

乗法モデルについて

東大 計数工学科 大橋靖雄

実験データの解析といえは、(場合によ、ては適当な変数変換後の)データの構造として、加法モデルを想定するのが普通である。ところが、実験計画法・分散分析法の創始者とも言つべし R.A. Fisher は、初期の論文

Fisher, R.A. and Mackenzie, W.A. (1923), "Studies in crop variation II; The manurial response of different potato varieties,"
J. of Agricultural Science, 13, 311-320.

の中で「加法モデルは明らかに満足できない (evidently unsatisfactory)」と述べ、2元表の解析(パラメータ推定・当てはまりの良さの「検定」)を行なうのに、加法モデル

$$E(X_{ij}) = \alpha_i + \beta_j \quad (1)$$

の代わりに乗法モデル(乗法型の式 product formula と彼は呼んでいる)

$$E(X_{ij}) = \alpha_i \cdot \beta_j \quad (2)$$

を採用している。Fisherは論文中でこのモデルに強い執着を示しているが、不思議なことに、その後の著作に乗法モデルは全く(?)登場してこない。また実験データ解析においても、この種の乗法モデルはほとんど顧みられることなく、むしろ計量心理学の分野でしばしば取りあげられてきた、といってよい。

上記論文の内容を、ほぼ

竹内啓・大橋靖雄(1982),「R.A. Fisher 再検討(3)」,

経済学論集, vol. 48, 102-112.

に従って紹介し、若干の補足と検討を加えたい。

§ 1 "収穫量変動の研究"

このFisherの論文は、"収穫量変動の研究(Studies in crop variation)"という標題の下に発表された一連の論文の第2作目にあたっている。この連作については、その概要を表1にまとめておくが、これらが発表された1921~1929年といえは、実験計画法や分散分析法がFisherによって確立されつつあった時期であり、単に実験計画法の適用事例というのみならず、次のような点で歴史的にも興味のある作品群と言えるだろう:

• いかにも“確立期”らしく、農事試験における実験計画法の意義を繰り返し強調している。また、同種の実験を行なう際の指針となるように、実験の内容を詳述している。

• 1925年の *Statistical Methods for Research Workers* (以下 RW と略す) と 1935年の *The Design of Experiments* (以下 DE と略す) の“タネ”が数多く見出だされる。例えば RW の例 22 は I のデータを用いているし、RW の例 41 と DE の 54 節は、それぞれ II と IV で述べられている実験と全く同じ計画に基づいた実験を扱っている。

Fisher が直交多項式回帰を詳しく調べる契機となったのは、おそらく I のデータであろうし、VI は部分交絡法を用いた極めて初期の例である。

• 細かなことではあるが、II では analysis of variance のかわりに analysis of variation という言葉を用いている。また、II の段階では $\tau = \frac{1}{2} \ln F$ の分布の数表は無かったらしく、標準誤差と実現値を比較している。ちなみに、RW には小さな数表が載せられており、IV ではこれを利用して検定を行なっている。Snedecor による F 分布の数表の作成は、1934 年であった。

このように“収穫量変動の研究”を眺めてみると、II の論文とくに乗法モデルの提唱が異彩を放っていることが理解されよう。

表1 "収穫量変動の研究 (Studies in crop variation)" 概要

発表年	共著者	標題	対象	目的	統計的手法
I 1921 vol. 11 107-135		An examination of the yield of dressed grain from Broadbalk	小麦	70年間における収量の 変化の要因を探る	直交多項式のあはめ 残差の(高次の)系列 相関のたゞ
II 1923 vol. 13 311-320	W.A. Mackenzie	The manurial response of different potato varieties	ジャガイモ	肥料と品種の 交互作用を調べる	2元表への 乗法モデルのあはめ
IV 1927 vol. 13 548-562	T. Eden	The experimental determination of the value of top dressings with cereals	小麦	窒素肥料を追肥する際の 時期・量・種類の交互 作用を調べる	乱塊法
VI 1929 vol. 19 201-213	T. Eden	Experiments on the response of the potato to potash and nitrogen	ジャガイモ	窒素肥料とカリ肥料(硫酸 加・塩化カ)・カリ肥料(塩)の 効果・交互作用を調べる	ラテン方格, 乱塊法 部分交絡法

注1. 発表は いずれも *Journal of Agricultural Science*. ただし, IとIVは
Contributions to Mathematical Statistics, Wiley, 1950. にも 載せら
れている.

注2. IIIとVは それぞれ W.A. Mackenzie と Bh. Balmukand に よ, 7 書かれ, 同じ
雑誌に 発表されている.

§2 ジャガイモの実験 ～論文の概要紹介1～

「肥料に対する反応に品種間差が存在すると，品種や肥料の試験が極めて複雑なものになる．そして過去の試験の結果を現実に応用しようとするとき，大きな危険を併うことになる．品種間差が無ければ，あるいは存在しても軽微ならば，施肥としては一種類の方法のみを用いた試験によって品種間の相対的価値を測るのに充分な証拠が得られるし，逆に一種類の品種のみを用いて，肥料の相対的価値を測ることができる．」

このような問題意識の後，Fisherは論文の要旨を次のように述べている．

「肥料に対する反応に品種間差が存在するかどうかという一般的な問いに対する答えは，勿論ただ一つの作物に関するデータから引き出すことはできない．この論文の主な目的は，(i)どのような種類のデータを用いれば，個々の場合に答えを引き出すのに適切であるか，(ii)そのためにどのような統計的手法を用いればよいか，に読者の注意を喚起することである．」

品種間差についてFisherは明確な説明を与えていないが，おそらく，第 i 品種を第 j 肥料の下で栽培したときの平均的収量 f_{ij} が，第 i 品種（の“主効果”）に対応したパラメータ α_i と第 j 肥料（の“主効果”）に対応したパラメータ β_j それ

それについて単調になる，すなわち二つのパラメータ α, β のそれぞれについて単調な関数 $f(\alpha, \beta)$ を用いて

$$f_{ij} = f(\alpha_i, \beta_j) \quad (3)$$

と表現される状態を“品種間差が無い”と考えていたのだらう。 $f(\alpha, \beta) = \alpha + \beta$ とすれば，“品種間差”の存在は分散分析における通常の意味での交互作用の存在に一致する。しかし Fisher は，“低い収獲量しか上げられないような品種に対して，同じ肥料が高い収獲量の品種と同じだけの増加をもたらすとは誰も期待しないだらう」と述べ，更に（この論文のデータを用いると）加法モデル (1) の下では期待値の推定値が負になるセルが現われることを示して，“（加法性の）仮定の正しくないことは，この事実によって更に強調される」と述べ，“より自然な仮定”として乗法モデル (2) を提唱したのである。

Fisher の用いたデータは，ロザムステッド農事試験場で行なわれた 12 品種のジャガイモのそれぞれに 6 通りの肥料を施した結果である。品種名は ① Up to Date, ② K of K, ③ Kerr's Pink, ④ Timwald Perfection, ⑤ Iron Duke, ⑥ Great Scott, ⑦ Ajax, ⑧ British Queen, ⑨ Nithsdale, ⑩ Epicure, ⑪ Arran Comrade, ⑫ Duke of York であり，施肥法は表 2 に示すように，a. Dunged series（厩肥を施す），b. Undunged

series (厩肥無し) に大きく分けられ、更にそれぞれが 1. Sulphate row (カリを硫酸物で与える)、2. Chloride row (カリを塩化物で与える)、3. Basal row (カリ肥料無し) に分かれています。これら品種、施肥法いずれにおいても“主効果”の違いは「充分大きく、当面の問題を調べるためには極めて適切なデータである」と Fisher は述べている。

