2 非線形最小２乗法（応用）

2.1 誤差を考慮した解析

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）

2.1 誤差を考慮した解析

p.69

（1）逆数変換によるMichaelis-Menten モデルのあてはめ
（2）変動係数が一定の場合
（3）Emax モデル（変動係数一定）への適用
（4）誤差の分散 σ^2 が μ に比例する場合
（5）変数変換方法の選択

テキストの
該当ページ

使用するファイル
　Excelファイル「改2非線形.xlsm」
　JMPファイル「21-不等分散.jmp」「21-不等分散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

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

p.69

● 課題 2.1

最小２乗法では、線形、非線形に関わらず
回帰モデルの誤差の分布に等分散性・正規性などが仮定される

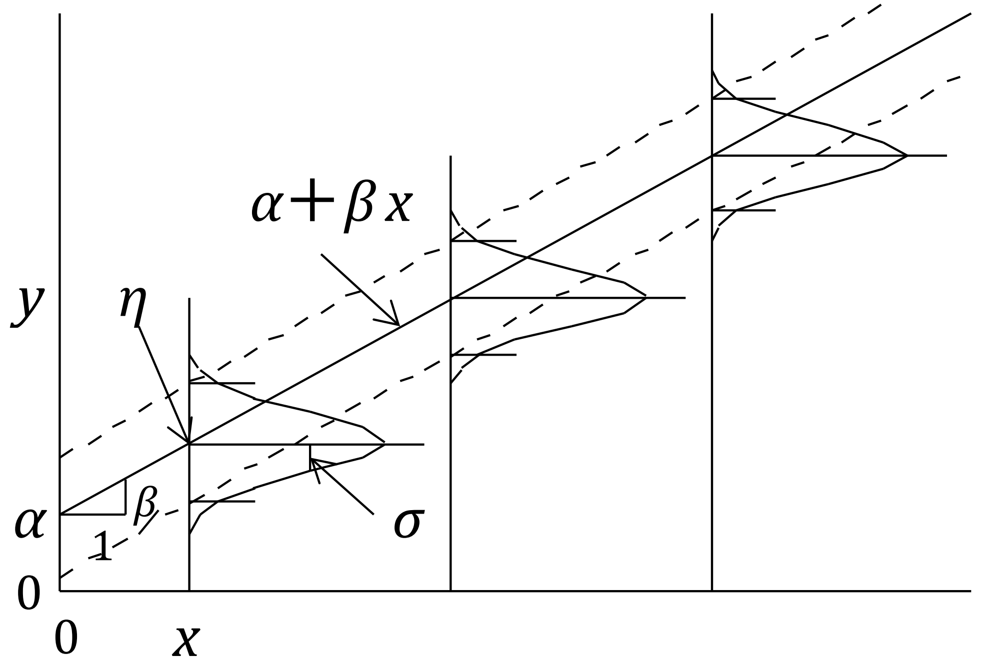
$y = \eta + \varepsilon = f(x) + \varepsilon$

テキストでは μ

$\varepsilon \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$

誤差の分布に
等分散性・正規性
を仮定

直線回帰モデル（第１部§ §4.3 参照）



本節では、等分散性の条件が満たされない場合の
解析方法を取り上げる

はじめに

p.69

●Excel のソルバー、JMP の［非線形回帰］による非線形回帰分析

前章「非線形最小２乗法（基礎）」の内容を理解していることを前提に説明

Excel のソルバー、JMP の［非線形回帰］の詳しい操作手順は省略

（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

（1）逆数変換による Michaelis-Menten モデルのあてはめ

Michaelis-Menten モデルのあてはめにおける昔と今
逆数変換（昔の解析方法）の問題点

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

●Michaelis-Menten モデル

$$y = \frac{y_\infty \cdot x}{x + x_{50}} \qquad (2.1.1)$$ §1.4

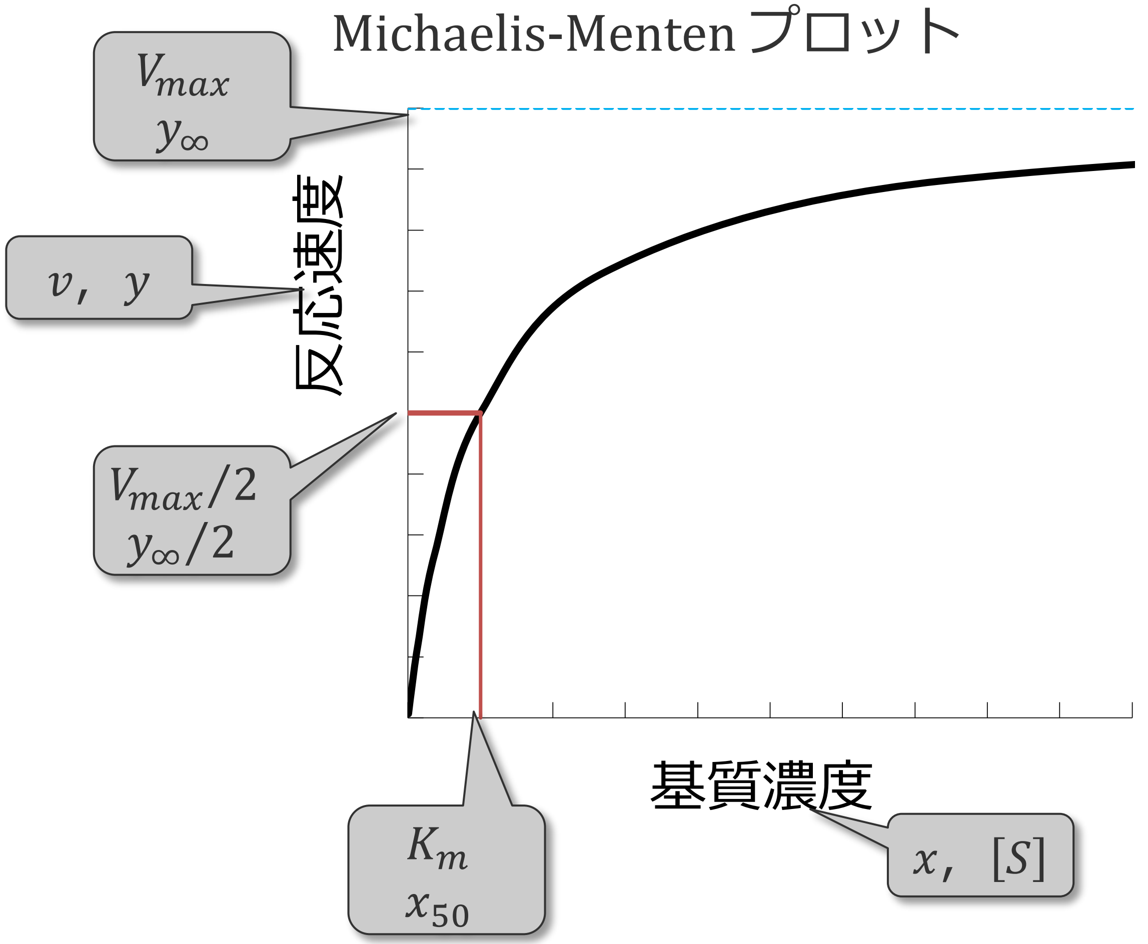
Leonor Michaelis と Maud L. Menten により
1913年に提案された

$$v = \frac{V_{max} \cdot [S]}{[S] + K_m}$$

v ：反応速度
$[s]$ ：基質濃度
V_{max} ：最大反応速度
K_m ：ミカエリス定数

Emax モデルで $y_0 = 0, b = 1$ に固定したモデル

$$y = y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b} = \frac{y_\infty}{1 + \frac{x_{50}}{x}} \qquad (1.4.10)$$



Michaelis-Menten モデルのあてはめ

●モデルの両辺を逆数変換してパラメータを推定

非線形回帰分析の手法が使えない時代の解析方法

$$y = \frac{y_\infty \cdot x}{x + x_{50}} \qquad (2.1.1)$$

$$\frac{1}{y} = \frac{x + x_{50}}{y_\infty \cdot x} = \frac{1 + x_{50}/x}{y_\infty} = \frac{1}{y_\infty} + \frac{x_{50}}{y_\infty} \cdot \frac{1}{x} \qquad (2.1.2)$$

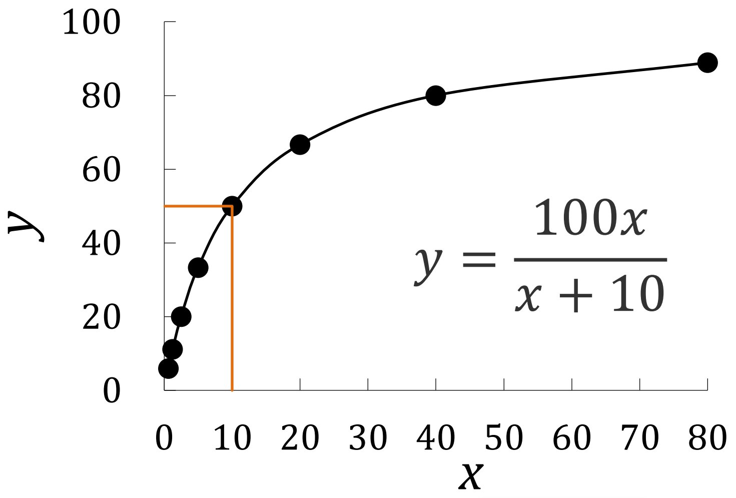
$$1/y = y' \qquad 1/x = x'$$

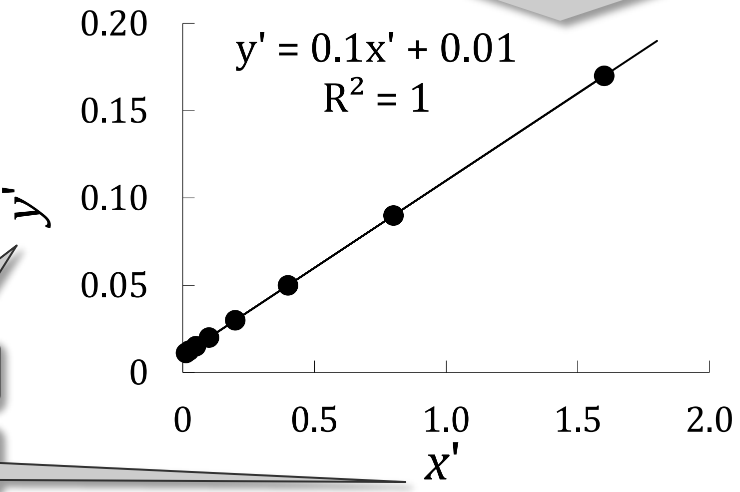
直線関係

$$y' = \frac{1}{y_\infty} + \frac{x_{50}}{y_\infty} \cdot x' = a' + b'x' \qquad (2.1.3)$$

$$a' = 1/y_\infty \qquad b' = x_{50}/y_\infty \qquad (2.1.4)$$

$$y_\infty = \frac{1}{a'} \qquad x_{50} = b'y_\infty = \frac{b'}{a'} \qquad (2.1.5)$$





$y' = 1/y$

$x' = 1/x$

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

●モデルの両辺を逆数変換してパラメータを推定

非線形回帰分析の手法が使えない時代の解析方法

$$y = \frac{y_\infty \cdot x}{x + x_{50}} \qquad (2.1.1)$$

$$\frac{1}{y} = \frac{x + x_{50}}{y_\infty \cdot x} = \frac{1 + x_{50}/x}{y_\infty} = \frac{1}{y_\infty} + \frac{x_{50}}{y_\infty} \cdot \frac{1}{x} \qquad (2.1.2)$$

$1/y = y' \qquad 1/x = x'$

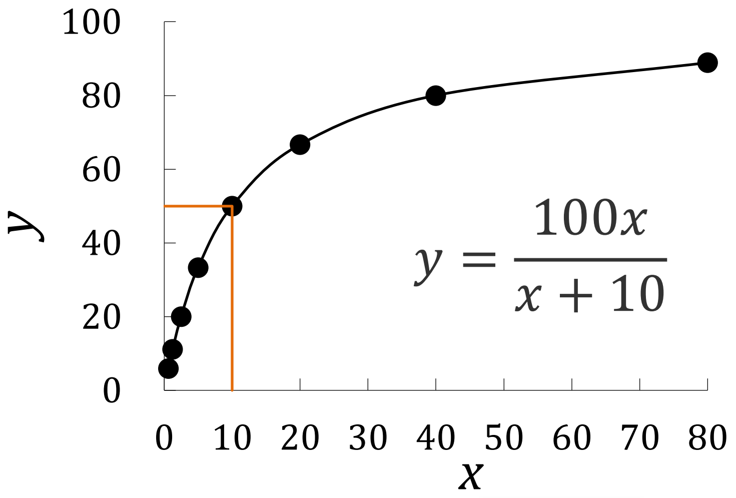
(1) 逆数変換の後、単回帰分析から
傾き b' 切片 a' を得る

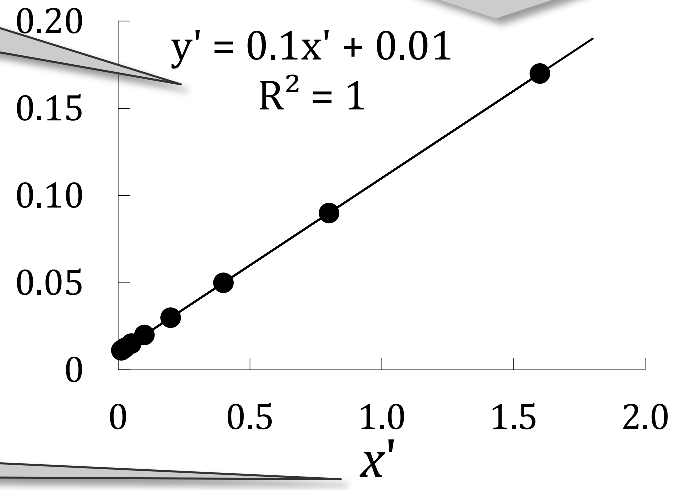
$$y' = \frac{1}{y_\infty} + \frac{x_{50}}{y_\infty} \cdot x' = a' + b'x' \qquad (2.1.3)$$

$$a' = 1/y_\infty \qquad b' = x_{50}/y_\infty$$

(2) $y_\infty = 1/a' = 1/0.01 = 100$
$x_{50} = b'/a' = 0.1/0.01 = 10$

$$y_\infty = \frac{1}{a'} \qquad x_{50} = b'y_\infty = \frac{b'}{a'} \qquad (2.1.5)$$





$y' = 1/y$

$x' = 1/x$

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

●モデルの両辺を逆数変換してパラメータを推定

非線形回帰分析の手法が使え

$$y = \frac{y_\infty \cdot x}{x + x_{50}}$$

$$\frac{1}{y} = \frac{x + x_{50}}{y_\infty \cdot x} = \frac{1 + x_{50}/x}{y_\infty} = \cdots$$

$1/y = y' \qquad 1/x = x'$

$$y' = \frac{1}{y_\infty} + \frac{x_{50}}{y_\infty} \cdot x' = a' + b'x' \qquad (2.1.3)$$

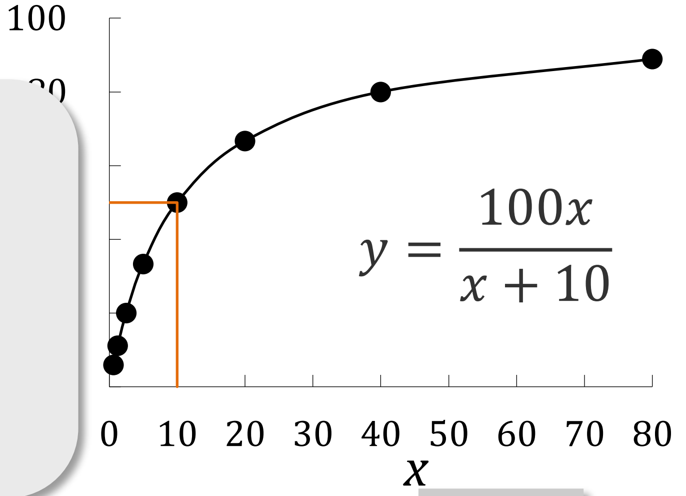
$a' = 1/y_\infty \qquad b' = x_{50}/y_\infty$

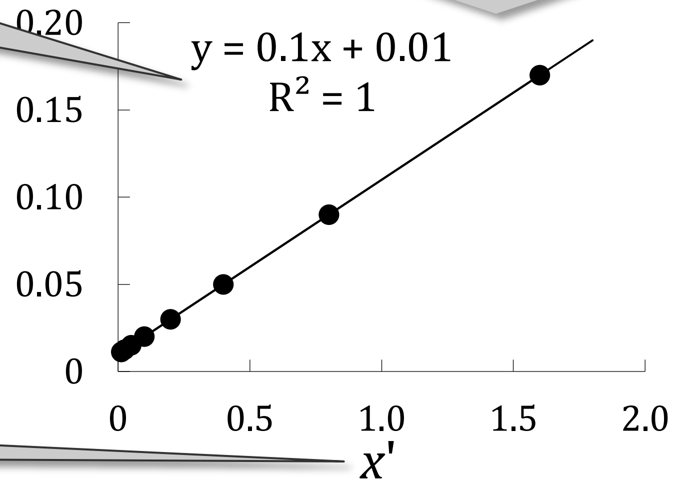
$$y_\infty = \frac{1}{a'} \qquad x_{50} = b'y_\infty = \frac{b'}{a'} \qquad (2.1.5)$$

この解析方法には大きな欠点がある
非線形回帰分析が使える現在では
使うべきではない
→その理由は？

(1) 逆数変換の後、単回帰分析から
傾き b' 切片 a' を得る

(2) $y_\infty = 1/a' = 1/0.01 = 100$
$x_{50} = b'/a' = 0.1/0.01 = 10$





$x' = 1/x$

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

p.70

●新法と旧法によるモデルのあてはめの比較

シミュレーション（Excelファイル「改2非線形.xlsm」、シート「§2.1(1)」）

母集団

$$y = \eta + \varepsilon = \frac{y_\infty \cdot x}{x + x_{50}} + \varepsilon$$

$$= \frac{100x}{x + 10} + \varepsilon \qquad \varepsilon \sim \mathrm{N}(0, 1^2)$$

母集団から標本を疑似抽出

x： 8水準を設定（公比 2 の等比級数）

y： 8個を20回、標準正規乱数から生成

モデルのあてはめ（旧法と新法の比較）

旧法：逆数変換して直線のあてはめ

新法：Michaelis-Menten モデルのあてはめ

（ソルバーによる非線形回帰 §1.4 ）

	x	y1	y2	・・・	y20
	0.625	5.60	6.60	・・・	4.65
	1.250	10.01	11.13	・・・	11.62
	2.500	19.66	19.25	・・・	21.75
	5.000	33.68	33.24	・・・	33.80
	10.000	49.53	48.76	・・・	51.94
	20.000	66.10	66.52	・・・	66.82
	40.000	79.72	79.81	・・・	80.67
	80.000	88.88	88.72	・・・	89.55
旧法	yinf	102.4	82.1	・・・	216.0
	x50	10.9	7.3	・・・	26.9
新法	yinf	100.1	100.2	・・・	99.9
	x50	10.2	10.3	・・・	9.5
	S	1.50	1.69	・・・	4.97
	ΣS	116.55			

正規乱数から
20組の y を発生

8 水準の x を設定
公比 2 の等比級数

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

p.70

●新法と旧法によるモデルのあてはめの比較

シミュレーション（Excelファイル「改2非線形.xlsm」、シート「§2.1(1)」）

母集団

$$y = \eta + \varepsilon = \frac{y_\infty \cdot x}{x + x_{50}} + \varepsilon$$

$$= \frac{100x}{x + 10} + \varepsilon \qquad \varepsilon \sim \mathrm{N}(0, 1^2)$$

真値
$y_\infty = 100$
$x_{50} = 10$

母集団から標本を疑似抽出

x：８水準を設定（公比２の等比級数）

y：８個を20回、標準正規乱数から生成

モデルのあてはめ（旧法と新法の比較）

旧法：逆数変換して直線をあてはめ

新法：Michaelis-Menten モデルのあてはめ

（ソルバーによる非線形回帰 §1.4）

x	y1	y2	・・・	y20
0.625	5.60	6.60	・・・	4.65
1.250	10.01	11.13	・・・	11.62
2.500	19.66	19.25	・・・	21.75
5.000	33.68	33.24	・・・	33.80
10.000	49.53	48.76	・・・	51.94
20.000	66.10	66.52	・・・	66.82
40.000	79.72	79.81	・・・	80.67
80.000	88.88	88.72	・・・	89.55

正規乱数から20組の y を発生

8 水準の x を設定
公比 2 の等比級数

旧法	yinf	102.4	82.1	・・・	216.0
	x50	10.9	7.3	・・・	26.9

旧法で 20個ずつパラメータを推定

新法	yinf	100.1	100.2	・・・	99.9
	x50	10.2	10.3	・・・	9.5
	S	1.50	1.69	・・・	4.97
	ΣS	116.55			

新法で 20個ずつパラメータを推定

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

p.70

●新法と旧法によるモデルのあてはめの比較

標準正規乱数を
8行 × 20列、
[分析ツール]で生成
Z_{ij}　（§1.4 参照）
i ：1〜8
j ：1〜20

標準正規乱数

	1	2	･･･	20
1	-0.29	0.72	･･･	-1.23
2	-1.11	0.02	･･･	0.51
3	-0.34	-0.75	･･･	1.75
4	0.35	-0.09	･･･	0.46
5	-0.47	-1.24	･･･	1.94
6	-0.57	-0.14	･･･	0.15
7	-0.28	-0.19	･･･	0.67
8	-0.01	-0.17	･･･	0.66

	x	y1	y2	･･･	y20
	0.625	5.60	6.60	･･･	4.65
	1.250	10.01	11.13	･･･	[illegible]
	2.500	19.66	19.25	･･･	21.75
	5.000	33.68	33.24	･･･	33.80
	10.000	49.53	48.76	･･･	51.94
	20.000	66.10	66.52	･･･	66.82
	40.000	79.72	79.81	･･･	80.67
	80.000	88.88	88.72	･･･	89.55
旧法	yinf	102.4	82.1	･･･	216.0
	x50	10.9	7.3	･･･	26.9
新法	yinf	100.1	100.2	･･･	99.9
	x50	10.2	10.3	･･･	9.5
	S	1.50	1.69	･･･	4.97
	ΣS	116.55			

$$y_{ij} = \frac{100x_i}{x_i + 10} + \varepsilon_{ij}$$

$$\varepsilon_{ij} = 1\sigma = Z_{ij}$$

x_i　i ：1〜8
x_{50} = 10 を中心
公比 2 の等比級数

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

●新法と旧法によるモデルのあてはめの比較

標準正規乱数

	1	2	・・・	20
1	-0.29	0.72	・・・	-1.23
2	-1.11	0.02	・・・	0.51
3	-0.34	-0.75	・・・	1.75
4	0.35	-0.09	・・・	0.46
5	-0.47	-1.24	・・・	1.94
6	-0.57	-0.14	・・・	0.15
7	-0.28	-0.19	・・・	0.67
8	-0.01	-0.17	・・・	0.66

