数理解析研究所講究録
第526巻 1984年 74-85

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

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

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

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

を検定するのに通常はF検定が用いられる。H_0が採択されればモデルは簡単になるが，H_0が棄却されると一般に自由度 $(a-1)(b-1)$ が大きいため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，交互作用が群間にのみ存在するように分類できれば便利である。ここでは H_0が真である時に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

であるときには，そのまとめられた各群ごとに最適な制御因子の水準を与えることができ，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ある程度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 $\boldsymbol{\gamma}$ をつぎのように導入する。

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_{+} + (P_a \otimes P_b)\boldsymbol{\gamma},$$

ただし,

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

$$\boldsymbol{\mu}_{+} = (\cdots, \bar{\mu}_{i\cdot} + \bar{\mu}_{\cdot j} - \bar{\mu}_{\cdot\cdot}, \cdots)'$$

$$\boldsymbol{\gamma} = (P_a' \otimes P_b')\boldsymbol{\mu}.$$

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 $\boldsymbol{j}_n' = (1, 1, \cdots, 1)$ とも直交する,すなわち

$$\begin{bmatrix} n^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{j}_n' \\ P_n' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{j}_n & \vdots & P_n \end{bmatrix} = I_n$$

$$P_n P_n' = I_n - n^{-1} \boldsymbol{j}_n \boldsymbol{j}_n'$$

である。I_n は n 次元単位行列を表わす。

2行 m, n の $\boldsymbol{\gamma}$ への寄与は

$$\mathbb{L}(m;n) = \left\{ \begin{array}{c} \begin{matrix} 1 & \cdots & m & \cdots & n & \cdots & a \end{matrix} \\ \left(0 \cdots 0 \ \frac{1}{\sqrt{2}} \ 0 \cdots 0 \ \frac{-1}{\sqrt{2}} \ 0 \cdots 0\right) \end{array} \otimes P_b' \right\} \boldsymbol{\mu}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} P_b' (\boldsymbol{\mu}_m - \boldsymbol{\mu}_n), \qquad (2.1)$$

$$\boldsymbol{\mu}_i = (\mu_{i1}, \cdots, \mu_{ib}), \quad i = 1, \cdots, a$$

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，それと直交する群間対比のみでγを表わす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。

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

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 , $u=1, \cdots, A$, J_v , $v=1, \cdots, B$, 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μ, γ, $L(m;n)$の最小二乗法による推定値は，それぞれ定義式でμ_{ij}を$\bar{y}_{ij.}$でお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に∧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。

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

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

とくに $r=1$ のときはつぎのような分散 σ^2 の推定量が得られる。

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

$$= \{T - \|\hat{\theta}\|^2\} / f ,$$

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

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

(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に注意する。

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

$$H(m;n):\ \mathbb{L}(m;n) = 0 \quad , m,n = 1, \cdots, a$$

の同時検定には

$$S(m;n) = r \| \hat{\mathbb{L}}(m;n) \|^2$$

$$= \frac{r}{2} \sum_j \{ \bar{y}_{mj\cdot} - \bar{\bar{y}}_{m\cdot\cdot} - (\bar{y}_{nj\cdot} - \bar{\bar{y}}_{n\cdot\cdot}) \}^2$$

が

$$T = r\sum_i\sum_j\left(\bar{y}_{ij\cdot} - \bar{\bar{y}}_{i\cdot\cdot} - \bar{\bar{y}}_{\cdot j\cdot} + \bar{\bar{\bar{y}}}_{\cdots}\right)^2 \qquad (3.1)$$

の成分であることを用い，$S(m;n)$を

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

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。

実際上の手続きとしてはすべての $\binom{a}{2}$ 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る群に属するように群分けを行う。とくに有意差有りと判定されたもの同士は必らず異る群に属するようにするが，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，引き続く 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。

$$\mathbb{L}(1,\cdots,p_1;\ p_1+1,\cdots,p_1+p_2)$$
$$=\{p_1p_2(p_1+p_2)\}^{-\frac{1}{2}}\{(p_2,\cdots,p_2,-p_1,\cdots,-p_1,0,\cdots,0)\otimes P_b'\}\mu$$

$$S(1,\cdots,p_1;\ p_1+1,\cdots,p_1+p_2)$$
$$=r\,\|\hat{\mathbb{L}}(1,\cdots,p_1;\ p_1+1,\cdots,p_1+p_2)\|^2$$
$$=\frac{2p_1p_2}{p_1+p_2}\cdot\frac{r}{2}\sum_{j=1}^{b}\left\{\frac{1}{p_1}\sum_{i=1}^{p_1}(\bar{y}_{ij\cdot}-\bar{\bar{y}}_{i\cdot\cdot})-\frac{1}{p_2}\sum_{i=p_1+1}^{p_1+p_2}(\bar{y}_{ij\cdot}-\bar{\bar{y}}_{i\cdot\cdot})\right\}^2 \qquad (3.3)$$

