

College Analysis 総合マニュアル

－ 多変量解析 4 －

目次

3 2. 2 値項目反応理論	1
3 3. 多変量分散分析	20
3 4. 周波数時系列推定.....	31

3.2. 2 値項目反応理論

3.2.1 2 値項目反応理論とは

試験問題を扱う際、問題の相対的な難易度はその問題の正答率で評価されるが、受験者の全体的な能力が分からぬ限り、その問題の絶対的な難易度は分からぬ。また、受験者の相対的な能力は試験の点数（配点が同じ場合は正答率）で判断されるが、問題の全体的な難易度が分からぬ限り、受験者の絶対的な能力は判断できない。そのため、別々の問題で受験した受験者の能力を比較することは不可能であった。しかし、項目反応理論を応用するとこれが可能となる。この理論は医療系の共用試験や TOEIC, TOEFL などの受験者の評価時や問題作成時に利用されており、今後多くの試験での利用が予想される。ここでは、試験を正解と不正解で判断する 2 値項目反応理論について考察する。

2 値項目反応理論では、受験者の能力値 θ が与えられたとき、問題の正解確率を例えば以下のように与える。

$$P(\theta) = g + \frac{(1-g)}{1 + \exp[-D(\theta - b)]}$$

ここで、 a, b, c は問題ごとに与えられる項目パラメータである。また、 D はロジスティック関数と標準正規分布の分布関数の違いを補正するパラメータである。 $D = 1.7$ のとき、最も標準正規分布関数に近いとされている。この式は $D = 1$ のとき、項目パラメータの値（以後、項目値）を変えると、能力パラメータの値（以後、能力値） θ に応じて図 1 のような形の特性曲線が与えられる。

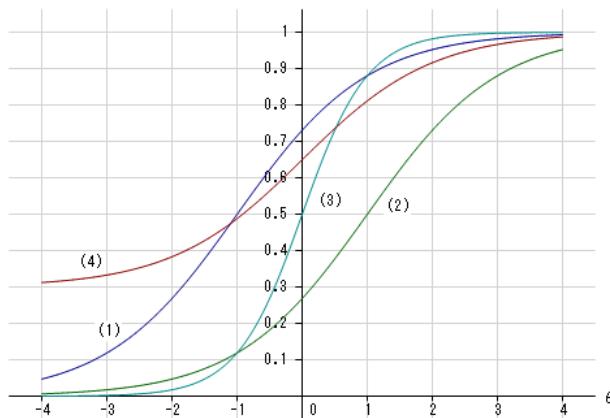


図 1 ロジスティック曲線

ここで、図 1 の各項目値は以下のように与えた。

- (1) $b = -1, a = 1, g = 0$
- (2) $b = 1, a = 1, g = 0$
- (3) $b = 0, a = 2, g = 0$
- (4) $b = 0, a = 1, g = 0.3$

項目パラメータ b は難易度母数と呼ばれ、(1)と(2)の比較で分かるように、大きくなるに

つれてグラフは右へ寄る。これにより難易度母数が大きくなるにつれて同じ能力値の受験者の正解率は低くなる。パラメータ a は識別力母数と呼ばれ、(3)で分かるように、グラフの立ち上がりが急になり、能力値の差により正解率の変化が大きくなる。パラメータ g は当て推量母数と呼ばれ、(4)で分かるようにグラフの下限がその値に応じて上がっていく。これは能力の低い受験者でも偶然正解を得る確率と解釈される。これらのパラメータによって、問題の特徴を捉えるが、モデルにより b だけを用いたもの（他は $a=1, g=0$ ）、 b と a を用いたもの（他は $g=0$ ）、すべてのパラメータを用いたものがあり、それぞれ、1PL モデル、2PL モデル、3PL モデルと呼ばれている。但し、これらのパラメータは独立でない。実際、以下のような線形変換によって同じ正解確率を得る。

$$\theta' = \alpha\theta + \beta, \quad b' = ab + \beta, \quad a' = a/\alpha, \quad g' = g$$

このため、ここまで話では単に問題の特徴を難しく言い換えただけのように思え、有用性はあまり感じられない。しかし、これらのパラメータを求める方法を固定すれば、受験した問題の項目値から受験者の能力値を、別の問題を受験した他者と比較できる形で決定でき、また、受験者の能力値から、問題の項目値を他の問題と比較できる形で決定できることが知られている。これが項目反応理論の特徴である。以下、実際の試験に当てはめて考え方を説明する。

最初に、基礎となる問題を多数含んだ問題セットを用意し、受験者を予備調査で集め、試験を実施して結果を求める。この結果から、長年研究されてきた方法を使って、最初の項目値と能力値を決める。ここで、これらの値を同時に求めるところが重要な点で、歴史的に様々な方法が提案してきた。我々のプログラムでは、EM アルゴリズムを利用したベイズ推定法という方法を用いている。これは最尤法と呼ばれる統計手法の一種である。

