

実験計画法

三中信宏

minaka@affrc.go.jp

<http://cse.niaes.affrc.go.jp/minaka/>

〒305-8604 茨城県つくば市観音台 3-1-3

独立行政法人 農業環境技術研究所 生態系計測研究領域 上席研究員

東京大学大学院 農学生命科学研究科 教授 [生態系計測学]

京都大学大学院理学研究科 連携併任教授 [進化生物学]

東京農業大学大学院 農学専攻 客員教授 [応用昆虫学]

はじめに

ばらつきを調教する－実験を計画する基本的意義

さまざまな要因によって観察データはばらつく。データが示すこの変動の様相を分析することにより、実験処理の変動因としての効果を判定することができる。ある実験処理の効果を調べる目的で実験区を配置することを実験計画と呼ぶ。ある方式で配置された実験区から得られたデータの変動は分散分析によって統計的に分析される。本項目では実験計画とそれに続く分散分析の基本について述べる。

今世紀初頭に生物統計学者ロナルド・A・フィッシャー (Ronald A. Fisher) が数理統計学の基礎理論をつくらうとしていた当時、圃場試験データはもっぱら変量間の相関分析のためだけに利用されていた。フィッシャーは単に相関係数の計算だけではデータの解析方法としては不十分であると考え、反復測定・無作為化・局所管理という実験計画の基礎原理群を定式化した。

フィッシャーの実験計画の考え方の基本は、データのばらつきを調教することにあった。ある実験区から得られる標本からの測定データは、制御された実験処理効果 (主効果・交互作用効果)・制御できない背景環境要因の効果・偶然誤差効果の集積として値がばらつく。したがって、単に観察データ値をそのまま見ているだけでは、いったいどの変動因の効果がどれだけ作用したのかはいつまでたってもわからない。そこで、まずはじめにデータのばらつきを各変動因ごとに分割する必要がある。そして、分割されたばらつき成分をそれぞれ評価できるような実験計画を組む必要がある。

ここで、実験計画という作業には、必ずしも統計学だけでは解決できない側面があることに留意しなければならない。たとえば、圃場試験を考えてみよう。われわれ実験者は、ある程度多くの実験反復を可能にする広さのある、できれば環境的に均質な圃場があってほしいと望む。その希望はうまく実現することもあるし、そうでないこともある。現実的な制約は、数理統計学が要求するような理想的実験環境を必ずしも具現するわけではない。むしろ、現実的に厳しい制約のもとで、いかにして実験目的を達成できる実験計画を組めるかを考えるべきだろう。大規模実験で威力を発揮する直交表に基づいて節約された実験区配置がその良い例である。

ばらつきを定量化する－偏差・平方和・分散

実験計画の根幹はばらつきの調教であると上で述べた。しかし、まずはじめにばらつきをどのように数値として表現するのかを説明する必要がある。観察データの値がばらつくことと認知されるためには、各データ値がそこからばらつく基準値が必要である。ばらつきの測定基準値としては全データ x_i ($i=1,2,\dots,n$) の算術平均値 \bar{x} を採用する。

無作為標本の各データのばらつきは、偏差 $x_i - \bar{x}$ ($i=1,2,\dots,n$) として与えられる。しかし、われわれが関心をもつのは、データ全体のばらつきの程度である。そのための第1段階は、偏差それぞれの平方の総和すなわち偏差平方和（略して平方和） $\sum (x_i - \bar{x})^2$ である。この平方和には自由度という数値が付随する。平方和の自由度とは、偏差がどのくらい自由に变化できるかを表わす数値である。元データ群 x_i ($i=1,2,\dots,n$) それ自身は無作為標本ゆえ自由度 n である。しかし、 n 個の偏差 $x_i - \bar{x}$ ($i=1,2,\dots,n$) の間には $\sum (x_i - \bar{x}) = 0$ という制約式が1つあるので、平方和の自由度はデータ数 n から制約数（ここでは1）を減じた $n - 1$ となる。

あるデータ集合から計算された平方和はそのデータ集合全体のばらつきの程度を表わす。しかし、データ集合間でばらつきの程度を比較するためには、平方和は不適切である。なぜなら、平方和はデータ集合に含まれるデータの個数に影響されてしまうからである。もっと正確に言うならば、平方和を構成する偏差の自由度（偏差個数－1）がデータ集合間で異なる場合には、平方和によってばらつきを比較することができなくなるという欠点がある。

この欠点を回避するためには、平方和の自由度による算術平均すなわち平方和／自由度を平均平方と定義し、この平均平方をもって比較可能なばらつきの尺度とみなせばよい。この平均平方は分散の不偏推定値となっている。したがって、データ集合のばらつきを反映する分散という記述統計量の推定値がここからの主役となる。

ばらつきを分割する－実験計画と構造模型

ある観察データに対して、上の方法で計算された平方和は、データ集合全体の総平均からのばらつきを表わしているので、全平方和と呼ぶ。実験計画とそれに続く分散分析は、この全平方和を構成成分に分割することから始まる。しかし、全平方和の分割のしかたは、実験計画における実験区の配置に全面的に依存している。ここでは、もっとも単純な実験計画である完全無作為化法を例にとり、全平方和の各変動因への分割について説明する。

一般の1要因完全無作為化法に基づく実験計画では、あるひとつの要因に関するいくつかの処理水準を設定し、各処理水準をもつ実験区を複数設定し、しかも実験区の配置を無作為化する。実験区を複数設定することにより、ある実験処理に伴うばらつきを評価できる。実験区配置の無作為化は制御できない背景要因（さまざまな環境要因など）に起因する体系誤差を偶然誤差に転換できる。体系誤差は実験処理効果の判定に影響を与える可能性があるが、無作為化によって偶然誤差に転換してしまえば問題ない。

いま要因の水準数を t とし、実験区の反復数を r と書けば、この実験で観察されるデータ値は x_{ij} ($i=1,2,\dots,t; j=1,2,\dots,r$) と表わせる。ここで x_{ij} は第 i 番目の処理水準の第 j 番目の

観測値であることを意味する。さらに、第 i 番目の行の平均 (すなわち処理平均) を $\bar{x}_{i\cdot}$ と表わし、このデータ集合全体の総平均を $\bar{x}_{\cdot\cdot}$ と表わす。

ある実験計画は観察データの構造モデルを設定することにほかならない。ここで考えている 1 要因完全無作為化法の構造モデルとは、 $x_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}$ と書き下せる。この構造モデルにおいて、 μ , α_i , ε_{ij} はそれぞれ母平均、第 i 処理効果、誤差項である。母平均と処理効果は未知パラメータという定数だが、すべての誤差項 ε_{ij} は独立かつ同一の平均 0, 分散 σ^2 の正規分布にしたがう変量 (確率変数) であると仮定する。したがって、この構造モデルは、第 i 処理水準の観察値 x_{ij} が独立かつ同一に平均 $\mu + \alpha_i$ 、分散 ε_{ij} の正規分布をすると仮定しているわけである。

観察データがこの構造モデルにしたがう正規分布をすると仮定した上で、モデルに含まれる変動因 α_i と ε_{ij} の効果を調べることがここでの目的となる。

上の表記のもとで、データの全平方和は $\sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_{\cdot\cdot})^2$ と計算される。上の構造モデルを変形すると $x_{ij} - \mu = \alpha_i + \varepsilon_{ij}$ となる。左辺は偏差であるから、この式は偏差を処理効果と誤差効果の和として分割することを求めている。処理平均 $\bar{x}_{i\cdot}$ を組み込んで偏差を分割すると $x_{ij} - \bar{x}_{\cdot\cdot} = (\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot}) + (x_{ij} - \bar{x}_{i\cdot})$ となる。全平方和の定義式に代入すると：

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_{\cdot\cdot})^2 &= \sum_i \sum_j \{(\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot}) + (x_{ij} - \bar{x}_{i\cdot})\}^2 \\ &= \sum_i \sum_j (\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot})^2 + \sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_{i\cdot})^2 \end{aligned}$$