標準正規乱数を
8行 × 20列、
[分析ツール]で生成
Z_{ij} （§1.4 参照）
i ：1～8
j ：1～20

x	y1	y2	・・・	y20
0.625	5.60	6.60	・・・	4.65
1.250	10.01	11.13	・・・	11.62
2.500	19.66	19.25	・・・	21.75
5.000	33.68	33.24	・・・	33.80
10.000	49.53	48.76	・・・	51.94
20.000	66.10	66.52	・・・	66.82
40.000	79.72	79.81	・・・	80.67
80.000	88.88	88.72	・・・	89.55

$$y_{ij} = \frac{100x_i}{x_i + 10} + \varepsilon_{ij}$$

$$\varepsilon_{ij} = 1\sigma = Z_{ij}$$

x_i i ：1～8
$x_{50} = 10$ を中心
公比２の等比級数

		1	2	・・・	20
旧法	yinf	102.4	82.1	・・・	216.0
	x50	10.9	7.3	・・・	26.9
新法	yinf	100.1	100.2	・・・	99.9
	x50	10.2	10.3	・・・	9.5
	S	1.50	1.69	・・・	4.97
	ΣS	116.55			

両辺を逆数変換して直線回帰関数 SLOP、INTERCEPT の結果を式(2.1.5) に代入

非線形最小２乗法
（ソルバーを利用、§1.4 ）

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

●新法と旧法によるモデルのあてはめの比較

表示 2.1.1 y_∞、x_{50} の平均と標準偏差

	yinf			x50		
	平均	中央値	標準偏差	平均	中央値	標準偏差
旧法	119.7	102.7	48.5	12.8	10.9	7.2
新法	100.4	100.3	1.1	10.1	10.1	0.4

真値
$y_\infty = 100$

真値
$x_{50} = 10$

	x	y1	y2	・・・	y8	・・・	y20
	0.625	5.60	6.60	・・・	7.74	・・・	4.65
	1.250	10.01	11.13	・・・	10.62	・・・	11.62
	2.500	19.66	19.25	・・・	19.11	・・・	21.75
	5.000	33.68	33.24	・・・	31.66	・・・	33.80
	10.000	49.53	48.76	・・・	50.10	・・・	51.94
	20.000	66.10	66.52	・・・	65.72	・・・	66.82
	40.000	79.72	79.81	・・・	79.97	・・・	80.67
	80.000	88.88	88.72	・・・	90.18	・・・	89.55
旧法	yinf	102.4	82.1	・・・	67.7	・・・	216.0
	x50	10.9	7.3	・・・	5.3	・・・	26.9
新法	yinf	100.1	100.2	・・・	101.8	・・・	99.9
	x50	10.2	10.3	・・・	10.7	・・・	9.5
	S	1.50	1.69	・・・	6.57	・・・	4.97
	ΣS	116.55					

小さい

大きい

安定

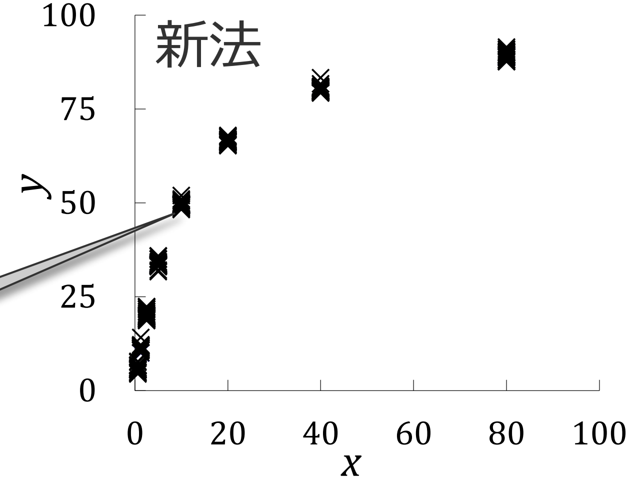
新法の平均は真値に近く、標準偏差は小
旧法の平均は真値から離れ、標準偏差は大
しかし、中央値は真値に近い
（極端に大きな値、小さな値がある）
新法は正確度、精度ともに旧法より優れる

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

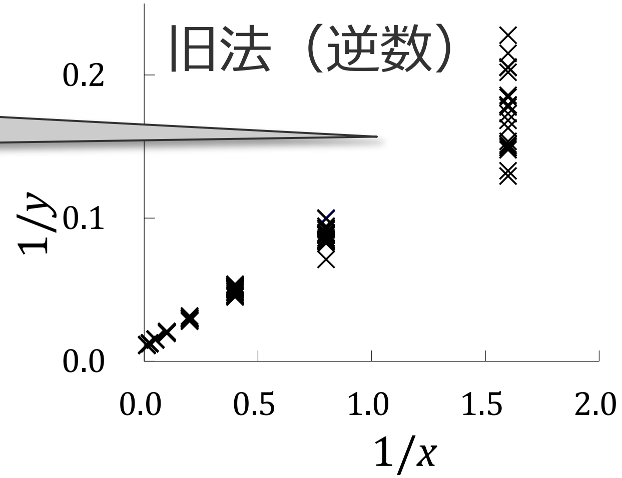
●新法と旧法によるモデルのあてはめの比較

旧法は等分散から大きく外れるため
パラメータの推定が安定しない

表示 2.1.2
20組の観測値の
散布図



等分散



等分散
不成立

	x	y1	y2	・・・	y8	・・・	y20
	0.625	5.60	6.60	・・・	7.74	・・・	4.65
	1.250	10.01	11.13	・・・	10.62	・・・	11.62
	2.500	19.66	19.25	・・・	19.11	・・・	21.75
	5.000	33.68	33.24	・・・	31.66	・・・	33.80
	10.000	49.53	48.76	・・・	50.10	・・・	51.94
	20.000	66.10	66.52	・・・	65.72	・・・	66.82
	40.000	79.72	79.81	・・・	79.97	・・・	80.67
	80.000	88.88	88.72	・・・	90.18	・・・	89.55
旧法	yinf	102.4	82.1	・・・	67.7	・・・	216.0
	x50	10.9	7.3	・・・	5.3	・・・	26.9
新法	yinf	100.1	100.2	・・・	101.8	・・・	99.9
	x50	10.2	10.3	・・・	10.7	・・・	9.5
	S	1.50	1.69	・・・	6.57	・・・	4.97
	ΣS	116.55					

小さい

大きい

安定

Michaelis-Menten モデルのあてはめ

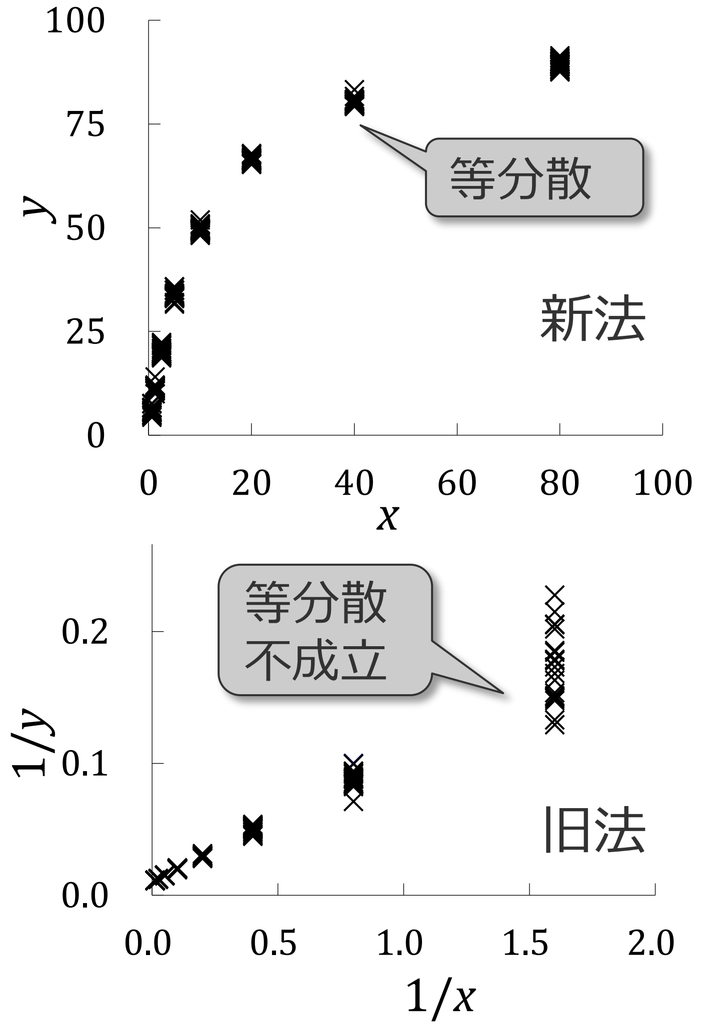
p.70

●新法と旧法によるモデルのあてはめの比較

旧法（逆数変換した２変数）は等分散から大きく外れる
これに、等分散性を仮定して回帰直線をあてはめたために
パラメータの推定値が真値から離れ，標準偏差は増大した

変数変換によって直線関係が得られても，
等分散性が成立しない例は少なくないが、
昔はこれを無視して使用 →　現在は使うべきではない

表示 2.1.2 20組の観測値の散布図



表示 2.1.1 y_∞、x_{50} の平均と標準偏差

	yinf			x50		
	平均	中央値	標準偏差	平均	中央値	標準偏差
旧法	119.7	102.7	48.5	12.8	10.9	7.2
新法	100.4	100.3	1.1	10.1	10.1	0.4

真値
$y_\infty = 100$、$x_{50} = 10$

p.71

（2） 変動係数が一定の場合

分散を考慮して
１次式のモデルをあてはめる事例

変動係数が一定の場合

p.71

- 誤差が対数正規分布に従う事例

  誤差の標準偏差が一定ではなく、

  y の期待値 μ が大きくなるにつれて標準偏差が大きくなることがよくある（等分散ではない）

  変動係数（標準偏差／平均）は一定

  y を対数変換すると誤差が正規分布に従う・・・対数正規分布（第１部 §2.3 参照）

  y が x の１次式に従ってこのように変化する場合を取り上げる

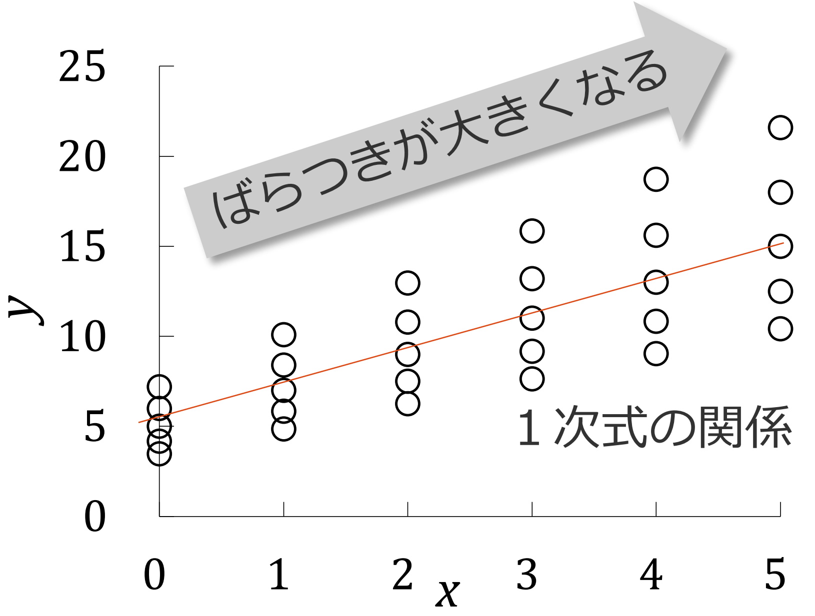
第 i 水準の誤差の標準偏差 σ_i が第 i 水準の期待値 μ_i に比例する

誤差が対数正規分布に従う人工データ

増加

一定

x	y					平均	標準偏差	変動係数
0.0	3.5	4.2	5.0	6.0	7.2	5.17	1.477	0.286
1.0	4.9	5.8	7.0	8.4	10.1	7.23	2.068	0.286
2.0	6.3	7.5	9.0	10.8	13.0	9.30	2.659	0.286
3.0	7.6	9.2	11.0	13.2	15.8	11.37	3.250	0.286
4.0	9.0	10.8	13.0	15.6	18.7	13.44	3.841	0.286
5.0	10.4	12.5	15.0	18.0	21.6	15.50	4.431	0.286



変動係数が一定の場合

●誤差が対数正規分布に従う事例

誤差の標準偏差が一定ではなく、

y の期待値 μ が大きくなるにつれて標準偏差が大きくなることがよくある（等分散ではない）

変動係数（標準偏差／平均）は一定

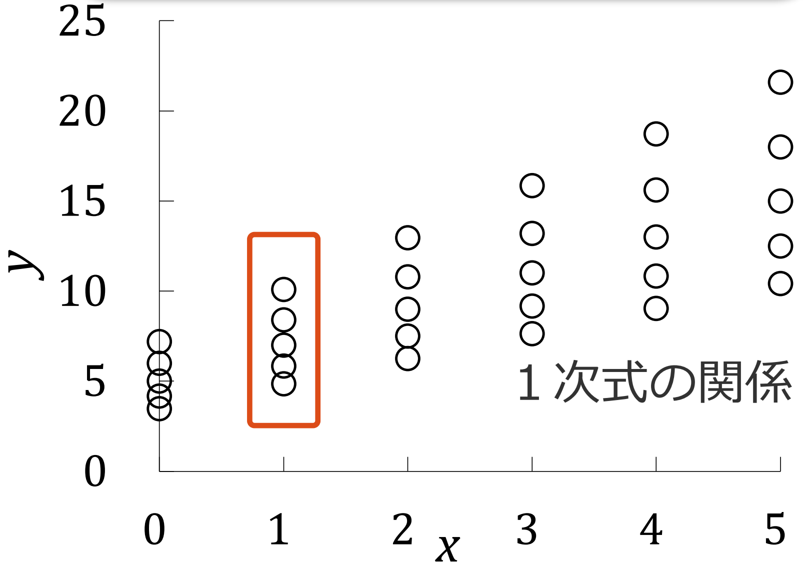
y を対数変換すると誤差が正規分布に従う・・・対数正規分布（

y が x の１次式に従ってこのように変化する場合を取り上げ

誤差の分布を
分かりやすくするために、
分布を代表する５点を表示して
分布の様子を表現している

誤差が対数正規分布に従う人工データ

x	y					平均	標準偏差	変動係数
0.0	3.5	4.2	5.0	6.0	7.2	5.17	1.477	0.286
1.0	4.9	5.8	7.0	8.4	10.1	7.23	2.068	0.286
2.0	6.3	7.5	9.0	10.8	13.0	9.30	2.659	0.286
3.0	7.6	9.2	11.0	13.2	15.8	11.37	3.250	0.286
4.0	9.0	10.8	13.0	15.6	18.7	13.44	3.841	0.286
5.0	10.4	12.5	15.0	18.0	21.6	15.50	4.431	0.286

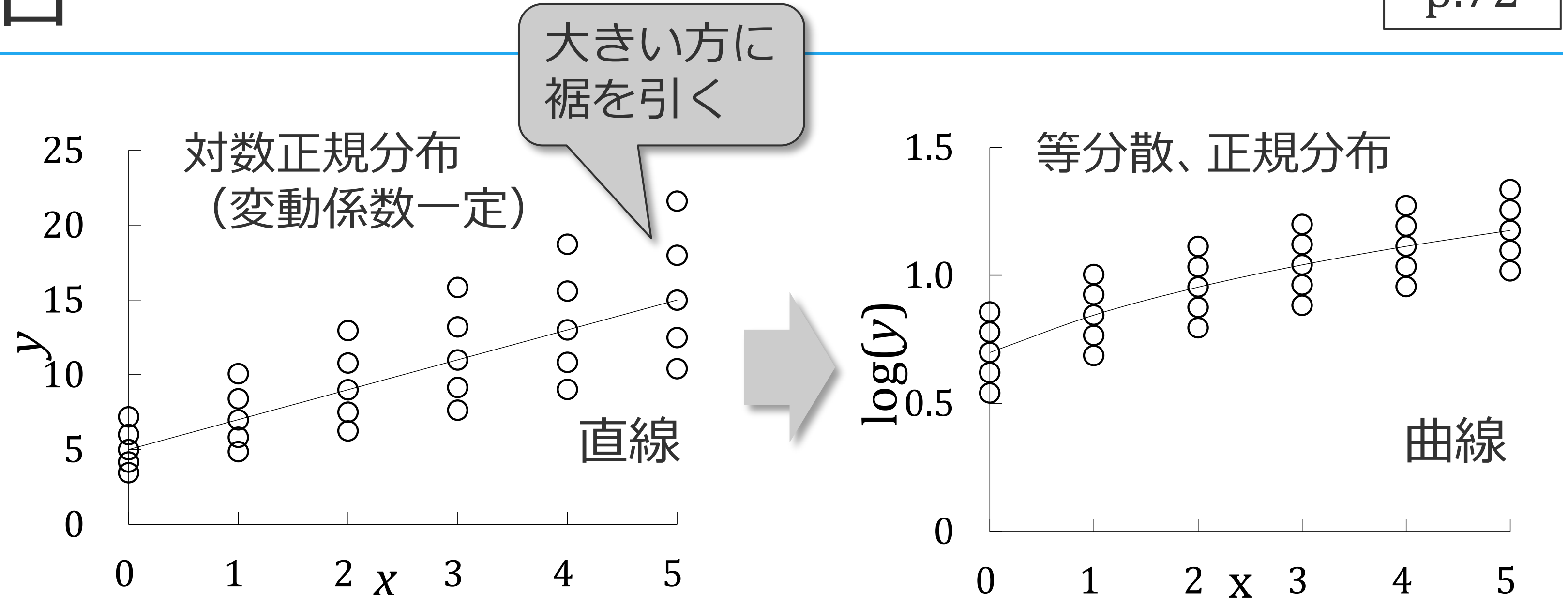


変動係数が一定の場合

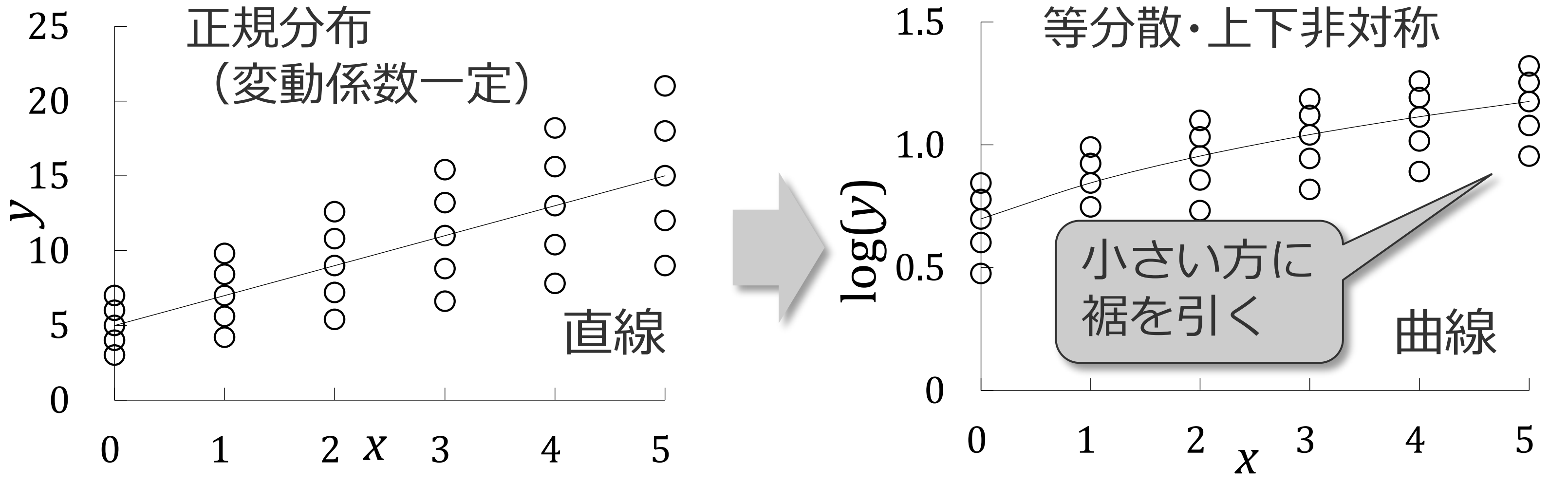
● 2 つのパターン

表示2.1.3 誤差の分布
（対数正規分布）

実際には、各水準での誤差が
対数正規分布に従う場合が多い



表示 2.1.4 誤差の分布
（正規分布）



変動係数が一定の場合

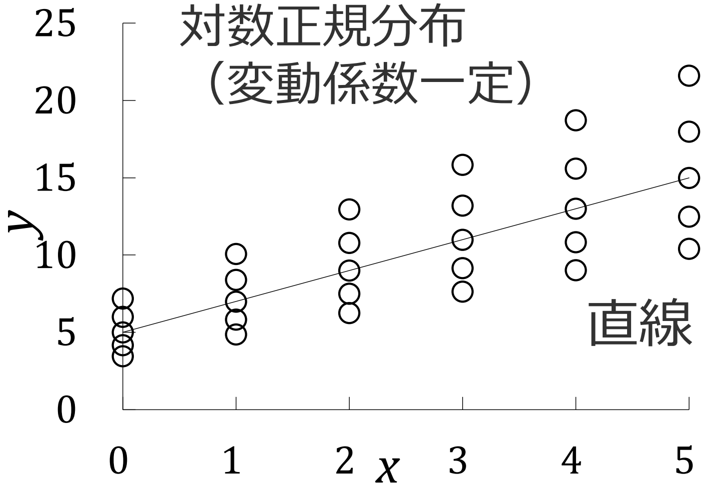
p.72

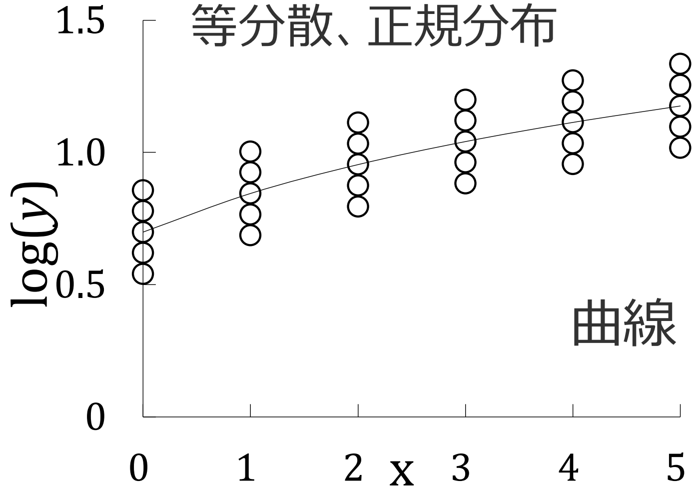
● 2 つのパターン

表示2.1.3 誤差の分布
（対数正規分布）

η : 母平均
（第 1 部
§4.3 参照）

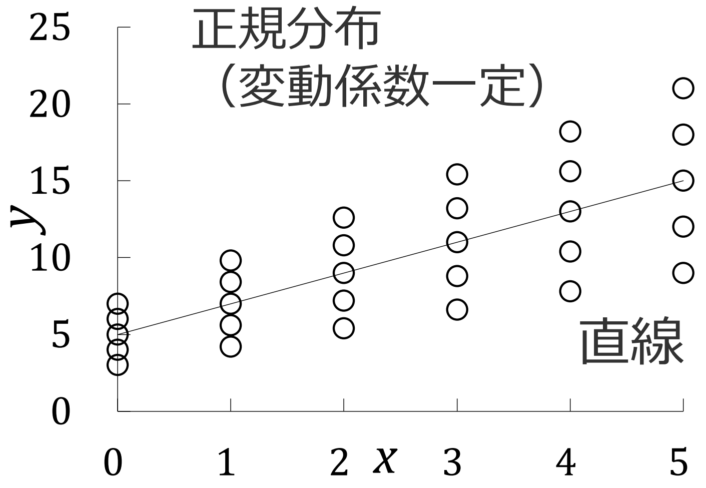
$$\eta = \alpha + \beta x$$
$$= 5 + 2x$$
$$CV = 0.2$$

