

共分散分析のしくみ

文責：尾崎寿昭、稲葉太一（神戸大学）

0. 問題内容

2変数の直線関係を見る際に、これらの関係に影響を及ぼす第3の変数がある場合、これを共変量として解析する方法として、共分散分析がある。

このレポートでは、これらが、最小二乗法によって求められることと、その際に導出される平方和で F 検定できることを示すのが目的である。

今回は、最小二乗解を求めるための前提となる「データの構造式」をダミー変数を用いて表現し、これを解くことが目的である。

1. 具体的状況

数値例として、「毒性・薬効データの統計解析 p.106」の表 3-3 にある「肝重量と体重の母獣単位の平均値」を紹介する。

対照群と処理群の違いを検定したいとき、「肝重量と体重」の関係を考慮に入れて解析するときに、体重を共変量として薬物の影響を見たいとする。

2. 最小二乗法

群番号を表すために、次のダミー変数を考える。

$$z_1 = 0, \quad z_2 = 1$$

このダミー変数を用いて、この問題を定式化すると以下ようになる。データの構造式は

$$y_{ij} = z_i \alpha_0 + \alpha_1 + \beta(x_{ij} - \bar{x}_{i.}) + \varepsilon_{ij}$$

である。ここで、 α_1 は第2群（処理群）の母平均であり、 α_0 は、2群の母平均の違いである。 β は、2つの群に共通の傾き、即ち、肝重量と体重の関係を表す。このとき、予測値 \hat{y}_{ij} は、

$$\hat{y}_{ij} = \hat{\alpha}_0 z_i + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{ij} - \bar{x}_{i.})$$

となる。したがって、残差 $e_{ij} = y_{ij} - \hat{y}_{ij}$ は

$$e_{ij} = y_{ij} - \hat{y}_{ij} = y_{ij} - \{\hat{\alpha}_0 z_i + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{ij} - \bar{x}_{i.})\}$$

となる。最小二乗法は、残差平方和を最小にするのであるから、次の量が最小化される対象である。

$$Q = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_i} e_{ij}^2 = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_i} [y_{ij} - \{\hat{\alpha}_0 z_i + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{ij} - \bar{x}_{i.})\}]^2$$

3. 正規方程式とその解

残差平方和を、偏微分することで、正規方程式を作る。

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\alpha}_0} Q = -2 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_i} z_i [y_{ij} - \{\hat{\alpha}_0 z_i + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{ij} - \bar{x}_{i.})\}] = 0 \quad \dots\dots (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\alpha}_1} Q = -2 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_i} [y_{ij} - \{\hat{\alpha}_0 z_i + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{ij} - \bar{x}_{i.})\}] = 0 \quad \dots\dots (3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\beta}} Q = -2 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_i} (x_{ij} - \bar{x}_{i.}) [y_{ij} - \{\hat{\alpha}_0 z_i + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{ij} - \bar{x}_{i.})\}] = 0 \quad \dots\dots (3.3)$$

まず、(3.1) より、 $z_1 = 0$, $z_2 = 1$ を考慮すると、

$$\begin{aligned} z_1 \sum_{j=1}^{n_1} [y_{1j} - \{\hat{\alpha}_0 z_1 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{1j} - \bar{x}_{1.})\}] \\ + z_2 \sum_{j=1}^{n_2} [y_{2j} - \{\hat{\alpha}_0 z_2 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{2j} - \bar{x}_{2.})\}] = 0 \quad \dots\dots (3.4) \end{aligned}$$

よって、以下を得る。

$$\sum_{j=1}^{n_2} [y_{2j} - \{\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{2j} - \bar{x}_{2.})\}] = 0 \quad \dots\dots (3.4)'$$

(3.4)' と (3.2) より

$$\sum_{j=1}^{n_1} [y_{1j} - \{\hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{1j} - \bar{x}_{1.})\}] = 0 \quad \dots\dots (3.5)$$

また、(3.4)' と $\sum_{j=1}^{n_2} (x_{2j} - \bar{x}_{2.}) = 0$ より

$$\sum_{j=1}^{n_2} y_{2j} = n_2 (\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1)$$

よって、

$$\bar{y}_2 = \hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1 \quad \dots\dots (3.4)''$$

同様に、(3.5) より

$$\bar{y}_1 = \hat{\alpha}_1 \quad \dots\dots (3.5)'$$

次に、 $\sum_{j=1}^{n_j} (x_{ij} - \bar{x}_{i.}) = 0$ であるから (3.3) より

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_j} (x_{ij} - \bar{x}_{i.}) y_{ij} &= \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_j} (x_{ij} - \bar{x}_{i.}) \{\hat{\alpha}_0 z_i + \hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}(x_{ij} - \bar{x}_{i.})\} \\ &= \hat{\beta} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{n_j} (x_{ij} - \bar{x}_{i.})^2 = \hat{\beta} (S_{xx_1} + S_{xx_2}) \quad \dots\dots (3.6) \end{aligned}$$

これらを解くと、以下が導かれる。

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_0 &= \bar{y}_1 - \bar{y}_2, \quad \hat{\alpha}_1 = \bar{y}_1 \\ \hat{\beta} &= \frac{S_{xy_1} + S_{xy_2}}{S_{xx_1} + S_{xx_2}} \quad (\text{これは (3.6) より分かる}) \end{aligned}$$