

交互作用の多重比較

東大 工学部 広津 千尋

1. 序論

2 元配置模型

$$y_{ijk} = \mu_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad (i=1, \dots, a; j=1, \dots, b; k=1, \dots, r)$$

を考える。ただし、誤差 ε_{ijk} はたがいに独立に正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従っているものとする。

交互作用に関する帰無仮説

$$H_0: \mu_{ij} = \bar{\mu}_{i.} + \bar{\mu}_{.j} - \bar{\mu} \quad (1.1)$$

を検定するのには通常は F 検定が用いられる。 H_0 が採択されればモデルは単純になるが、 H_0 が棄却されれば一般に自由度 $(a-1)(b-1)$ が大きいのでモデルは複雑になる。

そこで、もし、二つの因子の水準を群に分け、交互作用が群内でのみ存在するような分類できれば便利である。ここでは H_0 が真である時、群分けを有意とする確率を有意水準 α に抑える分類方式を与える。この方式は二つの因子ともに制御因子である場合には最適組合せを与えるが、一方が分類因子

であるときは，そのまとめられた各群ごとに最適な制御因子の水準を手えることができ，とくに有用である。

繰返しの無い場合 ($r=1$ の場合) には通常の不偏分散が得られず，F 検定は適用できない。そこでよく行われるのは Tukey の加法性検定 (1949, Biometrics) や Johnson & Graybill (1972b, JASA) のように交互作用に特別な構造を仮定することである。しかし，そのような接近法はモデルの適合度の検定を要するし，因子の各水準が連続量に対応しない（たとえば分類因子のような）場合にはモデルの意味自体が不明確である。Johnson & Graybill (1972a, JASA) では特別なモデルを仮定しない接近法を試みているが，検出力および結果の解釈に問題が残る。ここで提案する，線形モデルの上で多重比較を行う方法は上記の難点をおおむね克服するものである。ただし，分けられた群の数があまり多いような場合には，変数変換の工夫が有力な手段になると思われる。

水準に自然な順序がある場合に意味のある交互作用対比については以前に論じた (1978, Biometrika)。これには行，列の両方に順序がある場合，一方のみに順序がある場合に順序のある方を群分けする場合と，順序の無い方を群分けする場合等の立場がある。

2. 行 (列) 間の交互作用と単純化したモデル

交互作用を表わすパラメータベクトル γ をつぎのように導入する。

$$\mu = \mu_1 + (P_a \otimes P_b) \gamma,$$

ただし,

$$\mu = (\mu_{11}, \mu_{12}, \dots, \mu_{ab})'$$

$$\mu_1 = (\dots, \bar{\mu}_i + \bar{\mu}_j - \bar{\mu}, \dots)'$$

$$\gamma = (P'_a \otimes P'_b) \mu.$$

なお, $\otimes$ は行列のクロネッカー積を表わし, P'_n は $n-1 \times n$ の直交行列で各行は $\delta'_n = (1, 1, \dots, 1)$ と直交する, すなわち

$$\begin{bmatrix} n^{-\frac{1}{2}} \delta'_n \\ P'_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n^{-\frac{1}{2}} \delta_n \\ P_n \end{bmatrix} = I_n$$

$$P_n P'_n = I_n - n^{-1} \delta_n \delta'_n$$

である。 I_n は n 次元単位行列を表わす。

2 行 m, n の γ への寄与は

$$\begin{aligned} L(m; n) &= \left\{ (0 \dots 0 \underset{1 \dots m}{\frac{1}{\sqrt{2}}} 0 \dots 0 \underset{n \dots a}{\frac{1}{\sqrt{2}}} 0 \dots 0) \otimes P'_b \right\} \mu \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} P'_b (\mu_m - \mu_n), \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\mu_i = (\mu_{i1}, \dots, \mu_{ib}), \quad i=1, \dots, a$$

で表わされる。これを 2 行 (m, n) 間の交互作用要素と呼ぶ (1973, JUSE)。

交互作用要素が0と見なされるものをプールし, それと適
当な群間対比の計比を表現すると簡単なモデルが得られる
。得られたモデルはつぎのように表わすこともできる。

$$\mu_{ij} = \bar{\mu}_{i..} + \bar{\mu}_{.j.} - \bar{\mu}_{...} + (\alpha\beta)_{ij}, \quad (2.2)$$

ただし,

$$(\alpha\beta)_{i.} = 0, \quad (\alpha\beta)_{.j} = 0,$$

$$(\alpha\beta)_{ij} = (\alpha\beta)_{i'j'}, \quad \text{if } i, i' \in H_u, \quad j, j' \in J_v,$$