と計算される。上式右辺の第 1 項の平方和 $\sum_i \sum_j (\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot})^2$ は、処理平均の総平均まわりのばらつきを表わしており、処理平方和と呼ぶ。一方、第 2 項の平方和 $\sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_{i\cdot})^2$ は、各処理内での観察データの処理平均まわりのばらつきを表わす誤差平方和である。このようにして構造モデルに対応する全平方和の分割が完了する。

全平方和の自由度 (全自由度) は (データ個数) - (総平均制約) = $tr - 1$ である。処理平方和の自由度 (処理自由度) は同様にして (処理平均個数) - (総平均制約) = $t - 1$ となる。誤差平方和の自由度 (誤差自由度) については、(データ個数) - (処理平均制約) = $tr - t$ となる。平方和の分割式：全平方和 = 処理平方和 + 誤差平方和に対応して、自由度についても対応する分割式：全自由度 = 処理自由度 + 誤差自由度が成立することに注意されたい。

ばらつきを評価する - 分散比の意味の直感的理解

全平方和を構成する処理平方和と誤差平方和およびそれぞれに付随する自由度が求められれば、各変動因の平均平方すなわち分散の不偏推定値が次式により計算できる：

$$\begin{aligned} \text{処理平均平方} &= \text{処理平方和} / \text{処理自由度} ; \\ \text{誤差平均平方} &= \text{誤差平方和} / \text{誤差自由度} . \end{aligned}$$

データ $x_{[i,j]}$ が上記構造モデルにしたがって正規分布をする変量であるとき、処理平方和と誤差平方和はそれぞれ処理自由度と誤差自由度に対応する χ^2 二乗分布にしたがう変量となる。ここで、処理平均平方と誤差平均平方の比のもつ直感的意味を考えよう。この比は処理変動 / 誤差変動を意味している。日常感覚で考えたとき、偶然誤差と比べてある実験

処理によって生じたちがいが十分に大きければ、われわれは「実験効果はあった」と判断する。逆に、実験によるちがいが偶然誤差によるばらつきとくらべてさほど差がなければ、「実験効果はなかった」と判定するだろう。この直感的判断に統計学的根拠を与えるのが、次に述べるF分布に基づくF検定である。

一般に統計学的仮説検定においては、棄却を前提とする帰無仮説を設定する。上の完全無作為化法に基づく実験計画の例では、「すべての処理効果はない」すなわち「 $\alpha_i = 0$ 」という帰無仮説を設定する。この帰無仮説のもとで、上述の処理平均平方と誤差平均平方の比（F値と呼ぶ）は分母と分子の自由度をあわせもつF分布（ $F(t-1, tr-t)$ ）にしたがう変量であることが証明されている。F分布の「F」とはフィッシャーのイニシャルである。この平均平方とは分散推定値であるから、このF値は分散比にほかならない。分散比の確率分布に基づく仮説検定（F検定）が分散分析の根幹である。

実際に観察されたデータから計算されたF値が、帰無仮説のもとでのF分布の上でどこに位置するのがF検定の結果を左右する。得られたF値が小さいならば、帰無仮説を棄却することはできない。一方、そのF値が十分に大きければ（上側確率が5%または1%の棄却域に入るとき）、最初に設定した帰無仮説は棄却され、「ある処理効果はゼロではない」という対立仮説を選ぶことになる。実際にどの処理が有意な効果をもつのかは、分散分析ではなく、処理平均間の多重比較という別の統計分析を必要とする。ここで、F値の大小によって実験処理の効果に関するF検定をすることがわれわれの直感的な判断の統計学版であることを確認しよう。

ヒトは高次元空間に適応できるか？

われわれ生物の住む世界は3次元です。時間軸を考慮してもたかだか4次元です。ところが、統計学に足をつっこむと10次元や20次元というまさに「常人の想像を絶する高次元空間」が日常茶飯事のように登場します。しかし、ごく一握りの超人を除く、ほとんどすべての人間にとって多変量統計学が扱う“超”高次元空間は、確実に“生存不可能”な空間であると言えるでしょう。

いまの大学受験生が数学でもっとも頭を痛めている分野の一つは「空間図形」です。大部分の受験生は“たった3次元”の空間図形の問題ですら満足に解けません。彼らにとって「空間図形問題」とは「思考停止問題」と同義語なのです。おそらくこの統計研修の受講生の大部分の方も同様の苦い経験があるだろうと思います。高次元空間には人間の生息を許す場所はないのです。

3次元ですら大半の人間が落ちこぼれます。ましてや4次元以上の高次元空間など何もわからなくても当たり前、何かわかればもうけもの。一変量統計学から多変量統計学への移行で誰もが感じる感覚的ギャップあるいはストレスは「人間は高次元空間には耐えられない」という命題の正しさを示唆しているように思われます。ごく最近になって多次元データのCGを用いた視覚化の方法がようやく研究されるはじめました。これらは、ある意味で人間の多次元知覚能力に限界があることを象徴しているのではないのでしょうか。しかし

"耐高次元性"がないからと言って悲観することはありません。なくて当然だからです。むしろ、"耐高次元性"のない常人が多変量データを解析するにはどうすればいいのかを考えるほうが生産的でしょう。"思考停止"しないための方法としては、次の二つがあります。

(1) 多変量統計学=二変量統計学

多変量統計学での解析の柱は変量間の関係を明らかにすることです。これは二変量間の共分散や相関係数に典型的に見られます。したがって、「まず"二"から始める」というのが、理論を理解する手掛かりになるでしょう。二次元ならばおそらくすべての人が理解できるでしょうから。また、「多変量=100変量, 1000変量」と思いこんで落ち込むよりも、「多変量=二変量」と考えたほうが気分も[少しは]軽くなるでしょう？

(2) 毒をもって毒を制す

多変量統計学の多くの本ではベクトルと行列を用いて式の展開などが書かれており、やはり高校時代の代数幾何での悪夢を引きずる多くの研究者たちの静かな反感を買っています。しかし、ものは考えようです。多変量データにありがちな文字の乱舞や添字の氾濫など見たくもないものをきれいにパックして一まとめにできるのがベクトルや行列です。高次元の耐えられない重さを肩代わりしてくれるのがこれらの道具の役割です。「毒をもって毒を制す」というピッタリの言葉があるではないですか。

たとえば、正規分布の密度関数の式一つをとっても、 m 次元正規分布をベクトルと行列によって表示した

$$f(x) = (2\pi)^{-\frac{m}{2}} |\Sigma|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu) \right\}$$

という式は、「多変量っぽさ」をまったく感じさせません。実際、この式の分散共分散行列 Σ を分散 σ によって、また期待値ベクトルを単一の期待値 μ によって置換すれば、一変量正規分布の密度関数の式

$$f(x) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} |\sigma|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x - \mu) \sigma^{-2} (x - \mu) \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^2} \right\}$$

を導くことができます。

ベクトルや行列をまったく用いないとすると、

$$\begin{aligned} y_1 &= a_1 x_{11} + a_2 x_{12} + \dots + a_n x_{1n} + \varepsilon_1 \\ y_2 &= a_1 x_{21} + a_2 x_{22} + \dots + a_n x_{2n} + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ y_m &= a_1 x_{m1} + a_2 x_{m2} + \dots + a_n x_{mn} + \varepsilon_m \end{aligned}$$

のように、すべての文字やその添字を「ベタ書き」していることになります。多次元の肌触りをもろに感じさせるこの表記法はあまり支持されないでしょう。一方、この式を

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m1} & \dots & x_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_m \end{pmatrix}$$

のように「ピン詰め」にしてパックすると、多次元の"におい"はかなり薄まりますが、まだ文字や添字が透き通って見えてしまいます。そこで、次の式

$$y = X\alpha + \beta$$

のように、ベクトルや行列を用いて完全に「カン詰め」にしてしまえば、式の"多次元色"はまったくなくなってしまいます。残されたのは、ベクトルと行列だけということです。