(3.3) も明きらかにT(3.1)の成分であるから，(3.2)と比較して有意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内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群のほかに第3群($p_1+p_2+1, \cdots, p_1+p_2+p_3 (=a)$)を考えよう。このとき，

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

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時には，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

$$\| \{(a_1, \cdots, a_a) \otimes P_b'\} y \|^2 \qquad (4.1)$$

の $\alpha = (a_1, \cdots, a_a)'$ に関する，条件 $\Sigma a_i = 0$, $\Sigma a_i^2 = 1$ 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 で除した

$$\max_{\substack{\Sigma a_i = 0 \\ \Sigma a_i^2 = 1}} \| \{(a_1, \cdots, a_a) \otimes P_b'\} y \|^2 / T$$

について有意点 u_α が求められている。検定には

$$P_r [\, S \geq \{u_\alpha / (1 - u_\alpha)\} (T - l_1) \mid H_0 \,] \leq \alpha$$

という関係を用いる。ただし，S は任意の群間二乗距離であり，l_1 は (i, k) 要素が

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

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に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，行を群分けす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)。

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

ただし，$P_b^{*\prime}$ は第 m 行が

$$\{mb(b-m)\}^{-\frac{1}{2}}(\overbrace{b-m,\cdots,b-m}^{m},\overbrace{-m,\cdots,-m}^{b-m})$$

で与えられる $b-1 \times b$ 行列である。$P_b^{*\prime}$ の各行は順序制約を表わす 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つぎのように表わす。

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

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

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

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

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

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

νである。帰無仮説H_0のもとで近似的に

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

が成り立つ。ただし，νは近似自由度で次式で与えられる。

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

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。

$$\mathbb{L}^*(m;n) = \left\{ \begin{array}{c} \\ \left(0\cdots0\right. \end{array} \begin{array}{c} {\scriptstyle m} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{array} \begin{array}{c} \\ 0\cdots0 \end{array} \begin{array}{c} {\scriptstyle n} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{array} \begin{array}{c} {\scriptstyle a} \\ \left.0\cdots0\right) \end{array} \otimes P_b^{*\prime} \right\}\mu \tag{5.4}$$

同様に群間の交互作用は

$$\mathbb{L}^*(1,\cdots,p_1;p_1+1,\cdots,p_1+p_2)$$
$$= \{p_1p_2(p_1+p_2)\}^{\frac{1}{2}}\left\{(p_2 \cdots p_2\ -p_1 \cdots -p_1\ 0\cdots0)\otimes P_b^{*\prime}\right\}\mu \tag{5.5}$$

で定義する。

群間の二乗距離は

$$\overset{*}{S}(1,\cdots,p_1;p_1+1,\cdots,p_1+p_2) = \|\hat{\mathbb{L}}^*(1,\cdots,p_1;p_1+1,\cdots,p_1+p_2)\|^2$$
$$= \frac{rp_1p_2b}{p_1+p_2}\sum_{m=1}^{b-1}\frac{m}{b-m}\left\{\sum_{i=1}^{p_1}\left(\sum_{j=1}^{m}\bar{y}_{ij\cdot}/m - \bar{\bar{y}}_{i\cdot\cdot}\right)/p_1\right.$$
$$\left. - \sum_{i=p_1+1}^{p_1+p_2}\left(\sum_{j=1}^{m}\bar{y}_{ij\cdot}/m - \bar{\bar{y}}_{i\cdot\cdot}\right)/p_2\right\}^2 \tag{5.6}$$

で与えられる。

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

場合に，(5.3)式に基づく3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

$$\max_{\substack{\Sigma a_i=0 \\ \Sigma a_i^2=1}} \| \{ (a_1 \cdots\cdots a_a) \otimes P_b^{*\prime} \} y \|^2$$

の分布が，Wishart分布 $W(\sigma^2 P_b^{*\prime} P_b^{*}, a-1)$ 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，またたとえばTukeyのような特殊なモデルを仮定することもなく構成的に交互作用のモデルを明きらかにしようという試みである。Mandel (1971, Technometrics) や Johnson & Graybill (1972a,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に検出力が高い等の特長を持っている。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 がある程度大きいときにも適用でき，18×44 2元配置での応用例が分散分析(1976)にある。

参考文献

[1] Hirotsu, C. (1973). Multiple comparisons in a two-way layout, Rep. Statist. Res., JUSE 20, 1-10.

[2] 広津千尋 (1976). 分散分析，東京：教育出版.

[3] Hirotsu, 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, 388-394.

[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.