実験に用いられた畑は、実験前には同じ施肥がなされており、残存効果を考える必要はなかった。また全体の面積は 0.162 エーカー = 6.55 アールと小さいので、肥沃度の差も無視できた。畑は大きく二つに分けられ、一方に厩肥が施され、他方には施されなかった。(この二つの区画をそれぞれブロックと考えると、ブロック効果と厩肥の効果は交絡していることになる。) それぞれの区画は 36 のプロットに分けられ、更にそれぞれが三つの小プロットに分割された。それぞれの区画の 36 プロットは 12 の品種にそれぞれ 3 プロットずつ割り付けられ、また三つの小プロットにはそれぞれ 3 種の施肥法(1 から 3) が割り付けられた。図 1 に示した配置図を眺めると、品種の割り付けの仕方はランダムとは思えないし、またブロックを構成しているともいえない。また各プロットは縦方向に三つの小プロットに分割され、どのプロットでも施肥法は(図の上から下に) 1, 2, 3 の順で割り付けられてい

AJAX	K OF K	NITHSDALE	GREAT SCOTT	DUKE OF YORK	S
GREAT SCOTT	DUKE OF YORK	ARRAN COMRADE	IRON DUKE	EPIPURE	C
IRON DUKE	EPIPURE	AJAX	K OF K	NITHSDALE	B
K OF K	NITHSDALE	GREAT SCOTT	DUKE OF YORK	ARRAN COMRADE	S
	UP TO DATE	KERR'S PINK	UP TO DATE	BRITISH QUEEN	C
	BRITISH QUEEN	TINWALD PERFECTION	EPIPURE	KERR'S PINK	B
	KERR'S PINK	UP TO DATE	IRON DUKE	AJAX	S
	TINWALD PERFECTION	ARRAN COMRADE	BRITISH QUEEN	TINWALD PERFECTION	C
S-SULPHATE ROW					
C-CHLORIDE ROW					
B-BASAL ROW					

AJAX	K OF K	NITHSDALE	UP TO DATE	DUKE OF YORK	S
GREAT SCOTT	DUKE OF YORK	ARRAN COMRADE	IRON DUKE	EPIPURE	C
IRON DUKE	EPIPURE	AJAX	UP TO DATE	NITHSDALE	B
K OF K	NITHSDALE	GREAT SCOTT	DUKE OF YORK	ARRAN COMRADE	S
	KERR'S PINK	TINWALD PERFECTION	UP TO DATE	BRITISH QUEEN	C
	BRITISH QUEEN	ARRAN COMRADE	EPIPURE	KERR'S PINK	B
	TINWALD PERFECTION	IRON DUKE	AJAX	GREAT SCOTT	S
		KERR'S PINK	BRITISH QUEEN	TINWALD PERFECTION	C
S-SULPHATE ROW					
C-CHLORIDE ROW					
B-BASAL ROW					

図1 (原論文 Diagram 1,2) 7°ロットの配置

表2 (原論文 Table I) 施肥法

	厩肥 トン/エーカー	過磷酸石灰 ハンドレット ウェイト/エーカー	硫酸 ハンドレット ウェイト/エーカー	硫化カリ ポンド/エーカー	塩化カリ ポンド/エーカー
a1	15	4	1.5	184	
a2	15	4	1.5		147
a3	15	4	1.5		
b1		6	2	244	
b2		6	2		197
b3		6	2		

表3 (原論文 Table II) データ

品種	肥料	q1	q2	q3	b1	b2	b3	平均
① UD		25.3	26.0	26.5	23.0	18.5	9.5	21.47
② KK		28.0	27.0	23.8	20.4	17.0	6.5	20.45
③ KP		23.3	24.4	14.2	18.2	20.8	4.9	17.63
④ TP		20.0	19.0	20.0	20.2	18.1	7.7	17.49
⑤ ID		22.9	20.6	20.1	15.8	17.5	4.4	16.89
⑥ GS		20.8	24.4	21.8	15.8	14.4	2.3	16.58
⑦ Aj		22.3	16.8	21.7	12.7	19.6	4.2	16.21
⑧ BQ		21.9	20.9	20.6	12.8	13.7	6.6	16.08
⑨ Nd		18.3	20.3	16.0	11.8	13.0	1.6	13.49
⑩ Ep		14.7	15.6	14.3	12.5	12.0	2.2	11.88
⑪ AC		13.8	11.0	11.1	12.5	12.7	2.2	10.54
⑫ DY		10.0	11.8	13.3	8.2	8.3	1.6	8.86
平均		20.12	19.82	18.62	15.33	15.47	4.47	15.635

るので、実験計画全体を、品種×厩肥を1次単位、施肥法(1, 2, 3)をもう一つの1次単位とした2方分割型の配置と考えることも可能である。しかし、原論文には、品種と肥料の組み合わせについて三つの小プロットの収量を平均した表3が掲載されているのみ(ただしプロット間の平方和1758は与えられている)なので、この観点からの解析は不可能である。

上記のように実験配置、とくにランダム化に関して問題はあるものの、今後は、表3を品種×肥料の2元配置のデータとみなして議論を進めることにする。なお、理由は述べられていないが、K対Kという品種はUmdunged seriesの区画では二つのプロットにしか割り付けられていない。表3のUmdunged series (b1~b3)におけるK対Kの値は二つの小プロットの平均である。ただし表3の“平均”の計算に際しては、この繰り返し数の違いを無視している。

データを提示した後、Fisherは通常の分散分析法の説明を行っている。分散分析法のことをanalysis of variationと呼んでいることは既に述べた。そして、この手法は「収量の期待値が二つの量、すなわち品種を表わす量と施肥法を表わす量との和で表現されるという仮定」の上に成り立っており、この場合は「この仮説は明らかに満足のいかないもの」であり、「手法の説明のために計算して検定しているにすぎ

ないと述べている。

分散分析表を表4に示す。ただし“交互作用”の項は、原論文では“deviations from summation formula”となっている。プロット間の変動の自由度は、繰り返し数の不揃いのため、 $(6 \times 12 - 3) \times 2 + 3 = 141$ となっている。

表4 (原論文 Table III) 分散分析表 (加法モデル)

変 動	自由度	平方和	平均平方	標準偏差
肥 料	5	6,158	1,231.6	35.09
品 種	11	2,843	258.5	16.07
交 互 作 用	55	981	17.84	4.22
プロット間	141	1,758	12.47	3.53
全 体	212	11,740	—	—

ここでプロット間変動を誤差とみてF比を計算すると、肥料、品種、交互作用の順に98.77, 20.73, 1.43となり、主効果は高度に有意、交互作用の有意確率は約4.8%となる。

既に注意したように、この時期にはF分布の表はまだ作成されていなかったもので、Fisherは標準偏差の自然対数の差、すなわち s^2 の値と、その標準誤差を比較することにより、交互作用の検定(加法モデルからのズレの検出)を行なっている。自由度 f の平方和から計算された標準偏差を s とすると

$$V\left(\frac{1}{2} \log s^2\right) \doteq \frac{1}{4s^2} V(s^2) = \frac{1}{2f} \quad (4)$$

だから、今の場合 $(1/282 + 1/110)^{1/2} = 0.1124$ を標準誤差

とすればよい。その値は $\log 4.22 - \log 3.53 = 0.1725$ であり、
 またその標準誤差との比1.59は、標準正規分布の片側5%点、
 1.645より小さくなる。従って Fisher は、この結果を「有意と
 まではいかない」と述べている。F分布の表を用いて正確な
 検定を行なうと有意水準5%で僅かに有意となったが、この
 結果のくい違いは、元の分布の正規性への収束があまり速く
 ないことに帰因している。