前置きはこれくらいにして、本論の実験計画に話をすすめることにしましょう。

実験計画とは？

ある会話

実験屋： [少しだけ緊張して] あのう、このデータ、解析してほしいんですけどお。

統計屋： [やや虚勢をはって] 何や統計解析か、ちょっと見せてみ。ふんふん圃場実験データの解析やな。これぐらい自分でやらなアカンがな。ほんまに。

実験屋： [かなり恐縮して] すんません、昔から算数はちょっと....。

統計屋： [勝ち誇ったように] ほんまにしゃーないなあ。まあええわ。それでどんな実験区の配置を使たんや。

実験屋： [キョトンとして] 何ですか、それ？

統計屋： [啞然として] 何ですかやないがな。乱塊法とか完全無作為化法とかいっぱいあるやろ。そのうちどれを使たんかて聞いているんや。

実験屋： [コトの重大さにまだ気付かず、いささかムツとして] そんなことどーでもいいでしょ。データはちゃんとここにあるんだから。あなたもプロだったらこれぐらい解析できるでしょう。

統計屋： [眼が点]

圃場実験や室内実験で得られた観察データから何らかの結論を出さなければならない状況に（しばしば望んでもいないのに）追い込まれることがよくあります。掌からこぼれ落ちるほどの時間とあり余るほどのお金と掃いて捨てるほどの人手が三拍子そろっているという天国のような研究環境にいるならともかく、大多数の研究者が置かれている現状は、もうご存じのように、それとはほど遠いものですね。ともあれ、かぎられた研究資源（資金・時間・人力）のもとで当初の研究目的を達成するためには、的確な実験計画とそれに対応した統計的手法が不可欠です。

こういった問題を解決する目的で作られた実験計画法 (experimental design) と呼ばれる理論は、1) 実験区の配置 (experimental layout) : ある実験処理の組み合わせに対して実験区をどのように分割して配置すればいいのか；2) 分散分析 (analysis of variance) : ある実験区の配置から得られたデータに基づいて実験処理の効果が有意であるかどうかを検定する、という二つのテーマをその中核に置いています。

第1の問題である実験区の配置について考えるときには、まずはじめに研究の目的そのものと研究環境を考慮しなければなりません。研究目的を明確にしなければならないなどということは改めていうまでもないことですが、特に実験区の配置を考えるときには研究目的の違いが実験区の配置の違いに直結します。実験処理の数（要因数とその

水準数) およびブロックを設定するかどうかとか実験区の無作為化をどのように行うかという問題は、実験目的がはっきりして初めて決まることです。したがって、圃場試験ではよくあることですが、長年にわたってある実験処理または品種特性の試験をしなければならぬときは、最初の実験区の配置については十分に検討を重ねる必要があります。もちろん、実験目的だけが配置のしかたを決定する要因ではありません。すでに指摘した資金・時間・人力という現実の研究環境をも考慮をしなければならないのです。ですから、この配置の問題というのは、統計学の理論だけで解決できるわけではありません。

第2の問題である観察データの統計的処理(分散分析)は、上の第1の問題とは異なり、純粹に統計学理論上の問題です。統計理論としての分散分析は、実験処理の効果が有意であるかどうかを見きわめるための方法で、実験計画法の統計学的側面を代表する理論です。しかし、ここで注意していただきたいのは、個々の観察データに対する分散分析のやり方は実験区の配置法と密接に関係しており、たとえ要因や処理の数が同じであっても配置法が異なれば分散分析のプロセスは違ってくるといえる点です。冒頭の会話に象徴されるように、「実験屋」はともすれば観察データさえあれば統計分析できると考えがちですが、そういう考えは甘い(!)。観察データと配置パターンの両方の情報があつてはじめて統計分析ができるのだという点を強調したいと思います。最悪なのは、「適当に」(悪い意味で)実験区を割り振っておいて実験を勝手に始めてしまい、最後の段になって「統計屋」にデータ解析の尻ぬぐいをさせるというとんでもない話があります。そういう「お下のしつけのなつてない実験屋」に圃場試験をする資格はありません。せめて最初の実験計画の段階で統計屋の意見を聞いておくべきだと思います。

実験計画法の諸手法

今回の講義では時間も限られていますから、実験計画法を理論的に深く追究するだけの余裕はありません。ですから、取り上げる実験計画の手法は、もっとも単純な完全無作為化法から始まり、乱塊法・分割区法・細分区法と進めていくことにします。実際の圃場データに基づいて計算をする場合には、計算量が多いためコンピュータを使うべきでしょう。しかし、今回の講義では、できる限界まで「手計算」(電卓の使用はOKですが)でやることにします。それは、実際にコンピュータソフトを使う場合に、そのソフトをblack-box化させず、その中で「何」をやっているのかを少しでも知ってもらおうという教育的配慮とを考えてください。もちろん、研究現場で実際に実験計画法を用いている研究者にしてみれば、「おせっかいな教育的配慮」よりはむしろ「どんなソフトを使えばいいのか?」という点に興味があるだろうと思います。最後の節では、この点についての最新の情報を提供したいと思います。

完全無作為化法

まずはBOX 1を見てください。この例での実験は、6種類の殺虫剤がある作物の収量に与える効果を完全無作為化法によって調べることを目的にしています。したがって、ここでは殺虫剤という1つの要因が7水準(無処理区も含めて)を持っていると考えることができます。反復数はそれぞれの処理に対して4つあります。この実験データを以下に示す分散分析の手順にしたがって計算するというのが最初の演習です。

一般の1要因完全無作為化法の分散分析の手順を示します。

1) 平方和の分解

データの平方和(SS : *sum of squares*)をいくつかの要素に分割するという作業はすべての分散分析に共通する計算です。平均値からの各データのバラツキを表す平方和という量は、実験処理の効果や系統誤差・偶然誤差の影響をすべて含んだ量であると統計学ではみなされています。実験計画法の分散分析では、この平方和を観察されたデータとして、それに含まれるさまざまな変動因(source of variation)を分離していくことが第一の作業です。

いま要因の水準数を t とし、反復数を r とします。このとき、

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ t \end{array} \begin{array}{|ccc} x_{11} & \cdots & x_{1r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{t1} & \cdots & x_{tr} \end{array} \begin{array}{l} T_1 \\ \vdots \\ T_t \end{array}$$

のようなデータ行列が得られます。ここで x_{ij} は i 番目の処理水準の j 番目の観測値であることを意味しています。また T_i は i 番目の行の総和(すなわち処理和)を表しています。データの全平方和(Total SS)を計算すると、つぎのようになります。

$$\begin{aligned} \text{Total SS} &= \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (x_{ij} - \bar{x})^2 \quad \text{ここで全平均} \quad \bar{x} = \frac{1}{tr} \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r x_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r \{(\bar{x}_i - \bar{x}) + (x_{ij} - \bar{x}_i)\}^2 \quad \text{ここで処理平均} \quad \bar{x}_i = \frac{1}{r} T_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r x_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (\bar{x}_i - \bar{x})^2 + 2 \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (\bar{x}_i - \bar{x})(x_{ij} - \bar{x}_i) + \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (x_{ij} - \bar{x}_i)^2 \end{aligned}$$

ここで $2 \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (\bar{x}_i - \bar{x})(x_{ij} - \bar{x}_i) = 0$ だから上式左辺は

$$= \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (\bar{x}_i - \bar{x})^2 + \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (x_{ij} - \bar{x}_i)^2$$

この式の右辺に出現する2つの平方和を以下のように定義します。

$$\text{処理平方和(Treatment SS)} = \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (\bar{x}_i - \bar{x})^2 = r \sum_{i=1}^t (\bar{x}_i - \bar{x})^2$$

$$\text{誤差平方和(Error SS)} = \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (x_{ij} - \bar{x}_i)^2$$

上の式から

$$\text{Total SS} = \text{Treatment SS} + \text{Error SS}$$

という関係の成立が導かれます。この分解に対応して自由度(d.f.: degree of freedom)についても

$$\text{Total df} = \text{Treatment df} + \text{Error df} \quad [tr-1 = t-1 + t(r-1)]$$

