デザイン行列について

計算特訓第４回：補助資料３

土居正明

はじめに

0.1　前提知識など

本稿では、「デザイン行列とは何か？」についてご説明します。**第４回その１「最尤推定量２（回帰分析）」**については、解説の部分を読まれていることを前提としてご説明します。また、基本的な行列計算も仮定しています。不安な方は**第４回その２「行列・最小２乗推定量の計算」**の前半部分を先に解いてから読まれることをお勧めします。

0.2　本稿の流れ

回帰分析・分散分析（fixed effect model）・共分散分析・クロスオーバーの解析などについて順に見ていきますが、どのモデルにも共通した流れとして

(i)　データ・モデル式を縦に並べ、ベクトル表記する。

(ii)　パラメータベクトル $\boldsymbol{\beta}$ を作る。

(iii)「平均部分」を $\boldsymbol{\beta}$ と行列 $\mathbf{X}$ の掛け算の形で表す。

として、(iii) で得られた行列 $\mathbf{X}$ をデザイン行列と呼びます。

1　その１：回帰分析

1.1　具体例（単回帰分析）

まずは回帰分析についてです。**「最尤推定量２」**の解説部分でデータ

表１　３人の収縮期血圧と年齢のデータ（i は被験者番号）

被験者番号 (i)	年齢 (x_i)	収縮期血圧 (y_i)
1	20	110
2	40	130
3	60	170

に対して、モデル

$$y_i = a + bx_i + \epsilon_i \qquad (y_i: \text{被験者 } i \text{ の収縮期血圧、} x_i: \text{被験者 } i \text{ の年齢、} a, b: \text{定数、} \epsilon_i: \text{被験者 } i \text{ の誤差}) \tag{1}$$

をあてはめました。通常、誤差 ϵ_i には平均 0 を仮定しますので、y_i の平均は $E[y_i] = a + bx_i$ となります。これを用いて、右辺は**「平均部分：$a + bx_i$」**と**「誤差部分：ϵ_i」**とに分解できます[*1]。

さて、(1) を全データに対して並べると

被験者番号 1：$y_1 = a + bx_1 + \epsilon_1$

[*1] 「平均部分」「誤差部分」という言葉は私の造語なので、他の方には通じません。ご注意ください。

被験者番号 2： $y_2 = a + bx_2 + \epsilon_2$
被験者番号 3： $y_3 = a + bx_3 + \epsilon_3$

と書けます。さらに数値をあてはめると

被験者番号 1： $110 = a + 20b + \epsilon_1$
被験者番号 2： $130 = a + 40b + \epsilon_2$
被験者番号 3： $170 = a + 60b + \epsilon_3$

となります。**デザイン行列**とは、この「平均部分」を行列・ベクトルを用いてまとめたものです。まずはいくつかベクトルを定義します。

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 110 \\ 130 \\ 170 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \end{pmatrix} \tag{2}$$

とおきます。このとき、(1) をベクトル表示すると

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} a+20b \\ a+40b \\ a+60b \end{pmatrix}}_{\text{平均部分}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \end{pmatrix}}_{\text{誤差部分}}$$

より、(2) を用いて

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} a+20b \\ a+40b \\ a+60b \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon} \tag{3}$$

と書けます。ここでさらに「平均部分」

$$\begin{pmatrix} a+20b \\ a+40b \\ a+60b \end{pmatrix} \tag{4}$$

の部分をまとめましょう。ポイントは**「推定したいのは a, b の 2 つ」**ということです。ですので、この 2 つを

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

とまとめて、(4) を表現しようとします。そうすると

$$\begin{pmatrix} a+20b \\ a+40b \\ a+60b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot a + 20 \cdot b \\ 1 \cdot a + 40 \cdot b \\ 1 \cdot a + 60 \cdot b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 40 \\ 1 & 60 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 40 \\ 1 & 60 \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta}$$

と表現できます。これより、(3) をまとめると

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 40 \\ 1 & 60 \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

となります。ここで最後まで残った行列に $\mathbf{X}$ という名前をつけてやり

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 40 \\ 1 & 60 \end{pmatrix}$$

としたとき、この $\mathbf{X}$ のことをこの回帰分析モデルの**デザイン行列**と呼びます。このとき、結局 (1) は最もまとまった形で

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

と書けます。

1.2　具体例（重回帰分析）

では次に、説明変数が複数ある重回帰分析の具体例を見ます。本質的な部分は単回帰とほとんど同じです。
データは以下の通りとします。

表 2　4 人の収縮期血圧と年齢のデータ（j は被験者番号）

被験者番号 (j)	年齢 (x_{1j})	1 日の塩分摂取量 (x_{2j})	収縮期血圧 (y_j)
1	20	10	110
2	40	15	130
3	50	22	165
4	60	12	170

に対して、モデル

$$y_j = a + b_1 x_{1j} + b_2 x_{2j} + \epsilon_j$$

を当てはめます。ここで単回帰と同じく、ϵ_j の平均は 0 を仮定します。ここで、このモデルを用いてベクトル表記すると

$$\begin{pmatrix} 110 \\ 130 \\ 165 \\ 170 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} a + 20b_1 + 10b_2 \\ a + 40b_1 + 15b_2 \\ a + 50b_1 + 22b_2 \\ a + 60b_1 + 12b_2 \end{pmatrix}}_{\text{平均部分}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{pmatrix}}_{\text{誤差部分}} \tag{5}$$

とおけます。ここで、ベクトルを

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 110 \\ 130 \\ 165 \\ 170 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{pmatrix}$$

とおき、さらにパラメータも

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} a \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

とおくと、平均部分は

$$\begin{pmatrix} a + 20b_1 + 10b_2 \\ a + 40b_1 + 15b_2 \\ a + 50b_1 + 22b_2 \\ a + 60b_1 + 12b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 20 & 10 \\ 1 & 40 & 15 \\ 1 & 50 & 22 \\ 1 & 60 & 12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 20 & 10 \\ 1 & 40 & 15 \\ 1 & 50 & 22 \\ 1 & 60 & 12 \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta}$$

となるので、残った行列を

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 20 & 10 \\ 1 & 40 & 15 \\ 1 & 50 & 22 \\ 1 & 60 & 12 \end{pmatrix}$$

とおくと、(5) は

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} a+20b_1+10b_2 \\ a+40b_1+15b_2 \\ a+50b_1+22b_2 \\ a+60b_1+12b_2 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 20 & 10 \\ 1 & 40 & 15 \\ 1 & 50 & 22 \\ 1 & 60 & 12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

となります。このとき、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 20 & 10 \\ 1 & 40 & 15 \\ 1 & 50 & 22 \\ 1 & 60 & 12 \end{pmatrix}$$

がデザイン行列となります。

1.3 一般論

では次に文字を使った一般形で表現しておきます。一般形なので、説明変数を複数とした重回帰分析を扱います。被説明変数 y_i に対して、説明変数（要因）が k 個あるとします。

表 3　n 人の収縮期血圧と年齢のデータ (j は被験者番号)