なお、上記の分散分析においては、繰り返し数の不揃いは
 無視されている。これを考慮して正確に分散分析を行なって
 みたが、その違いはあまり大きくないので、簡単のため、繰
 り返し数は全て3とみなして議論を進めることにする。

§3 乗法モデルのあてはめ ～論文の概要紹介～

乗法モデル(2)をあてはめるための予備的な検討として、
 Fisherはまず $ab/\bar{x}$ を計算している。ただし a は各品種の平
 均、 b は各施肥法の平均であり、通常の記号を用いるなら、
 これは $\bar{x}_{i..} \cdot \bar{x}_{.j} / \bar{x}_{..}$ と書かれる量を目指している。そして、こ
 の値と表3とを比較して「計算結果は前の(加法モデルに基づ
 く)値より変動が大まいが、観測値にはより一層近づいてい

る。 $ab/\bar{x}$ という公式が最適のあてはめ公式ではないことを考慮すると、加法的な公式よりも乗法的な公式の方がより好ましいことが強く示唆される」と述べている。実際、表5の“分散分析表”をみると、モデルからのズレを表わす項は、乗法モデルの方が小さくなっていることが判る。なお、この場合、 $ab/\bar{x}$ の総平均は $\bar{x}$ ($\bar{\bar{x}}$) に一致するが、平方和の分解公式 (Fisher 流の記号を用いるが、意味は明らかであるう)

$$S(x-\bar{x})^2 = S(x-ab/\bar{x})^2 + S(ab/\bar{x}-\bar{x})^2$$

は成立せず、“全体”の平方和は、表4のそれとは異なっていることを注意しておく。

表5 (原論文 Table V) “分散分析表”

(乗法モデル — $ab/\bar{x}$ に基づく簡便法)

変 動	自由度	平方和	平均平方
計算値(品種・肥料)	16	9,348	
乗法モデルからのズレ	55	873	15.87
プロット間	141	1,758	12.47
全 体	212	11,979	

この“分散分析表”から、Fisherは「この場合は肥料に対する反応において品種間差は無い」と結論する。そして、「この例では、最適な公式を用いてもこの結論が強められるにすぎないが、結論がは、まりしない場合には、最適な公式によ、どの程度あてはまりが改善されるか示しておく必要が

ある」と述べ、その導き方を次のように説明している。

x_{ij} , $i=1, 2, \dots, m$; $j=1, 2, \dots, n$ を観測値としよう。

Fisher のいう “最適な公式” とは

$$\sum_i \sum_j (x_{ij} - a_i b_j)^2 \rightarrow \min \quad (5)$$

を達成する ab のことである。 a_i, b_j それぞれについて微分することによつて、

$$\sum_j b_j x_{ij} = a_i \sum_j b_j^2, \quad i=1, \dots, m \quad (\text{原論文 I 式}) \quad (6)$$

$$\sum_i a_i x_{ij} = b_j \sum_i a_i^2, \quad j=1, \dots, n \quad (\text{“ II 式”)} \quad (7)$$

が導かれる。いずれの式から

$$\sum_i \sum_j x_{ij} a_i b_j = \sum_i a_i^2 \sum_j b_j^2 \equiv \lambda \quad (8)$$

が導かれるので、独立な方程式の数は $m+n-1$ である。これは、すべての a を γ 倍し同時にすべての b を $1/\gamma$ 倍しても $\sum_i \sum_j (x_{ij} - a_i b_j)^2$ が変わらないことから明らかである。いま λ が判れば、

$$\sum_i \sum_j (x_{ij} - a_i b_j)^2 = \sum_i \sum_j x_{ij}^2 - \lambda \quad (\text{原論文 II 式}) \quad (9)$$

から求める最小値（加法モデルからのズレ）が直接得られる。

Fisher は解を求める方法として、 a と b を消去して λ に関する固有方程式を解く “正確な方法” と、（加法モデルの下で）得られている b の値を (6) に代入して a を求め、次にこの a を (7) に代入して b の値を改良する “近似的な方法” とを挙げている。そして、前者は（当時）「極めて面倒なの

で、後者によつて得られた近似解の正確さを確かめるためだけに用いられている。(詳しくは後述する。) こうして得られた "近似解" ab を正確な値と比較してみると、実は小数第1位まで完全に一致している。これは、後述する固有方程式を解いて求められる第1固有値が第2固有値以下と比べて極端に大きいためであらう。一仮に、上記の "近似的な方法" を反復すれば ab は真値に収束するが、その速さは第1固有値の相対的な大きさに依存しており、この場合はそれが充分大きいので、1回の反復で充分な精度が得られているのだらう。

この場合の "分散分析表" を表6に示そう。

表6 (原論文 Table VIII) "分散分析表" (乗法モデル)

変 動	自由度	平方和	平均平方	標準偏差
計算値	16	8,966		
平均の補正				
モデルからのズレ	55	847	15.40	3.92
プロット間	141	1,758	12.47	3.53
全 体	212	11,740		

表5と比較すると、乗法モデルからのズレの平方和は3%減少している。なお、この場合には

$$S(x-\bar{x})^2 = S(x-ab)^2 + S(ab-\bar{ab})^2 + nm(\bar{ab}^2 - \bar{x}^2)$$

という関係が成立しており、右辺第2項が "計算値" の平方和に、第3項が "平均の補正" に対応している。

ここでモデルからのズレを検定するのに、Fisherは通常の
 $z(F)$ 検定をそのまま用いて、

$$z = \log 3.92 - \log 3.53 = 0.1048$$

をその標準誤差 0.1124 と比べて、明らかに有意でないとして
 いる。また F 比を計算すると、 $F = 1.235$ となり、この有意確
 率は 16% である。ところが、乗法型のモデル

$$X_{ij} = \alpha_i \beta_j + \varepsilon_{ij} \quad (10)$$

$$\varepsilon_{ij} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

の下で、モデルからのズレの平方和 $S(x-ab)^2 = \sum (x_{ij} - a_i b_j)^2$
 は、非心 Wishart 行列の (対角和) - (第 1 固有値) に一致
 し、その分布は極めて複雑である。正確な検定はできないよ
 うに思われるが、(誤差分散) σ^2 と α, β 間にある程度の条
 件があれば、 χ^2 分布でかなり良い近似ができるようである。
 この問題については、§5 でもう一度触れることにする。

次に Fisher は、"近似的な方法" の正確さをチェックする
 ために α の値の計算を行なっている。

式 (6), (7) から a を消去すると

$$\sum_j b_j \left(\sum_i x_{ij} x_{ij'} \right) = n b_{j'}, \quad j' = 1, \dots, n$$

という式が得られる。したがって $\sum_i x_{ij} x_{ij'} = c_{jj'}$ とおくと
 方程式

$$\sum_j (c_{jj'} - n \delta_{jj'}) b_j = 0, \quad j' = 1, \dots, n,$$

$$\delta_{jj'} = \begin{cases} 1 & j=j' \\ 0 & j \neq j' \end{cases}$$

が得られる。したがって Λ は行列 $(C_{jj'})$ の (第 1) 固有値となり, 固有方程式

$$\Lambda^6 - (\sum_j C_{jj}) \Lambda^5 + \sum_j \sum_{j'} \begin{vmatrix} C_{jj} & C_{jj'} \\ C_{jj} & C_{jj'} \end{vmatrix} \Lambda^4 - \dots = 0$$

を解いて求められる。(言うまでもないことだが, 現在では固有値を求める効率的な算法が数多く提案されているので, 特別な場合を除けば, 固有方程式を直接解くことはない.)