という関係が成立します。このように、データの全平方和を分解して処理効果部分と誤差部分に分けることが、分散分析の第一歩になります。

上で述べた平方和という量は、計算は面倒ですが、観測データから計算されるという点から言えば、統計量(statistic: 標本のある関数値)の一種です。ということは、もとのデータの確率分布の型を指定すれば、平方和もまたある確率分布にしたがうことが予想されます。そこで、以下では平方和の確率分布を導くことにより、分散分析の基礎となるいくつかの定理を導くことにします。

2) 確率模型と平方和の分布

完全無作為化法という実験計画法では、実験処理番号*i*と反復番号*j*に対応する観測データ x_{ij} が、次の式で表現される構造模型に従っていると仮定しています:

$$x_{ij} = \mu_i + e_{ij} \quad \text{あるいは} \quad x_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij} \quad \dots \dots (1)$$

ここで、 μ_i は第*i*処理平均、 μ は総平均、 α_i は第*i*処理効果を表しています。したがって、

$$\mu_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r x_{ij} \quad \text{かつ} \quad \mu = \frac{1}{tr} \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r x_{ij}$$

となり、同時に

$$\alpha_i = \mu_i - \mu = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r x_{ij} - \frac{1}{tr} \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r x_{ij} \quad \text{かつ} \quad \sum_{i=1}^t \alpha_i = \sum_{i=1}^t (\mu_i - \mu) = 0$$

となります。さらに、(1)式において e_{ij} という誤差項はある正規分布 $N(0, \sigma^2)$ からの独立かつ同一の分布をする確率変数であると仮定されています。 μ_i は確率変数ではなく母数ですから、結局 x_{ij} は正規分布 $N(\mu_i, \sigma^2)$ からの独立かつ同一の分布をする確率変数であることとなります。

この構造模型のもとで、処理平方和と誤差平方和の期待値を求めてみましょう。(1)式に基づいて、第*i*処理平均 μ_i と総平均 μ の標本推定値 \bar{x}_i と \bar{x} の分布を決めると

$$\bar{x}_i = \mu_i + \bar{e}_i \sim N\left(\mu_i, \frac{\sigma^2}{r}\right); \bar{e}_i \sim N(0, \frac{\sigma^2}{r}) \quad \dots \dots (2)$$

$$\bar{x} = \mu + \bar{e} \sim N\left(\mu, \frac{\sigma^2}{tr}\right); \bar{e} \sim N(0, \frac{\sigma^2}{tr}) \quad \dots \dots (3)$$

となります。

処理平方和(Treatment SS)の期待値は以下のように求められます。

$$\begin{aligned}
E[\text{Treatment SS}] &= E\left[r \sum_{i=1}^t (\bar{x}_i - \bar{x})^2\right] \\
&= r E\left[\sum_{i=1}^t \{\alpha_i - (\bar{e}_i - \bar{e})\}^2\right] \\
&= r E\left[\sum_{i=1}^t \{\alpha_i^2 - 2\alpha_i(\bar{e}_i - \bar{e}) + (\bar{e}_i - \bar{e})^2\}\right] \\
&= r E\left[\sum_{i=1}^t \alpha_i^2\right] + 2r E\left[\sum_{i=1}^t \alpha_i(\bar{e}_i - \bar{e})\right] + r E\left[\sum_{i=1}^t (\bar{e}_i - \bar{e})^2\right] \\
&= r \sum_{i=1}^t \alpha_i^2 + 2r \sum_{i=1}^t \alpha_i E[\bar{e}_i - \bar{e}] + r E\left[\sum_{i=1}^t (\bar{e}_i - \bar{e})^2\right] \quad \dots \dots \dots (4)
\end{aligned}$$

(α_i は母数だから、期待値演算とは無関係)

ここで、

$$E[\bar{e}_i - \bar{e}] = E[\bar{e}_i] - E[\bar{e}] = 0 \quad \dots \dots \dots (5)$$

であり、また、

$$\begin{aligned}
E\left[\sum_{i=1}^t \bar{e}_i^2\right] &= E\left[\sum_{i=1}^t \{(\bar{e}_i - \bar{e}) + \bar{e}\}^2\right] = E\left[\sum_{i=1}^t \bar{e}^2\right] + 2E\left[\sum_{i=1}^t \bar{e}(\bar{e}_i - \bar{e})\right] + E\left[\sum_{i=1}^t (\bar{e}_i - \bar{e})^2\right] \\
\therefore E\left[\sum_{i=1}^t (\bar{e}_i - \bar{e})^2\right] &= E\left[\sum_{i=1}^t \bar{e}_i^2\right] - 2E\left[\sum_{i=1}^t \bar{e}(\bar{e}_i - \bar{e})\right] - E\left[\sum_{i=1}^t \bar{e}^2\right] \\
&= \sum_{i=1}^t \text{Var}[\bar{e}_i] - \sum_{i=1}^t \text{Var}[\bar{e}] \\
&\quad \left(E\left[\sum_{i=1}^t \bar{e}(\bar{e}_i - \bar{e})\right] = \sum_{i=1}^t \bar{e} E[\bar{e}_i - \bar{e}] = 0 \right) \\
&= t \times \frac{\sigma^2}{r} - t \times \frac{\sigma^2}{r} \\
&= \frac{1}{r} (t-1) \sigma^2 \quad \dots \dots \dots (6)
\end{aligned}$$

となります。(5),(6)を(4)式に代入すると、

$$\begin{aligned}
&= r \sum_{i=1}^t \alpha_i^2 + r \times \frac{1}{r} (t-1) \sigma^2 \\
&= r(t-1) \sum_{i=1}^t \frac{\alpha_i^2}{t-1} + (t-1) \sigma^2 \\
&= (t-1) (\sigma^2 + r \sigma_A^2) \quad \dots \dots \dots (7)
\end{aligned}$$

ただし $\sum_{i=1}^t \frac{\alpha_i^2}{t-1} = \sigma_A^2$ とおき、処理分散と呼びます。

誤差平方和(Error SS)についても同様にして、その期待値を計算できます：

$$E[Error SS] = E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (x_{ij} - \bar{x}_i)^2 \right] = E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (e_{ij} - \bar{e}_i)^2 \right] \cdot \cdot \cdot \cdot (8)$$

ここで、

$$\begin{aligned} E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r e_{ij}^2 \right] &= E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r \{(e_{ij} - \bar{e}_i) + \bar{e}_i\}^2 \right] \\ &= E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r e_{ij}^2 \right] + 2E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r \bar{e}_i (e_{ij} - \bar{e}_i) \right] + E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (e_{ij} - \bar{e}_i)^2 \right] \end{aligned}$$

であり、

$$E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r \bar{e}_i (e_{ij} - \bar{e}_i) \right] = E \left[\sum_{i=1}^t \bar{e}_i \sum_{j=1}^r (e_{ij} - \bar{e}_i) \right] = 0$$

を考えるならば、

$$\begin{aligned} E[Error SS] &= E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (e_{ij} - \bar{e}_i)^2 \right] = E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r e_{ij}^2 \right] - E \left[\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r \bar{e}_i^2 \right] \\ &= \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r \text{Var}[e_{ij}] - \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r \text{Var}[\bar{e}_i] \\ &= tr \times \sigma^2 - tr \times \frac{\sigma^2}{r} \\ &= t(r-1)\sigma^2 \cdot \cdot \cdot \cdot (9) \end{aligned}$$

と計算されます。

3) 分散分析：平均平方比のF検定

平方和を対応する自由度で割った値を平均平方(MS: mean square)といいます。完全無作為化法の場合、処理平均平方(Treatment MS)と誤差平均平方(Error MS)という2種類の平均平方を考えることができ、それぞれ

$$\begin{aligned} \text{処理平均平方} &= \frac{\text{処理平方和}}{\text{処理自由度}} \\ \text{誤差平均平方} &= \frac{\text{誤差平方和}}{\text{誤差自由度}} \end{aligned}$$

