

## じっくり勉強すれば身につく統計入門

2016 年 6 月 4 日 森戸記念館

「「じっくり勉強すれば身につく統計解析」を副題としたシリーズ全 3 巻がサイエンティスト社から刊行されている。タイトルは「医薬品開発のための統計解析，第 1 部基礎，第 2 部実験計画法，第 3 部非線形モデル」である。今回は，この本の第 2 部 2.3 節のダミー変数の使い方についてその基礎について解説し，各種の統計モデルの活用力をつけてもらいたい。また，第 3 部のテーマである「非線形回帰モデル」の最初の応用例である「逆推定」についてもじっくりと解説する

### ダミー変数の基礎

伏見 啓（一般財団法人日本食品分析センター）

- 第 2 部 実験計画法-
- 2 章 3 節 ダミー変数による質的因子の効果の推定

### 非線形回帰を用いた逆推定の基礎

中西 展大（田辺三菱製薬株式会社）

- 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

じっくり勉強すれば身につく統計入門  
ダミー変数による質的因子の効果の推定  
第2部 実験計画法  
2.3 ダミー変数による質的因子の効果の推定

(一財)日本食品分析センター  
安全性試験課 伏見啓

1

## はじめに

「じっくり勉強すれば身につく統計入門」の発表も12 回目となりました。  
なお、過去の発表資料はサイエントリスト社のホームページで公開されています。  
[http://www.scientist-press.com/12\\_280.html](http://www.scientist-press.com/12_280.html)

今回は、  
医薬品開発のための統計解析  
-第2部 実験計画法- 2章3節  
ダミー変数による質的因子の効果の推定

演習ファイルの入手先  
[http://www.scientist-press.com/11\\_328.html](http://www.scientist-press.com/11_328.html)



通称: グリーン本

2

# 目標

- 回帰式を用いた質的因子の効果の推定  
これには**ダミー変数**が必要
- **ダミー変数の基本的な作成方法を理解する**

$$y_{ij} = \mu + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_5 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

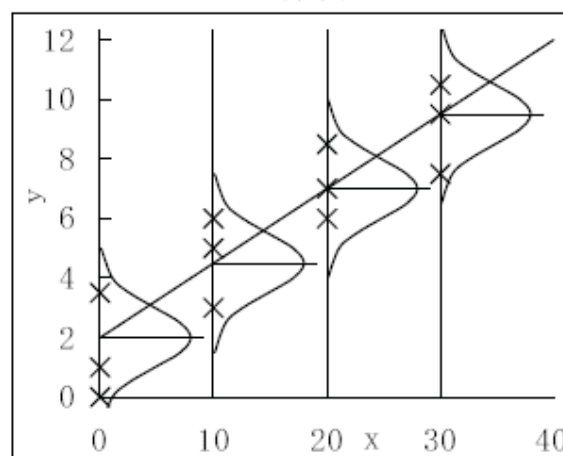
3

# 目的

<量的因子の場合>

x と y の関係を回帰式で表わす (LINEST 関数で推定)

量的因子



$$y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_{ij}$$

4

# 目的

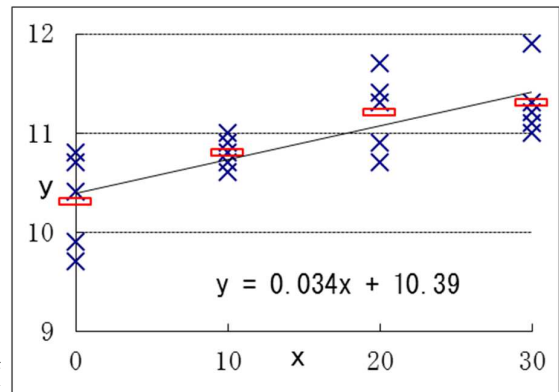
## <量的因子の場合>

x と y の関係を回帰式で表わす (LINEST 関数で推定)

LINEST 関数による解析例

水準	1	2	3	4	5
0	10.8	9.9	9.7	10.4	10.7
10	10.7	10.6	11.0	10.8	10.9
20	11.4	10.7	10.9	11.3	11.7
30	11.9	11.2	11.0	11.1	11.3

	x	const	
回帰係数	0.034	10.390	
その標準誤差	0.007	0.136	
寄与率	0.547	0.364	標準偏差
F 比	21.766	18	残差自由度
回帰平方和	2.890	2.390	残差平方和
t 値	4.665	76.206	
p 値	0.0002	0.0000	



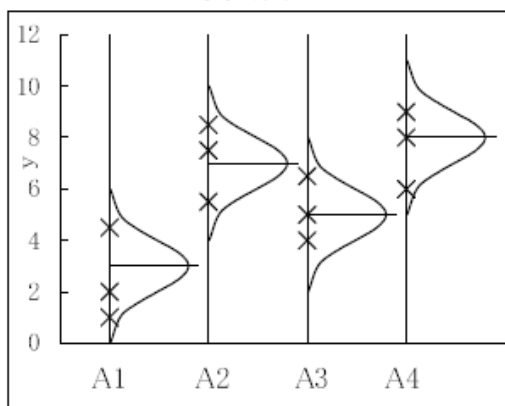
5

# 目的

## <質的因子の場合>

同様に各水準の効果  $\alpha_i$  を回帰式で表わし、  
LINEST 関数で推定したい。

質的因子

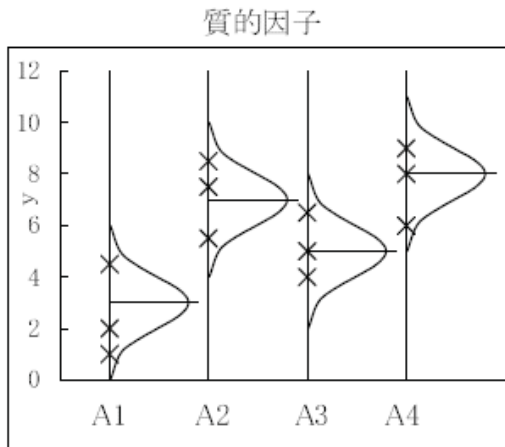


## ダミー変数

- 複雑なデータの解析に広く利用することができる

6

# 質的因子について



○水準番号1,2,... は序数(1st, 2nd, ...)

- 量を表わすものではない
- そのまま回帰分析を適用することはできない.

○1 因子実験(質的因子)では,  
データ $y_{ij}$ の構造を以下のように表せる

$$\begin{aligned} y_{ij} &= \mu_i + \varepsilon_{ij} \\ &= \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij} \end{aligned}$$

基準+効果+誤差

7

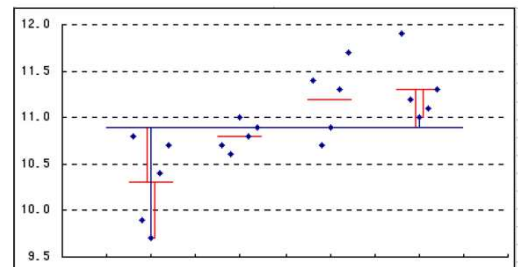
## 質的因子の解析

$$\begin{aligned} y_{ij} &= \mu_i + \varepsilon_{ij} \\ &= \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij} \end{aligned}$$

基準+効果+誤差

解を一意に定めるため

$$\sum_{i=1}^a n_i \alpha_i = 0 \quad \alpha_i = \mu_i - \mu$$



基準 $\mu$ は総平均と一致

水準間平方和 $S_A$  が $\alpha_i$ の推定値 $a_i$ の2乗和で表わされる  
→分散分析表を用いた解析

この式だと複雑なモデルへ拡張が困難

8

# ダミー変数1(1, 0)型

## <目的>

第1水準のコントロールと他の水準を比べて  
どれだけ違うか？

## <考え方>

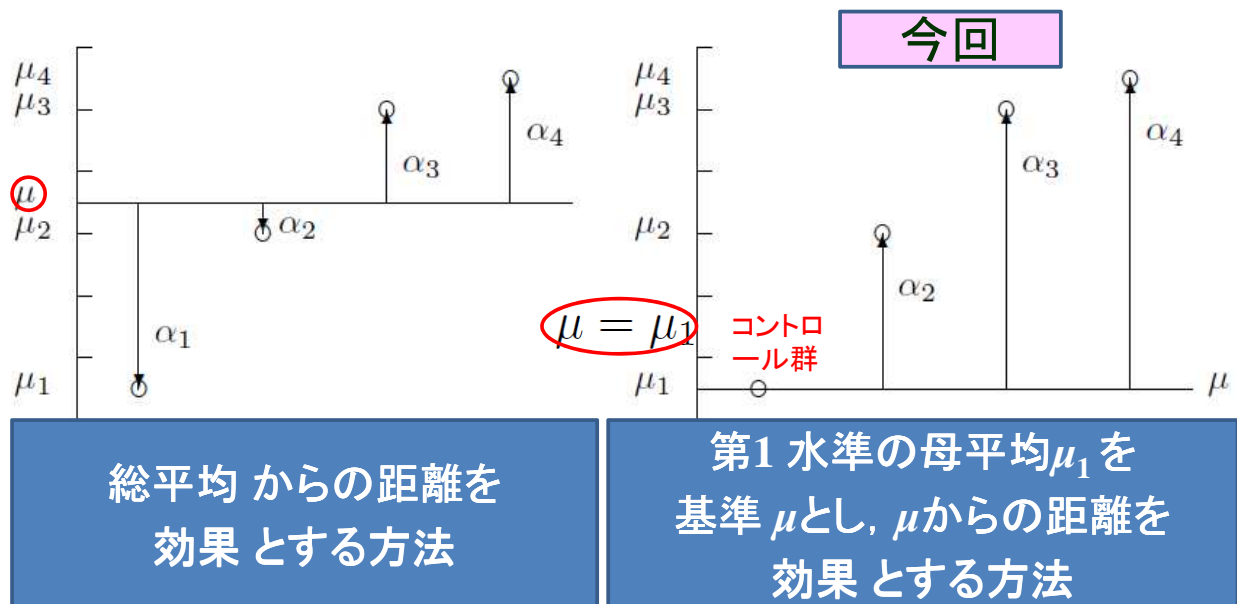
コントロールの平均を基準とし各水準の効果を評価し  
てみる.

以下のデータを例として利用

データ									
水準	n	平均	1	2	3	4	5	6	
A1	6	46.0	43	45	42	47	49	50	
A2	3	49.0	47	51	49				
A3	3	53.0	54	48	57				
A4	3	58.0	55	58	61				
A5	3	51.0	52	48	53				

9

# ダミー変数1(1, 0)型



$$\sum_{i=1}^a n_i \alpha_i = 0$$

基準 = 総平均

$$\alpha_i = \mu_i - \mu$$

$$\mu = \mu_1$$

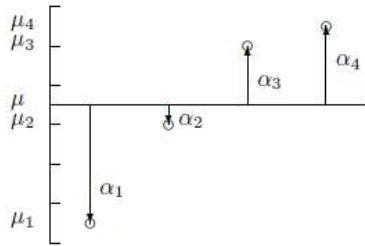
基準 = 母平均 $\mu_1$

$$\alpha_i = \mu_i - \mu_1 \quad \text{効果}$$

$i=1$  のとき

$$\alpha_1 = \mu_1 - \mu_1 = 0 \quad \alpha_1 = 0 \quad 10$$

# モデル式でみる

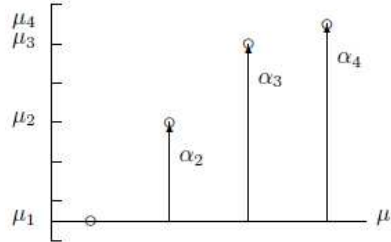


$$y_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij}$$

$$= \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}$$

総平均 + 効果 + 誤差

今回



$$y_{ij} = \mu + \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \\ \alpha_a \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

$$\mu = \mu_1$$

行の対応を示す:  
A1の効果

コントロール群A1

水準ごとに分ける

$$= \mu + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + \alpha_a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_a \end{pmatrix}$$

