

分散分析を用いた 不確かさ評価入門

産業技術総合研究所 計量標準総合センター

田中秀幸

このような実験をしていませんか？

- 例：日間変動の評価

日ごとに測定値が変わるかもしれない．それを評価するために，1日5回の測定，それを4日間にわたって実験を行いデータを得た．

	1	2	3	4	5回
1日目	12.5	12.3	12.7	12.3	12.2
2日目	12.0	12.1	12.2	12.1	11.9
3日目	12.4	12.3	12.6	12.4	12.5
4日目	12.6	12.6	12.8	12.4	12.6

日間変動の算出

	1	2	3	4	5回	平均 $\bar{x}_i$
1日目	12.5	12.3	12.7	12.3	12.2	12.40
2日目	12.0	12.1	12.2	12.1	11.9	12.06
3日目	12.4	12.3	12.6	12.4	12.5	12.44
4日目	12.6	12.6	12.8	12.4	12.6	12.60

全平均 $\bar{\bar{x}} = 12.375$

分散の算出
$$V = \frac{\sum (\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2}{m - 1} = 0.05157$$

この方法では、日間変動のばらつきの算出を行ったつもりでも、算出された分散に繰返しのばらつきが一部含まれる。

平均値の差の評価

- 例：瓶詰めされた標準物質で、各瓶の間で値が異なるのかどうか、ということを調べることを考える。

瓶詰めされた2つの標準物質を5回ずつ繰り返し測定を行い、瓶ごとに値が同じか、異なるかを調べる。

よって、二つの瓶の測定値の平均値を比較することによって、差があるかどうかを判定する。

平均値の差の評価

• 測定データ1

	1	2	3	4	5(回)	平均
瓶A	99.9	100.2	100.1	100.2	100	100.08
瓶B	100.2	100.5	100.3	100.4	100.5	100.38

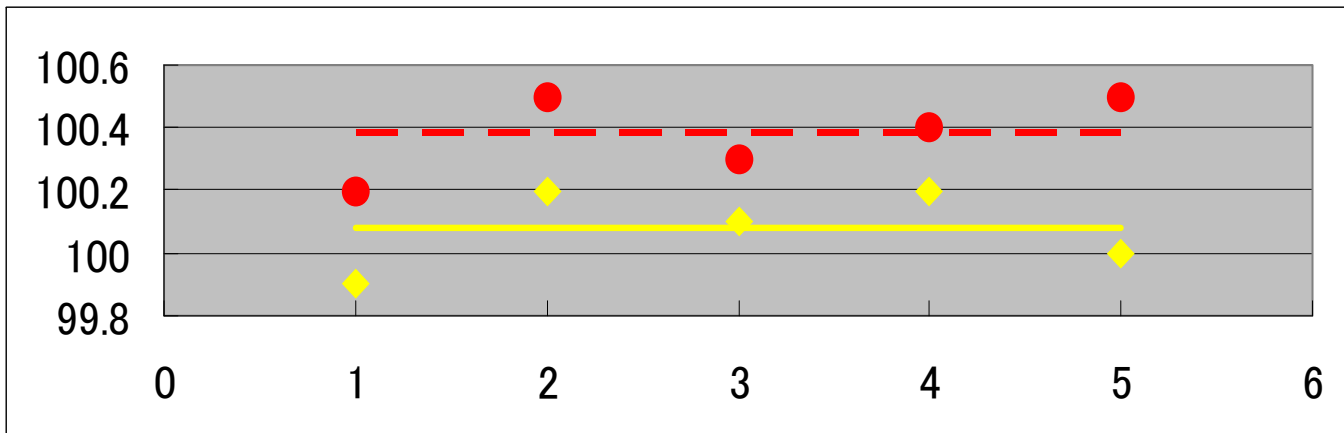
• 測定データ2

	1	2	3	4	5(回)	平均
瓶A	101.9	99.0	103.6	98.2	97.7	100.08
瓶B	100.3	98.5	102.1	97.9	103.1	100.38

