マルコフ基底と実験計画

鹿児島大 理工・JST CREST　青木敏

東京大 情報理工・JST CREST　竹村彰通

2012 年 2 月 22 日

JST CREST Gröbner School

グレブナー道場 第 4 章 目次

4.3 実験計画とマルコフ基底

4.3.1 2 水準実験

4.3.2 組合せ配置データの解析

4.3.3 一部実施計画データの解析

4.1 分割表の条件付検定

4.1.1 十分統計量

- X : 離散確率変数
- x : X の実現値
- X, x は, 非負整数 $\{0, 1, 2, \ldots\}$ の値をとる.
  多次元確率変数は太字で, 個々の変数は添字で表現する.
  例えば,

$$\boldsymbol{X} = (X_i) = (X_1, X_2, \ldots, X_n)$$

$$\boldsymbol{X} = (X_{ij}) = (X_{11}, \ldots, X_{1J}, \ldots, X_{I1}, \ldots, X_{IJ})$$

$$\Pr(\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \Pr(X_{ij} = x_{ij} \textbf{ for all } i, j)$$

という具合.

- $p(\boldsymbol{x}) = \Pr(\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$: $\boldsymbol{X}$ の確率分布 (確率関数)
  $p(\boldsymbol{x})$ は, パラメータ (母数) で特徴付けられる.
- [定義 4.1.1] 一般に, 多次元確率変数 $\boldsymbol{X}$ の関数 (統計量) を $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{X}) = (T_1(\boldsymbol{X}), \ldots, T_k(\boldsymbol{X}))$, パラメータを $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_\nu)$ とする. $\boldsymbol{T}$ を与えたときの $\boldsymbol{X}$ の条件付分布

$$p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{t}) = \Pr(\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{T}(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{t})$$

  が θ によらないとき, $\boldsymbol{T}$ を θ の十分統計量とよぶ.
- つまり, $\boldsymbol{T}$ の値を知っていれば, $\boldsymbol{X}$ はそれ以上 θ に関する情報をもたない ($\boldsymbol{T}$ を知れば十分), という意味.

- [定理 $4.1.3$](分解定理) T が θ の十分統計量であるための必要十分条件は, X の確率分布が

$$p(\boldsymbol{x}) = h(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\theta})$$

の形に分解できることである.

- [定義 $4.1.4$] $p(\boldsymbol{x})$ が,

$$p(\boldsymbol{x}) = h(\boldsymbol{x}) \exp\left(\sum_{j=1}^{k} T_j(\boldsymbol{x}) \psi_j(\boldsymbol{\theta}) - c(\boldsymbol{\theta}) \right)$$

と書けるとき, (k 母数) 指数型分布族とよぶ.

- 分解定理より, $(T_1, \ldots, T_k)$ は k 次元十分統計量である.

- 本講義で扱う分布は, すべて指数型分布族に含まれ, 多次元の母数をもつ.
- 本講義では, 母数 θ を, 興味のある母数 λ と興味のない母数 (局外母数) ψ に分解する変数変換

$$\boldsymbol{\theta} \leftrightarrow (\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\psi})$$

を考え,

$$\mathbf{H}_0: \ \boldsymbol{\lambda} = (0, \ldots, 0)$$
$$\mathbf{H}_1: \ \boldsymbol{\lambda} \neq (0, \ldots, 0)$$

の形の検定問題を考える.

- まず, 2×2 分割表の例で説明する.

4.1.2 2×2 分割表

- 観測値が 2×2 分割表として得られる 3 つの例を紹介する.
- 想定する確率分布は
  - 各行が独立な 2 項分布
  - 全体がひとつの多項分布 (4 項分布)
  - 各セルが独立なポアソン分布

  の 3 種類
- いずれの場合も, 帰無仮説に想定する自然なモデルの下では,
  局外母数に関する十分統計量が行和と列和になることを確認する.

例 4.1.5: 観測値が独立な 2 項分布にしたがう場合

胃ガンに対する喫煙のリスクを調べるため, 胃ガン患者 20 人と健常者 100 人に対し, 過去の喫煙習慣の有無を調査したところ, 以下の結果を得た. 喫煙習慣は胃ガンに関係あるといえるか?

	喫煙歴あり	喫煙歴なし	合計
胃ガン患者	14	6	20
健常者	56	44	100

(数値は架空)

- X_1: 胃ガン患者の喫煙者数
  X_2: 健常者の喫煙者数

$$X_1 \sim \mathrm{Bin}(n_1, p_1),\ \ X_2 \sim \mathrm{Bin}(n_2, p_2),\ \ X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

p_1: 胃ガン患者の喫煙確率
p_2: 健常者の喫煙確率

観測値	喫煙	非喫煙	合計
胃ガン	x_1	$n_1 - x_1$	n_1
健常者	x_2	$n_2 - x_2$	n_2

確率	喫煙	非喫煙	合計
胃ガン	p_1	$1 - p_1$	1
健常者	p_2	$1 - p_2$	1

- $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2)$ の確率分布

$$p(\boldsymbol{x}) = \binom{n_1}{x_1}\binom{n_2}{x_2} p_1^{x_1}(1-p_1)^{n_1-x_1} p_2^{x_2}(1-p_2)^{n_2-x_2},$$
$$x_1 = 0, 1, \ldots, n_1,\ \ x_2 = 0, 1, \ldots, n_2$$

- 母数は (p_1, p_2) であり，2 次元.
- 興味のある自然なモデル:「胃ガン患者と健常者の喫煙率が等しい」

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 &: \ p_1 = p_2 \\ \mathbf{H}_1 &: \ p_1 \neq p_2 \end{aligned}$$

- 指数型分布族の枠組みで考えるため，母数変換

$$\psi = \log \frac{p_2}{1-p_2}, \quad \lambda = \log \frac{p_1(1-p_2)}{p_2(1-p_1)}$$

を考える．逆変換は

$$p_1 = \frac{e^{\psi+\lambda}}{1+e^{\psi+\lambda}}, \quad p_2 = \frac{e^{\psi}}{1+e^{\psi}}$$

- 仮説 H_0 は，$\lambda = 0$ と表される.
  λ は, 対数オッズ比とよばれる量．医学統計でよく使われる.

- **新しい母数に関する確率分布 (指数型分布族)：**

$$p(\boldsymbol{x}) = \binom{n_1}{x_1}\binom{n_2}{x_2}\exp\big((x_1 + x_2)\psi + x_1\lambda$$
$$-n_1\log(1+e^{\psi+\lambda}) - n_2\log(1+e^{\psi})\big)$$

- **従って,** $\mathrm{H}_0: \ \lambda = 0$ **の下では,** $X_1 + X_2$ **が母数** ψ **の十分統計量である.**

- n_1, n_2 **が固定なので, 十分統計量を固定することは,「**2×2 **分割表の行和と列和」をすべて固定することと同値.**

例 4.1.6: 観測値が多項分布にしたがう場合

若者の政治への関心を調べるため, 街頭で 100 人に,

(1) 与野党のいずれを支持するか

(2) 今回の選挙で投票に行くか

を聞いた. 結果は以下のようになった.

支持政党と投票率には関連があるといえるか?

	与党支持	野党支持	合計
投票する	22	43	65
棄権する	14	21	35
合計	36	64	100

(数値は架空)

- $\boldsymbol{X} = (X_{11}, X_{12}, X_{21}, X_{22})$ は, 多項分布 (4 項分布) $\mathrm{M}(n, (p_{11}, p_{12}, p_{21}, p_{22}))$ にしたがう, と仮定するのが自然.
- x_{ij}, p_{ij} は以下 $(i, j = 1, 2)$

観測値	与党	野党	合計
投票	x_{11}	x_{12}	
棄権	x_{21}	x_{22}	
合計			n

確率	与党	野党	合計
投票	p_{11}	p_{12}	
棄権	p_{21}	p_{22}	
合計			1

- $\boldsymbol{X} = (X_{11}, X_{12}, X_{21}, X_{22})$ の確率分布

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{n!}{x_{11}!x_{12}!x_{21}!x_{22}!} p_{11}^{x_{11}} p_{12}^{x_{12}} p_{21}^{x_{21}} p_{22}^{x_{22}},$$

$$p_{11} + p_{12} + p_{21} + p_{22} = 1,$$

$$x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} = n$$

- 母数 $p = (p_{11}, p_{12}, p_{21}, p_{22})$ は 3 次元.
- この場合の興味のあるモデル: 「支持政党と投票率が無関係」

$$\mathbf{H}_0: \ \frac{p_{11}}{p_{12}} = \frac{p_{21}}{p_{22}} \quad \mathbf{vs} \quad \mathbf{H}_1: \ \frac{p_{11}}{p_{12}} \neq \frac{p_{21}}{p_{22}}$$

- **母数変換**

$$\psi_1 = \log \frac{p_{12}}{p_{22}}, \quad \psi_2 = \log \frac{p_{21}}{p_{22}}, \quad \lambda = \log \frac{p_{11}p_{22}}{p_{12}p_{21}}$$

を考える．逆変換は

$$\begin{aligned} p_{11} &= \frac{e^{\psi_1+\psi_2+\lambda}}{1+e^{\psi_1}+e^{\psi_2}+e^{\psi_1+\psi_2+\lambda}}, \\ p_{12} &= \frac{e^{\psi_1}}{1+e^{\psi_1}+e^{\psi_2}+e^{\psi_1+\psi_2+\lambda}}, \\ p_{21} &= \frac{e^{\psi_2}}{1+e^{\psi_1}+e^{\psi_2}+e^{\psi_1+\psi_2+\lambda}}, \\ p_{22} &= \frac{1}{1+e^{\psi_1}+e^{\psi_2}+e^{\psi_1+\psi_2+\lambda}} \end{aligned}$$

- 「行 (投票に行くか) と列 (支持政党) が独立」という仮説 (行と列の独立モデル) は, $\lambda = 0$ と表される.
- 新しい母数に関する確率分布 (指数型分布族) :

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{n!}{x_{11}!x_{12}!x_{21}!x_{22}!} \exp\Big((x_{11} + x_{12})\psi_1 + (x_{21} + x_{22})\psi_2 + x_{11}\lambda \\ -n\log(1 + e^{\psi_1} + e^{\psi_2} + e^{\psi_1+\psi_2+\lambda})\Big)$$

- 従って, $\mathbf{H}_0: \ \lambda = 0$ の下では, $(X_{11} + X_{12}, X_{21} + X_{22})$ が母数 (ψ_1, ψ_2) の十分統計量である.
- n が固定なので, 十分統計量を固定することは, 「2×2 分割表の行和と列和」をすべて固定することと同値.

例 4.1.7: 観測値がポアソン分布にしたがう場合

ある工場では, ある鋳造工程で作られる製品の不良品の個数が少なくなる条件を調べるために, 2 通りの熱処理時間 (長, 短) と 2 通りの触媒 (A,B) の組合せについて, 不良品の個数を計測した. 結果は以下のようになった. 熱処理時間の長短と触媒の種類を, どのように設定するのが適切といえるか?

	触媒 A	触媒 B
長時間	5	12
短時間	7	6

(数値は架空)

- 一見, もっとも不良品数が少ない, (長時間, 触媒 A) の組合せが最適と思える.
- しかし, 「熱処理時間と触媒の種類の影響は独立」と考えれば, 「長時間」における不良品数 $(5+12=17)$ よりも「短時間」における不良品数 $(7+6=13)$ の方が少ないので, (短時間, 触媒 A) の組合せの方が適切かもしれない.
- 結局, 前の 2 例と同様, 「興味のあるモデルの当てはまり具合の評価」が重要となる.