$\alpha_i$ を推定するため  
説明変数を設定する  
式で表わす必要  
があるため。

11

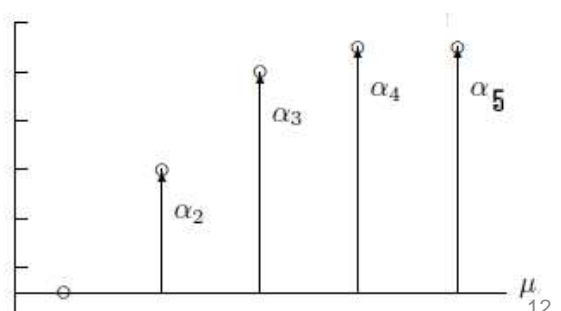
例

データ									
水準	n	平均	1	2	3	4	5	6	
A1	6	46.0	43	45	42	47	49	50	
A2	3	49.0	47	51	49				
A3	3	53.0	54	48	57				
A4	3	58.0	55	58	61				
A5	3	51.0	52	48	53				

$$= \mu + \alpha_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_5 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \end{pmatrix}$$

$$= \mu + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_5 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

$$\mu = \mu_1$$



12

# ダミー変数

$$\mu = \mu_1$$

$$= \mu + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + \alpha_a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_a \end{pmatrix}$$

ダミー変数

ダミー変数

例

$$y_{ij} = \mu + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_5 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

- ✓ ダミー変数は「水準数 - 1」個
- ✓ 水準が2, 3, ..., a のとき1 となりそれ以外は0
- ✓ 基準となった第1水準は全部のダミー変数の値が0

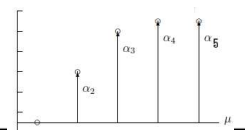
13

## ダミー変数：具体例（ダミー変数1）

水準	n	平均	1	2	3	4	5	6
A1	6	46.0	43	45	42	47	49	50
A2	3	49.0	47	51	49			
A3	3	53.0	54	48	57			
A4	3	58.0	55	58	61			
A5	3	51.0	52	48	53			

$$y_{ij} = \mu + \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \\ \alpha_a \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

$$\mu = \mu_1$$



$y_{11}$	43	$\mu$	$+\varepsilon_{11}$	$(\mu)$	$(0)$	$(0)$	$(0)$	$(0)$	$(\varepsilon_{11})$	$(\mu)$	$(0)$	$(0)$	$(0)$	$(0)$	$(\varepsilon_{11})$
$y_{12}$	45	$\mu$	$+\varepsilon_{12}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{12}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{12}$
$y_{13}$	42	$\mu$	$+\varepsilon_{13}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{13}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{13}$
$y_{14}$	47	$\mu$	$+\varepsilon_{14}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{14}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{14}$
$y_{15}$	49	$\mu$	$+\varepsilon_{15}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{15}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{15}$
$y_{16}$	50	$\mu$	$+\varepsilon_{16}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{16}$	$\mu$	0	0	0	0	$\varepsilon_{16}$
$y_{21}$	47	$\mu + \alpha_2$	$+\varepsilon_{21}$	$\mu$	$\alpha_2$	0	0	0	$\varepsilon_{21}$	$\mu$	1	0	0	0	$\varepsilon_{21}$
$y_{22}$	51	$\mu + \alpha_2$	$+\varepsilon_{22}$	$\mu$	$\alpha_2$	0	0	0	$\varepsilon_{22}$	$\mu$	1	0	0	0	$\varepsilon_{22}$
$y_{23}$	49	$\mu + \alpha_2$	$+\varepsilon_{23}$	$\mu$	$\alpha_2$	0	0	0	$\varepsilon_{23}$	$\mu$	1	0	0	0	$\varepsilon_{23}$
$y_{31}$	54	$\mu + \alpha_3$	$+\varepsilon_{31}$	$\mu$	0	$\alpha_3$	0	0	$\varepsilon_{31}$	$\mu$	0	1	0	0	$\varepsilon_{31}$
$y_{32}$	48	$\mu + \alpha_3$	$+\varepsilon_{32}$	$\mu$	0	$\alpha_3$	0	0	$\varepsilon_{32}$	$\mu$	0	1	0	0	$\varepsilon_{32}$
$y_{33}$	57	$\mu + \alpha_3$	$+\varepsilon_{33}$	$\mu$	0	$\alpha_3$	0	0	$\varepsilon_{33}$	$\mu$	0	1	0	0	$\varepsilon_{33}$
$y_{41}$	55	$\mu + \alpha_4$	$+\varepsilon_{41}$	$\mu$	0	0	$\alpha_4$	0	$\varepsilon_{41}$	$\mu$	0	0	1	0	$\varepsilon_{41}$
$y_{42}$	58	$\mu + \alpha_4$	$+\varepsilon_{42}$	$\mu$	0	0	$\alpha_4$	0	$\varepsilon_{42}$	$\mu$	0	0	1	0	$\varepsilon_{42}$
$y_{43}$	61	$\mu + \alpha_4$	$+\varepsilon_{43}$	$\mu$	0	0	$\alpha_4$	0	$\varepsilon_{43}$	$\mu$	0	0	1	0	$\varepsilon_{43}$
$y_{51}$	52	$\mu + \alpha_5$	$+\varepsilon_{51}$	$\mu$	0	0	0	$\alpha_5$	$\varepsilon_{51}$	$\mu$	0	0	0	1	$\varepsilon_{51}$
$y_{52}$	48	$\mu + \alpha_5$	$+\varepsilon_{52}$	$\mu$	0	0	0	$\alpha_5$	$\varepsilon_{52}$	$\mu$	0	0	0	1	$\varepsilon_{52}$
$y_{53}$	53	$\mu + \alpha_5$	$+\varepsilon_{53}$	$\mu$	0	0	0	$\alpha_5$	$\varepsilon_{53}$	$\mu$	0	0	0	1	$\varepsilon_{53}$

14



## 表示2.3.2

$\mu = \mu_1$

$$\begin{pmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{14} \\ y_{15} \\ y_{16} \\ y_{21} \\ y_{22} \\ y_{23} \\ y_{31} \\ y_{32} \\ y_{33} \\ y_{41} \\ y_{42} \\ y_{43} \\ y_{51} \\ y_{52} \\ y_{53} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 43 \\ 45 \\ 42 \\ 47 \\ 49 \\ 50 \\ 47 \\ 51 \\ 49 \\ 54 \\ 48 \\ 58 \\ 55 \\ 58 \\ 61 \\ 52 \\ 48 \\ 53 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{14} \\ \varepsilon_{15} \\ \varepsilon_{16} \\ \varepsilon_{21} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{32} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{41} \\ \varepsilon_{42} \\ \varepsilon_{43} \\ \varepsilon_{51} \\ \varepsilon_{52} \\ \varepsilon_{53} \end{pmatrix}$$

→

水準	y	ダミー変数1			
		A2	A3	A4	A5
A1	43	0	0	0	0
A1	45	0	0	0	0
A1	42	0	0	0	0
A1	47	0	0	0	0
A1	49	0	0	0	0
A1	50	0	0	0	0
A2	47	1	0	0	0
A2	51	1	0	0	0
A2	49	1	0	0	0
A3	54	0	1	0	0
A3	48	0	1	0	0
A3	57	0	1	0	0
A4	55	0	0	1	0
A4	58	0	0	1	0
A4	61	0	0	1	0
A5	52	0	0	0	1
A5	48	0	0	0	1
A5	53	0	0	0	1

15

## LINEST 関数で利用すると...

$\mu$ の推定値=第1水準の平均

$\alpha_i$ : 第2, 3, 4水準の平均が第1水準からどれだけ異なるか

	A5	A4	A3	A2	const
推定値	5.000	12.000	7.000	3.000	46.000
標準誤差	2.270	2.270	2.270	2.270	1.311
寄与率	0.703	3.211	標準偏差	#N/A	#N/A
F比	7.676	13	残差自由度	#N/A	#N/A
回帰平方和	316.50	134.00	残差平方和	#N/A	#N/A
t	2.202	5.286	3.083	1.321	
p	0.046	0.000	0.009	0.209	

## 平均と比較

水準	n	平均	1	2	3	4	5	6
A1	6	46.0	43	45	42	47	49	50
A2	3	49.0	47	51	49			
A3	3	53.0	54	48	57			
A4	3	58.0	55	58	61			
A5	3	51.0	52	48	53			

各水準の平均  
=const+効果

分散分析表の値も一致

分散分析表					
要因	平方和	自由度	平均平方	F比	p値
水準間	316.50	4	79.125	7.676	0.0021
残差	134.00	13	10.308	1.000	
全体	450.50	17	26.500		

16

	A5	A4	A3	A2	const
推定値	5.000	12.000	7.000	3.000	46.000
標準誤差	2.270	2.270	2.270	2.270	1.311
	0.703	3.211	#N/A	#N/A	#N/A
	7.676	13	#N/A	#N/A	#N/A
	316.50	134.00	#N/A	#N/A	#N/A
t	2.202	5.286	3.083	1.321	
p	0.046	0.000	0.009	0.209	

2行目の推定値のSEからt 値, p値を求めることができる

分散分析表からの計算値

				t(0.05)	2.160
水準		差	標準誤差	t 値	p 値
A1	A2	-3.00	2.270	-1.321	0.209
A1	A3	-7.00	2.270	-3.083	0.009
A1	A4	-12.00	2.270	-5.286	0.000
A1	A5	-5.00	2.270	-2.202	0.046
A2	A3	-4.00	2.621	-1.526	0.151
A2	A4	-9.00	2.621	-3.433	0.004
A2	A5	-2.00	2.621	-0.763	0.459
A3	A4	-5.00	2.621	-1.907	0.079
A3	A5	2.00	2.621	0.763	0.459
A4	A5	7.00	2.621	2.670	0.019

推定値, t 値とp 値は一致

ダミー変数を上手く作成すると結果をみてすぐコントロールとの差がわかる

17

## ダミー変数: 具体例 (ダミー変数2)

JMPは  $\sum_{i=1}^a \alpha_i = 0$  という性質を持つ

この条件を満たすために  $\alpha_a$  は

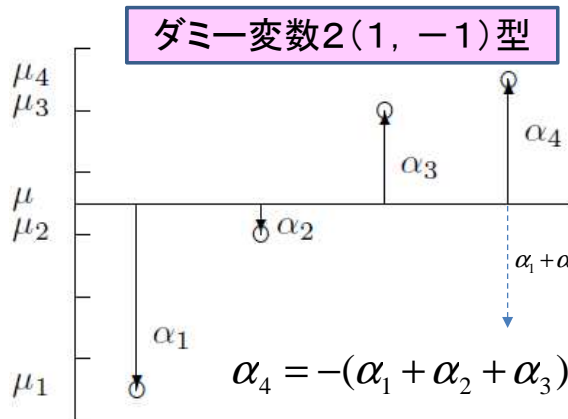
$$\alpha_a = -\sum_{i=1}^{a-1} \alpha_i = -\alpha_1 - \alpha_2 \cdots - \alpha_{a-1}$$

とならなくてははいけない。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^a \alpha_i &= \alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_{a-1} + \alpha_a = 0 \\ \alpha_a &= -\alpha_1 - \alpha_2 - \cdots - \alpha_{a-1} \\ &= -(\alpha_1 + \cdots + \alpha_{a-1}) = -\sum_{i=1}^{a-1} \alpha_i \end{aligned}$$