ここで Fisher は, 「各項はその順に寄与分が小さくなる, ているので, 方程式全体を評価する必要はない」ことに注意する。

また

$$\sum_j C_{jj} = \sum_i \sum_j x_{ij}^2 = n + \sum_i \sum_j (x_{ij} - a_{i.} b_{.j})^2$$

であり, 前の計算で Λ はこれよりわずかに小さい量であることが判っているから, 初めの 2 項, 3 項, 4 項を解いて求まる根が, 順に正, 負, 正の誤差をもつことに気づいたのである。図 2 に, 理

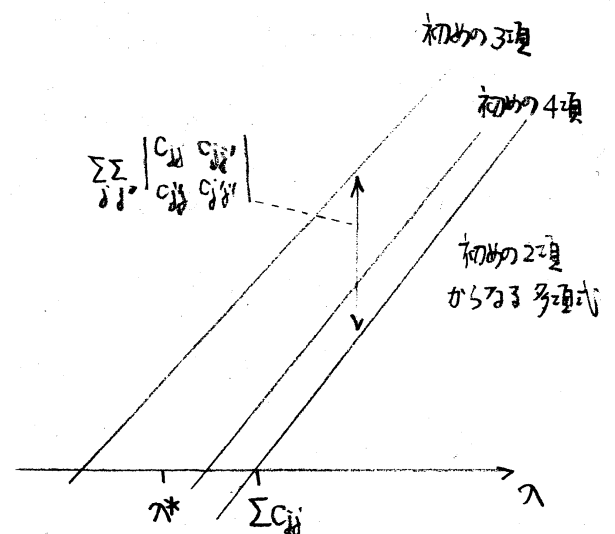


図2 固有値の近似 (直観的説明)

解を容易にするための直観的な説明を与えておく。最初の4項を計算すると

$$\lambda^6 - 20928.01\lambda^5 + 5853407.6454\lambda^4 - 597335955\lambda^3 + \dots =$$

となり、これから Fisher は、

$$\text{第1近似} : \lambda = 20928.01 \quad (\text{これは } \sum_j g_j \text{ に等しい})$$

$$2 : \lambda = 20644.48$$

$$3 : \lambda = 20645.90$$

を得ている。第3近似を用いて $\sum_i \sum_j x_{ij}^2 - \lambda$ を計算すると $20928.01 - 20645.90 = 282.11$ が得られるが、ここで λ が正の誤差を持つことを考えると、乗法モデルからのズレ（繰り返し数を考えて） $3 \sum_i \sum_j (x_{ij} - a_{ij})^2$ は $3 \times 282.11 = 846.33$ より小さくはないはずである。ところが、先に求めた値847は真の値より大きいはずであるから、Fisher は「(847は) 実質的に真値とみなしてよい」と結論づけている。

実は正確に固有値 λ を求めると、(第1から第6の順に)

$$20645.893 \quad 100.548 \quad 80.282 \quad 66.120 \quad 27.004 \quad 8.163$$

が得られる。(20928.01 - 20645.893) $\times$ 3 = 846.351 であるから、Fisher の議論は驚くほど正確である。この問題、あるいは前の a , b の推定において見られた近似計算に対する Fisher の直観力の鋭さは、驚くべきものである。

最後に、Fisher は結論として次の4点を挙げている：

- 「(i) 品種, あるいは施肥の違いによつて生ずる収穫量の差は有意に大きい。
 (ii) 施肥法に対する反応において, 品種間に差は無い。
 (iii) 様々な施肥法の下での各品種の収穫量には, 加法的な公式よりも乗法的な公式の方が良くあてはまる。
 (iv) 変動を分析するために乗法的な公式を求める際には, "近似的な方法" を用いて逐次近似すればよい。"正確な方法" は通常は不要であろう。」

§4 モデルの検討

Fisher は, 加法モデルを用いて解析したとしても, 「施肥法に対する反応において品種間差は無い」と述べているが, 詳しくみると, その有意確率は4.8%になつてゐることを注意した。したがつて5%を有意水準にとるならば, 何らかの交互作用を考える必要が生ずることになる。

一般に, 加法モデルの下では交互作用が現れてモデルが複雑化する場合でも, 他のモデルを用いるとパラメータ数の少い単純な(したがつて解釈のしやすい)ものが得られる可能性がある。このような意味で, 通常用いられてゐる加法モデル

ルの代案として、(たとえ Fisher 自身は捨ててしまったとしても) 乗法モデルは魅力のあるモデルである。適合度検定の統計量の分布なども、もっと調べられるべきであろう。

さて、誤差構造に関して原論文には何ら明確な記載はないが、Fisher が (10) で表現される誤差の加法性を想定していたことは間違いないだろう。これは "自然な" 仮定であろうか？ 期待値と誤差の大きさの間に何らかの関連がある場合も考えられる。たとえば

$$X_{ij} = \alpha_i \beta_j (1 + \varepsilon_{ij}) \quad (\text{ただし } \varepsilon \text{ は } 1 \text{ に比べて小})$$

という、変動係数一定のモデルが合理的な状況も考えられる。本節では、上記のモデルを含むいくつかのモデルをとりあげ、Fisher のデータへのあてはまりの良さについて、かなり探索的な立場から検討してみよう。

3種類のモデル

$$X_{ij} = \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij} \quad (M1)$$

$$X_{ij} = \alpha_i \beta_j (1 + \varepsilon_{ij}) \quad (M2)$$

$$X_{ij} = \alpha_i \beta_j + \varepsilon_{ij} \quad (M3)$$

を考えよう。ε は独立同一分布に従う誤差である。(M1) と (M3) については最小二乗法 (誤差分布が正規のときは最尤法になる) でパラメータを推定する。(M2) については、対数変換後に最小二乗法を適用する方法 (誤差分布が対数正規のときは最

尤法)と

$$\sum_i \sum_j (x_{ij}/a_i b_j - 1)^2 \rightarrow \min$$

を最小にするようにパラメータを推定する方法 (M2)' を採用した。α, β の推定値 a, b (ただし (M2) については

$$\sum_i \sum_j (\log x_{ij} - a_i - b_j')^2 \rightarrow \min$$

の解 a', b' を用いて $a = e^{a'}$, $b = e^{b'}$ とした) を用いて計算される「基準化した残差」

$$(M1) \quad x_{ij} - \hat{x}_{ij} \quad ; \quad \hat{x}_{ij} = a_i + b_j$$

$$(M2) \quad x_{ij}/\hat{x}_{ij} - 1 \quad ; \quad \hat{x}_{ij} = a_i \cdot b_j = \exp(\log \hat{x}_{ij})$$

$$(M3) \quad x_{ij} - \hat{x}_{ij} \quad ; \quad \hat{x}_{ij} = a_i \cdot b_j'$$

$$(M2)' \quad x_{ij}/\hat{x}_{ij} - 1 \quad ; \quad \hat{x}_{ij} = a_i \cdot b_j$$