- $X_{ij},\ i,j=1,2$：各組合せにおける不良品の個数

$$X_{ij} \sim \mathrm{Po}(\mu_{ij}),\ i,j=1,2,\ X_{ij}\ \text{はすべて独立}$$

μ_{ij} ：各組合せにおける不良品の期待値 $(E(X_{ij})=\mu_{ij})$

観測値	触媒 A	触媒 B
長時間	x_{11}	x_{12}
短時間	x_{21}	x_{22}

期待値	触媒 A	触媒 B
長時間	μ_{11}	μ_{12}
短時間	μ_{21}	μ_{22}

- $\boldsymbol{X}=(X_{11},X_{12},X_{21},X_{22})$ の確率分布

$$p(\boldsymbol{x})=\prod_{i=1}^{2}\prod_{j=1}^{2}\frac{\mu_{ij}^{x_{ij}}e^{-\mu_{ij}}}{x_{ij}!},$$

$$x_{ij}=0,1,2,\ldots$$

- **母数** $(\mu_{11}, \mu_{12}, \mu_{21}, \mu_{22})$ **は** 4 **次元.**
- **興味あるモデル: 「熱処理時間と触媒の組合せ効果はない」**

$$\mathbf{H}_0 : \ \frac{\mu_{11}}{\mu_{12}} = \frac{\mu_{21}}{\mu_{22}} \quad \mathbf{vs} \quad \mathbf{H}_1 : \ \frac{\mu_{11}}{\mu_{12}} \neq \frac{\mu_{21}}{\mu_{22}}$$

- **母数変換**

$$\psi_0 = \log \mu_{22}, \ \psi_1 = \log \frac{\mu_{12}}{\mu_{22}}, \ \psi_2 = \log \frac{\mu_{21}}{\mu_{22}}, \ \lambda = \log \frac{\mu_{11}\mu_{22}}{\mu_{12}\mu_{21}}$$

を考える. 逆変換は

$$\mu_{11} = e^{\psi_0+\psi_1+\psi_2+\lambda}, \ \mu_{12} = e^{\psi_0+\psi_1}, \ \mu_{21} = e^{\psi_0+\psi_2}, \ \mu_{22} = e^{\psi_0}$$

- **「行 (熱処理時間) と列 (触媒の種類) に交互作用はない」という仮説 (主効果モデル) は,** $\lambda = 0$ **と表される.**

- **新しい母数に関する確率分布 (指数型分布族)：**

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{x_{11}!x_{12}!x_{21}!x_{22}!} \exp\big((x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22})\psi_0 + (x_{11}+x_{12})\psi_1 + (x_{11}+x_{21})\psi_2 + x_{11}\lambda - (e^{\psi_0+\psi_1+\psi_2+\lambda} + e^{\psi_0+\psi_1} + e^{\psi_0+\psi_2} + e^{\psi_0})\big)$$

- **従って，$\mathbf{H}_0:\ \lambda = 0$ の下では，**

$$(X_{11}+X_{12}+X_{21}+X_{22}, X_{11}+X_{12}, X_{21}+X_{22})$$

が母数 (ψ_0, ψ_1, ψ_2) の十分統計量である．

- **この場合も，十分統計量を固定することは，「2×2 分割表の行和と列和」をすべて固定することと同値．**

まとめ

- 3 つの例は, データの取り方 (行和固定 or 総和固定 or 固定しない) が異なるため, 仮定する確率分布も, 母数の次元も異なる.
- 興味の対象となる自然なモデルは
  独立な 2 項分布: 「母比率が共通」
  多項分布: 「行と列が独立」
  独立なポアソン分布: 「2 因子交互作用がない」
- これらは，適切な変数変換により, 1 次元母数 λ に関する帰無仮説
  $$\mathbf{H}_0 \ : \ \lambda = 0$$
  として表すことができる.
- このとき, 残りの「興味のない母数」(これは局外母数とよばれる) に関する十分統計量は, 2×2 分割表の行和と列和となる.

- 「何も構造を仮定しないモデル」では, 母数の次元はデータの次元に等しい. 例えば,
  - 例 1 (独立な 2 項分布) では, 母数 (p_1, p_2) は 2 次元.
  - 例 2 (4 項分布) では, 母数 $(p_{11}, p_{12}, p_{21}, p_{22})$ は 3 次元 ($\sum p_{ij} = 1$ の制約があるので).
  - 例 3 (独立なポアソン分布) では, 母数 $(\mu_{11}, \mu_{12}, \mu_{21}, \mu_{22})$ は 4 次元.

  このようなモデルを, 飽和モデルという.

- 本講義で扱う問題は,

  H_0 : 「母数の次元が少ない, 飽和モデルのサブモデル」vs
  H_1 : 「飽和モデル」

  の検定問題.

Remark

- 統計学では, 伝統的に, 確率の対数をとって考えることが多い.
  これまで見てきた変数変換は, 対数線形モデル

  $$\log p_{ij} = \psi_0 + \psi_{1i} + \psi_{2i} + \lambda_{ij}$$

  において, 母数の次元が合うように適当な制約を入れて書き直したものに他ならない.

- 最近では, 母数の対数をとらずに, 単項式のままで考えることも多い (toric model). 例えば, 2 元分割表の独立モデルであれば,

  $$p_{ij} = \alpha_i \beta_j$$

  と書けばよい.

この場合も, 母数の次元を合わせるために適当な制約を入れなければならない点は同じなので, 結局, 同じような変換を考えることになる. しかし, 例えば多項分布の場合, 確率関数は

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{n!}{\prod_{i,j} x_{ij}!} \prod_{i,j} p_{ij}^{x_{ij}} = \frac{n!}{\prod_{i,j} x_{ij}!} \left(\prod_i \alpha_i^{x_{i+}} \right) \left(\prod_j \beta_j^{x_{+j}} \right)$$

となり, 行和と列和が十分統計量になることが分かる.

- 対数で (対数線形モデル) を考えることのメリット:

母数の解釈がしやすい.

本講義では, 主に, 統計学の伝統的な記法である, 対数線形モデルで説明する.

4.1.3 相似検定

- 本講義では, 帰無仮説

$$\mathbf{H}_0 \ : \ \boldsymbol{\lambda} = (0, \ldots, 0)$$

の検定問題を, 局外母数に関する十分統計量を固定した条件付分布にもとづく条件付検定として解く手法を紹介する.

- このような検定は, 相似検定とよばれる.
- 2×2 分割表の 3 つの例では, 観測値とその行和, 列和を統一的に

$$\begin{array}{|c|c|c}
\hline
x_{11} & x_{12} & x_{1+} \\
\hline
x_{21} & x_{22} & x_{2+} \\
\hline
\multicolumn{1}{c}{x_{+1}} & \multicolumn{1}{c}{x_{+2}} & x_{++}
\end{array}$$

と書けば,

H_0 の下での条件付分布はすべて (例えば x_{11} の)1 変数関数となり,

$$
\begin{aligned}
p(x_{11} \mid x_{++}, x_{1+}, x_{+1}) &= \frac{x_{1+}!x_{2+}!x_{+1}!x_{+2}!}{x_{++}!} \prod_{i=1}^{2} \prod_{j=1}^{2} \frac{1}{x_{ij}!} \\
&= \frac{\binom{x_{1+}}{x_{11}} \binom{x_{++} - x_{1+}}{x_{+1} - x_{11}}}{\binom{x_{++}}{x_{+1}}}
\end{aligned}
$$

と書ける (命題 4.1.10).これは, 超幾何分布とよばれる.

- **超幾何分布: 「壷の中に, 1 と書いた球を x_{1+} 個, 2 と書いた球を x_{2+} 個入れ, そこから目隠しして x_{+1} 個を取り出す.このとき, 取り出した球のうち 1 と書かれた球の数 X_{11} の分布」**

- このように, 条件付分布を考えることにより, 局外母数によらず, また, (データの取り方に依存して決まる) 最初に仮定した確率分布にもよらない議論をする.
- 2×2 分割表の例であれば, 例えば片側検定

$$\mathbf{H}_0 \;:\; \lambda = 0$$
$$\mathbf{H}_1 \;:\; \lambda > 0$$

であれば,

$$X_{11} > c \implies \mathbf{H}_0 \text{ を棄却}$$

という検定方式が自然.

- この検定の**有意確率 (p 値)** は,

$$p\ 値 = \Pr(X_{11} \geq x_{11} \mid \mathbf{H}_0) = \sum_{x \geq x_{11}} p(x \mid x_{++}, x_{1+}, x_{+1})$$

  と書ける．この値を計算し，有意水準 α (例えば 0.05) と比較して,

$$p\ 値 \leq 0.05 \implies \mathbf{H}_0\ を棄却$$

  とすればよい．

- p 値：H_0 が真と仮定したときに，実際に得られたデータが (H_1 の方向に)「どれだけ珍しいか」を評価したもの (確率).
  この値が小さいときには，「今回の測定で，たまたまこんな珍しい出来事が起こったと考えるのは不自然だ．つまり，H_0 は誤りである」と判断するのが，統計的仮説検定の考え方．

- **胃ガン患者と喫煙歴の例:**

	喫煙歴あり	喫煙歴なし	合計
胃ガン患者	**14**	**6**	**20**
健常者	**56**	**44**	**100**
合計	**70**	**50**	**120**

$$p(x_{11} \mid 120, 20, 70) = \frac{\binom{20}{x_{11}}\binom{100}{70 - x_{11}}}{\binom{120}{70}}$$

$$p\text{ 値} = \sum_{x=14}^{20} p(x \mid 120, 20, 70) = 0.1818$$

H_0 は棄却できない．「胃ガン患者の方が喫煙率が高い」(あるいは，「喫煙者の方が胃ガンになりやすい」) とはいえない．

- **R での計算**

```
> data <- matrix(c(14,6,56,44),2,2,byrow=T)
> data
     [,1] [,2]
[1,]   14    6
[2,]   56   44
> fisher.test(data,alternative="greater")

        Fisher's Exact Test for Count Data

data:  data
p-value = 0.1818
alternative hypothesis: true odds ratio is greater than 1
95 percent confidence interval:
 0.697064      Inf
sample estimates:
odds ratio
  1.824451

>
```

- **もう少し小さい例で考えてみる (例題 7.2.1 の類題).**

	喫煙	なし	合計
胃ガン	**2**	**1**	**3**
健常者	**2**	**3**	**5**
合計	**4**	**4**	**8**

$$p(x_{11} \mid 8, 3, 4) = \frac{\binom{3}{x_{11}}\binom{5}{4-x_{11}}}{\binom{8}{4}}$$

超幾何分布 (独立性の帰無仮説) の下では, 十分統計量が等しい以下の 4 つの結果

$$\boxed{\begin{matrix} 3 & 0 \\ 1 & 4 \end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix} 2 & 1 \\ 2 & 3 \end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix} 1 & 2 \\ 3 & 2 \end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix} 0 & 3 \\ 4 & 1 \end{matrix}}$$

が得られる確率は, 順に $\left(\frac{1}{14}, \frac{6}{14}, \frac{6}{14}, \frac{1}{14}\right)$.

$$\begin{aligned} p\ \text{値} &= \Pr(\text{実際の観測値 } x_{11} = 2 \text{ と同程度以上に珍しい結果が得られる}) \\ &= p(2 \mid 8, 3, 4) + p(3 \mid 8, 3, 4) = 0.5 \end{aligned}$$

4.1.4 $I \times J$ 分割表

- 次に, 一般の $I \times J$ 分割表の検定について述べる. この場合, $\boldsymbol{\lambda}$ は多次元であり, H_0 は複合仮説となる.
- 考え方は 2×2 分割表の場合と同じ. つまり, 適当な母数変換により, 母数を $(\psi, \boldsymbol{\lambda})$ と変換し, 局外母数 ψ に関する十分統計量を固定した条件付検定 (相似検定) を行う.
- ただし, 条件付分布は多次元分布となり, 適当な検定統計量を考える必要がある.