18

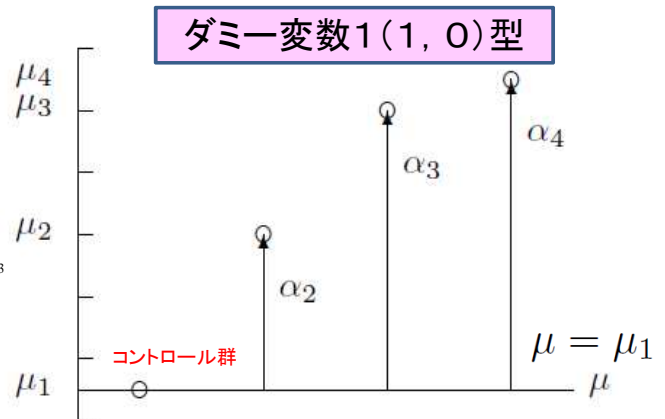
# ダミー変数2(1, -1)型



全水準の効果の推定値の和を0とする方法

$$\sum_{i=1}^a \alpha_i = 0$$

$$\alpha_i = \mu_i - \mu$$



第1水準の母平均 $\mu_1$ を基準 $\mu$ とし、 $\mu$ からの距離を効果とする方法

$$\mu = \mu_1 \quad \text{基準} = \text{母平均} \mu_1$$

$$\alpha_i = \mu_i - \mu_1 \quad \text{効果}$$

$i = 1$  のとき

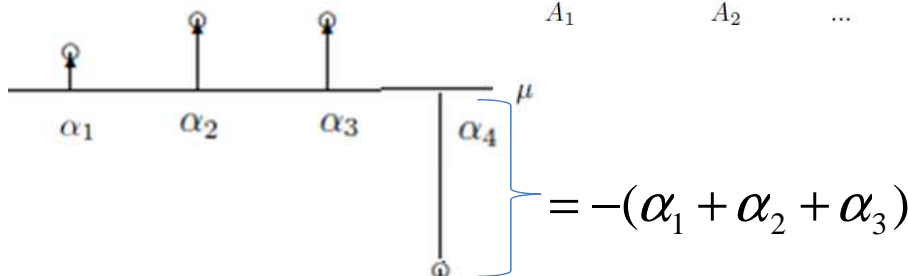
$$\alpha_1 = \mu_1 - \mu_1 = 0 \quad \alpha_1 = 0 \quad 19$$

第 $a$ の効果:  $\alpha_a = -\sum_{i=1}^{a-1} \alpha_i = -\alpha_1 - \alpha_2 - \dots - \alpha_{a-1}$

$$y_{ij} = \mu + \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \dots + \alpha_{a-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \dots \\ A_{a-1} \\ A_a \end{pmatrix}$$

$A_1 \quad A_2 \quad \dots \quad A_{a-1}$

例



$$= \mu + \begin{pmatrix} \alpha_1 & & \\ & \alpha_2 & \\ & & \alpha_3 \\ -\alpha_1 & -\alpha_2 & -\alpha_3 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij} = \mu + \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

$$y_{ij} = \mu + \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \dots + \alpha_{a-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \dots \\ A_{a-1} \\ A_a \end{pmatrix}$$

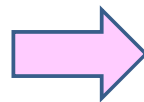
$$\alpha_a = -\sum_{i=1}^{a-1} \alpha_i = -\alpha_1 - \alpha_2 - \dots - \alpha_{a-1}$$

下の例では第5水準  
を上の式の $\alpha$ とする

$y_{11}$	43	$\mu + \alpha_1$	$+\varepsilon_{11}$	$\begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{14} \\ \varepsilon_{15} \end{pmatrix}$
$y_{12}$	45	$\mu + \alpha_1$	$+\varepsilon_{12}$	$\mu$	$\alpha_1$	0	$\varepsilon_{12}$
$y_{13}$	42	$\mu + \alpha_1$	$+\varepsilon_{13}$	$\mu$	$\alpha_1$	0	$\varepsilon_{13}$
$y_{14}$	47	$\mu + \alpha_1$	$+\varepsilon_{14}$	$\mu$	$\alpha_1$	0	$\varepsilon_{14}$
$y_{15}$	49	$\mu + \alpha_1$	$+\varepsilon_{15}$	$\mu$	$\alpha_1$	0	$\varepsilon_{15}$
$y_{16}$	50	$\mu + \alpha_1$	$+\varepsilon_{16}$	$\mu$	$\alpha_1$	0	$\varepsilon_{16}$
$y_{21}$	47	$\mu + \alpha_2$	$+\varepsilon_{21}$	$\mu$	0	$\alpha_2$	$\varepsilon_{21}$
$y_{22}$	51	$\mu + \alpha_2$	$+\varepsilon_{22}$	$\mu$	0	$\alpha_2$	$\varepsilon_{22}$
$y_{23}$	49	$\mu + \alpha_2$	$+\varepsilon_{23}$	$\mu$	0	$\alpha_2$	$\varepsilon_{23}$
$y_{31}$	54	$\mu + \alpha_3$	$+\varepsilon_{31}$	$\mu$	0	0	$\varepsilon_{31}$
$y_{32}$	48	$\mu + \alpha_3$	$+\varepsilon_{32}$	$\mu$	0	0	$\varepsilon_{32}$
$y_{33}$	58	$\mu + \alpha_3$	$+\varepsilon_{33}$	$\mu$	0	0	$\varepsilon_{33}$
$y_{41}$	55	$\mu + \alpha_4$	$+\varepsilon_{41}$	$\mu$	0	0	$\varepsilon_{41}$
$y_{42}$	58	$\mu + \alpha_4$	$+\varepsilon_{42}$	$\mu$	0	0	$\varepsilon_{42}$
$y_{43}$	61	$\mu + \alpha_4$	$+\varepsilon_{43}$	$\mu$	0	0	$\varepsilon_{43}$
$y_{51}$	52	$\mu - \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4$	$+\varepsilon_{51}$	$\mu$	$-\alpha_1$	$-\alpha_2$	$\varepsilon_{51}$
$y_{52}$	48	$\mu - \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4$	$+\varepsilon_{52}$	$\mu$	$-\alpha_1$	$-\alpha_2$	$\varepsilon_{52}$
$y_{53}$	53	$\mu - \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4$	$+\varepsilon_{53}$	$\mu$	$-\alpha_1$	$-\alpha_2$	$\varepsilon_{53}$

21

$$= \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \end{pmatrix} + \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{14} \\ \varepsilon_{15} \\ \varepsilon_{16} \\ \varepsilon_{21} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{32} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{41} \\ \varepsilon_{42} \\ \varepsilon_{43} \\ \varepsilon_{51} \\ \varepsilon_{52} \\ \varepsilon_{53} \end{pmatrix}$$



水準	y	仮変数2			
		A1	A2	A3	A4
A1	43	1	0	0	0
A1	45	1	0	0	0
A1	42	1	0	0	0
A1	47	1	0	0	0
A1	49	1	0	0	0
A1	50	1	0	0	0
A2	47	0	1	0	0
A2	51	0	1	0	0
A2	49	0	1	0	0
A3	54	0	0	1	0
A3	48	0	0	1	0
A3	57	0	0	1	0
A4	55	0	0	0	1
A4	58	0	0	0	1
A4	61	0	0	0	1
A5	52	-1	-1	-1	-1
A5	48	-1	-1	-1	-1
A5	53	-1	-1	-1	-1

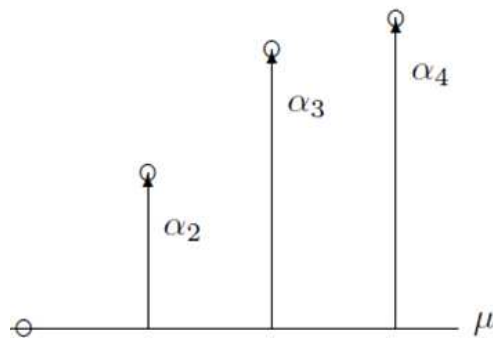
22

## ちょっとまとめてみよう

### ダミー変数1(1, 0)型とダミー変数2(1, -1)型

#### ダミー変数1(1, 0)型: 例

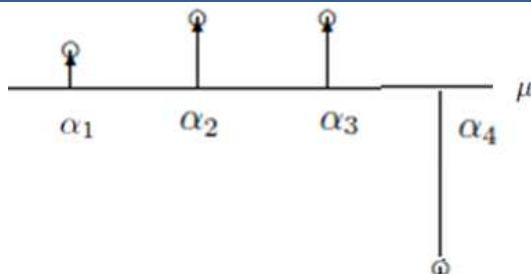
1つ基準 =  $\mu$



$$\mu + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

#### ダミー変数2(1, -1)型: 例

効果は全て足して0を利用



$$\mu + \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{ij}$$

23

## LINEST 関数で比べると... → 上2行を除いた部分と同じ

表示 2.3.2 元データとダミー変数

水準	y	ダミー変数1				ダミー変数2			
		A2	A3	A4	A5	A1	A2	A3	A4
A1	43	0	0	0	0	1	0	0	0
A1	45	0	0	0	0	1	0	0	0
A1	42	0	0	0	0	1	0	0	0
A1	47	0	0	0	0	1	0	0	0
A1	49	0	0	0	0	1	0	0	0
A1	50	0	0	0	0	1	0	0	0
A2	47	1	0	0	0	0	1	0	0
A2	51	1	0	0	0	0	1	0	0
A2	49	1	0	0	0	0	1	0	0
A3	54	0	1	0	0	0	0	1	0
A3	48	0	1	0	0	0	0	1	0
A3	57	0	1	0	0	0	0	1	0
A4	55	0	0	1	0	0	0	0	1
A4	58	0	0	1	0	0	0	0	1
A4	61	0	0	1	0	0	0	0	1
A5	52	0	0	0	1	-1	-1	-1	-1
A5	48	0	0	0	1	-1	-1	-1	-1
A5	53	0	0	0	1	-1	-1	-1	-1

表示 2.3.3 LINEST 関数の解

ダミー変数1 の解

	A5	A4	A3	A2	const
推定値	5.000	12.000	7.000	3.000	46.000
標準誤差	2.270	2.270	2.270	2.270	1.311
	0.703	3.211	#N/A	#N/A	#N/A
	7.676	13	#N/A	#N/A	#N/A
平方和	316.50	134.00	#N/A	#N/A	#N/A
t	2.202	5.286	3.083	1.321	35.096
p	0.046	0.000	0.009	0.209	0.000

ダミー変数2 の解

	A4	A3	A2	A1	const
推定値	6.600	1.600	-2.400	-5.400	51.400
標準誤差	1.637	1.637	1.637	1.284	0.786
	0.703	3.211	#N/A	#N/A	#N/A
	7.676	13	#N/A	#N/A	#N/A
平方和	316.50	134.00	#N/A	#N/A	#N/A
t	4.032	0.977	-1.466	-4.205	65.359
p	0.001	0.346	0.166	0.001	0.000

#### 全水準の推定値

名義尺度の要因においては、全水準に対して推定値が求められる

項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob> t )
切片	51.4	0.786423	65.36	<.0001*
群[A1]	-5.4	1.284224	-4.20	0.0010*
群[A2]	-2.4	1.637071	-1.47	0.1664
群[A3]	1.6	1.637071	0.98	0.3462
群[A4]	6.6	1.637071	4.03	0.0014*
群[A5]	-0.4	1.637071	-0.24	0.8108

ダミー変数2が

JMPの出力と一致

→A1~A5足すと0になる

24

演習 2.3.1

3 人の男性と 4 人の女性について次の  $y$  の値が得られたとき、 $a_{男} = 0$  とするダミー変数 1 と  $a_{男} + a_{女} = 0$  とするダミー変数 2 を用いる解析の違いを明らかにせよ。

性別	ダミー変数 1	ダミー変数 2	$y$
男	0	1	1
男	0	1	2
男	0	1	3
女	1	-1	3
女	1	-1	5
女	1	-1	5
女	1	-1	7

それぞれのダミー変数を横軸に、 $y$  の値を縦軸に取って 2 つの散布図を描き、回帰直線をあてはめて、回帰式を求めよ。それに男女別の平均値と全体の平均値を計算し、散布図に男女別の平均値の位置を示せ。回帰式の切片と傾きが何を意味するかを考えよ。  
女性の 2 番目の観測値を除いた場合はどうなるか。

ダミー変数1(1, 0)型と  
ダミー変数2(1、-1)型の違い

性別	ダミー変数	$y$
男	0	1
男	0	2
男	0	3
女	1	3
女	1	5
女	1	5
女	1	7

回帰直線(直線のあてはめ)を行うと

$$y = 2 + 3 \times (\text{ダミー変数})$$

切片を  $a$ 、傾きを  $b$  とおき

$$= a + b \times (\text{ダミー変数}) \quad \text{とする.}$$

切片  $a$  は

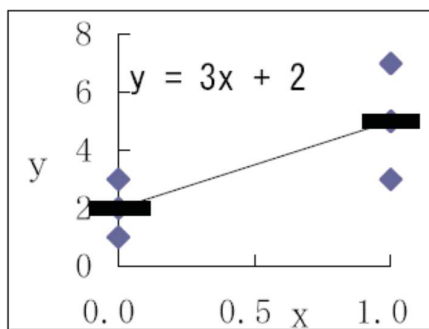
男の平均値  $(1 + 2 + 3) \div 3 = 2$  を示す

傾き  $b$  は

男を基準とした場合の男と女の平均値の差になっている

男の平均 = 2 女の平均 = 5

女の平均 - 男の平均 =  $5 - 2 = 3$



回帰直線(直線のあてはめ)を行うと

$$y = 2 + 3 \times (\text{ダミー変数})$$

$$= a + b \times (\text{ダミー変数})$$

その理由は, ダミー変数は男=0, 女=1なので

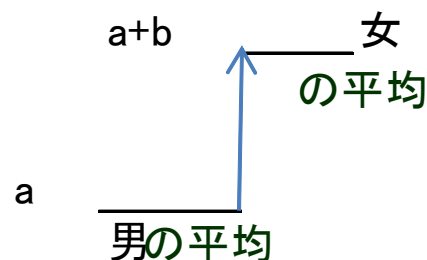
$$\text{男の平均} = a + b \times 0 = a \quad \dots \textcircled{1}$$

$$\text{女の平均} = a + b \times 1 = a + b \quad \dots \textcircled{2}$$

①と②の式から

$$\text{女の平均} - \text{男の平均} = a + b - a = b$$

となっている.