この予備調査の問題セットに対して、項目値と能力値が同時に求まれば、上で述べたように、これらの問題のどのような組み合わせからでも新しい受験者の能力を推定できる。また、新しい問題の項目値については、少数の新しい問題を余分に含めた試験を実施し、まず項目値の分かっている問題だけを使って受験者の能力値を求める。次にその能力値を用いて、含めておいた新しい問題の項目値を求める。このような方法によって、問題を増やして項目値を求めていくことができる。我々のプログラムではこの原理が体感できるようになっている。実用では、実務的な意見を取り入れながら、操作を自動化していく必要がある。

3.2.2 プログラムの利用法

メニュー [分析－多変量解析他－教育関連手法－2 値項目反応理論] を選択すると、図 1 に与えられる分析実行画面が表示される。

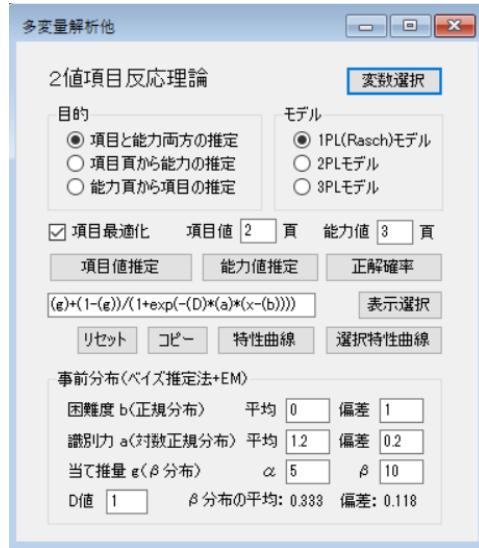


図 1 分析実行画面

データは正解を 1、不正解を 0 とした図 2 のような形式である。

	問題01	問題02	問題03	問題04	問題05	問題06	問題07	問題08
▶ 2	1	1	0	1	1	1	0	
3	1	1	0	1	1	1	0	
4	1	1	1	1	1	0	1	
5	1	1	1	1	1	1	0	
6	1	1	1	1	1	1	1	
7	1	1	1	1	1	1	1	
8	1	1	1	1	0	1	1	
9	1	1	1	1	1	1	1	
10	1	1	1	1	1	1	1	
11	1	1	1	1	1	1	1	

図 2 データ (2 値項目反応理論 1.txt)

モデルは 1PL, 2PL, 3PL の 3 つのモデルから選択できる。ここでは 2PL モデルを元に説明を進める。

変数選択で問題 1 から問題 25 まで選択し、「項目値推定」のボタンをクリックすると項目反応理論の計算が実行され、推定された項目値の結果が図 3 のように表示される。

項目値推定											
	困難度値	識別力値	当て推量値	困難度誤差	識別力誤差	当て推量誤	困難2.5%下	困難3.5%上	識別2.5%下	識別2.5%上	
▶ 問題01	-2.217	1.296	0.000	0.542	0.202	0.000	-3.279	-1.154	0.901	1.691	
問題02	-1.900	1.295	0.000	0.489	0.203	0.000	-2.858	-0.942	0.896	1.693	
問題03	-1.107	1.238	0.000	0.384	0.195	0.000	-1.859	-0.355	0.856	1.621	
問題04	-1.900	1.295	0.000	0.489	0.203	0.000	-2.858	-0.942	0.896	1.693	
問題05	-1.445	1.269	0.000	0.423	0.200	0.000	-2.274	-0.617	0.877	1.662	
問題06	-1.156	1.166	0.000	0.398	0.179	0.000	-1.937	-0.376	0.816	1.517	
問題07	-0.349	1.133	0.000	0.334	0.174	0.000	-1.003	0.305	0.792	1.474	
問題08	0.218	1.157	0.000	0.305	0.180	0.000	-0.380	0.815	0.805	1.509	
問題09	-0.690	1.205	0.000	0.346	0.189	0.000	-1.369	-0.011	0.835	1.575	

図 3 項目値の推定結果 (2PL モデル)

ここでは各パラメータの推定値の他に、推定の標準誤差と 2.5%の下限と上限も表示されている。ここで、2PL モデルであるので、当該推量パラメータ値は 0 に固定されており、標準誤差も 0 となっている。

続けて「能力値推定」ボタンをクリックすると、図 4 のような結果が表示される。



	能力値	能力誤差	5%下限	5%上限
2	-0.523	0.332	-1.175	0.128
3	-0.934	0.334	-1.589	-0.279
4	0.726	0.409	-0.076	1.528
5	0.553	0.391	-0.213	1.319
6	1.483	0.519	0.467	2.499
7	0.365	0.374	-0.368	1.098
8	-0.421	0.334	-1.075	0.234
9	0.553	0.391	-0.214	1.319
10	0.937	0.435	0.084	1.791