という関係になります。

(7)式を用いると、処理平均平方(Treatment MS)の期待値が計算できます:

$$\begin{aligned} E[Treatment MS] &= E \left[\frac{Treatment SS}{Treatment d.f.} \right] \\ &= \frac{E[Treatment SS]}{t-1} = \frac{(t-1)(\sigma^2 + r\sigma_A^2)}{t-1} = \sigma^2 + r\sigma_A^2 \cdot \cdot \cdot \cdot (10) \end{aligned}$$

また、(8)式を用いると、誤差平均平方(Error MS)の期待値が計算されます:

$$\begin{aligned}
 E[\text{Error MS}] &= E\left[\frac{\text{Error SS}}{\text{Error d.f.}}\right] \\
 &= \frac{E[\text{Error SS}]}{t(r-1)} = \frac{t(r-1)\sigma^2}{t(r-1)} = \sigma^2 \quad \dots \dots (11)
 \end{aligned}$$

(11)式は、処理平均平方がこの構造模型の母分散の不偏推定値であることを示しています。

帰無仮説 H_0 「処理効果はない」のもとでは、処理平均平方も誤差平均平方もともに母分散の不偏分散推定値となります。この二つの平均平方の比(分散比)に関しては次の定理が重要です。

定理: 2つの平均平方 V_1 と V_2 の自由度がそれぞれ n_1 と n_2 であったとする。このとき

分散比 $F = \frac{V_1}{V_2}$ は、 $F(n_1, n_2)$ で規定される F 分布をする。

データから計算された F 値(calculated F)を統計数表などに載っている F 分布表における F 値(tabular F)と比較することにより、処理効果が有意であるかどうかを統計的に検定することができます。これを F 検定といいます。 F 分布表には、 F 分布の上側5%点と上側1%点がかかれていますが、計算された F 値がそれらの値を越える場合、それぞれ5%有意・1%有意といいます。

このように、分散比をデータから計算して、「処理効果がない」という帰無仮説のもとでの F 分布と照らしあわせることにより検定するという手順は以下に述べる他の実験計画法にも当てはまります。

乱塊法

BOX2(1要因)とBOX3(2要因)を見てください。

完全無作為化法というのは、実験計画法を学ぶ上でのいわば「入門的方法」であり、実際の研究現場でそれが用いられることはあまりないだろうと思われます。そのもっとも大きな理由は、ある程度以上実験の規模(要因や反復の数)が大きくなったときに、完全無作為化法の暗黙の前提である実験場所の「大域的な管理」---つまり背景となる実験環境の均一性を全体として維持すること---が困難になるからであると考えられます。このような大規模な実験を行なうときには、実験場所全体をいくつかの部分(ブロック)に細分化し、それぞれのブロックの中での実験環境を「局所的に管理」する方がより容易でしょう。

ブロックを作るという乱塊法の特徴は、分散分析をする上では、ブロック効果という新しい変動因を持ち込みます。いまブロック(反復)の数が r であるとしますと、全平方和は

$$\sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (x_{ij} - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (\bar{x}_i - \bar{x})^2 + \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (\bar{x}_j - \bar{x})^2 + \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^r (x_{ij} - \bar{x}_i - \bar{x}_j + \bar{x})^2$$

のように分解され、右辺の第2,3項をそれぞれ反復平方和(replication SS)、誤差平方和と規定します。つまり、

$$\text{Total SS} = \text{Treatment SS} + \text{Replication SS} + \text{Error SS}$$

$$\text{Total df} = \text{Treatment df} + \text{Replication df} + \text{Error df}$$

$$[tr-1 = (t-1) + (r-1) + (t-1)(r-1)]$$

という関係が成立することになります。

分割区法

BOX4を見てください。

複数の実験要因を組み合わせた実験計画をするとき、それらの要因が必ずしもすべて「等価」ではないことがあります。これは、例えば管理のしやすさとか研究目的から見た重要性などいくつかの点で要因間に「差」をつけることができるということです。

細分区法

BOX5を見てください。

多要因実験をするとき、個々の要因の主効果それ自身が研究目的ではなく、むしろ要因間の交互作用の解明に主眼がおかれることがあります。「細分区法」は交互作用をより正確に分析するための実験計画法です。

BOX 1

Treatment	Grain Yield, kg/ha				Treatment	
					Total (<i>T</i>)	Treatment Mean
Dol-Mix (1 kg)	2,537	2,069	2,104	1,797	8,507	2,127
Dol-Mix (2 kg)	3,366	2,591	2,211	2,544	10,712	2,678
DDT + γ -BHC	2,536	2,459	2,827	2,385	10,207	2,552
Azodrin	2,387	2,453	1,556	2,116	8,512	2,128
Dimecron-Boom	1,997	1,679	1,649	1,859	7,184	1,796
Dimecron-Knap	1,796	1,704	1,904	1,320	6,724	1,681
Control	1,401	1,516	1,270	1,077	5,264	1,316
Grand total (<i>G</i>)					57,110	
Grand mean						2,040

BOX 2

Treatment, kg seed/ha	Grain Yield, kg/ha				Treatment Total (<i>T</i>)	Treatment Mean
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	Rep. IV		
25	5,113	5,398	5,307	4,678	20,496	5,124
50	5,346	5,952	4,719	4,264	20,281	5,070
75	5,272	5,713	5,483	4,749	21,217	5,304
100	5,164	4,831	4,986	4,410	19,391	4,848
125	4,804	4,848	4,432	4,748	18,832	4,708
150	5,254	4,542	4,919	4,098	18,813	4,703
Rep. total (<i>R</i>)	30,953	31,284	29,846	26,947		
Grand total (<i>G</i>)					119,030	
Grand mean						4,960

1	4	7	10	13	16	19	22
C	E	A	C	F	A	E	A
2	5	8	11	14	17	20	23
D	B	E	D	D	B	C	F
3	6	9	12	15	18	21	24
F	A	F	B	C	E	D	B
Block I		Block II		Block III		Block IV	

BOX 3

Nitrogen Level, kg/ha	Factorial Treatment Combination		
	6966 (V ₁)	P1215936 (V ₂)	Milfor 6(2) (V ₃)
0(N ₀)	N ₀ V ₁	N ₀ V ₂	N ₀ V ₃
40(N ₁)	N ₁ V ₁	N ₁ V ₂	N ₁ V ₃
70(N ₂)	N ₂ V ₁	N ₂ V ₂	N ₂ V ₃
100(N ₃)	N ₃ V ₁	N ₃ V ₂	N ₃ V ₃
130(N ₄)	N ₄ V ₁	N ₄ V ₂	N ₄ V ₃

Rep. I	V ₃ N ₂	V ₂ N ₁	V ₁ N ₄	V ₁ N ₁	V ₂ N ₃
	V ₃ N ₀	V ₁ N ₃	V ₃ N ₄	V ₁ N ₂	V ₃ N ₃
	V ₂ N ₄	V ₃ N ₁	V ₂ N ₀	V ₁ N ₀	V ₂ N ₂

Rep. II	V ₂ N ₃	V ₃ N ₃	V ₁ N ₁	V ₂ N ₀	V ₂ N ₁
	V ₁ N ₃	V ₃ N ₂	V ₁ N ₂	V ₁ N ₄	V ₂ N ₄
	V ₁ N ₀	V ₃ N ₄	V ₂ N ₂	V ₃ N ₁	V ₃ N ₀

Rep. III	V ₁ N ₁	V ₃ N ₀	V ₁ N ₀	V ₃ N ₁	V ₁ N ₄
	V ₂ N ₂	V ₁ N ₂	V ₁ N ₃	V ₂ N ₄	V ₃ N ₄
	V ₂ N ₀	V ₃ N ₂	V ₂ N ₁	V ₂ N ₃	V ₃ N ₃