ダミー変数の与え方で推定される回帰係数の意味が異なる.

27

性別	ダミー変数	y
男	1	1
男	1	2
男	1	3
女	-1	3
女	-1	5
女	-1	5
女	-1	7

回帰直線(直線のあてはめ)を行うと

$$y = 3.5 + (-1.5) \times (\text{ダミー変数})$$

$$= a + b \times (\text{ダミー変数})$$

ダミー変数は男=1, 女=-1なので

$$\text{男の平均} = a + b \times 1 = a + b = 2 \quad \dots \textcircled{1}$$

$$\text{女の平均} = a + b \times -1 = a - b = 5 \quad \dots \textcircled{2}$$

①と②の式からaについて解くと

$$a = (\text{男の平均} + \text{女の平均}) \div 2$$

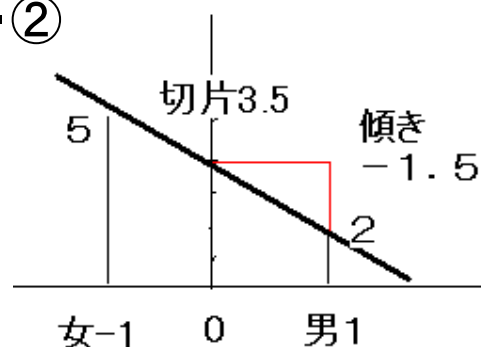
切片は男と女の平均の平均とわかる

①と②の式からbについて解くと

$$b = (\text{男の平均} - \text{女の平均}) \div 2$$

傾きは男と女の平均の差の半分, aからの性別による効果

28





# JMPによる解析

パラメータ推定値					パラメータ推定値				
項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob> t )	項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob> t )
切片	2	0.816497	2.45	0.0580	切片	3.5	0.540062	6.48	0.0013*
ダミー変数1	3	1.080123	2.78	0.0390*	ダミー変数2	-1.5	0.540062	-2.78	0.0390*

## • データ削除後(女、No.2)

パラメータ推定値					パラメータ推定値				
項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob> t )	項	推定値	標準誤差	t値	p値(Prob> t )
切片	2	0.912871	2.19	0.0936	切片	3.5	0.645497	5.42	0.0056*
ダミー変数1	3	1.290994	2.32	0.0808	ダミー変数2	-1.5	0.645497	-2.32	0.0808

- 注意すべきことは、ダミー変数の与え方で推定される回帰係数の意味が異なる。
- 自分の利用している解析ソフトがどのような方法でダミー変数を計算に利用しているか知ることは、結果を解釈する上でも非常に重要といえる。

29

## まとめ

- LINEST 関数は、ダミー変数を用いると、質的因子の効果を推定することができる。
- この解析方法は拡張性が極めて広く、欠測値のある2因子以上の実験などでも利用される。
- ダミー変数の生成方法は説明した2つの方法に限定されるものではない。
  - SAS のGLM では、表示2.3.2 の「ダミー変数1」とは逆に、最後の水準の効果を0としている。

30



## まとめ

ダミー変数の作り方にもコツがあり、  
今回の説明だけで完全にマスターすることは難しい。

テキストの演習を解くなどして理解を深め、  
自由に使えるようになろう。

31

## 出典と謝辞

本発表は、「医薬品開発のための統計解析-第2部  
実験計画法-」及び、過去の SAS Institute Japan  
JMP事業部主催セミナー「医薬品開発のための統計  
解析」講師資料を元に構成致しました

ご指導、資料の提供を頂きましたJMPセミナー講師  
陣の皆様にお礼申し上げますとともに、本発表の  
機会をいただきましたことをお礼申し上げます。

32

# じっくり勉強すれば身につく統計入門 非線形最小2乗法の基本的な考え方

## 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

田辺三菱製薬株式会社  
創薬本部 データサイエンス部 中西展大

## はじめに

### 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

先週2016年5月26日に改訂版が発売！

「じっくり勉強すれば身につく統計入門」がテーマ

本日は、その冒頭を『改訂版』準拠にて紹介

演習ファイルの入手先

[http://www.scientist-press.com/12\\_336.html](http://www.scientist-press.com/12_336.html)



# 本日のお話

目標：非線形回帰の基礎を学んで逆推定まで理解しよう

## 1.1 線形と非線形

線形・非線形の違いは？（直線・曲線とは違います）

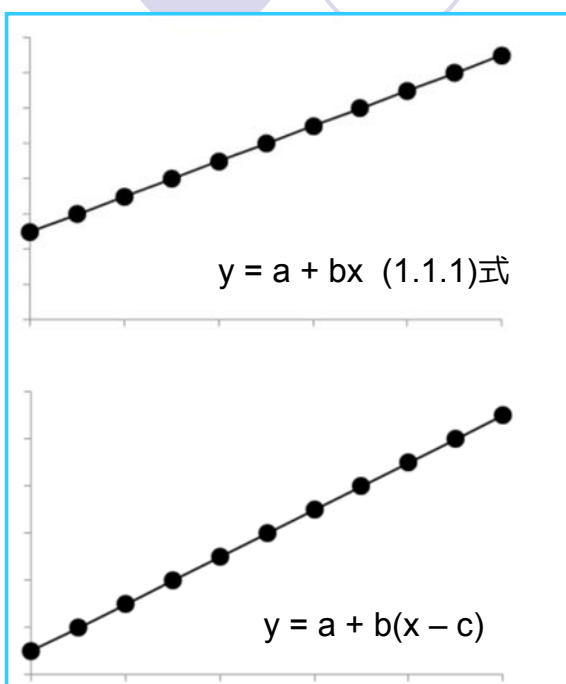
## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方（前半）

線形モデルを最小2乗法で～逆推定を非線形最小2乗法でまで

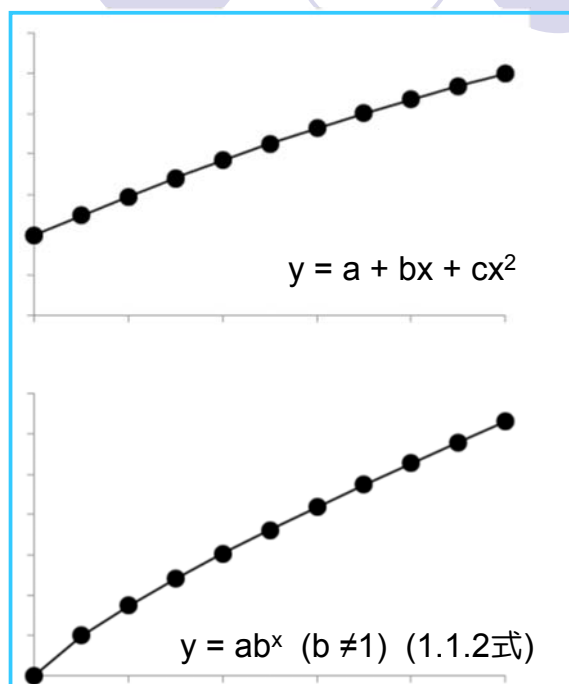
3

p. 3

## 1.1 線形と非線形（直線関係と曲線関係）



説明変数  $x$  と目的変数  $y$  が直線関係  
⇒ 直線関係がある



説明変数  $x$  と目的変数  $y$  が曲線関係  
⇒ 曲線関係がある

4

## 1.1 線形と非線形（直線関係と曲線関係）

直線関係か曲線関係か、は散布図を描き回帰直線を引くことで容易に判別できる。もう少し丁寧に定義する。

$y = ax + b$  は直線である。

⇒変数が増えて、 $y = ax_1 + bx_2 + c$

としても直線（平面）である。

⇒もし、 $y = abx + b$  としてもやはり直線である。

一般的に変数が1次式で結合しているなら、

直線関係である。

5

## 1.1 線形と非線形（直線関係と曲線関係）

$y = ab^x$  ( $b \neq 1$ ) 1.1.2式 これは、変数が1次ではない

⇒曲線関係である。

両辺の自然対数 (ln) を取ると

$\ln(y) = \ln(a) + \ln(b)x$   $\ln(y)$  と  $x$  は1次式で結合している

⇒直線関係である

では、線形関係・非線形関係は

どのように見分ければよいか？

6

# 1.1 線形と非線形（線形関係と非線形関係）

変数が1次式で結合しているなら、

直線関係である。

パラメータ（係数）が1次式で結合しているなら、

線形関係である

$y = ax + b$  は直線関係であり、線形関係である。

パラメータが増えて、 $y = ax_1 + bx_2 + c$

としても直線関係（平面）であり、線形関係である。

⇒もし、 $y = abx + b$  としてもやはり直線関係であるが、

線形関係ではなく非線形関係である。

7

# 1.1 線形と非線形

- |                             |                       |
|-----------------------------|-----------------------|
| ① $y = b_0 + b_1x$          | $= 50 + 10x$          |
| ② $y = b_0 + b_1x + b_2x^2$ | $= 40 + 10x - 0.2x^2$ |
| ③ $y = 50 + b_1(x - b_2)$   | $= 50 + 10(x - 4)$    |
| ④ $y = b_0x^{b_1}$          | $= 10x^{0.8}$         |