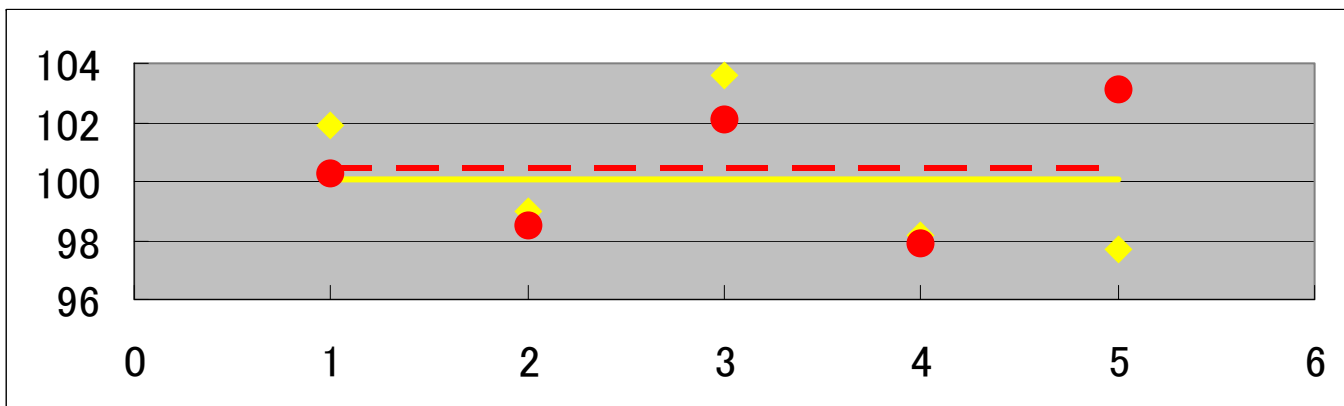
平均値の差の評価

- 2つの結果をグラフで表すと・・・

測定データ1



測定データ2



平均値の差の評価

- 測定データ1のほうは明らかに2つの瓶間に差があるようだが、測定データ2のほうは、2つの瓶間に差があるのではなく、繰り返しのばらつきが大きいいため、たまたま2つの平均値に差が出たと考えられる。