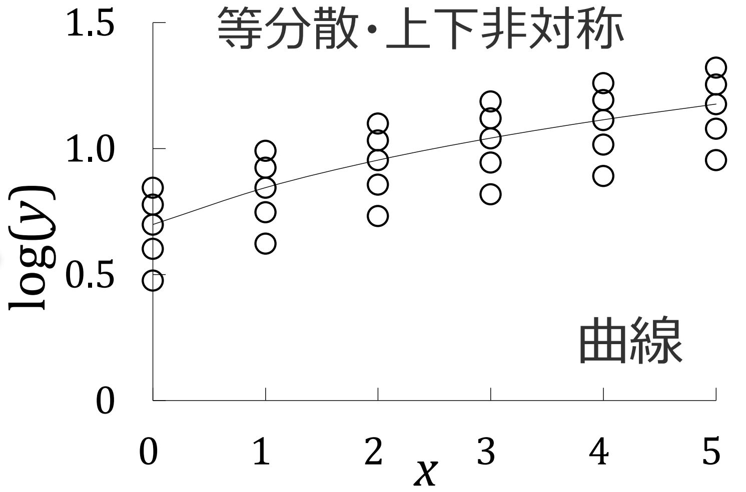




表示 2.1.4 誤差の分布
（正規分布）

$$\eta = \alpha + \beta x$$
$$= 5 + 2x$$
$$CV = 0.2$$





変動係数が一定の場合

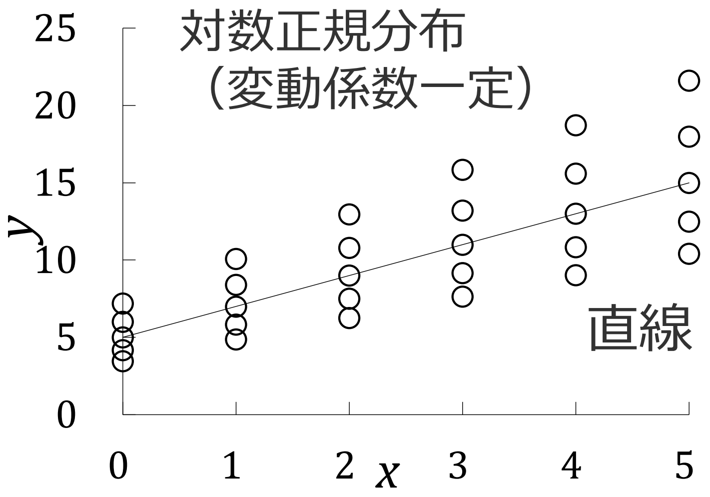
p.72

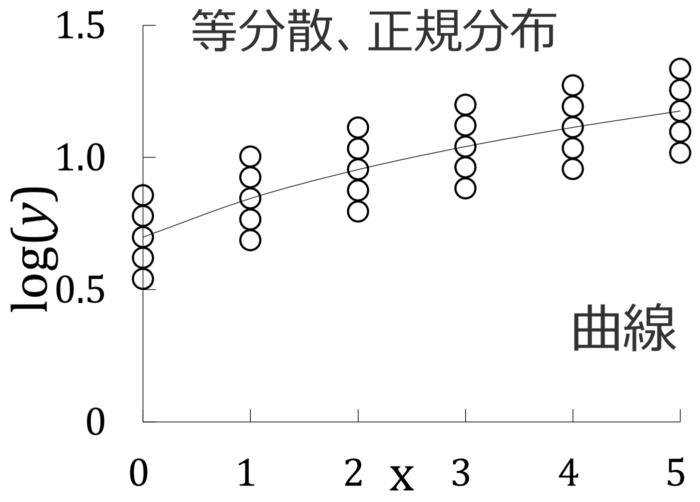
- 2つのパターン

表示2.1.3 誤差の分布
（対数正規分布）

η：母平均
（第1部
§4.3 参照）

$$\eta = \alpha + \beta x$$
$$= 5 + 2x$$
$$CV = 0.2$$

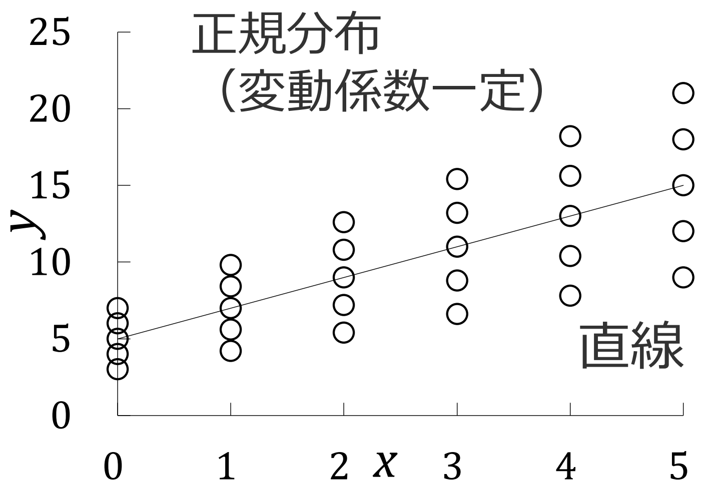


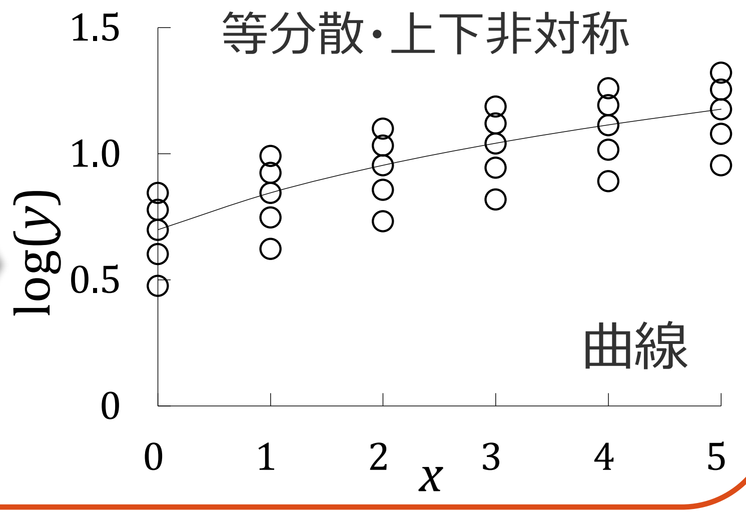


最初に
説明

表示 2.1.4 誤差の分布
（正規分布）

$$\eta = \alpha + \beta x$$
$$= 5 + 2x$$
$$CV = 0.2$$





変動係数が一定の場合

p.72

●誤差が正規分布に従う場合

y が x の１次式に従って変化、
x における y の期待値を μ とする（先ほどは η）
μ は x の１次式で表され、誤差 ε が加わる

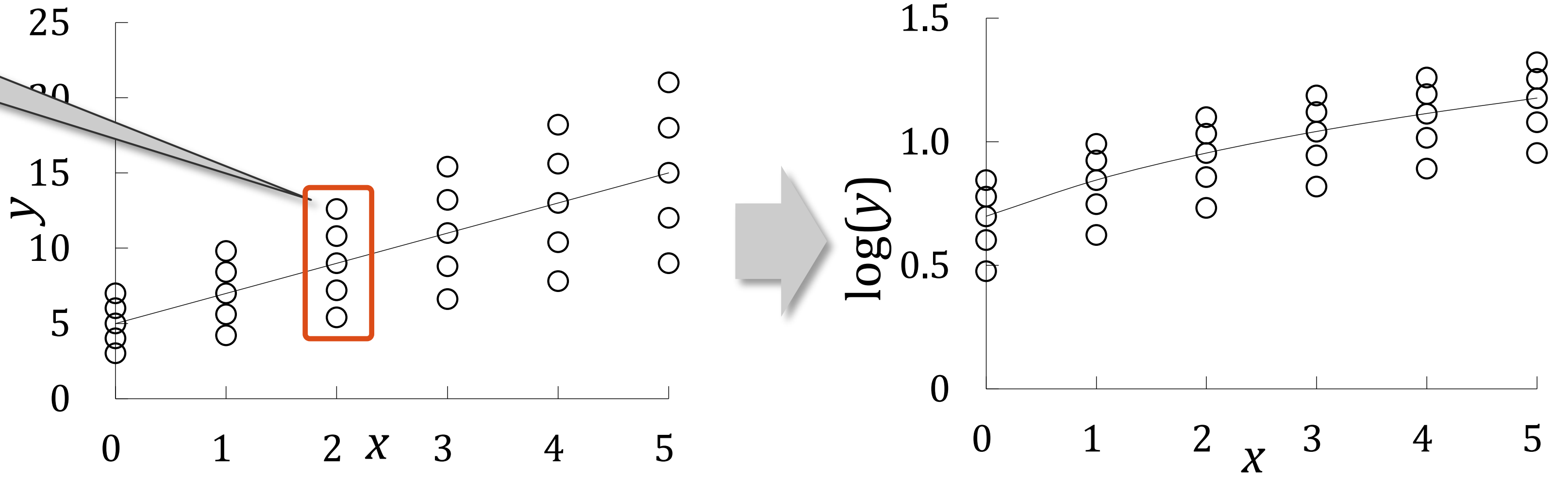
$$y = \mu + \varepsilon = \alpha + \beta x + \varepsilon \quad (2.1.6)$$

（第１部 §4.3）

先ほどは η

各水準ごとに分布を代表する５点をプロットする
（誤差の分布を分かりやすくする）

代表する
５点をプロット



表示 2.1.4 誤差の分布
（正規分布）

変動係数が一定の場合

●誤差が正規分布に従う場合

y が x の１次式に従って変化、
x における y の期待値を μ とする（先ほどは η）
μ は x の１次式で表され、誤差 ε が加わる

各水準ごとに分布を代表する５点をプロットする
（誤差の分布を分かりやすくする）

$$y = \mu + \varepsilon = \alpha + \beta x + \varepsilon \quad (2.1.6)$$

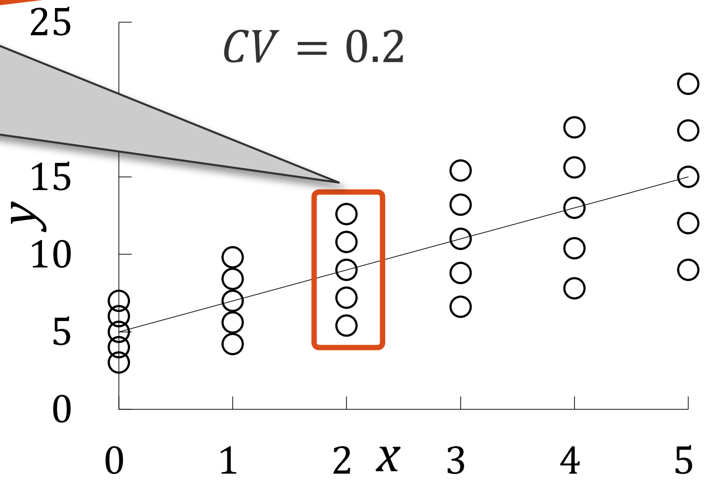
正規分布に従う

$$\begin{aligned} y &= \alpha + \beta x + \varepsilon_f \\ &= \alpha + \beta x + \sigma \cdot f \qquad (f = 0, \pm 1, \pm 2) \\ &= \alpha + \beta x + \mu \cdot CV \cdot f \\ &= \alpha + \beta x + (\alpha + \beta x) CV \cdot f \\ &= (\alpha + \beta x)(1 + CV \cdot f) \end{aligned}$$

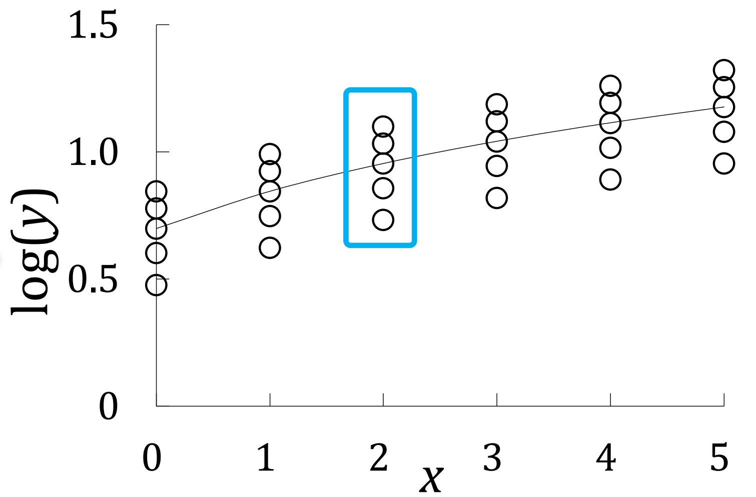
$$CV = \frac{\sigma}{\mu} \qquad \sigma = \mu \cdot CV$$

$y = (5 + 2x)(1 + 0.2 \cdot f) \quad x = 2$

$y = 9 \times (1 + 0.2 \times \quad 2\ ) = 12.6$
$y = 9 \times (1 + 0.2 \times \quad 1\ ) = 10.8$
$y = 9 \times (1 + 0.2 \times \quad 0\ ) = \ \ 9.0$
$y = 9 \times \big(1 + 0.2 \times (-1)\big) = \ \ 7.2$
$y = 9 \times \big(1 + 0.2 \times (-2)\big) = \ \ 5.4$



表示 2.1.4 誤差の分布
（正規分布）



変動係数が一定の場合

●誤差が正規分布に従う場合

一定

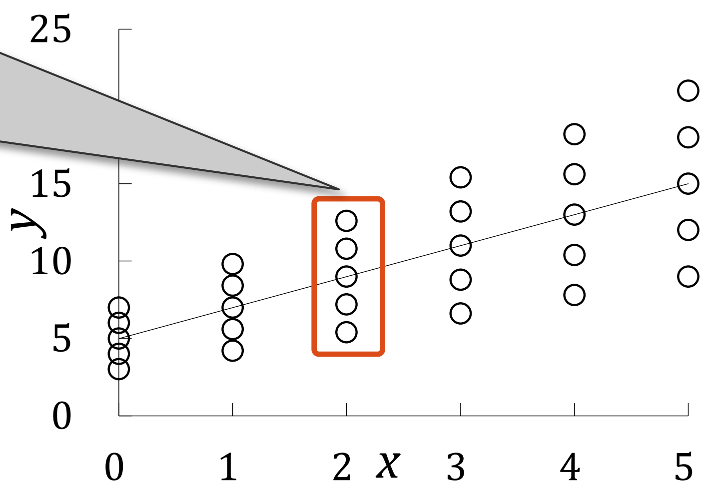
x	y					平均	標準偏差	CV
0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	5.0	1.581	0.316
1	4.2	5.6	7.0	8.4	9.8	7.0	2.214	0.316
2	5.4	7.2	9.0	10.8	12.6	9.0	2.846	0.316
3	6.6	8.8	11.0	13.2	15.4	11.0	3.479	0.316
4	7.8	10.4	13.0	15.6	18.2	13.0	4.111	0.316
5	9.0	12.0	15.0	18.0	21.0	15.0	4.743	0.316

一定

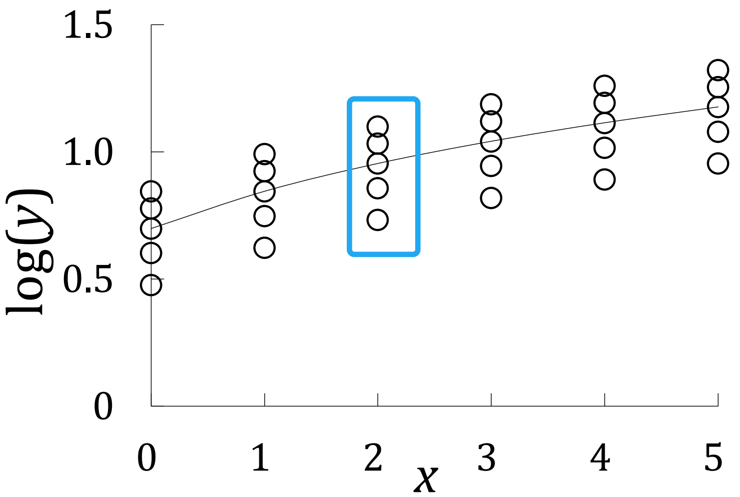
x	$\log(y)$					平均	標準偏差
0	0.48	0.60	0.70	0.78	0.85	0.68	0.145
1	0.62	0.75	0.85	0.92	0.99	0.83	0.145
2	0.73	0.86	0.95	1.03	1.10	0.94	0.145
3	0.82	0.94	1.04	1.12	1.19	1.02	0.145
4	0.89	1.02	1.11	1.19	1.26	1.10	0.145
5	0.95	1.08	1.18	1.26	1.32	1.16	0.145

$y = (5 + 2x)(1 + 0.2 \cdot f) \quad x = 2$

$$y = 9 \times (1 + 0.2 \times \quad 2\ ) = 12.6$$
$$y = 9 \times (1 + 0.2 \times \quad 1\ ) = 10.8$$
$$y = 9 \times (1 + 0.2 \times \quad 0\ ) = \ 9.0$$
$$y = 9 \times \left(1 + 0.2 \times (-1)\right) = \ 7.2$$
$$y = 9 \times \left(1 + 0.2 \times (-2)\right) = \ 5.4$$



表示 2.1.4 誤差の分布
（正規分布）



変動係数が一定の場合

p.72

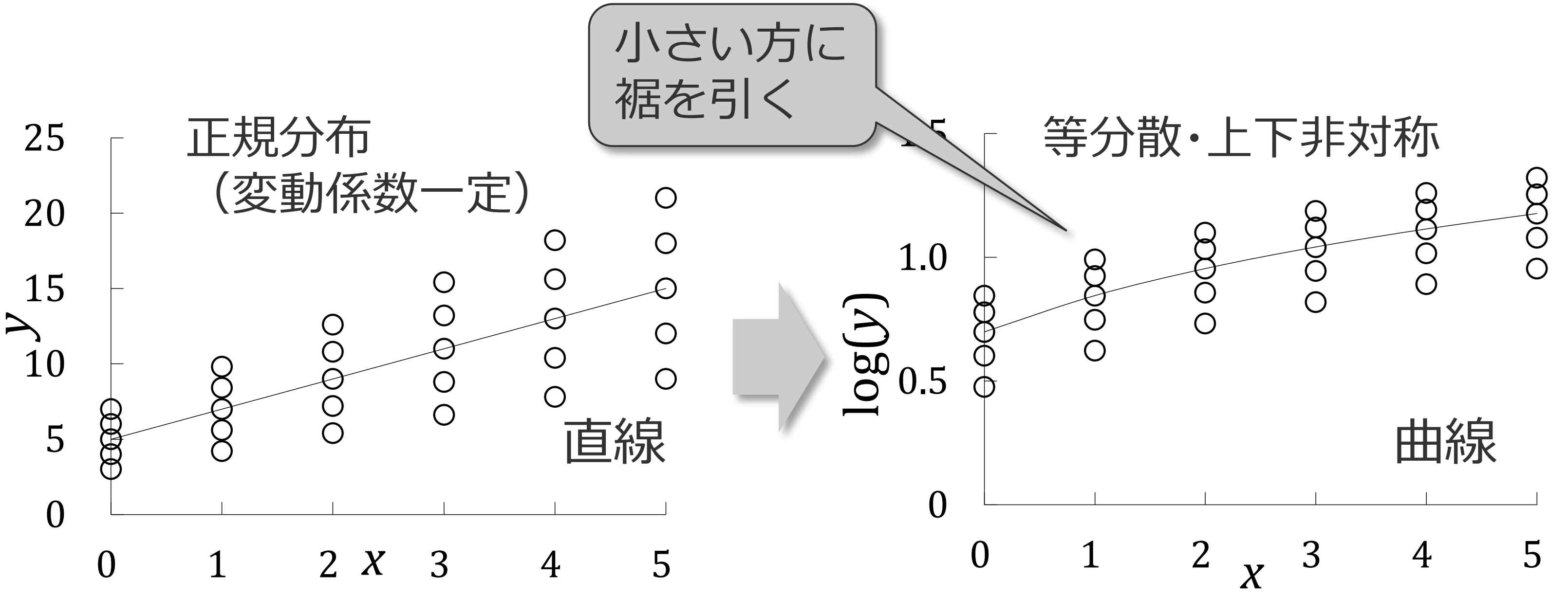
●誤差が正規分布に従う場合

対数変換値は等分散性が成立、誤差の分布は上下非対称：正規性の条件が満たされない

→　変動係数が極端に大きい場合を除いて

　　正規性からの外れが解析に及ぼす影響は小さい

→　等分散・正規分布を仮定した解析を適用できる



表示 2.1.4 誤差の分布
（正規分布）

変動係数が一定の場合

●誤差が対数正規分布に従う場合

$$y = \mu + \varepsilon = \mu + \sigma \qquad (2.1.6)$$

1点に注目

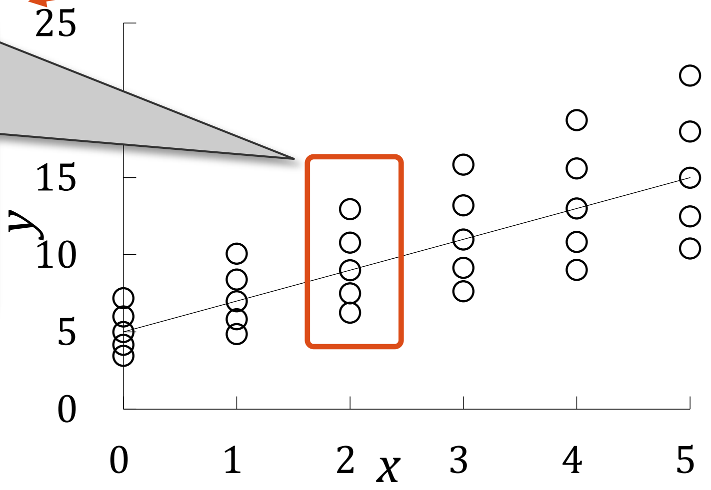
$$\log y = \log(\mu + \sigma)$$
$$= \log(\mu + \mu \cdot CV)$$
$$= \log\big(\mu(1 + CV)\big)$$
$$= \log\mu + \log(1 + CV)$$

