推定値の相関が表示（§1.2 参照）

表示1.2.7　JMP による解析結果

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
3.4661582973	4	0.8665396	0.9308811

パラメータ	推定値	近似標準誤差	下側信頼限界	上側信頼限界
yinf	20.580011783	1.21770143	17.9925445	26.4470924
y0	3.0720979496	0.89541956	0.56870341	5.53690568
B	-0.093646072	0.0187746	-0.1549052	-0.046189

解法: 数値 Gauss-Newton

推定値の相関

	yinf	y0	B
yinf	1.0000	0.2731	0.8961
y0	0.2731	1.0000	0.4742
B	0.8961	0.4742	1.0000

JMP［非線形回帰］による解析

●信頼限界のグラフ化

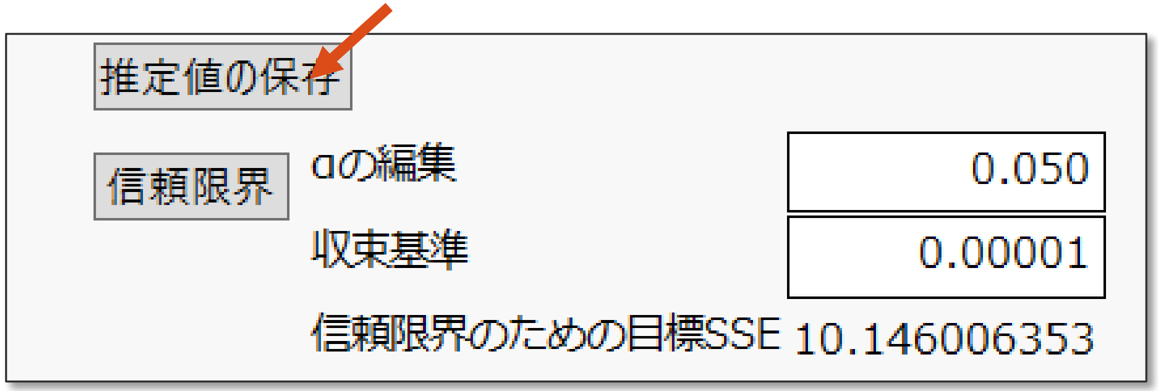
回帰曲線に信頼限界を入れられない

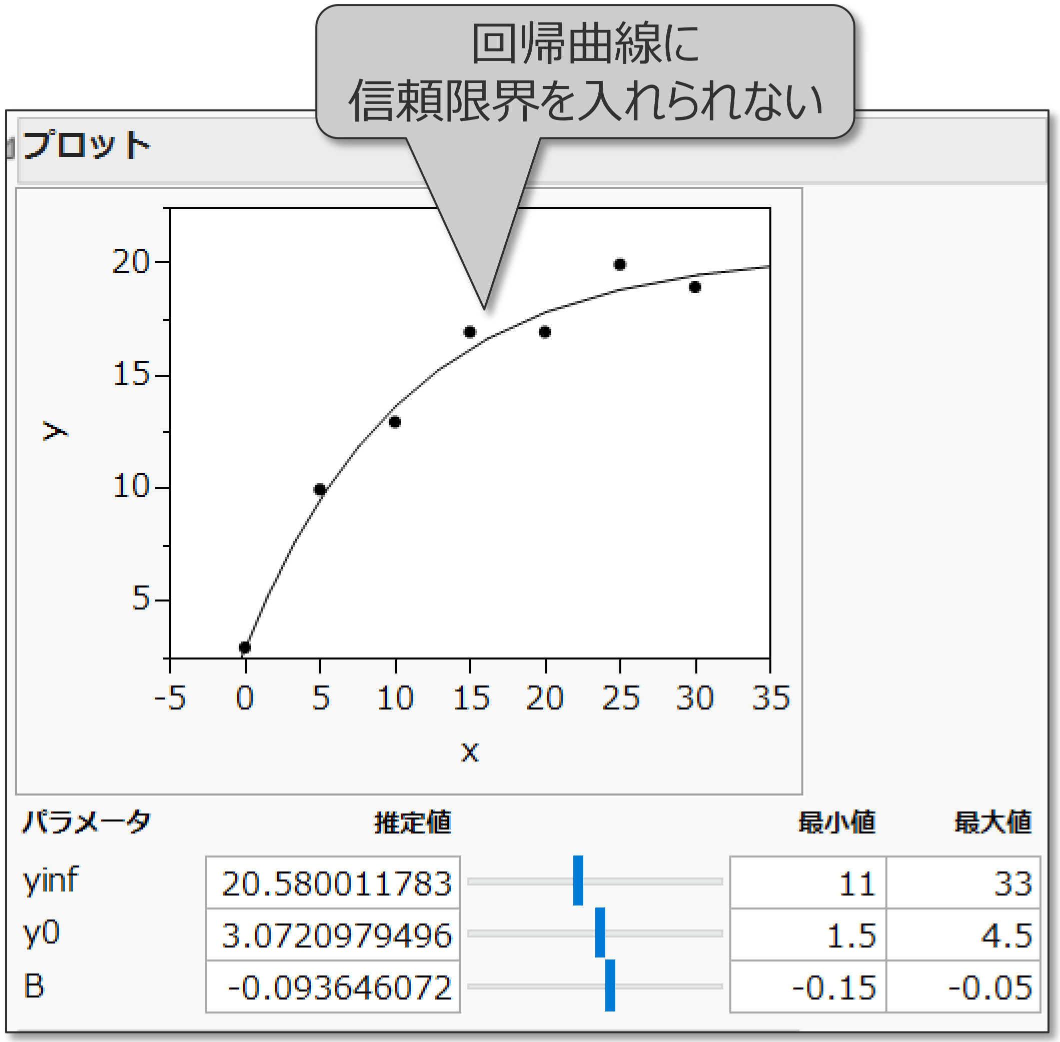
↓

JMP のグラフ機能を利用

推定値の保存

yhat 列で、初期値を使った計算結果から、
推定値を使った計算結果に変更





下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.35

●信頼限界のグラフ化

信頼限界を求める計算式をデータテーブルに保存

▼オプションメニュー＞

［予測信頼限界の保存］

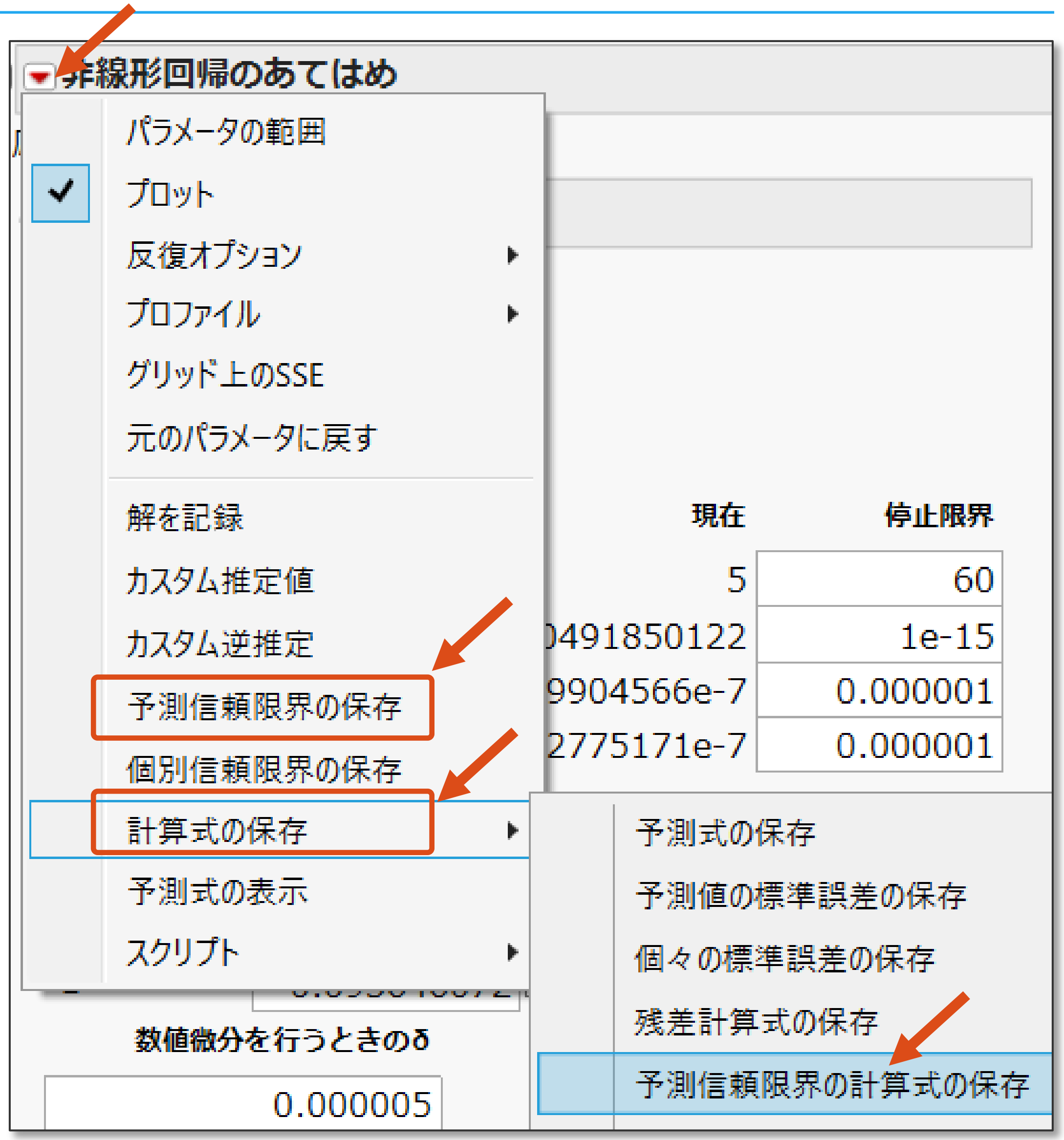
計算式が入らない数値のみの列を保存

▼オプションメニュー＞

［計算式の保存］＞

［予測信頼限界の計算式の保存］

計算式が入った列を保存



下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.35

●信頼限界のグラフ化

信頼限界の値を保存（数値の保存、計算式の保存）

新規の x に対する推定

信頼限界（数値）

信頼限界（計算式）

	x	y	yhat	下限M	上限M	下限M yhat	上限M yhat
1	0	3	3.07209	0.5860	5.55818	0.58601468	5.558181212
2	5	10	9.61814	8.0157	11.2205	8.01575953	11.22052948
3	10	13	13.7166	12.109	15.3234	12.10991768	15.32345229
4	15	17	16.2828	14.973	17.5916	14.9739466	17.59169180
5	20	17	17.8894	16.7074	19.0715	16.7074500	19.07154919
6	25	20	18.8954	17.4490	20.3418	17.44904332	20.34187101
7	30	19	19.5252	17.6622	21.3883	17.6622202	21.38837281
8	18	•	17.3353	•	•	16.15154701	18.51907130

$\hat{y}$ の式が入っている
［推定値の保存］で
初期値による計算結果から
推定値による計算結果に変更

グラフには不要
この行を削除

新規の x を入力

新規の x に対応する信頼限界を計算

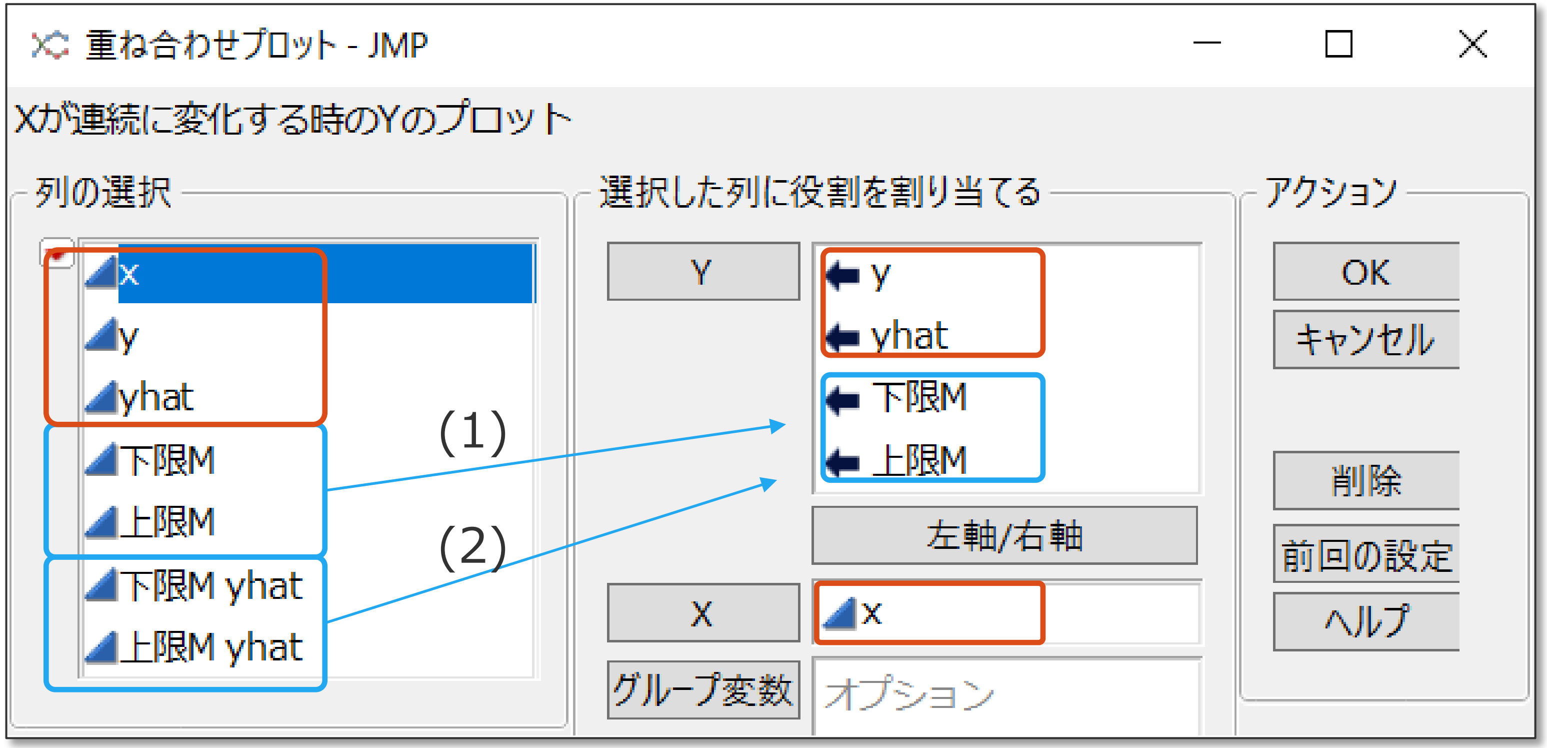
下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