2 元分割表の独立性の検定の例 (例 4.1.12)

例：幾何数理工学と推測数理工学の試験成績

幾何 \ 推測	5	4	3	2	1-	計
5	2	1	1	0	0	4
4	8	3	3	0	0	14
3	0	2	1	1	1	5
2	0	0	0	1	1	2
1-	0	0	0	0	1	1
計	10	6	5	2	3	26

- これは, 5 行 5 列の２元分割表
- H_0 ：「幾何数理工学と推測数理工学の成績は独立」

- $\boldsymbol{X} = (X_{11}, \ldots, X_{15}, \ldots, X_{51}, \ldots, X_{55})$
- この場合の自然なモデルは, 総度数 n を固定した多項分布モデル

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{n!}{\prod_{i,j} x_{ij}!} \prod_{i,j} p_{ij}^{x_{ij}}, \quad \sum_{i,j} p_{ij} = 1,$$

$$\sum_{i,j} x_{ij} = n$$

  p_{ij} は, (i, j) セルの生起確率を表す母数.
- 飽和モデルの母数の次元は, $IJ - 1 = 24$.

- **母数変換:** 2×2 **の場合の拡張 (式 (4.25))**

$$
\begin{cases}
\psi_{1i} = \log \dfrac{p_{iJ}}{p_{IJ}}, \quad i = 1, \ldots, I-1, \\
\psi_{2j} = \log \dfrac{p_{Ij}}{p_{IJ}}, \quad j = 1, \ldots, J-1, \\
\lambda_{ij} = \log \dfrac{p_{ij} p_{IJ}}{p_{iJ} p_{Ij}}, \quad i = 1, \ldots, I-1, \ j = 1, \ldots, J-1
\end{cases}
$$

- **逆変換は複雑 (式 (4.26)) だが，この変換は 1 対 1 変換．**
飽和モデルの次元は確かに,

$$
(I-1) + (J-1) + (I-1)(J-1) = IJ - 1
$$

- $p_{IJ} = e^{\psi_0}$ **とおけば，この変換は**

$$
\log p_{ij} = \psi_0 + \psi_{1i} + \psi_{2j} + \lambda_{ij}
$$

と書き直される．これは対数線形モデルとよばれる．

- 対数線形モデルでは, 母数はそれぞれ,
  - ψ_{1i} : 因子 1 の水準 i の主効果 (幾何の成績 i の主効果)
  - ψ_{2j} : 因子 2 の水準 j の主効果 (推測の成績 j の主効果)
  - λ_{ij} : 因子 $1, 2$ の水準組合せ (i, j) の交互作用 (幾何と推測の成績が (i, j) の交互作用)

  と解釈できる.（これも, 統計学の伝統的な用語.）
- 独立性の仮説は,

$$\mathbf{H}_0 \ : \ p_{ij} = \alpha_i \beta_j \ \textbf{for all} \ (i, j)$$

と書ける. これは, 新しい母数について,

$$\mathbf{H}_0 \ : \ \lambda_{ij} = 0 \ \textbf{for all} \ (i, j)$$

と書き直せる.

- 局外母数は

$$\psi_0, \psi_{11}, \ldots, \psi_{1I}, \psi_{21}, \ldots, \psi_{2J}$$

- [命題 4.1.14] 局外母数の十分統計量は,

$$x_{++}, x_{1+}, \ldots, x_{I+}, x_{+1}, \ldots, x_{+J}$$

つまり, 2 元分割表の行和と列和になる.

- [命題 4.1.15] H_0 のもとでの条件付分布は, 多項超幾何分布

$$p(\boldsymbol{x} \mid x_{i+}, x_{+j}, \lambda_{ij} = 0) = \frac{\left(\prod_i x_{i+}!\right)\left(\prod_j x_{+j}!\right)}{x_{++}! \prod_{i,j} x_{ij}!}$$

になる.

- ここまでは, 2×2 のときと同じ.

- 本講義では, 対立仮説 H_1 は飽和モデルの場合のみを考える.
- つまり, 飽和モデルの母数を適当に母数変換して $(\psi, \boldsymbol{\lambda})$ と書いたとき, 局外母数 ψ の十分統計量を固定した条件付分布にもとづき, 検定問題

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 &: \boldsymbol{\lambda} = (0, \ldots, 0) \\ \mathbf{H}_1 &: \boldsymbol{\lambda} \neq (0, \ldots, 0) \end{aligned}$$

を考える.
- 応用上は, 対立仮説が飽和モデルよりも小さい場合の検定, 例えば, 母数が $(\psi, \lambda_1, \lambda_2)$ と書けるときに

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 &: \lambda_1 = \lambda_2 = 0 \\ \mathbf{H}_1 &: \lambda_1 \neq 0,\ \lambda_2 = 0 \end{aligned}$$

のような検定も重要であるが, 本講義では省略する.

- 対立仮説が飽和モデルである検定は, 一般に, 適合度検定とよばれる.
- H_0 が表すモデルの自由度は,

$$\text{飽和モデルの自由度} - \lambda \text{ の次元},$$

つまり, 局外母数 ψ の次元.

- 検定統計量の自由度は, H_1, H_0 の表すモデルの自由度の差, つまり, λ の次元となる.

- 2 元分割表の独立性の問題の場合, 検定問題は

$$
\begin{aligned}
\mathbf{H}_0 &: \lambda_{ij} = 0 \ \textbf{for all} \ (i,j) \\
\mathbf{H}_1 &: \lambda_{ij} \neq 0 \ \textbf{for some} \ (i,j)
\end{aligned}
$$

  となる.

- 代表的な検定:
  - カイ２乗適合度検定

$$
\chi^2(\boldsymbol{x}) = \sum_i \sum_j \frac{(x_{ij} - m_{ij})^2}{m_{ij}} > c_\alpha \Rightarrow \mathbf{H}_0 \ \textbf{reject}
$$

  - 尤度比検定

$$
G^2(\boldsymbol{x}) = 2 \sum_i \sum_j x_{ij} \log \frac{x_{ij}}{m_{ij}} > c_\alpha \Rightarrow \mathbf{H}_0 \ \textbf{reject}
$$

- ここで, $\mathbf{m} = (m_{ij})$ は, H_0 のもとでの当てはめ値 (fitted value). 多項分布モデルでは $E(X_{ij}) = np_{ij}$ であるから, $\mathbf{m}$ は

$$m_{ij} = n\hat{p}_{ij}$$

と定義される．ただし, $\hat{p}_{ij}$ は H_0 のもとでの p_{ij} の最尤推定値. つまり, 対数尤度関数

$$L = \mathbf{Const} + \sum_{i,j} x_{ij} \log p_{ij}$$

を, $\boldsymbol{\lambda} = (0, \ldots, 0)$ の制約下で最大化したもの.

- 当てはめ値は, 一般には, 比例反復法で求める. 2 元分割表の独立モデルでは,

$$m_{ij} = \frac{x_{i+}x_{+j}}{x_{++}}$$

となる.

観測値 $\boldsymbol{x}^o = (x^o_{ij})$

	5	**4**	**3**	**2**	**1-**	**計**
5	**2**	**1**	**1**	**0**	**0**	**4**
4	**8**	**3**	**3**	**0**	**0**	**14**
3	**0**	**2**	**1**	**1**	**1**	**5**
2	**0**	**0**	**0**	**1**	**1**	**2**
1-	**0**	**0**	**0**	**0**	**1**	**1**
計	**10**	**6**	**5**	**2**	**3**	**26**

H_0 のもとでの当てはめ値 $\mathbf{m} = (m_{ij})$

	5	4	3	2	1-	計
5	1.54	0.92	0.77	0.31	0.46	4
4	5.38	3.23	2.69	1.08	1.62	14
3	1.92	1.15	0.96	0.38	0.58	5
2	0.77	0.46	0.38	0.15	0.23	2
1-	0.38	0.23	0.19	0.08	0.12	1
計	10	6	5	2	3	26

$$\chi^2(\boldsymbol{x}^o) = \sum_i \sum_j \frac{(x_{ij}^o - m_{ij})^2}{m_{ij}} = \frac{(2-1.54)^2}{1.54} + \cdots + \frac{(1-0.12)^2}{0.12} = 25.338$$

- 有意性の評価 (p 値の計算)
  $\cdots\ \chi^2(\boldsymbol{x}^o) = 25.338$ は有意に大きいか？

  (a) 漸近分布論の利用

  (b) 正確法

  (c) モンテカルロ法

(a) **漸近分布論の利用**

- **H_0 のもとで，$\chi^2(\boldsymbol{x})$ は自由度 $(5-1)(5-1)=16$ のカイ２乗分布に漸近的にしたがう．**
  (漸近的: ある正則条件のもとで, $n \to \infty$ とした極限)

$$\Downarrow$$

- **自由度 16 のカイ２乗分布の上側 α パーセント点と $\chi^2(\boldsymbol{x}^o)$ を比較する．**
  $\chi_{16,0.05} = 26.30$ **なので，有意水準 5% では**
  H_0 **は棄却されない**

- **欠点：疎 (sparse) な分割表に対する漸近分布論の当てはまりは悪い．**

- **R での計算**

```
> data <- matrix(c(2,1,1,0,0,8,3,3,0,0,0,2,1,1,1,0,0,0,1,1,0,0,0,0,1),
                 byrow=T,ncol=5)
> data
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
[1,]    2    1    1    0    0
[2,]    8    3    3    0    0
[3,]    0    2    1    1    1
[4,]    0    0    0    1    1
[5,]    0    0    0    0    1
> res <- chisq.test(data)
Warning message:
カイ自乗近似は不正確かもしれません in: chisq.test(data)
> res

        Pearson's Chi-squared test

data:  data
X-squared = 25.3376, df = 16, p-value = 0.06409
```

```
> qchisq(0.95,16)
[1] 26.29623
> res$expected
          [,1]      [,2]      [,3]       [,4]      [,5]
[1,] 1.5384615 0.9230769 0.7692308 0.30769231 0.4615385
[2,] 5.3846154 3.2307692 2.6923077 1.07692308 1.6153846
[3,] 1.9230769 1.1538462 0.9615385 0.38461538 0.5769231
[4,] 0.7692308 0.4615385 0.3846154 0.15384615 0.2307692
[5,] 0.3846154 0.2307692 0.1923077 0.07692308 0.1153846
>
```

(b) **正確法**

○ H_0 **のもとでの** x **の分布（超幾何分布）：**

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{\left(\prod_i x_{i+}!\right)\left(\prod_j x_{+j}!\right)}{x_{++}! \prod_{i,j} x_{ij}!}$$

○ **行和，列和が** x^o **と等しい分割表の集合：**

$$\mathcal{F} = \left\{ \boldsymbol{x} \;\middle|\; x_{i+} = x^o_{i+},\ x_{+j} = x^o_{+j},\ x_{ij} \in \{0, 1, 2, \ldots\} \right\}$$

○ **適合度カイ 2 乗検定の正確な p 値：**

$$p = \Pr(\chi^2(\boldsymbol{x}) \geq \chi^2(\boldsymbol{x}^o) \mid \mathbf{H}_0) = \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{F}} g(\boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x}),$$

$$g(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1, & \textbf{if } \chi^2(\boldsymbol{x}) \geq \chi^2(\boldsymbol{x}^o), \\ 0, & \textbf{otherwise} \end{cases}$$

○ **欠点：**$\#\mathcal{F}$ **が大きいと計算量が膨大になる．**

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{(4!14!5!2!1!)\,(10!6!5!2!3!)}{26!} \prod_{i=1}^{5} \prod_{j=1}^{5} \frac{1}{x_{ij}!}$$

$$\mathcal{F} = \left\{ \boldsymbol{x} = (x_{ij}) \;\middle|\; \begin{array}{|ccccc|c} \hline x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} & x_{15} & 4 \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} & x_{25} & 14 \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} & x_{35} & 5 \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} & x_{45} & 2 \\ x_{51} & x_{52} & x_{53} & x_{54} & x_{55} & 1 \\ \hline \multicolumn{1}{c}{10} & 6 & 5 & 2 & \multicolumn{1}{c}{3} & 26 \end{array} \right\} \quad (\#\mathcal{F} = 229,174)$$

$$\chi^2(\boldsymbol{x}^o) = 25.338$$

$$p = \Pr(\chi^2(\boldsymbol{x}) \geq 25.338 \mid \mathbf{H}_0) = \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{F}} g(\boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x}) = 0.0609007$$

$$g(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1, & \textbf{if } \chi^2(\boldsymbol{x}) \geq 25.338, \\ 0, & \textbf{otherwise} \end{cases}$$

(c) モンテカルロ法

$p = \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{F}} g(\boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x})$ の値を，$p(\boldsymbol{x})$ からのサンプル $\boldsymbol{x}_1, ..., \boldsymbol{x}_N$ を用いて

$\frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N} g(\boldsymbol{x}_t)$ と推定する．

- N を大きくすれば，任意の精度で推定可能．
- 任意の統計量に適用可能．
- 欠点：$p(\boldsymbol{x})$ の形が複雑だと，サンプルの発生方法は簡単でない．

本講義では，マルコフ連鎖を利用したサンプルの発生方法を紹介する．
(マルコフ連鎖・モンテカルロ法)

- **マルコフ連鎖・モンテカルロ法（MCMC 法）**

 定常分布が H_0 のもとでの条件付分布 $p(x)$ に一致するマルコフ連鎖を構成する.