図 4 能力値の推定結果

この表示でも推定の標準誤差と 2.5%の下限と上限が示される。ここで、「項目と能力両方の推定」の場合、計算時間がかかることが予想されるため、「項目値の推定」ボタンでほとんどすべての処理を行う。そのため、他のボタンは結果の表示のみに使われ、まず「項目値の推定」で計算を行っていなければならない。計算が行われていない場合は、図 5 のようなエラーメッセージが表示される。

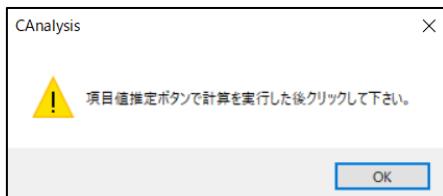


図 5 エラーメッセージ

図 3 と図 4 の計算結果は、1 回の最尤法の計算から求めたものではない。「項目と能力両方の推定」では、最初どちらのパラメータの値も求まっていないため、能力値については、事前分布を与え、積分して周辺分布を求めることで推定から除外し、項目値だけを求めている。その後、その項目値を使って能力値を求めており、求めた能力値から項目値を推定しようとすると、誤差が生じる。このプログラムでは「項目最適化」のチェックボックスを設け、それをチェックすることで、能力値から項目値、項目値から能力値を求めるこれを繰り返し、推定値を安定させようとしている。但し、繰り返しの 2 回目以降は周辺分布を用いせず、求めた能力値と項目値の暫定的な値を使っている。1 回目の周辺分布を使った推定の結果を見たい場合は、「項目最適化」チェックボックスのチェックを外すとよい。

「正解確率」ボタンも「項目値推定」ボタンをクリックしておくことが必要であるが、これは各問題と各人の能力値から問題の正解確率を計算し、表示するものである。実行結果は図 6 のようになる。

	能力値	問題01	問題02	問題03	問題04	問題05	問題06	問題07
2	-0.523	0.900	0.856	0.673	0.856	0.763	0.677	0.451
3	-0.934	0.841	0.777	0.554	0.777	0.657	0.565	0.340
4	0.726	0.978	0.968	0.906	0.968	0.940	0.900	0.772
5	0.553	0.973	0.960	0.887	0.960	0.927	0.880	0.735
6	1.483	0.992	0.988	0.961	0.988	0.976	0.956	0.889
7	0.365	0.966	0.949	0.861	0.949	0.909	0.855	0.692
8	-0.421	0.911	0.872	0.701	0.872	0.786	0.702	0.480
9	0.553	0.973	0.960	0.887	0.960	0.927	0.880	0.735
10	0.937	0.984	0.975	0.926	0.975	0.954	0.920	0.811

図 6 各人の各問題に対する正解確率

「選択特性曲線」ボタンは、「表示選択」ボタンの画面で選んだ変数について、特性曲線のグラフを表示するために、図 7 の 1 変数関数グラフ実行画面を表示する。ここでは、問題 1 と問題 20 を選択している。そのまま、「グラフ描画」ボタンをクリックすると、これらの問題についての特性曲線が図 8 のように表示される。