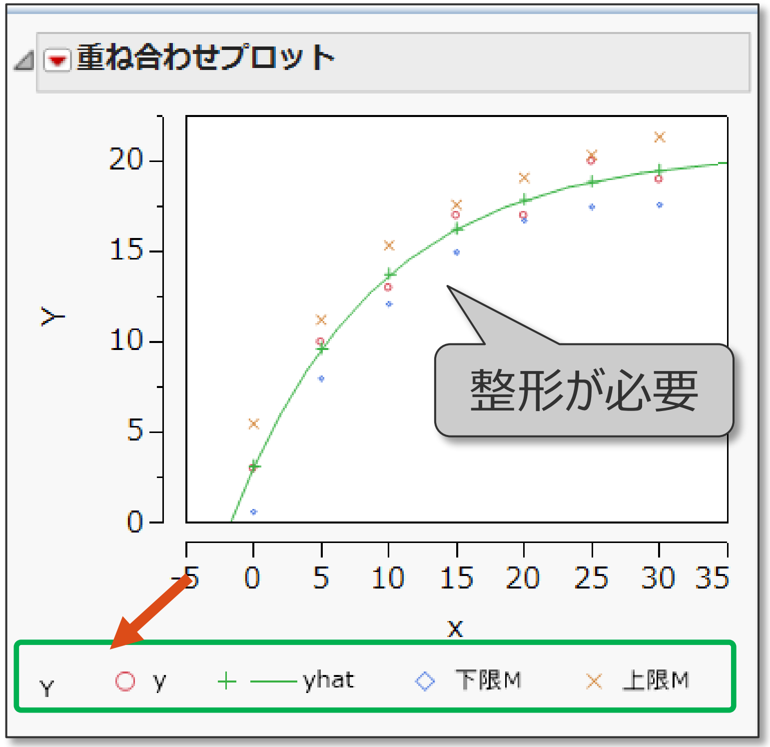
●信頼限界のグラフ化

トップメニュー＞［グラフ］＞［重ね合わせプロット］

２つのグラフ（1）［Y］：「y」「yhat」「下限M」「上限M」 [X]：「x」

（2）［Y］：「y」「yhat」「下限M yhat」「上限M yhat」 [X]：「x」

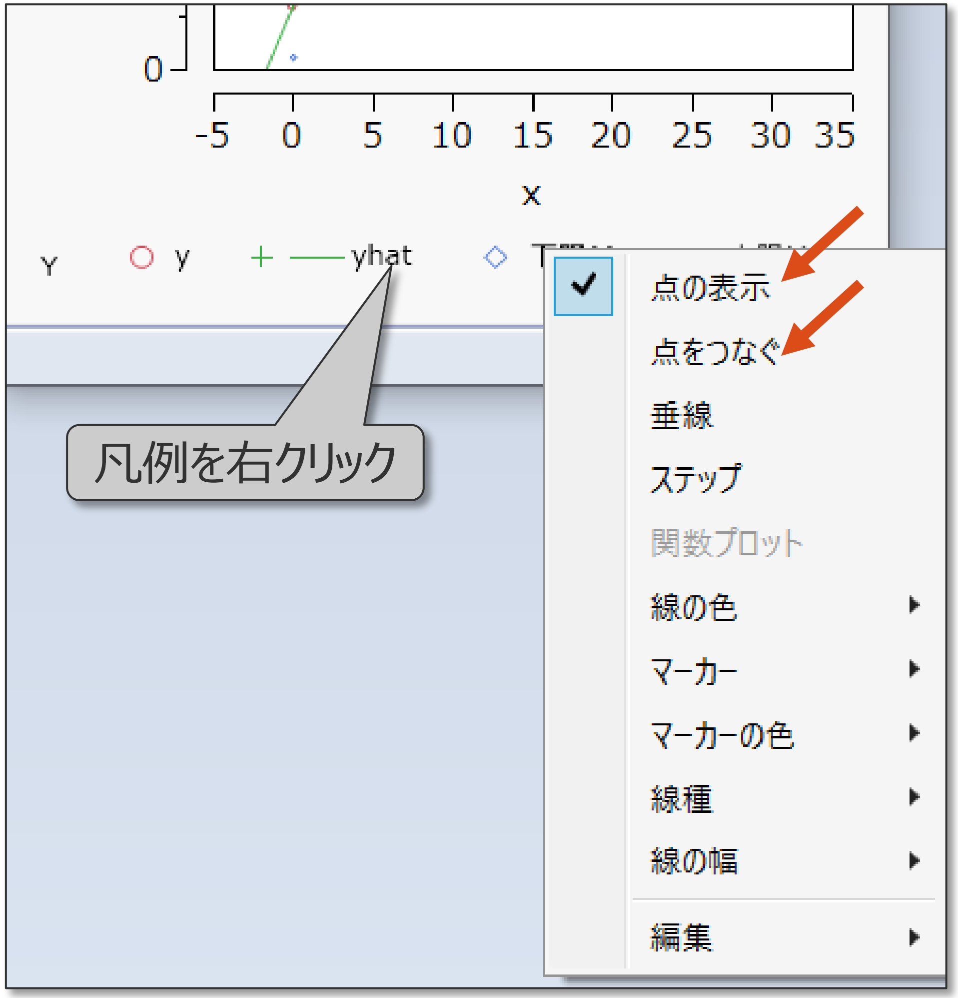


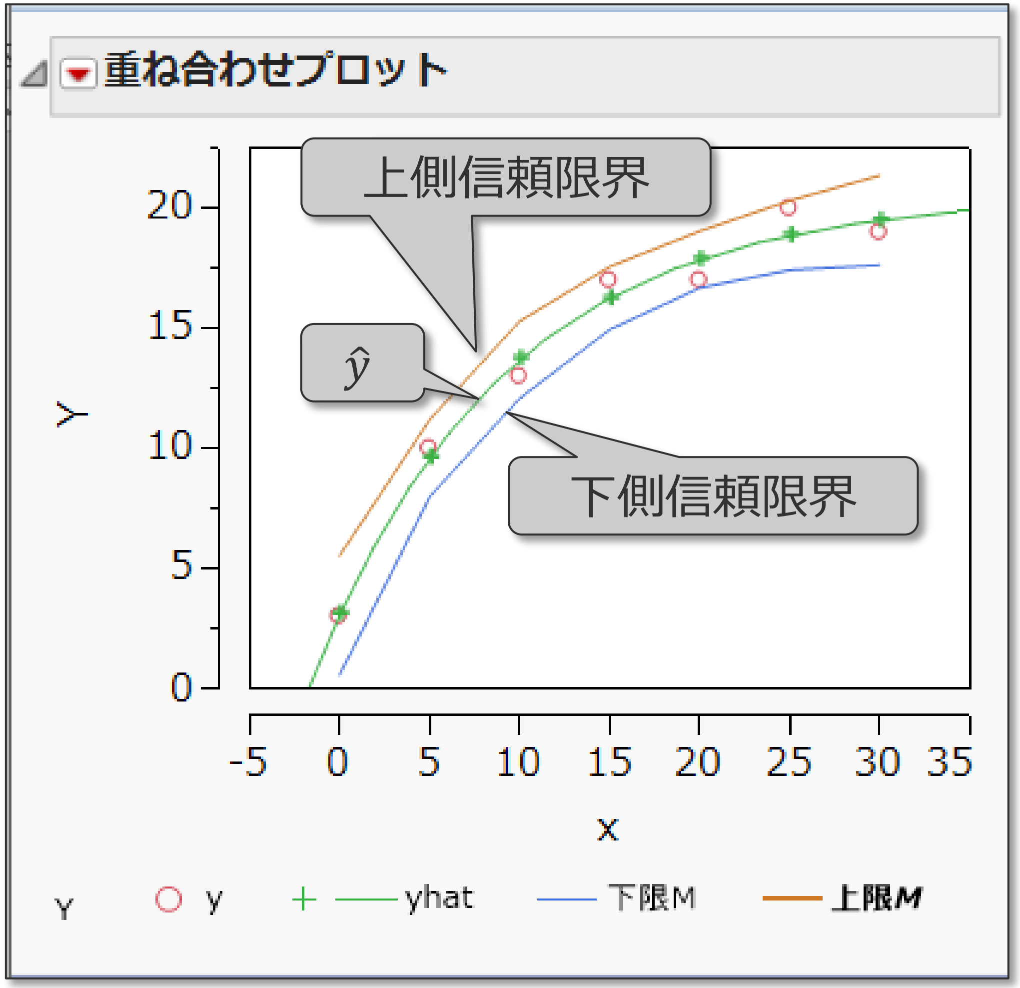


下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

p.35

●信頼限界のグラフ化



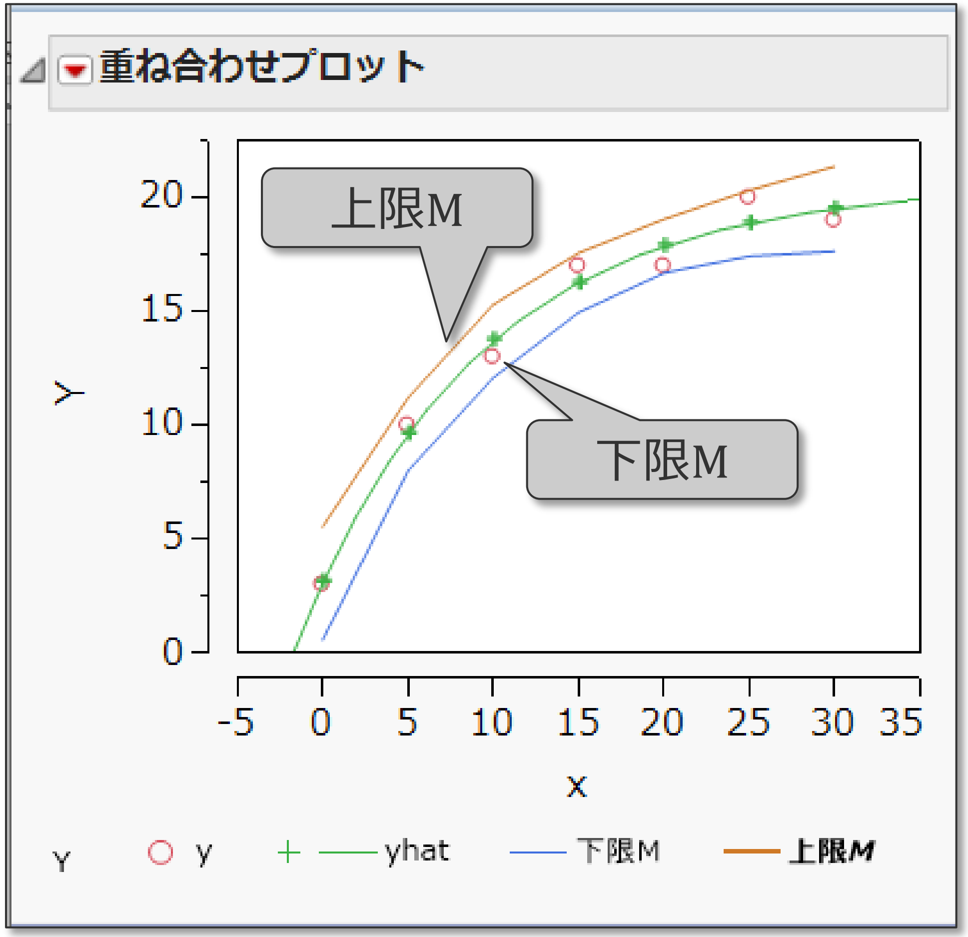


下限／上限のある場合の指数曲線：JMP［非線形回帰］

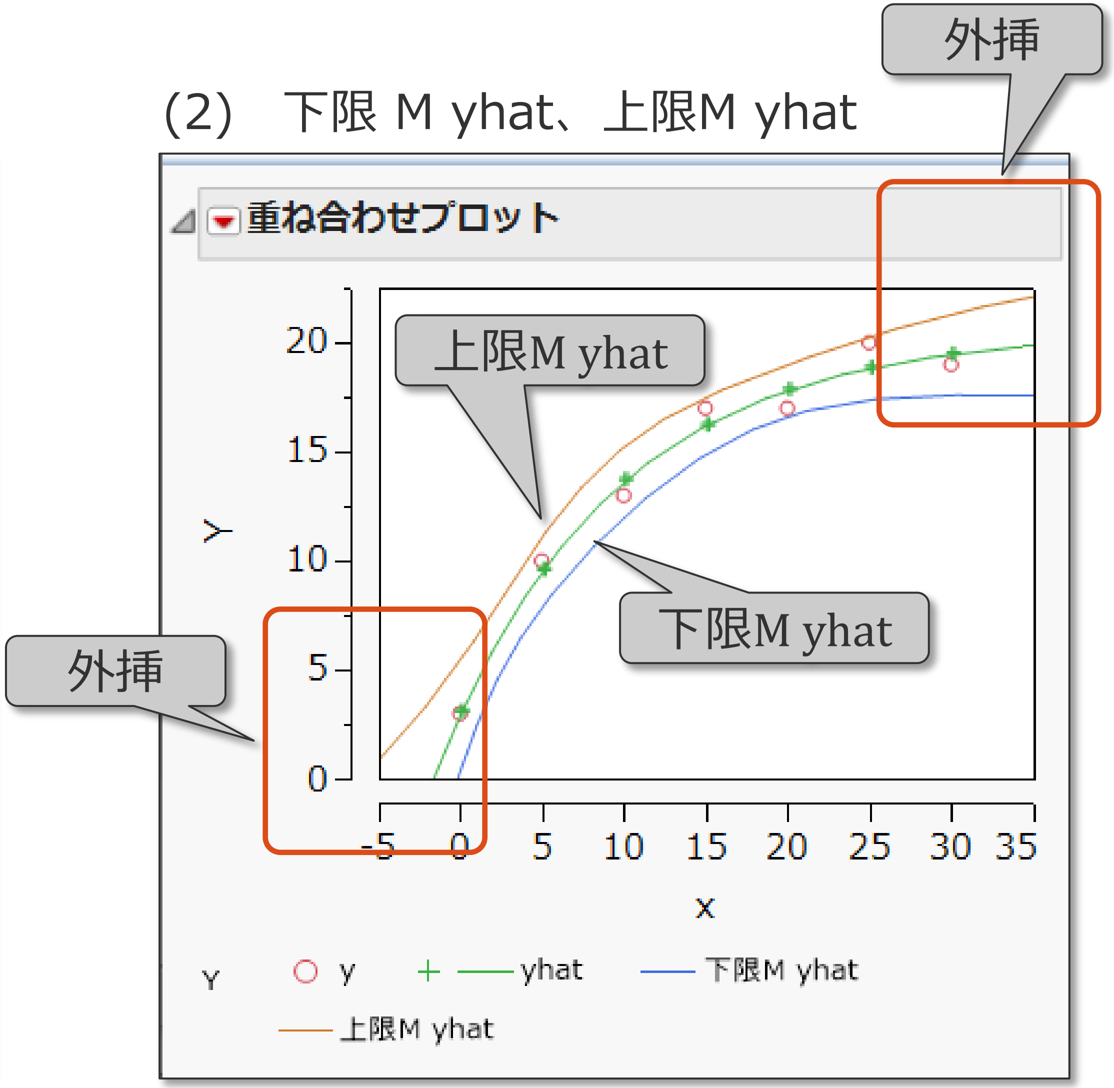
p.35

●信頼限界のグラフ化

(1)　下限M、上限M



(2)　下限 M yhat、上限M yhat



（4） 繰り返しのある場合

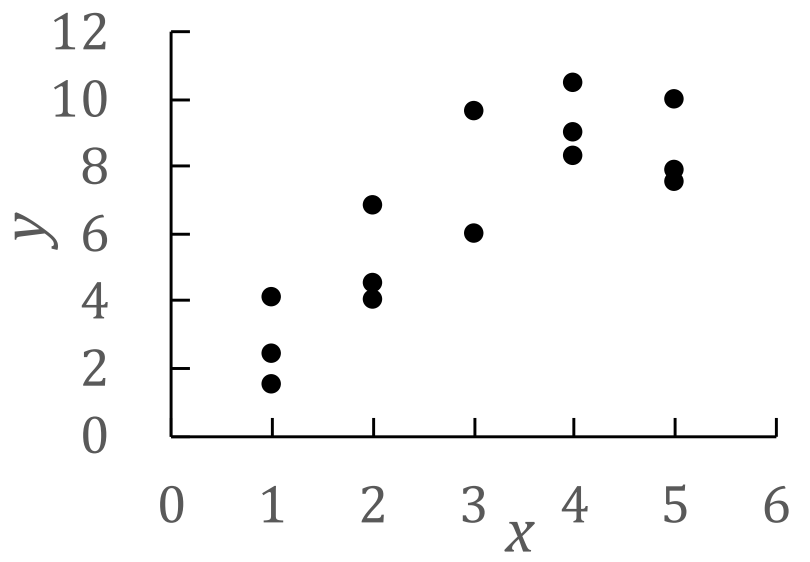
あてはまりの悪さ（LOF）の導入

繰り返しのある場合

p.36

●事例

同じ条件で複数の対象について観測
５水準の量的変数（x）の条件で、
各水準ごとに３匹ずつの動物から観測値を得た
かつ、欠測値があった（繰り返し数の異なる一般の場合）
第2部 §2「量的因子の1因子実験」のデータ



（1）モデル

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$
$$= y_\infty + (0 - y_\infty)\exp(Bx)$$
$$= y_\infty\big(1 - \exp(Bx)\big)$$

$y_0 = 0$ （固有技術から妥当だと判断）

表示1.3.8
（改変）

x	y			平均
1	2.4	4.1	1.5	2.7
2	6.8	4.5	4.0	5.1
3	9.6	6.0		7.8
4	10.5	8.3	9.0	9.3
5	7.9	7.5	10.0	8.5

欠測

繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

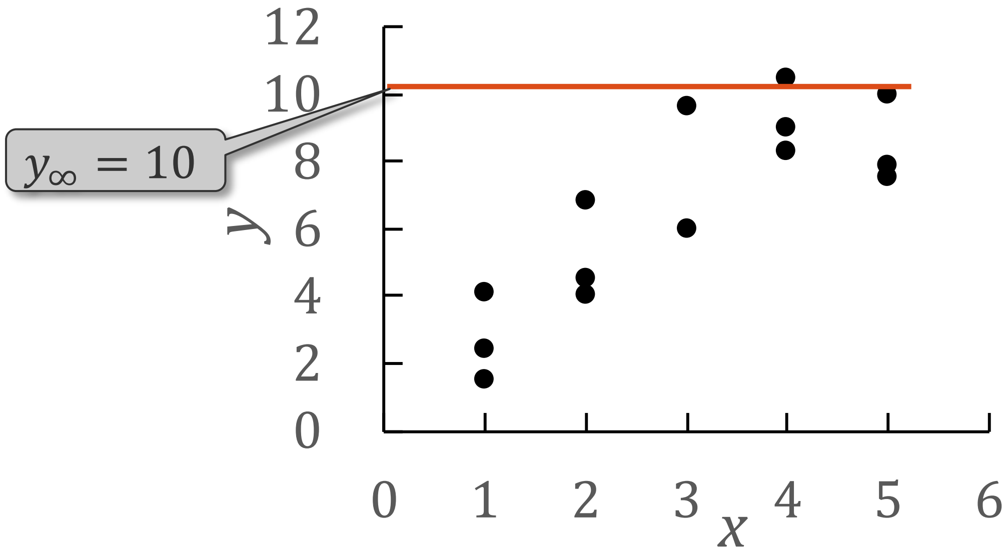
（2）初期値

$$y = y_\infty\left(1 - \exp(Bx)\right)$$

$$y_\infty = 10$$

$$5.1 = 10 \times \left(1 - \exp(2B)\right)$$

$$B = \frac{\ln(1 - 5.1/10)}{2} = -0.36$$



（3）～（6）の手順

(a) 個々の値（y_{ij}）の解析

(b) 平均値（$\bar{y}_{i\cdot}$）の解析

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値 − 予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

表示1.3.8
（改変）

x	y			平均
1	2.4	4.1	1.5	2.7
2	6.8	4.5	4.0	5.1
3	9.6	6.0		7.8
4	10.5	8.3	9.0	9.3
5	7.9	7.5	10.0	8.5

個々の値（y）

平均値（$\bar{y}_{i\cdot}$）

繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

p.37

(3) ～ (6) の手順

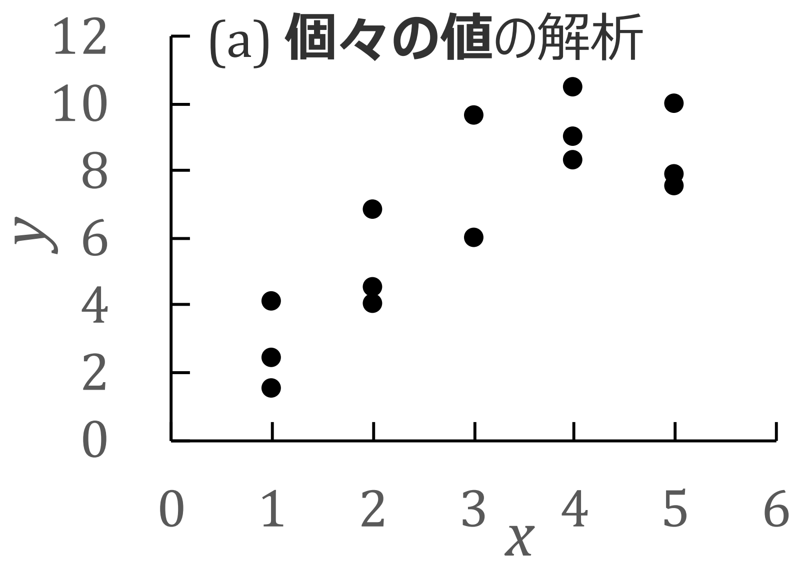
表示 1.3.8 データとExcelソルバーによる解析

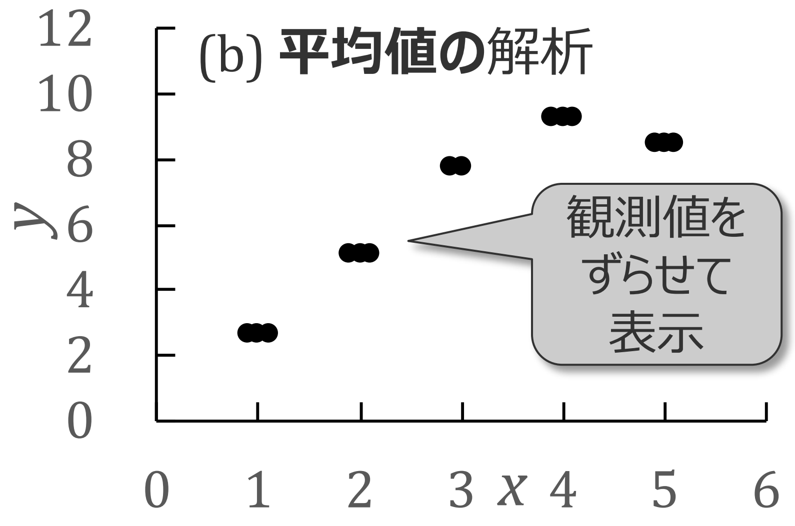
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
4	*x*		*y*		*yhat*		*e*		*n*	平均	*yhat*
5	1	2.4	4.1	1.5	3.15	-0.75	0.95	-1.65	3	2.667	3.15
6	2	6.8	4.5	4.0	5.45	1.35	-0.95	-1.45	3	5.100	5.45
7	3	9.6	6.0		7.13	2.47	-1.13		2	7.800	7.13
8	4	10.5	8.3	9.0	8.36	2.14	-0.06	0.64	3	9.267	8.36
9	5	7.9	7.5	10.0	9.25	-1.35	-1.75	0.75	3	8.467	9.25
10				yinf	11.671						11.671
11				B	-0.315						-0.315
12				S	26.863						6.303
13		E12: =SUMSQ(F5:H9)				K12: {=SUM(I5:I9*(J5:J9-K5:K9)^2)}					

(a) 個々の値の解析

(b) 平均値の解析

(a)(b) で参照





繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

（3）～（6）の手順

i ：1～5（行）
j：1～3（列）

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
	x_i	y_{ij}			$\hat{y}_i$		e_{ij}		n_i	$\bar{y}_{i\cdot}$	$\hat{y}_i$
4	*x*		*y*		*yhat*		*e*		*n*	平均	*yhat*
5	1	2.4	4.1	1.5	3.15	-0.75	0.95	-1.65	3	2.667	3.15
6	2	6.8	4.5	4.0	5.45	1.35	-0.95	-1.45	3	5.100	5.45
7	3	9.6	6.0		7.13	2.47	-1.13		2	7.800	7.13
8	4	10.5	8.3	9.0	8.36	2.14	-0.06	0.64	3	9.267	8.36
9	5	7.9	7.5	10.0	9.25	-1.35	-1.75	0.75	3	8.467	9.25
10				yinf	11.671						11.671
11				B	-0.315						-0.315
12				S	26.863						6.303
13		E12: =SUMSQ(F5:H9)				K12: {=SUM(I5:I9*(J5:J9-K5:K9)^2)}					

(a) **個々の値**の解析

セルE5　：=E$10 * (1 − EXP(E$11 * $A5))

$$\hat{y} = y_\infty \times \left(1 - \exp(Bx)\right)$$

セルE12 ：=SUMSQ(F5:H9)

空白セルは除外

$$S = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i}\left(y_{ij} - \hat{y}_i\right)^2 = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i} e_{ij}^2 = 26.863$$

i ：1～5（行）
j：1～3（列）

(b) **平均値の**解析

セルK5　：=K$10 * (1 − EX

セルK12：{ =SUM(I5:I9 * (J5:J9 - K5:K9)^2)}

$$S = \sum_{i=1}^{5} n_i\left(\bar{y}_{i\cdot} - \hat{y}_i\right)^2 = 6.303$$

繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

（3）～（6）の手順

	x_i	y_{ij}			$\hat{y}_i$	e_{ij}			n_i	$\bar{y}_{i\cdot}$	$\hat{y}_i$
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
4	*x*		*y*		*yhat*		*e*		*n*	平均	*yhat*
5	1	2.4	4.1	1.5	3.15	-0.75	0.95	-1.65	3	2.667	3.15
6	2	6.8	4.5	4.0	5.45	1.35	-0.95	-1.45	3	5.100	5.45
7	3	9.6	6.0		7.13	2.47	-1.13		2	7.800	7.13
8	4	10.5	8.3	9.0	8.36	2.14	-0.06	0.64	3	9.267	8.36
9	5	7.9	7.5	10.0	9.25	-1.35	-1.75	0.75	3	8.467	9.25
10				yinf	11.671						11.671
11				B	-0.315						-0.315
12				S	26.863						6.303
13		E12: =SUMSQ(F5:H9)				K12: {=SUM(I5:I9*(J5:J9-K5:K9)^2)}					

(a) **個々の値**の解析

セルE5　：=E$10 * (1 − EXP(E$11 * $A5))

$$\hat{y} = y_\infty(1 - \exp(Bx))$$

セルE12 ：=SUMSQ(F5:H9)

$$S = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i}(y_{ij} - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i} e_{ij}^2 = 26.863$$