(1.1.3)式

直線関係

線形関係

(1.1.4)式

曲線関係

線形関係

(1.1.5)式

直線関係

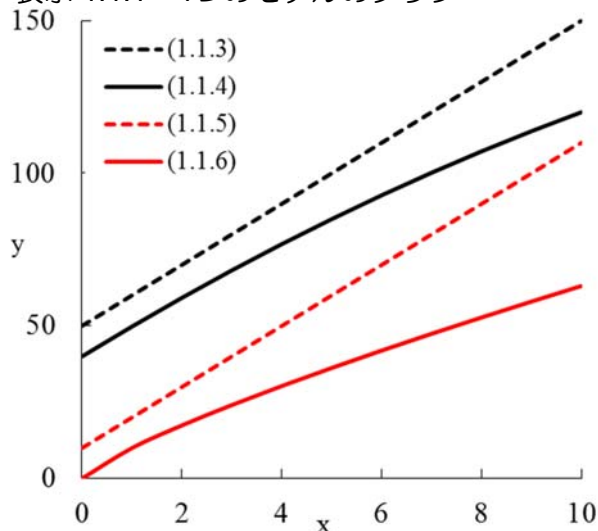
非線形関係

(1.1.6)式

曲線関係

非線形関係

表示 1.1.1 4つのモデルのグラフ



直線関係・曲線関係

⇒ x に注目

式の説明変数が x だけ  
 $x^2$  や  $x^{0.8}$  がある

→ 直線

→ 曲線

線形関係・非線形関係

⇒ パラメータに注目

パラメータが線形式 → 線形

パラメータが線形式で表せない → 非線形

8

# 1.1 線形と非線形

関数の一般式;  $y = f(x, \beta)$   
変数 パラメータ

## 直線・曲線

直線  $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$

曲線  $y = x_0^{b_0}$   
 $y = b_0x_0$

## 線形・非線形

線形  $y = b_0 + b_1x + b_2x^2$

非線形  $y = b_0b_1x_0$   
 $y = b_0b_1x_0$

“推定”の目的とするところは“パラメータ”の推定である。  
 よって直線・曲線より線形・非線形が推定時に問題となる。

線形関係でのパラメータ推定

Excel; LINEST関数  
 JMP ; モデルのあてはめ

非線形関係でのパラメータ推定

Excel; ソルバー  
 JMP ; 非線形回帰

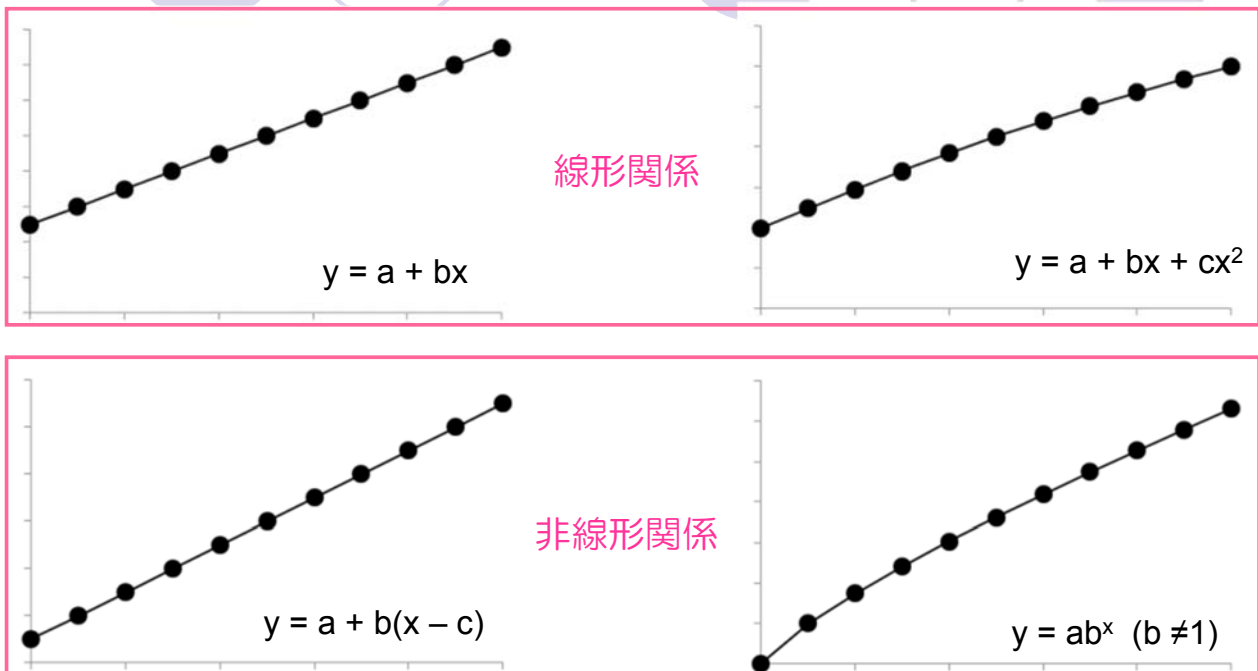
9

# 1.1 線形と非線形

## この節のまとめ

- この節では『非線形』とは何を意味しているのかについて『線形』と比較して説明した。
- 『線形 / 非線形』関係とは、パラメータに注目し、式がパラメータ  $b$  に対して一次式ならば線形  
 パラメータ  $b$  に対して一次式でない場合は非線形  
 となることを学んだ。
- 『線形・非線形』と『直線・曲線』関係は全く異なるということを充分に理解することが大切である。

## 1.1 線形と非線形



11

## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方

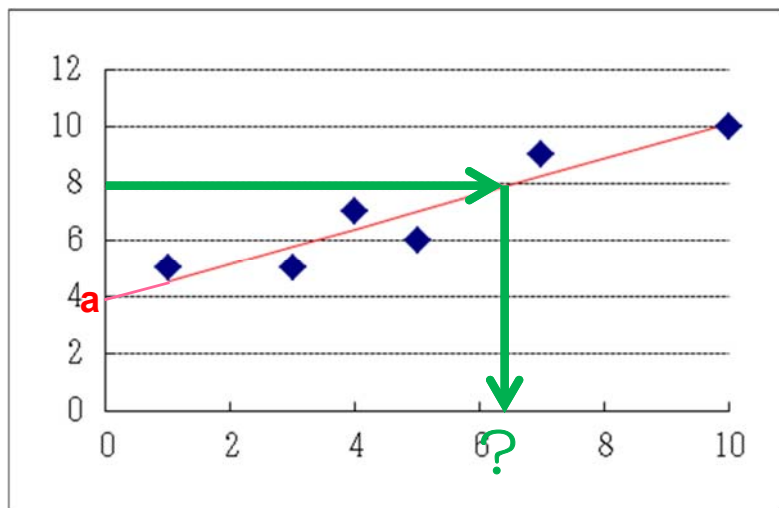
- (1) Excel ソルバー による回帰式の解析
- (2) JMP 非線形回帰 による回帰式の解析
- (3) ソルバー による逆推定の解析
- (4) JMPによる逆推定の解析
- (5) 推定値の標準誤差
- (6) 平均値の標準誤差
- (7) 単回帰式の傾き  $b$  の標準誤差
- (8) 非線形最小2乗法による推定値の標準誤差

12

## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方

$y = a + bx (= 3.9 + 0.62x)$  という式（直線・線形）から、 $y = 8$  となる  $x$  を推定（逆推定）する方法を考える。

※()は推定値



13

## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方

$y = a + bx (= 3.9 + 0.62x)$  という式（直線・線形）から、 $y = 8$  となる  $x$  を推定（逆推定）する方法を考える。

※()は推定値

### [方法 1] 代数的に求める方法

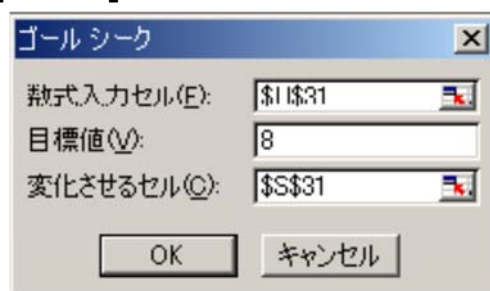
$y = a + bx$  の式を変形して

$$x = (y - a) / b$$

$a = 3.9$ ,  $b = 0.62$ ,  $y = 8$   
を代入

⇒ 計算により  $x$  を求める。

### [方法 2] ゴールシークを使う方法



ここでは、

『方法3 パラメータとして直接求める方法』を考える

14

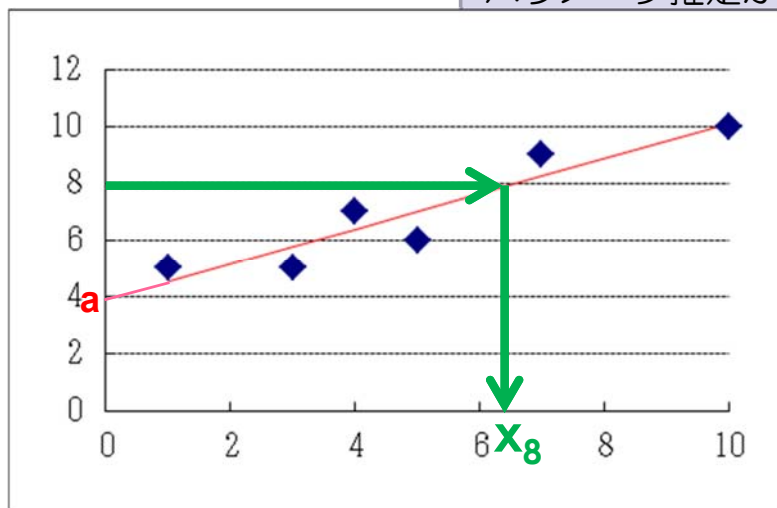


## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方

$y = a + bx$ について

$y = 8$  となる  $x$  の値を  $x_8$  とすると  $y = 8 + b(x - x_8)$  (1.2.1式) と表すこともできる。

パラメータ推定が、そのまま逆推定



15

## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方

$y = a + bx$ について

$y = 8$  となる  $x$  の値を  $x_8$  とすると  $y = 8 + b(x - x_8)$  (1.2.1式) と表すこともできる。

パラメータ推定が、そのまま逆推定

展開すると

$$y = 8 + bx - \boxed{b \times x_8}$$

←パラメータに積項があるので

直線・非線形なモデル

非線形モデルに対して最小2乗法でパラメータを推定する方法を**非線形最小2乗法**とか**非線形回帰分析**という。

非線形回帰分析 を適用するツールとして以下を紹介

EXCEL 「ソルバー」

JMP 「非線形回帰」

16

# ソルバー：Solverとは

solve

音節 solve 発音記号 / sálv, s'ɔ : lv | s'ɔlv / 音声を聞く

## 【動詞】【他動詞】

〈問題・難事などを〉解決する, 解く; 解明する, 解答する.

用例 + • solve a problem 問題を解く.

sólver【名詞】

[ラテン語 solvere 「ゆるめる」から; 【名詞】 solution]

“解決者”という名の通り，こちらが正しく問題を教えれば，solve “解決”してくれる機能.

確認した限り，EXCEL2003以降には標準搭載されている。（マイナーチェンジは有り）

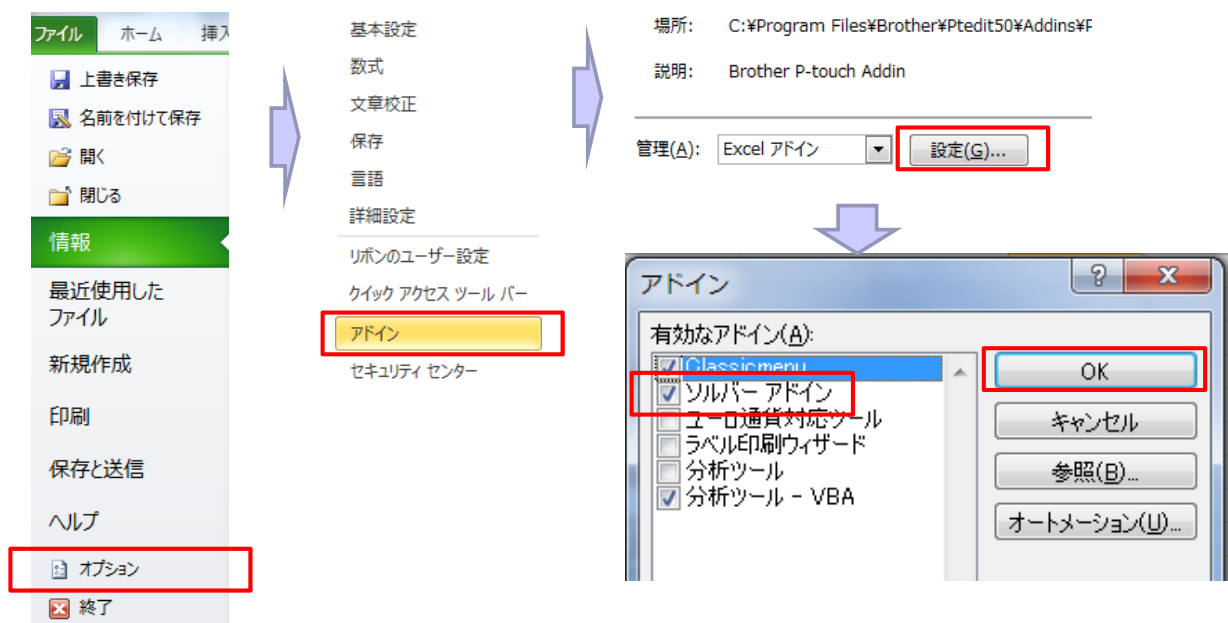
本日はEXCEL2010をベースに解説する.

出典：weblio英和和英

## 参考：ソルバー機能の有効化

ソルバー機能はDefaultではoffになっているため，機能を有効化する.

2003では『ツール』→『アドイン』で右下図と似た表示が出る.