Rep. IV	V ₁ N ₂	V ₂ N ₂	V ₂ N ₄	V ₁ N ₀	V ₂ N ₀
	V ₁ N ₃	V ₃ N ₁	V ₁ N ₄	V ₁ N ₁	V ₂ N ₃
	V ₃ N ₀	V ₂ N ₁	V ₃ N ₂	V ₃ N ₃	V ₃ N ₄

Nitrogen Level, kg/ha	Grain Yield, t/ha				Treatment Total (<i>T</i>)
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	Rep. IV	
	V_1				
N_0	3.852	2.606	3.144	2.894	12.496
N_1	4.788	4.936	4.562	4.608	18.894
N_2	4.576	4.454	4.884	3.924	17.838
N_3	6.034	5.276	5.906	5.652	22.868
N_4	5.874	5.916	5.984	5.518	23.292
	V_2				
N_0	2.846	3.794	4.108	3.444	14.192
N_1	4.956	5.128	4.150	4.990	19.224
N_2	5.928	5.698	5.810	4.308	21.744
N_3	5.664	5.362	6.458	5.474	22.958
N_4	5.458	5.546	5.786	5.932	22.722
	V_3				
N_0	4.192	3.754	3.738	3.428	15.112
N_1	5.250	4.582	4.896	4.286	19.014
N_2	5.822	4.848	5.678	4.932	21.280
N_3	5.888	5.524	6.042	4.756	22.210
N_4	5.864	6.264	6.056	5.362	23.546
Rep. total (<i>R</i>)	76.992	73.688	77.202	69.508	
Grand total (<i>G</i>)					297.390

Source of Variation	Degree of Freedom	Sum of Squares	Mean Square	Computed <i>F</i>	Tabular <i>F</i>	
					5%	1%
Replication	$r - 1 = 3$					
Treatment	$ab - 1 = 14$					
Variety (<i>A</i>)	$a - 1 = (2)$					
Nitrogen (<i>B</i>)	$b - 1 = (4)$					
<i>A</i> × <i>B</i>	$(a - 1)(b - 1) = (8)$					
Error	$(r - 1)(ab - 1) = 42$					
Total	$rab - 1 = 59$					

BOX 4

N_4	N_3	N_1	N_0	N_5	N_2
-------	-------	-------	-------	-------	-------

Replication I

N_1	N_0	N_5	N_2	N_4	N_3
-------	-------	-------	-------	-------	-------

Replication II

N_0	N_1	N_4	N_5	N_3	N_2
-------	-------	-------	-------	-------	-------

Replication III

N_4	N_3	N_1	N_0	N_5	N_2
V_2	V_1	V_1	V_2	V_1	V_3
V_1	V_1	V_2	V_3	V_3	V_2
V_3	V_2	V_4	V_1	V_2	V_1
V_4	V_3	V_3	V_4	V_1	V_4

Replication I

N_1	N_0	N_5	N_2	N_4	N_3
V_1	V_4	V_3	V_1	V_1	V_3
V_3	V_1	V_1	V_2	V_1	V_2
V_2	V_2	V_1	V_4	V_2	V_1
V_4	V_3	V_2	V_3	V_3	V_1

Replication II

N_0	N_1	N_4	N_5	N_3	N_2
V_4	V_3	V_3	V_1	V_2	V_1
V_2	V_1	V_2	V_3	V_3	V_4
V_1	V_1	V_4	V_2	V_4	V_2
V_3	V_2	V_1	V_4	V_1	V_3

Replication III

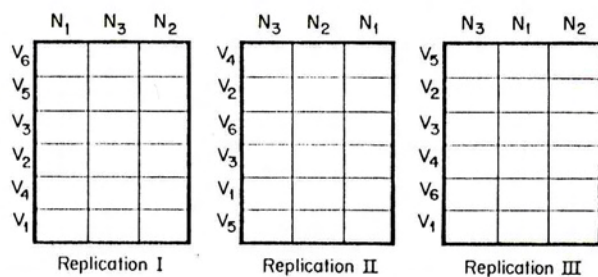
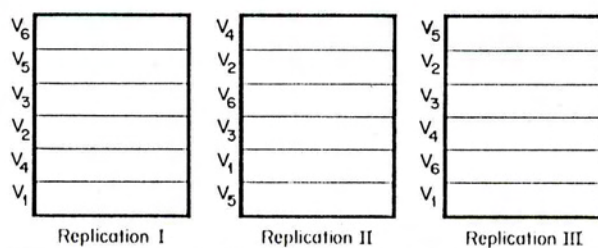
Variety	Grain Yield, kg/ha		
	Rep. I	Rep. II	Rep. III
<i>N₀(0 kg N/ha)</i>			
V ₁ (IR8)	4,430	4,478	3,850
V ₂ (IR5)	3,944	5,314	3,660
V ₃ (C4-63)	3,464	2,944	3,142
V ₄ (Peta)	4,126	4,482	4,836
<i>N₁(60 kg N/ha)</i>			
V ₁	5,418	5,166	6,432
V ₂	6,502	5,858	5,586
V ₃	4,768	6,004	5,556
V ₄	5,192	4,604	4,652
<i>N₂(90 kg N/ha)</i>			
V ₁	6,076	6,420	6,704
V ₂	6,008	6,127	6,642
V ₃	6,244	5,724	6,014
V ₄	4,546	5,744	4,146
<i>N₃(120 kg N/ha)</i>			
V ₁	6,462	7,056	6,680
V ₂	7,139	6,982	6,564
V ₃	5,792	5,880	6,370
V ₄	2,774	5,036	3,638
<i>N₄(150 kg N/ha)</i>			
V ₁	7,290	7,848	7,552
V ₂	7,682	6,594	6,576
V ₃	7,080	6,662	6,320
V ₄	1,414	1,960	2,766
<i>N₅(180 kg N/ha)</i>			
V ₁	8,452	8,832	8,818
V ₂	6,228	7,387	6,006
V ₃	5,594	7,122	5,480
V ₄	2,248	1,380	2,014

Source of Variation	Degree of Freedom	Sum of Squares	Mean Square	Computed <i>F</i>	Tabular <i>F</i> 5% 1%
Replication	$r - 1 = 2$				
Main-plot factor (<i>A</i>)	$a - 1 = 5$				
Error(<i>a</i>)	$(r - 1)(a - 1) = 10$				
Subplot factor (<i>B</i>)	$b - 1 = 3$				
<i>A</i> × <i>B</i>	$(a - 1)(b - 1) = 15$				
Error(<i>b</i>)	$a(r - 1)(b - 1) = 36$				
Total	$rab - 1 = 71$				

Nitrogen	Yield Total (RA)			Nitrogen Total (A)
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	
N_0	15,964	17,218	15,488	48,670
N_1	21,880	21,632	22,226	65,738
N_2	22,874	24,015	23,506	70,395
N_3	22,167	24,954	23,252	70,373
N_4	23,466	23,064	23,214	69,744
N_5	22,522	24,721	22,318	69,561
Rep. total (R)	128,873	135,604	130,004	
Grand total (G)				394,481

Nitrogen	Yield Total (AB)			
	V_1	V_2	V_3	V_4
N_0	12,758	12,918	9,550	13,444
N_1	17,016	17,946	16,328	14,448
N_2	19,200	18,777	17,982	14,436
N_3	20,198	20,685	18,042	11,448
N_4	22,690	20,852	20,062	6,140
N_5	26,102	19,621	18,196	5,642
Variety total (B)	117,964	110,799	100,160	65,558

BOX 5



Nitrogen Rate, kg/ha	Grain Yield, kg/ha		
	Rep. I	Rep. II	Rep. III
	<i>IR8(V₁)</i>		
0 (N ₁)	2,373	3,958	4,384
60 (N ₂)	4,076	6,431	4,889
120 (N ₃)	7,254	6,808	8,582
	<i>IR127-80(V₂)</i>		
0	4,007	5,795	5,001
60	5,630	7,334	7,177
120	7,053	8,284	6,297
	<i>IR305-4-12(V₃)</i>		
0	2,620	4,508	5,621
60	4,676	6,672	7,019
120	7,666	7,328	8,611
	<i>IR400-2-5(V₄)</i>		
0	2,726	5,630	3,821
60	4,838	7,007	4,816
120	6,881	7,735	6,667
	<i>IR665-58(V₅)</i>		
0	4,447	3,276	4,582
60	5,549	5,340	6,011
120	6,880	5,080	6,076
	<i>Peta (V₆)</i>		
0	2,572	3,724	3,326
60	3,896	2,822	4,425
120	1,556	2,706	3,214