(b) **平均値の**解析

セルK5　：=K$10 * (1 − EXP(K$11 * $A5))

セルK12：{ =SUM(I5:I9 * (J5:J9 - K5:K9)^2)}

配列数式

$$S = \sum_{i=1}^{5} n_i(\bar{y}_{i\cdot} - \hat{y}_i)^2 = 6.303$$

3, 3, 2, 3, 3

繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

(3) ～ (6) の手順

	x_i	y_{ij}			$\hat{y}_i$	e_{ij}			n_i	$\bar{y}_{i\cdot}$	$\hat{y}_i$
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
4	x		y		yhat		e		n	平均	yhat
5	1	2.4	4.1	1.5	3.15	-0.75	0.95	-1.65	3	2.667	3.15
6	2	6.8	4.5	4.0	5.45	1.35	-0.95	-1.45	3	5.100	5.45
7	3	9.6	6.0		7.13	2.47	-1.13		2	7.800	7.13
8	4	10.5	8.3	9.0	8.36	2.14	-0.06	0.64	3	9.267	8.36
9	5	7.9	7.5	10.0	9.25	-1.35	-1.75	0.75	3	8.467	9.25
10				yinf	11.671						11.671
11				B	-0.315						-0.315
12				S	26.863						6.303
13		E12: =SUMSQ(F5:H9) K12: {=SUM(I5:I9*(J5:J9-K5:K9)^2)}									

変数セルの変更

変数セルの変更

目的セルの設定
目標値：最小値

目的セルの設定
目標値：最小値

S が最小になるパラメータを求める（表示1.3.4 と同じ）

(a) **個々の値**の解析

セルE5　: =E$10 * (1 − EXP(E$11 * $A5))

$$\hat{y} = y_\infty\left(1 - \exp(Bx)\right)$$

セルE12　: =SUMSQ(F5:H9)

空白セル
は除外

$$S = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i}\left(y_{ij} - \hat{y}_i\right)^2 = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i} e_{ij}^2 = 26.863$$

(b) **平均値**の解析

セルK5　: =K$10 * (1 − EXP(K$11 * $A5))

セルK12 : { =SUM(I5:I9 * (J5:J9 - K5:K9)^2)}

配列数式

$$S = \sum_{i=1}^{5} n_i\left(\bar{y}_{i\cdot} - \hat{y}_i\right)^2 = 6.303$$

3, 3, 2, 3, 3

繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

（3）～（6）の手順

	x_i	y_{ij}			$\hat{y}_i$	e_{ij}			n_i	$\bar{y}_{i\cdot}$	$\hat{y}_i$
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
4	x		y		yhat		e		n	平均	yhat
5	1	2.4	4.1	1.5	3.15	-0.75	0.95	-1.65	3	2.667	3.15
6	2	6.8	4.5	4.0	5.45	1.35	-0.95	-1.45	3	5.100	5.45
7	3	9.6	6.0		7.13	2.47	-1.13		2	7.800	7.13
8	4	10.5	8.3	9.0	8.36	2.14	-0.06	0.64	3	9.267	8.36
9	5	7.9	7.5	10.0	9.25	-1.35	-1.75	0.75	3	8.467	9.25
10				yinf	11.671						11.671
11				B	-0.315						-0.315
12				S	26.863						6.303
13		E12: =SUMSQ(F5:H9) K12: {=SUM(I5:I9*(J5:J9-K5:K9)^2)}									

(a) **個々の値**の解析

セルE5　：=E$10 * (1 − EXP(E$11 * $A5))

$$\hat{y} = y_\infty\left(1 - \exp(Bx)\right)$$

セルE12　：=SUMSQ(F5:H9)

空白セルは除外

$$S = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i}\left(y_{ij} - \hat{y}_i\right)^2 = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{n_i} e_{ij}^2 = 26.863$$

(b) **平均値の**解析

セルK5　：=K$10 * (1 − EXP(K$11 * $A5))

セルK12：{ =SUM(I5:I9 * (J5:J9 - K5:K9)^2)}

配列数式

$$S = \sum_{i=1}^{5} n_i\left(\bar{y}_{i\cdot} - \hat{y}_i\right)^2 = 6.303$$

3, 3, 2, 3, 3

S が最小になるパラメータを求める（表示1.3.4 と同じ）

(a)と(b) のパラメータは同じ値である

残差平方和 S が異なる： 26.863 − 6.303 = 20.560

差の意味

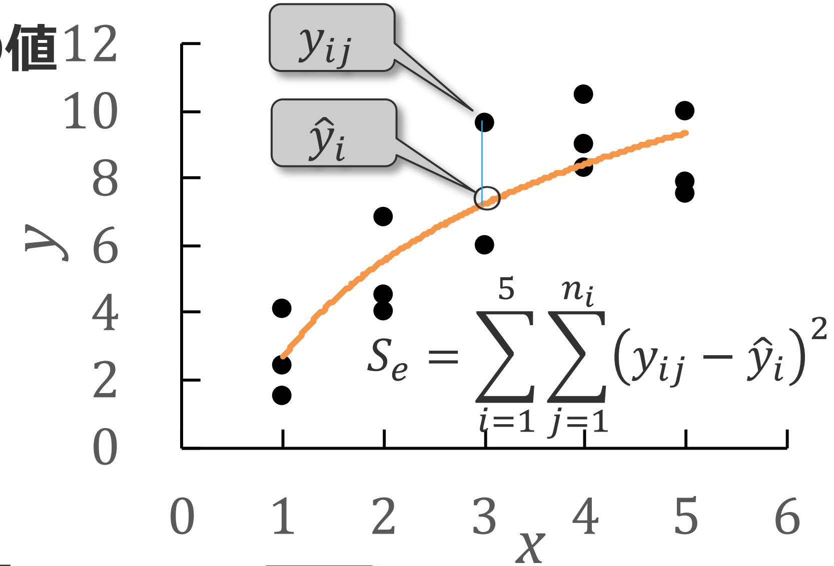
繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

●個々の値の解析と平均値の解析

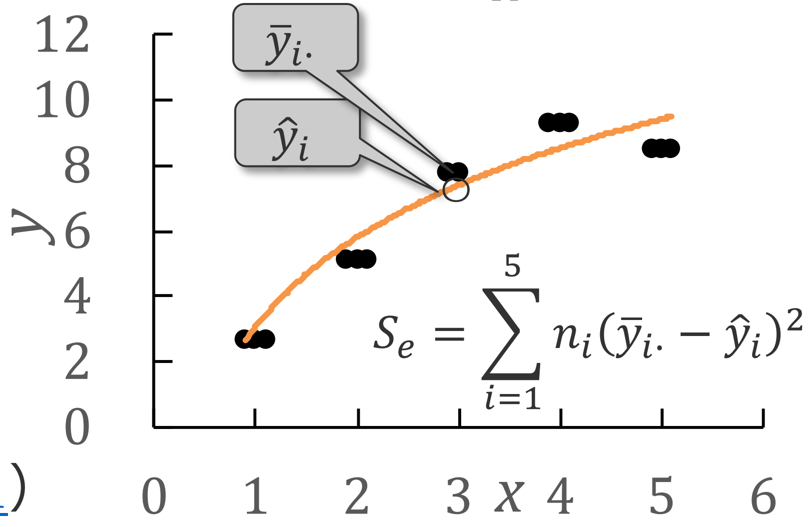
	x_i	y_{ij}			$\hat{y}_i$	e_{ij}			n_i	$\bar{y}_{i\cdot}$	$\hat{y}_i$
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
4	*x*		*y*		*yhat*		*e*		*n*	平均	*yhat*
5	1	2.4	4.1	1.5	3.15	-0.75	0.95	-1.65	3	2.667	3.15
6	2	6.8	4.5	4.0	5.45	1.35	-0.95	-1.45	3	5.100	5.45
7	3	9.6	6.0		7.13	2.47	-1.13		2	7.800	7.13
8	4	10.5	8.3	9.0	8.36	2.14	-0.06	0.64	3	9.267	8.36
9	5	7.9	7.5	10.0	9.25	-1.35	-1.75	0.75	3	8.467	9.25
10				yinf	11.671						11.671
11				B	-0.315						-0.315
12				S	26.863						6.303
13		E12: =SUMSQ(F5:H9)				K12: {=SUM(I5:I9*(J5:J9-K5:K9)^2)}					

LOF

(a) 個々の値



(b) 平均値



(a) 26.863　：個々の値と予測値との差を反映 → 残差平方和

(b)　6.303　：水準の平均と予測値との差を反映 → LOF

（Lack of Fit、あてはまりの悪さ、第２部 §2.1）

繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

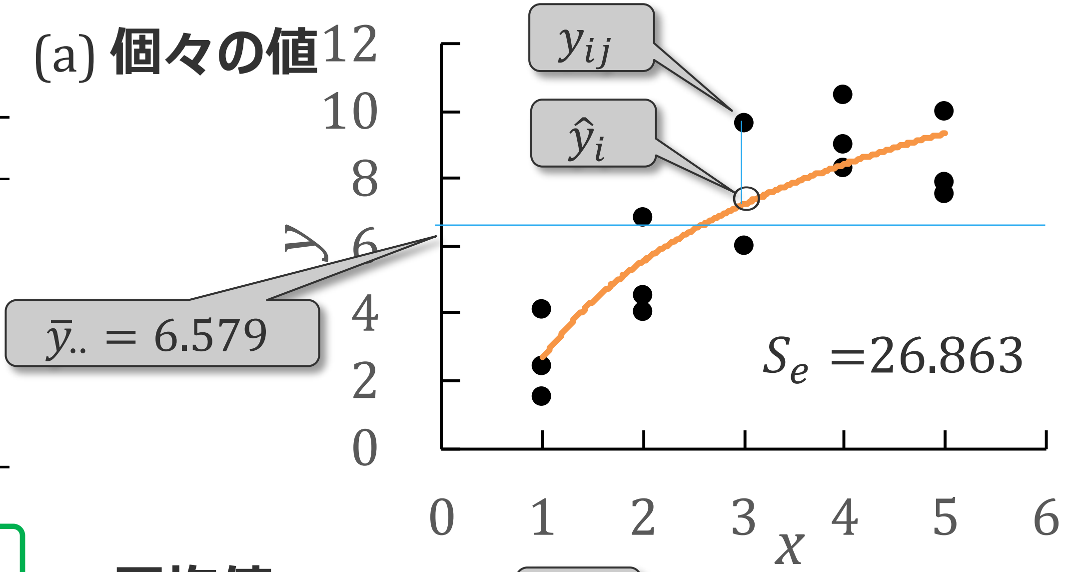
●個々の値の解析と平均値の解析

表示 1.3.9

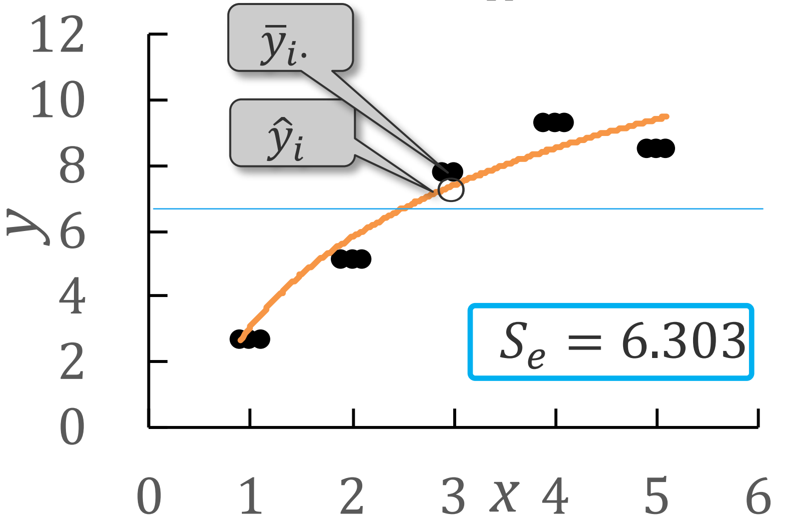
質的因子と見なす

x	y			n	平均	偏差	平方和
1	2.4	4.1	1.5	3	2.667	-3.912	3.487
2	6.8	4.5	4.0	3	5.100	-1.479	4.460
3	9.6	6.0		2	7.800	1.221	6.480
4	10.5	8.3	9.0	3	9.267	2.688	2.527
5	7.9	7.5	10.0	3	8.467	1.888	3.607
平均			6.579				
平方和			108.384			87.824	20.560
			全体			水準間	繰返し

(a) **個々の値**



(b) **平均値**



質的因子の１因子実験と見なした解析（第２部 §2.1）

108.384 = 87.824 + 20.560

26.863 = 20.560 + 6.303・・・平方和の分解

(a) 26.863　：個々の値と予測値との差を反映 → 残差平方和

(b)　6.303　：水準の平均と予測値との差を反映 → LOF

差 20.560　：各水準の繰り返し誤差の平方和（第２部 §2.1）

繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

●あてはまりの悪さ（LOF）

単回帰モデルでのLOF（第2部 §2.1）

$$\underbrace{y_{ij}-\bar{y}_{..}}_{S_T}=\underbrace{(y_{ij}-\bar{y}_{i.})}_{S_e}+\underbrace{(\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})}_{S_A}$$

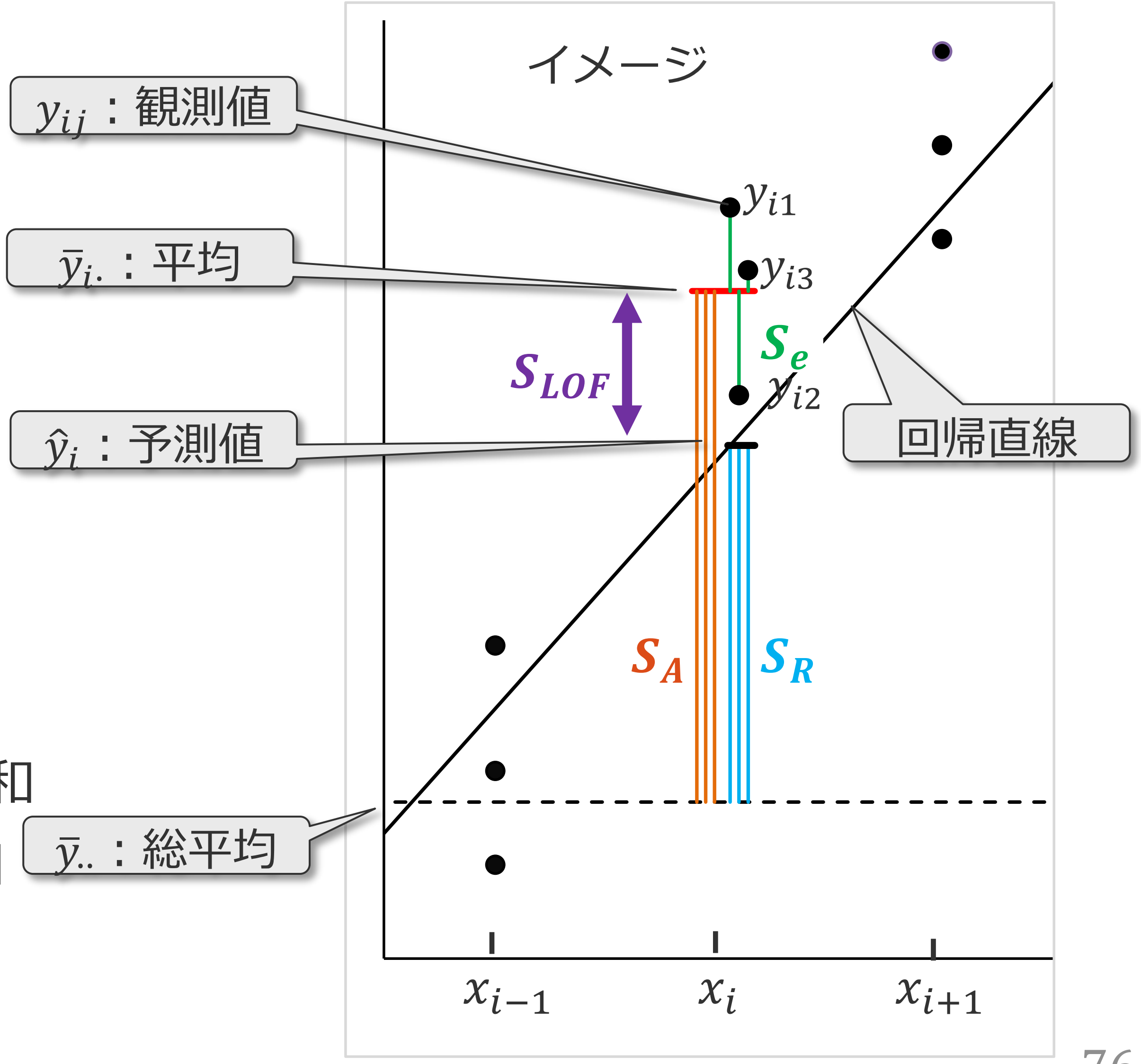
$$=\underbrace{(y_{ij}-\hat{y}_i)}_{S_e^*}+\underbrace{(\hat{y}_i-\bar{y}_{..})}_{S_R}$$

$$=\underbrace{(y_{ij}-\bar{y}_{i.})}_{S_e}+\underbrace{(\bar{y}_{i.}-\hat{y}_i)}_{S_{LOF}}+\underbrace{(\hat{y}_i-\bar{y}_{..})}_{S_R}$$

S_A：質的因子と見なした場合の水準間の平方和

S_R：回帰の平方和、　S_e：純粋誤差の平方和

S_{LOF}： LOFの平方和、 S_e^* ：残差平方和



繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

●個々の値の解析と平均値の解析

表示 1.3.9

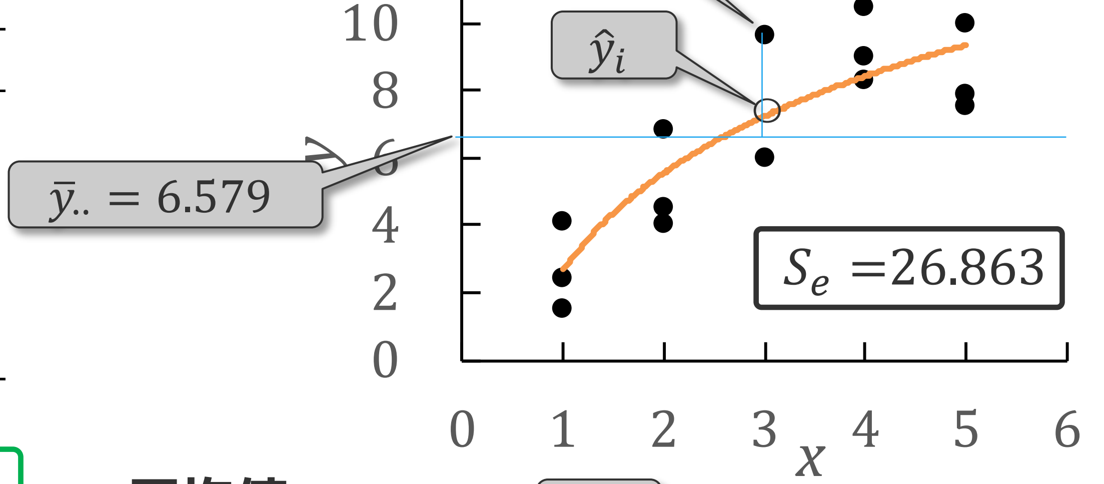
x	y			n	平均	偏差	平方和
1	2.4	4.1	1.5	3	2.667	-3.912	3.487
2	6.8	4.5	4.0	3	5.100	-1.479	4.460
3	9.6	6.0		2	7.800	1.221	6.480
4	10.5	8.3	9.0	3	9.267	2.688	2.527
5	7.9	7.5	10.0	3	8.467	1.888	3.607
平均			6.579				
平方和			108.384			87.824	20.560
			全体			水準間	繰返し

表示 1.3.10

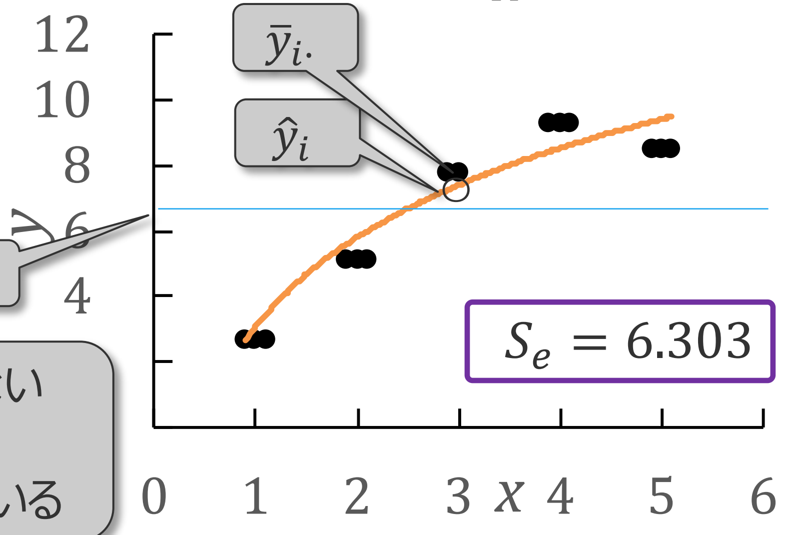
要因	平方和	自由度	平均平方	F比	p値
モデル	81.521	1			
残差	26.863	12	2.24		
LOF	6.303	3	2.10	0.92	0.470
純粋誤差	20.560	9	2.28	1.00	
全体	108.384	13			