ここで $H_u, u=1, \dots, A, J_v, v=1, \dots, B$, は行および列のそれ
ぞれについて, 交互作用要素が0と見なされるものをまとめた
群を表わす。列間の交互作用要素は行の場合と対称に定義さ
れる。

係数行列の直交性から得, $r, L(m; n)$ の最小二乗法によ
る推定値は, それぞれ定義式で μ_{ij} を $\bar{y}_{ij.}$ で置きかえること
によって得られる。以後それらの推定量は上へをつけて表
わす。 $\hat{\mu}$ の分散も直交性から容易に導びくことができる。
いま, H_u, J_v にまとめられた群の数を n_u, n_v とするとつ
ぎの公式が得られる。

$$\begin{aligned} \hat{\mu}_{ij} = & \bar{y}_{i..} + \bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...} \\ & + \left(\sum_{i \in H_u} \sum_{j \in J_v} \bar{y}_{ij.} / (n_u n_v) - \sum_{i \in H_u} \bar{y}_{i..} / n_u - \sum_{j \in J_v} \bar{y}_{.j.} / n_v + \bar{y}_{...} \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$Var(\hat{\mu}_{ij}) = \frac{\sigma^2}{r} \left\{ \frac{a+b-1}{ab} + \frac{(a-n_u)(b-n_v)}{ab n_u n_v} \right\} \quad (2.4)$$

とくに $r=1$ のときにはつぎのような分散 σ^2 の推定量が得られる。

$$\hat{\sigma}^2 = \sum_i \sum_j (y_{ij} - \hat{\mu}_{ij})^2 / f \quad (2.5)$$

$$= \{T - 1\} \hat{\sigma}^2 / f ,$$

$$T = \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{..})^2 ,$$

$$f = (a-1)(b-1) - (A-1)(B-1) .$$

(2.3), (2.5) で得られた μ , σ^2 の推定量は, 群分けした群毎に加法模型を仮定したときに得られる推定量より精度の良いものであることを注意する。

以下では, 上記のような群分けを得るための多重比較法について論ずる。

3. 交互作用の多重比較, $r \geq 2$ の場合

仮説

$$H(m; n): L(m; n) = 0, \quad m, n = 1, \dots, a$$

の同時検定には

$$\begin{aligned} S(m; n) &= r \|\hat{L}(m; n)\|^2 \\ &= \frac{r}{2} \sum_j \{ \bar{y}_{mj.} - \bar{y}_{m..} - (\bar{y}_{nj.} - \bar{y}_{n..}) \}^2 \end{aligned}$$

が

$$T = r \sum_i \sum_j (\bar{y}_{ij} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{...})^2 \quad (3.1)$$

の成分であることを用い, $S(m; n)$ を

$$(a-1)(b-1) \hat{\sigma}^2 F \{ (a-1)(b-1), ab(n-1); \alpha \} \quad (3.2)$$

と比較することによって行う。ただし, $\hat{\sigma}^2$ は通常の不偏分散である。

実際上の手順としてはすべての (3.2) 通りの組合せに対して $S(m; n)$ を計算し, それを $a \times a$ 行列に配列する。これを二乗距離の行列と呼ぶ。距離の近いもの同士を 1 群にまとめ, 距離の遠いものは異なる群に属するよう群分けを行う。とくに有意差有り と判定されたもの同士は異なる群に属するようになるが, 必ずしも有意でなくてもある程度距離があるものは異なる群にわけ, つぎの群間の二乗距離を計算する。

簡単のため最初の p_1 行, 引き続き p_2 行を群にまとめたときの群間の交互作用および二乗距離の定義を記す。

$$\begin{aligned} & L(1, \dots, p_1; p_1+1, \dots, p_1+p_2) \\ &= \{ p_1 p_2 (p_1+p_2) \}^{-\frac{1}{2}} \{ (p_2, \dots, p_2, -p_1, \dots, -p_1, 0, \dots, 0) \otimes P'_b \} \mu \\ & S(1, \dots, p_1; p_1+1, \dots, p_1+p_2) \\ &= r \| L(1, \dots, p_1; p_1+1, \dots, p_1+p_2) \|^2 \\ &= \frac{2 p_1 p_2}{p_1+p_2} \cdot \frac{r}{2} \sum_{j=1}^{p_2} \left\{ \frac{1}{p_1} \sum_{i=1}^{p_1} (\bar{y}_{ij} - \bar{y}_{i..}) - \frac{1}{p_2} \sum_{i=p_1+1}^{p_1+p_2} (\bar{y}_{ij} - \bar{y}_{i..}) \right\}^2 \end{aligned} \quad (3.3)$$