Variety	Yield Total (RA)			Variety Total (A)
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	
V_1	13,703	17,197	17,855	48,755
V_2	16,690	21,413	18,475	56,578
V_3	14,962	18,508	21,251	54,721
V_4	14,445	20,372	15,304	50,121
V_5	16,876	13,696	16,669	47,241
V_6	8,024	9,252	10,965	28,241
Rep. total (R)	84,700	100,438	100,519	
Grand total (G)				285,657

Nitrogen	Yield Total (RB)			Nitrogen Total (B)
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	
N_1	18,745	26,891	26,735	72,371
N_2	28,665	35,606	34,337	98,608
N_3	37,290	37,941	39,447	114,678

Variety	Yield Total (AB)		
	N_1	N_2	N_3
V_1	10,715	15,396	22,644
V_2	14,803	20,141	21,634
V_3	12,749	18,367	23,605
V_4	12,177	16,661	21,283
V_5	12,305	16,900	18,036
V_6	9,622	11,143	7,476

Source of Variation	Degree of Freedom	Sum of Squares	Mean Square	Computed F	Tabular F 5% 1%
Replication	$r - 1 = 2$				
Horizontal factor (A)	$a - 1 = 5$				
Error(a)	$(r - 1)(a - 1) = 10$				
Vertical factor (B)	$b - 1 = 2$				
Error(b)	$(r - 1)(b - 1) = 4$				
$A \times B$	$(a - 1)(b - 1) = 10$				
Error(c)	$(r - 1)(a - 1)(b - 1) = 20$				
Total	$rab - 1 = 53$				

分割区法(Split-plot design) --- BOX4の解答

分割区法は、複数の要因の間で「一次要因」(main-plot factor)および「二次要因」(subplot factor)というランク付けを行なう。この際、実験処理の反復数から見て、一次要因の分析精度を犠牲にして二次要因の分析精度を上げるのが目的である。

BOX4では、チッ素施肥量(N)を一次要因A(水準数a=6)とし、イネの品種(V)を二次要因B(水準数b=4)、さらに反復(R)の数(ブロック数)をr=3としている。必要な派生データ表は

- 1) 「一次要因分析」(main-plot analysis)を行なうための「R×A表」
(反復×チッ素: Table 3-8)の作成←元データ表の各チッ素水準の部分行列ごとに列の合計(RA)を計算する
- 2) 「二次要因分析」(subplot analysis)を行なうための「A×B表」
(チッ素×品種: Table 3-9)の作成←元データ表の各部分行列ごとに行の合計(AB)を計算する

の二つである。

Step 1) 基礎数値の計算

総計Gに基づいて「補正項」(CF: correction factor)を計算する:

$$CF = \frac{G^2}{rab} = \frac{394,481^2}{3 \times 6 \times 4} = 2,161,323,047$$

$$\text{全平方和} = \sum X^2 - CF = (4,430^2 + \dots + 2,014^2) - 2,161,323,047 = 204,747,916$$

Step 2) 一次要因分析での平方和計算

$$\begin{aligned} \text{ブロック平方和} &= \frac{1}{ab} \sum R^2 - CF = \frac{1}{6 \times 4} (128,873^2 + \dots + 130,004^2) - 2,161,323,047 \\ &= 1,082,577 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{チッ素平方和} &= \frac{1}{rb} \sum A^2 - CF = \frac{1}{3 \times 4} (48,670^2 + \dots + 69,561^2) - 2,161,323,047 \\ &= 30,429,200 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{誤差(a)平方和} &= \frac{1}{b} \sum RA^2 - CF - \text{ブロック平方和} - \text{チッ素平方和} \\ &= \frac{1}{4} (15,964^2 + \dots + 22,318^2) - 2,161,323,047 - 1,082,577 - 30,429,200 \\ &= 1,419,678 \end{aligned}$$

Step 3) 二次要因分析での平方和計算

$$\begin{aligned}\text{品種平方和} &= \frac{1}{ra} \sum B^2 - CF = \frac{1}{3 \times 6} (117,964^2 + \dots + 65,558^2) - 2,161,323,047 \\ &= 89,888,101\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{チッ素} \times \text{品種平方和} &= \frac{1}{r} \sum AB^2 - CF - \text{品種平方和} - \text{チッ素平方和} \\ &= \frac{1}{3} (12,758^2 + \dots + 5,642^2) - 2,161,323,047 - 89,888,101 - 30,429,200 \\ &= 69,343,487\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{誤差(b)平方和} &= \text{全平方和} - [\text{他のすべての平方和}] \\ &= 204,747,916 - (1,082,577 + 30,429,200 + 1,419,678 + 89,888,101 + 69,343,487) \\ &= 12,584,873\end{aligned}$$

Step 4) 平均平方計算

各平方和を対応する自由度で割って平均平方を求める。

$$\text{ブロック平均平方} = 1,082,577 / (3 - 1) = 541,228$$

$$\text{チッ素平均平方} = 30,429,200 / (6 - 1) = 6,085,840$$

$$\text{誤差(a)平均平方} = 1,419,678 / \{(6 - 1)(3 - 1)\} = 141,968$$

$$\text{品種平均平方} = 89,888,101 / (4 - 1) = 29,962,700$$

$$\text{チッ素} \times \text{品種平均平方} = 69,343,487 / \{(6 - 1)(4 - 1)\} = 4,622,899$$

$$\text{誤差(b)平均平方} = 12,584,873 / \{6(3 - 1)(4 - 1)\} = 349,580$$

Step 5) F値の計算

一次要因分析では誤差(a)平均平方を、二次要因分析では誤差(b)平均平方を分母としてF値を計算する。

$$\text{ブロックF値} = \frac{541,228}{141,968} = 3.81$$

$$\text{チッ素F値} = \frac{6,085,840}{141,968} = 42.87$$

$$\text{品種F値} = \frac{29,962,700}{349,580} = 85.71$$

$$\text{チッ素} \times \text{品種} F \text{値} = \frac{4,622,899}{349,580} = 13.22$$

以上の計算により、Table 3-10の分散分析表が得られる。

Table 3.8 The Replication \times Nitrogen Table of Yield Totals Computed from Data in Table 3.7

Nitrogen	Yield Total (RA)			Nitrogen Total (A)
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	
N_0	15,964	17,218	15,488	48,670
N_1	21,880	21,632	22,226	65,738
N_2	22,874	24,015	23,506	70,395
N_3	22,167	24,954	23,252	70,373
N_4	23,466	23,064	23,214	69,744
N_5	22,522	24,721	22,318	69,561
Rep. total (R)	128,873	135,604	130,004	
Grand total (G)				394,481

Table 3.9 The Nitrogen \times Variety Table of Yield Totals Computed from Data in Table 3.7

Nitrogen	Yield Total (AB)			
	V_1	V_2	V_3	V_4
N_0	12,758	12,918	9,550	13,444
N_1	17,016	17,946	16,328	14,448
N_2	19,200	18,777	17,982	14,436
N_3	20,198	20,685	18,042	11,448
N_4	22,690	20,852	20,062	6,140
N_5	26,102	19,621	18,196	5,642
Variety total (B)	117,964	110,799	100,160	65,558

Table 3.10 Analysis of Variance of Data in Table 3.7 from a 4×6 Factorial Experiment in a Split-Plot Design^a