被験者番号 (j)	説明変数 1 (x_{1j})	説明変数 2 (x_{2j})	$\cdots$	説明変数 k (x_{kj})	被説明変数 (y_j)
1	x_{11}	x_{21}	$\cdots$	x_{k1}	y_1
2	x_{12}	x_{22}	$\cdots$	x_{k2}	y_2
3	x_{13}	x_{23}	$\cdots$	x_{k3}	y_3
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$	$\vdots$
n	x_{1n}	x_{2n}	$\cdots$	x_{kn}	y_n

ここで、モデル

$$y_j = a + b_1x_{1j} + b_2x_{2j} + \cdots b_kx_{kj} + \epsilon_j \tag{6}$$

を当てはめます。今までと同様に ϵ_i の平均は 0 を仮定します。このとき、このモデルを用いてベクトル表記すると

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} a+b_1x_{11}+b_2x_{21}+\cdots+b_kx_{k1} \\ a+b_1x_{12}+b_2x_{22}+\cdots+b_kx_{k2} \\ \vdots \\ a+b_1x_{1n}+b_2x_{2n}+\cdots+b_kx_{kn} \end{pmatrix}}_{\text{平均部分}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}}_{\text{誤差部分}} \tag{7}$$

とおけます。今までと同様、

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} a \\ b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix}$$

とおくと、(7) は

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} a + b_1x_{11} + b_2x_{21} + \cdots + b_kx_{k1} \\ a + b_1x_{12} + b_2x_{22} + \cdots + b_kx_{k2} \\ \vdots \\ a + b_1x_{1n} + b_2x_{2n} + \cdots + b_kx_{kn} \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{kn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{kn} \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

となります。これより、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{kn} \end{pmatrix}$$

とおくと、この $\mathbf{X}$ がこのモデルのデザイン行列です。

2 その２：分散分析

次に、分散分析を考えます。分散分析はパターンが多く面倒ですが、一つ一つ見ていきます。

2.1 一元配置

まずは一元配置です。以下のデータを用います。薬剤群３群でそれぞれ３例、２例、４例の場合とします。1:プラセボ群、２：10mg 群、３：20mg 群と考えてください。

表４　３群の比較

薬剤群 (i)	群内被験者番号 (j)	コレステロール低下量 (y_{ij})
1	1	0
1	2	5
1	3	-2
2	1	11
2	2	13
3	1	30
3	2	35
3	3	19
3	4	31

ここで、データはそれぞれ各群の平均値を $\mu_1,\ \mu_2,\ \mu_3$ として、分散の等しい正規分布に従う、つまり

$$y_{1j} \sim N(\mu_1, \sigma^2),\ \ y_{2j} \sim N(\mu_2, \sigma^2),\ \ y_{3j} \sim N(\mu_3, \sigma^2) \tag{8}$$

とします。

2.1.1 一元配置１（最も簡単なモデル）

ではまず、最も簡単なモデルで考えます。(8) を書き直すと

$$
\begin{aligned}
y_{1j} &= \mu_1 + \epsilon_{1j} \quad (\epsilon_{1j} \sim N(0,\sigma^2)) \\
y_{2j} &= \mu_2 + \epsilon_{2j} \quad (\epsilon_{2j} \sim N(0,\sigma^2)) \\
y_{3j} &= \mu_3 + \epsilon_{3j} \quad (\epsilon_{3j} \sim N(0,\sigma^2))
\end{aligned}
$$

とおけます[*2]。さらにまとめますと

$$
y_{ij} = \mu_i + \epsilon_{ij} \quad (\epsilon_{ij} \sim N(0,\sigma^2)) \tag{9}
$$

のように書けます。

さて、このとき回帰分析の場合と同様にモデルをベクトルの形で書いていくことにしましょう。まず最初にデータを全て並べ

$$
\left\{
\begin{array}{ccc}
0 & = & \mu_1 + \epsilon_{11} \\
5 & = & \mu_1 + \epsilon_{12} \\
-2 & = & \mu_1 + \epsilon_{13} \\
11 & = & \mu_2 + \epsilon_{21} \\
13 & = & \mu_2 + \epsilon_{22} \\
30 & = & \mu_3 + \epsilon_{31} \\
35 & = & \mu_3 + \epsilon_{32} \\
19 & = & \mu_3 + \epsilon_{33} \\
31 & = & \mu_3 + \epsilon_{34}
\end{array}
\right.
\quad \Longrightarrow \quad
\left\{
\begin{array}{ccc}
y_{11} & = & \mu_1 + \epsilon_{11} \\
y_{12} & = & \mu_1 + \epsilon_{12} \\
y_{13} & = & \mu_1 + \epsilon_{13} \\
y_{21} & = & \mu_2 + \epsilon_{21} \\
y_{22} & = & \mu_2 + \epsilon_{22} \\
y_{31} & = & \mu_3 + \epsilon_{31} \\
y_{32} & = & \mu_3 + \epsilon_{32} \\
y_{33} & = & \mu_3 + \epsilon_{33} \\
y_{34} & = & \mu_3 + \epsilon_{34}
\end{array}
\right.
$$

とおきます。次にこれをベクトルを用いて書きなおしますと

$$
\begin{pmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{21} \\ y_{22} \\ y_{31} \\ y_{32} \\ y_{33} \\ y_{34} \end{pmatrix}
=
\underbrace{\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_1 \\ \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_3 \\ \mu_3 \\ \mu_3 \end{pmatrix}}_{\text{平均部分}}
+
\underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{32} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{34} \end{pmatrix}}_{\text{誤差部分}}
\tag{10}
$$

とおきます。

ここで、回帰分析と同様にベクトルを

$$
\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{21} \\ y_{22} \\ y_{31} \\ y_{32} \\ y_{33} \\ y_{34} \end{pmatrix}, \quad
\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{32} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{34} \end{pmatrix}, \quad
\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix}
$$

とおきます。

では次に平均部分を見ていくことにします。平均部分は**ベクトルの各要素に** μ_1, μ_2, μ_3 **の１つずつしか現れない点が回帰分析と違います**ので、ここをたとえば「$\mu_1 = 1 \cdot \mu_1 + 0 \cdot \mu_2 + 0 \cdot \mu_3$」という風に処理してやります。すると、回帰分析と同

[*2] 正規分布の一般的性質として $x \sim N(0,\sigma^2)$ のときに、定数 a を持ってくると $x + a \sim N(a,\sigma^2)$ となることを逆方向に用いています。

様に

$$\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_1 \\ \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_3 \\ \mu_3 \\ \mu_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot\mu_1 + 0\cdot\mu_2 + 0\cdot\mu_3 \\ 1\cdot\mu_1 + 0\cdot\mu_2 + 0\cdot\mu_3 \\ 1\cdot\mu_1 + 0\cdot\mu_2 + 0\cdot\mu_3 \\ 0\cdot\mu_1 + 1\cdot\mu_2 + 0\cdot\mu_3 \\ 0\cdot\mu_1 + 1\cdot\mu_2 + 0\cdot\mu_3 \\ 0\cdot\mu_1 + 0\cdot\mu_2 + 1\cdot\mu_3 \\ 0\cdot\mu_1 + 0\cdot\mu_2 + 1\cdot\mu_3 \\ 0\cdot\mu_1 + 0\cdot\mu_2 + 1\cdot\mu_3 \\ 0\cdot\mu_1 + 0\cdot\mu_2 + 1\cdot\mu_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta}$$