有意ではない
モデルが
あてはまっている

(a) **個々の値**



(b) **平均値**



繰り返しのある場合：Excel ソルバーによる解析

●個々の値の解析と平均値の解析

表示 1.3.9

x	y			n	平均	偏差	平方和
1	2.4	4.1	1.5	3	2.667	-3.912	3.487
2	6.8	4.5	4.0	3	5.100	-1.479	4.460
3	9.6	6.0		2	7.800	1.221	6.480
4	10.5	8.3	9.0	3	9.267	2.688	2.527
5	7.9	7.5	10.0	3	8.467	1.888	3.607
平均			6.579				
平方和			108.384			87.824	20.560
			全体			水準間	繰返し

表示 1.3.10

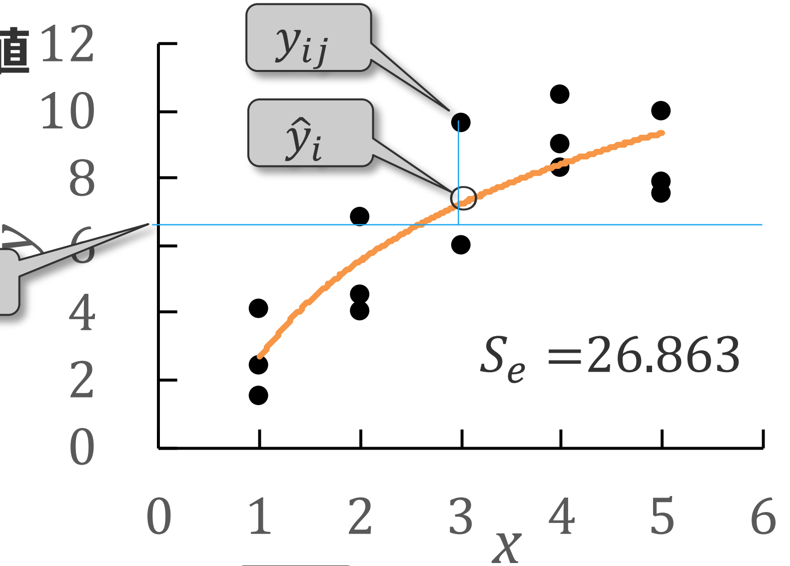
70.601

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
モデル	$\boxed{81.521}$	1			
残差	26.863	12	2.24		
LOF	6.303	3	2.10	0.92	0.470
純粋誤差	20.560	9	2.28	1.00	
全体	108.384	13			

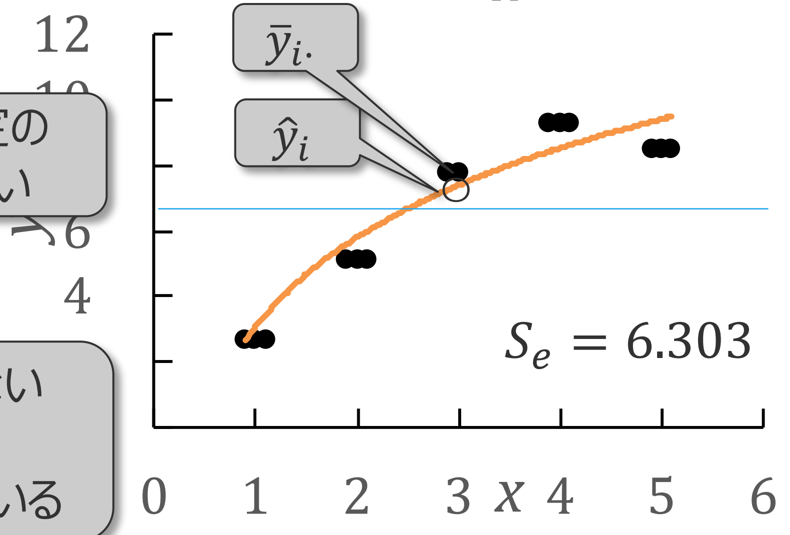
モデルの F 検定の結果を用いない

有意ではないモデルがあてはまっている

(a) **個々の値**



(b) **平均値**



繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

p.38

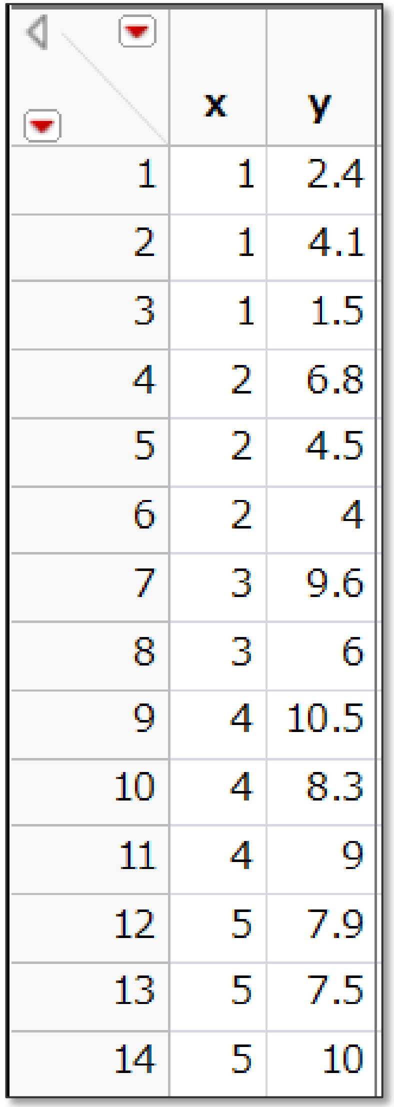
●データテーブルの作成

（a）個々の値のデータテーブルの作成

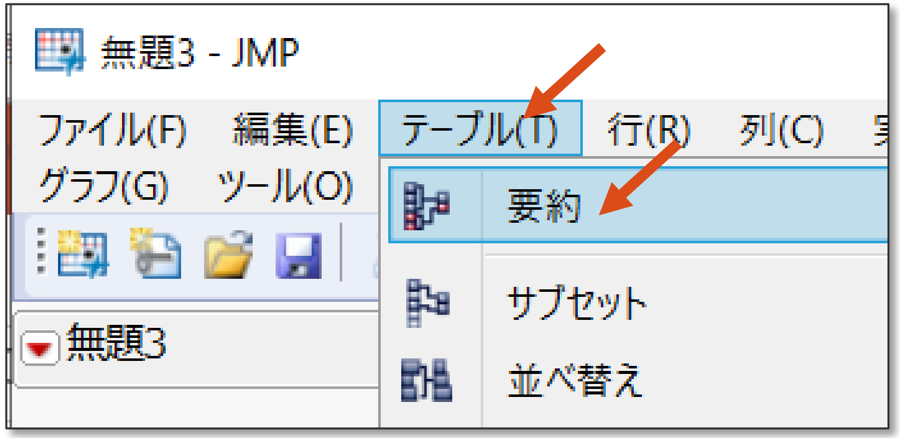
表示1.3.8 （改変）

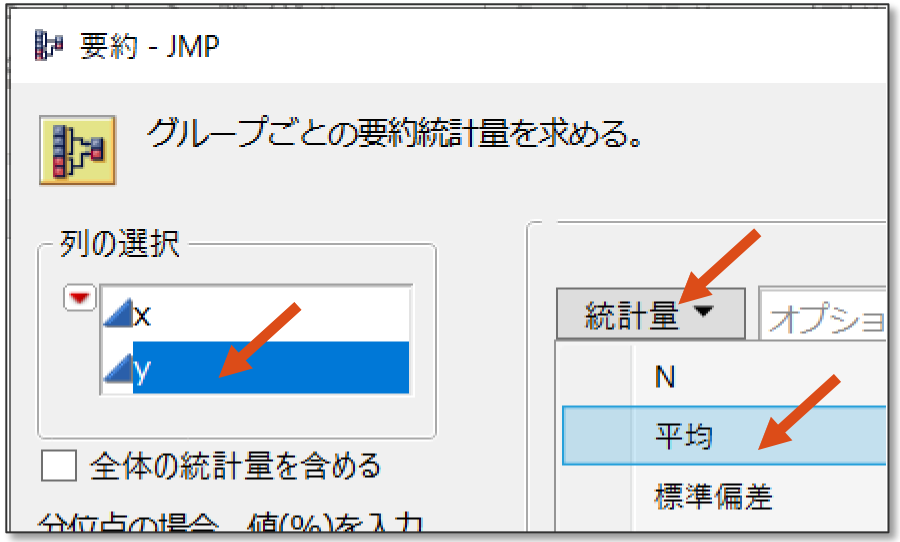
x	y			平均
1	2.4	4.1	1.5	2.7
2	6.8	4.5	4.0	5.1
3	9.6	6.0		7.8
4	10.5	8.3	9.0	9.3
5	7.9	7.5	10.0	8.5

（13-指数曲線2.jmp で提供）



	x	y
1	1	2.4
2	1	4.1
3	1	1.5
4	2	6.8
5	2	4.5
6	2	4
7	3	9.6
8	3	6
9	4	10.5
10	4	8.3
11	4	9
12	5	7.9
13	5	7.5
14	5	10





（b）平均値のデータテーブルの作成

［テーブル］＞［要約］

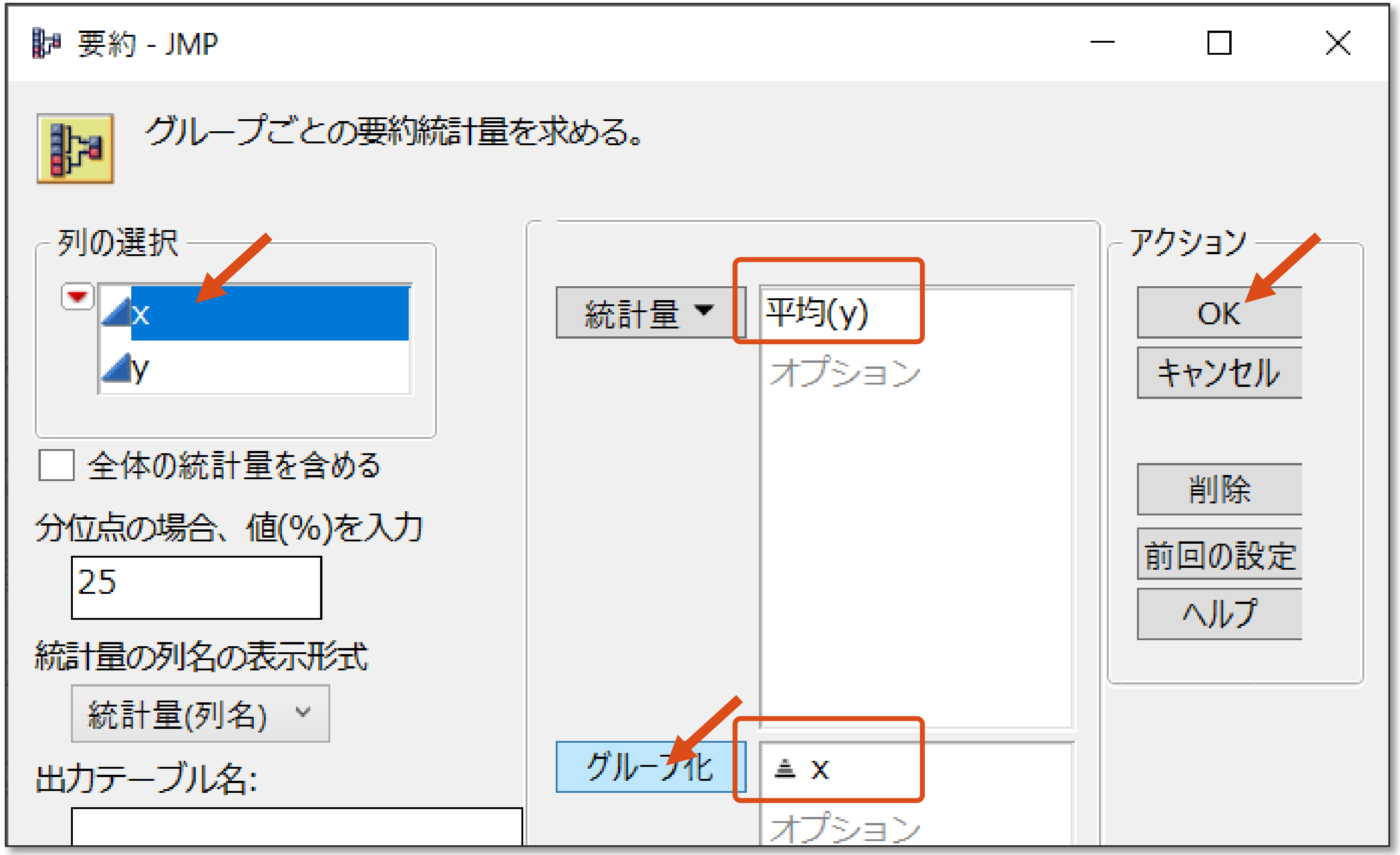
y を選択して［統計量］＞［平均］

繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

p.38

●データテーブルの作成

（b）平均値のデータテーブルの作成



	x	行数	平均(y)
1	1	3	2.666666
2	2	3	5.1
3	3	2	7.8
4	4	3	9.266666
5	5	3	8.466666

	x	n	ybar
1	1	3	2.666666
2	2	3	5.1
3	3	2	7.8
4	4	3	9.266666
5	5	3	8.466666

繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

(a) 個々の値の解析

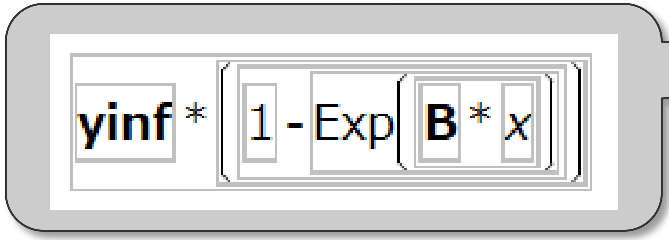
モデル

$$y = y_\infty\left(1 - \exp(Bx)\right)$$

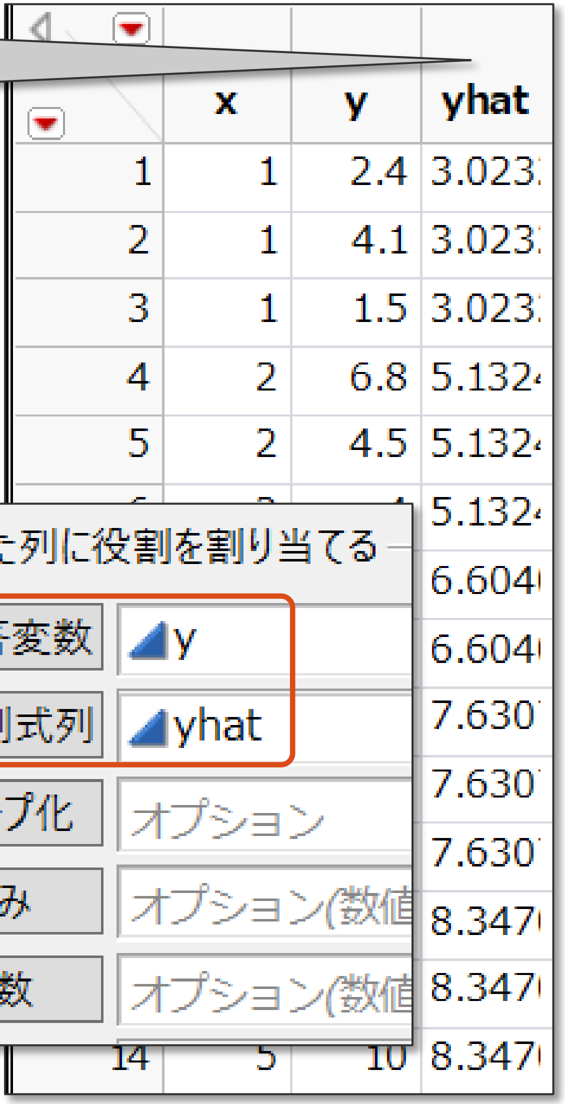
初期値

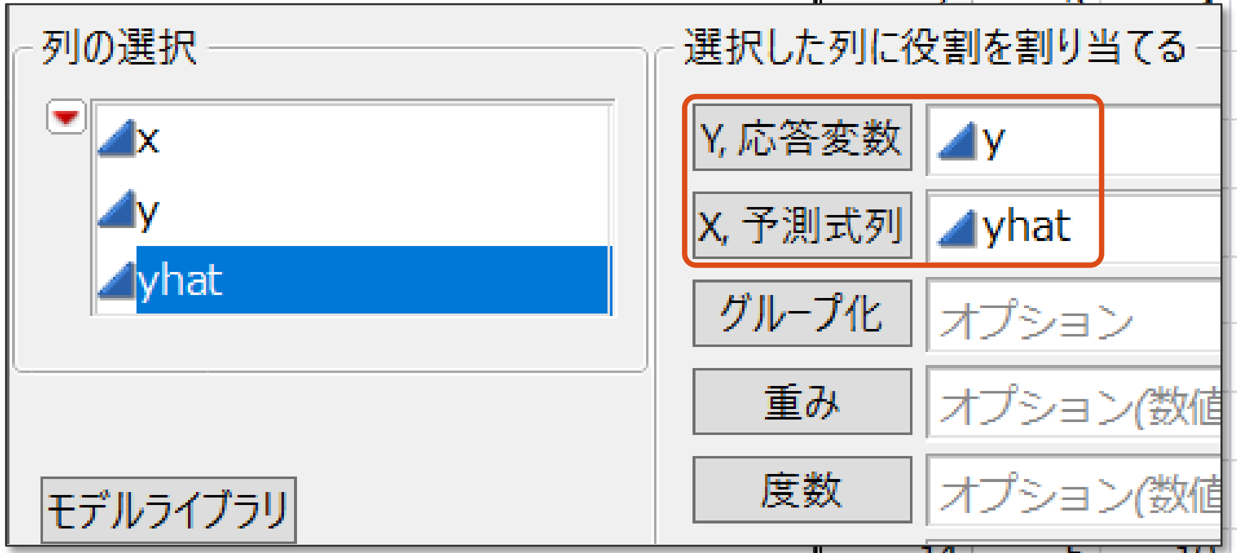
$$y_\infty = 10$$

$$B = -0.36$$



「パラメータ」、yinf、×、(、)、
1、−、「超越関数」、Exp、B、
×、「テーブル列」、x





(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値 − 予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

p.38

（b）平均値の解析

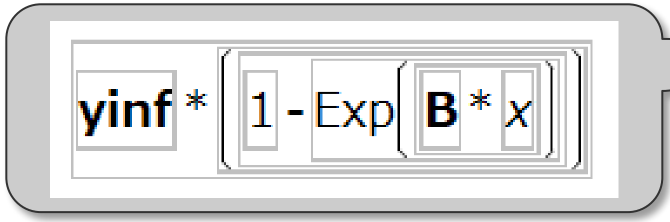
モデル

$$y = y_\infty\left(1 - \exp(Bx)\right)$$

初期値

$$y_\infty = 10$$

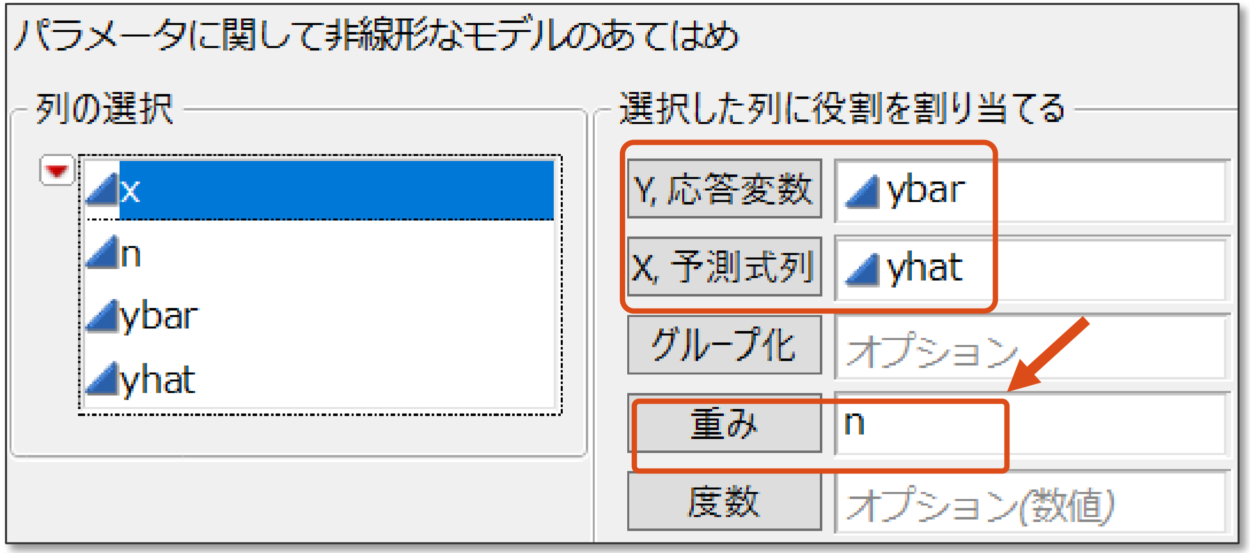
$$B = -0.36$$



「パラメータ」、yinf、×、(、)、
1、−、「超越関数」、Exp、B、
×、「テーブル列」、x

	x	n	ybar	yhat
1	1	3	2.667	3.02323
2	2	3	5.1	5.13247
3	3	2	7.8	6.60404
4	4	3	9.267	7.63072
5	5	3	8.467	8.34701