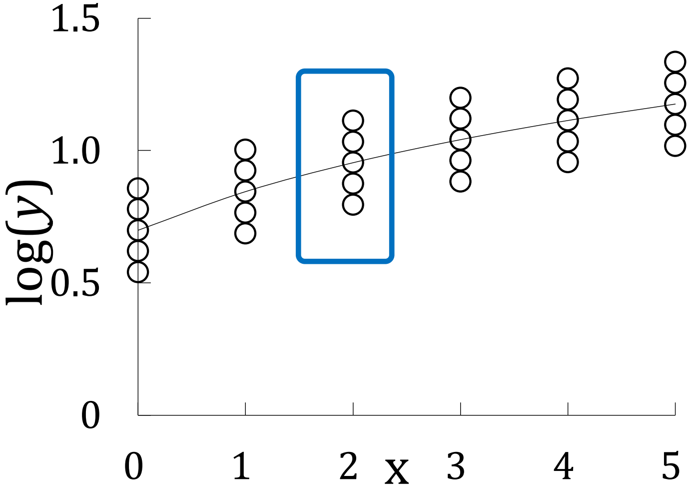
$$CV = \frac{\sigma}{\mu}$$
$$\sigma = \mu \cdot CV$$

対数変化後、正規分布に従うと仮定すると
log y の周囲に等間隔で点を配置

$$\log y = \log\mu + f \cdot \log(1 + CV)$$
$$\log y = \log\big(\mu(1 + CV)^f\big) \qquad (f = 0, \pm 1, \pm 2)$$
$$y = \mu(1 + CV)^f$$
$$= (\alpha + \beta x)(1 + CV)^f$$

$$y = (5 + 2x)(1 + 0.2)^f \qquad x = 2$$
$$y = 9 \times (1 + 0.2)^2 = 12.96$$
$$y = 9 \times (1 + 0.2)^1 = 10.80$$
$$y = 9 \times (1 + 0.2)^0 = 9.00$$
$$y = 9 \times (1 + 0.2)^{-1} = 7.50$$
$$y = 9 \times (1 + 0.2)^{-2} = 6.25$$





表示2.1.3 誤差の分布
（対数正規分布）

変動係数が一定の場合

●誤差が対数正規分布に従う場合

一定

x	y					平均	標準偏差	CV
0	3.5	4.2	5.0	6.0	7.2	5.17	1.477	0.286
1	4.9	5.8	7.0	8.4	10.1	7.23	2.068	0.286
2	6.3	7.5	9.0	10.8	13.0	9.30	2.659	0.286
3	7.6	9.2	11.0	13.2	15.8	11.37	3.250	0.286
4	9.0	10.8	13.0	15.6	18.7	13.44	3.841	0.286
5	10.4	12.5	15.0	18.0	21.6	15.50	4.431	0.286

一定

x	$\log(y)$					平均	標準偏差
0	0.54	0.62	0.70	0.78	0.86	0.70	0.125
1	0.69	0.77	0.85	0.92	1.00	0.85	0.125
2	0.80	0.88	0.95	1.03	1.11	0.95	0.125
3	0.88	0.96	1.04	1.12	1.20	1.04	0.125
4	0.96	1.03	1.11	1.19	1.27	1.11	0.125
5	1.02	1.10	1.18	1.26	1.33	1.18	0.125

$y = (5 + 2x)(1 + 0.2)^f \qquad x = 2$

$y = 9 \times (1 + 0.2)^2 \;\; = 12.96$

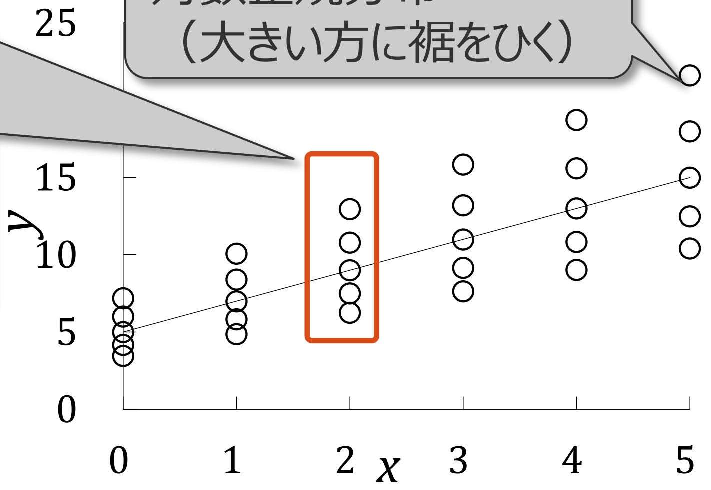
$y = 9 \times (1 + 0.2)^1 \;\; = 10.80$

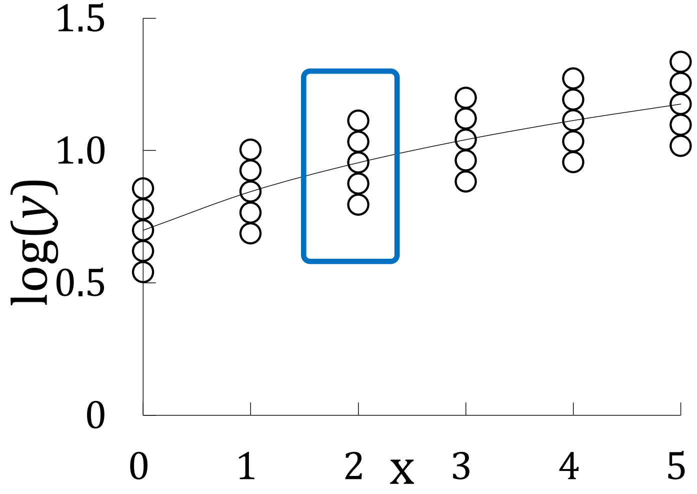
$y = 9 \times (1 + 0.2)^0 \;\; = \;\; 9.00$

$y = 9 \times (1 + 0.2)^{-1} = \;\; 7.50$

$y = 9 \times (1 + 0.2)^{-2} = \;\; 6.25$

対数正規分布
（大きい方に裾をひく）





表示2.1.3 誤差の分布
（対数正規分布）

変動係数が一定の場合

p.72

●誤差が対数正規分布に従う場合

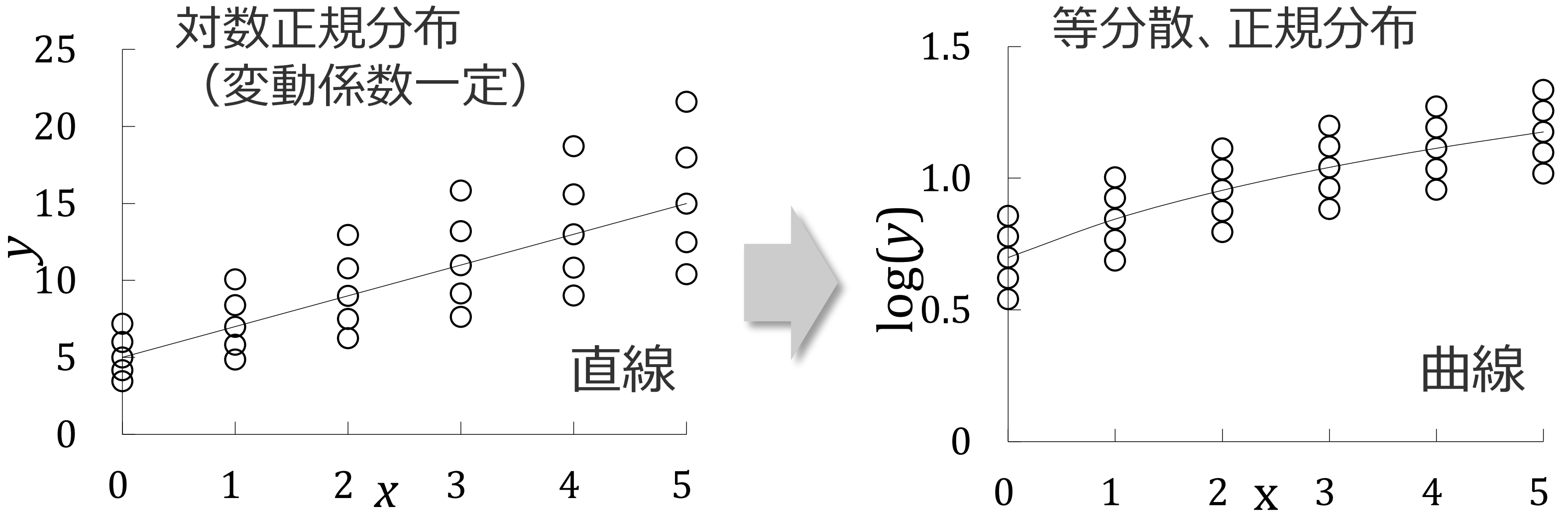
対数変換値は等分散性が成立、正規性の条件が満たされる

→　等分散・正規分布を仮定した解析を適用できる

以下のモデルで非線形最小２乗法により解を求める

$$\log(y) = \log(a + bx) \qquad (2.1.7)$$

等分散が成立しない事例で役立つ解析方法 → この後で事例を挙げて解説



表示2.1.3 誤差の分布
（対数正規分布）

（3）Emax モデル（変動係数一定）への適用

Emax モデルでの対数変換

Emax モデル（変動係数一定）への適用

p.73

●Emax モデルでの対数変換の問題点

データ：誤差が対数正規分布に従う（誤差が等変動係数）

解析　：Emax モデルをあてはめてx_{50} を求めるため、y を対数変換して解析

問題点：対数変換して求めたパラメータは、元データから求めたパラメータと一致しない
対数変換して求めた X_{50} の値は、元データでの x_{50} ではない

元データ

$y_\infty = 100$ の場合、$y_\infty/2 = 50$ 、$y = 50$ の x の値が x_{50}

対数変換値

$Y_\infty = \log y_\infty = \log 100 = 2$ 、$Y_\infty/2 = 1 \rightarrow y = 10^1 = 10$ の x の値？

対数変換値は間隔尺度であるから 1/2 という意味が曖昧

x	log(x)
100	2
10	1
1	0

考え方：残差の 2 乗和を計算するときのみ、対数変換値を用いる

Emax モデル（変動係数一定）への適用

p.73

●対数正規分布に従うデータ

データ：x を10水準設定、$x_1 = 1.25 \sim x_{10} = 640$ の間を公比２の等比級数で変化

Emax モデルで $y_0 = 15, y_\infty = 80, x_{50} = 30, b = 2$ に設定

これに従う対数正規乱数 y を x あたり２つずつ生成（ $\mathrm{CV} = 0.2$）

x_i　公比２の等比級数で変化

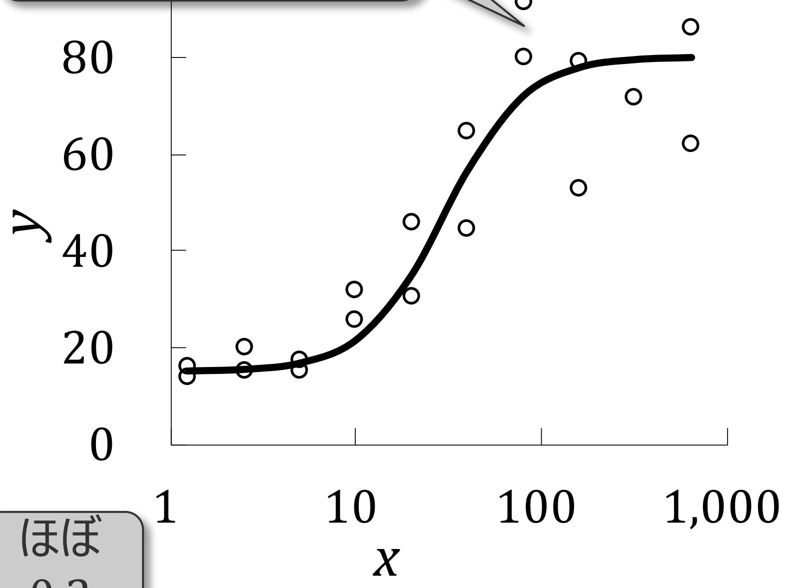
$$y_{ij} = \eta_i + \varepsilon_{ij} \quad i = 1 \sim 10$$
$$j = 1 \sim 2$$
$$= y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x_i}\right)^b} + \varepsilon_{ij}$$
$$= 15 + \frac{80 - 15}{1 + \left(\frac{30}{x_i}\right)^2} + \varepsilon_{ij} \qquad (2.1.8)$$

表示 2.1.5 Emax モデルのテストとグラフ（一部改変）

x	η	y		CV
1.25	15.11	16.13	14.03	0.10
2.50	[illegible]	20.21	15.19	0.20
[illegible]	16.76	17.39	15.12	0.10
10.00	21.50	31.90	25.56	0.16
20.00	35.00	46.08	30.70	0.28
40.00	56.60	64.61	44.41	0.26
80.00	71.99	80.18	91.55	0.09
160.00	77.79	53.00	79.12	0.28
320.00	79.43	71.53	98.49	0.22
640.00	79.86	86.19	62.10	0.23

ほぼ
0.2

x の増加に伴って
ばらつきが増加



Emax モデル（変動係数一定）への適用

p.73

●ソルバーによる解析

（1）等分散：等分散と仮定してそのまま解析

（2）等変動係数：等変動係数と仮定して対数変換（残差平方和の計算のみ）

$$\hat{y}_{ij} = y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x_i}\right)^b} \quad (2.1.8)$$

(1)
(2)

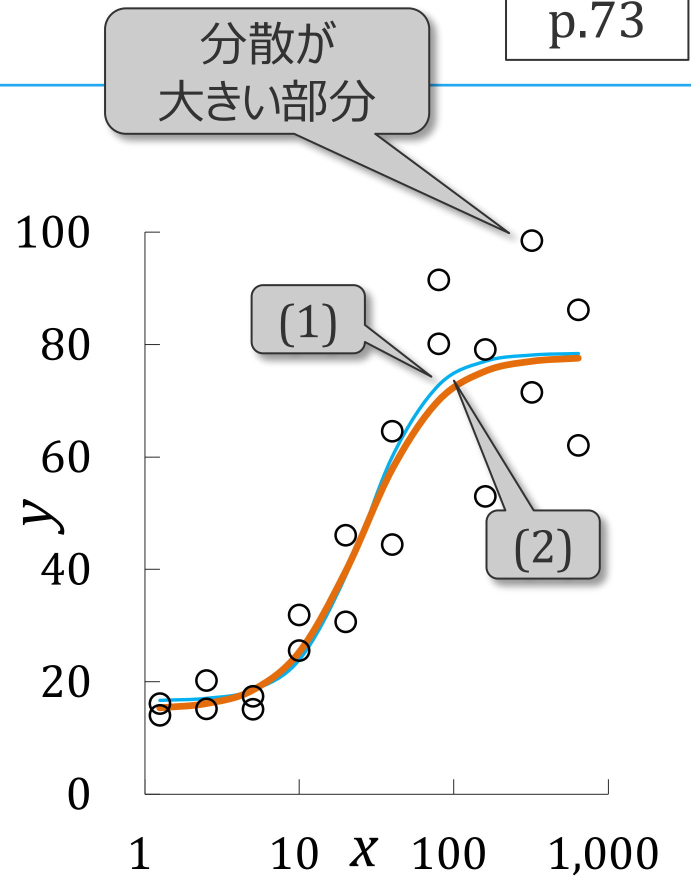
$$S = \sum_{i=1}^{10} \left\{y_{ij} - \hat{y}_{ij}\right\}^2 \quad (1)$$

$$S = \sum_{i=1}^{10} \left\{\ln(y_{ij}) - \ln(\hat{y}_{ij})\right\}^2 \quad (2)$$

表示 2.1.6

x	y		(1) 等分散 yhat		(2) 等変動係数 yhat	
1.25	16.13	14.03	16.69	16.69	15.37	15.37
2.50	20.21	15.19	17.05	17.05	16.13	16.13
5.00	17.39	15.12	18.52	18.52	18.52	18.52
10.00	31.90	25.56	23.95	23.95	25.27	25.27
20.00	46.08	30.70	38.95	38.95	39.67	39.67
40.00	64.61	44.41	60.12	60.12	57.83	57.83
80.00	80.18	91.55	72.83	72.83	70.05	70.05
160.00	[illegible]	[illegible]	77.05	77.05	75.25	75.25
[illegible]	71.53	98.49	78.15	78.15	77.01	77.01
640.00	86.19	62.10	78.42	78.42	77.56	77.56

	(1)		(2)
y0	16.58	y0	15.03
yinf	78.51	yinf	77.80
x50	26.36	x50	25.74
b	2.07	b	1.73
S	2257	S	0.676



Emax モデル（変動係数一定）への適用

● ソルバーによる解析

（1）等分散：等分散と仮定してそのまま解析

（2）等変動係数：等変動係数と仮定して対数変換（残差平方和の計算のみ）

$$\hat{y}_{ij} = y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x_i}\right)^b} \quad (2.1.8)$$

(1) (2)

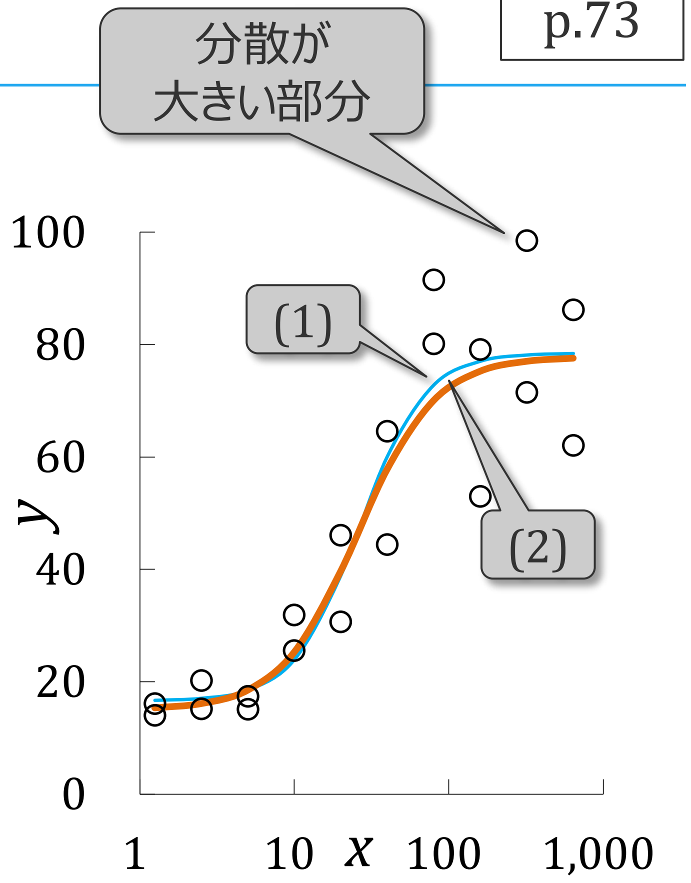
$$S = \sum_{i=1}^{10} \left\{ y_{ij} - \hat{y}_{ij} \right\}^2 \quad (1)$$

$$S = \sum_{i=1}^{10} \left\{ \ln(y_{ij}) - \ln(\hat{y}_{ij}) \right\}^2 \quad (2)$$

表示 2.1.6

x	y		(1) 等分散 yhat		(2) 等変動係数 yhat	
1.25	16.13	14.03	16.69	16.69	15.37	15.37
2.50	20.21	15.19	17.05	17.05	16.13	16.13
5.00	17.39	15.12	18.52	18.52	18.52	18.52
10.00	31.90	25.56	23.95	23.95	25.27	25.27
20.00	46.08	30.70	38.95	38.95	39.67	39.67
40.00	64.61	44.41	60.12	60.12	57.83	57.83
80.00	80.18	91.55	72.83	72.83	70.05	70.05
160.00	[illegible]	79.12	77.05	77.05	75.25	75.25
[illegible]	71.53	98.49	78.15	78.15	77.01	77.01
640.00	86.19	62.10	78.42	78.42	77.56	77.56

	(1)		(2)
y0	16.58	y0	15.03
yinf	78.51	yinf	77.80
x50	26.36	x50	25.74
b	2.07	b	1.73
S	2257	S	0.676