Source of Variation	Degree of Freedom	Sum of Squares	Mean Square	Computed F^b	Tabular F	
					5%	1%
Replication	2	1,082,577	541,228			
Nitrogen (A)	5	30,429,200	6,085,840	42.87**	3.33	5.64
Error(a)	10	1,419,678	141,968			
Variety (B)	3	89,888,101	29,962,700	85.71**	2.86	4.38
$A \times B$	15	69,343,487	4,622,899	13.22**	1.96	2.58
Error(b)	36	12,584,873	349,580			
Total	71	204,747,916				

細分区法(Strip-plot design) --- BOX5の解答

細分区法は、複数の要因の間の交互作用を高精度に分析することを目標とする。二要因の場合、各要因は等価な「水平要因」(horizontal factor)および「垂直要因」(vertical factor)と呼ばれる。この際、実験処理の反復数から見て、水平要因と垂直要因の分析精度を犠牲にして交互作用の分析精度を上げている。

実験区の配置上の特徴は、水平要因と垂直要因について別々に無作為化配置をすることにある。その結果、単純な二要因乱塊法ともまた前述の分割区法とも異なる配置となることに注意されたい。

BOX5では、チッ素施肥量(N)を垂直要因B(水準数 $b=6$)とし、イネの品種(V)を水平要因A(水準数 $a=3$)、さらに反復(R)の数(ブロック数)を $r=3$ としている。必要な派生データ表は

- 1) 「水平要因分析」を行なうための「A×R表」(品種×反復: Table 3-12)の作成←元データ表の各チッ素水準の部分行列ごとに列の合計(AR)を計算する
 - 2) 「垂直要因分析」を行なうための「B×R表」(チッ素×反復)の作成←元データ表の各部分行列ごとに行の合計(BR: Table 3-13)を計算する
 - 3) 「交互作用分析」を行なうための「A×B表」(品種×チッ素: 3-14)の作成←元データ表の各部分行列ごとに行の合計(AB)を計算する
- の三つである。

Step 1) 基礎数値の計算

$$CF = \frac{G^2}{rab} = \frac{285,657^2}{3 \times 6 \times 3} = 1,511,109,660$$

$$\text{全平方和} = \sum X^2 - CF = (2,373^2 + \dots + 3,214^2) - 1,511,109,660 = 167,005,649$$

Step 2) 水平要因分析での平方和計算

$$\begin{aligned} \text{ブロック平方和} &= \frac{1}{ab} \sum R^2 - CF = \frac{1}{6 \times 3} (84,700^2 + \dots + 100,519^2) - 1,511,109,660 \\ &= 9,220,962 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{品種平方和} &= \frac{1}{rb} \sum A^2 - CF = \frac{1}{3 \times 3} (48,755^2 + \dots + 28,241^2) - 1,511,109,660 \\ &= 57,100,201 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{誤差(a)平方和} &= \frac{1}{b} \sum RA^2 - CF - \text{ブロック平方和} - \text{品種平方和} \\
&= \frac{1}{3} (13,703^2 + \dots + 10,965^2) - 1,511,109,660 - 9,220,962 - 57,100,201 \\
&= 14,922,620
\end{aligned}$$

Step 3) 垂直要因分析での平方和計算

$$\begin{aligned}
\text{チッ素平方和} &= \frac{1}{ra} \sum B^2 - CF = \frac{1}{3 \times 6} (72,371^2 + \dots + 114,678^2) - 1,511,109,660 \\
&= 50,676,061
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{誤差(b)平方和} &= \frac{1}{a} \sum RB^2 - CF - \text{ブロック平方和} - \text{チッ素平方和} \\
&= \frac{1}{6} (18,475^2 + \dots + 39,447^2) - 1,511,109,660 - 9,220,962 - 50,676,061 \\
&= 2,974,909
\end{aligned}$$

Step 4) 交互作用分析での平方和計算

$$\begin{aligned}
\text{品種} \times \text{チッ素平方和} &= \frac{1}{r} \sum AB^2 - CF - \text{品種平方和} - \text{チッ素平方和} \\
&= \frac{1}{3} (10,715^2 + \dots + 7,416^2) - 1,511,109,660 - 57,100,201 - 50,676,061 \\
&= 23,877,980
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{誤差(c)平方和} &= \text{全平方和} - [\text{他のすべての平方和}] \\
&= 167,005,649 - \\
&\quad 9,220,962 + 57,100,201 + 14,922,620 + 50,676,061 + 2,974,909 + 23,877,980 \\
&= 8,232,916
\end{aligned}$$

Step 4) 平均平方の計算

各平方和を対応する自由度で割って平均平方を求める。

$$\text{ブロック平均平方} = 9,220,962 / (3 - 1) = 4,610,481$$

$$\text{品種平均平方} = 57,100,201 / (6 - 1) = 11,420,040$$

$$\text{誤差(a)平均平方} = 14,922,620 / \{(6 - 1)(3 - 1)\} = 1,492,262$$

$$\text{チッ素平均平方} = 50,676,061 / (3 - 1) = 25,338,031$$

$$\text{誤差(b)平均平方} = 2,974,909 / \{(3-1)(3-1)\} = 743,727$$

$$\text{品種} \times \text{チッ素平均平方} = 23,877,980 / \{(5-1)(4-1)\} = 2,387,798$$

$$\text{誤差(c)平均平方} = 8,232,916 / \{(6-1)(3-1)(3-1)\} = 411,646$$

Step 5) F値の計算

各分析ごとに異なる誤差平均平方を分母としてF値が計算される。

$$\text{ブロックF値} = \frac{4,610,481}{1,492,262} = 3.09$$

$$\text{品種F値} = \frac{11,420,040}{1,492,262} = 7.65$$

$$\text{チッ素F値} = \frac{25,338,031}{1,492,262} = 16.98$$

$$\text{品種} \times \text{チッ素F値} = \frac{2,387,798}{411,646} = 5.80$$

以上の計算により、Table 3-15の分散分析表が得られる。

Table 3.15 Analysis of Variance of Data in Table 3.11 from a 3 × 6 Factorial Experiment in a Strip-plot Design^a

Source of Variation	Degree of Freedom	Sum of Squares	Mean Square	Computed F^b	Tabular F	
					5%	1%
Replication	2	9,220,962	4,610,481			
Variety (A)	5	57,100,201	11,420,040	7.65**	3.33	5.64
Error(a)	10	14,922,620	1,492,262			
Nitrogen (B)	2	50,676,061	25,338,031	^c	—	—
Error(b)	4	2,974,909	743,727			
A × B	10	23,877,980	2,387,798	5.80**	2.35	3.37
Error(c)	20	8,232,916	411,646			
Total	53	167,005,649				

^a $cv(a) = 23.1\%$, $cv(c) = 12.1\%$.

^b** = significant at 1% level.

^cError(b) d.f is not adequate for valid test of significance.

Table 3.12 The Replication Variety Table of Yield Totals Computed from Data in Table 3.11

Variety	Yield Total (RA)			Variety Total (A)
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	
V_1	13,703	17,197	17,855	48,755
V_2	16,690	21,413	18,475	56,578
V_3	14,962	18,508	21,251	54,721
V_4	14,445	20,372	15,304	50,121
V_5	16,876	13,696	16,669	47,241
V_6	8,024	9,252	10,965	28,241
Rep. total (R)	84,700	100,438	100,519	
Grand total (G)				285,657

Table 3.13 The Replication \times Nitrogen Table of Yield Totals Computed from Data in Table 3.11

Nitrogen	Yield Total (RB)			Nitrogen Total (B)
	Rep. I	Rep. II	Rep. III	
N_1	18,745	26,891	26,735	72,371
N_2	28,665	35,606	34,337	98,608
N_3	37,290	37,941	39,447	114,678

Table 3.14 The Variety \times Nitrogen Table of Yield Totals Computed from Data in Table 3.11

Variety	Yield Total (AB)		
	N_1	N_2	N_3
V_1	10,715	15,396	22,644
V_2	14,803	20,141	21,634
V_3	12,749	18,367	23,605
V_4	12,177	16,661	21,283
V_5	12,305	16,900	18,036
V_6	9,622	11,143	7,476