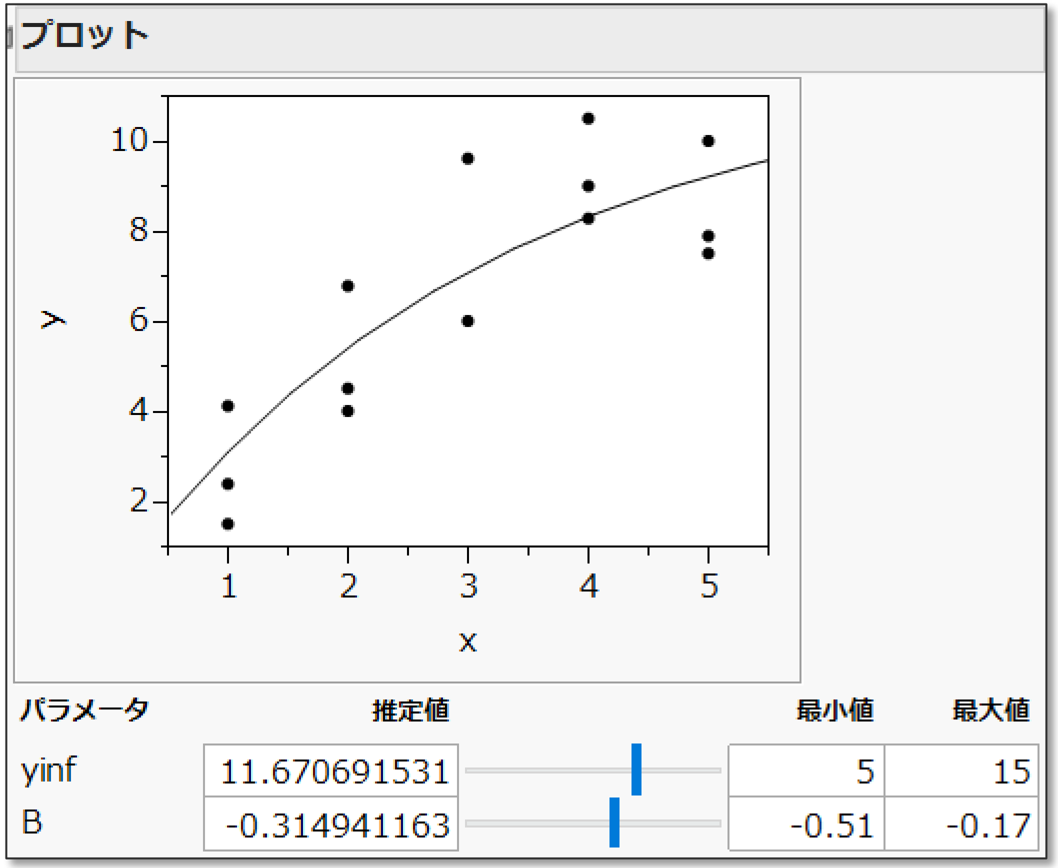
(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の２乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定



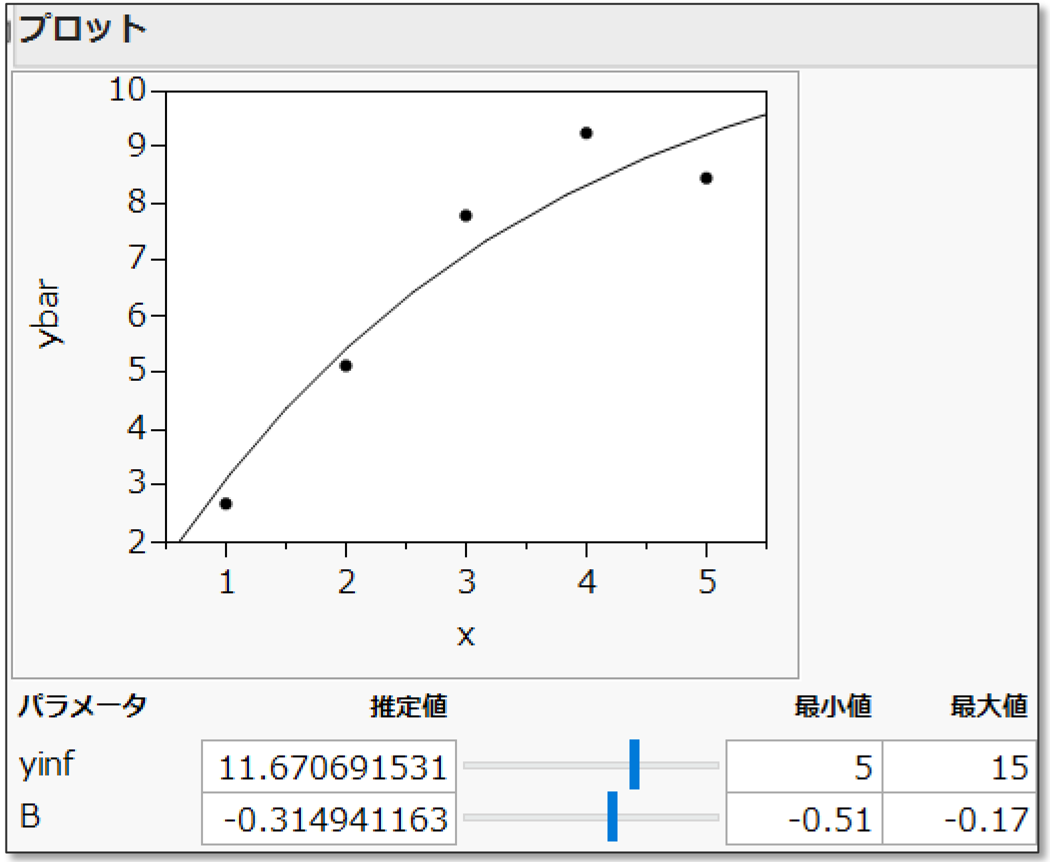
繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

●個々の値の解析と平均値の解析

(a) **個々の値**の解析



(b) **平均値**の解析



繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

p.38

●個々の値の解析と平均値の解析

表示1.3.8 データとExcelソルバーによる解析

	A	B	C	D	E
4	*x*		*y*		*yhat*
5	1	2.4	4.1	1.5	3.15
6	2	6.8	4.5	4.0	5.45
7	3	9.6	6.0		7.13
8	4	10.5	8.3	9.0	8.36
9	5	7.9	7.5	10.0	9.25
10				yinf	11.671
11				B	-0.315
12				S	26.863

I	J	K
n	平均	*yhat*
3	2.667	3.15
3	5.100	5.45
2	7.800	7.13
3	9.267	8.36
3	8.467	9.25
		11.671
		-0.315
		6.303

表示1.3.11 JMP の解

(a) **個々の値**についての解析

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
26.86296141	12	2.2385801	1.4961885

パラメータ	推定値	近似標準誤差	下側信頼限界	上側信頼限界
yinf	11.670691531	2.90097298	8.24045712	42.8806861
B	-0.314941163	0.14514072	-0.6733802	-0.0543217

解法: 解析 Gauss-Newton

(b) **平均値**についての解析

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
6.3029614105	3	2.1009871	1.4494782

パラメータ	推定値	近似標準誤差	下側信頼限界	上側信頼限界
yinf	11.670691531	2.81040597	7.43820885	.
B	-0.314941163	0.1406095	-0.8890965	.

解法: 解析 Gauss-Newton

繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

p.39

●あてはまりの悪さ（LOF）

２つの残差平方和から純粋誤差の平方和と自由度を計算

LOF の F 検定で有意ではない（$p = 0.470$）

モデルはあてはまっていることが分かる（第２部 §2.1）

表示1.3.10 分散分析表（改変）

要因	平方和	自由度	平均平方	F比	p値
モデル	81.521	1			
残差	26.863	12	2.24		
LOF	6.303	3	2.10	0.92	0.470
純粋誤差	20.560	9	2.28	1.00	
全体	108.384	13			

表示1.3.11 JMP の解

(a) **個々の値**についての解析

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
26.86296141	12	2.2385801	1.4961885

パラメータ	推定値	近似標準誤差	下側信頼限界	上側信頼限界
yinf	11.670691531	2.90097298	8.24045712	42.8806861
B	-0.314941163	0.14514072	-0.6733802	-0.0543217

解法: 解析 Gauss-Newton

(b) **平均値**についての解析

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
6.3029614105	3	2.1009871	1.4494782

パラメータ	推定値	近似標準誤差	下側信頼限界	上側信頼限界
yinf	11.670691531	2.81040597	7.43820885	.
B	-0.314941163	0.1406095	-0.8890965	.

解法: 解析 Gauss-Newton

繰り返しのある場合：JMP［非線形回帰］による解析

p.39

●分散分析表、あてはまりの悪さ（LOF）、決定係数

JMPでは「モデルのあてはめ」（第２部 §2.1）のように
SSE (残差平方和) を LOF と純粋誤差に分解して F 検定を行う出力が得られない
→ 分散分析表を作成して LOF の検定を補う（水準ごとに繰り返しがある場合）

非線形回帰分析では、総平方和＝回帰平方和＋残差平方和 が成立しないので、
モデル全体の F 検定の部分を用いない（第１部（§4.3）で定義した決定係数を用いない）
分散分析表の LOF の検定のみを用いる（表示2.2.8 参照 p.85）

表示1.3.10 分散分析表　70.601

要因	平方和	自由度	平均平方	F 比	p 値
モデル	81.521	1			
残差	26.863	12	2.24		
LOF	6.303	3	2.10	0.92	0.470
純粋誤差	20.560	9	2.28	1.00	
全体	108.384	13			

モデルの F 検定の結果を
用いない

本セミナー末尾の補足を参照
「非線形回帰における分散分析表
と決定係数の考え方」

p.39

（5）パワーモデル

（べき乗モデル）

パワーモデル

p.39

●指数曲線モデルとパワーモデル

$y = b_0 b_1^x$	$y = y_0 b^x$	（1.3.1）	指数曲線モデル
$y = b_0 x^{b_1}$		（1.3.12）	パワーモデル（べき乗モデル）

対数変換すると直線関係になる

$\ln(y) = \ln(b_0) + x\ln(b_1)$	$Y = B_0 + B_1 x$		指数曲線モデル
$\ln(y) = \ln(b_0) + b_1 \ln(x)$	$Y = B_0 + b_1 X$	（1.3.13）	パワーモデル

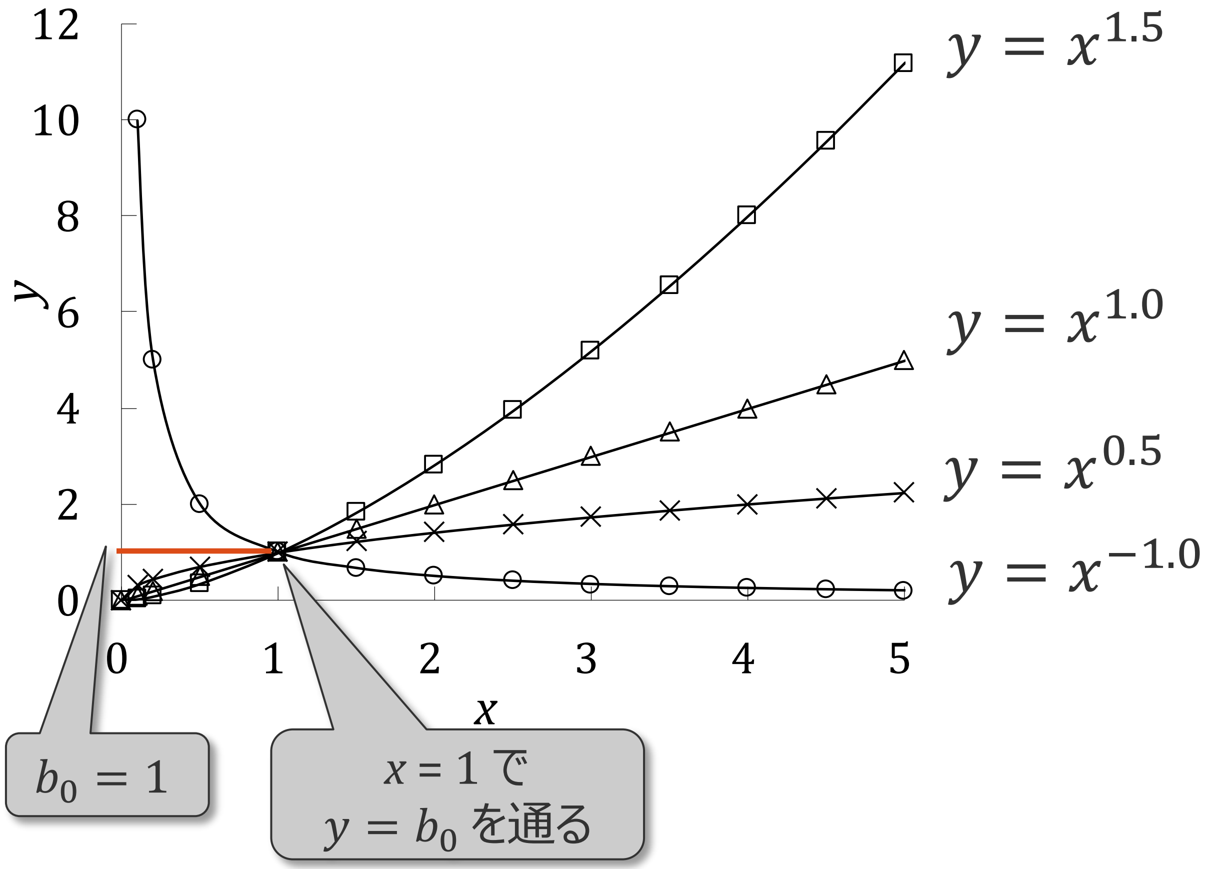
xも対数変換

パワーモデル

p.39

●パワーモデルの特徴

表示 1.3.12 $y = b_0 x^{b_1}$の関係（$b_0 = 1$）



$y = b_0 x^{b_1}$ （1.3.12）

$y = 1 \times x^{b_1}$ $b_1 = -1.0, 0.5, 1.0, 1.5$

$x = 1$ で$y = b_0$を通る（事例は b_0=1）

$b_1 > 0$ で増加関数

$b_1 < 0$ で減少関数

いずれの場合もy の最小値は 0

$x < 0$ には適用できない

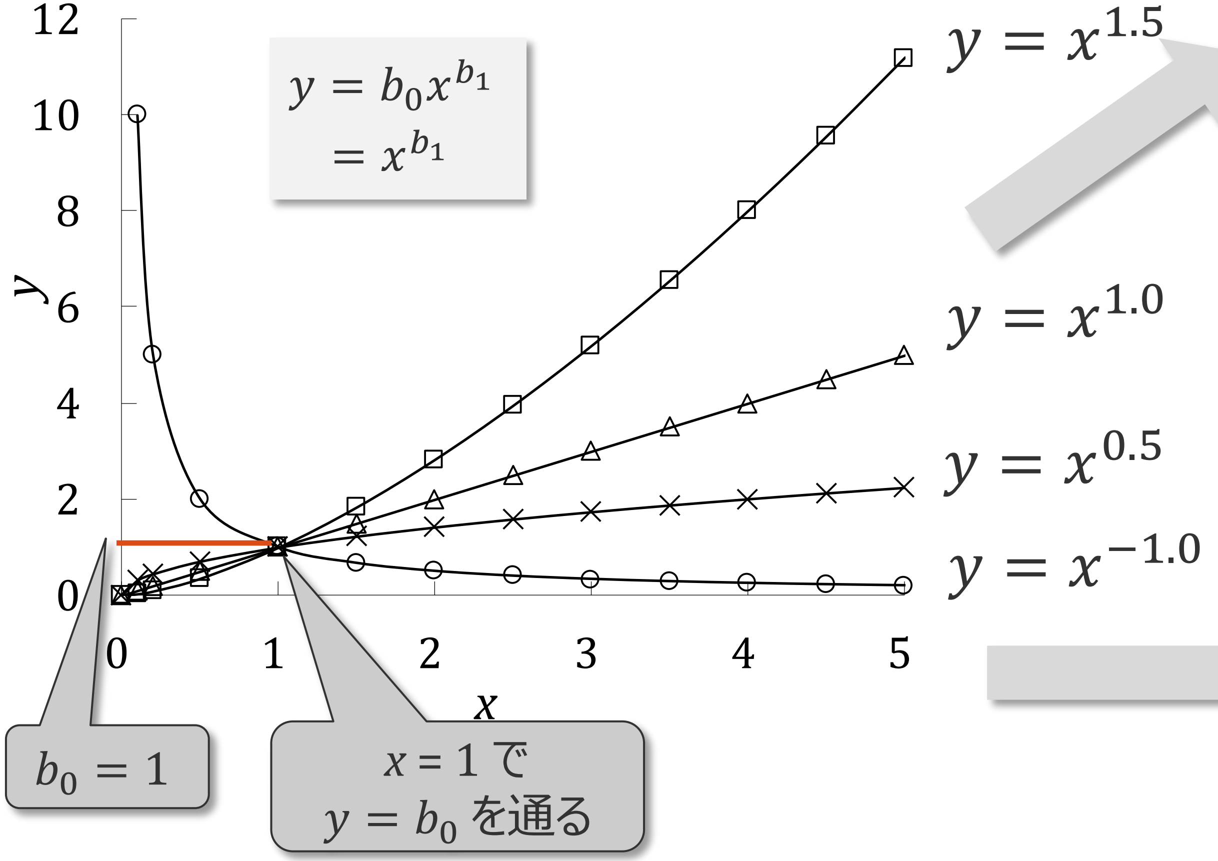
$y = x^{b_1}$

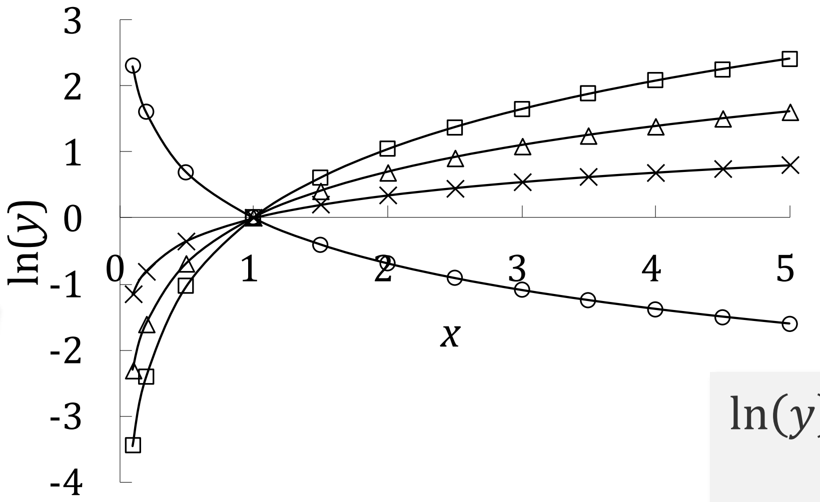
$= (-4)^{0.5} = \sqrt{-4} =?$

パワーモデル

●パワーモデルの対数変換

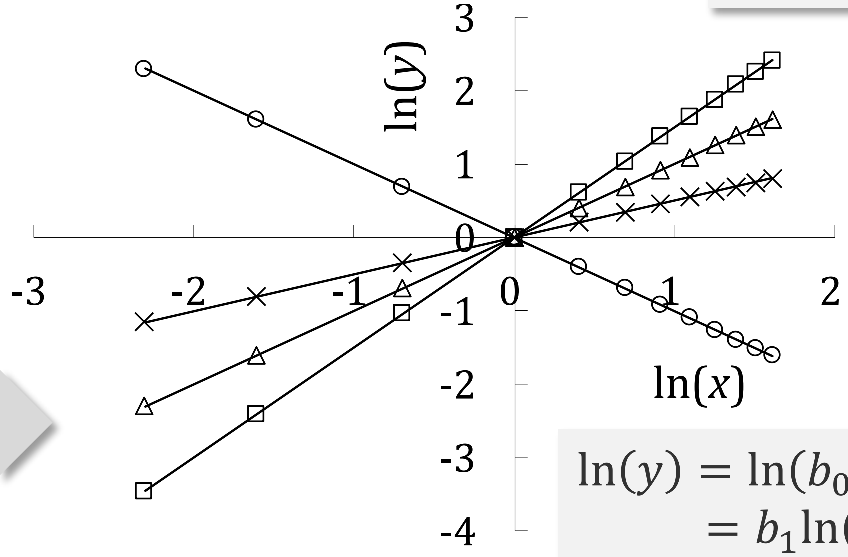
表示 1.3.12 $y = b_0 x^{b_1}$の関係（$b_0 = 1$）