 適当な初期値から, 十分大きな回数 (例えば $50,000$ 回, $100,000$ 回など) の状態推移を行えば, その時点ではマルコフ連鎖は定常分布に収束しているとみなせるので, そこから先の状態推移を定常分布からのサンプルとして使用する.

$$\boldsymbol{x}^{(0)} \longrightarrow \boldsymbol{x}^{(1)} \longrightarrow \boldsymbol{x}^{(2)} \longrightarrow \cdots \longrightarrow \underbrace{\boldsymbol{x}^{(100000)} \longrightarrow \boldsymbol{x}^{(100001)} \longrightarrow \cdots}_{\text{定常分布からのサンプル}}$$

 Metropolis-Hastings **アルゴリズム**により,

 $\mathcal{F}$ 上で連結な**任意の**マルコフ連鎖から,

 定常分布が $p(x)$ に一致するマルコフ連鎖を構成できる.

- ○ $\mathcal{F} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_s\}$ **(適当に番号付けられているとする．)**
- ○ $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \ldots, \pi_s)$ **：** H_0 **のもとでの条件付分布** $\pi_i = p(\boldsymbol{x}_i)$
- ○ $\{Z_t,\ t = 0, 1, 2, \ldots\}$ **：確率過程**
- ○ **推移確率行列** $Q = (q_{ij})$ **：**

$$q_{ij} = \Pr(Z_{t+1} = \boldsymbol{x}_j \mid Z_t = \boldsymbol{x}_i)$$

- ○ $\boldsymbol{\pi}$ **が平衡方程式**

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} Q$$

を満たすとき, π **を定常分布とよぶ.**

○ **[定理 4.1.22](Metropolis-Hastings)**
$R=(r_{ij})$ を, $\mathcal{F}$ 上の連結, 対称な任意のマルコフ連鎖の推移確率行列とする. このとき, $Q=(q_{ij})$ を,

$$
\begin{aligned}
q_{ij} &= r_{ij}\min\left(1,\ \frac{\pi_j}{\pi_i}\right),\ \ i\neq j,\\
q_{ii} &= 1-\sum_{j\neq i} q_{ij}
\end{aligned}
$$

と定義すれば, Q は平衡方程式を満たす.

○ つまり, $\mathcal{F}$ 上で連結, 対称であるようなマルコフ連鎖が (どんなものでもよいからひとつ) 作ればよい.

○ 条件付分布の基準化定数の計算は不要.

4.2 マルコフ基底

4.2.1 マルコフ基底

- $\boldsymbol{x} = (x_{11}, \ldots, x_{IJ})'$: 分割表（頻度ベクトル．列ベクトルとする）
- $\boldsymbol{t} = A\boldsymbol{x}$: 固定する十分統計量 (行列の形で書く)
  例えば, 2×3 分割表の独立モデルであれば,

$$\begin{pmatrix} x_{1+} \\ x_{2+} \\ x_{+1} \\ x_{+2} \\ x_{+3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{12} \\ x_{13} \\ x_{21} \\ x_{22} \\ x_{23} \end{pmatrix}$$

- $\mathcal{F}_{\boldsymbol{t}} = \{\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \mid A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{t}\}$: 十分統計量が t に等しい分割表の集合（$\boldsymbol{t}$-fiber）

  MCMC 法によって相似検定の p 値を計算するために，
  観測値 x^o が含まれる t-fiber 上に，連結なマルコフ連鎖を構成したい．

- $\mathcal{M}$ を以下で定義する．

$$\begin{aligned}\mathcal{M} &= \mathrm{Ker}(A) \cap \mathbb{Z}^p \\ &= \{\mathbf{z} \mid A\mathbf{z} = \mathbf{0},\ \mathbf{z} \text{ の成分 } \in \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}\} \\ &= \{ \text{固定する十分統計量がすべてゼロである整数ベクトル} \}\end{aligned}$$

(p ば分割表のセル数)

- $\mathcal{M}$ の要素を move と呼ぶ．
- $\boldsymbol{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{F}_{\boldsymbol{t}}$ が $\mathcal{B} \subset \mathcal{M}$ によって相互到達可能

$\overset{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ $N > 0,\ \mathbf{z}_j \in \mathcal{B},\ \varepsilon_j \in \{-1, 1\},\ j = 1, \dots, N$ が存在して

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{x} + \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j \mathbf{z}_j \text{ かつ } \boldsymbol{x} + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j \mathbf{z}_j \in \mathcal{F}_{\boldsymbol{t}},\ n = 1, \dots, N$$

が成り立つ

- **相互到達可能性は，$\mathcal{F}_t$ 内の同値関係であり，$\mathcal{F}_t$ は $\mathcal{B}$ によって排反な同値類に分解される．この同値類を $\mathcal{F}_t$ の $\mathcal{B}$-同値類と呼ぶ．**

- **マルコフ基底 (Diaconis and Sturmfels, 1998)**

  move の有限集合 $\mathcal{B} \subset \mathcal{M}$ が (A に対する) マルコフ基底
  $\overset{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ **任意の t に対して $\mathcal{F}_t$ がそれ自身ひとつの $\mathcal{B}$-同値類となる**

- **マルコフ基底が求まれば，任意の観測値に対する t-fiber 上に連結なマルコフ連鎖が構成できるので，MCMC 法により相似検定の p 値が計算できる．**

アルゴリズムの例 (アルゴリズム 4.2.4)

入力: 観測値 $\boldsymbol{x}^o$, マルコフ基底 $\mathcal{B}$, 総ステップ数 N, 配置行列 A,

帰無分布 $f(\cdot)$, 検定統計量 $T(\cdot)$, ($\boldsymbol{t} = A\boldsymbol{x}^o$ とおく)

出力: p 値の推定値

変数: obs, count, sig, $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x}_{next}$

ステップ 1: $\texttt{obs} = T(\boldsymbol{x}^o)$, $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^o$, $\texttt{count} = 0$, $\texttt{sig} = 0$

ステップ 2: $\mathbf{z} \in \mathcal{B}$ をランダムに，$\varepsilon \in \{-1, +1\}$ を等確率で選ぶ.

ステップ 3: $\boldsymbol{x} + \varepsilon\mathbf{z} \notin \mathcal{F}_{\boldsymbol{t}}$ であれば $\boldsymbol{x}_{next} = \boldsymbol{x}$ としてステップ 5 へ. $\boldsymbol{x} + \varepsilon\mathbf{z} \in \mathcal{F}_{\boldsymbol{t}}$ であれば u を 0 と 1 の間の一様乱数とする.

ステップ 4: $u \leq \dfrac{f(\boldsymbol{x} + \varepsilon\mathbf{z})}{f(\boldsymbol{x})}$ であれば $\boldsymbol{x}_{next} = \boldsymbol{x} + \varepsilon\mathbf{z}$ としてステップ 5 へ. $u > \dfrac{f(\boldsymbol{x} + \varepsilon\mathbf{z})}{f(\boldsymbol{x})}$ であれば $\boldsymbol{x}_{next} = \boldsymbol{x}$ としてステップ 5 へ.

ステップ 5: $T(\boldsymbol{x}_{next}) \geq \texttt{obs}$ であれば $\texttt{sig} = \texttt{sig} + 1$

ステップ 6: $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_{next}$, $\texttt{count} = \texttt{count} + 1$

ステップ 7: $\texttt{count} < N$ であればステップ 2 へ

ステップ 8: p 値の推定値は $\texttt{sig}/N$

- 任意の A に対して，マルコフ基底が存在する．
  (ヒルベルトの基底定理)
- 任意の A に対して，マルコフ基底を計算するアルゴリズムがある．

- 本講義では，まず，分割表のふたつの問題に対して，マルコフ基底を紹介する．その後，マルコフ基底の計算アルゴリズムを紹介する．

4.2.2 マルコフ基底の例

2 元分割表の独立モデルのマルコフ基底

- $\boldsymbol{x} = (x_{11}, \ldots, x_{IJ})'$: $I \times J$ の分割表，$x_{ij} \in \{0, 1, 2, ...\}$

$$\boxed{\begin{array}{ccc} x_{11} & \cdots & x_{1J} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{I1} & \cdots & x_{IJ} \end{array}}$$

- 固定する十分統計量は行和と列和：
  $\boldsymbol{t} = (x_{1+}, \ldots, x_{I+}, x_{+1}, \ldots, x_{+J})'$
- 任意に与えられた $\boldsymbol{t} = A\boldsymbol{x}^o$ に対して，

$$\mathcal{F}_{\boldsymbol{t}} = \{\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \mid A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{t}\}$$

上に連結なマルコフ連鎖を作りたい．

これは簡単

[定理 4.2.6] $\mathcal{F}_t$ 上の連結なマルコフ連鎖の構成：

$$\begin{array}{cc} + & - \\ - & + \end{array}$$ の形の推移のみで十分（マルコフ基底をなす）.

- 証明は背理法による.
- $\begin{array}{cc} + & - \\ - & + \end{array}$ の形の move の集合 $\mathcal{B}$ だけではマルコフ基底にならない，つまり,「ある t について $\mathcal{F}_t$ がそれ自身ひとつの $\mathcal{B}$-同値類にならない」ことを仮定して矛盾を導く.