について、基礎統計量と、以下のあてはまりの良さの規準

$$C1 = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2$$

$$C2 = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 / \hat{x}_{ij}^2$$

$$C3 = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 / x_{ij}^2$$

を計算した結果を表 7 に示す。(C2), (C3) に関し (M2), (M2)' が小さい値を持つのは当然であるが, (M3) などの規準に対し

表 7 残差の基礎統計量とあてはまりの規準

方法 M	C1	C2	C3	最小残差	最大残差	歪 度	尖 度
(1)	328	—	11.72	-2.99	1.81	-0.33	-0.32
(2)	404	2.88	3.19	-2.43	3.16	0.71	1.75
(3)	282	2.65	6.43	-3.32	1.86	-0.36	0.26
(2)'	434	2.38	5.62	-3.10	2.22	-0.48	0.81

注) (M1) では 2 が負になることがあるので、C2 は計算しなかった

ても比較的良いあてはまり)を示すことに注目すべきである。
また“基準化した残差”の正規性については、(M3)が最も良く
次いで(M1)であった。

図3には“基準化した残差”を推定値 $\hat{x}_{ij}$ に対してプロッ
トした残差プロット、図4には“基準化した残差”の正規プ
ロットを示す。ここでは(M2)と(M3)に対応したプロットを示
したが((M2)については $\log x_{ij} - \log \hat{x}_{ij}$ を残差としたが、
前述の定義の残差を用いても傾向は同じである)、(M2)や(M2)
については誤差の一様性がくすれていることと正規性からの
ズレが大まかいことが確認された。(M1)と(M3)については、外
れ値が一つ(Kerr's Pink x A3の施肥)存在するが、その影
響はそれほど大きくなり、誤差の一様性や正規性はほぼ満足さ
れることが判った。

これまでの議論をまとめれば、変動係数が一定というモデ
ルはあてはまらず、Fisherの乗法モデルのあてはまりがやは
り最も良いと言えるだろう。

さて、Fisherがこの論文で乗法モデルの優れていることを
示したにもかかわらず、既に指摘したようにその後このモデ
ルは殆んど顧みられることなく、むしろ加法モデルが用い
られてきた。その最大の理由は、F分布の表が作成されるこ
とによつて、正確な検定が容易にできるようになったことで

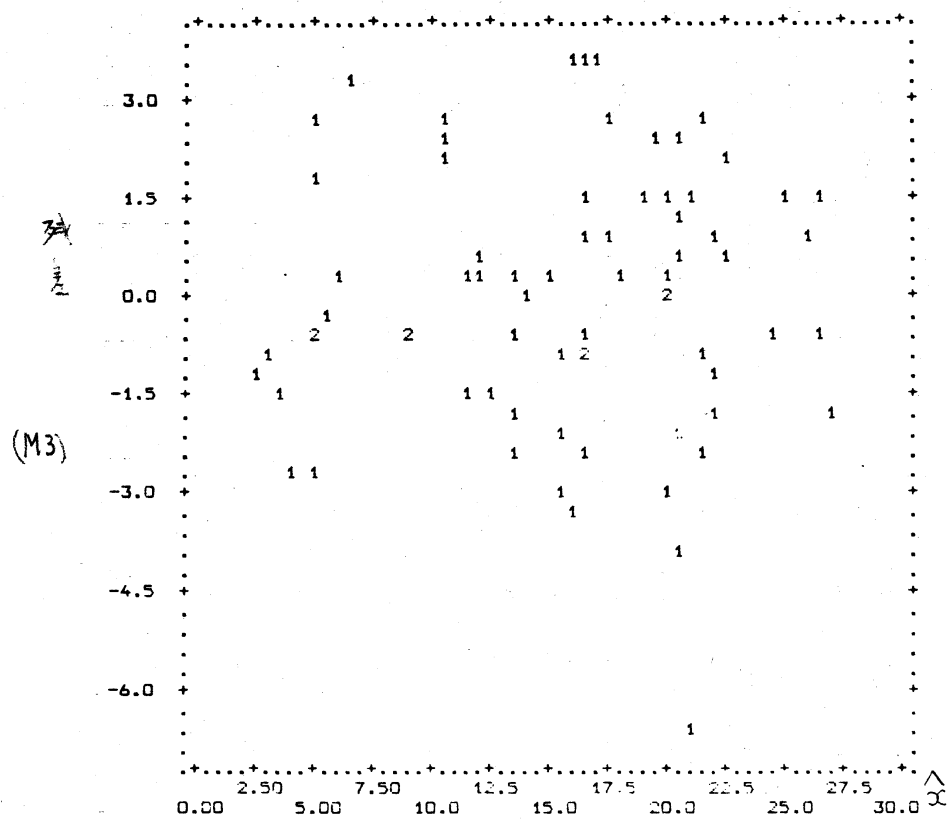
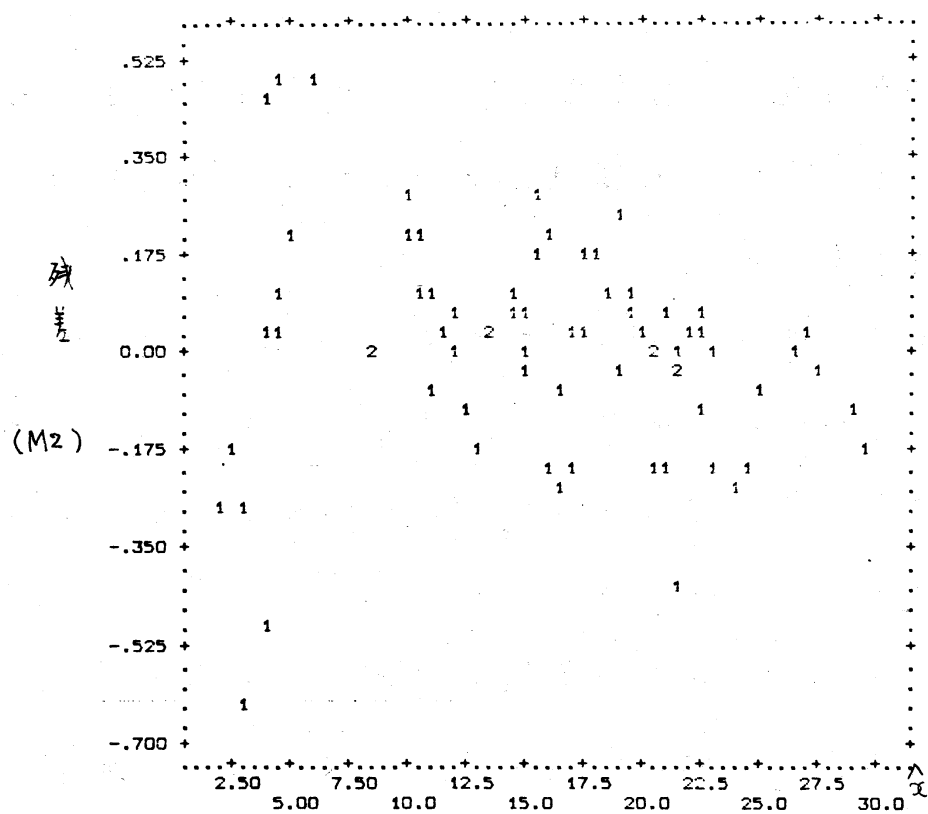
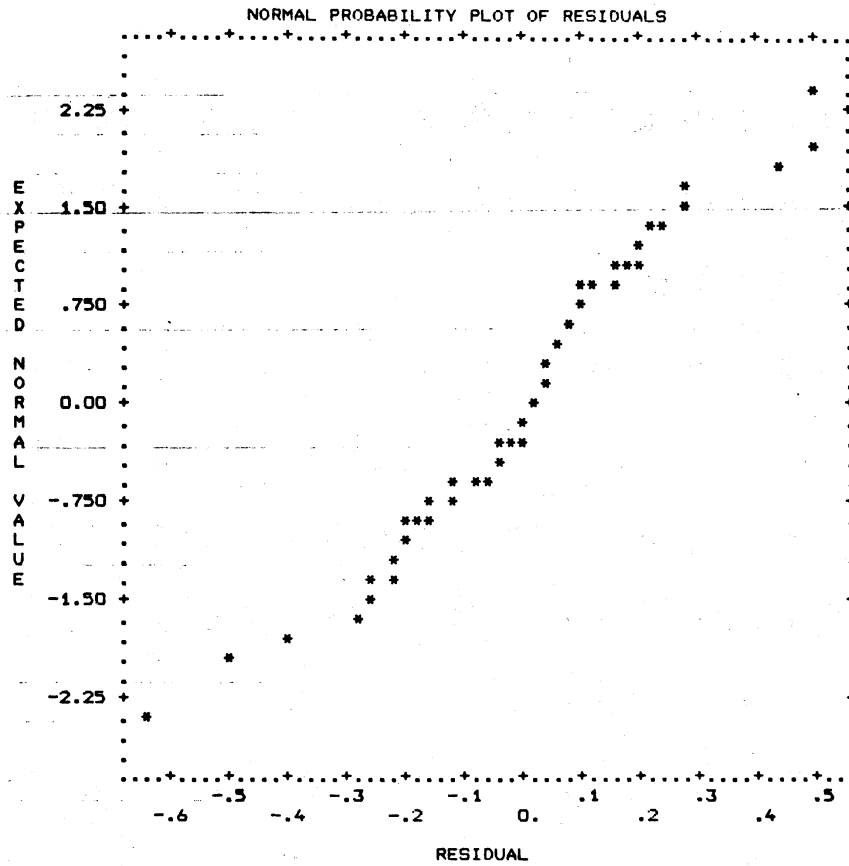