となり、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

とおくと、(10) は

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

と表せ、$\mathbf{X}$ がデザイン行列となります。

2.1.2 一元配置 2（制約条件が必要なモデル）

次に、同じデータに対してモデルを変更しましょう。<u>平均値 $\mu_1,\ \mu_2,\ \mu_3$ により細かい構造を入れていきます</u>。

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \mu + \alpha_1 \\ \mu_2 &= \mu + \alpha_2 \\ \mu_3 &= \mu + \alpha_3 \end{aligned}$$

のように、**各 μ_i を「全群に共通の定数：μ」と「群ごとに異なる定数：$\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3$」に分ける**のです。つまり、(9) に対応する形で書きますと

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij} \qquad (\epsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)) \tag{12}$$

と書けます。

ただしここで困ったことが一つ起こるのです。それは前のモデル (9) では $\mu_1,\ \mu_2,\ \mu_3$ のパラメータ 3 つでちょうどよかったのが、今回のモデル (12) では $\mu,\ \alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3$ の 4 つになってしまい、**パラメータの数が多すぎる**ようになってしまうことです[*3]。

[*3] 大体、以下のようなイメージを持ってください。連立方程式

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 &=& 10 \\ \mu_1 + 2\mu_2 + 3\mu_3 &=& 20 \\ -\mu_1 + 3\mu_2 - \mu_3 &=& 0 \end{array} \right.$$

は「文字 3 つ式 3 つ」であり、（無意味な式が 1 つもないので）解が一つに定まります。ところがここで、今回のように $\mu_1 = \mu + \alpha_1,\ \mu_2 = \mu + \alpha_2,\ \mu_3 = \mu + \alpha_3$ としてしまうと、上の式は

$$\left\{ \begin{array}{rcl} (\mu+\alpha_1) + (\mu+\alpha_2) + (\mu+\alpha_3) &=& 10 \\ (\mu+\alpha_1) + 2(\mu+\alpha_2) + 3(\mu+\alpha_3) &=& 20 \\ -(\mu+\alpha_1) + 3(\mu+\alpha_2) - (\mu+\alpha_3) &=& 0 \end{array} \right. \Longrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} 3\mu + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 &=& 10 \\ 6\mu + \alpha_1 + 2\alpha_2 + 3\alpha_3 &=& 20 \\ \mu + \alpha_1 + 3\alpha_2 - \alpha_3 &=& 0 \end{array} \right.$$

となって、「文字 4 つ、式 3 つ」ですので、文字の数に対して式の数が少な過ぎて、解が一つでなくなってしまいます。このようなことが起きているのだ、と思ってください。

この問題の 対処法 としては、**「式を１つ増やして、文字を１つ消す」**という方法がとられます。その式のことを**制約条件**と言い、主に用いられるのはたとえば、n_i を第 i 群の例数を表すとして、

$$
\begin{array}{lcl}
\text{（制約条件１）:} & \alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=0 & (\alpha_i\text{を全部足して }0) \\
\text{（制約条件２）:} & \alpha_3=0 & (\alpha_i\text{の一番最後が }0) \\
\text{（制約条件３）:} & n_1\alpha_1+n_2\alpha_2+n_3\alpha_3=0 & (n_i\alpha_i\text{を全部足して }0)
\end{array}
$$

の３種類のうちのどれかです。本稿では、それぞれの制約条件の内容・利点欠点については述べずに、デザイン行列の形のみを述べることにします。

(12) をベクトル表記するところまでは共通なのでそこまではやってしまいますと、

$$
\begin{pmatrix} y_{11}\\ y_{12}\\ y_{13}\\ y_{21}\\ y_{22}\\ y_{31}\\ y_{32}\\ y_{33}\\ y_{34} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_2\\ \mu+\alpha_2\\ \mu+\alpha_3\\ \mu+\alpha_3\\ \mu+\alpha_3\\ \mu+\alpha_3 \end{pmatrix}
+
\begin{pmatrix} \epsilon_{11}\\ \epsilon_{12}\\ \epsilon_{13}\\ \epsilon_{21}\\ \epsilon_{22}\\ \epsilon_{31}\\ \epsilon_{32}\\ \epsilon_{33}\\ \epsilon_{34} \end{pmatrix}
\tag{13}
$$

となります。そして、パラメータは $\mu,\ \alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3$ の４つあるのですが、以下 パラメータ α_3 を消す、という方針で考えますので、

$$
\boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix} \mu\\ \alpha_1\\ \alpha_2 \end{pmatrix}
$$

とおきます。

2.1.3 制約条件１：$\sum_i \alpha_i=0$ のとき

では最初の制約条件 $\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=0$ です。これを用いると

$$
\alpha_3=-\alpha_1-\alpha_2
$$

となって α_3 が消せます。こよれり、(13) は

$$
\begin{pmatrix} y_{11}\\ y_{12}\\ y_{13}\\ y_{21}\\ y_{22}\\ y_{31}\\ y_{32}\\ y_{33}\\ y_{34} \end{pmatrix}
=
\underbrace{\begin{pmatrix} \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_2\\ \mu+\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2 \end{pmatrix}}_{\text{平均部分}}
+
\underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_{11}\\ \epsilon_{12}\\ \epsilon_{13}\\ \epsilon_{21}\\ \epsilon_{22}\\ \epsilon_{31}\\ \epsilon_{32}\\ \epsilon_{33}\\ \epsilon_{34} \end{pmatrix}}_{\text{誤差部分}}
$$

となり、平均部分は

$$
\begin{pmatrix} \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_1\\ \mu+\alpha_2\\ \mu+\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2\\ \mu-\alpha_1-\alpha_2 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & 1 & 0\\
1 & 1 & 0\\
1 & 1 & 0\\
1 & 0 & 1\\
1 & 0 & 1\\
1 & -1 & -1\\
1 & -1 & -1\\
1 & -1 & -1\\
1 & -1 & -1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \mu\\ \alpha_1\\ \alpha_2 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & 1 & 0\\
1 & 1 & 0\\
1 & 1 & 0\\
1 & 0 & 1\\
1 & 0 & 1\\
1 & -1 & -1\\
1 & -1 & -1\\
1 & -1 & -1\\
1 & -1 & -1
\end{pmatrix}
\boldsymbol{\beta}
$$

となり、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

とおくと、この $\mathbf{X}$ がデザイン行列となります。

2.1.4　制約条件２：α_i の最後が 0 のとき

次の制約条件は $\alpha_3 = 0$ です。これは単に α_3 を消すだけですので大変簡単です。(13) は

$$\begin{pmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{21} \\ y_{22} \\ y_{31} \\ y_{32} \\ y_{33} \\ y_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu+\alpha_1 \\ \mu+\alpha_1 \\ \mu+\alpha_1 \\ \mu+\alpha_2 \\ \mu+\alpha_2 \\ \mu \\ \mu \\ \mu \\ \mu \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{32} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{34} \end{pmatrix} \Longrightarrow \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\Longrightarrow \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\Longrightarrow \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