アルゴリズムの例:

- $x \in \mathcal{F}_t$: **現在の状態**
- **行のペア，列のペアをランダムに選ぶ．**
- $\begin{matrix} + & - \\ - & + \end{matrix}$ or $\begin{matrix} - & + \\ + & - \end{matrix}$ **をランダムに選ぶ．**
- x **の** 4 **つのセル頻度を更新** $\longrightarrow$ $\mathbf{y}$
- $\mathbf{y} \in \mathcal{F}_t$ **ならば** $\mathbf{y}$ **が次の状態**

  $\mathbf{y} \notin \mathcal{F}_t$ **ならば（どこかの頻度が負になったら）** x **に留まる**

$$
\cdots \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{|cccc|} \hline 2 & 0 & 3 & 1 \\ 1 & \color{blue}{1} & 0 & \color{blue}{3} \\ 0 & \color{blue}{2} & 1 & \color{blue}{1} \\ \hline \end{array} \begin{matrix} \\ \leftarrow \\ \leftarrow \end{matrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{|cccc|} \hline 2 & 0 & 3 & 1 \\ 1 & \color{blue}{2} & 0 & \color{blue}{2} \\ 0 & \color{blue}{1} & 1 & \color{blue}{2} \\ \hline \end{array} \quad \Rightarrow \quad \cdots
$$

$$
\begin{matrix} \quad & \uparrow & \quad & \uparrow \end{matrix}
$$

どんな t に対しても，$\mathcal{F}_t$ 上の連結なマルコフ連鎖となる．

3 元分割表の無 3 因子交互作用モデルのマルコフ基底

$$\boldsymbol{x} = (x_{ijk}), \quad 1 \le i \le I,\ 1 \le j \le J,\ 1 \le k \le K$$

$$x_{ijk} \in \{0, 1, 2, ...\}$$

$$\begin{array}{|ccc|}\hline x_{111} & \cdots & x_{11K} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{1J1} & \cdots & x_{1JK} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|ccc|}\hline x_{211} & \cdots & x_{21K} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{2J1} & \cdots & x_{2JK} \\ \hline \end{array} \quad \cdots \quad \begin{array}{|ccc|}\hline x_{I11} & \cdots & x_{I1K} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{IJ1} & \cdots & x_{IJK} \\ \hline \end{array}$$

- $\boldsymbol{t} = A\boldsymbol{x}$: すべての２次元周辺度数 $\{x_{ij+}\}, \{x_{i+k}\}, \{x_{+jk}\}$
- 任意に与えられた $\boldsymbol{t} = A\boldsymbol{x}^o$ に対して，

$$\mathcal{F}_{\boldsymbol{t}} = \{\boldsymbol{x} \ge \boldsymbol{0} \mid A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{t}\}$$

上に連結なマルコフ連鎖を作りたい．

surprisingly difficult ！

Remark：これは以下の問題に対応する．

- **対数線形モデル**

$$\log p_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + (\alpha\beta)_{ij} + (\alpha\gamma)_{ik} + (\beta\gamma)_{jk} + (\alpha\beta\gamma)_{ijk}$$

- **帰無仮説は「三因子交互作用が存在しない」**

$$\mathbf{H}_0 : (\alpha\beta\gamma)_{ijk} = 0, \quad \textbf{for all } i, j, k$$

- **局外母数：** μ, α_i, β_j, γ_k, $(\alpha\beta)_{ij}$, $(\alpha\gamma)_{ik}$, $(\beta\gamma)_{jk}$
- **局外母数に対する十分統計量：**

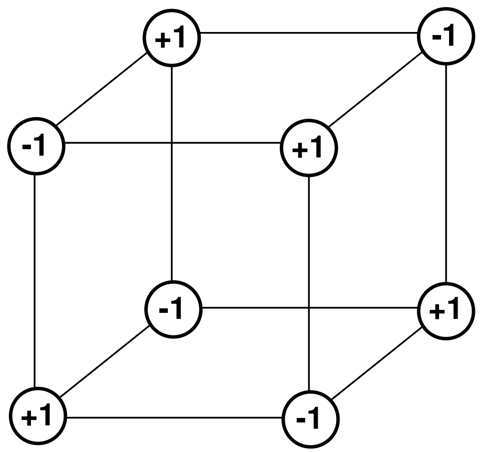
x_{+++}, x_{i++}, x_{+j+}, x_{++k}, x_{ij+}, x_{i+k}, x_{+jk}

- **条件つき確率関数：** $p(x_{ijk} \mid x_{ij+}, x_{i+k}, x_{+jk}) \propto \left(\prod_{i,j,k} x_{ijk}!\right)^{-1}$

H_0 は分解可能モデルではないため，$p(x_{ijk} \mid x_{ij+}, x_{i+k}, x_{+jk})$ からの直接的なサンプリングも難しい　$\Rightarrow$ MCMC 法が使えれば嬉しい

2×2 の move の単純な拡張 ($2 \times 2 \times 2$ basic move)

2 元分割表における $\begin{array}{cc} + & - \\ - & + \end{array}$ **の形の move を 3 元分割表に自然に拡張し，十分統計量の値を保存する** $2 \times 2 \times 2$ **の move を考える．**



$i = i_1$

$$\begin{array}{c|cc|} j \backslash k & k_1 & k_2 \\ \hline j_1 & +1 & -1 \\ j_2 & -1 & +1 \\ \hline \end{array}$$

$i = i_2$

$$\begin{array}{c|cc|} j \backslash k & k_1 & k_2 \\ \hline j_1 & -1 & +1 \\ j_2 & +1 & -1 \\ \hline \end{array}$$

$\longrightarrow$ **構成されるマルコフ連鎖は，連結になるとは限らない．**

(これだけでは，マルコフ基底にならない.)

例：$3 \times 3 \times 3$ **分割表** $(\#\mathcal{F}_{\boldsymbol{t}} = 18)$

$$\boldsymbol{t} \ : \quad \begin{array}{|ccc|c} \hline & & & 2 \\ & & & 1 \\ & & & 1 \\ \hline 2 & 1 & 1 & 4 \end{array} \quad \begin{array}{|ccc|c} \hline & & & 1 \\ & & & 2 \\ & & & 1 \\ \hline 1 & 2 & 1 & 4 \end{array} \quad \begin{array}{|ccc|c} \hline & & & 1 \\ & & & 1 \\ & & & 2 \\ \hline 1 & 1 & 2 & 4 \end{array} \quad \begin{array}{|ccc|c} \hline 2 & 1 & 1 & 4 \\ 1 & 2 & 1 & 4 \\ 1 & 1 & 2 & 4 \\ \hline 4 & 4 & 4 & 12 \end{array}$$

$$1: \boxed{\begin{matrix}2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\1&1&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\0&0&1\\1&1&0\end{matrix}} \qquad 2: \boxed{\begin{matrix}2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&1\end{matrix}} \qquad 3: \boxed{\begin{matrix}2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\0&1&1\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&1\end{matrix}}$$

$$4: \boxed{\begin{matrix}2&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\1&1&0\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&1\end{matrix}} \qquad 5: \boxed{\begin{matrix}2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\1&1&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&1\end{matrix}} \qquad 6: \boxed{\begin{matrix}2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\0&2&0\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&2\end{matrix}}$$

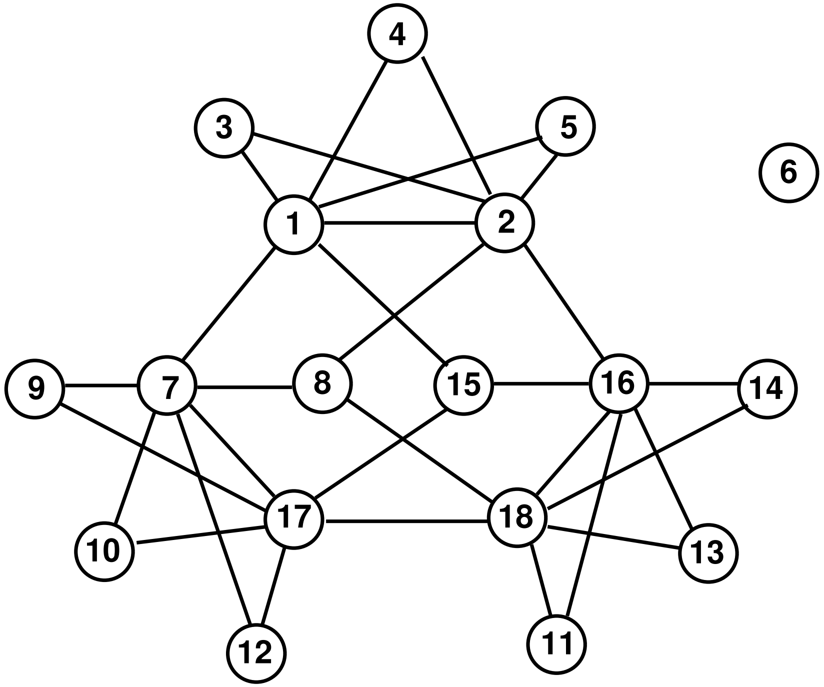
$$7: \boxed{\begin{matrix}1&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\0&0&1\\1&1&0\end{matrix}} \qquad 8: \boxed{\begin{matrix}1&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&1&1\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&1\end{matrix}} \qquad 9: \boxed{\begin{matrix}1&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\0&2&0\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&1\end{matrix}}$$

$$10: \boxed{\begin{matrix}1&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&1\end{matrix}} \qquad 11: \boxed{\begin{matrix}1&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&0&1\\1&1&0\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&2\end{matrix}} \qquad 12: \boxed{\begin{matrix}1&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&1\end{matrix}}$$

$$13: \boxed{\begin{matrix}1&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\0&1&1\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&2\end{matrix}} \qquad 14: \boxed{\begin{matrix}1&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&1&1\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&2\end{matrix}} \qquad 15: \boxed{\begin{matrix}1&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\1&1&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&1\end{matrix}}$$

$$16: \boxed{\begin{matrix}1&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&2\end{matrix}} \qquad 17: \boxed{\begin{matrix}0&1&1\\1&0&0\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&1\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&1\end{matrix}} \qquad 18: \boxed{\begin{matrix}0&1&1\\1&0&0\\1&0&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&1&1\\0&1&0\end{matrix}}\ \boxed{\begin{matrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&2\end{matrix}}$$

basic move から構成される推移グラフ



状態 6: $\begin{array}{|ccc|}\hline 2&0&0\\ 0&0&1\\ 0&1&0\\ \hline\end{array}$ $\begin{array}{|ccc|}\hline 0&0&1\\ 0&2&0\\ 1&0&0\\ \hline\end{array}$ $\begin{array}{|ccc|}\hline 0&1&0\\ 1&0&0\\ 0&0&2\\ \hline\end{array}$

は他の状態と相互到達不可能．

i, j, k のペアをどう選んで

$i = i_1$ $\qquad$ $i = i_2$

$$\begin{array}{c|cc|}
j \backslash k & k_1 & k_2 \\ \hline
j_1 & +1 & -1 \\
j_2 & -1 & +1 \\ \hline
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|cc|}
j \backslash k & k_1 & k_2 \\ \hline
j_1 & -1 & +1 \\
j_2 & +1 & -1 \\ \hline
\end{array}$$

を加えても，どこかの頻度が -1 になってしまう．

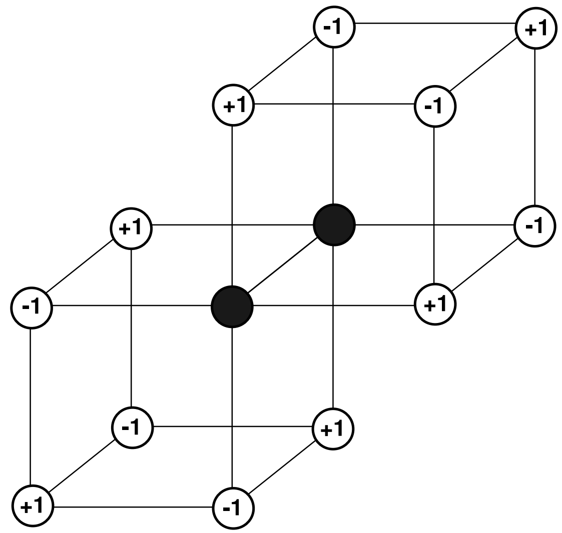
$3 \times 3 \times 3$ 表のマルコフ基底には, 6 次の move:

$i = i_1$

$j \backslash k$	k_1	k_2	k_3
j_1	0	$+1$	-1
j_2	-1	0	$+1$
j_3	$+1$	-1	0

$i = i_2$

$j \backslash k$	k_1	k_2	k_3
j_1	0	-1	$+1$
j_2	$+1$	0	-1
j_3	-1	$+1$	0



が必要．この形の推移を許せば, 先ほどの例は連結になることが観察される．実際, {basic move, 6 次の move} は, この問題に対するマルコフ基底になる．