図3 残差のプロット

(M2)



(M3)

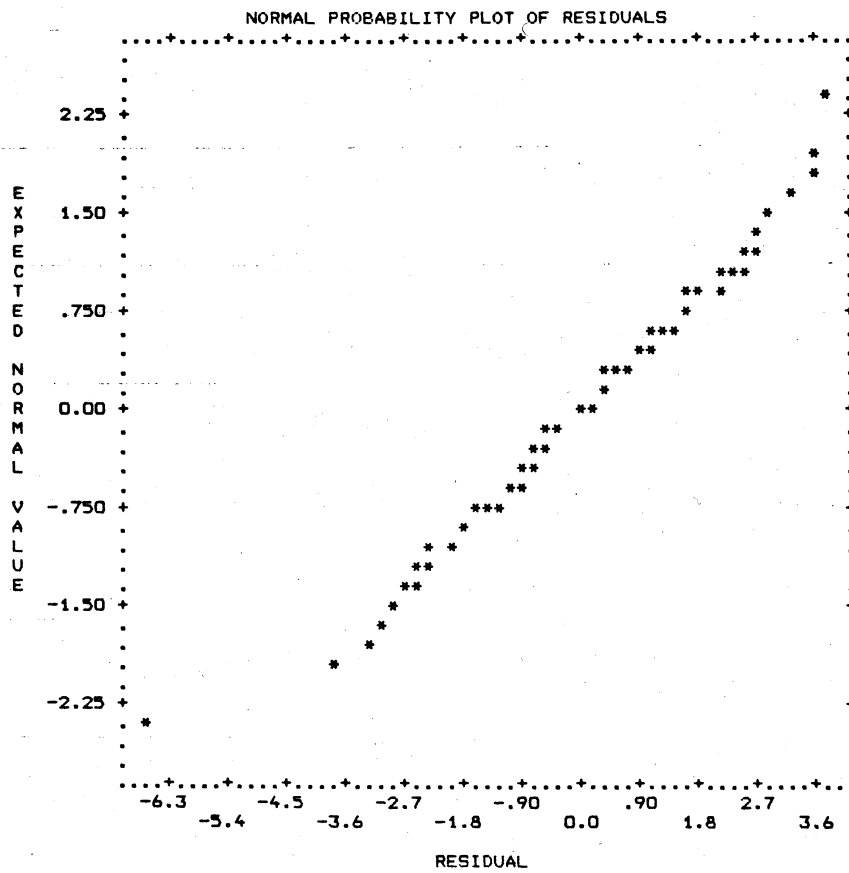


図4 残差の正規確率プロット

あろう。そして加法モデルがあてはまらない場合には、適当な変数変換がしばしば行なわれている。この場合でも、いわゆる "Box-Cox 変換"

$$X \longrightarrow \begin{cases} (X^\lambda - 1)/\lambda & \lambda \neq 0 \\ \log X & \lambda = 0 \end{cases}$$

を行ない、変換後のデータに正規線型（加法）モデルを想定して λ を最尤推定すると、 $\hat{\lambda} = 0.55$ 、漸近的な 95% 信頼区間として $(0.35, 0.75)$ が得られた。また、加法モデルの下での残差 $x_{ij} - \bar{x}_{i.} - \bar{x}_{.j} + \bar{x}_{..}$ を $(\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})(\bar{x}_{.j} - \bar{x}_{..})/\bar{x}_{..}$ に対してプロットする "Tukey の方法" (Tukey (1949), また

Tukey, J.W. (1977), *Exploratory Data Analysis*, Addison-Wesley, Chap. 10.

にも解説がある) によっても、 $\lambda \approx 1/2$ とすべき変換が適当であることが示唆された。そこで

$$\sqrt{x_{ij}} = \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij} \quad (11)$$

というモデルを想定して、残差分析、並びに (C1) ~ (C3) の計算を行なってみた。これらの値は順に 290, 195, 298 となり、また残差分析の結果も問題がないので、(これが "自然" なモデルかどうかは議論のあるところだろうが) このモデルを採用して、結果の解釈を行なうことも可能であろう。

あてはまりがともに良い乗法モデル (M2) と平方根モデル (11) のいずれを選ぶべきか?

実はこれは、包含関係にない（階層的でない）モデル間の選択という、数学的に取り扱いにくい厄介な問題に帰着する。

Atkinson, A.C. (1982), "Regression diagnostics, transformations and constructed variables," *J. of Royal Statist. Soc., B*, 44, 1-36.

は、この問題に対してシミュレーションによるアプローチを試みているが、この方法を適用すると、少なくとも Fisher のデータを生み出すようなパラメータ値（の近傍）では

- (i) 乗法モデル，平方根モデルのいずれも捨てられないこと，
- (ii) この二つのモデルは，互いに識別しにくいという意味で
"近い" こと

が確認された。しかし，いずれのモデルを採用するにせよ，「品種間差は無い」という結論は同じである。

言うまでもないことだが，データ解析においては，不適当なモデルをあてはめたために誤った結論が導き出されているかどうか，十分に注意を払う必要がある。そのためには，適合度の検定統計量という一つの指標に過度に頼ることなく，上記の Atkinson のアプローチや，（とくに 2 元表の解析においては）Tukey のアプローチなどを参考にして，多様な可能性の中から探索的にモデルを構築することが必要であろう。

§5. 補足と注意

交互作用に対する乗法モデル

Fisher の乗法モデルは，そのまゝの形でほとんど顧みられることがなかったが，交互作用に乗法型のモデルを想定する試みはかなり多くなされている。

$$\text{Tukey (1949)} : X_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \lambda(\alpha_i \beta_j) + \varepsilon_{ij} \quad (12)$$

$$\text{Finlay \& Wilkinson (1963)} : X_{ij} = \mu + \alpha_i + (1 + \gamma_i) \beta_j + \varepsilon_{ij} \quad (13)$$

$$\text{Mandel (1969, 1971)} : X_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \sum_{p=1}^k \pi_p u_{pi} v_{pj} + \varepsilon_{ij} \quad (14)$$