より、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

とおくと、$\mathbf{X}$ がデザイン行列です。

2.1.5 制約条件３：$\sum_i n_i\alpha_i = 0$ のとき

最後の制約条件は $n_1\alpha_1 + n_2\alpha_2 + n_3\alpha_3 = 0$ ですが、今回は「第１群：３例、第２群：２例、第３群：４例」なので、$3\alpha_1 + 2\alpha_2 + 4\alpha_3 = 0$ です。これを変形すると

$$\alpha_3 = -\frac{3}{4}\alpha_1 - \frac{1}{2}\alpha_2$$

となり、α_3 が消せます。このとき (13) は

$$\begin{pmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \\ y_{21} \\ y_{22} \\ y_{31} \\ y_{32} \\ y_{33} \\ y_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu + \alpha_1 \\ \mu + \alpha_1 \\ \mu + \alpha_1 \\ \mu + \alpha_2 \\ \mu + \alpha_2 \\ \mu - \frac{3}{4}\alpha_1 - \frac{1}{2}\alpha_2 \\ \mu - \frac{3}{4}\alpha_1 - \frac{1}{2}\alpha_2 \\ \mu - \frac{3}{4}\alpha_1 - \frac{1}{2}\alpha_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{32} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{34} \end{pmatrix} \Longrightarrow \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1\cdot\mu + 1\cdot\alpha_1 + 0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu + 1\cdot\alpha_1 + 0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu + 1\cdot\alpha_1 + 0\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu + 0\cdot\alpha_1 + 1\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu + 0\cdot\alpha_1 + 1\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu - \frac{3}{4}\cdot\alpha_1 - \frac{1}{2}\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu - \frac{3}{4}\cdot\alpha_1 - \frac{1}{2}\cdot\alpha_2 \\ 1\cdot\mu - \frac{3}{4}\cdot\alpha_1 - \frac{1}{2}\cdot\alpha_2 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\Longrightarrow \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon}$$

となるので $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$ となり、 $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$ とおくと、この $\mathbf{X}$ がデザイン行列となります。

2.2 二元配置

2.2.1 交互作用なしのモデル

では同様に二元配置を考えます。一元配置とは説明変数が「薬剤群だけ」の場合でしたが、今度は説明変数として「薬剤群（3群)」と「喫煙の有無」の2つを考えます。ここで、

表5　3群の比較 ($j = 1$: 喫煙あり, $j = 2$: 喫煙なし)

薬剤群 (i)	喫煙の有無 (j)	群内被験者番号 (k)	コレステロール低下量 (y_{ijk})
1	1	1	0
1	1	2	5
1	2	3	-2
2	1	1	11
2	2	2	13
3	1	1	30
3	2	2	35
3	2	3	19
3	2	4	31

$$y_{11k} \sim N(\mu_{11}, \sigma^2), \;\; y_{12k} \sim N(\mu_{12}, \sigma^2), \;\; y_{13k} \sim N(\mu_{13}, \sigma^2)$$
$$y_{21k} \sim N(\mu_{21}, \sigma^2), \;\; y_{22k} \sim N(\mu_{22}, \sigma^2), \;\; y_{23k} \sim N(\mu_{23}, \sigma^2)$$

を仮定します。ここで各 μ_{ij} の中身をより詳しく見ていきます。

最初に**交互作用なしのモデル**ですが、これは「全体の効果」＝「薬剤の効果」＋「喫煙の効果」と**2つの効果の足し算**で表される場合のモデルです。式で書きますと「薬剤第 i 群の影響：α_i」と「喫煙の有無 j 群の影響：β_j」を用いて

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \epsilon_{ijk}$$

のように表されます。これを用いて、各データをベクトル表記すると

$$\begin{pmatrix} y_{111} \\ y_{112} \\ y_{121} \\ y_{211} \\ y_{221} \\ y_{311} \\ y_{321} \\ y_{322} \\ y_{323} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu+\alpha_1+\beta_1 \\ \mu+\alpha_1+\beta_1 \\ \mu+\alpha_1+\beta_2 \\ \mu+\alpha_2+\beta_1 \\ \mu+\alpha_2+\beta_2 \\ \mu+\alpha_3+\beta_1 \\ \mu+\alpha_3+\beta_2 \\ \mu+\alpha_3+\beta_2 \\ \mu+\alpha_3+\beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{111} \\ \epsilon_{112} \\ \epsilon_{121} \\ \epsilon_{211} \\ \epsilon_{221} \\ \epsilon_{311} \\ \epsilon_{321} \\ \epsilon_{322} \\ \epsilon_{323} \end{pmatrix} \tag{14}$$

となります。今回も一元配置と同様に制約条件を考えますが、ページ数が現時点でも多くなりすぎていますので、$\underline{\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=0 \text{ と } \beta_1=\beta_2=0}$ のみ入れることにします[*4]。

一元配置と同様に各パラメータの最後の文字を消すようにします。すると

$$\alpha_3 = -\alpha_1 - \alpha_2, \quad \beta_2 = -\beta_1$$

となりますので、α_3, β_2 の2つを消していきます。このとき、パラメータベクトルはこの2つを除いた

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$$

とし、(15) の平均部分のみに注目しますと

$$\begin{pmatrix} \mu+\alpha_1+\beta_1 \\ \mu+\alpha_1+\beta_1 \\ \mu+\alpha_1+\beta_2 \\ \mu+\alpha_2+\beta_1 \\ \mu+\alpha_2+\beta_2 \\ \mu+\alpha_3+\beta_1 \\ \mu+\alpha_3+\beta_2 \\ \mu+\alpha_3+\beta_2 \\ \mu+\alpha_3+\beta_2 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} \mu+\alpha_1+\beta_1 \\ \mu+\alpha_1+\beta_1 \\ \mu+\alpha_1-\beta_1 \\ \mu+\alpha_2+\beta_1 \\ \mu+\alpha_2-\beta_1 \\ \mu-\alpha_1-\alpha_2+\beta_1 \\ \mu-\alpha_1-\alpha_2-\beta_1 \\ \mu-\alpha_1-\alpha_2-\beta_1 \\ \mu-\alpha_1-\alpha_2-\beta_1 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} 1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1 \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta}$$

となりますので、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

とおくと、$\mathbf{X}$ がデザイン行列です。

[*4] 2元配置の交互作用なしの場合の制約条件は、α_1 に1つ、β_j に1つの計2つ必要です。

2.2.2 交互作用ありのモデル

次に、交互作用ありのモデルを考えます。データは以下の通りです。薬剤３群と喫煙歴３群で考えます。これに対し

表６　３群の比較 ($j=1$: 現在喫煙あり, $j=2$: 現在喫煙なし・喫煙歴あり, $j=3$: 喫煙なし)

薬剤群 (i)	喫煙歴 (j)	群内被験者番号 (k)	コレステロール低下量 (y_{ijk})
1	1	1	0
1	1	2	3
1	2	1	-2
1	2	2	-2
1	3	1	-5
1	3	2	-10
2	1	1	3
2	1	2	5
2	2	1	7
2	2	2	10
2	3	1	11
2	3	2	13
3	1	1	7
3	1	2	8
3	2	1	10
3	2	2	15
3	3	1	20
3	3	2	30