片対数変換
(b_0= 1)

$$\ln(y) = b_0 x^{b_1}$$
$$= x^{b_1}$$



両対数変換
(b_0= 1)

$$\ln(y) = \ln(b_0) + b_1 \ln(x)$$
$$= b_1 \ln(x)$$
$$Y = B_0 + b_1 X = b_1 X$$

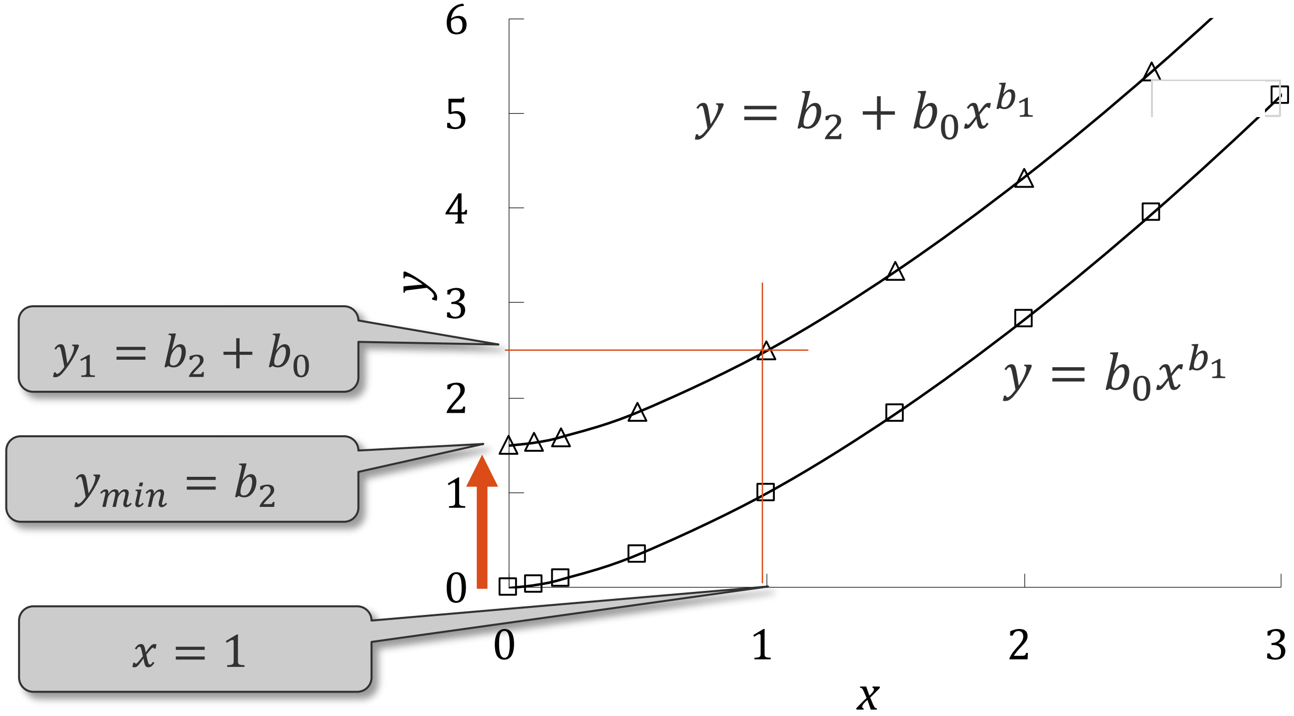
パワーモデル

●パワーモデルの拡張

曲線を b_2 だけ上に移動したパワーモデル

$$y = b_0 x^{b_1} \qquad (1.3.12)$$

$$y = b_2 + b_0 x^{b_1} \qquad (1.3.14)$$



$x = 1 \rightarrow y_1 = b_2 + b_0 1^{b_1} = b_2 + b_0$

$b_2 = y_{min}$

$y_1 = b_2 + b_0 = y_{min} + b_0$

$b_0 = y_1 - y_{min}$

代入

$$y = b_2 + b_0 x^{b_1} \qquad (1.3.14)$$
$$= y_{min} + (y_1 - y_{min}) x^b$$
$$= y_{min} + (y_1 - y_{min}) \exp\big(b \cdot \ln(x)\big)$$
$$= y_{min} + (y_1 - y_{min}) \exp(bX) \qquad (1.3.15)$$

これらのモデルは非線形モデル

Excel ソルバー、JMP［非線形回帰］を用いてパラメータを推定

p.33, 36, 65

演習1.3.1, 1.3.2

指数曲線モデルのあてはめ
（２次曲線モデルのあてはめとの比較）

演習1.3.1, 1.3.2

●データと解析方法

２変量の観測値が4点

（第２部§2.2 のデータ）

解析手順の確認

２次曲線と指数曲線の比較

２次曲線のあてはめ（第２部）

Excel 散布図、LINEST 関数

JMP ［２変量の関係］

指数曲線のあてはめ

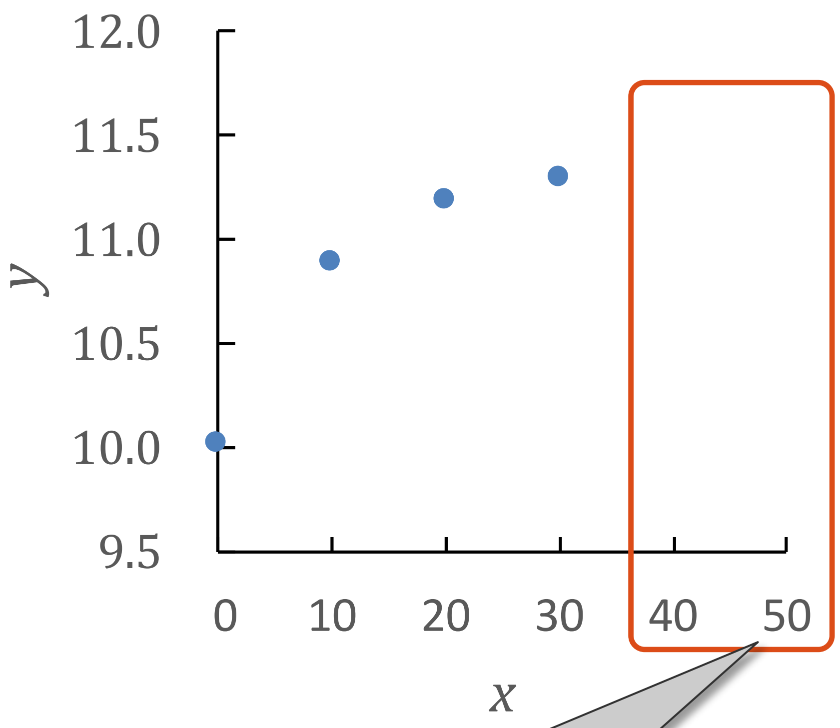
Excel ソルバー

JMP［非線形回帰］

表示1.6.6

x	y
0	10.02
10	10.90
20	11.20
30	11.30
40	
50	

外挿（補外）範囲
（対応するyhat を計算）



外挿（補外）範囲

演習1.3.1, 1.3.2

p.65

- 2 次曲線のあてはめ：Excel による解析

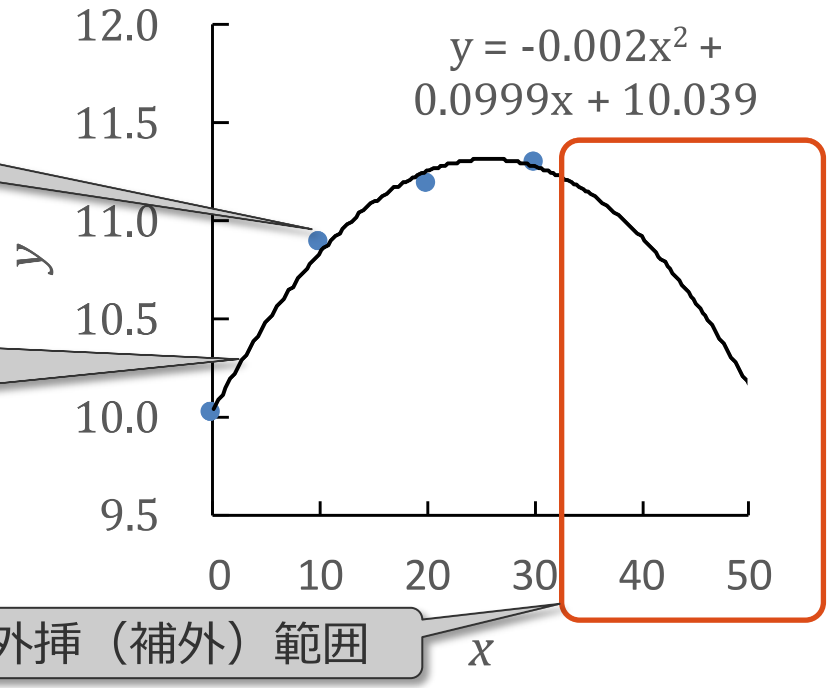
  散布図

  プロットした点を右クリック＞［近似曲線の追加］

  ＞［近似曲線の書式設定］＞［多項式近似］：2 次

  ［前方補外］：20.0

近似曲線の書式設定



プロットを右クリック

［近似曲線の追加］＞［多項式近似］

外挿（補外）範囲

演習1.3.1, 1.3.2

p.65

- 2次曲線のあてはめ：Excelによる解析（LINEST関数）

LINEST関数による回帰分析（第1部§4.3）

x	x^2	y
0	0	10.02
10	100	10.90
20	400	11.20
30	900	11.30

=LINEST(L5:L8,J5:K8,,TRUE)

5行3列

推定式

$$y = 10.039 + 0.100x - 0.002x^2$$

データ数が少ないので、
パラメータ推定値は有意ではない

	x^2	x	const	
回帰係数	-0.002	0.0999	10.0390	
その標準誤差	0.00042	0.0133	0.0828	標準誤差
寄与率	0.9929	0.08497	#N/A	標準偏差
F 比	69.8809	1	#N/A	残差自由度
回帰平方和	1.00908	0.00722	#N/A	残差平方和
t 値	-4.5898	7.51128	121.216	
p 値	0.1366	0.0843	0.0053	

パラメータは有意ではない

演習1.3.1, 1.3.2

p.65

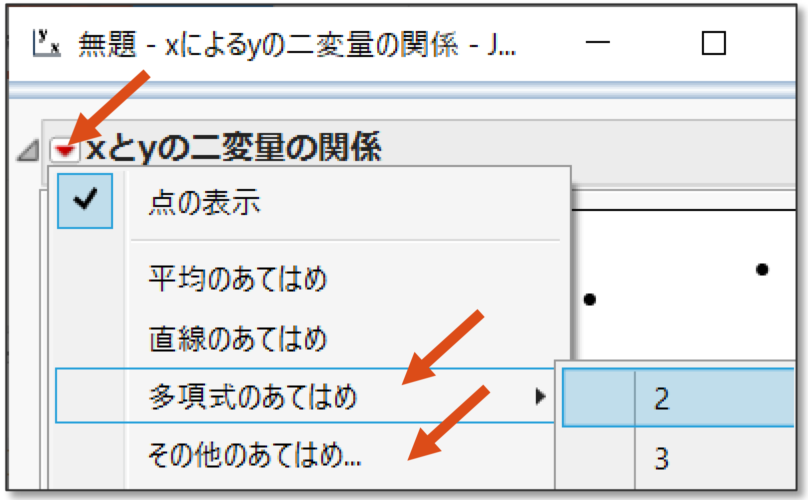
● 2 次曲線のあてはめ：JMP ［二変量の関係］

［多項式のあてはめ］（中心化、第 2 部）
［その他のあてはめ］（中心化を外せる）

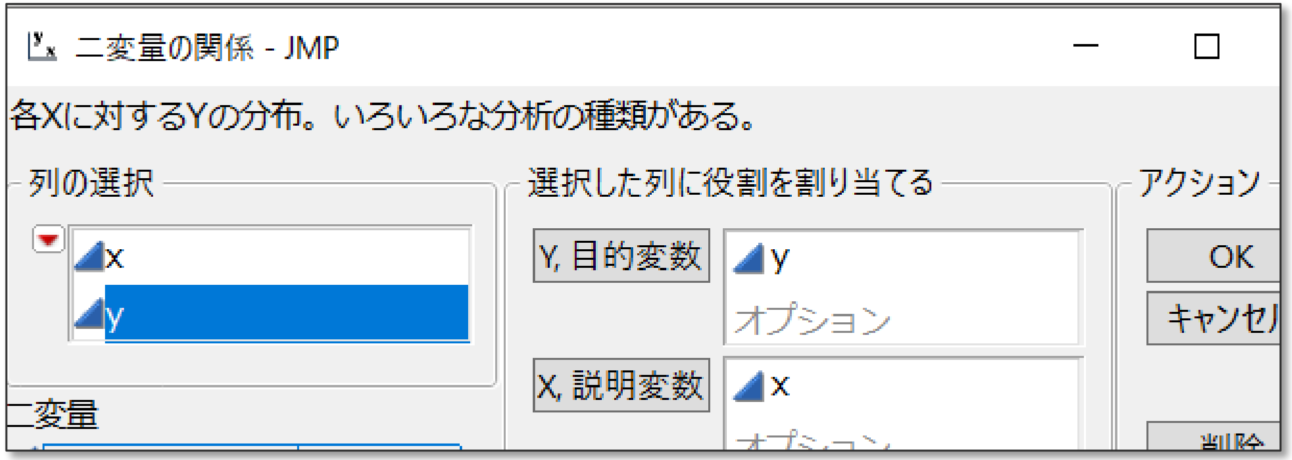
(1)

	x	y
1	0	10.02
2	10	10.9
3	20	11.2
4	30	11.3

(3)

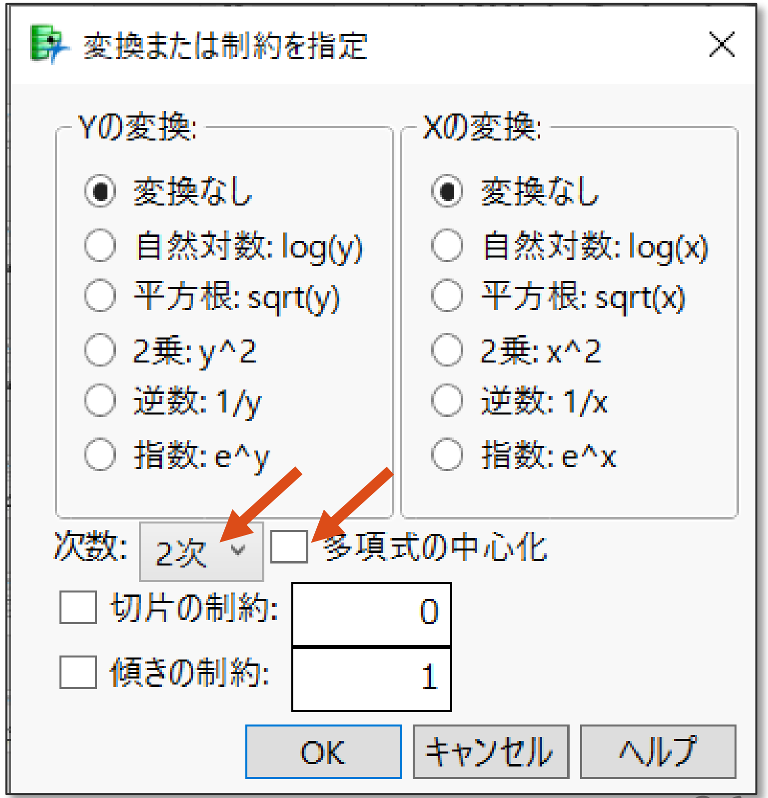


(2)



［その他のあてはめ］ダイアログ

(4)



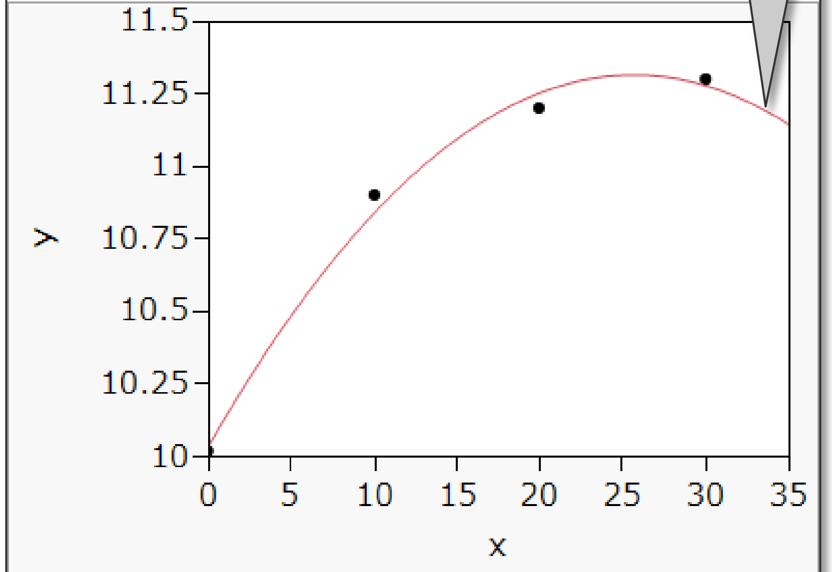
演習1.3.1, 1.3.2

p.65

- 2 次曲線のあてはめ：JMP ［二変量の関係］

外挿は不可

xとyの二変量の関係



多項式のあてはめ 次数=2

多項式のあてはめ 次数=2

y = 10.039 + 0.0999*x - 0.00195*x^2

分散分析

要因	自由度	平方和	平均平方	F値
モデル	2	1.0090800	0.504540	69.8809
誤差	1	0.0072200	0.007220	p値(Prob>F)
全体(修正済み)	3	1.0163000		0.0843

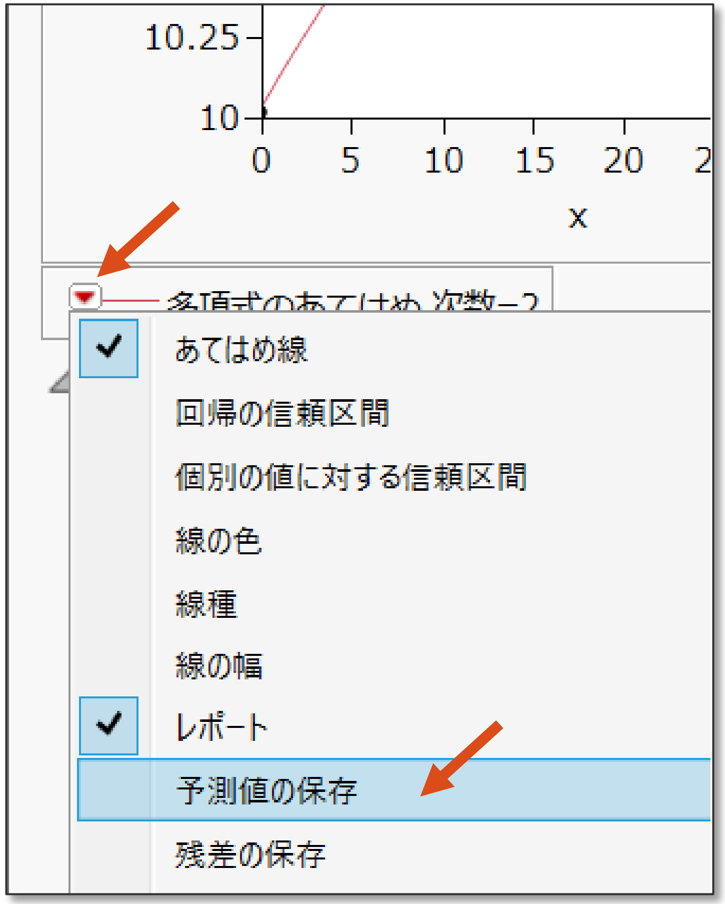
LINEST 関数の結果と一致

パラメータ推定値

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob>|t|)
切片	10.039	0.082819	121.22	0.0053*
x	0.0999	0.0133	7.51	0.0843
x^2	-0.00195	0.000425	-4.59	0.1366