平均値の差だけに注目すればよいわけではなく、平均値の差が、繰り返しのばらつきと比べどの程度の大きさであるかということを考える必要がある。

分散分析とは

- 分散分析は、先程の例のような複数のばらつきを与える要因を含むデータから、それぞれのばらつきを抽出することができる統計的手法。

つまり、

デ	ー	タ	群

分散分析

→ 要因Aが原因のばらつき

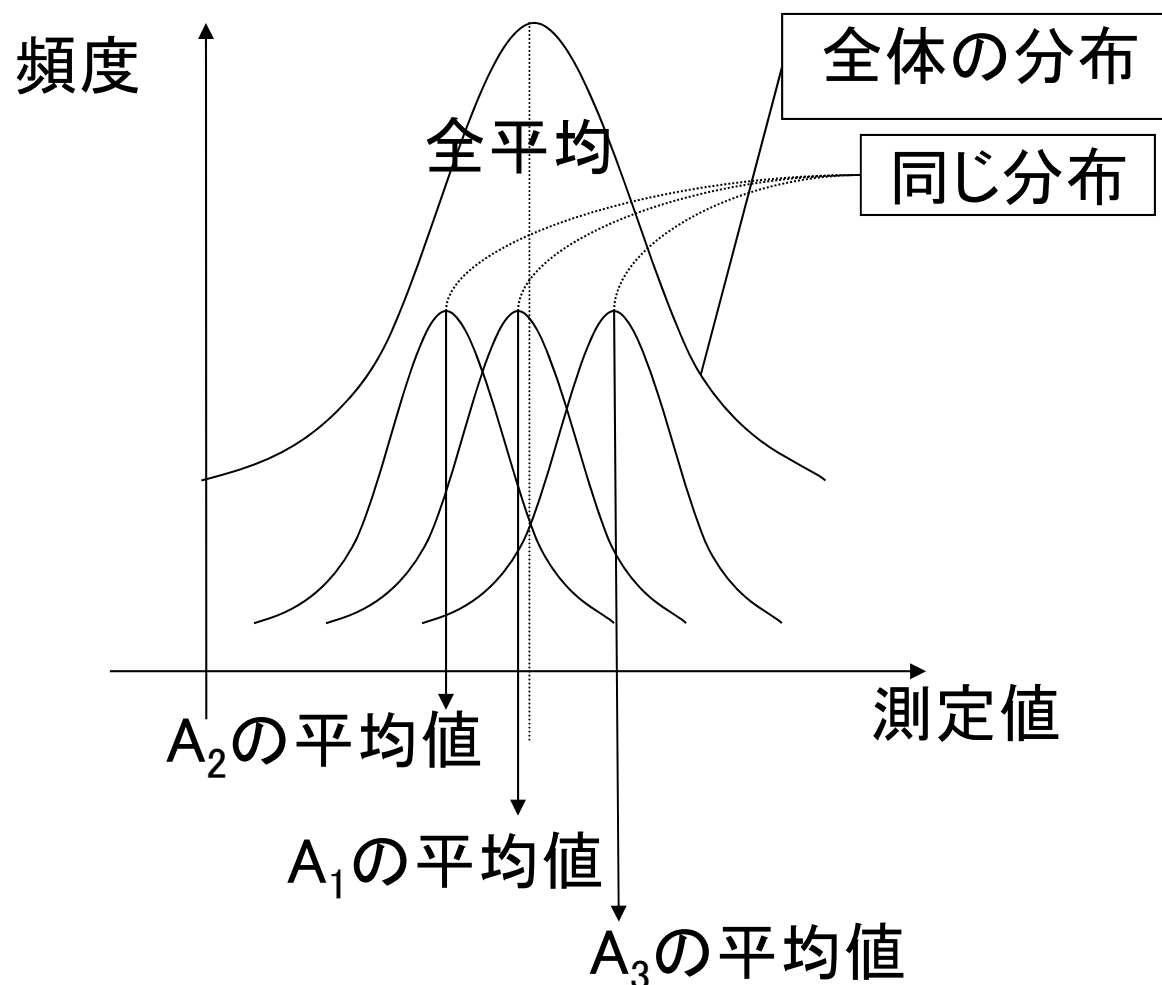
→ 要因Bが原因のばらつき

→ 要因Cが原因のばらつき

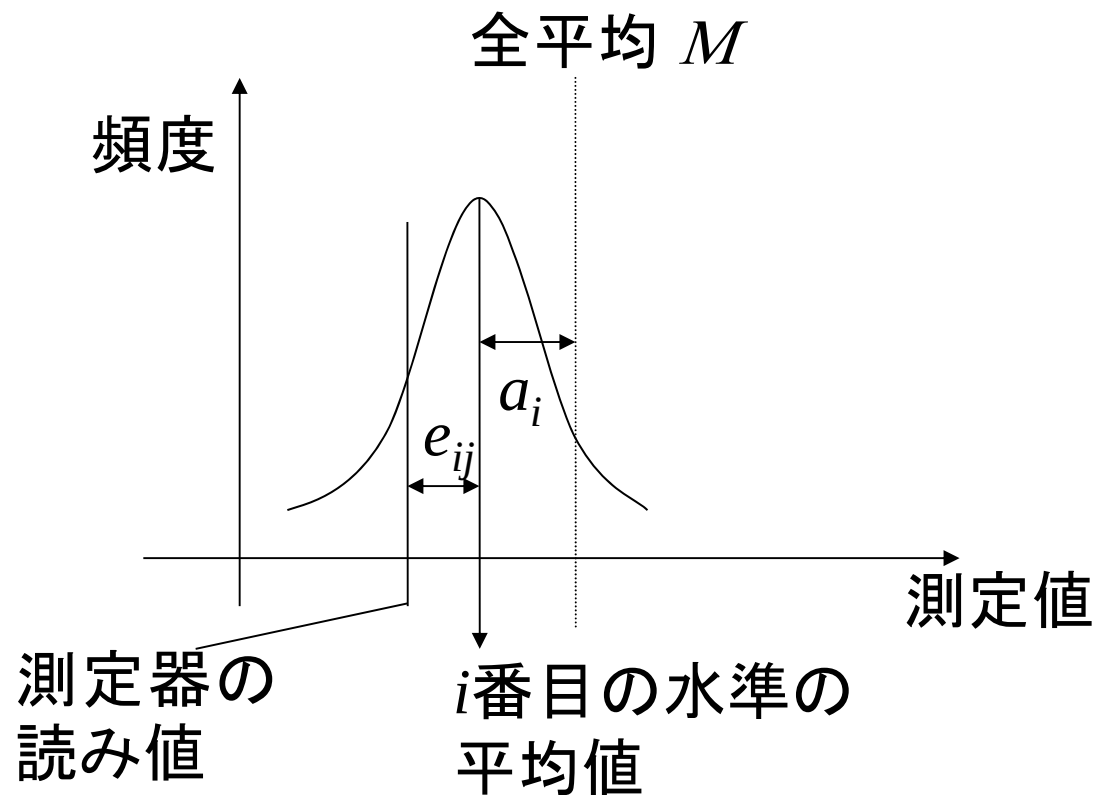
・
・
・

分散分析の構造

最も簡単な分散分析(一元配置)