などはよく知られたものである。とくに Mandel (1969, 1971) は (Williams (1952) がヒントになっただけ) 主成分分析，あるいは特異値分解によつて交互作用項を抽出する方法を示した論文として有名である。また Gollob (1968) は Mandel とは独立に，Mandel と同種のモデル・解析法を提案し，FANOVA と名づけている。Gollob は Fisher の研究に言及しているが，Gollob がとくに「有益な suggestion をしていただいた」と感謝している。F. J. Anscombe は Fisher の乗法モデルをよく知っており，竹内啓教授に「Fisher は加法モデルで分散分析を考える前に，乗法モデルによる解析も考えていた」と話したことがあるそうである。

Mandel のモデル (14) は，2 元表の解析に広く応用されてい

る。筆者の目についた興味深い事例としては

奥野他(1971): イネの適応性試験 (29品種 $\times$ 14環境)

Freeman (1975): カリフラワーの適応性試験 (57品種 $\times$ 46環境で計 2622セルのうち 1293のみが観測されている)

Efron (1980): 薬品レベル i の下で人 j について測定されたリンパ球水準 x_{ij} (対数値) の分析

などが挙げられる。

さて、モデル (4) において $k=1$ としたものは、Johnson & Graybill (1972) が詳しく検討を行なっている。加法モデルの下での残差を

$$z_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_{i.} - \bar{x}_{.j} + \bar{x}_{..}$$

とおくと、(4) と誤差の正規性の下で (ただし $\sum u_i^2 = \sum v_j^2 = 1$, $\sum u_i = \sum v_j = 0$ という制約を課す) $\lambda \neq 0$ の最尤推定量 $\hat{\lambda}_1$ は

$$\text{行列 } (z_{ij}) \text{ の第 1 特異値} = \left\{ \text{行列 } (z_{ij})(z_{ij})' \text{ の第 1 固有値} \right\}^{1/2}$$

になり、 u, v の最尤推定量は $\hat{\lambda}_1$ に対応した固有ベクトルとなる。なおこれらは、 $\sum_i \sum_j (z_{ij} - \hat{z}_{ij})^2 \rightarrow \min$ とする最小二乗解でもある。

モデル (4) ($k=1$) と誤差の正規性の下で

$$H_0: \lambda = 0$$

$$H_1: \lambda \neq 0$$

に対して検定する尤度比検定統計量は

$$R = \hat{\sigma}_1^2 / \sum_{i,j} \hat{\sigma}_{ij}^2$$

と同等なものになるが、この有意点は Johnson & Graybill (1972)

(ベータ分布による近似と一部正確な積分計算) によつて与

えられている。Mandel (1969) は $\hat{\sigma}_1^2 / \sigma^2$ を χ^2 変量とみなし、そ

の自由度 (期待値) をシミュレーションによつて求めている。

なお Krzanowski (1979) は Johnson & Graybill の近似の精度を検討している。

Okamoto (1972) は、主成分分析を応用して 2 元表を分析する方法として

$$\left. \begin{array}{l} X_{ij} - \bar{X}_{i.} - \bar{X}_{.j} + \bar{X}_{..} \\ X_{ij} \\ X_{ij} - \bar{X}_{.j} \\ X_{ij} - \bar{X}_{i.} \end{array} \right\} = \sum_p \lambda_p u_{pi} v_{pj}$$

という 4 通りの手法をまとめ、上の二つをそれぞれ M 法、N 法と呼んだ。(下の二つは通常の R 法、Q 法である。) なお、Mandel (1971) もこれと同様の分析法を提案している。N 法が Fisher の情報モデルに相当している。

特異値分解

任意の $m \times n$ (実) 行列 X は、 m 次ベクトル α と n 次ベク

トル β (ただし $\alpha\alpha' = \beta\beta' = 1$) を用いて

$$X = \sum_{p=1}^k \lambda_p \alpha_p \beta_p' \quad (k = \text{rank}(X)) \quad (15)$$

と分解できる。 $\lambda_1 > \dots > \lambda_k > 0$ は特異値、この分解 (15) は特異値分解 (singular value decomposition) と呼ばれている、この命題は 1939 年に Eckart & Young により証明されたので、Eckart - Young 分解と呼ばれることもある。 $n=m$ のときの同様の命題は 1889 年に Sylvester により証明されているらしい。

行列 $X = (x_{ij})$ に対して

$$\sum_i \sum_j (x_{ij} - a_i b_j)^2$$

を最小にする a, b を求めることは、最小 2 乗 (ユークリッド・ノルム) の意味で、行列 X を最もよく近似する階数 1 の行列を求めることに他ならない。一般に、 $k < \text{rank}(X)$ の行列で最良の近似を得るには、(15) の記号を用いて

$$\sum_{p=1}^k \lambda_p \alpha_p \beta_p'$$

を用いればよいことが判る。これは 1936 年に Eckart & Young により証明された。また Householder & Young (1938) も同様の定理を与え、更に λ, α, β の計算法について述べている。

これらの研究に先立つ十数年前に、既に Fisher に同様の問題意識が見られ、解の一部が得られていることは興味深い。階数が小さい行列で $X = (x_{ij})$ を近似しようという意識が

Fisherにあったかどうか、原論文を読む限り定かたはないが、もし (a_{ij}) という階数 1 の行列で充分な a_{ij} が得られるから、Fisher はどうしたか想像してみるのがおもしろい。あるいは第 2 固有値以下を用いる近似法に気がついて、特異値分解の概念に到達していたかもしれない。

乗法モデルの適合度検定

Fisher の乗法モデルの適合度を検定するための統計量、たとえば

$$\sum_i \sum_j (x_{ij} - a_i b_j)^2 / \sigma^2 \quad \text{や} \quad \sum_i \sum_j (x_{ij} - a_i b_j)^2 / \delta^2 \quad (16)$$

δ^2 は x_{ij} とは独立

の分布理論は難しいことを述べた。実は、同様の問題が Hegemann & Johnson (1976) によっても調べられている。彼らはモデル

$$X_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \lambda_1 u_i v_j + \lambda_2 u_i^2 v_j^2 + \varepsilon_{ij} \quad (17)$$