## 参考：ソルバー機能の有効化の確認

『データ』タブに『ソルバー』が出来ていればOK



## アルゴリズムイメージ

ソルバーは“最小化問題”を“反復計算”で解くアルゴリズムです。

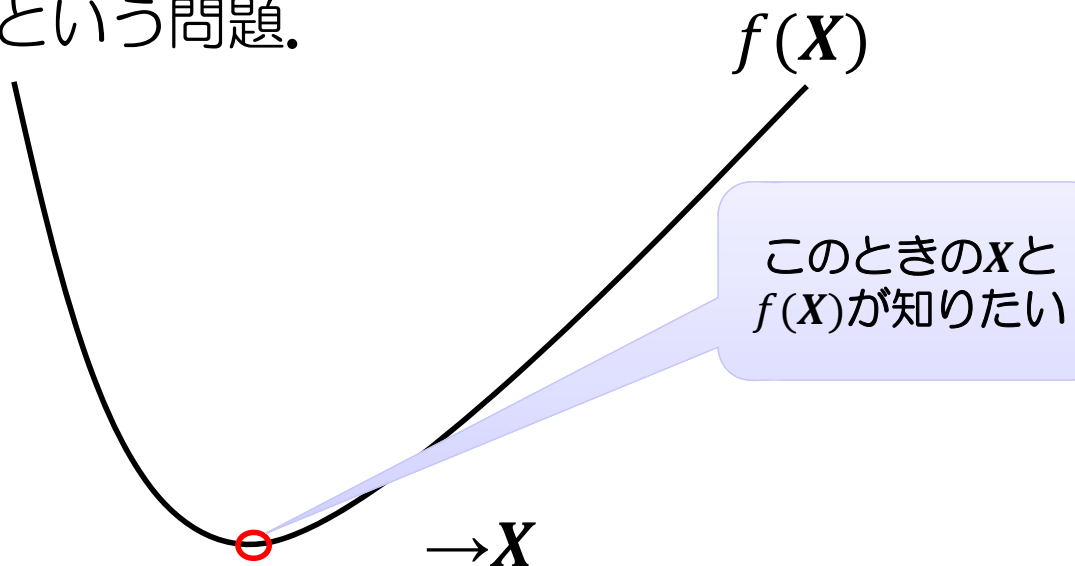
正確なアルゴリズムの解説は出来ません。

あくまで“イメージ”のみ解説します。

JMPの非線形回帰も似たアルゴリズムを採用しています。  
詳細は不勉強でわかりません。

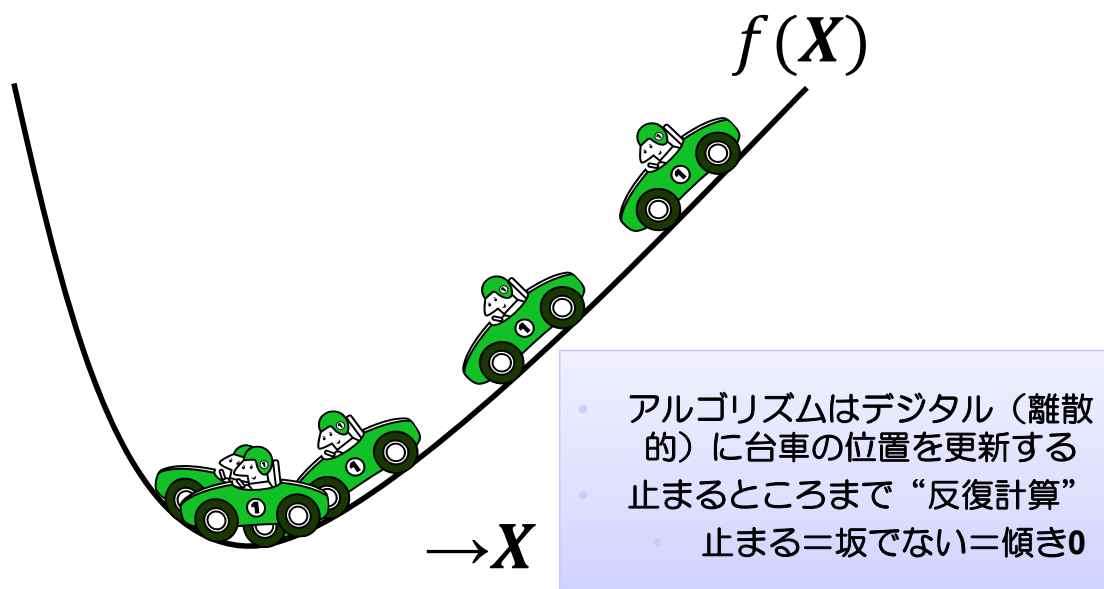
## “最小化問題”とは

ある関数 $f(X)$ が与えられたときに、 $f(X)$ が最少となる $X$ 及びそのときの $f(X)$ を求めようという問題.

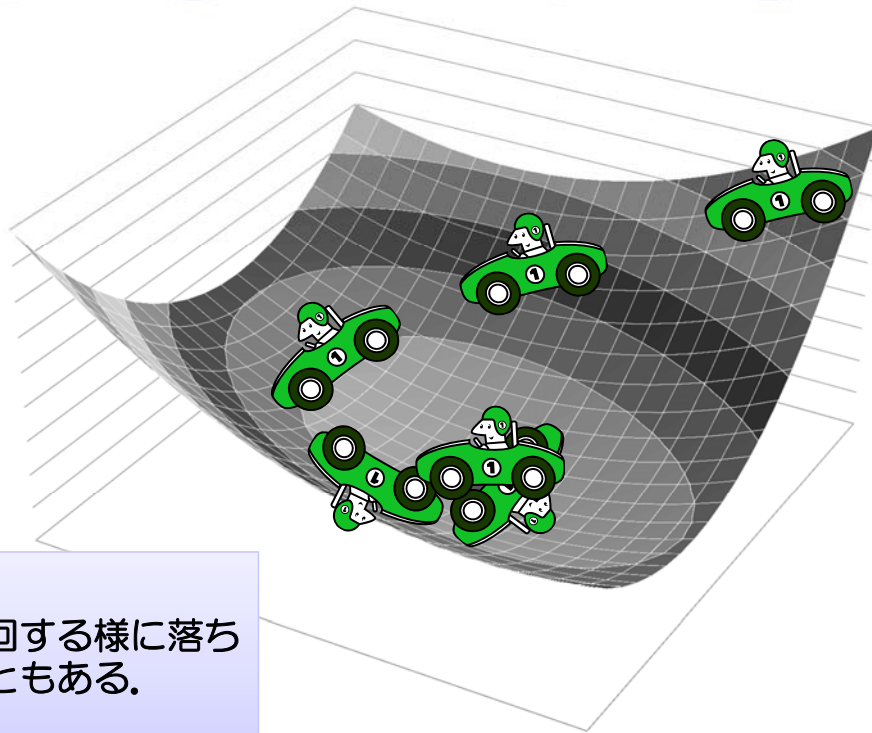


## どうするか？

適当なところからミニカーを転がして止まるのを待つ.



$X$ が多次元でも基本的には同じ



周囲を旋回する様に落ちることもある。

ここで気づく諸問題

転がり方はどういう計算？

解説は省略。

何手法か選ぶことは出来ます。

完全に止まるのを待つ？

まず不可能です。おおよそ“止まった”と判断したところで辞めます。

止まったと判断する基準（収束条件）はオプションで調節できます。

## ソルバーの弱点 局所解について

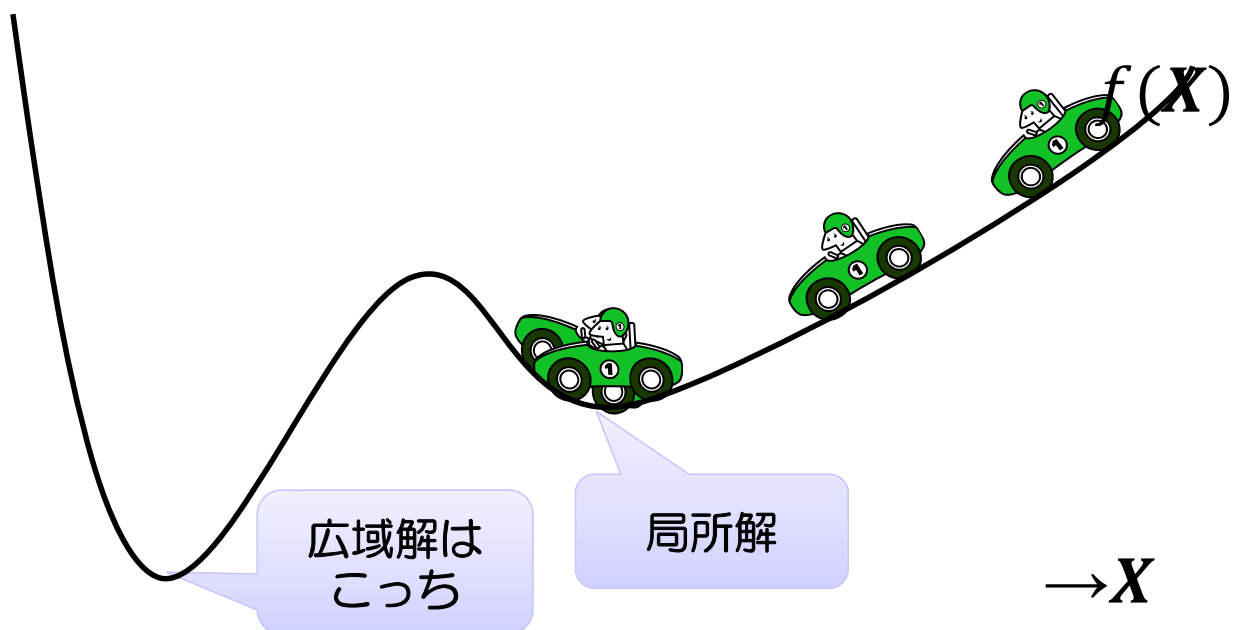
複雑な問題においてはミニカーの止まった場所が $f(\mathbf{X})$ の最小値でない場合があり得る。

$f(\mathbf{X})$ の最小値を与える $\mathbf{X}$ を“広域解”と呼ぶのに対し、

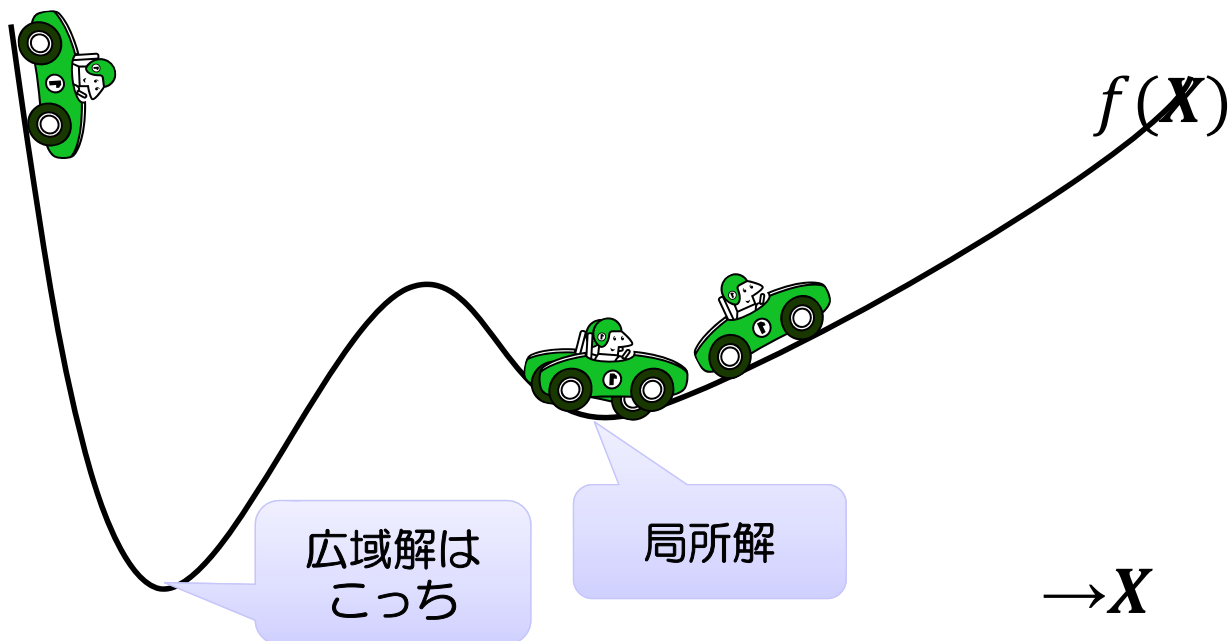
$f(\mathbf{X})$ の最小値でないのにミニカーの止まる $\mathbf{X}$ を“局所解”と呼ぶ。