分散分析の構造



$$x_{ij} = M + a_i + e_{ij} \quad \begin{array}{l} i=1,2,\dots,m \\ j=1,2,\dots,n \end{array}$$

分散・標準偏差のおさらい

例：ある製品の質量測定(g)

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
87.5	86.2	90.1	88.4	87.0

標本平均： $\bar{x} = \frac{87.5 + 86.2 + 90.1 + 88.4 + 87.0}{5} = 87.84 \text{ g}$

標本平均からの
距離(残差)単位：g

$87.5 - 87.84 = -0.34$ (標本平均からの距離)²

$86.2 - 87.84 = -1.64$

$90.1 - 87.84 = 2.26$

$88.4 - 87.84 = 0.56$

$87.0 - 87.84 = -0.84$

単位： g^2

0.1156

2.6896

5.1076

0.3136

0.7056

残差の二乗和

単位： g^2

8.9320

データの個数-1
(自由度)で割る
単位： g^2

標本標準偏差

平方根
単位：g

1.494

標本分散

2.233

変動(二乗和)について

- 全変動(実験全体の変動)

$$S_T = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{\bar{x}})^2$$

- 級間変動(因子間の変動)

$$S_A = \sum_i \sum_j (\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2$$

- 級内変動(因子内の繰返しの変動)

$$S_e = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_i)^2$$

$$S_T = S_A + S_e \text{ が成立}$$

全変動は,
Aによる変動(級間変動)と繰返し
の変動(級内変動)に分解できる

各変動の自由度

- 全変動・・・データ数は mn ，全平均を1つ使う
- 級間変動・・・データ数は m ，全平均を1つ使う
- 級内変動・・・データ数は mn ，各水準の平均を m 個使う.

変動	自由度
全変動	$mn-1$
級間変動	$m-1$
級内変動	$mn-m=m(n-1)$

分散分析表

	$S(\text{変動})$	$f(\text{自由度})$	$V(\text{分散})$
A	$S_A = \sum_i \sum_j (\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2$	$m-1$	S_A/f_A
e	$S_e = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_i)^2$	$m(n-1)$	S_e/f_e
T	$S_T = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{\bar{x}})^2$	$mn-1$	(S_T/f_T)

これで、各要因の分散を算出することができた。

分散の期待値

$$V_A = \frac{\sum_i \sum_j (\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2}{m-1} \quad V_e = \frac{\sum_i \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_i)^2}{m(n-1)}$$

上式で表される2つの標本分散の期待値を求めると,

$$E(V_A) = \sigma_e^2 + n\sigma_A^2$$

$$E(V_e) = \sigma_e^2$$

となる。つまり、 V_A は n 倍された級間変動の分散と級内変動の分散の和を推定しているものであり、 V_e は級内変動の分散をそのまま推定している。

Aの分散には、繰返しのばらつきが一部含まれていることが分かる。

各分散の推定値の算出

$$E(V_A) = \sigma_e^2 + n\sigma_A^2$$

$$E(V_e) = \sigma_e^2$$

つまり,

$$V_A = \hat{\sigma}_e^2 + n\hat{\sigma}_A^2$$

$$V_e = \hat{\sigma}_e^2$$

となる. 「^」は推定値を表す.

よって,

$$\hat{\sigma}_A^2 = \frac{V_A - V_e}{n}$$

$$\hat{\sigma}_e^2 = V_e$$

を計算することによって, 各分散の推定値を求めることができる。

分散分析例

- 例：標準物質を一回に大量に作成し，それを小分けして瓶詰めを行なった．瓶詰めされた標準物質間に濃度の差があるのかどうか調べたい．このとき，瓶詰めされた標準物質から5個瓶を取りだし，それぞれの瓶の標準物質を3回の繰り返し測定を行なって，その結果から瓶の間に濃度の差があるかどうか調べる．

分散分析について

- 実験結果

瓶名 \ 繰り返し	1	2	3(回)
瓶1	100.2	100.3	100.0
瓶2	99.8	99.9	99.7
瓶3	100.3	100.4	100.2
瓶4	100.0	100.1	100.0
瓶5	99.7	99.8	99.9