(3.3) も明らかに $T(3.1)$ の成分であるから, (3.2) と比較して有差性検定を行うことができる。

さらに, T の成分であることを保ちつつ直交する群間交互作用平方和を追加することができる。たとえば上記2群のほかには群 $(p_1 + p_2 + 1, \dots, p_1 + p_2 + p_3 (=a))$ を考えよう。このとき,

$$\begin{aligned} & S(1, \dots, p_1; p_1 + 1, \dots, p_1 + p_2) + S(1, \dots, p_1 + p_2; p_1 + p_2 + 1, \dots, a) \\ &= S(1, \dots, p_1; p_1 + p_2 + 1, \dots, a) + S(1, \dots, p_1, p_1 + p_2 + 1, \dots, a; p_1 + 1, \dots, p_1 + p_2) \\ &= S(p_1 + 1, \dots, p_1 + p_2; p_1 + p_2 + 1, \dots, a) + S(1, \dots, p_1; p_1 + 1, \dots, a) \end{aligned}$$

は T の成分であるから, これが (3.2) 式の値を越えるとき3群への群分けが有意であることが示唆される。この手順によって多重比較に伴う検出力の低下を防ぐことができるが, あまり群の数が多くなるような場合には, 変数変換の工夫などがより適切な手段となるであろう。

4. 交互作用の多重比較, $r=1$ の場合

不偏分散 $\hat{\sigma}^2$ が得られないので3節の手法は用いることができない。しかしながら, つぎの定理によって任意の2群間の二乗距離 (3.3) は仮説 $H_0(1.1)$ の下で, ある Wishart 行列の最大根でおさえられることがわかる。

定理 二乗和

$$\| \{ (a_1, \dots, a_a) \otimes P_b' \} \}_\theta \|^2 \quad (4.1)$$

の $\alpha = (a_1, \dots, a_a)'$ に関する, 条件 $\sum a_i = 0, \sum a_i^2 = 1$ の下での最大値は Wishart 分布

$$W \{ \sigma^2 I_{\min(a-1, b-1)}, \max(a-1, b-1) \}$$

に従う Wishart 行列の最大根に一致する。

証明 略

(3.3)式あるいはその特別な場合である $S(m; n)$ はすべて (4.1)式で α を特別に選んだものになっていることに注意する。実際上は σ^2 を消去するために (4.1) を T で除いた

$$\max_{\substack{\sum a_i = 0 \\ \sum a_i^2 = 1}} \| \{ (a_1, \dots, a_a) \otimes P_b' \} \}_\theta \|^2 / T$$

について有差点 u_α が求められている。検定には

$$P_2 [S \geq \{ u_\alpha / (1 - u_\alpha) \} (T - f_1) \mid H_0] \leq \alpha$$

という関係を用いる。ただし, S は任意の群内二乗距離であり, f_1 は (r, n) 要素が

$$\sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{.j} + \bar{\bar{y}}_{..}) (y_{kj} - \bar{y}_{k.} - \bar{y}_{.j} + \bar{\bar{y}}_{..})$$

である行列の最大根である。

5. 水準に順序がある場合

序論で述べたように，行列の両方に順序がある場合，その一方たとえば列だけ順序がある場合に行をわける場合，列を分ける場合等の種類がある。ここでは列だけに順序がある場合に，行を群分ける方法について述べる。この場合に興味ある交互作用として次のようなものを提案した (1978, *Biometrika*)。

$$\eta = (P_a' \otimes P_b^{*'}) \mu \quad (5.1)$$

ただし， $P_b^{*'}$ は m 行が $\{mb(b-m)\}^{\frac{1}{2}} \underbrace{(b-m, \dots, b-m)}_m, \underbrace{-m, \dots, -m}_{b-m}$

で与えられる $(b-1) \times b$ 行列である。 $P_b^{*'}$ の各行は順序制約をわける convex cone の $b-1$ 個の基底ベクトルをなす。

この定義に基づいて平均ベクトルを次のように表わす。

$$\mu = \mu_1 + (P_a \otimes B^{*-1} P_b^*) \eta \quad (5.2)$$

ただし， $B^* = (j_b : P_b^*) (j_b : P_b^*)'$ である。次式

$$B^{*-1} P_b^* P_b^{*'} = I_b - b^{-1} j_b j_b'$$

によって，(5.2) の定義が well defined であることがわかる。

η の最小二乗推定量は

$$\hat{\eta} = (P_a' \otimes P_b^{*'}) \bar{y}$$

で与えられる。ただし， $\bar{y}$ は $\bar{y}_{ij}$ を斜書式に並べたベクトル

ルである。帰無仮説 H_0 のもとで近似的に

$$P_2 \left\{ \|\hat{\eta}\|^2 \geq (a-1)(b-1) \hat{\sigma}^2 F(\nu, ab(r-1); \alpha) \right\} \leq \alpha \quad (5.3)$$