反復計算が“局所解”を導いてしまうことを、“局所解に捕まる”と呼ぶことがある。

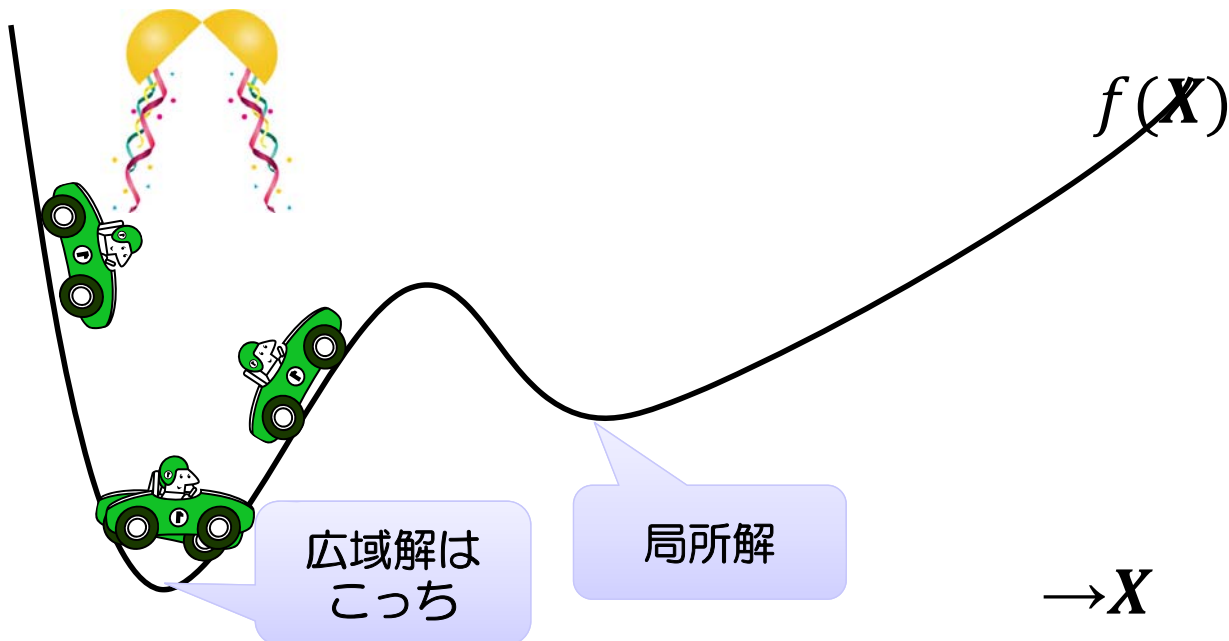
### イメージ1



イメージ2



成功例



局所解を回避するには

初期値に気を配るより仕方がない。

話を戻します。

## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方

- (1) Excel ソルバー による回帰式の解析
- (2) JMP 非線形回帰 による回帰式の解析

$y = a + bx$  (直線・線形) で解説する。

- (3) ソルバー による逆推定の解析
- (4) JMPによる逆推定の解析

$y = 8 + b(x - x_8)$  (直線・非線形) で解説する。



# (1) Excel ソルバーによる回帰式の解析

表示 1.2.1 ソルバーによる回帰式の推定

第1部 § 4.3 (3) 表示4.3.3の再掲

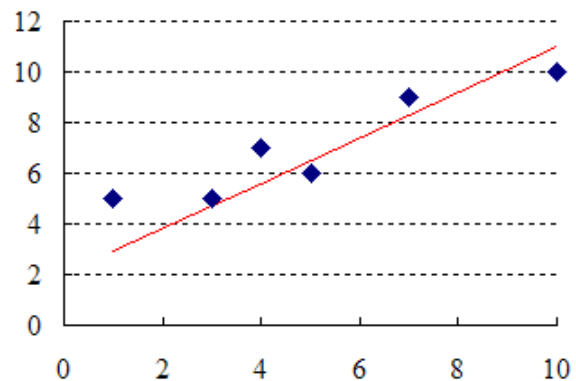
$$y \text{ の予測値} = a + b \times x$$

i	x	y	yhat	e
1	1	5	2.9	2.1
2	3	5	4.7	0.3
3	4	7	5.6	1.4
4	5	6	6.5	-0.5
5	7	9	8.3	0.7
6	10	10	11.0	-1.0

a	2.0
b	0.9
S	8.2

残差の2乗和  
= SUMSQ

残差 = y - yhat



最小2乗法は『残差 e の平方和 S が最小になるモデルが最も当てはまりがよい』ことを意味する。

残差平方和 S を “最小化” する “問題” ?  
⇒ソルバーの登場！

31

# (1) Excel ソルバーによる回帰式の解析

## EXCEL 2010の場合

トップメニューの『データ』から  
“分析”メニューの『ソルバー』  
を選択

↓

[目的セル] 残差平方和 S のセルを指定

[目標値] 最小値を選択

[変化させるセル] パラメータ a, b のセル  
を指定

↓

[解決] ボタンをクリック

(y が目標値になるための a や b が計算  
され, yhat・残差 e・残差平方和 S,  
グラフの直線も連動して更新される)。

↓

ソルバーの解で良ければ [OK] をクリック,  
推定されたそれぞれの値が確定する。



!注意!

パラメータの初期値が解からあまりにも乖離  
していると解が求められない, 間違った解が  
得られる, など不具合が生じるころがある  
ので, グラフを描く習慣をつけたほうが良い。

32

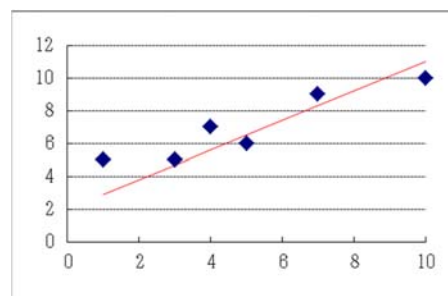
# (1) Excel ソルバーによる回帰式の解析

表示 1.2.1 ソルバーによる回帰式の推定

i	x	y	yhat	e
1	1	5	2.9	2.1
2	3	5	4.7	0.3
3	4	7	5.6	1.4
4	5	6	6.5	-0.5
5	7	9	8.3	0.7
6	10	10	11.0	-1.0

初期値

a	2.0
b	0.9
S	8.2



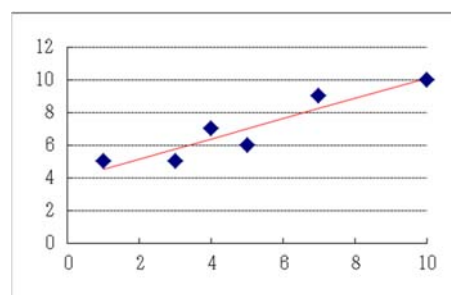
i	x	y	yhat	e
1	1	5	4.5	0.5
2	3	5	5.8	-0.8
3	4	7	6.4	0.6
4	5	6	7.0	-1.0
5	7	9	8.2	0.8
6	10	10	10.1	-0.1

D5:	=H\$5+H\$6*B5
E5:	=C5-D5
H7:	=SUMSQ(E5:E10)

結果

a	3.90
b	0.62
S	2.78



33

# (2) JMP 非線形回帰による回帰式の解析

【12-単回帰.JMP】を開く

データテーブルの空いているところをダブルクリックして列を追加，新たにできた列を右クリックして[列情報]画面で [yhat] など列名や各種情報を選択する。

↓  
列名セルをクリックして[計算式]を選択

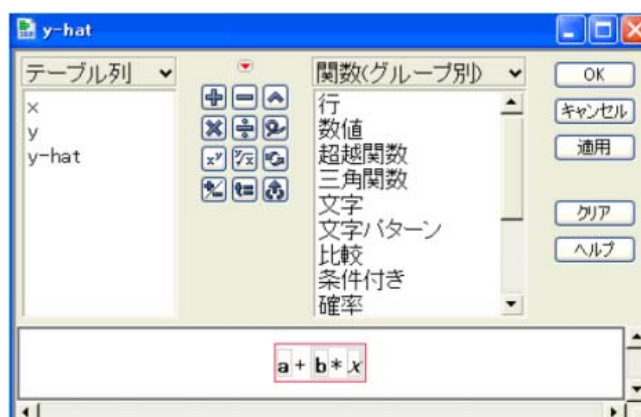
↓  
パラメータ (a, b)と初期値を登録

↓  
パラメータ, テーブル列を使って計算式を入力

↓  
[OK]をクリック  
(yhatの値が自動的に計算される)

↓

表示 1.2.3 計算式指定画面

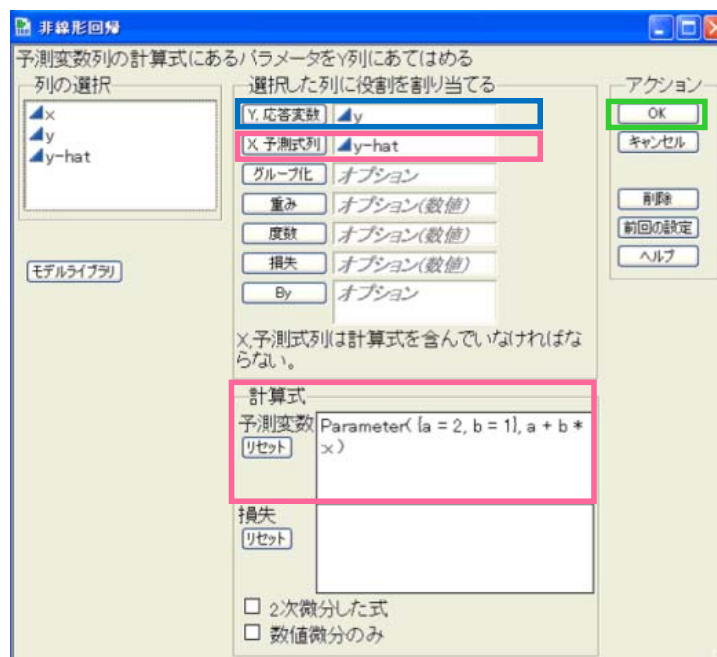


34

## (2) JMP 非線形回帰による回帰式の解析

↓  
 トップメニュー[分析]  
 ↓  
 [モデル化]  
 ↓  
 [非線形回帰]  
 『y』を” Y, 応答変数”,  
 『yhat』を” X, 予測式列”  
 ↓  
 [OK]

表示 1.2.5 「非線形回帰」指定画面

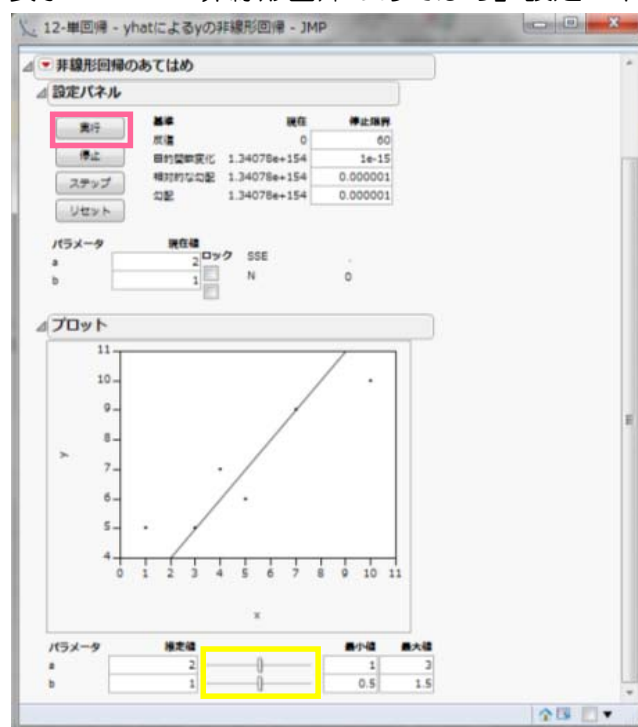


35

## (2) JMP 非線形回帰による回帰式の解析

↓  
 『非線形回帰のあてはめ』画面で  
 [設定パネル] [プロット] 表示  
 [プロット] 画面下のスクロール  
 バーで初期値を改善  
 ↓  
 [設定パネル]の[実行]をクリック  
 ↓  
 解が求められる  
 ↓  
 [推定値の保存] [信頼限界]など算出