4.2.3 マルコフ基底とイデアル

- 分割表：$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_p)$，　十分統計量：$\boldsymbol{t} = (t_1, \ldots, t_d)$
  $\boldsymbol{t} = A\boldsymbol{x}$,　$A = (a_{ij})$：$d \times p$ 行列
- $k[u_1, \ldots, u_p]$: 体 k 上の多項式環
  $\mathbf{u} = \{u_1, \ldots, u_p\}$: 不定元
- 分割表 x と単項式の対応

$$\boldsymbol{x} \quad \Leftrightarrow \quad u_1^{x_1} \ldots u_p^{x_p} = \mathbf{u}^{\boldsymbol{x}}$$

- move $\mathbf{z} = \mathbf{z}^+ - \mathbf{z}^-$ と二項式の対応

$$\mathbf{z} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{u}^{\mathbf{z}^+} - \mathbf{u}^{\mathbf{z}^-}$$

- **例：** $\mathbf{u} = \{u_{11}, \ldots, u_{33}\}$

$$\boldsymbol{x} : \begin{array}{|ccc|} 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ \hline \end{array} \Leftrightarrow \quad \mathbf{u}^{\boldsymbol{x}} = u_{11}^2 u_{13} u_{21} u_{22} u_{32} u_{33}^2$$

$$\mathbf{z} : \begin{array}{|ccc|} 2 & -2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & 2 & -1 \\ \hline \end{array} \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} & \mathbf{u}^{\mathbf{z}^+} - \mathbf{u}^{\mathbf{z}^-} \\ & = u_{11}^2 u_{23} u_{32}^2 - u_{12}^2 u_{21} u_{31} u_{33} \end{aligned}$$

- 多項式環 $k[\mathbf{u}]$ の二項式イデアル

$$I_A = \left\langle \left\{ \mathbf{u}^{\mathbf{z}^+} - \mathbf{u}^{\mathbf{z}^-},\ \mathbf{z} \in \mathcal{M} \right\} \right\rangle$$

  は，配置 A のトーリックイデアル．

- つまり，配置 A に対するすべての move の集合 $\mathcal{M}$ からトーリックイデアルを定義したとき，I_A は二項式で生成されるが，マルコフ基底はこの生成系に他ならない

- [定理 4.2.8](Diaconis and Sturmfels, 1998)

$$\mathcal{B} = \{\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_L\}, \mathbf{z}_i \in \mathcal{M} \text{ が } A \text{ に対するマルコフ基底}$$
$$\iff \ I_A = \left\langle \mathbf{u}^{\mathbf{z}_i^+} - \mathbf{u}^{\mathbf{z}_i^-},\ i = 1, \ldots, L \right\rangle$$

- 証明は帰納法による．
  $F = \{\boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_i^+} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_i^-}, i = 1, \ldots, L\}$ とおく．
- 十分性，すなわち
  「$\mathcal{B} = \{\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_L\}$ が A に対するマルコフ基底ならば，
  任意の $f \in I_A$ について $f \in \langle F \rangle$」は比較的容易．
- 必要性，すなわち
  「$I_A = \langle F \rangle$ であれば，
  任意の $\boldsymbol{x}, \mathrm{y}(\neq \boldsymbol{x}) \in \mathcal{F}_{A\boldsymbol{x}}$ が $\mathcal{B}$ で相互到達可能」がやや難しい．
- ポイント: グレブナー基底の性質を利用する．
- I_A のグレブナー基底を $\{g_1, \ldots, g_M\}$ と書く．

- $\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{y}} \in I_A = \langle g_1, \ldots, g_M \rangle$ であるから，二項式 $\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{y}}$ は

$$\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{y}} = \sum_j c_j \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{v}_j} g_j$$

  と書ける．

- 右辺の $c_j \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{v}_j}$ は $k[\boldsymbol{u}]$ の単項式であり，一般には $c_j \in k$．しかし，右辺はグレブナー基底による割り算を表しており，割り算アルゴリズムの各ステップは，係数が $+1$ または -1 の単項式を掛けながら先頭項を打ち消していく作業であるから，右辺の項に重複を許せば，c_j は体 k によらず $+1$ または -1 としてよい．

- 一方，$g_1, \ldots, g_M \in I_A = \langle F \rangle$ であるので，グレブナー基底の各元は生成系をもちいて

$$g_j = \sum_{\ell} d_\ell \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{w}_\ell} (\boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_{i_\ell}^+} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_{i_\ell}^-})$$

  と表されるが，この右辺は，生成系の各元から S-pair を計算してグレブナー基底を求める式に他ならないので，S-pair の定義からやはり d_ℓ も $+1$ または -1 としてよい．

- 以上をまとめると，二項式 $\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{y}}$ は，右辺の重複を許せば

$$\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{y}} = \sum_{j=1}^{S} \varepsilon_j \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{h}_j} (\boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_{i_j}^+} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_{i_j}^-})$$

  で，かつすべての ε_j を $+1$ または -1 として表すことができることがわかる．

- この式の S について，帰納法をもちいる．

- 一般には，

$$\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{y}} = \sum_{j=1}^{S} \varepsilon_j \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{h}_j} (\boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_{i_j}^+} - \boldsymbol{u}^{\mathbf{z}_{i_j}^-})$$

  の S は，x から y への推移のステップ数には対応しない．

- つまり上式は，単に x から y への推移を書き換えたものではない．この意味で，定理 4.2.8 は非自明な結果であるといえる．

- 与えられた配置に対するマルコフ基底の計算には，消去定理を利用する．
- $\boldsymbol{v} = \{v_1, \ldots, v_d\}$: $t_1, \ldots, t_d$ に対応する不定元
- $\boldsymbol{t} = A\boldsymbol{x}$ は次の準同型写像で表現される

$$\begin{array}{rccc} \phi_A & : & k[\mathbf{u}] & \longrightarrow & k[\boldsymbol{v}] \\ & & u_j & \longmapsto & v_1^{a_{1j}} v_2^{a_{2j}} \ldots v_d^{a_{dj}} \end{array}$$

- ϕ_A の核

$$I_A = \mathbf{ker}(A) = \{f \in k[\mathbf{u}] \mid \phi(k[\mathbf{u}]) = 0\}$$

は，A に対するトーリックイデアルである (命題 4.2.9, 補題 1.5.9).

- **例:** 2×2 **分割表**

$(v_1, v_2, v_3, v_4) = (r_1, r_2, c_1, c_2)$ **と書けば,**

$$\phi_A(u_{11}) = r_1c_1, \quad \phi_A(u_{12}) = r_1c_2,$$
$$\phi_A(u_{21}) = r_2c_1, \quad \phi_A(u_{22}) = r_2c_2,$$

$$\begin{aligned}\phi_A(u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21}) &= \phi_A(u_{11})\phi_A(u_{22}) - \phi_A(u_{12})\phi_A(u_{21}) \\ &= r_1r_2c_1c_2 - r_1r_2c_1c_2 = 0\end{aligned}$$

i.e., $u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21} \in I_A$.

二項式 $u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21}$ **は move** $\boxed{\begin{array}{cc} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{array}}$ **に対応**

- **マルコフ基底の計算 (消去定理)**

$$I_A^* = \langle -\phi_A(u_i) + u_i,\ \ i = 1, \ldots, p \rangle \subset k[\mathbf{u}, \boldsymbol{v}]$$

と定義すれば, $I_A = I_A^* \cap k[\mathbf{u}]$ **が成り立つ．よって,** $\{t_1, \ldots, t_d\} \succ \{u_1, \ldots, u_p\}$ **となるような適当な項順序のもとで,** I_A^* **のグレブナー基底** G^* **が求まれば,** $G^* \cap k[\mathbf{u}]$ **が** I_A **のグレブナー基底になる.**

- Risa/Asir での計算

```
[0] load("gr")$
[86] Polys = [-x11+r1*c1,-x12+r1*c2,-x13+r1*c3,
              -x21+r2*c1,-x22+r2*c2,-x23+r2*c3];
[-x11+c1*r1,c2*r1-x12,c3*r1-x13,r2*c1-x21,r2*c2-x22,r2*c3-x23]
[87] Q = hgr(Polys, [r1,r2,c1,c2,c3,x11,x12,x13,x21,x22,x23],
             [[2,5],[2,6]])$
[88] for(J=0; J<length(Q); J++) print([J,Q[J]]);
[0,x23*x12-x22*x13]
[1,x23*x11-x21*x13]
[2,x22*x11-x21*x12]
[3,x23*c2-x22*c3]
[4,-c3*x12+x13*c2]
[5,x23*c1-x21*c3]
[6,x22*c1-x21*c2]
       (中略)
[16,c2*r1-x12]
[17,-x11+c1*r1]
[89]
```

- 4ti2 での計算 (例題 7.2.4)

```
$ less 2x3-indep.mat
5 6
1 1 1 0 0 0
0 0 0 1 1 1
1 0 0 1 0 0
0 1 0 0 1 0
0 0 1 0 0 1

$ ./markov 2x3-indep.mat

(計算)

$ less 2x3-indep.mat.mar
3 6
 0 -1  1  0  1 -1
 1 -1  0 -1  1  0
 1  0 -1 -1  0  1
```

4.3 実験計画とマルコフ基底

4.3.1 2 水準実験

- 本講義では, 2 水準・多因子の実験計画データの解析を, マルコフ連鎖・モンテカルロ法で行う方法を紹介する.
- 実験計画データの例 (表 4.5): 噴流式はんだ付け装置の不良品数データ (7 因子, すべて 2 水準)

A: prebake condition

B: flux density

C: conveyer speed

D: preheat condition

E: cooling time

F: ultrasonic solder agitator

G: solder temperature

観測値: 不良品数

L. W. Condra,
Reliability Improvement with Design of Experiments, **1993.**

4.3.2 組合せ配置データの解析

- まず, 組合せ配置の説明をする.

  とりあえず, 7 因子のうち A,B,C,D の 4 因子のみに注目し, 不良品数の以下のデータが得られたと仮定する.

run	A	B	C	D	x
1	+1	+1	+1	+1	$x_1 = 69$
2	+1	+1	+1	−1	$x_2 = 31$
3	+1	+1	−1	+1	$x_3 = 55$
4	+1	+1	−1	−1	$x_4 = 149$
5	+1	−1	+1	+1	$x_5 = 46$
6	+1	−1	+1	−1	$x_6 = 43$
7	+1	−1	−1	+1	$x_7 = 118$
8	+1	−1	−1	−1	$x_8 = 30$
9	−1	+1	+1	+1	$x_9 = 43$
10	−1	+1	+1	−1	$x_{10} = 45$
11	−1	+1	−1	+1	$x_{11} = 71$
12	−1	+1	−1	−1	$x_{12} = 380$
13	−1	−1	+1	+1	$x_{13} = 37$
14	−1	−1	+1	−1	$x_{14} = 36$
15	−1	−1	−1	+1	$x_{15} = 212$
16	−1	−1	−1	−1	$x_{16} = 52$

- このような, 因子のすべての水準の組合せについて観測を行う計画を, 完全実施要因計画 (または, 組合せ配置計画) とよぶ.
- 実験の目的: 不良品数を減らすような水準の選択
- 因子の数を p とすれば, 組合せ配置の実験回数 k は $k = 2^p$.
- 計画行列 D : $\{+1, -1\}$ を要素とする $k \times p$ 行列

$$D = \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{d}_1 & \mathbf{d}_2 & \mathbf{d}_3 & \mathbf{d}_4 \end{pmatrix}$$

- p 因子の組合せ配置は, 2^p 型 p 元分割表データに他ならない.
  $p = 4$ 因子の例では,

$$X = (X_{1111}, X_{1112}, X_{1121}, X_{1122}, \ldots, X_{2222})'$$

- したがって, 前章で説明した分割表に対する条件付検定の方法でモデルの当てはまりが評価できる.
- 確率分布の仮定: 独立なポアソン分布 (2×2 分割表の 3 番目の例と同じ)

$$X_{abcd} \sim \mathrm{Po}(\mu_{abcd}), \;\; a, b, c, d = 1, 2, \;\; \textbf{i.i.d.}$$

- **対数線形モデル (飽和モデルの母数の母数変換)**

$$\begin{aligned}\log \mu_{abcd} = \quad & \kappa + \alpha_a + \beta_b + \gamma_c + \delta_d + (\alpha\beta)_{ab} + (\alpha\gamma)_{ac} + (\alpha\delta)_{ad} \\ & +(\beta\gamma)_{bc} + (\beta\delta)_{bd} + (\gamma\delta)_{cd} + (\alpha\beta\gamma)_{abc} + (\alpha\beta\delta)_{abd} \\ & +(\alpha\gamma\delta)_{acd} + (\beta\gamma\delta)_{bcd} + (\alpha\beta\gamma\delta)_{abcd}\end{aligned}$$

- **飽和モデルと 1 対 1 対応とするために, ここでは,**

$$\begin{aligned}& \textstyle\sum_a \alpha_a = \cdots = \sum_d \delta_d = 0 \\ & \textstyle\sum_a (\alpha\beta)_{ab} = \sum_b (\alpha\beta)_{ab} = \cdots = \sum_c (\gamma\delta)_{cd} = \sum_d (\gamma\delta)_{cd} = 0 \\ & \textstyle\sum_a (\alpha\beta\gamma)_{abc} = \sum_b (\alpha\beta\gamma)_{abc} = \cdots = \sum_d (\beta\gamma\delta)_{bcd} = 0 \\ & \textstyle\sum_a (\alpha\beta\gamma\delta)_{abcd} = \cdots = \sum_d (\alpha\beta\gamma\delta)_{abcd} = 0\end{aligned}$$

の制約をつける．しかし, この問題は 2 水準であるので, 右辺の各項の母数の自由度はすべて 1 になる.