分散分析について

分散分析結果

ここが重要

普通の分散分析のソフトでは表示されない

要因	二乗和S	自由度 f	分散 V	分散の期待値 $E(V)$
瓶	0.5907	4	0.1477	$\sigma_e^2 + 3\sigma_B^2$
繰り返し	0.1133	10	0.01133	σ_e^2
合計	0.7040	14		

つまり分散分析を行うと、「分散」の欄に、瓶の項は繰り返しの分散の推定値1個分と瓶間のばらつきを表す分散の推定値3個分が足されたものが計算される。繰り返しの項は繰り返しの分散の推定値1個分が計算される。

もし、瓶間の平均値に差がないのであれば、 $\sigma_B=0$ であると推定できる。よって、「瓶」の分散と「繰り返し」の分散は等しくなるはずである。また逆に、瓶間の平均値に差があるのであれば、 $\sigma_B>0$ であると推定できる。よって、「瓶」の分散は「繰り返し」の分散より大きくなるはずである。

分散分析について

- 判定法

分散の比を考える.

$$F = \frac{V_B}{V_e} \Rightarrow \frac{\sigma_e^2 + 3\sigma_B^2}{\sigma_e^2}$$

もし、瓶間に差が無いのであれば、 F の値は1に近い値となる。瓶間に差があるのであれば、 F の値は1よりもずっと大きくなる。

ではどのくらい F の値が大きければ差があるのだろうか？

分散分析について

• F 分布表(5%)

$v_e \backslash v_b$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	161	200	216	225	230	237	239	241	242	244
2	18.5	19.0	19.2	19.2	19.3	19.3	19.4	19.4	19.4	19.4
3	10.1	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81	8.79
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.96
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.10	4.06
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68	3.64
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39	3.35
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.29	3.23	3.18	3.14
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02	2.98

この表で示される値より F の値が大きければ有意！

分散分析について

- 今回の例では,

$$F = \frac{0.1477}{0.01133} = 13.03$$

F分布表より, ($\nu_B=4, \nu_e=10$) $\cdots 3.48$

$$13.03 > 3.48$$

であるので, 瓶間の濃度の差は存在すると考えられる.

F検定

要因Aのばらつきは誤差eのばらつきと比べ、
本当に意味があるほどばらついているのかどうかを調べる。

分散比 $F_0 = \frac{V_A}{V_e}$ すなわち, $\frac{\sigma_e^2 + n\sigma_A^2}{\sigma_e^2}$ の推定値を求める。

もし, Aは意味のあるほどのばらつきを持たなければ,
理想的には, 分散比は1となる。

意味があるのなら, 分散比は1よりは大きな値となるはずで
ある。どの程度大きければ意味があるのか？

検定法

$F_0 \geq F(f_A, f_e; \alpha)$ であれば有意。 α : 有意水準
 F : F分布表より求める

各ばらつきの算出

分散分析の目的が意味がある、無しの判定ではなく、瓶間のばらつきと繰返しのばらつきを求めることが目的であるなら、下式によって求める。

$$\hat{\sigma}_A^2 = \frac{V_A - V_e}{n} \qquad \hat{\sigma}_e^2 = V_e$$

$$\hat{\sigma}_A = \sqrt{\frac{0.1477 - 0.01133}{3}} = 0.2132$$

$$\hat{\sigma}_e = \sqrt{0.01133} = 0.1065$$

再掲 日間変動

- 例：日間変動の評価

日ごとに測定値が変わるかもしれない．それを評価するために，1日5回の測定，それを4日間にわたって実験を行いデータを得た．

	1	2	3	4	5回
1日目	12.5	12.3	12.7	12.3	12.2
2日目	12.0	12.1	12.2	12.1	11.9
3日目	12.4	12.3	12.6	12.4	12.5
4日目	12.6	12.6	12.8	12.4	12.6

再掲 日間変動

	1	2	3	4	5回	平均 $\bar{x}_i$
1日目	12.5	12.3	12.7	12.3	12.2	12.40
2日目	12.0	12.1	12.2	12.1	11.9	12.06
3日目	12.4	12.3	12.6	12.4	12.5	12.44
4日目	12.6	12.6	12.8	12.4	12.6	12.60

全平均 $\bar{\bar{x}} = 12.375$

分散の算出
$$V = \frac{\sum (\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2}{m - 1} = 0.05157$$