て、「薬の効果」と「喫煙歴の効果」の足し算だけでない部分がある以下のモデルを考えます。ここで、薬の効果：α_i や喫煙歴の効果：β_j をそれぞれ**「主効果」**と呼び、その足し算では表現できない部分：γ_{ij} のことを薬と喫煙の**「交互作用」**と呼びます。

$$y_{ijk}=\mu+\alpha_i+\beta_j+\gamma_{ij}+\epsilon_{ijk} \qquad (\epsilon_{ijk}\sim N(0,\sigma^2)) \tag{15}$$

であり、ϵ_{ijk} はそれぞれ独立であると仮定します。このとき、データを縦に並べると

$$\left\{\begin{array}{r}
0=\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}+\epsilon_{111}\\
3=\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}+\epsilon_{112}\\
2=\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}+\epsilon_{121}\\
-2=\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}+\epsilon_{122}\\
-5=\mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13}+\epsilon_{131}\\
-10=\mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13}+\epsilon_{132}\\
3=\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}+\epsilon_{211}\\
5=\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}+\epsilon_{212}\\
7=\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}+\epsilon_{221}\\
10=\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}+\epsilon_{222}\\
11=\mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23}+\epsilon_{231}\\
13=\mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23}+\epsilon_{232}\\
7=\mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31}+\epsilon_{311}\\
8=\mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31}+\epsilon_{312}\\
10=\mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32}+\epsilon_{321}\\
15=\mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32}+\epsilon_{322}\\
20=\mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33}+\epsilon_{331}\\
30=\mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33}+\epsilon_{331}
\end{array}\right.
\quad\Longrightarrow\quad
\left\{\begin{array}{l}
y_{111}=\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}+\epsilon_{111}\\
y_{112}=\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}+\epsilon_{112}\\
y_{121}=\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}+\epsilon_{121}\\
y_{122}=\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}+\epsilon_{122}\\
y_{131}=\mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13}+\epsilon_{131}\\
y_{132}=\mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13}+\epsilon_{132}\\
y_{211}=\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}+\epsilon_{211}\\
y_{212}=\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}+\epsilon_{212}\\
y_{221}=\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}+\epsilon_{221}\\
y_{222}=\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}+\epsilon_{222}\\
y_{231}=\mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23}+\epsilon_{231}\\
y_{232}=\mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23}+\epsilon_{232}\\
y_{311}=\mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31}+\epsilon_{311}\\
y_{312}=\mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31}+\epsilon_{312}\\
y_{321}=\mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32}+\epsilon_{321}\\
y_{322}=\mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32}+\epsilon_{322}\\
y_{331}=\mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33}+\epsilon_{331}\\
y_{332}=\mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33}+\epsilon_{331}
\end{array}\right.$$

となります。ベクトル表記すると

$$\begin{pmatrix} y_{111} \\ y_{112} \\ y_{121} \\ y_{122} \\ y_{131} \\ y_{132} \\ \hline y_{211} \\ y_{212} \\ y_{221} \\ y_{222} \\ y_{231} \\ y_{232} \\ \hline y_{311} \\ y_{312} \\ y_{321} \\ y_{322} \\ y_{331} \\ y_{332} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11} \\ \mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11} \\ \mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12} \\ \mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12} \\ \mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13} \\ \mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13} \\ \hline \mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21} \\ \mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21} \\ \mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22} \\ \mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22} \\ \mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23} \\ \mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23} \\ \hline \mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31} \\ \mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31} \\ \mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32} \\ \mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32} \\ \mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33} \\ \mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{111} \\ \epsilon_{112} \\ \epsilon_{121} \\ \epsilon_{122} \\ \epsilon_{131} \\ \epsilon_{132} \\ \hline \epsilon_{211} \\ \epsilon_{212} \\ \epsilon_{221} \\ \epsilon_{222} \\ \epsilon_{231} \\ \epsilon_{232} \\ \hline \epsilon_{311} \\ \epsilon_{312} \\ \epsilon_{321} \\ \epsilon_{322} \\ \epsilon_{331} \\ \epsilon_{332} \end{pmatrix}$$

ここで制約条件を入れますが、制約条件は主効果と交互作用の両方に考えてやらないといけません。また、制約条件の入れ方は色々ありますが、ページ数などの都合により、今回は１種類のみを考えます。

(i) 主効果 α_i と β_j については、交互作用なしの場合と同じく $\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=0,\ \beta_1+\beta_2+\beta_3=0$ を考えます。

(ii) 交互作用については、薬剤群１群につき１つ・喫煙群１群につき１つ考えます。つまり、順番に番号を振ると

$(a)\ \gamma_{11}+\gamma_{12}+\gamma_{13}=0,\ (b)\ \gamma_{21}+\gamma_{22}+\gamma_{23}=0,\ (c)\ \gamma_{31}+\gamma_{32}+\gamma_{33}=0$

$(d)\ \gamma_{11}+\gamma_{21}+\gamma_{31}=0,\ (e)\ \gamma_{12}+\gamma_{22}+\gamma_{32}=0,\ (f)\ \gamma_{13}+\gamma_{23}+\gamma_{33}=0$

の６つの式を考えます。実はこれらは６個あるのですが、実質５個分しかないのです[*5][*6]。

これらを考えます。(i) の方は、今までと同じく $\alpha_3=-\alpha_1-\alpha_2,\ \beta_3=-\beta_1-\beta_2$ となります。次に (ii) ですが、γ_{ij} が３×３＝９個あり、制約条件の式が実質５個あります。式１個につき文字１個が減りますので、文字は９－５＝４個残ります。残す文字を $\gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{21}, \gamma_{22}$ とすると

$$\gamma_{13}=-\gamma_{11}-\gamma_{12},\quad \gamma_{31}=-\gamma_{11}-\gamma_{21},\quad \gamma_{23}=-\gamma_{21}-\gamma_{22},\quad \gamma_{32}=-\gamma_{12}-\gamma_{22},\quad \gamma_{33}=\gamma_{11}+\gamma_{21}+\gamma_{12}+\gamma_{22}$$

となり、他の要素が全てこの４つで表わされます。これより、パラメータベクトルは

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \gamma_{11} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \end{pmatrix}$$

[*5] (a)+(b)+(c)-(d)-(f) を考えると、(e) に一致しています。つまり、(e) はそれ以外のものから作り出されてしまうものなので、なくても全く問題ない、というか、あっても $\gamma_{11}, \cdots, \gamma_{33}$ に関する情報量が増えていない、ということなのです。

[*6] 一般の二元配置の場合、薬剤群が全 I 群、喫煙群が全 J 群であるとき、制約条件は実質 $I+J-1$ 個 となります。そのため、残る文字は $IJ-(I+J-1)=(I-1)(J-1)$ 個となります。