が成り立つ。ただし, ν は近似自由度で次式で与えられる。

$$\nu = \frac{(a-1)(b-1)^2}{\text{tr}(P_b^* P_b^*)^2}$$

さて, 以上の準備から行間の交互作用要素の定義をつぎのように修正することが考えられる。

$$L^*(m; n) = \left\{ (0 \cdots 0 \frac{1}{\sqrt{2}} 0 \cdots 0 \frac{1}{\sqrt{2}} 0 \cdots 0) \otimes P_b^* \right\} / \mu \quad (5.4)$$

同様に群間の交互作用は

$$\begin{aligned} L^*(1, \dots, p_1; p_1+1, \dots, p_1+p_2) \\ = \{p_1 p_2 (p_1+p_2)\}^{\frac{1}{2}} \left\{ (p_2 \cdots p_2 -p_1 \cdots -p_1 0 \cdots 0) \otimes P_b^* \right\} / \mu \end{aligned} \quad (5.5)$$

で定義する。

群間の二乗距離は

$$\begin{aligned} S^*(1, \dots, p_1; p_1+1, \dots, p_1+p_2) &= \|\hat{L}^*(1, \dots, p_1; p_1+1, \dots, p_1+p_2)\|^2 \\ &= \frac{r p_1 p_2 b}{p_1+p_2} \sum_{m=1}^{b-1} \frac{m}{b-m} \left\{ \sum_{i=1}^{p_1} \left(\sum_{j=1}^m \bar{y}_{ij} / m - \bar{y}_{i..} \right) / p_1 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{i=p_1+1}^{p_1+p_2} \left(\sum_{j=1}^m \bar{y}_{ij} / m - \bar{y}_{i..} \right) / p_2 \right\}^2 \end{aligned} \quad (5.6)$$

で与えられる。

(5.6) 式は明かにかた $\|\hat{\eta}\|^2$ の成分であるから, $r \geq 2$ の

場合、(5.3) 式に基づく節と同様の多重比較法が構成できる。

$r=1$ の場合でも $a \geq b$ なら

$$\max_{\substack{\sum a_i = 0 \\ \sum a_i^2 = 1}} \left\| \{ (a_1, \dots, a_a) \otimes p_b^{*'} \} y \right\|^2$$

の分布が、Wishart 分布 $W(\sigma^2 p_b^{*'} p_b^*, a-1)$ に従う Wishart 行列の最大根に従うことを用いて 4 節と同様の検定が行えるが、そのための数表はまだ作成していない。

6. 結語

ここで論じたのは事前に F 検定を行うこともなく、たとえば Tukey のような特殊なモデルを仮定することもなく構造的な交互作用のモデルを明らかにしようという試みである。Mandel (1971, *Technometrics*) や Johnson & Graybill (1972 a, b) の接近法に較べて結果の解釈が容易であること、および多重比較法として較べたときの検出力が高い等の長を持っている。とくに行または列が本来分類因子であるような場合には、まとめられた群毎に最適な制御因子の水準を与えることができ有用である。本方法は a, b があまり大きくないときにも適用でき、 18×44 2 元配置での成功例が分散分析 (1976) にある。

参考文献

- [1] Hironaka, C. (1973). Multiple comparisons in a two-way layout, Rep. Statist. Res., JUSE 20, 1-10.
- [2] 広津千野 (1976). 分散分析, 東京: 教育出版.
- [3] Hironaka, C. (1978). Ordered alternatives for interaction effects, Biometrika 65, 561-570.
- [4] Johnson, D.E. & Graybill, F.A. (1972a). Estimation of σ^2 in a two-way classification model with interaction, J. Amer. Statist. Assoc. 67, 388-399.
- [5] Johnson, D.E. & Graybill, F.A. (1972b). An analysis of a two-way model with interaction and no replication, J. Amer. Statist. Assoc. 67, 862-868.
- [6] Mandel, J. (1971). A new analysis of variance model for non-additive data, Technometrics 13, 1-18.
- [7] Tukey, J.W. (1949). One degree of freedom for non-additivity, Biometrics 5, 232-242.