(2) の値が小さい
分散の大きい部分の
影響が小さくなった

Emax モデル（変動係数一定）への適用

p.73

● ソルバーによる解析

（2'）等変動係数（対数変換）の別の解析方法 → JMP

$$\hat{y} = y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b} \qquad (1)\ (2)$$

$$\widehat{lny} = \ln\left(y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b}\right) \qquad (2')$$

$$S = \sum_{i=1}^{10} \{\ln(y_i) - \ln(\hat{y}_i)\}^2 \qquad (2)$$

同じ

$$S = \sum_{i=1}^{10} \{lny_i - \widehat{lny}_i\}^2 \qquad (2')$$

表示 2.1.6（改変）

（2'）で利用

					(1) 等分散		(2) 等変動係数		(2') 等変動係数	
x	y		lny		yhat		yhat		lnyhat	
1.25	16.13	14.03	2.78	2.64	16.69	16.69	15.37	15.37	2.73	2.73
2.50	20.21	15.19	3.01	2.72	17.05	17.05	16.13	16.13	2.78	2.78
5.00	17.39	[illegible]	2.86	2.72	18.52	18.52	18.52	18.52	2.92	2.92
10.00	31.90	25.56	3.46	3.24	23.95	23.95	25.27	25.27	3.23	3.23
[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	3.42	38.95	38.95	39.67	39.67	3.68	3.68
40.00	64.61	44.41	4.17	3.79	60.12	60.12	57.83	57.83	4.06	4.06
[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	73.83	73.83	70.05	70.05	4.25	4.25
160.00	53.00	79.12	3.97	4.37	77.05	77.05	75.25	75.25	4.32	4.32
320.00	71.53	98.49	4.27	4.59	78.15	78.15	77.01	77.01	4.34	4.34
640.00	86.19	62.10	4.46	4.13	78.42	78.42	77.56	77.56	4.35	4.35

	(1)	(2)	(2')
y0	16.58	15.03	15.03
yinf	78.51	77.80	77.80
x50	26.36	25.74	25.74
b	2.07	1.73	1.73
S	2257	0.676	0.676

Emax モデル（変動係数一定）への適用

p.73

●ソルバーによる解析

$$\hat{y} = y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b} \qquad (1)\ (2)$$

$$\widehat{lny} = \ln\left(y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b}\right) \qquad (2')$$

$$S = \sum_{i=1}^{10}\{y_i - \hat{y}_i\}^2 \qquad (1)$$

$$S = \sum_{i=1}^{10}\{\ln(y_i) - \ln(\hat{y}_i)\}^2 \qquad (2)$$

$$S = \sum_{i=1}^{10}\left\{lny_i - \widehat{lny}_i\right\}^2 \qquad (2')$$

表示 2.1.6（改変）

(2')で利用

					(1) 等分散		(2) 等変動係数		(2') 等変動係数	
x	y		lny		yhat		yhat		lnyhat	
1.25	16.13	14.03	2.78	2.64	16.69	16.69	15.37	15.37	2.73	2.73
2.50	20.21	15.19	3.01	2.72	17.05	17.05	16.13	16.13	2.78	2.78
5.00	17.39	15.12	2.86	2.72	18.52	18.52	18.52	18.52	2.92	2.92
[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	3.24	23.95	23.95	25.27	25.27	3.23	3.23
20.00	46.08	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	3.68	3.68
40.00	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	4.06	4.06
80.00	80.18	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	4.25	4.25
160.00	53.00	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	4.32	4.32
320.00	71.53	98.49	4.27	4.59	78.15	78.15	77.01	77.01	4.34	4.34
640.00	[illegible]	62.10	4.46	4.13	78.42	78.42	77.56	77.56	4.35	4.35

$$\widehat{lny} = \ln y_0 + \frac{\ln y_\infty - \ln y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b}$$

このような式ではない

	(1)	(2)	(2')
y0	16.58	15.03	15.03
yinf	78.51	77.80	77.80
x50	26.36	25.74	25.74
b	2.07	1.73	1.73
S	2257	0.676	0.676

Emax モデル（変動係数一定）への適用

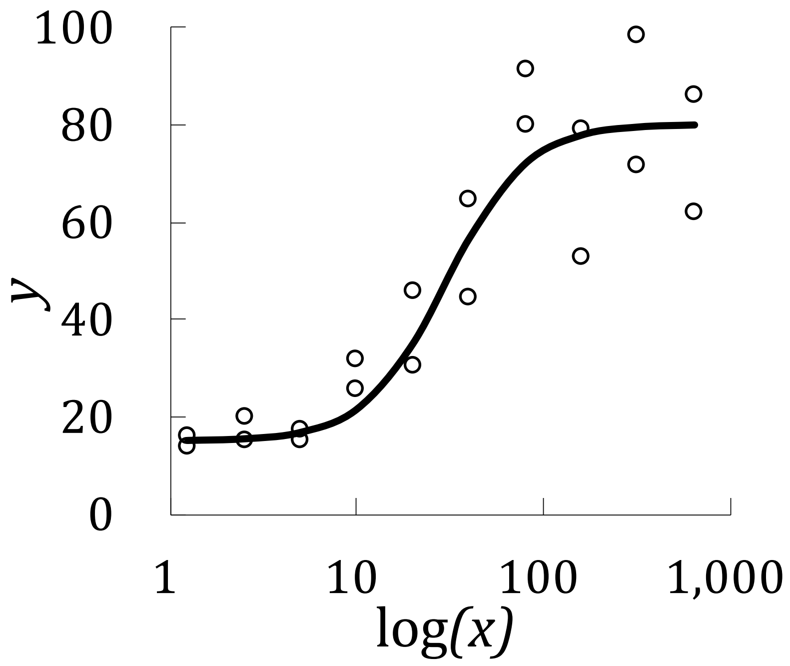
●JMP による解析

新規に JMP のデータテーブルを作成し、表示2.1.5 の観測値を入力、または Excel からコピー
（「21-不等分散.jmp」）

	x	y
1	1.25	16.13
2	1.25	14.03
3	2.5	20.21
4	2.5	15.19
5	5	17.39
6	5	15.12
7	10	31.9
8	10	25.56
9	20	46.08

表示 2.1.5 Emax モデルのテストとグラフ（一部改変）

x	η	y		CV
1.25	15.11	16.13	14.03	0.10
2.50	15.45	20.21	15.19	0.20
5.00	16.76	17.39	15.12	0.10
10.00	21.50	31.90	25.56	0.16
20.00	35.00	46.08	30.70	0.28
40.00	56.60	64.61	44.41	0.26
80.00	71.99	80.18	91.55	0.09
160.00	77.79	53.00	79.12	0.28
320.00	79.43	71.53	98.49	0.22
640.00	79.86	86.19	62.10	0.23



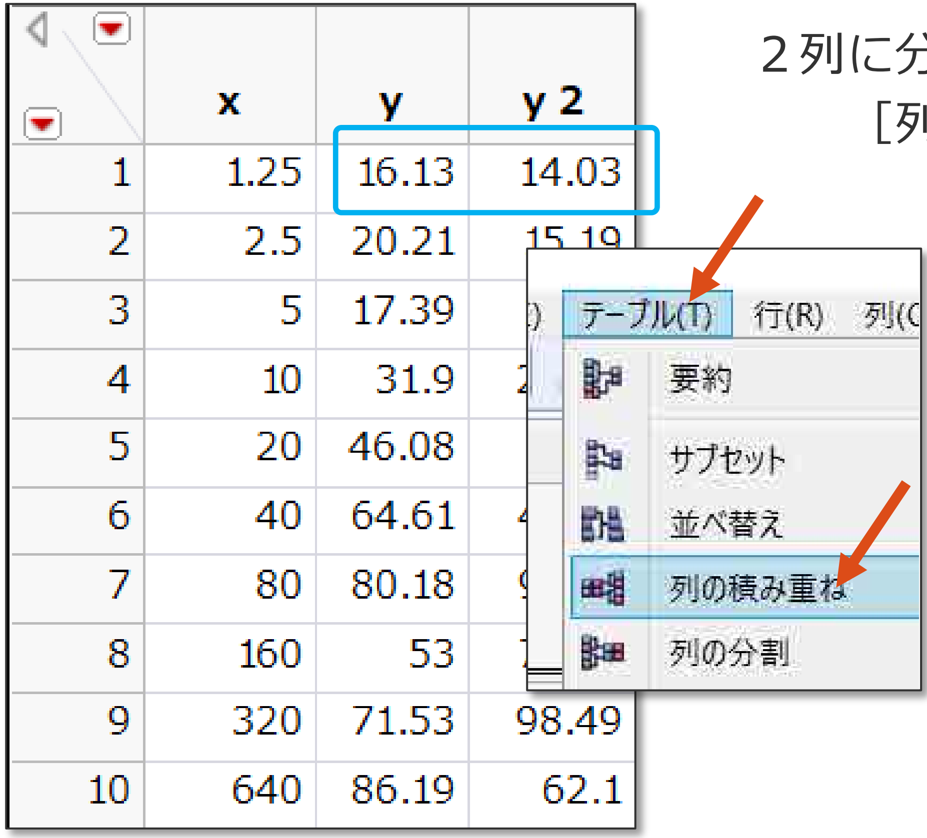
Emax モデル（変動係数一定）への適用

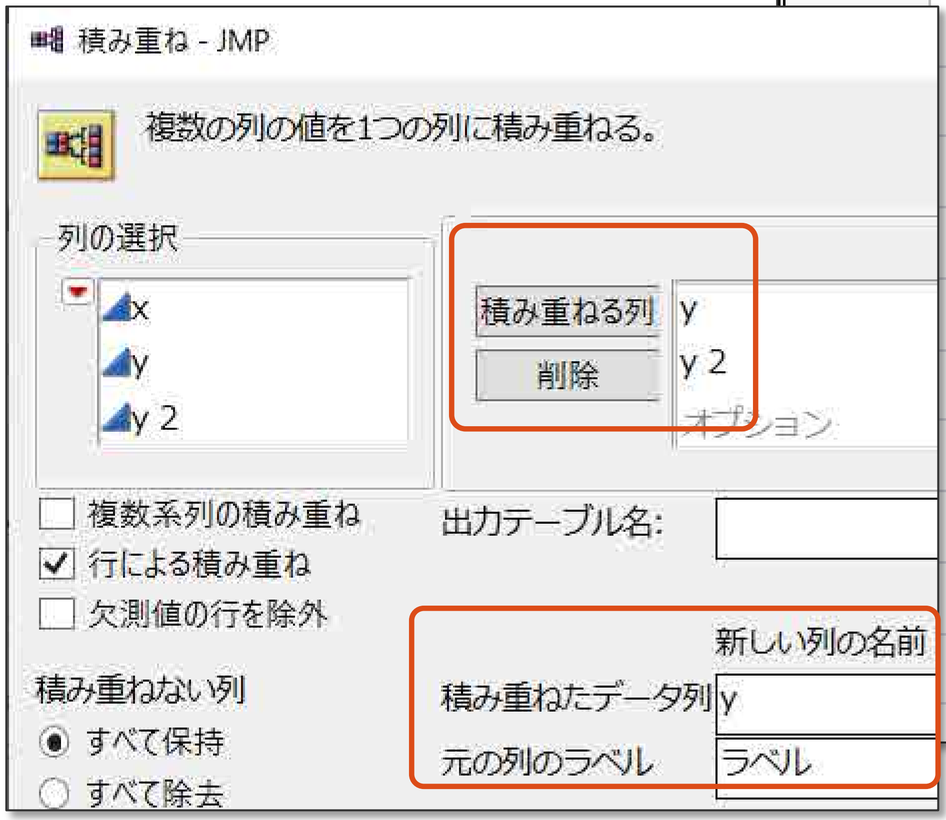
p.74

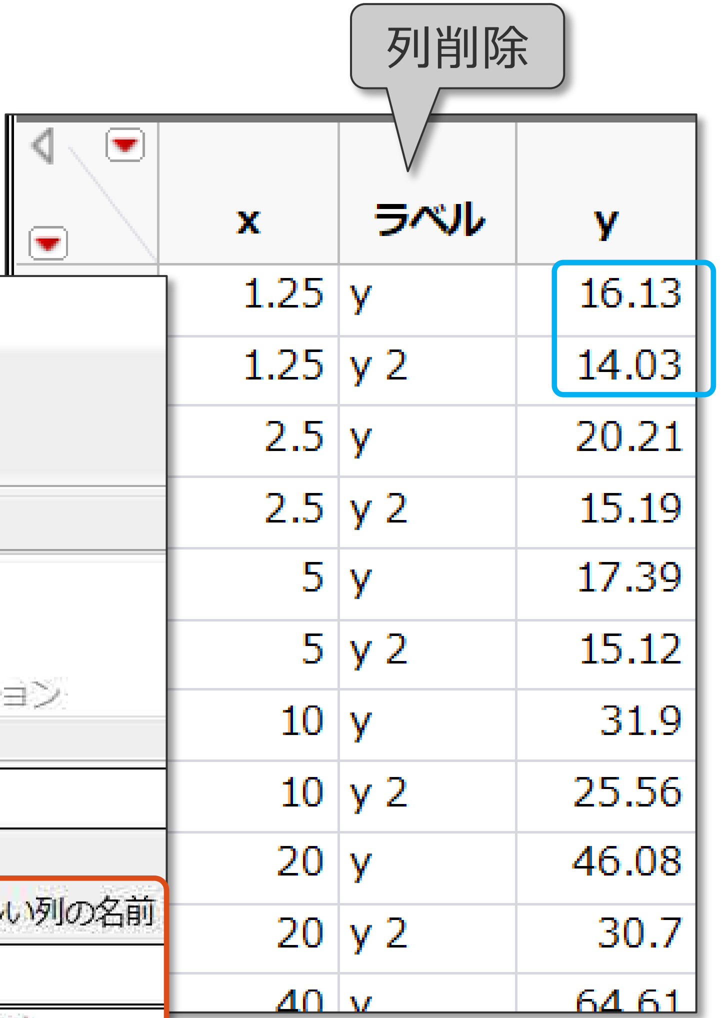
●データテーブルの作成：列の積み重ね

2 列に分かれた y を 1 列に合わせる

［列の積み重ね］＞［列の積み重ね］







Emax モデル（変動係数一定）への適用

p.74

●JMP で解析：等分散を仮定（不等分散を無視）

ここでは、(1)～(6)の手順で操作する

（1）モデル式（計算式）の選択

$$\hat{y} = y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b} \quad (2.1.8)$$

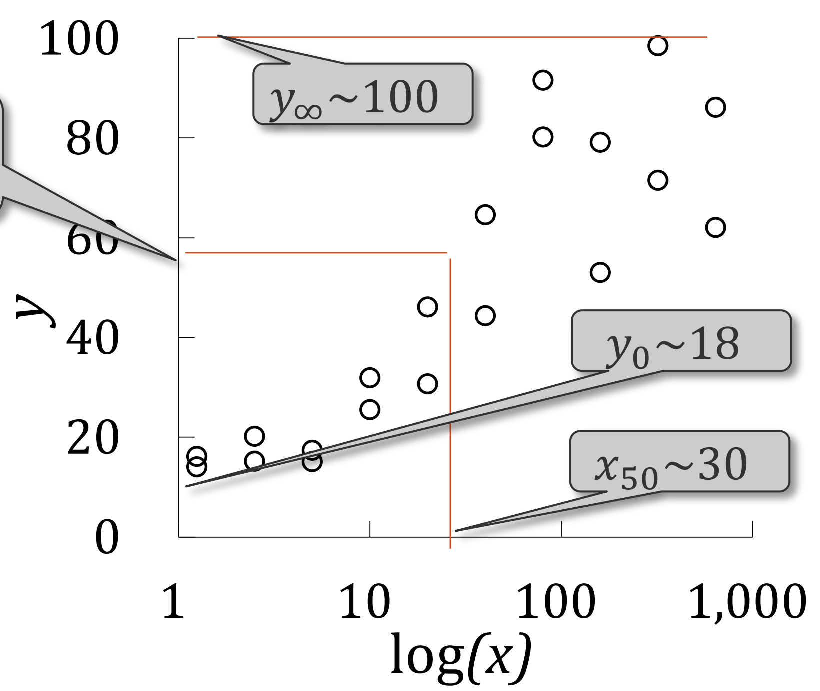
（2）パラメータ初期値の設定

$y_0 = 18$　・・・グラフから
$y_\infty = 100$・・・グラフから
$(100 + 18)/2 = 59$
$x_{50} = 30$・・・グラフから
$b = 1.17 \sim 1$・・・・・・・・
　ゴールシーク利用（§1.4）

	x	y
1	1.25	16.13
2	[illegible]	[illegible]
3	[illegible]	[illegible]
4	2.5	[illegible]
11	40	64.61
12	40	44.41
13	80	80.18
14	80	91.55
15	160	53

$$\frac{(100 + 18)}{2} = 59$$

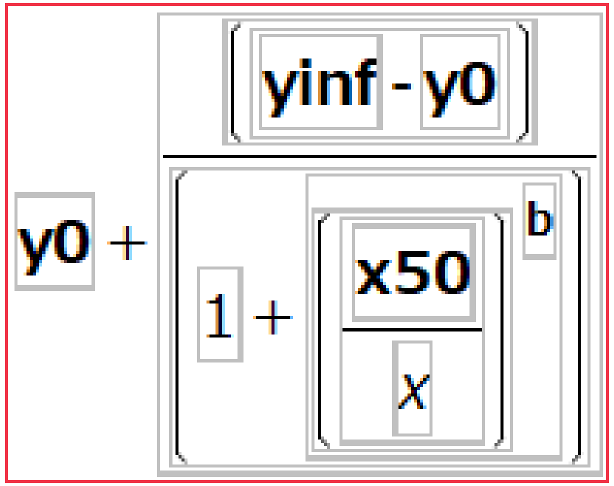
（1）モデル式（計算式）の選択
（2）パラメータ初期値の設定
（3）予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力
（4）残差 e（観測値 − 予測値）の設定
（5）残差の 2 乗和 S の設定
（6） S を最小にするパラメータを推定



Emax モデル（変動係数一定）への適用

●JMP で解析：等分散を仮定（不等分散を無視）

（3）予測値 $\hat{y}$ の計算式の入力



$y_0 = 18$
$y_\infty = 100$
$x_{50} = 30$
$b = 1$

$$\hat{y} = y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b} \quad (2.1.8)$$

（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

yhat 列に計算式を入力　新規作成

	x	y	yhat
1	1.25	16.13	21.28
2	1.25	14.03	21.28
3	2.5	20.21	24.307(
4	2.5	15.19	24.307(
5	5	17.39	29.714
6	5	15.12	29.714

「パラメータ」、y0、＋、(、)、「パラメータ」、yinf、－、y0、↑、↑、÷、分母表示、1、＋、(、)、「パラメータ」、x50、÷、「テーブル列」、x、↑、↑、演算子「x^y」、x^y、肩の 2 を選択、「パラメータ」、b　（§1.4 参照）

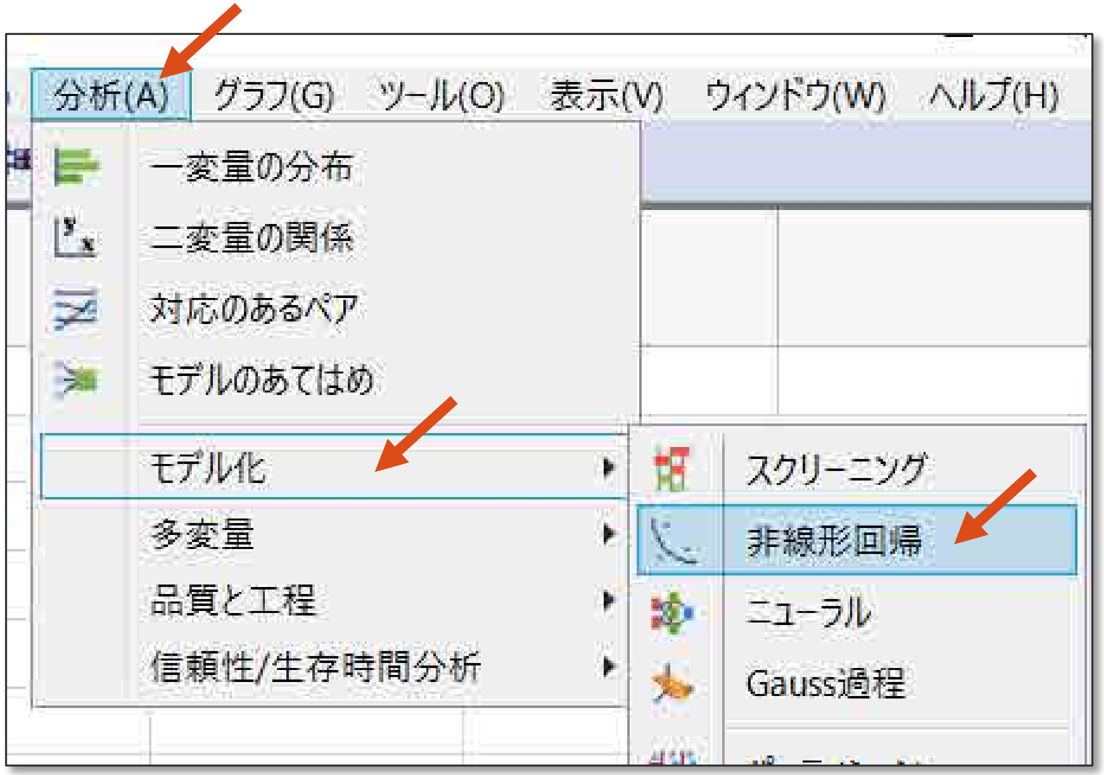
Emax モデル（変動係数一定）への適用

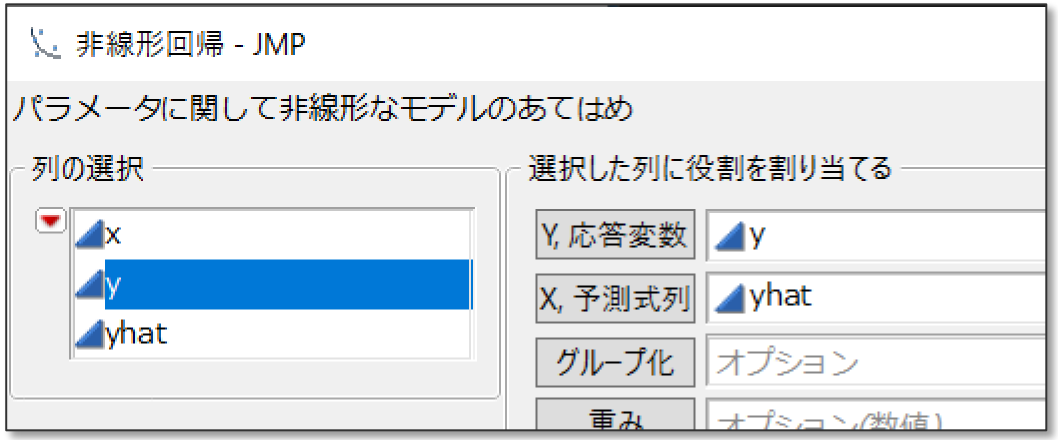
p.74

●JMP で解析：等分散を仮定（不等分散を無視）

（6）S を最小にするパラメータを推定

［分析］＞［モデル化］＞［非線形回帰］





横軸を対数目盛りに変更
初期値の調整（§1.4 参照）

Emax モデル（変動係数一定）への適用

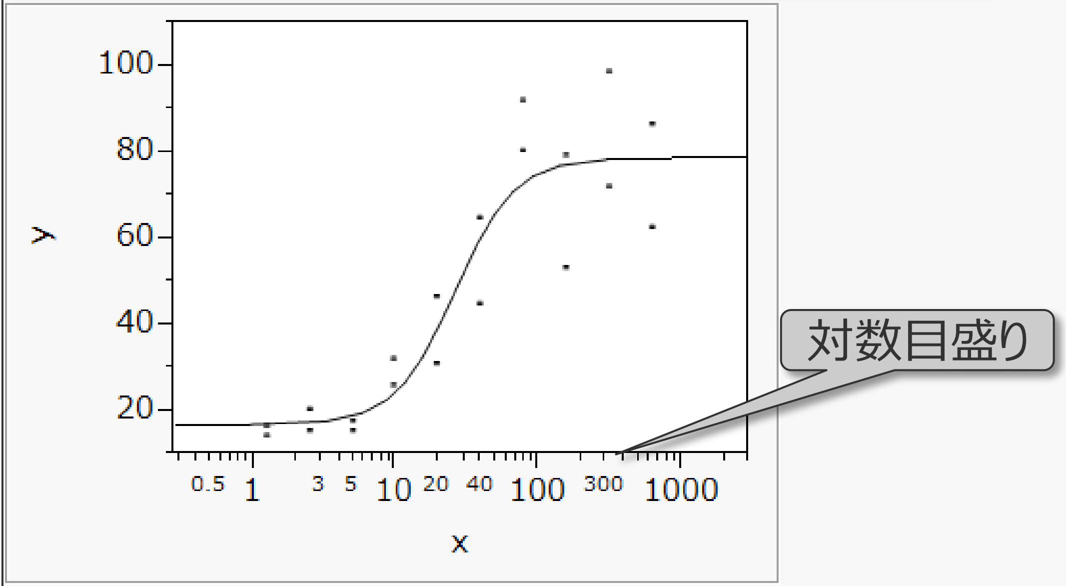
p.74

●JMP で解析：等分散を仮定（不等分散を無視）

信頼限界の表示　［信頼限界］をクリック
予測値の更新　　［推定値の保存］をクリック
グラフ化するためにデータテーブルに値を保存
　▼オプションメニュー［予測信頼限界の保存］
（§1.4 参照）