表示 1.2.6 「非線形回帰のあてはめ」設定パネル



36

## (2) JMP 非線形回帰による回帰式の解析

表示 1.2.7 JMPによる解析結果

Sum of Square Error 残差平方和  
Degree of Freedom Error 残差平方和の自由度  
Mean Square Error 平均平方  
Root Mean Square Error 平均平方の平方根  
SSE ÷ DFE  
√MSE

解

	SSE 2.78	DFE 4	MSE 0.695	RMSE 0.8336666	
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	
a	3.9	0.68068593	2.01011289	5.78988711	
b	0.62	0.11789826	0.29266195	0.94733805	
解法: 解析 Gauss-Newton					

Excelで求めた結果と一致します

JMPでは信頼限界も求められる

第1部 § 4.3 (7)参照

(これはまだ、線形モデルなので、はExcelではLINEST関数を使えば求められる)

37

## (3) ソルバーによる逆推定の解析

回帰式の推定と同様の方法で逆推定の解を求めることができる。

表示 1.2.8 ソルバーによる非線形パラメータの推定

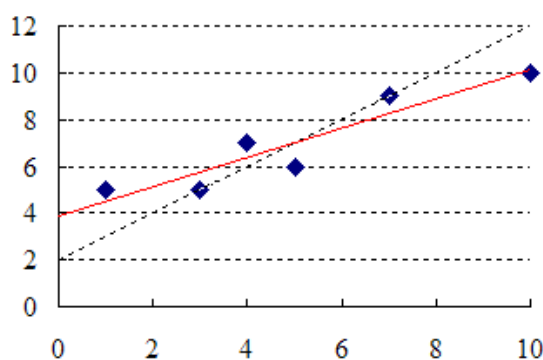
$\hat{y}$ の入力式 = 8 + b( x-x<sub>8</sub> )

i	x	y	yhat	e	yhat	e
1	1	5	3.00	2.00	4.52	0.48
2	3	5	5.00	0.00	5.76	-0.76
3	4	7	6.00	1.00	6.38	0.62
4	5	6	7.00	-1.00	7.00	-1.00
5	7	9	9.00	0.00	8.24	0.76
6	10	10	12.00	-2.00	10.10	-0.10

x8	6.000	x8	6.613
b	1.000	b	0.620
S	10.000	S	2.780

初期値

結果



38

## (4) JMP による逆推定の解析

【12-逆推定.JMP】を開く

データテーブルに[yhat]の列を追加して [計算式] 入力画面を開く.

↓

計算式 “ $8 + (x - x_g)$ ”  
を入力 ⇒ [OK]

↓

トップメニュー[分析]⇒[モデル化]  
⇒[非線形回帰]⇒[OK]

↓

『非線形回帰のあてはめ』画面  
⇒[設定パネル]の[実行]

↓

解が求められる.

表示 1.2.9 JMPによる解析結果

解			
SSE	DFE	MSE	RMSE
2.78	4	0.695	0.8336666
パラメータ		推定値	近似標準誤差
x8		6.6129032258	0.62881217
b		0.62	0.11799826
解法: 解析 Gauss-Newton			
推定値の相関			
	x8	b	
x8	1.0000	-0.4878	
b	-0.4878	1.0000	

逆推定結果が精度付き  
(信頼区間も表示可能)  
で出てくるのが大きな  
メリット!

SSEなどやパラメータ b は表示1.2.8 で  
求めた結果と一致

39

## 1.2 非線形最小2乗法の基本的な考え方

### この節前半のまとめ

- 本節では、最小2乗法の最も簡単な例として線形モデルからスタートし、非線形最小2乗法を用いる逆推定まで順次取り上げて、非線形最小2乗法の基本的な考え方を説明した。
- また、ExcelソルバーとJMP「非線形回帰」を用いた解の求め方を学習した。

40

## 第3部 非線形モデル この後の発展を少し紹介

### 1.4 Emaxモデルとロジスティック曲線

Emax理論による，用量反応モデル

$$y = \frac{E_{max} \times x^{\gamma}}{x^{\gamma} + D_{50}^{\gamma}}$$

この $D_{50}$ は50%反応に達する， $x$ を推定（逆推定）するパラメータ。  
Emaxモデルでパラメータ推定すれば，50%反応濃度（用量 etc）が同時に推定される。

これも各パラメータが，非線形の関係なので，非線形回帰による解決を行う。

41

## 第3部 非線形モデル この後の発展を少し紹介

### 1.4 Emaxモデルとロジスティック曲線

Emax理論による，用量反応モデル

$$y = \frac{y_{\infty}}{1 + \frac{1-p}{p} \left( \frac{x_p}{x} \right)^b}$$

このように少し変形すると，  
 $p \times 100\%$ 反応に達する， $x$ を直接推定（逆推定）出来る。

2.2 効力比 : 2剤での $D_{50}$ の比を直接推定

2.3 併用効果 : 2剤同時使用時の効果を推定

42

## 第3部 非線形モデル この後の発展を少し紹介

### 4.2 ロジスティック回帰（基礎）

非線形最小2乗法は、誤差分布に等分散の正規分布を仮定した場合に、最尤不偏推定量になる保証がある。

誤差に2項分布を仮定するロジスティック回帰では、非線形最小2乗法は適当ではなく、最尤法による非線形回帰を行う必要がある。

これも、本テキストの範囲として取り扱っている。

43

## 出典と謝辞

本発表は、「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」及び、過去のSAS Institute Japan JMP事業部主催セミナー「医薬品開発のための統計解析」講師資料を元に構成致しました

ご指導、資料の提供を頂きましたJMPセミナー講師陣の皆様にお礼申し上げますとともに、本発表の機会をいただきましたことをお礼申し上げます。



# Appendix

ソルバーの多くの機能を理解するために、  
いくつか例を追加しました。

45

## ソルバーの操作（基本1）

ソルバーの初歩: 二次関数の最小値算出  
yを最小にするxを求める

$y = Ax^2 + Bx + C$   
A= 1  
B= 3  
C= -10

x= -1.5  
y= -12.25

ソルバーのパラメーター

目的セルの設定(D) \$H\$9

目標値: ☐ 最大値(M) ☒ 最小値(N) ☐ 指定値(V) 0

変数セルの変更(B) \$H\$5

制約条件の対象(L)

☐ 制約のない変数を非負数にする(K)

解決方法の選択(E) GRG 非線形

解決方法  
滑らかな非線形モデル  
レックス エンジン、  
ください。

ヘルプ(H) 解決(S) 閉じる(O)

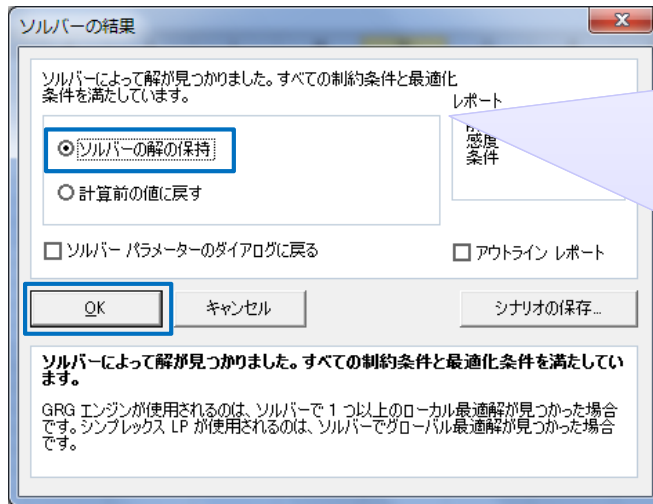
最小値を選択

チェックを必ず外す

設定が確認できたら押す



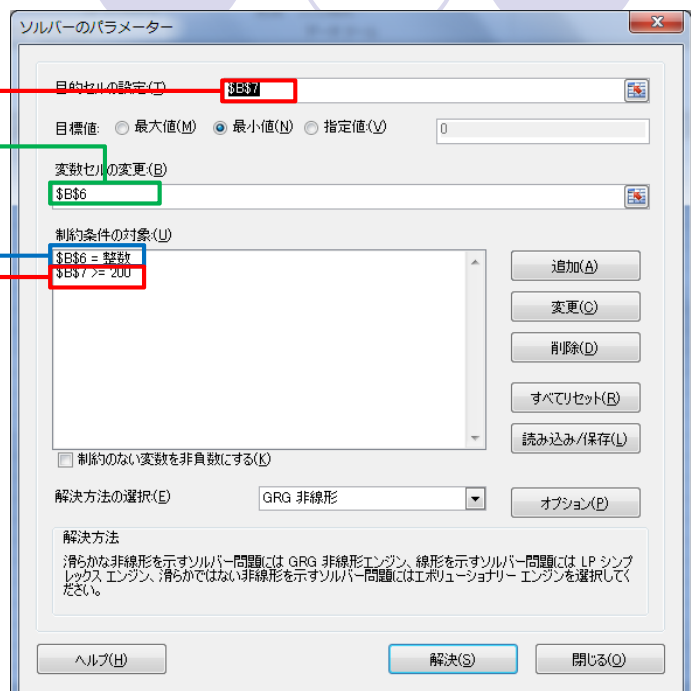
# ソルバーの操作（基本2）



- 基本的にはこの画面が出て終了。
- その他「エラー」と「収束しない」パターンが存在する。
- その対応は解決したい最小化問題に応じて異なるので、試行錯誤して経験を積むしかない。

# ソルバーの操作（制約1）

	A	B	C	D	E
1	制約をつける：貯蓄シミュレーション				
2	100万円を年 <i>p</i> %複利で預けたら、何年で200万円になるか？				
3	$n$ 年後の残高は $100 \cdot (1 + p/100)^n$ であるから、				
4					
5	$p =$	2			
6	$n =$	36			
7	残高 =	203.98871			



# ソルバーの操作（制約2）

	A	B	C	D	E
1	<b>線形計画問題</b>				
2	行列Aとベクトルbcが与えられた時				
3	$Ax=b$ を満たす成分が全て非負のベクトルxの内、				
4	$c^T x$ を最小とするxを求める。これが線形計画問題。				
5					
6	(製品構成)	A=	1	2	3
7			0	1	2
8	(総必要数)	b=	300	400	
9	(入荷コスト)	c=	1	2	4
10					
11	(入荷数)	x=	0	150	0
12					83.33333
13	(総必要数との差異) $(Ax-b)_i$		0	0	
14	(総コスト)	$c^T x$	716.6667		

ソルバーのパラメーター

目的セルの設定(T) **\$B\$14**

目標値: ☐ 最大値(M) ☒ 最小値(N) ☐ 指定値(V) 0

変数セルの変更(B) **\$B\$11:\$E\$11**

制約条件の対象(U)

**\$B\$11:\$E\$11 >= 0**

**\$B\$13:\$C\$13 = 0**

☐ 制約のない変数を非負数にする(K)

解決方法の選択(E) GRG 非線形

解決方法

滑らかな非線形を示すソルバー問題には GRG 非線形エンジン、線形を示すソルバー問題には LP シンプレックス エンジン、滑らかではない非線形を示すソルバー問題にはエボリューションナリー エンジンを選択してください。

ヘルプ(H) 解決(S) 閉じる(Q)

# ソルバーの操作（オプション）

ソルバーのパラメーター

目的セルの設定(T) **\$B\$5**

目標値: ☒ 最大値(M) ☐ 最小値(N) ☒ 指定値(V) 0

変数セルの変更(B) **\$H\$5**

制約条件の対象(U)

☐ 制約のない変数を非負数にする(K)

解決方法の選択(E) **GRG 非線形**

オプション(P)

解決方法

滑らかな非線形を示すソルバー問題には GRG 非線形エンジン、線形を示すソルバー問題には LP シンプレックス エンジン、滑らかではない非線形を示すソルバー問題にはエボリューションナリー エンジンを選択してください。

ヘルプ(H) 解決(S) 閉じる(Q)

『最大値』と『指定値』は基本的に不要  
 最大値は $-f(X)$ の最小値と本質的に同じ  
 推定値は $(a - f(X))^2$ の最小値と本質的に同じ

ミニカーの転がし方ルールが選べる。

収束条件、中断条件などの設定が可能。