- 例えば, $(\alpha\beta)_{ab}$ は, 因子 A と因子 B の水準組合せ (a, b) の 2 因子交互作用であるが,

$$\sum_a (\alpha\beta)_{ab} = \sum_b (\alpha\beta)_{ab} = 0$$

より,

$$\begin{aligned} (\alpha\beta)_{11} &= \psi_{AB} & (\alpha\beta)_{12} &= -\psi_{AB} \\ (\alpha\beta)_{21} &= -\psi_{AB} & (\alpha\beta)_{22} &= \psi_{AB} \end{aligned}$$

と書くことができる.

主効果, 3 因子交互作用, 4 因子交互作用についてもすべて同様.

- **結局, 対数線形モデルの飽和モデルは,**
  - **ベクトル** $(1,\ldots,1)'$
  - **計画行列** $D=(\mathbf{d}_1,\ldots,\mathbf{d}_4)$ **の各列ベクトル,** $\mathbf{d}_1,\ldots,\mathbf{d}_4$
  - D **の 2 列の成分ごとの積,** $\mathbf{d}_1\odot\mathbf{d}_2,\mathbf{d}_1\odot\mathbf{d}_3,\ldots,\mathbf{d}_3\odot\mathbf{d}_4$
  - D **の 3 列の成分ごとの積,** $\mathbf{d}_1\odot\mathbf{d}_2\odot\mathbf{d}_3,\ldots,\mathbf{d}_2\odot\mathbf{d}_3\odot\mathbf{d}_4$
  - D **の 4 列の成分ごとの積,** $\mathbf{d}_1\odot\mathbf{d}_2\odot\mathbf{d}_3\odot\mathbf{d}_4$

をすべて (適当な順番で) 並べた $k\times k$ **行列** M **をもちいて,**

$$
\begin{pmatrix}
\log\mu_{1111} \\
\log\mu_{1112} \\
\log\mu_{1121} \\
\log\mu_{1122} \\
\vdots \\
\log\mu_{2211} \\
\log\mu_{2212} \\
\log\mu_{2221} \\
\log\mu_{2222}
\end{pmatrix}
= M
\begin{pmatrix}
\psi_0 \\
\psi_A \\
\vdots \\
\psi_D \\
\psi_{AB} \\
\vdots \\
\psi_{CD} \\
\psi_{ABC} \\
\vdots \\
\psi_{BCD} \\
\psi_{ABCD}
\end{pmatrix}
$$

と書ける．行列 M は，共変量行列（モデル行列）とよばれる．

$$M = \begin{pmatrix}
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\
1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\
1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\
1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\
1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1
\end{pmatrix}$$

- M **は, 次数** 16 **の アダマール行列.**
- [**命題 4.3.3**] $M'\boldsymbol{X}$ **(の各成分) は, 母数**

$$\boldsymbol{\psi} = (\psi_0, \psi_A, \ldots, \psi_D, \psi_{AB}, \ldots, \psi_{CD}, \psi_{ABC}, \ldots, \psi_{BCD}, \psi_{ABCD})'$$

(の各成分) の十分統計量.

- **例えば,**
    - ◦ ψ_0 **の十分統計量は** $(1, \ldots, 1)\boldsymbol{X} = \sum_{a,b,c,d} X_{abcd}$
    - ◦ ψ_A **(因子** A **の主効果) の十分統計量は,**

$$\mathbf{d}_1'\boldsymbol{X} = (X_{1111} + \cdots + X_{1222}) - (X_{2111} + \cdots + X_{2222})$$

$= \sum$ (A **の水準が** 1 **の観測値**) $- \sum$ (A **の水準が** 2 **の観測値**)

○ ψ_{AB} (因子 A, B の $\mathbf{2}$ 因子交互作用) の十分統計量は,

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{d}_1 \odot \mathbf{d}_2)' \boldsymbol{X} \\
&= \textstyle\sum \text{(} (\mathrm{A}, \mathrm{B}) \text{ の水準が } (1,1), (2,2) \text{ の観測値)} \\
&\qquad - \textstyle\sum \text{(} (\mathrm{A}, \mathrm{B}) \text{ の水準が } (1,2), (2,1) \text{ の観測値)}
\end{aligned}
$$

○ ψ_{ABC} (因子 $\mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{C}$ の $\mathbf{3}$ 因子交互作用) の十分統計量は,

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{d}_1 \odot \mathbf{d}_2 \odot \mathbf{d}_3)' \boldsymbol{X} \\
&= \textstyle\sum \text{(} (\mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{C}) \text{ の水準が } (1,1,1), (1,2,2), (2,1,2), (2,2,1) \text{ の観測値)} \\
&\quad - \textstyle\sum \text{(} (\mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{C}) \text{ の水準が } (1,1,2), (1,2,1), (2,1,1), (2,2,2) \text{ の観測値)}
\end{aligned}
$$

という具合.

- 検証したいモデル (H_0) は, 対数線形モデルの左辺の母数のいくつかを $=0$ とおいたもの.

  ただし, $=0$ とおく母数は, すべての組合せを許すわけではなく, 以下のクラスに属すものに限る.

- [定義 4.3.4](階層モデル) 対数線形モデルにおいて,
  「高次の交互作用がモデルに含まれる」
  $\Longrightarrow$「それに含まれるすべての低次の交互作用がモデルに含まれる」
  が満たされるモデルを, 階層モデルとよぶ.

- 例えば, ψ_{ABC} を含む階層モデルは, それより低次の

$$\psi_A, \psi_B, \psi_C, \psi_{AB}, \psi_{AC}, \psi_{BC}$$

  をすべて含む.

- 検証するモデルを階層モデルに限ることは, 解釈の面からも自然.

- 階層モデルは, モデルに含まれる極大な交互作用の集合 (生成集合) で表記できる.
- 例えば, モデル ABC/ABD の適合度検定は,

$$\mathbf{H}_0 \;:\; \psi_{CD} = \psi_{ACD} = \psi_{BCD} = \psi_{ABCD} = 0$$

となる.

このモデルの自由度: $(16-1)-4=11$

検定統計量の自由度: 4

- R で計算する場合は, 一般化線形モデル (generalized linear model) の関数 `glm` を使うとよい.

(尤度比検定統計量の値を, デフォルトで計算してくれる.)

```
> data4 <- read.table("data4.txt", header=T)
> data4
    A  B  C  D   x
1   1  1  1  1  69
2   1  1  1 -1  31
3   1  1 -1  1  55
4   1  1 -1 -1 149
5   1 -1  1  1  46
6   1 -1  1 -1  43
7   1 -1 -1  1 118
8   1 -1 -1 -1  30
9  -1  1  1  1  43
10 -1  1  1 -1  45
11 -1  1 -1  1  71
12 -1  1 -1 -1 380
13 -1 -1  1  1  37
14 -1 -1  1 -1  36
15 -1 -1 -1  1 212
16 -1 -1 -1 -1  52
```

```
> data4.glm <- glm(x~A+B+C+D+A*B+A*C+A*D+B*C+B*D+A*B*C+A*B*D,
                 data4,family="poisson")
> summary(data4.glm)

Call:
glm(formula = x ~ A + B + C + D + A * B + A * C + A * D + B *
    C + B * D + A * B * C + A * B * D, family = "poisson", data = data4)

Deviance Residuals:
     1       2       3       4       5       6       7       8
 4.015  -4.037  -3.298   2.476  -2.080   2.746   1.503  -2.463
     9      10      11      12      13      14      15      16
 4.821  -3.131  -2.617   1.279  -2.446   3.450   1.196  -2.133


Coefficients:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  4.182653   0.034131 122.546  < 2e-16 ***
A           -0.072021   0.034131  -2.110  0.03485 *
B            0.142381   0.034131   4.172 3.03e-05 ***
```

```
C           -0.517643   0.031613 -16.374  < 2e-16 ***
D            0.020120   0.030598   0.658  0.51083
A:B         -0.001776   0.034131  -0.052  0.95850
A:C          0.212262   0.031613   6.714 1.89e-11 ***
A:D          0.089063   0.030598   2.911  0.00361 **
B:C         -0.069127   0.031613  -2.187  0.02877 *
B:D         -0.442261   0.030598 -14.454  < 2e-16 ***
A:B:C        0.018033   0.031613   0.570  0.56838
A:B:D        0.146741   0.030598   4.796 1.62e-06 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)

    Null deviance: 1021.25  on 15  degrees of freedom
Residual deviance:  135.02  on  4  degrees of freedom
AIC: 255.19

Number of Fisher Scoring iterations: 5
```

```
>
> fitted(data4.glm)
        1         2         3         4         5         6
 40.78947  59.21053  83.21053 120.78947  61.58650  27.41350
        7         8         9        10        11        12
102.41350  45.58650  18.61224  69.38776  95.38776 355.61224
       13        14        15        16
 53.93769  19.06231 195.06231  68.93769
>
> 1-pchisq(135.02, 4)
[1] 0
>
> qchisq(0.95, 4)
[1] 9.487729
>
```

- p 値の評価の手法については, 分割表の解析と全く同様のことがいえる．すなわち,
  - 漸近分布論 (カイ 2 乗近似) を利用するのがもっとも簡単. ただし, 得られたデータによっては, 漸近分布論の当てはまりが悪いかもしれない.
  - 可能であれば, 正確法により評価したい．ただし, データのサイズが大きい場合は, 計算量の問題が生じる.
  - 正確法が難しい場合は, マルコフ連鎖・モンテカルロ法が有用.

- **十分統計量を固定した X の条件付分布:**

$$p(\boldsymbol{x} \mid M'\boldsymbol{x} = M'\boldsymbol{x}^o) = C(M'\boldsymbol{x}^o) \prod_{i=1}^{k} \frac{1}{x_i!},$$

$\boldsymbol{x}^o$ **: 観測されたデータ,**
$C(M'\boldsymbol{x}^o)$ **: 規格化定数**

$$C(M'\boldsymbol{x}^o)^{-1} = \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{F}(M'\boldsymbol{x}^o)} \left(\prod_{i=1}^{k} \frac{1}{x_i!} \right),$$

$$\mathcal{F}(M'\boldsymbol{x}^o) = \{\boldsymbol{x} \mid M'\boldsymbol{x} = M'\boldsymbol{x}^o,\ \boldsymbol{x} \in \{0, 1, 2, \ldots\}^k\}.$$

- つまり, 共変量行列 M の転値を配置とみて, 十分統計量の値 $M'x^o$ を共有する空間 $\mathcal{F}(M'x^o)$ を連結に繋ぐ基底 (M' に対するマルコフ基底) を求めればよい.
- マルコフ基底の計算には, `4ti2` が便利.