とおけます。このとき、モデルの平均部分を変形していきますと[*7]

$$
\left(\begin{array}{c}
\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}\\
\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}\\
\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}\\
\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}\\
\mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13}\\
\mu+\alpha_1+\beta_3+\gamma_{13}\\ \hline
\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}\\
\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}\\
\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}\\
\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}\\
\mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23}\\
\mu+\alpha_2+\beta_3+\gamma_{23}\\ \hline
\mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31}\\
\mu+\alpha_3+\beta_1+\gamma_{31}\\
\mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32}\\
\mu+\alpha_3+\beta_2+\gamma_{32}\\
\mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33}\\
\mu+\alpha_3+\beta_3+\gamma_{33}
\end{array}\right)
=
\left(\begin{array}{c}
\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}\\
\mu+\alpha_1+\beta_1+\gamma_{11}\\
\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}\\
\mu+\alpha_1+\beta_2+\gamma_{12}\\
\mu+\alpha_1-\beta_1-\beta_2-\gamma_{11}-\gamma_{12}\\
\mu+\alpha_1-\beta_1-\beta_2-\gamma_{11}-\gamma_{12}\\ \hline
\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}\\
\mu+\alpha_2+\beta_1+\gamma_{21}\\
\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}\\
\mu+\alpha_2+\beta_2+\gamma_{22}\\
\mu+\alpha_2-\beta_1-\beta_2-\gamma_{21}-\gamma_{22}\\
\mu+\alpha_2-\beta_1-\beta_2-\gamma_{21}-\gamma_{22}\\ \hline
\mu-\alpha_1-\alpha_2+\beta_1-\gamma_{11}-\gamma_{21}\\
\mu-\alpha_1-\alpha_2+\beta_1-\gamma_{11}-\gamma_{21}\\
\mu-\alpha_1-\alpha_2+\beta_2-\gamma_{12}-\gamma_{22}\\
\mu-\alpha_1-\alpha_2+\beta_2-\gamma_{12}-\gamma_{22}\\
\mu-\alpha_1-\alpha_2-\beta_1-\beta_2+\gamma_{11}+\gamma_{12}+\gamma_{21}+\gamma_{22}\\
\mu-\alpha_1-\alpha_2-\beta_1-\beta_2+\gamma_{11}+\gamma_{12}+\gamma_{21}+\gamma_{22}
\end{array}\right)
$$

$$
=\left(\begin{array}{c}
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1+0\cdot\beta_2+1\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1+0\cdot\beta_2+1\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2+0\cdot\beta_1+1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+1\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2+0\cdot\beta_1+1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+1\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1-1\cdot\beta_2-1\cdot\gamma_{11}-1\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+1\cdot\alpha_1+0\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1-1\cdot\beta_2-1\cdot\gamma_{11}-1\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\ \hline
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1+0\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}+1\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1+0\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}+1\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2+0\cdot\beta_1+1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+1\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2+0\cdot\beta_1+1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+1\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1-1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}-1\cdot\gamma_{21}-1\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu+0\cdot\alpha_1+1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1-1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}-1\cdot\gamma_{21}-1\cdot\gamma_{22}\\ \hline
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1+0\cdot\beta_2-1\cdot\gamma_{11}-1\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2+1\cdot\beta_1+0\cdot\beta_2-1\cdot\gamma_{11}-1\cdot\gamma_{12}+0\cdot\gamma_{21}+0\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2+0\cdot\beta_1+1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}-1\cdot\gamma_{21}-1\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2+0\cdot\beta_1+1\cdot\beta_2+0\cdot\gamma_{11}+0\cdot\gamma_{12}-1\cdot\gamma_{21}-1\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1-1\cdot\beta_2+1\cdot\gamma_{11}+1\cdot\gamma_{12}+1\cdot\gamma_{21}+1\cdot\gamma_{22}\\
1\cdot\mu-1\cdot\alpha_1-1\cdot\alpha_2-1\cdot\beta_1-1\cdot\beta_2+1\cdot\gamma_{11}+1\cdot\gamma_{12}+1\cdot\gamma_{21}+1\cdot\gamma_{22}
\end{array}\right)
$$

$$
=\left(\begin{array}{ccccccccc}
1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\
1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0\\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0\\
1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0\\
1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0\\ \hline
1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\
1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1\\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1\\
1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1\\
1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1\\ \hline
1 & -1 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0\\
1 & -1 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0\\
1 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1\\
1 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1\\
1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1\\
1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1
\end{array}\right)
\left(\begin{array}{c}
\mu\\ \alpha_1\\ \alpha_2\\ \beta_1\\ \beta_2\\ \gamma_{11}\\ \gamma_{12}\\ \gamma_{21}\\ \gamma_{22}
\end{array}\right)
$$

[*7] 見やすさのため、ベクトル・行列中に投与群ごとに横線を引いていきます。

より、

$$\mathbf{X} = \left(\begin{array}{ccccccccc}
1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\
\hline
1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\
1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\
\hline
1 & -1 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\
1 & -1 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\
1 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\
1 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\
1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1
\end{array}\right)$$

とおくと、$\mathbf{X}$ がデザイン行列となります。

2.3 分散分析（制約条件あり）のまとめ

制約条件のある分散分析モデルの流れを整理しておきます。

(i) 制約条件なしのモデルをベクトル表記する。

(ii) <u>制約条件を用いてパラメータ１つを消す</u>。

(iii) 平均部分を $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ の形で表す。

の順で、デザイン行列 $\mathbf{X}$ が得られます。

3 その３：共分散分析

次に、共分散分析を考えます。実は、**共分散分析のデザイン行列**は <u>分散分析と回帰分析を合わせたもの</u> になっています。

表 7　収縮期血圧と年齢のデータ

薬剤群 (i)	被験者番号 (j)	年齢 (x_{ij})	収縮期血圧 (y_{ij})
1	1	20	110
1	2	40	131
1	3	60	172
2	1	30	139
2	2	50	161
2	3	60	203

このデータに対して、**薬剤群ごとに傾きの等しい直線**を当てはめます。

$$\begin{aligned}
&(\text{第１群}):y_{1j} = \mu + a + bx_{1j} + \epsilon_{1j} \quad (\epsilon_{1j} \sim N(0,\sigma^2)) \\
&(\text{第２群}):y_{2j} = \mu \qquad\ + bx_{2j} + \epsilon_{2j} \quad (\epsilon_{2j} \sim N(0,\sigma^2))
\end{aligned}$$

ここで、切片のパラメータは μ, a の２つであり[*8]、傾きは両群共通の b です。

*8 このパラメータ数は、群の数と同じになります。

これに対して、データを並べると

$$\left\{\begin{array}{lll}110 & = & \mu+a+20b+\epsilon_{11}\\ 131 & = & \mu+a+40b+\epsilon_{12}\\ 172 & = & \mu+a+60b+\epsilon_{13}\\ 139 & = & \mu \qquad +30b+\epsilon_{21}\\ 161 & = & \mu \qquad +50b+\epsilon_{22}\\ 203 & = & \mu \qquad +60b+\epsilon_{23}\end{array}\right. \quad \Longrightarrow \quad \left\{\begin{array}{lll}y_{11} & = & \mu+a+bx_{11}+\epsilon_{11}\\ y_{12} & = & \mu+a+bx_{12}+\epsilon_{12}\\ y_{13} & = & \mu+a+bx_{13}+\epsilon_{13}\\ y_{21} & = & \mu \qquad +bx_{21}+\epsilon_{21}\\ y_{22} & = & \mu \qquad +bx_{22}+\epsilon_{22}\\ y_{23} & = & \mu \qquad +bx_{23}+\epsilon_{23}\end{array}\right.$$