演習1.3.1, 1.3.2

- 2 次曲線のあてはめ：JMP ［二変量の関係］
  ［予測値の保存］と外挿

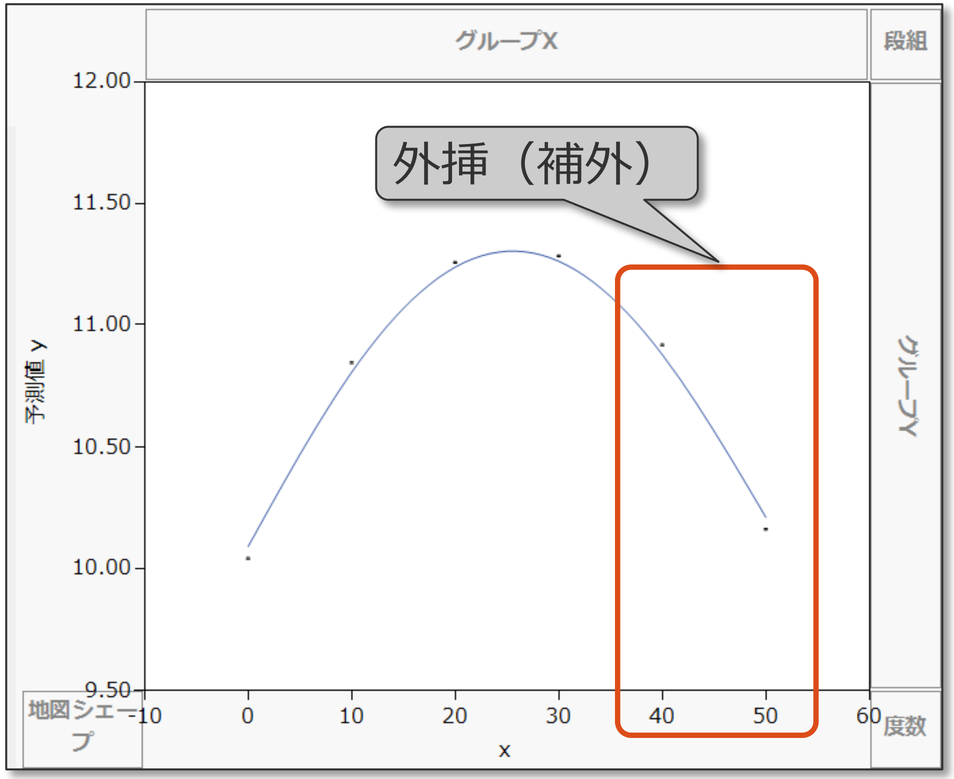


保存された列
計算式がある

	x	y	予測値 y
1	0	10.02	10.039
2	10	10.9	10.843
3	20	11.2	11.257
4	30	11.3	11.281
5	40	•	10.915
6	50	•	10.159

入力

推定



演習1.3.1, 1.3.2

●指数曲線のあてはめ：Excel ソルバー

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

$$y_0 \approx 10$$

$$y_\infty \approx 12$$

$$10.9 = 12 + (10 - 12) \times \exp(10B)$$

$$B = -0.06 \approx -0.1$$

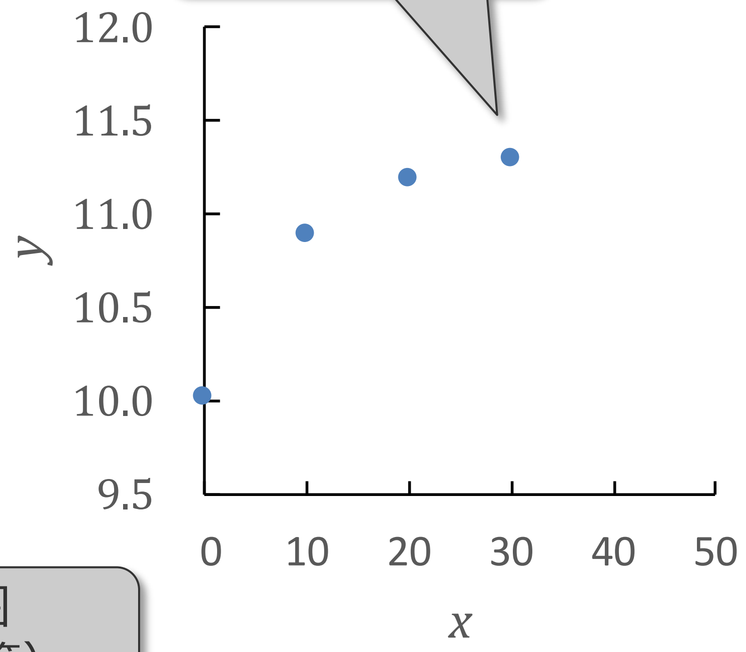
(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

表示1.6.6

x	y
0	10.02
10	10.90
20	11.20
30	11.30
$\boxed{40}$	
$\boxed{50}$	

外挿（補外）範囲
（対応するyhat を計算）

増加して
ある値に接近



演習1.3.1, 1.3.2

●指数曲線のあてはめ：Excel ソルバー

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \qquad (1.3.9)$$

$y_0 \approx 10$

$y_\infty \approx 12$

$10.9 = 12 + (10 - 12) \times \exp(10B)$

$B = -0.06 \approx -0.1$

x	y	yhat
0	10.02	10.000
10	10.90	11.264
20	11.20	11.729
30	11.30	11.900
40		11.963
50		11.987
	y0	10.000
	yinf	12.000
	B	-0.100
	S	0.774
		初期値

yhat の計算式の入力

残差 e の 2 乗和の計算範囲

グラフ作成に利用（外挿）

パラメータと初期値

残差 e の 2 乗和

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の 2 乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

演習1.3.1, 1.3.2

●指数曲線のあてはめ：Excel ソルバー

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \quad (1.3.9)$$

$$y_0 \approx 10$$

$$y_\infty \approx 12$$

$$10.9 = 12 + (10 - 12) \times \exp(10B)$$

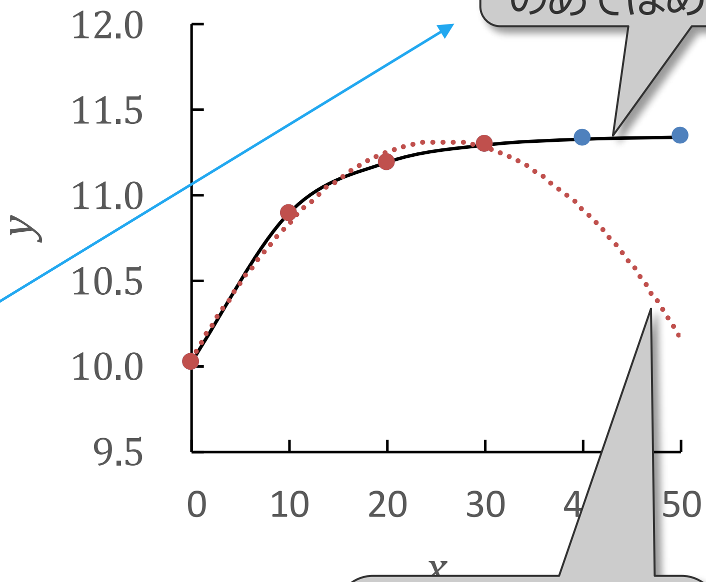
$$B = -0.06 \approx -0.1$$

テキストでは
-1 or -2

$$y = 11.35 + (10.02 - 11.35)\exp(-0.108x)$$
$$= 11.35 - 1.33\exp(-0.108x)$$

表示 1.6.6 指数曲線のあてはめ（改変）

x	y	$yhat$	$yhat$
0	10.02	10.000	10.020
10	10.90	11.264	10.900
20	11.20	11.729	11.199
30	11.30	11.900	11.300
40		11.963	11.335
50		11.987	11.347
	y0	10.000	10.020
	yinf	12.000	11.353
	B	-0.100	-0.108
	S	0.774	0.000
		初期値	結果



指数曲線のあてはめ

２次式のあてはめ
(前方補外20)

演習1.3.1, 1.3.2

●指数曲線のあてはめ：Excel ソルバー

$$y = 11.35 + (10.02 - 11.35)\exp(-0.108x)$$
$$= 11.35 - 1.33\exp(-0.108x)$$

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \quad (1.3.9)$$

$y_0 \approx 10$

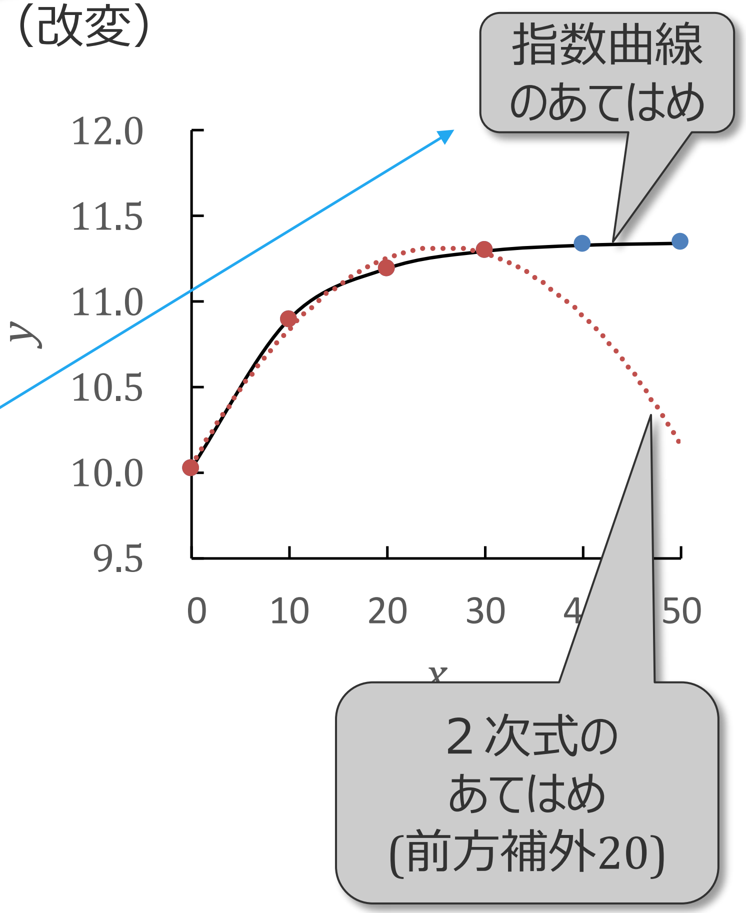
$y_\infty \approx 12$

$10.9 = 12 + (10 - 12) \times \exp(10B)$

$B = -0.06 \approx -0.1$

表示 1.6.6 指数曲線のあてはめ（改変）

x	y	$yhat$	$yhat$
0	10.02	10.000	10.020
10	10.90	11.264	10.900
20	11.20	11.729	11.199
30	11.30	11.900	11.300
40		11.963	11.335
50		11.987	11.347
	y0	10.000	10.020
	yinf	12.000	11.353
	B	-0.100	-0.108
	S	0.774	0.000
		初期値	結果



投与量が増すと、
副作用などのために効果が減少する場合
　→ ２次曲線のあてはめが妥当
投与量を増しても効果には上限がある場合
　→ 指数曲線のあてはめが妥当
　（統計解析の問題ではなく、固有技術の問題）

演習1.3.1, 1.3.2

●指数曲線のあてはめ：Excel ソルバー

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \quad (1.3.9)$$

$y_0 \approx 10$

$y_\infty \approx 12$

$10.9 = 12 + (10 - 12) \times \exp(10B)$

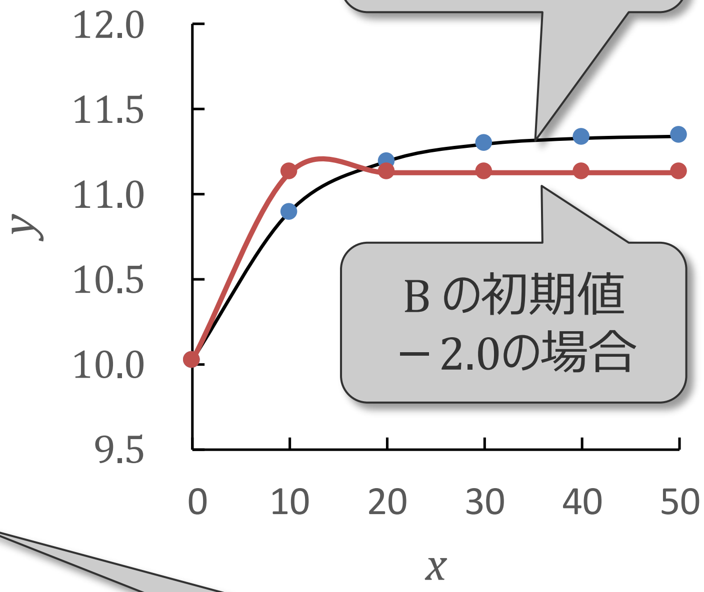
$B = -0.06 \approx -0.1$

テキストでは
-1 or -2

Bの初期値が－1.0でも解は正確
Bの初期値を－2.0にすると
同じ解（正しい解）は得られない
適切な初期値の設定が重要

表示 1.6.6 指数曲線のあてはめ（改変）

x	y	$yhat$	$yhat$
0	10.02	10.020	10.020
10	10.90	10.900	11.133
20	11.20	11.199	11.133
30	11.30	11.300	11.133
40		11.335	11.133
50		11.347	11.133
	y0	10.020	10.020
	yinf	11.353	11.133
	B	-0.108	-2.000
	S	0.000	0.087
		結果	結果
	Bの初期値	-1.000	-2.000



Bの初期値
－1.0の場合

Bの初期値
－2.0の場合

正しい解が
得られていない

演習1.3.1, 1.3.2

p.66

●指数曲線のあてはめ：JMP ［非線形回帰］

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \quad (1.3.9)$$

$$y_0 \approx 10$$

$$y_\infty \approx 12$$

$$10.9 = 12 + (10 - 12) \times \exp(10B)$$

$$B = -0.06 \approx -0.1$$

	x	y	yhat
1	0	10.02	10
2	10	10.9	11.2642
3	20	11.2	11.7293
4	30	11.3	11.9004

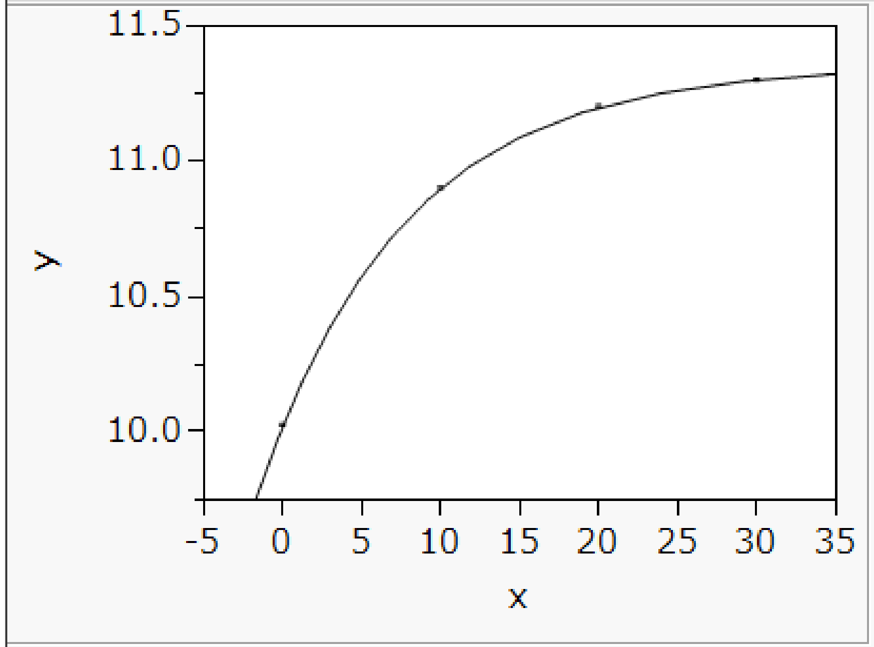
yinf + (y0 - yinf) * Exp(B * x)

(1) モデル式（計算式）の選択
(2) パラメータ初期値の設定
(3) 予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
(4) 残差 e（観測値－予測値）の設定
(5) 残差の2乗和 S の設定
(6) S を最小にするパラメータを推定

演習1.3.1, 1.3.2

●指数曲線のあてはめ：JMP ［非線形回帰］

プロット



パラメータ	推定値	最小値	最大値
y0	10.01994139	5	15
yinf	11.352563738	6	18
B	-0.108086836	-0.15	-0.05

$$y = 11.35 + (10.02 - 11.35)\exp(-0.108x)$$
$$= 11.35 - 1.33\exp(-0.108x)$$

信頼限界が得られる

表示 1.6.7 JMP による指数曲線のあてはめ

解

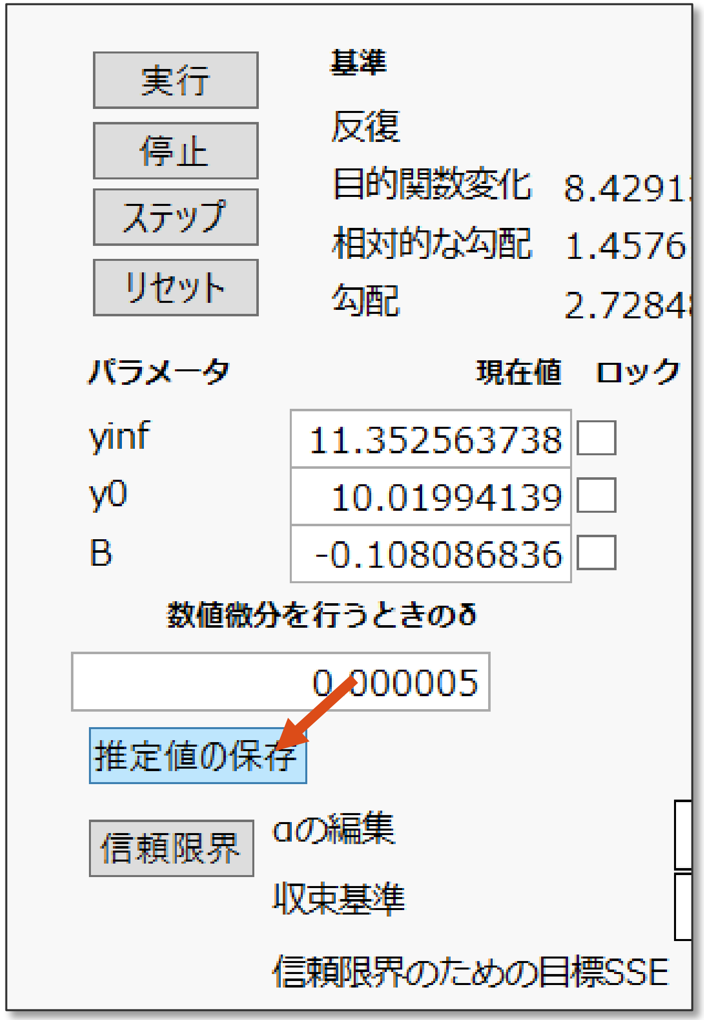
SSE	DFE	MSE	RMSE
1.1555695e-6	1	1.1556e-6	0.001075

パラメータ	推定値	近似標準誤差	下側信頼限界	上側信頼限界
y0	10.01994139	0.00107333	10.006303	10.033579
yinf	11.352563738	0.00147391	11.3342481	11.3717328
B	-0.108086836	0.00038991	-0.1131399	-0.1032255

解法: 数値 Gauss-Newton

演習1.3.1, 1.3.2

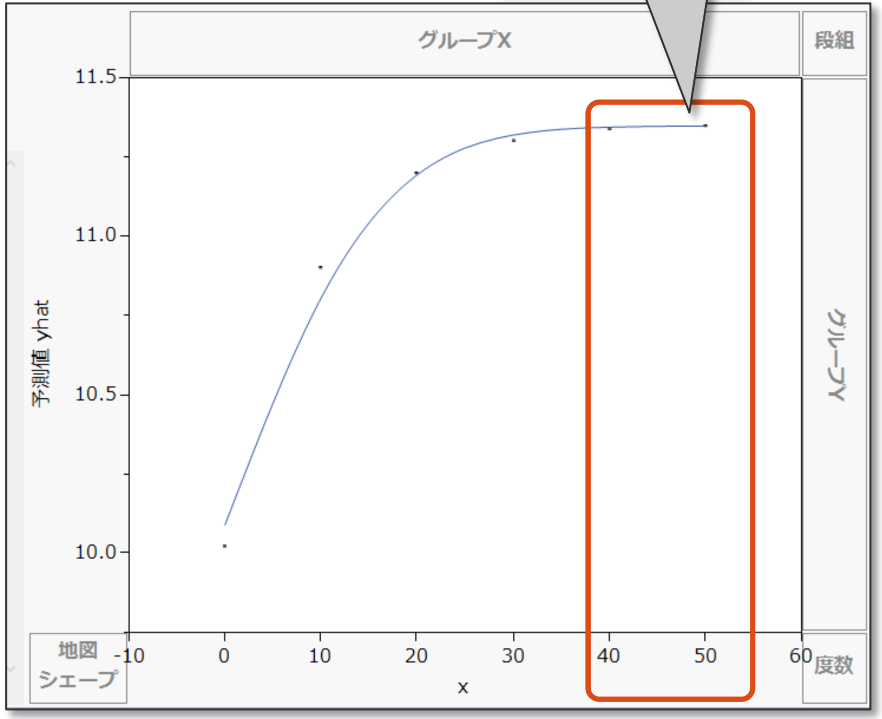
●指数曲線のあてはめ：JMP［非線形回帰］



	x	y	yhat
1	0	10.02	10.01994
2	10	10.9	10.90040
3	20	11.2	11.19914
4	30	11.3	11.30050
5	40	•	11.33490
6	50	•	11.34657