表示　2.1.7 JMP による解（不等分散を無視した解析）

プロット



パラメータ	推定値	最小値	最大値
y0	16.580219032	9	27
yinf	78.509274534	50	150
x50	26.356507306	15	45
b	2.0659554487	0.5	3

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
2256.5239149	16	141.03274	11.875721

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	16.580219032	5.868035	-5.2643766	27.6286763
yinf	78.509274534	5.00390715	68.6132035	94.9039876
x50	26.356507306	7.02670601	12.9052541	.
b	2.0659554487	0.92468981	0.70131573	.

解法: 数値 Gauss-Newton

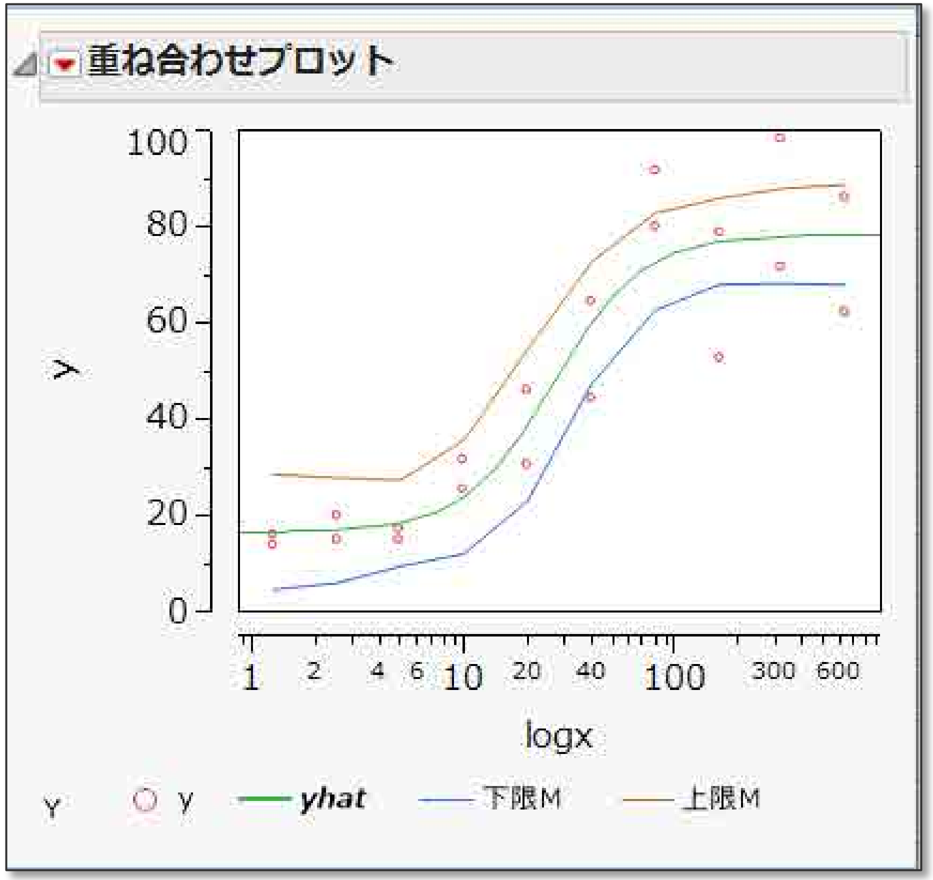
Emax モデル（変動係数一定）への適用

●JMP で解析：等分散を仮定（不等分散を無視）

［グラフ］＞［重ね合わせプロット］
（§1.3 、§1.4 参照）

	x	y	yhat	下限M	上限M
1	1.25	16.13	16.69393:	4.735570	28.6522!
2	1.25	14.03	16.69393:	4.735570	28.6522!
3	2.5	20.21	17.05358!	6.135738	27.9714:
4	2.5	15.19	17.05358!	6.135738	27.9714:
5	5	17.30	18.51512(	0.55822:	27.4720:

表示 2.1.8 回帰曲線と信頼限界
（不等分散を無視した解析）



Emax モデル（変動係数一定）への適用

●JMP で解析：等変動係数を仮定（不等分散を考慮）

（1）モデル式（計算式）の選択

$$\widehat{\ln y} = \ln\left(y_0 + \frac{y_\infty - y_0}{1 + \left(\frac{x_{50}}{x}\right)^b}\right)$$

（2）パラメータ初期値の設定

$y_0 = 18$ ・・・グラフから
$y_\infty = 100$・・・グラフから
$x_{50} = 30$ ・・・グラフから
$b = 1$・・・・・ゴールシーク利用

（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

	x	y	lny	lnyhat
1	1.25	16.13	2.78068	3.05776
2	1.25	14.03	2.64119	3.05776
3	2.5	20.21	3.00617	3.19079

Y, 応答変数

Log(y)

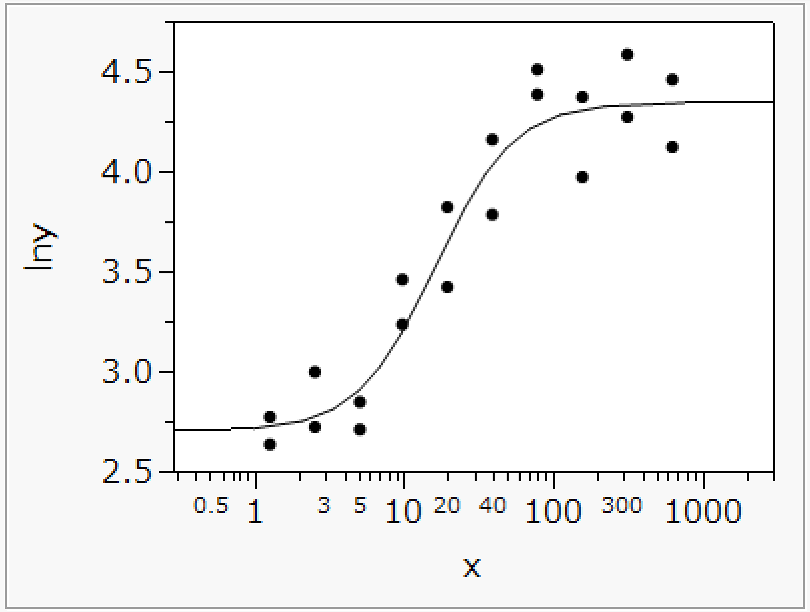
X, 予測式列

$\mathrm{Log}\left(y0 + \frac{yinf - y0}{1 + \left(\frac{x50}{x}\right)^{b}}\right)$

Emax モデル（変動係数一定）への適用

●JMP で解析：等変動係数を仮定（不等分散を考慮）

プロット



パラメータ	推定値	最小値	最大値
y0	15.031088406	7.51554	22.5466
yinf	77.803725865	38.9019	116.706
x50	25.744104234	12.8721	38.6162
b	1.7288512615	0.86443	2.59328

表示　2.1.7 JMP による解（不等分散を考慮した解析）

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
0.6764479102	16	0.042278	0.2056161

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	15.031088406	2.03854838	9.47913067	19.0614189
yinf	77.803725865	7.10165745	65.3731302	97.8377353
x50	25.744104234	6.35617562	16.1965198	49.9843678
b	1.7288512615	0.52859214	0.90571126	3.14247895

解法: 解析 Gauss-Newton

Emax モデル（変動係数一定）への適用

●JMP で解析：等変動係数を仮定（不等分散を考慮）

［推定値の保存］

信頼限界値「下限M」「上限M」の保存

▼オプションメニュー＞［予測信頼限界の保存］

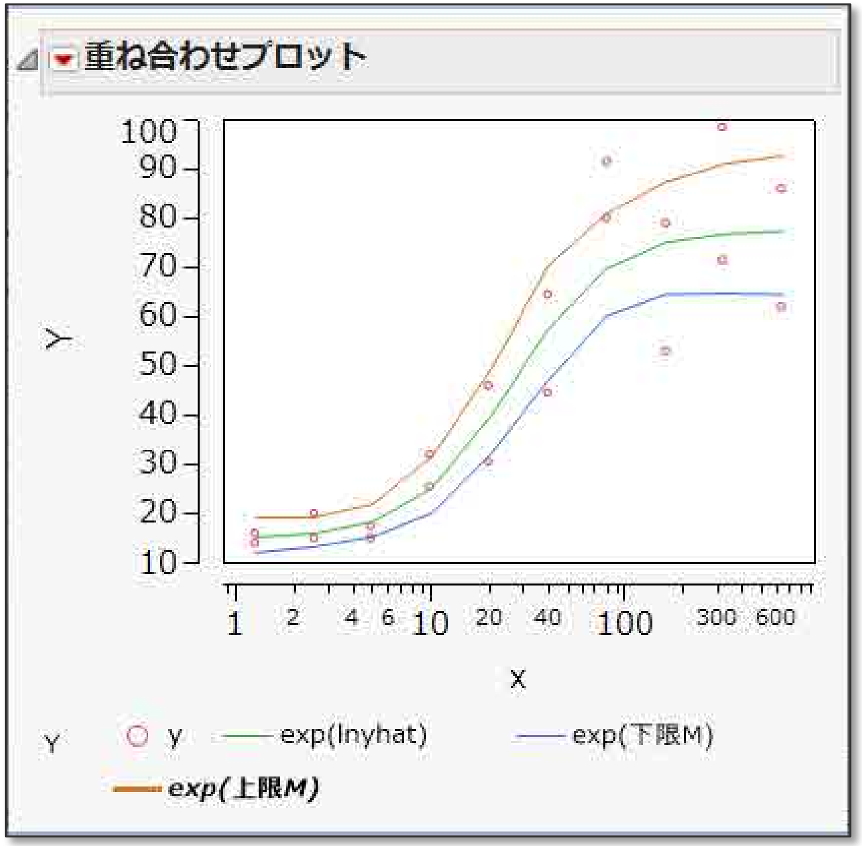
推定値（対数）を計算式のExp 関数で元に戻す

［グラフ］＞［重ね合わせプロット］

Exp[*lnyhat*]　Exp[下限*M*]　Exp[上限*M*]

	x	y	lny	lnyhat	下限M	上限M	exp(lnyhat)	exp(下限M)	exp(上限M)
1	1.25	16.1	2.78	2.73211	2.499	2.964	15.3653929	12.1778735	19.3872351
2	1.25	14.0	2.64	2.73211	2.499	2.964	15.3653929	12.1778735	19.3872351

表示 2.1.8 回帰曲線と信頼限界
（不等分散を考慮した解析）



Emax モデル（変動係数一定）への適用

●JMP による解

表示 2.1.7

等分散を仮定
（不等分散を無視）

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
2256.5239149	16	141.03274	11.875721

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	16.580219032	5.868035	-5.2643766	27.6286763
yinf	78.509274534	5.00390715	68.6132035	94.9039876
x50	26.356507306	7.02670601	12.9052541	.
b	2.0659554487	0.92468981	0.70131573	.

解法: 数値 Gauss-Newton

求められない

実際は等変動係数であるデータ
（等分散ではないデータ）を
上：等分散として解析
下：等変動係数として解析

等変動係数を仮定
（不等分散を考慮）

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
0.6764479102	16	0.042278	0.2056161

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	15.031088406	2.03854838	9.47913067	19.0614189
yinf	77.803725865	7.10165745	65.3731302	97.8377353
x50	25.744104234	6.35617562	16.1965198	49.9843678
b	1.7288512615	0.52859214	0.90571126	3.14247895

解法: 解析 Gauss-Newton

等変動係数として解析
した方が（下）、
近似標準誤差は小さく、
信頼限界が上下とも求められている

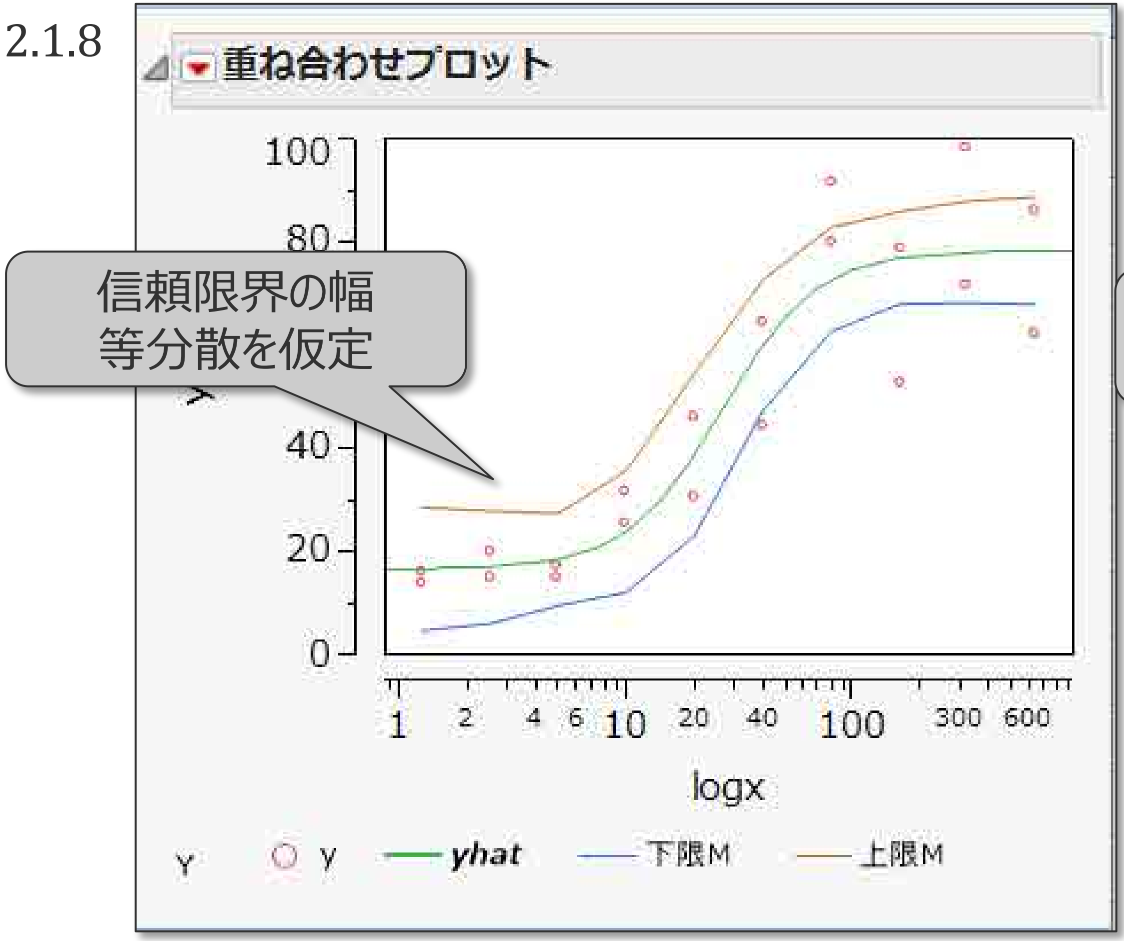
Emax モデル（変動係数一定）への適用

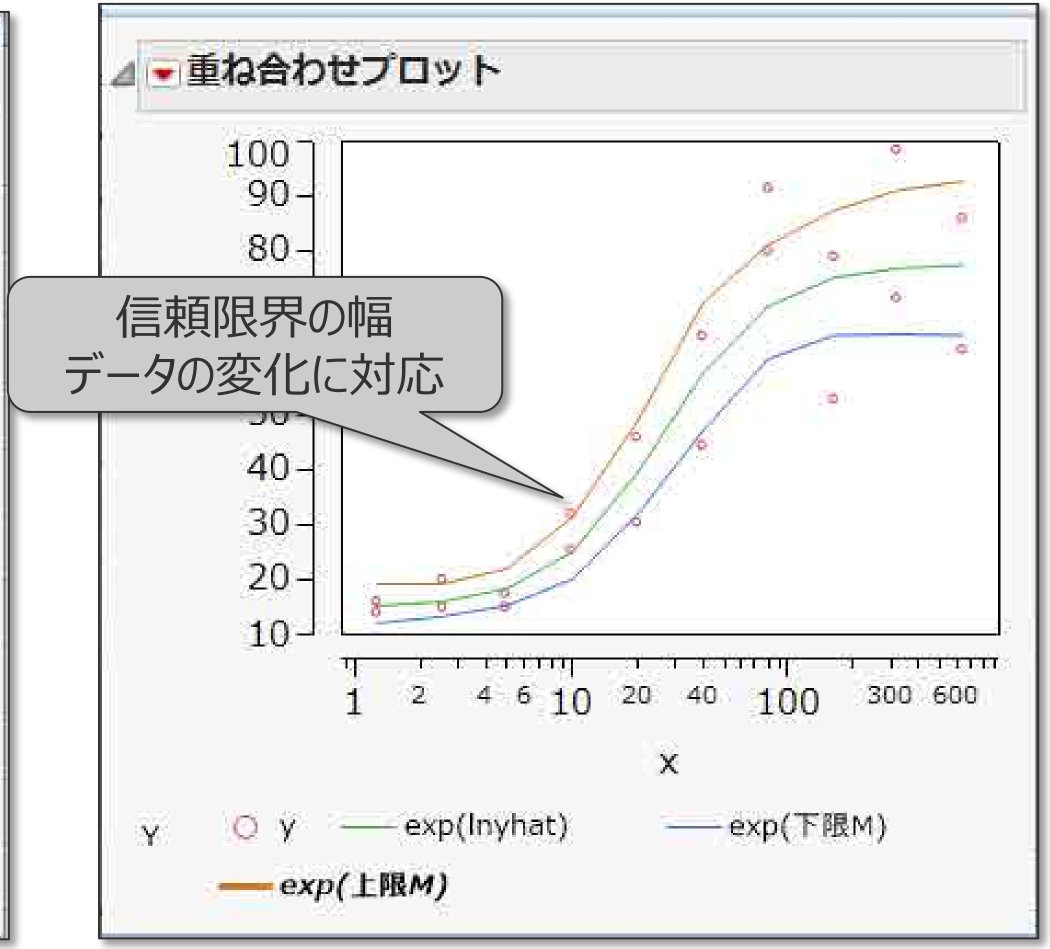
●回帰曲線と信頼限界

等分散を仮定
（不等分散を無視）

等変動係数を仮定
（不等分散を考慮した解析）

表示 2.1.8





p.75

（4） 誤差の分散 σ^2 が μ に比例する場合

（2）（3）誤差の標準偏差σが μ に比例する場合
（変動係数が一定）

誤差の分散 σ^2 が μ に比例する場合

p.75

●平方根変換

誤差の分散 σ^2 が μ に 比例する場合（標準偏差の2 乗（分散）が μ に比例する場合）
= 誤差の標準偏差 σ が$\mu^{0.5}$ に比例する場合

この場合は，y の平方根を取ると等分散が成立することが証明されている

Excel、JMPでの解析方法
§2.1(3) で説明した残差平方和の式で，対数を取る代わりに平方根を取る

対数変換

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

平方根変換

$$S = \sum_{i=1}^{n} \left(\sqrt{y_i} - \sqrt{\hat{y}_i}\right)^2$$

（5）変数変換方法の選択

誤差の分布が不明なデータに対して
分析前にどう対応するか

変数変換方法の選択

●事例

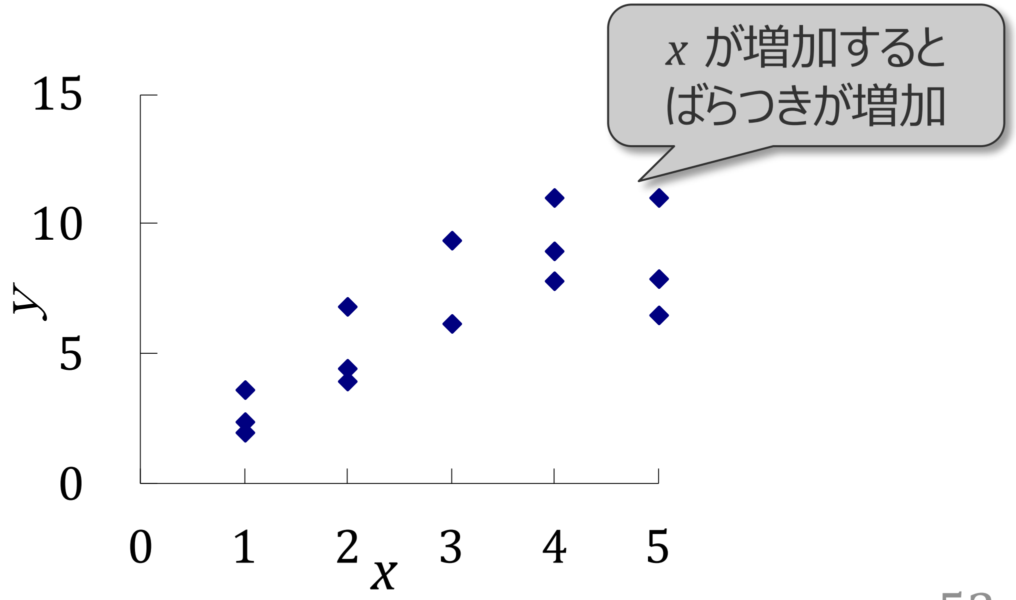
表示1.3.8 のデータを等分散性から外れるように修正
（等分散性から外れている、指数曲線の関係がある、繰り返し数が異なる）
このデータをはじめて手にしたものと仮定（データの特性が分からない段階）