ベクトル表記すると

$$\begin{pmatrix} y_{11}\\ y_{12}\\ y_{13}\\ y_{21}\\ y_{22}\\ y_{23}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu+a+20b\\ \mu+a+40b\\ \mu+a+60b\\ \mu \qquad +30b\\ \mu \qquad +50b\\ \mu \qquad +60b\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\epsilon_{11}\\ \epsilon_{12}\\ \epsilon_{13}\\ \epsilon_{21}\\ \epsilon_{22}\end{pmatrix}$$

これに対して、パラメータベクトルを

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix}\mu\\ a\\ b\end{pmatrix}$$

とおくと、平均部分は

$$\begin{pmatrix} \mu+a+20b\\ \mu+a+40b\\ \mu+a+60b\\ \mu \qquad +30b\\ \mu \qquad +50b\\ \mu \qquad +60b\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot\mu+1\cdot a+20\cdot b\\ 1\cdot\mu+1\cdot a+40\cdot b\\ 1\cdot\mu+1\cdot a+60\cdot b\\ 1\cdot\mu \qquad +30\cdot b\\ 1\cdot\mu \qquad +50\cdot b\\ 1\cdot\mu \qquad +60\cdot b\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 20\\ 1 & 1 & 40\\ 1 & 1 & 60\\ 1 & 0 & 30\\ 1 & 0 & 50\\ 1 & 0 & 60\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu\\ a\\ b\end{pmatrix}$$

より、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 20\\ 1 & 1 & 40\\ 1 & 1 & 60\\ 1 & 0 & 30\\ 1 & 0 & 50\\ 1 & 0 & 60\end{pmatrix}$$

とおくと、$\mathbf{X}$ がデザイン行列である。

4　その４：クロスオーバー試験の解析

では次にクロスオーバー試験の解析を見ていきます。データは以下の通りです。なお、簡単のため、今回は「各群２例ずつ」としてあります。

表８　クロスオーバー試験のデザイン

	時期１	時期２	
第１群	薬剤１	薬剤２	（２例）
第２群	薬剤２	薬剤１	（２例）

データは以下の通り得られたものとします。

表 9　クロスオーバー試験のデータ

薬剤群 (i)	被験者番号 (j)	時期 (k)	収縮期血圧 (y_{ijk})
1	1	1	120
2	1	2	110
1	2	1	130
2	2	2	140
1	3	2	150
2	3	1	130
1	4	2	100
2	4	1	110

とします[*9]。なお、被験者番号 1,2 が第 1 群、3,4 が第 2 群です。

以下、「被験者の効果」を入れるか入れないかにより、２つのモデルについて考えていきます。

4.1　fixed effect model：被験者の効果を入れないモデル

最初のモデルは、被験者の効果をモデルに入れず**「薬剤：d_i」「時期効果：t_k」をそれぞれ fixed effect （固定効果）で入れたモデル**を考えますと、モデルは以下の通りとなります。

$$y_{ijk} = \mu + d_i + t_k + \epsilon_{ijk}$$

このとき、データを全て並べると

$$\begin{aligned}
120 &= \mu + d_1 + t_1 + \epsilon_{111} \\
110 &= \mu + d_2 + t_2 + \epsilon_{212} \\
130 &= \mu + d_1 + t_1 + \epsilon_{121} \\
140 &= \mu + d_2 + t_2 + \epsilon_{222} \\
150 &= \mu + d_1 + t_2 + \epsilon_{132} \\
130 &= \mu + d_2 + t_1 + \epsilon_{231} \\
100 &= \mu + d_1 + t_2 + \epsilon_{142} \\
110 &= \mu + d_2 + t_1 + \epsilon_{241}
\end{aligned}$$

ベクトル表記すると

$$\begin{pmatrix} 120 \\ 110 \\ 130 \\ 140 \\ 150 \\ 130 \\ 100 \\ 110 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu + d_1 + t_1 \\ \mu + d_2 + t_2 \\ \mu + d_1 + t_1 \\ \mu + d_2 + t_2 \\ \mu + d_1 + t_2 \\ \mu + d_2 + t_1 \\ \mu + d_1 + t_2 \\ \mu + d_2 + t_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{111} \\ \epsilon_{212} \\ \epsilon_{121} \\ \epsilon_{222} \\ \epsilon_{132} \\ \epsilon_{231} \\ \epsilon_{142} \\ \epsilon_{241} \end{pmatrix}$$

となります。

ここで、制約条件を

$$d_1 + d_2 = 0,\ \ t_1 + t_2 = 0$$

とおき、それぞれ

$$d_2 = -d_1,\ \ t_2 = -t_1$$

[*9] 今までのモデルでは「被験者番号」は投与群ごとに 1 からつけ直していましたが、今回は被験者番号 $j = 1$ は 1 人だけ、$j = 2$ は 1 人だけ…という風にします。

としてパラメータを減らします。結局パラメータベクトルは

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mu \\ d_1 \\ t_1 \end{pmatrix}$$

となり、平均部分を見ると

$$\begin{pmatrix} \mu + d_1 + t_1 \\ \mu + d_2 + t_2 \\ \mu + d_1 + t_1 \\ \mu + d_2 + t_2 \\ \mu + d_1 + t_2 \\ \mu + d_2 + t_1 \\ \mu + d_1 + t_2 \\ \mu + d_2 + t_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu + d_1 + t_1 \\ \mu - d_1 - t_1 \\ \mu + d_1 + t_1 \\ \mu - d_1 - t_1 \\ \mu + d_1 - t_1 \\ \mu - d_1 + t_1 \\ \mu + d_1 - t_1 \\ \mu - d_1 + t_1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \cdot \mu + 1 \cdot d_1 + 1 \cdot t_1 \\ 1 \cdot \mu - 1 \cdot d_1 - 1 \cdot t_1 \\ 1 \cdot \mu + 1 \cdot d_1 + 1 \cdot t_1 \\ 1 \cdot \mu - 1 \cdot d_1 - 1 \cdot t_1 \\ 1 \cdot \mu + 1 \cdot d_1 - 1 \cdot t_1 \\ 1 \cdot \mu - 1 \cdot d_1 + 1 \cdot t_1 \\ 1 \cdot \mu + 1 \cdot d_1 - 1 \cdot t_1 \\ 1 \cdot \mu - 1 \cdot d_1 + 1 \cdot t_1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ d_1 \\ t_1 \end{pmatrix}$$

より、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

とおくと、$\mathbf{X}$ がデザイン行列となります。

4.2 mixed model：被験者を random effect としてモデルに入れる場合

では次に、被験者をモデルに入れる場合を考えます。被験者の影響は random effect（変量効果）としてモデルに組み込むことが多いです[*10]ので、今回も**「被験者：p_j」を random effect で入れた、mixed model（混合モデル）**を考えます。モデルは以下の通りとなります。

$$y_{ijk} = \mu + d_i + p_j + t_k + \epsilon_{ijk}$$

[*10] つまり、被験者の影響を定数でなく確率変数と考える、ということです。

です。デザイン行列を考える際に重要なのは fixed effect と random effect は別に扱う ということです。つまり、

$$y_{ijk} = \underbrace{\mu + d_i + t_k}_{fixed\ effect} + \underbrace{p_j}_{random\ effect} + \underbrace{\epsilon_{ijk}}_{\text{誤差部分}}$$