［推定値の保存］により
パラメータの解で再計算

外挿



外挿

演習1.3.1, 1.3.2（補足）

- Excel［近似曲線の追加］の利用上の注意事項

  Excelの散布図に近似曲線を追加する機能

  この中の［指数近似］は、データ y を対数変換し、

  最小２乗法で直線回帰をしている

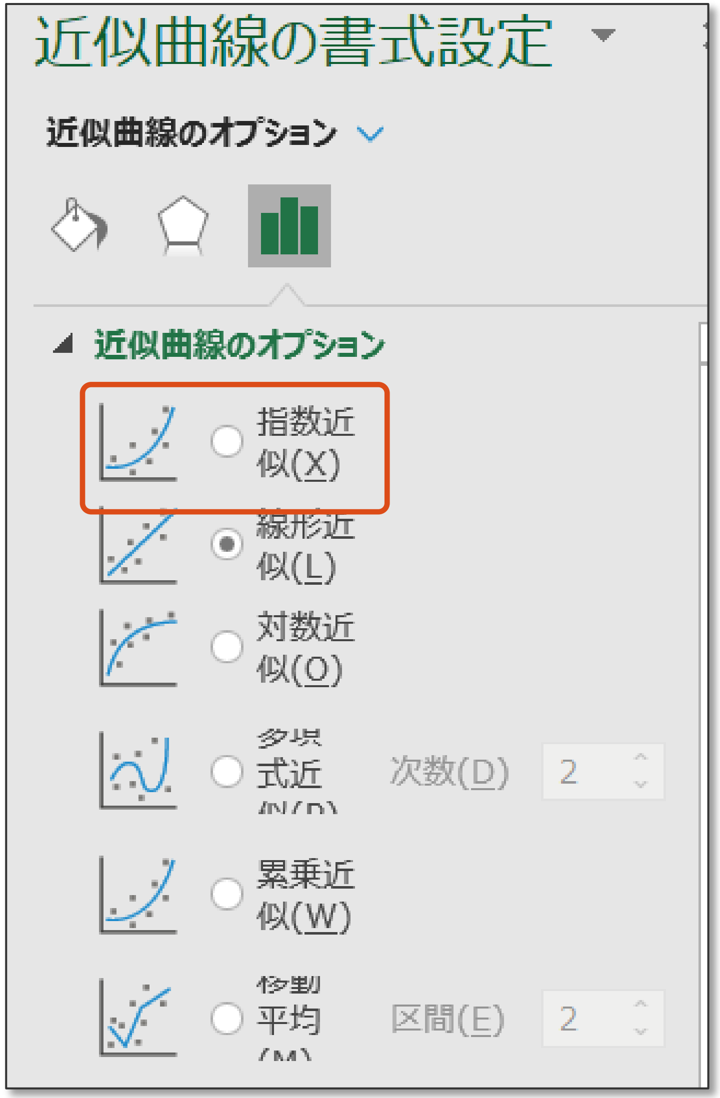
  非線形回帰による解析結果ではないので注意

  あてはめるモデル式と直線回帰

$$\ln(y) = \ln(y_0) + Bx$$

$$\downarrow$$

$$y = y_0 \exp(Bx) \qquad (1.3.5)$$



演習1.3.1, 1.3.2（補足）

●Excel［近似曲線の追加］の利用上の注意事項

x と y の［指数近似］

$$y = 10.23 \times \exp(0.0039x)$$

x と ln(y) の［線形近似］

一致

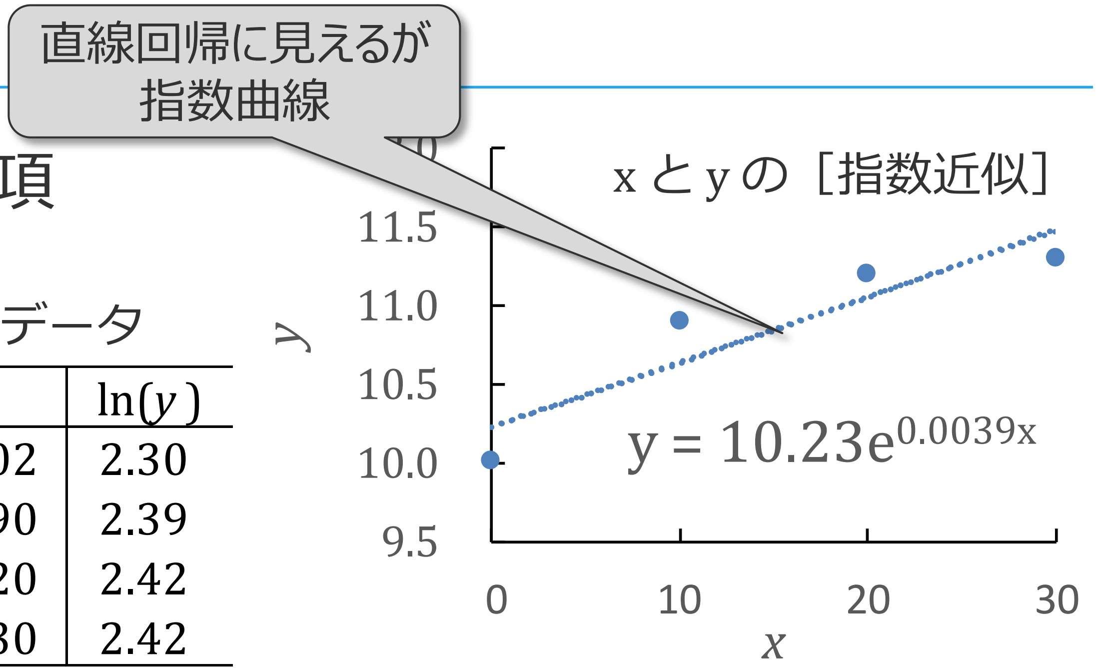
$$\ln(y) = 2.3253 + 0.0039x$$

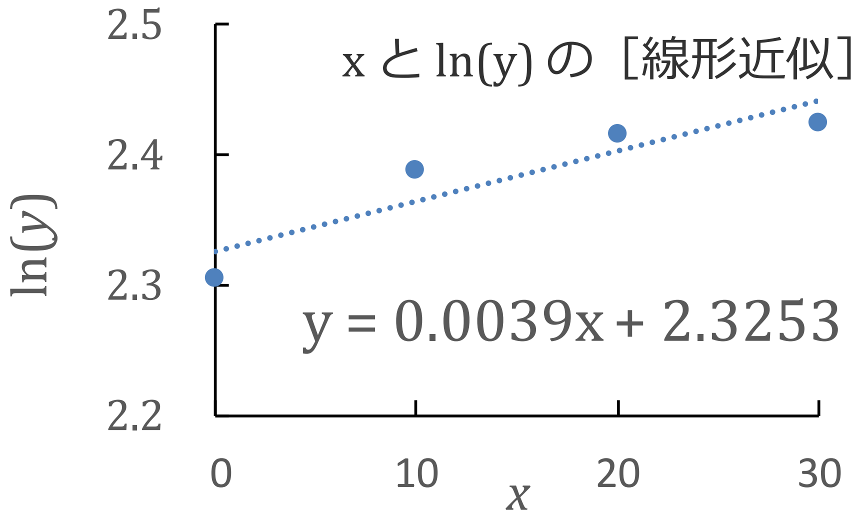
↓

$$y = \exp(2.3253) \times \exp(0.0039x)$$
$$= 10.23 \times \exp(0.0039x)$$

演習 1.3.1 のデータ

x	y	$\ln(y)$
0	10.02	2.30
10	10.90	2.39
20	11.20	2.42
30	11.30	2.42





Excel ソルバーによる解析（非線形回帰による解）

$$y = y_\infty + (y_0 - y_\infty)\exp(Bx) \quad ・・・モデル式$$
$$y = 11.35 - 1.33\exp(-0.108x)$$

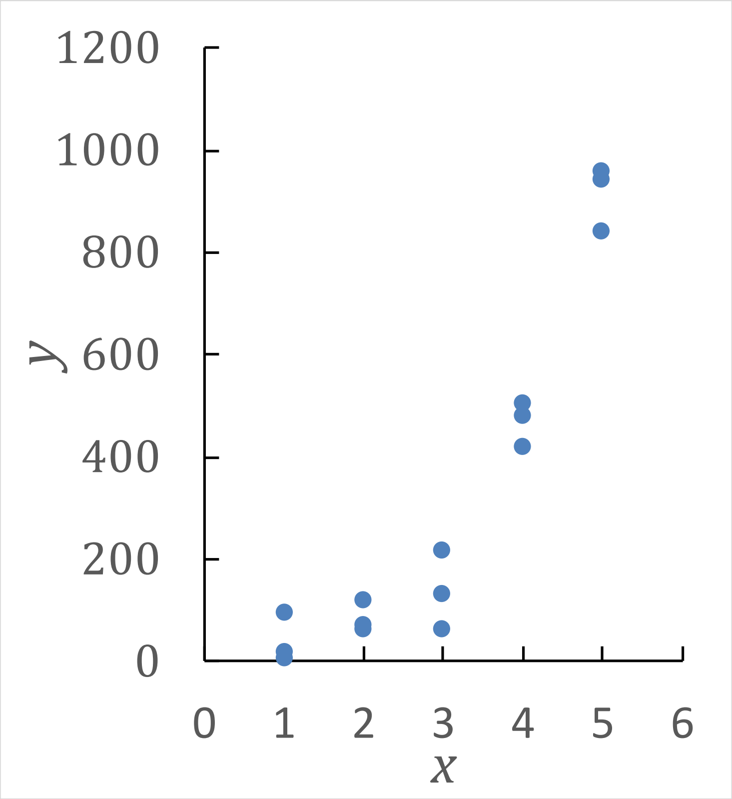
まとめ

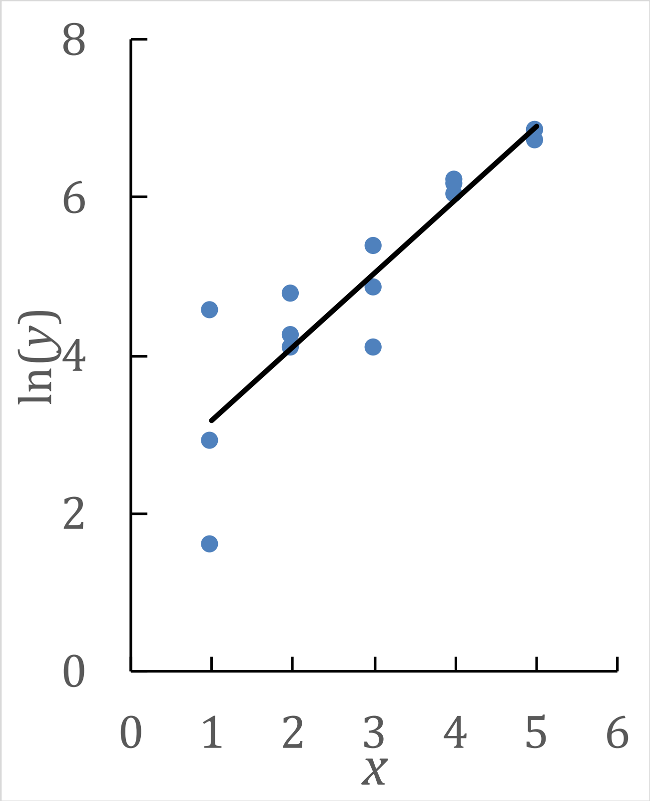
●回帰分析の今と昔

コンピュータが発達してなかった時代

x または y（または両方）を変数変換して直線関係にし，回帰分析を適用するのが一般的

等分散性は考慮されなかった





現在

等分散性が成立するような

変数変換を探索し，

非線形回帰分析を適用

補足
非線形回帰における平方和の分解と決定係数、分散分析表

（§1.4 参照）

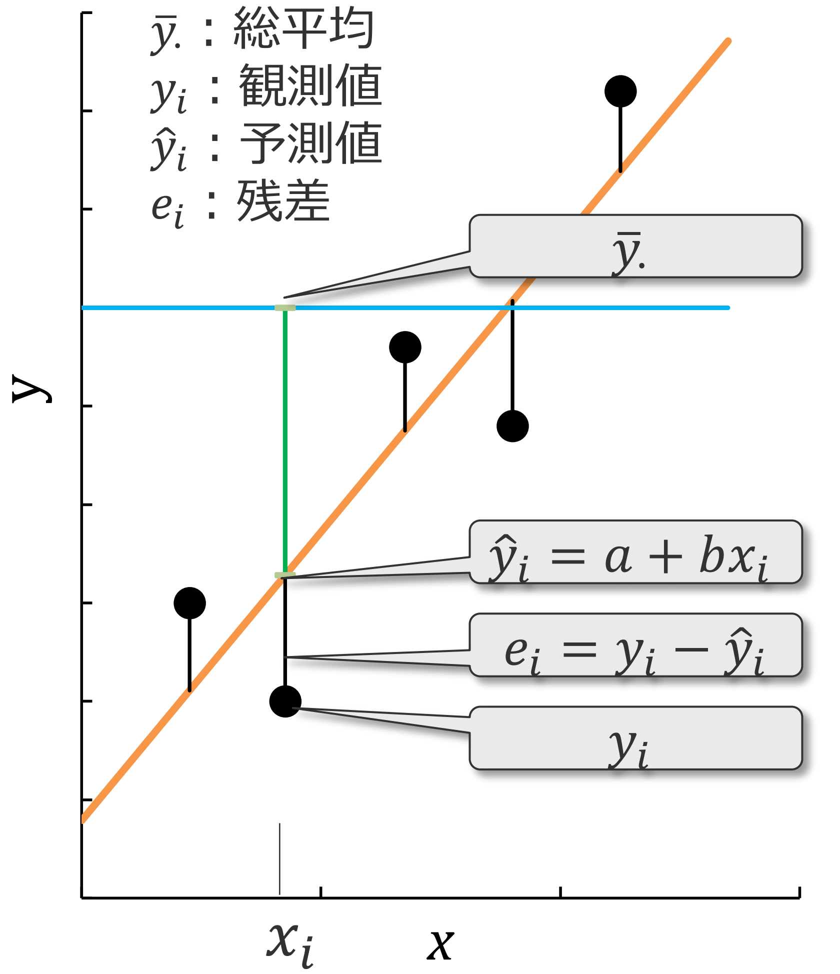
補足：非線形回帰分析における平方和の分解と決定係数

●平方和の分解：線形回帰（単回帰モデル）

総平方和 S_T を分解して整理（第１部 §4.3 ,§4.6）

$$
\begin{aligned}
S_T &= \sum (y_i - \bar{y}.)^2 \\
&= \sum \left((y_i - \hat{y}_i) + (\hat{y}_i - \bar{y}.) \right)^2 \\
&= \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum (\hat{y}_i - \bar{y}.)^2 + 2\sum (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}.) \\
&= \quad S_e \quad + \quad S_R \quad + 2\sum e_i (\hat{y}_i - \bar{y}.)
\end{aligned}
$$

残差平方和　回帰平方和　　第３項

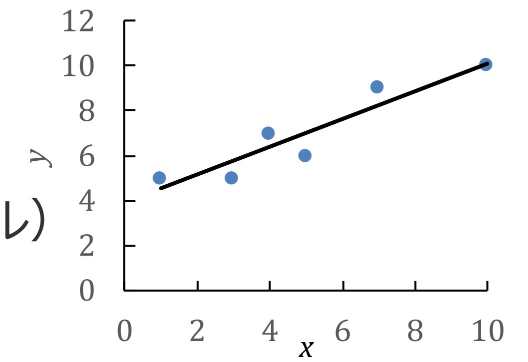


補足：非線形回帰分析における平方和の分解と決定係数

●平方和の分解：線形回帰（単回帰モデル）

総平方和 S_T を分解して整理（第１部 §4.3 ,§4.6）

第1部 表示4.3.6
線形回帰（単回帰モデル）
でのソルバーによる解
a, b, S の表示を省略



$$S_T = \sum (y_i - \bar{y}.)^2$$

$$= \sum \left((y_i - \hat{y}_i) + (\hat{y}_i - \bar{y}.)\right)^2$$

$$= \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum (\hat{y}_i - \bar{y}.)^2 + 2\sum (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}.)$$

$$= \underbrace{S_e}_{\text{残差平方和}} + \underbrace{S_R}_{\text{回帰平方和}} + 2\sum e_i(\hat{y}_i - \bar{y}.)$$

$\bar{y}. = \bar{\hat{y}}.$

e_i と $\hat{y}_i$ の積和
$\sum(e_i - 0)(\hat{y}_i - \bar{\hat{y}}.) = 0$

線形回帰では、以下の関係が成立

$$S_T = S_R + S_e$$

i	x	y	yhat	e
1	1	5	4.52	0.48
2	3	5	5.76	-0.76
3	4	7	6.38	0.62
4	5	6	7.00	-1.00
5	7	9	8.24	0.76
6	10	10	10.10	-0.10
平均	5.00	**7.00**	**7.00**	**0.00**

$\bar{y}.$　$\bar{\hat{y}}.$

相関係数	x	y	yhat	e
x	1.000	0.935	1.000	**0.00**
y		1.000	0.935	0.36
y-hat			1.00	**0.00**
e				1.00

補足：非線形回帰分析における平方和の分解と決定係数

●平方和の分解：非線形回帰

$$S_T = S_e + S_R + 2\underbrace{\sum e_i(\hat{y}_i - \bar{y}_.)}_{0\text{ではない}}$$

以下の関係が成立しない

$$S_T = S_R + S_e$$

表示1.3.8（改変） 非線形回帰（指数曲線モデル）

	x			*y*			*yhat*			*e*		
	1	1	1	2.4	4.1	1.5	3.15	3.15	3.15	-0.75	0.95	-1.65
	2	2	2	6.8	4.5	4.0	5.45	5.45	5.45	1.35	-0.95	-1.45
	3	3		9.6	6.0		7.13	7.13		2.47	-1.13	
	4	4	4	10.5	8.3	9.0	8.36	8.36	8.36	2.14	-0.06	0.64
	5	5	5	7.9	7.5	10.0	9.25	9.25	9.25	-1.35	-1.75	0.75
平均	3.0			**6.58**			**6.64**			**-0.06**		

相関係数	*x*	*y*	*yhat*	*e*
x	1.000	0.830	0.985	**0.070**
y		1.000	0.870	0.600
yhat			1.000	**0.127**
e				1.000

第１部 表示4.3.6　線形回帰
（単回帰モデル）

i	x	y	yhat	e
1	1	5	4.52	0.48
2	3	5	5.76	-0.76
3	4	7	6.38	0.62
4	5	6	7.00	-1.00
5	7	9	8.24	0.76
6	10	10	10.10	-0.10
平均	5.00	**7.00**	**7.00**	**0.00**

相関係数	x	y	yhat	e
x	1.000	0.935	1.000	**0.00**
y		1.000	0.935	0.36
y-hat			1.00	**0.00**
e				1.00

補足：非線形回帰分析における平方和の分解と決定係数

●決定係数と平方和の分解

決定係数（寄与率、R^2）

（注、決定係数には複数の定義あり）

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

平方和の分解

$$S_T = S_R + S_e$$

●線形回帰と非線形回帰の違い

線形回帰

上記の平方和の分解が成立する

上記の定義による決定係数から、あてはまりの良さが評価できる（第1部 §4.3）

分散分析表による解析を行う

非線形回帰

上記の平方和の分解が成立しない

上記の定義による決定係数を用いることは不適当（MSE, RMSE が代わりになる ）

JMP は決定係数、分散分析表を表示しない（参照　第1部 §4.6 「原点を通る回帰式」）

まとめ

p.41

●本節の取り上げたモデル

指数曲線モデル

基本的な指数曲線モデル

半減期を直線求めるモデル

上限と下限がある指数曲線モデル

パワーモデル

次節以降で，もっと複雑かつ実用的なモデルを学習する

考え方と解析方法は本節と基本的には同じ

- 作成　　片瀬雅彦
- 監修　　松本一彦、長谷文雄
- 作成時期　　2020年5月4日
- 改訂　　2021年1月28日、2022年6月6日
  2023年1月20日