データとその誤差の状態を詳しく観察
x が増加するとばらつきが増加、標準偏差は約 3 倍の差（n が小さいので統計的判断は不可）

表示 2.1.9 データと散布図

x	y			平均	標準偏差
1	2.4	3.6	2.0	2.67	0.833
2	6.8	4.5	4.0	5.10	1.493
3	9.4	6.2		7.80	2.263
4	11.0	7.8	9.0	9.27	1.617
5	7.9	6.5	11.0	8.47	2.303

標準偏差に
約 3 倍の差



変数変換方法の選択

●事例

表示1.3.8 のデータを等分散性から外れるように修正
（等分散性から外れている、指数曲線の関係がある、繰り返し数が異なる）
このデータをはじめて手にしたものと仮定（データの特性が分からない段階）

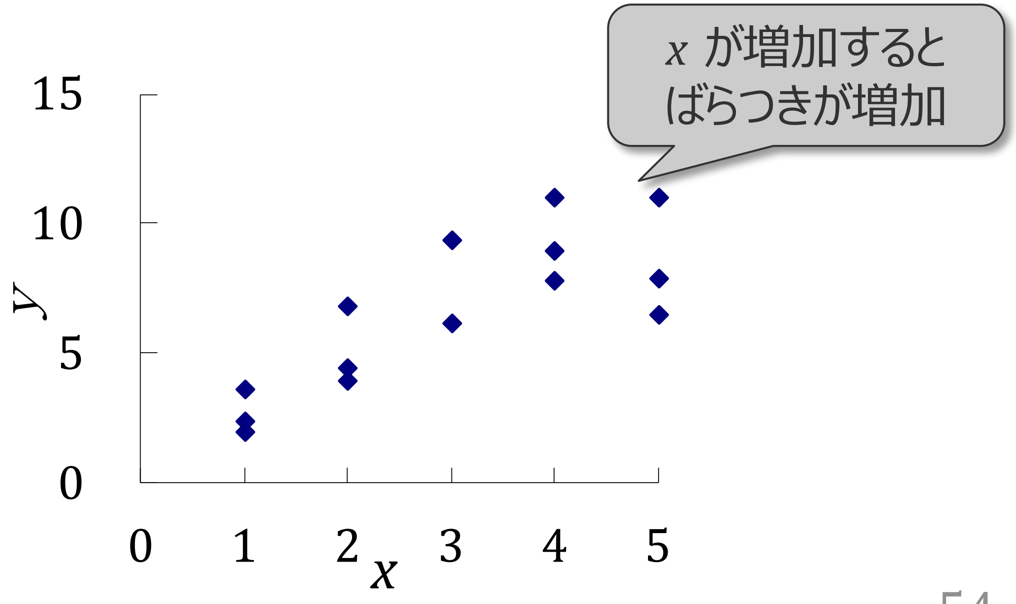
データとその誤差の状態を詳しく観察
x が増加するとばらつきが増加、標準偏差は約 3 倍の差（n が小さいので統計的判断は不可）

x_i　　y_{ij}　　$\bar{y}_{i\cdot}$

表示 2.1.9 データと散布図（改変）

x	y			平均	標準偏差
1	2.4	3.6	2.0	2.67	0.833
2	6.8	4.5	4.0	5.10	1.493
3	9.4	6.2		7.80	2.263
4	11.0	7.8	9.0	9.27	1.617
5	7.9	6.5	11.0	8.47	2.303

標準偏差に
約 3 倍の差



変数変換方法の選択

p.76

●繰り返し誤差の分布

繰り返し誤差 $|e_{ij}| = |y_{ij} - \bar{y}_{i.}|$ と平均値 $\bar{y}_{i.}$ の関係を調べる

$$|e_{ij}| = b \cdot \bar{y}_{i.}{}^{p} \qquad (2.1.9)$$

$p = 1$　：誤差の標準偏差 σ_i が μ_i に比例する（等変動係数）→　対数変換

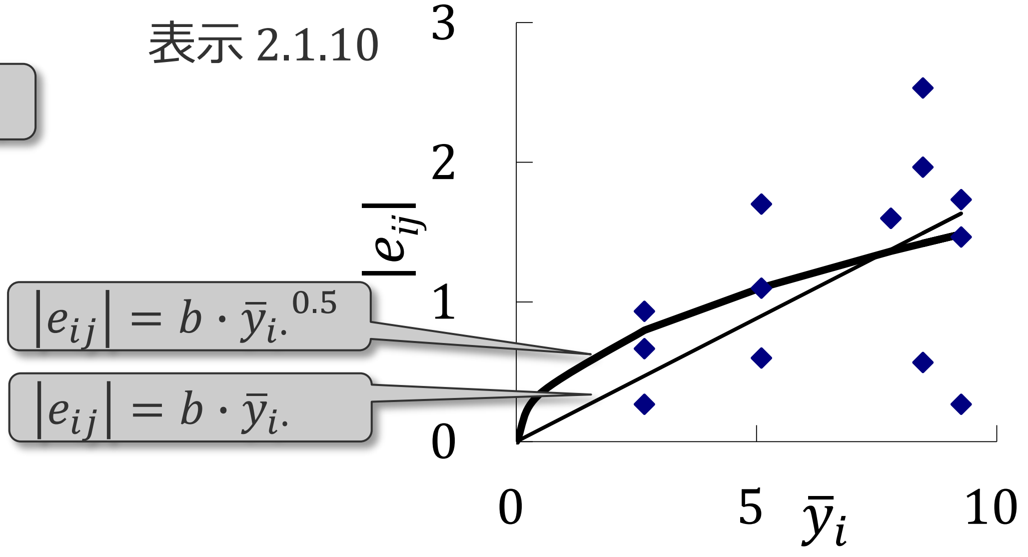
$p = 0.5$　：誤差の分散 σ_i^2 が μ_i に比例する・・・・・・・・　→　平方根変換

表示 2.1.9 データと散布図（改変）

$|e_{ij}| = |y_{ij} - \bar{y}_{i.}|$

x_i	y_{ij}			$\bar{y}_{i.}$	$\lvert e_{ij}\rvert$		
1	2.4	3.6	2.0	2.67	0.27	0.93	0.67
2	6.8	4.5	4.0	5.10	1.70	0.60	1.10
3	9.4	6.2		7.80	1.60	1.60	
4	11.0	7.8	9.0	9.27	1.73	1.47	0.27
5	7.9	6.5	11.0	8.47	0.57	1.97	2.53

表示 2.1.10



変数変換方法の選択

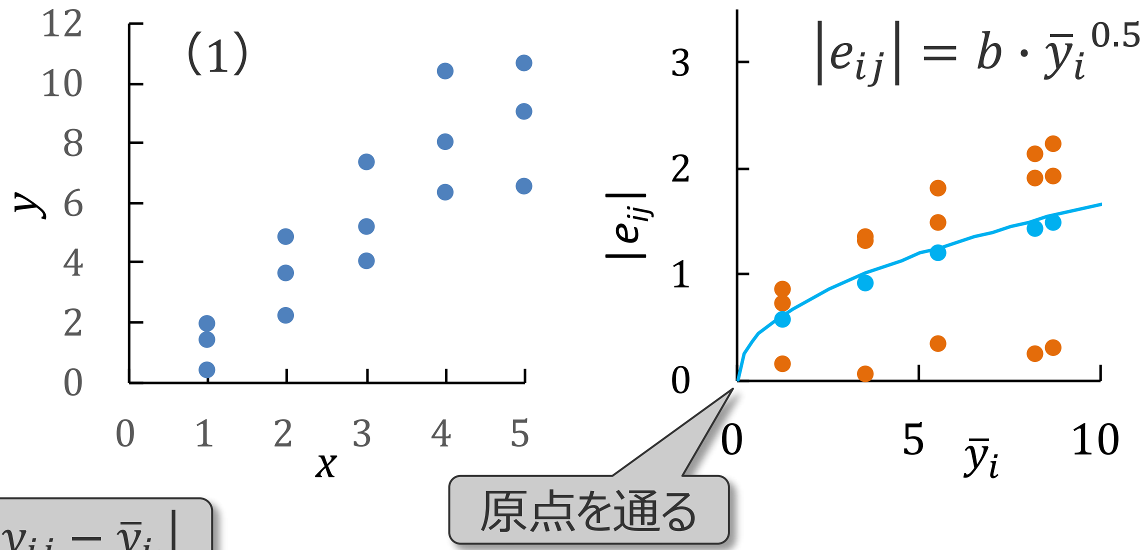
●補足：繰り返し誤差の分布

（1）誤差の分散 σ^2 が μ に比例する場合

x_i	y_{ij}			$\bar{y}_i$	V	$V/\bar{y}_i$	$\lvert e_{ij}\rvert$		
1	1.4	0.4	2.0	1.3	0.630	0.500	0.14	0.85	0.71
2	4.9	3.6	2.2	3.6	1.778	0.500	1.31	0.04	1.35
3	7.3	5.2	4.1	5.5	2.766	0.500	1.80	0.33	1.47
4	10.4	8.0	6.3	8.2	4.120	0.500	2.14	0.24	1.90
5	9.0	6.5	10.6	8.7	4.360	0.500	0.29	2.22	1.93

一定

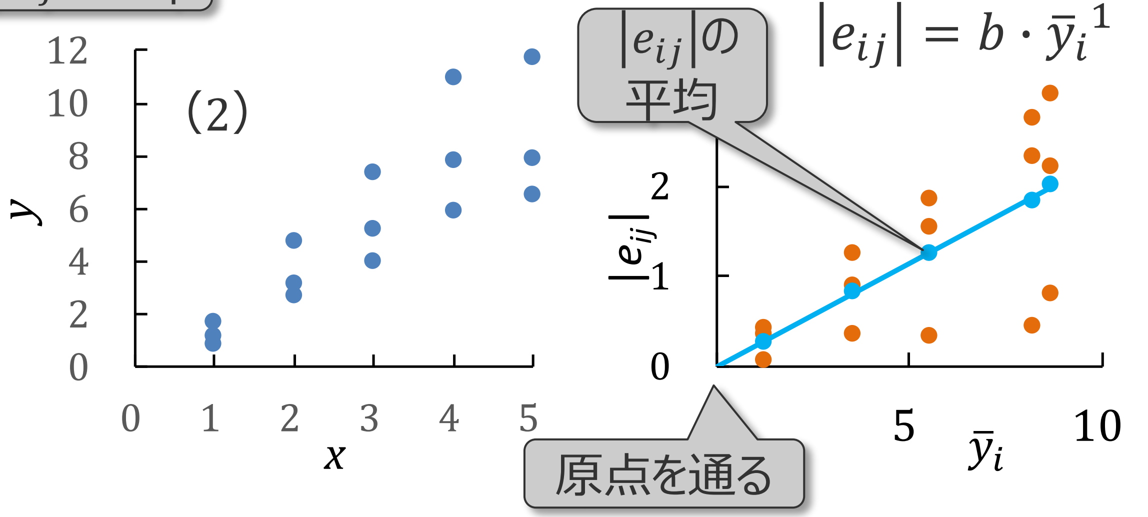
$\lvert e_{ij}\rvert = \lvert y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot}\rvert$



（2）誤差の標準偏差 σ が μ に比例する場合

一定　（等変動係数）

x_i	y_{ij}			$\bar{y}_i$	$s.d.$	CV	$\lvert e_{ij}\rvert$		
1	0.9	1.2	1.7	1.3	0.393	0.312	0.36	0.06	0.42
2	4.8	3.2	2.7	3.6	1.110	0.312	1.24	0.36	0.89
3	7.4	5.2	4.0	5.5	1.726	0.312	1.87	0.33	1.54
4	11.0	7.8	5.9	8.2	2.570	0.312	2.76	0.44	2.32
5	7.9	6.5	11.8	8.7	2.720	0.312	0.82	2.22	3.03



変数変換方法の選択

p.76

●冪数 p の推定

直線と曲線のあてはめ

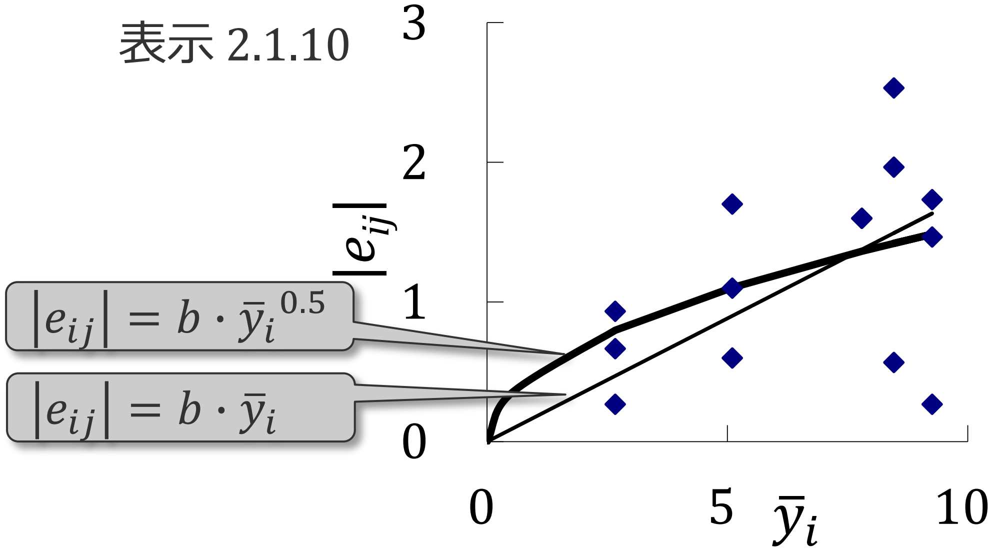
	A	B
1	$y_{i\cdot}$	$\lvert e_{ij}\rvert$
2	2.67	0.27
3	2.67	0.93
4	2.67	0.67
5	5.10	1.70
6	5.10	0.60
7	5.10	1.10
8	7.80	1.60
9	7.80	1.60
10	9.27	1.73
11	9.27	1.47
12	9.27	0.27
13	8.47	0.57
14	8.47	1.97
15	8.47	2.53

表示 2.1.9 データと散布図（改変）

x_i	y_{ij}			$\bar{y}_{i\cdot}$	$\lvert e_{ij}\rvert$		
1	2.4	3.6	2.0	2.67	0.27	0.93	0.67
2	6.8	4.5	4.0	5.10	1.70	0.60	1.10
3	9.4	6.2		7.80	1.60	1.60	
4	11.0	7.8	9.0	9.27	1.73	1.47	0.27
5	7.9	6.5	11.0	8.47	0.57	1.97	2.53

$$|e_{ij}| = b \cdot \bar{y}_{i\cdot}{}^{p} \qquad (2.1.9)$$

このデータの場合
曲線か直線か？
すなわち、p の値は？



表示 2.1.10

変数変換方法の選択

●冪数 p の推定：LINEST 関数での解

	A	B
1	$y_{i\cdot}$	$\lvert e_{ij}\rvert$
2	2.67	0.27
3	2.67	0.93
4	2.67	0.67
5	5.10	1.70
6	5.10	0.60
7	5.10	1.10
8	7.80	1.60
9	7.80	1.60
10	9.27	1.73
11	9.27	1.47
12	9.27	0.27
13	8.47	0.57
14	8.47	1.97
15	8.47	2.53

直線のあてはめ（p=1）

$$\lvert e_{ij}\rvert = b \cdot \bar{y}_i$$

0. 176	0. 000
0. 024	#N/A
0. 805	0. 6348
53. 505	13
21. 561	5. 239

残差平方和

=LINEST(B2:B15, A2:A15, FALSE, TRUE)

原点を通る指定

曲線のあてはめ（p=0.5）

$$\lvert e_{ij}\rvert = b \cdot \bar{y}_i^{\,0.5} = b \cdot \sqrt{\bar{y}_i}$$

0. 488	0. 000
0. 064	#N/A
0. 819	0. 611
58. 795	13
21. 947	4. 853

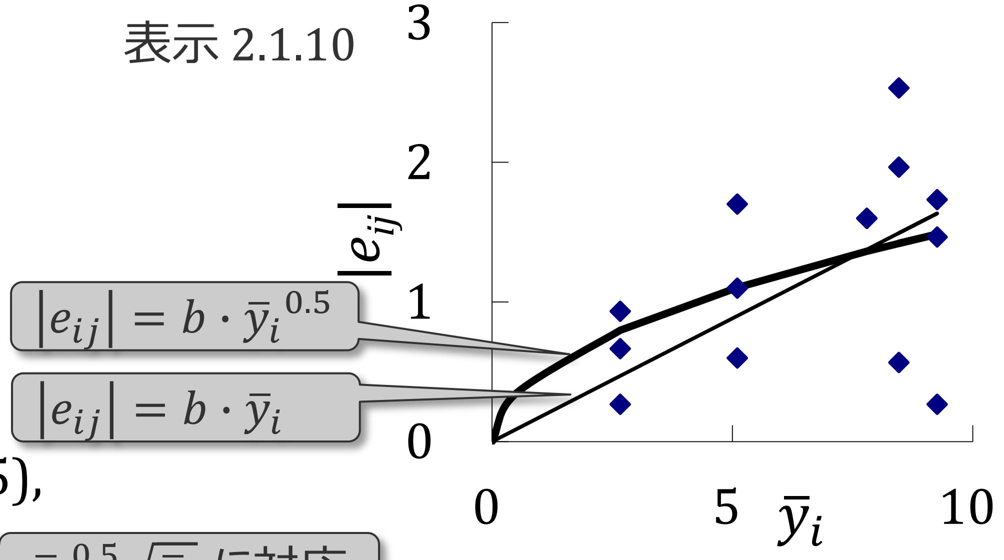
=LINEST(B2:B15, SQRT(A2:A15), FALSE, TRUE)

$\bar{y}_i^{\,0.5}$ $\sqrt{\bar{y}_i}$ に対応

2 つのモデルの残差平方和は
曲線のあてはめの方が小さい
その比は 4.853/5.239 = 0.926
わずか 7.4% 小さくなっただけ

（LINEST 関数 第 1 部 §4.3 参照）

表示 2.1.10



変数変換方法の選択

p.77

●冪数 p の推定： JMP での解

モデルの冪数（べきすう）p をパラメータとして

JMP の［非線形回帰］で解く

$$\left|e_{ij}\right| = b \cdot \bar{y}_i{}^p \quad (2.1.9)$$

●データテーブルの作成

繰り返し誤差 $\left|e_{ij}\right|$ と平均値 $\bar{y}_{i.}$ の列を作る

表示 2.1.9 （一部）

x	y		
1	2.4	3.6	2.0
2	6.8	4.5	4.0
3	9.4	6.2	
4	11.0	7.8	9.0
5	7.9	6.5	11.0

［編集］＞［列名とともにコピー］

	x	y	y 2	y 3
1	1	2.4	3.6	2
2	2	6.8	4.5	4
3	3	9.4	6.2	•
4	4	11	7.8	9
5	5	7.9	6.5	11

最終の形

$\bar{y}_i$　$\left|e_{ij}\right|$

	x	y	ybar	e
1	1	2.4	2.6666(	0.266
2	1	3.6	2.6666(	0.933
3	1	2	2.6666(	0.666
4	2	6.8	5.1	1.7
5	2	4.5	5.1	0.6
6	2	4	5.1	1.1
7	3	9.4	7.8	1.6
8	3	6.2	7.8	1.6
9	4	11	9.2666(	1.733:
10	4	7.8	9.2666(	1.466(
11	4	9	9.2666(	0.266
12	5	7.9	8.4666(	0.566
13	5	6.5	8.4666(	1.966(
14	5	11	8.4666(	2.533