と分解されます。ここで、データを並べてみますと

$$\begin{aligned}
120 &= \mu + d_1 + t_1 + p_1 + \epsilon_{111} \\
110 &= \mu + d_2 + t_2 + p_1 + \epsilon_{212} \\
130 &= \mu + d_1 + t_1 + p_2 + \epsilon_{121} \\
140 &= \mu + d_2 + t_2 + p_2 + \epsilon_{222} \\
150 &= \mu + d_1 + t_2 + p_3 + \epsilon_{132} \\
130 &= \mu + d_2 + t_1 + p_3 + \epsilon_{231} \\
100 &= \mu + d_1 + t_2 + p_4 + \epsilon_{142} \\
110 &= \mu + d_2 + t_1 + p_4 + \epsilon_{241}
\end{aligned}$$

となります。制約条件も fixed effect と同じ

$$d_1 + d_2 = 0,\ \ t_1 + t_2 = 0 \implies d_2 = -d_1,\ \ t_2 = -t_1$$

と考えてベクトル表記するのですが、**fixed effect と random effect は別ベクトルで書いてやります**。つまり、fixed effect の部分は上と変わりませんので

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mu \\ d_1 \\ t_1 \end{pmatrix}$$

とし、それに加えて random effect のベクトルを

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix}$$

とおくのです*11。こうして、ベクトル表示してやりますと、

$$\begin{pmatrix} 120 \\ 110 \\ 130 \\ 140 \\ 150 \\ 130 \\ 100 \\ 110 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu + d_1 + t_1 \\ \mu + d_2 + t_2 \\ \mu + d_1 + t_1 \\ \mu + d_2 + t_2 \\ \mu + d_1 + t_2 \\ \mu + d_2 + t_1 \\ \mu + d_1 + t_2 \\ \mu + d_2 + t_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_1 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{111} \\ \epsilon_{212} \\ \epsilon_{121} \\ \epsilon_{222} \\ \epsilon_{132} \\ \epsilon_{231} \\ \epsilon_{142} \\ \epsilon_{241} \end{pmatrix}$$

*11 random effect には制約条件を考える必要はありません。

より、右辺の誤差以外の部分を考えます。fixed effect の部分は上と全く同じ計算が成り立ち、

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \mu+d_1+t_1 \\ \mu+d_2+t_2 \\ \mu+d_1+t_1 \\ \mu+d_2+t_2 \\ \mu+d_1+t_2 \\ \mu+d_2+t_1 \\ \mu+d_1+t_2 \\ \mu+d_2+t_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_1 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_4 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mu+d_1+t_1 \\ \mu-d_1-t_1 \\ \mu+d_1+t_1 \\ \mu-d_1-t_1 \\ \mu+d_1-t_1 \\ \mu-d_1+t_1 \\ \mu+d_1-t_1 \\ \mu-d_1+t_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_1 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_4 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1\cdot\mu+1\cdot d_1+1\cdot t_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot d_1-1\cdot t_1 \\ 1\cdot\mu+1\cdot d_1+1\cdot t_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot d_1-1\cdot t_1 \\ 1\cdot\mu+1\cdot d_1-1\cdot t_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot d_1+1\cdot t_1 \\ 1\cdot\mu+1\cdot d_1-1\cdot t_1 \\ 1\cdot\mu-1\cdot d_1+1\cdot t_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{p}
\end{aligned}
$$

と書くことができます。ここで、fixed effect と random effect を別々に

$$
\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

とおきますと、$\mathbf{X}$, $\mathbf{Z}$ の 2 つがこのモデルのデザイン行列となります。また、モデル全体は

$$
\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{p} + \boldsymbol{\epsilon}
$$

と書けます[*12]。

[*12] もう一度注意しておきますが、$\boldsymbol{\beta}$ は fixed effect (定数ベクトル）で、$\mathbf{p}$ は random effect（確率変数ベクトル）です。

5　ダミー変数について

最後に**ダミー変数**について述べます。たとえば先の共分散分析のモデルをもう一度見てみます。

$$\text{（第１群）}: y_{1j} = \mu + a + bx_{1j} + \epsilon_{1j} \qquad (\epsilon_{1j} \sim N(0, \sigma^2)) \tag{16}$$

$$\text{（第２群）}: y_{2j} = \mu \qquad\quad + bx_{2j} + \epsilon_{2j} \qquad (\epsilon_{2j} \sim N(0, \sigma^2)) \tag{17}$$

です。このとき、切片に注目しますと

（第１群） $\mu + a$

（第２群） μ

であり、第１群の方だけに a がついています。モデル式はこれ以外の部分は同じですので、**ここの部分がまとめて書ければ両方を１つの式で書くことができるようになります**。これを可能にするために用いられるのが ダミー変数 です。つまり、ここの部分を

$$\mu + D_i \cdot a$$

とおいてやり、この D_i (i：投与群) を

$$D_i = \begin{cases} 1 & (i = 1 \text{ のとき}) \\ 0 & (i = 2 \text{ のとき}) \end{cases}$$

という風にしてやります。そうすると上のモデル式 (16)(17) を１つの式にまとめて

$$y_{ij} = \mu + D_i \cdot a + bx_{ij} + \epsilon_{ij}$$

と書くことができます。このように、**ある特定の群にだけしか存在しない変数があるときに、全ての群でのモデルを１つの式で表すために用いる変数**を ダミー変数 と呼びます。

同様に、１元配置分散分析モデル

$$y_{1j} = \mu_1 + \epsilon_{1j}$$
$$y_{2j} = \mu_2 + \epsilon_{2j}$$
$$y_{3j} = \mu_3 + \epsilon_{3j}$$

も、３つのダミー変数 $D_{1i},\ D_{2i},\ D_{3i}$ を

$$D_{1i} = \begin{cases} 1 & (i = 1 \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad D_{2i} = \begin{cases} 1 & (i = 2 \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad D_{3i} = \begin{cases} 1 & (i = 3 \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

と定義してやると、これらを用いて

$$y_{ij} = D_{1i} \cdot \mu_1 + D_{2i} \cdot \mu_2 + D_{3i} \cdot \mu_3 + \epsilon_{ij}$$

と書くこともできます[*13]。なお、このダミー行列を用いて、デザイン行列を表現することもできます。一元配置のときに用いた (11) の式は

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{21} & D_{31} \\ D_{11} & D_{21} & D_{31} \\ D_{11} & D_{21} & D_{31} \\ D_{12} & D_{22} & D_{32} \\ D_{12} & D_{22} & D_{32} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \end{pmatrix}$$

のように表現できます。

[*13] この D_{1i} などは、数学では Kronecker の δ (クロネッカーのデルタ）と呼ばれるものと同じです。Kronecker の δ は

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

と定義されるものです。