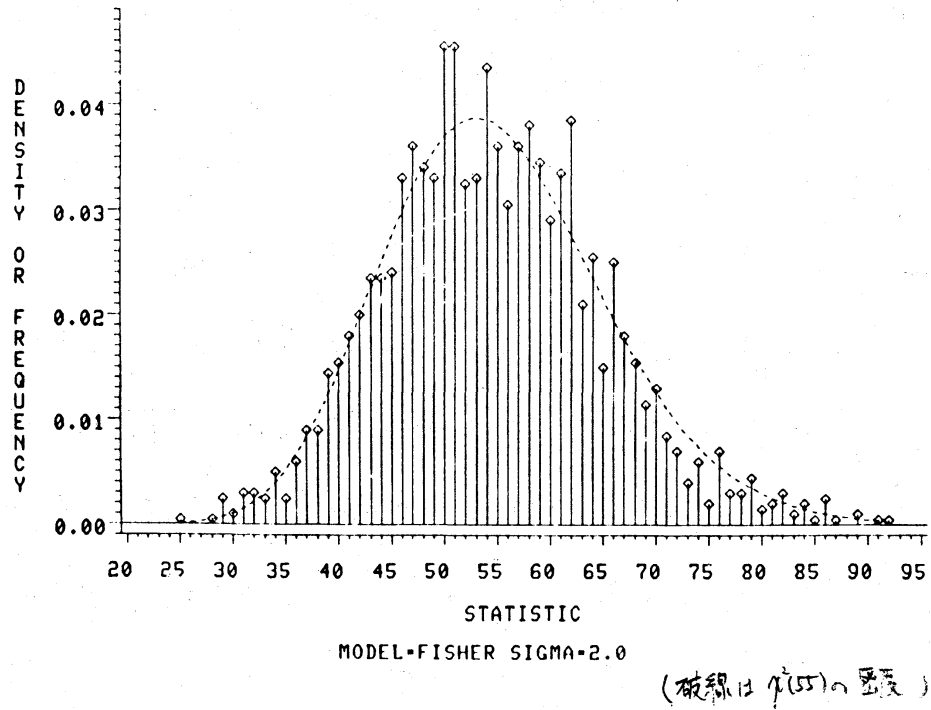
$$\lambda_1 \neq 0$$

の下で $H_0: \lambda_2 = 0$ の検定統計量の分布をシミュレーションによっても調べ、それが λ_1 に大きく依存しないこと (Mandel (1969, p.314) も同様のことを述べている)、 $\lambda_1 = 0$ のときの有意点を用いれば、conservative な検定ができることを実験的に示している。

Fisherの乗法モデルの場合も、ほぼ同様のことと言える
 である。 α, β として、Fisherのデータから計算された a, b を
 用い、 $\sigma = 0.25, 0.5, 1.0, 2.0$ (Fisherのデータでは $\sigma =$
 $3.92/\sqrt{3} = 2.26$) と変化させて $\sum_j \sum_i (\alpha_{ij} - a_i b_j)^2 / \sigma^2$ の分布をシ
 ミュレーションで求めたところ、 σ の値に依らず自由度 55 の
 χ^2 分布とみなしてもよいことが確認された。図5にこの検定
 統計量のヒストグラムと自由度 55 の χ^2 分布に対して描いた確
 率プロットを示す (反復は 2000 回)。同様に、 $\alpha = \beta = 1$ と
 いうモデルの下で $\sigma = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ として同様の実
 験をしたところ、 $\sigma \leq 0.3$ では分布はほとんど変わらず、やは
 り自由度 55 の χ^2 分布とみなしてよいことが判、た。 $\sigma = 0.5$ で
 は、有意点は conservative な方向に (すなわち小さい方向に)
 ズれていく。 $\alpha\beta$ の大半が σ より充分 (たとえば 3 倍以上)
 大きければ、 χ^2 近似の精度は高いことが想像される。

この研究を行なう契機は、竹内啓東大教授が Fisher の論文
 をいくつか紹介してくれたことである。奥野忠一教授は
 この問題に関心を寄せられ、多くの御教示をして下さい。
 有益な助言をして下さいました両教授と、本研究の発表の機会を
 与えて下さった景山三平博士に感謝する次第である。

HISTGRAM OF STATISTIC



Q-Q PROBABILITY PLOT

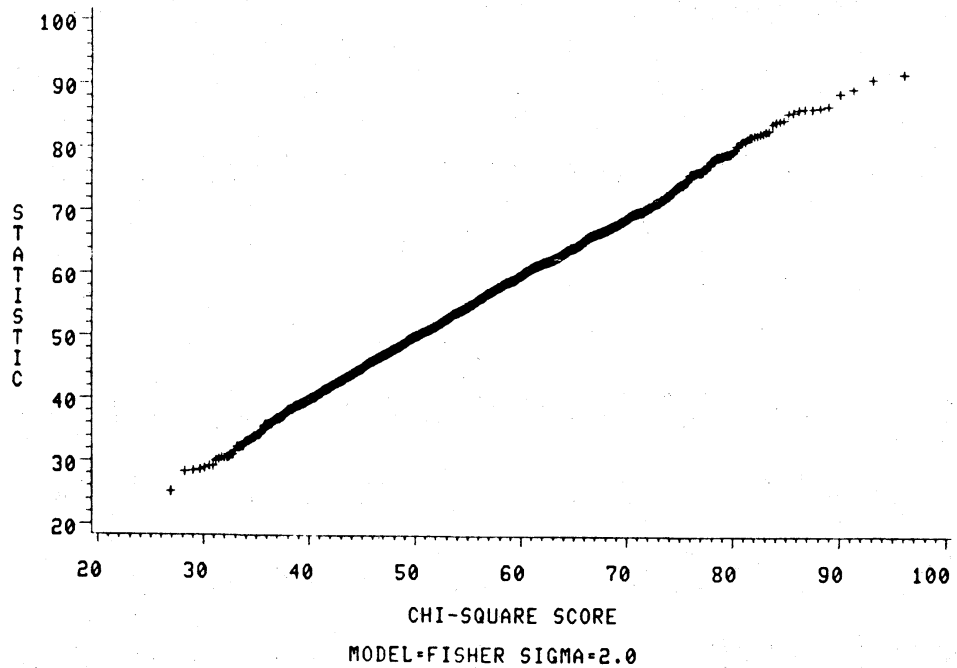


図5 検定統計量の経験分布

REFERENCES

- Eckart, C. and Young, G. (1936), "The approximation of one matrix by another of lower rank," *Psychometrika*, 1, 211-218.
- Eckart, C. and Young, G. (1939), "A principal axis transformation for non-Hermitian matrices," *Bull. Amer. Math. Soc.*, 45, 118-121.
- Efron, B. (1980), "Which of two measurements is better?" in *Biostatistics Casebook*, Wiley.
- Finlay, K.W. and Wilkinson, G.N. (1963), "The analysis of adaptation in a plantbreeding programme," *Aust. Jour. Agric. Res.*, 14, 724-754.
- Freeman, G.H. (1975), "Analysis of interaction in incomplete two-way tables," *Applied Statistics*, 24, 46-55.
- Gollob, H.F. (1968), "A statistical model which combines features of factor analytic and analysis of variance techniques," *Psychometrika*, 33, 73-115.
- Hegemann, V. and Johnson, D.E. (1976), "On analyzing two-way AoV data with interaction," *Technometrics*, 18, 273-281.
- Householder, A.S. and Young, G. (1938), "Matrix approximation and latent roots," *Amer. Math. Monthly*, 45, 165-171.
- Johnson, D.E. and Graybill, F.A. (1972), "An analysis of a two-way model with interaction and no replication," *Jour. Amer. Stat. Assoc.*, 67, 862-868.
- Krzanowski, W.J. (1979), "Some exact percentage points of a statistic useful in analysis of variance and principal component analysis," *Technometrics*, 21, 261-263.
- Mandel, J. (1969), "The partitioning of interaction in analysis of variance," *Jour. Res. of the National Bureau of Standards*, B, 73B, 309-328.
- Mandel, J. (1971), "A new analysis of variance model for non-additive data," *Technometrics*, 13, 1-18.
- Okamoto, M. (1972), "Four techniques of principal component analysis," *Jour. Japan Statist. Soc.*, 2, 63-69.
- 奥野克一他 (1971), "品種特性の環境による変動の評価法について," 『農業技術研究所報告』 A18, 93-147.
- Tukey, J.W. (1949), "One degree of freedom for non-additivity," *Biometrics*, 5, 232-242.
- Williams, E.J. (1952), "The interpretation of interactions in factorial experiments," *Biometrika*, 39, 65-81.