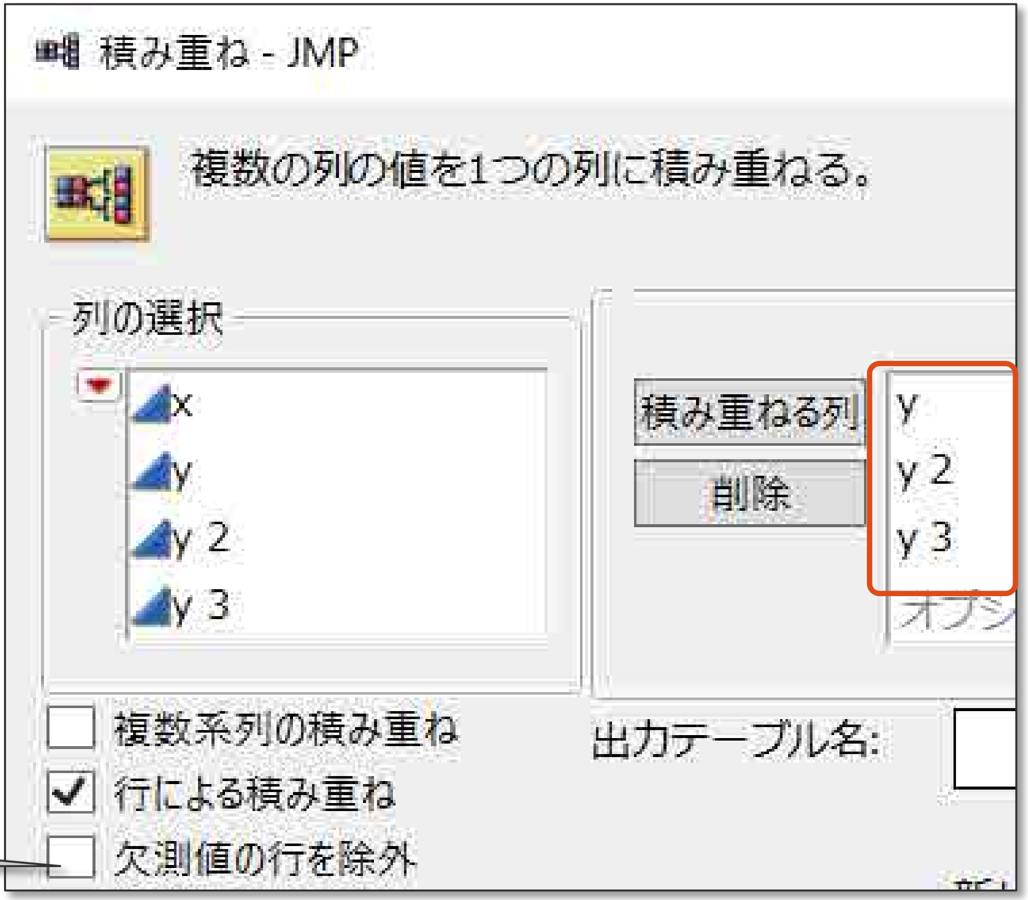
変数変換方法の選択

p.77

●データテーブルの作成

［テーブル］＞［列の積み重ね］

	x	y	y 2	y 3
1	1	2.4	3.6	2
2	2	6.8	4.5	4
3	3	9.4	6.2	•
4	4	11	7.8	9
5	5	7.9	6.5	11



チェック

削除

	x	ラベル	y
1	1	y	2.4
2	1	y 2	3.6
3	1	y 3	2
4	2	y	6.8
5	2	y 2	4.5
6	2	y 3	4
7	3	y	9.4
8	3	y 2	6.2
9	3	y 3	•
10	4	y	11
11	4	y 2	7.8
12	4	y 3	9
13	5	y	7.9
14	5	y 2	6.5
15	5	y 3	11

削除

変数変換方法の選択

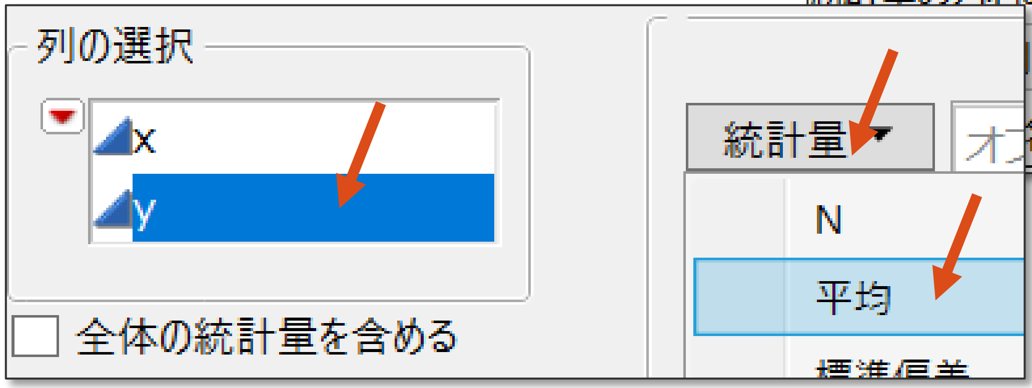
p.77

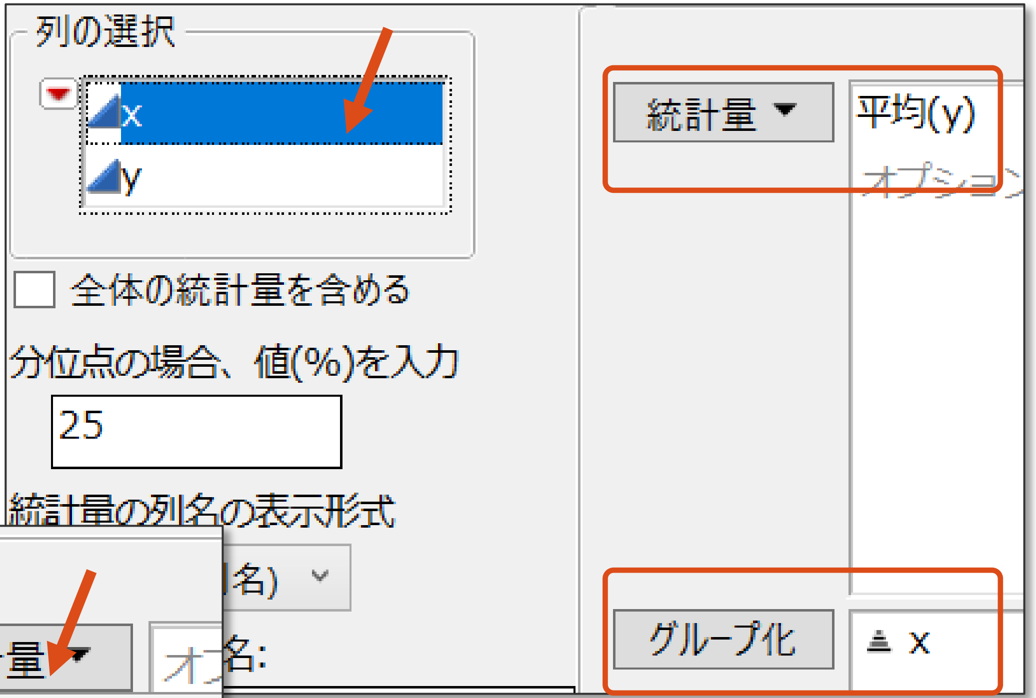
●データテーブルの作成

	x	y
1	1	2.4
2	1	3.6
3	1	2
4	2	6.8
5	2	4.5
6	2	4
7	3	9.4
8	3	6.2
9	4	11
10	4	7.8
11	4	9
12	5	7.9
13	5	6.5
14	5	11

x の水準ごとに、 y の平均の列を作成

［テーブル］ > ［要約］





変数変換方法の選択

●データテーブルの作成　x ごとの y の平均の列を作成

新規のテーブル

	x	行数	平均(y)
1	1	3	2.66666(
2	2	3	5.1
3	3	2	7.8
4	4	3	9.26666(
5	5	3	8.46666(

「無題２の要約(x)」

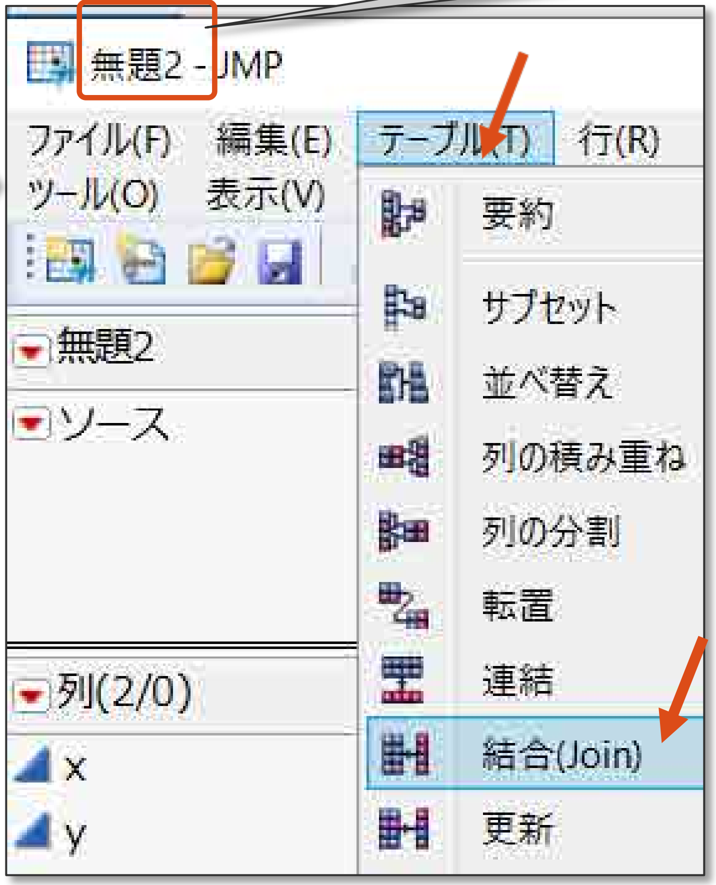
元のテーブル

	x	y
1	1	2.4
2	1	3.6
3	1	2
4	2	6.8
5	2	4.5
6	2	4
7	3	9.4
8	3	6.2
9	4	11
10	4	7.8
11	4	9
12	5	7.9
13	5	6.5
14	5	11

「無題２」

［テーブル］＞［結合］

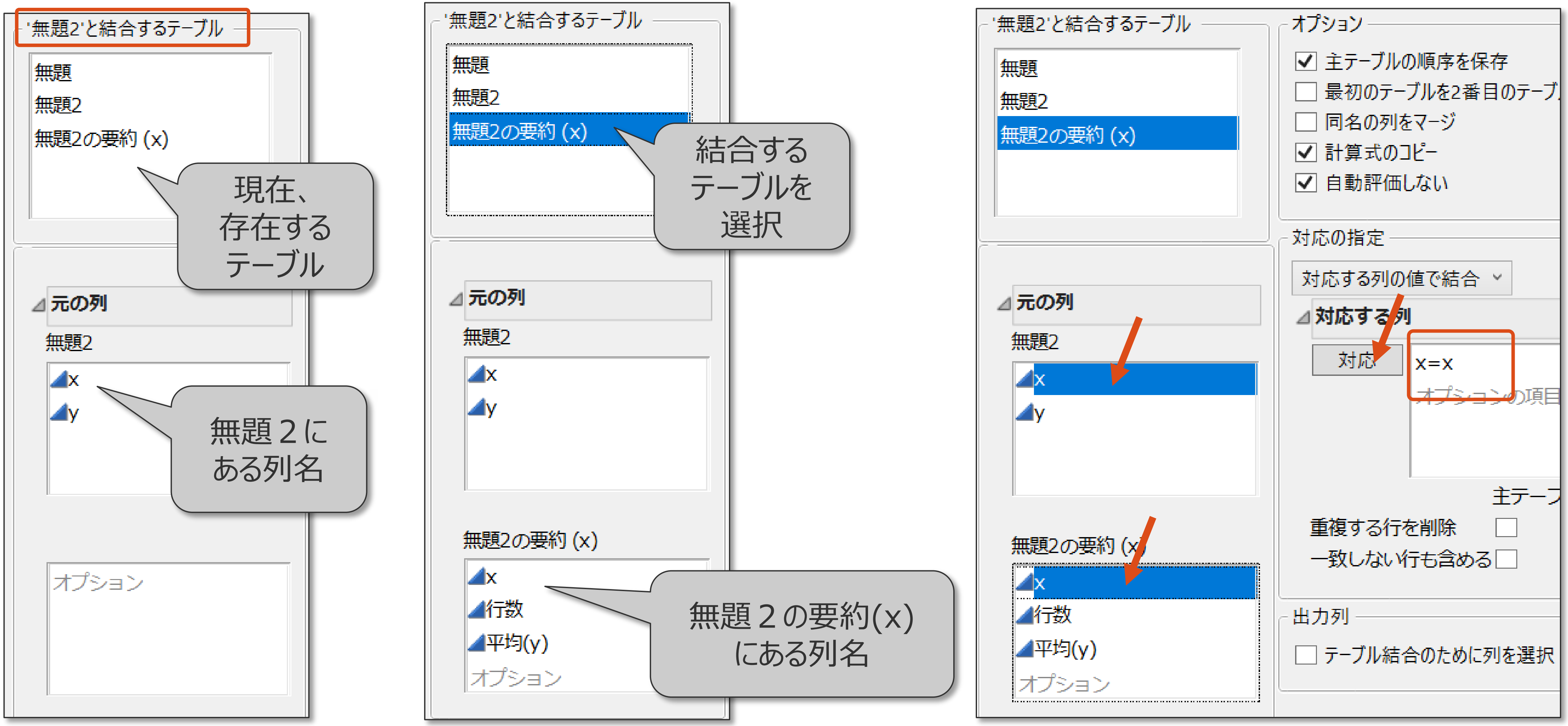
元のテーブル
「無題２」



x の値に関連付けて、
元のテーブルに
新規のテーブルを
結合する

変数変換方法の選択

p.77



変数変換方法の選択

●データテーブルの作成

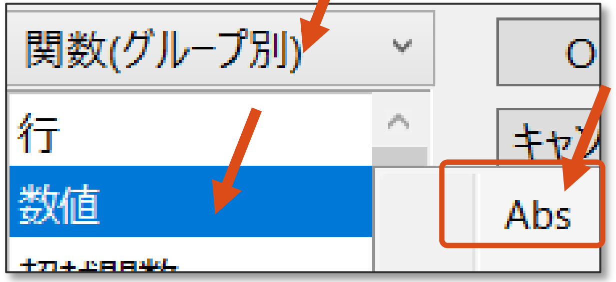
削除

	無題2のx	y	無題2の要約(x)のx	行数	平均(y)
1	1	2.4	1	3	2.66666(
2	1	3.6	1	3	2.66666(
3	1	2	1	3	2.66666(
4	2	6.8	2	3	5.1
5	2	4.5	2	3	5.1
6	2	4	2	3	5.1
7	3	9.4	3	2	7.8
8	3	6.2	3	2	7.8
9	4	11	4	3	9.26666(
10	4	7.8	4	3	9.26666(
11	4	9	4	3	9.26666(
12	5	7.9	5	3	8.46666(
13	5	6.5	5	3	8.46666(
14	5	11	5	3	8.46666(

	x	y	ybar	e
1	1	2.4	2.6666(	0.266
2	1	3.6	2.6666(	0.933
3	1	2	2.6666(	0.666
4	2	6.8	5.1	1.7
5	2	4.5	5.1	0.6
6	2	4	5.1	1.1
7	3	9.4	7.8	1.6
8	3	6.2	7.8	1.6
9	4	11	9.2666(	1.733
10	4	7.8	9.2666(	1.466(
11	4	9	9.2666(	0.266
12	5	7.9	8.4666(	0.566
13	5	6.5	8.4666(	1.966(
14	5	11	8.4666(	2.533

$|y - ybar|$

Abs(y－ybar)



変数変換方法の選択

p.77

●冪数 p の推定：JMP［非線形回帰］

	x	y	ybar	e	ehat
1	1	2.4	2.6666(	0.266	0.3265
2	1	3.6	2.6666(	0.933	0.3265
3	1	2	2.6666(	0.666	0.3265
4	2	6.8	5.1	1.7	0.4516(
5	2	4.5	5.1	0.6	0.4516(
6	2	4	5.1	1.1	0.4516(
7	3	9.4	7.8	1.6	0.5585
8	3	6.2	7.8	1.6	0.5585
9	4	11	9.2666(	1.733:	0.6088
10	4	7.8	9.2666(	1.466(	0.6088
11	4	9	9.2666(	0.266	0.6088
12	5	7.9	8.4666(	0.566	0.5819:
13	5	6.5	8.4666(	1.966(	0.5819:
14	5	11	8.4666(	2.533	0.5819:

b * ybar p

（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
§1.2 参照

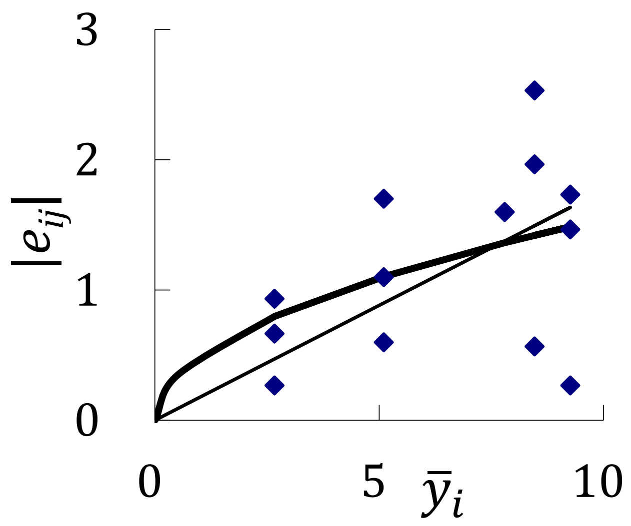
モデル式

$$\left|e_{ij}\right| = b \cdot \bar{y}_i{}^p \qquad (2.1.9)$$

初期値

$$b = 1/5 = 0.2$$
$$p = 0.5$$

表示 2.1.10

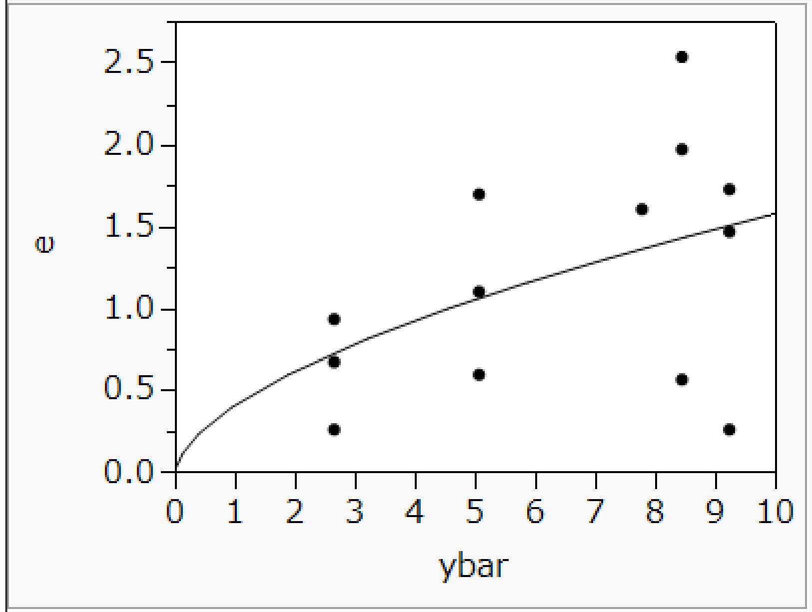


変数変換方法の選択

●冪数 p の推定：JMP［非線形回帰］

モデル　$|e_{ij}| = b \cdot \bar{y}_i^{\,0.5}$　(2.1.9)

プロット



パラメータ	推定値	最小値	最大値
b	0.4188621847	0.1	0.5
p	0.5777349589	0.25	0.75

LINEST 関数による回帰分析（p = 0.5）の結果

0. 488	0. 000
0. 064	#N/A
0. 819	0. 611
58. 795	13
21. 947	4. 853

この程度の繰り返し数のデータからはモデルを確定することはできない

p=1 も p=0.5 も信頼限界の中に含まれる

表示 2.1.11　冪数 p の推定

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
4.8340678702	12	0.402839	0.634696

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
b	0.4188621847	0.32916614	0.03670836	1.50198104
p	0.5777349589	0.39004834	-0.1041391	1.72382438

解法: 解析 Gauss-Newton

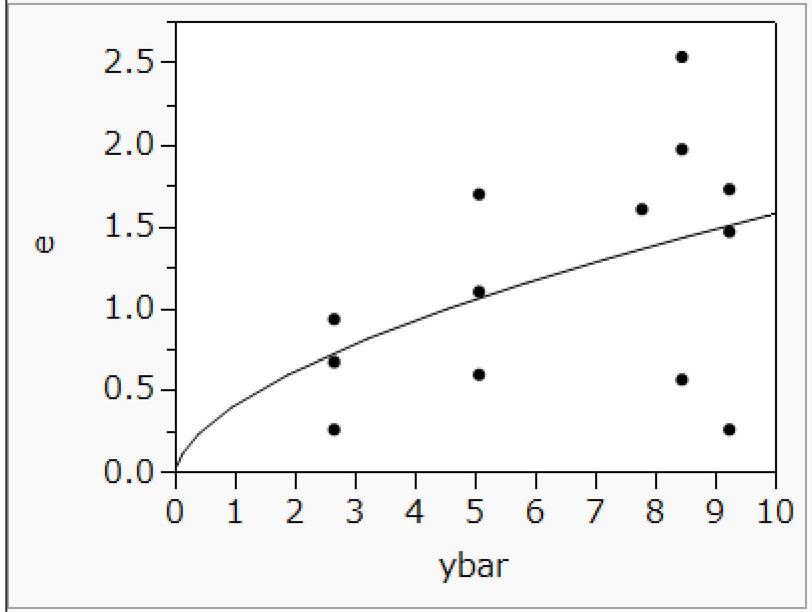
変数変換方法の選択

p.77

●冪数 p の推定：JMP［非線形回帰］

モデル　$|e_{ij}| = b \cdot \bar{y}_i^{\,0.5}$　(2.1.9)

プロット



パラメータ	推定値	最小値	最大値
b	0.4188621847	0.1	0.5
p	0.5777349589	0.25	0.75

誤差のモデルの解を最小2 乗法を使って解析
最小2 乗法の前提（等分散性、正規性）は成立しない
従って，ここに得られた解は目安に過ぎない

繰り返し数が少ない場合は p の推定誤差が大きい
1 回の実験でモデルを決定することは難しい
何回かの経験を経て、複数の解析結果を総合的に判断

表示 2.1.11　冪数 p の推定

解

SSE	DFE	MSE	RMSE
4.8340678702	12	0.402839	0.634696

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
b	0.4188621847	0.32916614	0.03670836	1.50198104
p	0.5777349589	0.39004834	-0.1041391	1.72382438

解法: 解析 Gauss-Newton

まとめ

p.77

●誤差を考慮した解析：等分散性

線形モデルを最小２乗法で解析する場合、
非線形モデルを非線形最小２乗法で解析する場合、いずれも等分散性の仮定が必要とされる

この仮定が成立しない場合に変数変換を考える

繰り返し誤差の算出（標準偏差、分散）、期待値と繰り返し誤差の散布図を作成

誤差の標準偏差がyの期待値に比例する（等変動係数）場合の対応・・・対数変換
誤差の分散がyの期待値に比例する場合の対応・・・・・・・・・・・・・平方根変換

- 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2月5日、2022年6月6日
  2023年2月5日