4.3.3 一部実施計画データの解析

- 組合せ配置は, 因子の数が増えると実験回数が膨大になる.
- 例えば, 噴流式はんだ付け装置の不良品数データは, 7 因子実験であるので, 組合せ配置を行うためには $2^7 = 128$ 回の測定が必要となり, コストがかかる.
- 実験回数を減らすために有効な方法のひとつに, **別名関係 (定義関係)** を満たす水準組合せの実験だけをおこなう, という方法がある. これは, **レギュラーな一部実施計画**とよばれる.
- レギュラーな一部実施計画では, 実験回数は, 組合せ配置の $\dfrac{1}{2^q}$ 倍となる. ただし, q は独立な別名関係の数.

- レギュラーな一部実施計画は, **実験回数が 2^{p-q} の形に限られる**という欠点を除けば, 統計理論におけるさまざまなよい性質をもつ, きわめて有効な方法.
- 本講義では, レギュラーな一部実施計画で得られた実験データについて, これまでに述べた方法で相似検定を実行する方法を説明する.

- **噴流式はんだ付け装置の不良品数データ**

run	A	B	C	D	E	F	G	x
1	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$x_1 = 69$
2	$+1$	$+1$	$+1$	-1	-1	-1	-1	$x_2 = 31$
3	$+1$	$+1$	-1	$+1$	$+1$	-1	-1	$x_3 = 55$
4	$+1$	$+1$	-1	-1	-1	$+1$	$+1$	$x_4 = 149$
5	$+1$	-1	$+1$	$+1$	-1	$+1$	-1	$x_5 = 46$
6	$+1$	-1	$+1$	-1	$+1$	-1	$+1$	$x_6 = 43$
7	$+1$	-1	-1	$+1$	-1	-1	$+1$	$x_7 = 118$
8	$+1$	-1	-1	-1	$+1$	$+1$	-1	$x_8 = 30$
9	-1	$+1$	$+1$	$+1$	-1	-1	$+1$	$x_9 = 43$
10	-1	$+1$	$+1$	-1	$+1$	$+1$	-1	$x_{10} = 45$
11	-1	$+1$	-1	$+1$	-1	$+1$	-1	$x_{11} = 71$
12	-1	$+1$	-1	-1	$+1$	-1	$+1$	$x_{12} = 380$
13	-1	-1	$+1$	$+1$	$+1$	-1	-1	$x_{13} = 37$
14	-1	-1	$+1$	-1	-1	$+1$	$+1$	$x_{14} = 36$
15	-1	-1	-1	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$x_{15} = 212$
16	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	$x_{16} = 52$

別名関係: $\mathrm{ABDE} = \mathrm{ACDF} = \mathrm{BCDG} = \mathrm{I}$

- 別名関係

$$\mathrm{ABDE} = \mathrm{ACDF} = \mathrm{BCDG} = \mathrm{I}$$

を満たす 16 点でのみ測定を行っている.

2^{7-3} 一部実施要因計画とよばれる.

- k: 実験回数

p: 制御因子の数 (すべて 2 水準)

q: 別名関係の数

- $k = 2^{p-q}$ の関係がある.

噴流式はんだ付け装置の実験では, $p = 7, q = 3, k = 2^{7-3} = 16$.

- 計画行列: $\{+1, -1\}$ を要素とする $k \times p$ 行列

- **計画行列**

$$D = \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ & & & \vdots & & & \\ -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{d}_1 & \cdots & \mathbf{d}_7 \end{pmatrix}$$

- 考え方: 計画行列 D から, 検証したいモデル (H_0) の共変量行列 (モデル行列) M を作成し, 配置 M' に対するマルコフ基底を求める.
- 条件付分布やファイバーなど, 組合せ配置のときと全く同じ.
- 注意すべき点はひとつだけ:

  検証するモデルにおいて, すべての母数が推定可能であるか?

- 母数の同時推定可能性は, 別名関係

$$\mathrm{ABDE} = \mathrm{ACDF} = \mathrm{BCDG} = \mathrm{I}$$

から判定できる.

- 4 因子交互作用までのすべての別名関係:

$$\mathrm{I} = \mathrm{ABDE} = \mathrm{ABFG} = \mathrm{ACDF} = \mathrm{ACEG} = \mathrm{BCDG} = \mathrm{BCEF} = \mathrm{DEFG}$$

$$\mathrm{A} = \mathrm{BDE} = \mathrm{BFG} = \mathrm{CDF} = \mathrm{CEG}, \qquad \mathrm{B} = \mathrm{ADE} = \mathrm{AFG} = \mathrm{CDG} = \mathrm{CEF}$$

$$\mathrm{C} = \mathrm{ADF} = \mathrm{AEG} = \mathrm{BDG} = \mathrm{BEF}, \qquad \mathrm{D} = \mathrm{ABE} = \mathrm{ACF} = \mathrm{BCG} = \mathrm{EFG}$$

$$\mathrm{E} = \mathrm{ABD} = \mathrm{ACG} = \mathrm{DFG}, \qquad \mathrm{F} = \mathrm{ABG} = \mathrm{ACD} = \mathrm{BCF} = \mathrm{DEG}$$

$$\mathrm{G} = \mathrm{ABF} = \mathrm{ACE} = \mathrm{BCD} = \mathrm{DEF}$$

$$\mathrm{AB} = \mathrm{DE} = \mathrm{FG} = \mathrm{ABDG} = \mathrm{ACDG} = \mathrm{ACEF} = \mathrm{BCDF} = \mathrm{BCEG}$$

$$\mathrm{AC} = \mathrm{DF} = \mathrm{EG} = \mathrm{ABEF} = \mathrm{BCDE} = \mathrm{BCFG}$$

$$\mathrm{AD} = \mathrm{BE} = \mathrm{CF} = \mathrm{ABCG} = \mathrm{AEFG} = \mathrm{BDFG} = \mathrm{CDEG}$$

$$\mathrm{BC} = \mathrm{DG} = \mathrm{EF} = \mathrm{ABDF} = \mathrm{ABEG} = \mathrm{ACDE} = \mathrm{ACFG}$$

$$\mathrm{BD} = \mathrm{AE} = \mathrm{CG} = \mathrm{ABCF} = \mathrm{ADFG} = \mathrm{BEFG} = \mathrm{CDEF}$$

$$\mathrm{CD} = \mathrm{AF} = \mathrm{BG} = \mathrm{ABCE} = \mathrm{ADEG} = \mathrm{BDEF} = \mathrm{CEFG}$$

$$\mathrm{AG} = \mathrm{BF} = \mathrm{CE} = \mathrm{ABCD} = \mathrm{ADEF} = \mathrm{BDEG} = \mathrm{CDFG}$$

$$\mathrm{ABC} = \mathrm{ADG} = \mathrm{AEF} = \mathrm{BDF} = \mathrm{BEG} = \mathrm{CDE} = \mathrm{CFG}$$

別名関係を考慮して, すべての母数が推定可能になるようにモデルを定めればよい.

- 例えば, 7 つの因子の主効果と, ふたつの交互作用, AC, BD からなるモデル

$$\mathrm{AC/BD/E/F/G}$$

は, AC と BD が別名関係にないから, すべての母数は同時に推定可能.

この場合の共変量行列 M は,

$$
M = \begin{array}{c}
\begin{array}{cccc} & & \mathrm{AC} & \mathrm{BD} \end{array} \\
\left(\begin{array}{cccc}
1 & & 1 & 1 \\
1 & & 1 & -1 \\
\vdots & D & \vdots & \vdots \\
1 & & 1 & -1 \\
1 & & 1 & 1
\end{array}\right)
\end{array}.
$$

- 一方で, モデル

$$\mathrm{AB/DE/C/F/G}$$

は, AB と DE が別名関係にあるから推定可能でない.

$$\mathrm{AB} = \mathrm{DE} = \mathrm{FG} = \mathrm{ABDG} = \cdots .$$

- このような, 別名関係の判定は, 多項式環イデアルの文脈では「イデアル所属問題」と等価になることが示される.

この点については, 本講義では省略. 演習問題を参照.

- **飽和モデル** の母数は $16 (= k)$ 個．このとき共変量行列 M は次数 16 のアダマール行列になる．
- モデルの解釈は一通りでない．例えば，

$$\mathrm{ABC/AD/BD/CD/AG/EF} \quad \text{と}$$
$$\mathrm{ABCD}$$

はいずれも母数が推定可能な階層モデルで，飽和モデルの解釈となる．

- **Hamada and Nelder (1997) は, この噴流式はんだ付け装置の不良品数データに対して,**

$$\mathrm{AC/BD/E/F/G}$$

というモデルの当てはまりを考察している. (例題 7.2.10)

```
> data7 <- read.table("data7.txt", heade=T)
> data7
    A  B  C  D  E  F  G   x
1   1  1  1  1  1  1  1  69
2   1  1  1 -1 -1 -1 -1  31
3   1  1 -1  1  1 -1 -1  55
4   1  1 -1 -1 -1  1  1 149
5   1 -1  1  1 -1  1 -1  46
6   1 -1  1 -1  1 -1  1  43
7   1 -1 -1  1 -1 -1  1 118
8   1 -1 -1 -1  1  1 -1  30
9  -1  1  1  1 -1 -1  1  43
10 -1  1  1 -1  1  1 -1  45
11 -1  1 -1  1 -1  1 -1  71
12 -1  1 -1 -1  1 -1  1 380
13 -1 -1  1  1  1 -1 -1  37
14 -1 -1  1 -1 -1  1  1  36
15 -1 -1 -1  1  1  1  1 212
16 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1  52
>
```

```
> data7.glm <- glm(x~A+B+C+D+E+F+G+A*C+B*D,data7,family="poisson")
> summary(data7.glm)

Call:
glm(formula = x ~ A + B + C + D + E + F + G + A * C + B * D,
    family = "poisson", data = data7)

Deviance Residuals:
     Min        1Q    Median        3Q       Max
-2.52419  -0.47818   0.04629   0.36474   2.62292

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  4.17140    0.03393 122.946  < 2e-16 ***
A           -0.10842    0.03250  -3.337 0.000848 ***
B            0.19039    0.03015   6.315 2.70e-10 ***
C           -0.42315    0.03352 -12.625  < 2e-16 ***
D            0.01264    0.03086   0.409 0.682193
E            0.10302    0.03206   3.213 0.001312 **
F           -0.04236    0.02784  -1.522 0.128070
```

```
G             0.38144    0.03352  11.380  < 2e-16 ***
A:C           0.18109    0.03318   5.457 4.83e-08 ***
B:D          -0.29896    0.03380  -8.845  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ’***’ 0.001 ’**’ 0.01 ’*’ 0.05 ’.’ 0.1 ’ ’ 1

(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)

    Null deviance: 1021.255  on 15  degrees of freedom
Residual deviance:   19.093  on  6  degrees of freedom
AIC: 135.26

Number of Fisher Scoring iterations: 4

>
>
>
>
>
>
```

```
> fitted(data7.glm)
        1         2         3         4         5         6
 64.52677  47.25345  53.14603 151.07960  30.42595  46.79383
        7         8         9        10        11        12
115.24100  32.53337  49.42430  46.13193  70.90290 360.53502
       13        14        15        16
 35.18867  30.25510 232.14438  51.41770
> 1-pchisq(19.093,6)
[1] 0.00400942
> qchisq(0.95,6)
[1] 12.59159
>
```