この方法では、日間変動のばらつきの算出を行ったつもりでも、算出された分散に繰返しのばらつきが一部含まれる。

繰り返し測定に含まれるばらつき

通常校正する際には5回の繰り返し測定を行って値付けしているが、日によって微妙に値が異なるため、日間変動を分散分析によって知りたい。

実験：

	1回目	2回目	3回目	4回目	5回目	平均
1日目	x_{11}	x_{12}	x_{13}	x_{14}	x_{15}	$\bar{x}_1$
2日目	x_{21}	x_{22}	x_{23}	x_{24}	x_{25}	$\bar{x}_2$
3日目	x_{31}	x_{32}	x_{33}	x_{34}	x_{35}	$\bar{x}_3$
4日目	x_{41}	x_{42}	x_{43}	x_{44}	x_{45}	$\bar{x}_4$

日間変動の分散： $\hat{\sigma}_A^2$ 繰り返しの分散： $\hat{\sigma}_e^2$ 全平均： $\bar{\bar{x}}$

$$\text{不確かさ: } u = \sqrt{\hat{\sigma}_A^2 + \frac{\hat{\sigma}_e^2}{5}}$$

繰り返し測定に含まれるばらつき

$$\bar{x}_i = \frac{\sum_{j=1}^5 x_{ij}}{5} = \frac{\sum_{j=1}^5 (\mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij})}{5} = \mu + \alpha_i + \bar{\varepsilon}_i \quad \bar{\bar{x}} = \frac{\sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^5 x_{ij}}{4 \cdot 5} = \frac{\sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^5 (\mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij})}{4 \cdot 5} = \mu + \bar{\alpha} + \bar{\bar{\varepsilon}}$$

$$s(\bar{x}_i) = \frac{\sum_{i=1}^4 (\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2}{4-1} = \frac{\sum_{i=1}^4 \{(\mu + \alpha_i + \bar{\varepsilon}_i) - (\mu + \bar{\alpha} + \bar{\bar{\varepsilon}})\}^2}{4-1} = \frac{\sum_{i=1}^4 \{(\alpha_i - \bar{\alpha}) + (\bar{\varepsilon}_i - \bar{\bar{\varepsilon}})\}^2}{4-1}$$

ここで、 α と ε は相関がないとすると、

$$s(\bar{x}_i) = \frac{\sum_{i=1}^4 (\alpha_i - \bar{\alpha})^2}{4-1} + \frac{\sum_{i=1}^4 (\bar{\varepsilon}_i - \bar{\bar{\varepsilon}})^2}{4-1} \quad \text{となる.}$$

右辺第1項が日間変動の分散，第2項が5回の繰り返しの平均の分散

$$s(\bar{x}_i) = \frac{\sum_{i=1}^4 (\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2}{4-1} = \sqrt{\hat{\sigma}_A^2 + \frac{\hat{\sigma}_e^2}{5}} = u \quad \text{不確かさを求めるだけなら、これでよい。}$$

Excelにおける分散分析について

- これまで紹介した例のように分散分析を行うためのアドインを用いて分散分析を行うと非常に手軽に結果を得ることができる。
- しかし、これらのアドインを実際の業務に用いる際には面倒なことがある。



数値を入れ替えただけでは再計算してくれない！

つまり、数値を入れ替えるたびにアドインを立ち上げ、もう一度計算し直さなければならない。

Excelにおける分散分析について

- 数値を入れ替えるだけで自動的に再計算をするには・・・

セルに数式を入力し，自分で分散分析を行うシートを作成する必要がある！

ただし，この方法にも問題がある。

→作成した分散分析を行うシートは本当に計算間違いをしないシートになっているか？

作成したシートを検証する必要がある！！

分散分析シートの検証法

- 作成した分散分析シートをどのように検証するか？



設定した σ_A , σ_e のばらつきを持つデータを作成し、そのデータに対し分散分析を行い、 σ_A の推定値、 σ_e の推定値を求め、その値が、設定した σ_A , σ_e の値とほぼ同じになっているかを確認する。

分散分析シートの検証法

- 分散分析用データの作成

$$\mu = 50$$

$\sigma_A = 10$ に従うデータを発生させる。

$$\sigma_e = 5$$

=NORMINV(RAND(), 50, 10)

これで、平均値50、標準偏差10のデータとなる。

=NORMINV(RAND(), 0, 5)

これで、平均値0、標準偏差5のデータとなる。

分散分析シートの検証法

- 分散分析用データの作成

=NORMINV(RAND(), 50, 10)

=NORMINV(RAND(), 0, 5)