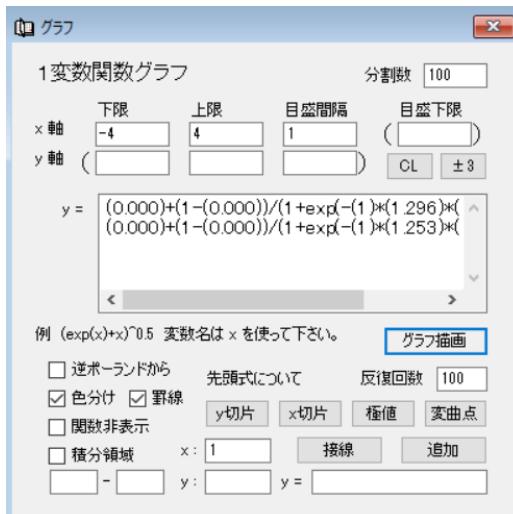


図 7 問題 1 と問題 20 の 1 変数関数グラフ表示画面

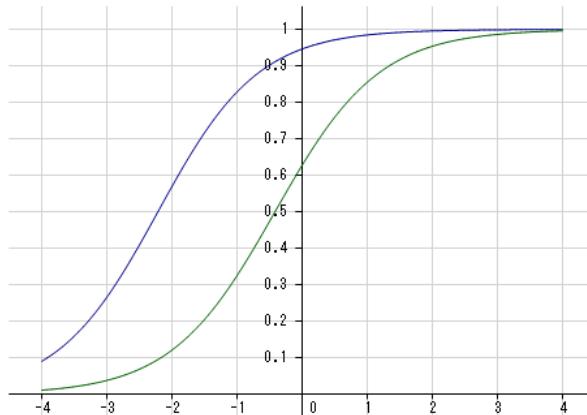


図 8 問題 1 と問題 20 のロジスティック曲線

ここでは、2PL モデルを使っているため、グラフの値域は 0 から 1 の範囲となる。

利用者がパラメータを与えて特性曲線を描く場合は、「特性曲線」ボタンをクリックする。その際には図 9 のような 1 変数グラフ表示画面となる。

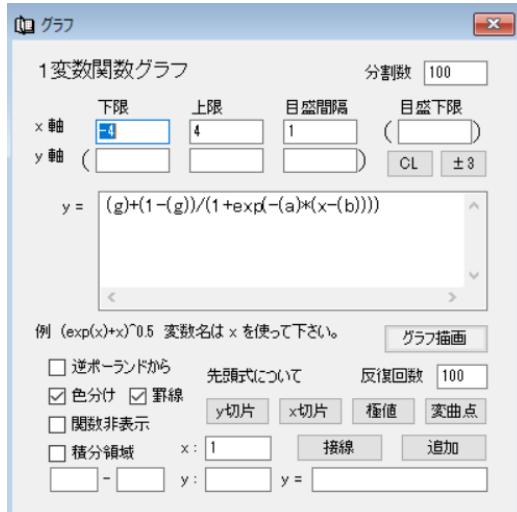


図 9 1 变数関数グラフ表示画面

この画面の中の、 b , a , g の文字に数値を代入すると、それに応じた特性曲線が表示される。複数表示したい場合は、値を変えたものを、行を変えて追加して行く。前節の図 1 は、この機能を使って作ったグラフである。

次に項目値が与えられた問題からの、新しい受験者の能力値の推定の問題を考える。図 10 は、図 2 の問題 1 から問題 25 のデータから求めた項目値を保存した頁を示している。

	困難度値	識別力値	当推量値	困難度誤差	識別力誤差	当推量誤差
問題01	-2.217	1.296	0.000	0.542	0.202	0.0
問題02	-1.900	1.295	0.000	0.489	0.203	0.0
問題03	-1.107	1.238	0.000	0.384	0.195	0.0
問題04	-1.900	1.295	0.000	0.489	0.203	0.0
問題05	-1.445	1.269	0.000	0.423	0.200	0.0
問題06	-1.156	1.166	0.000	0.398	0.179	0.0
問題07	-0.349	1.133	0.000	0.334	0.174	0.0
問題08	0.218	1.157	0.000	0.305	0.180	0.0
問題09	-0.690	1.205	0.000	0.346	0.189	0.0

図 10 項目値データページ

この項目値の分かっている頁の最初の 3 列のデータを使って、新しい受験者の能力値を求めてみよう。ここでは確認のため 37 番の受験者を新しい受験者に見立て、図 11 のように、問題 10 と問題 11 の正否を 1 から 0 に変えている。

1/3 (36,11) 分析 備考 問題26を別に考えること。能力値を見る場合は10-11を0に。

図 11 項目値データ頁と同じ問題での解答結果

「項目頁から能力の推定」チェックボックスにチェックを入れ、「項目値」テキストボックスに頁の番号を書き込み、「能力値推定」ボタンをクリックすると、図 12 のような結果が得られる。左が元々の推定結果で、右が 37 番を新しい受験者に見立てた能力値である。

図 12 項目頁からの能力値の推定結果の変化

他の受験者の能力は変わっていながら（繰り込み誤差のため多少変化することもある）、37 番の能力値は、正解を不正解にしたため、下がっていることが分かる。このように項目値が分かっている問題からの能力値の結果は整合性の取れた結果となる。

同様にして、能力値の分かっている受験者からの、新しい問題の項目値の推定の問題を考える。図 13 はこのデータの問題 1 から問題 25 より求めた能力値を保存した頁を示している。先ほどの 37 番のデータの変更は元に戻している。

3/3 (1,1) 分析 備考

図 13 能力値データページ

この能力値の分かっている頁の 1 列目のデータを使って、今度はすべての問題を選択し、以前の結果と比較してみよう。データは図 14 のように、問題 26 が 1 つ追加されている。

図 14 能力値の分かっている場合の問題追加

「能力頁から項目の推定」チェックボックスにチェックを入れ、「能力値」テキストボックスに頁の番号を書き込み、「項目値推定」ボタンをクリックすると、図 15 のような結果が得られる。左が元の結果、右が問題 26 を追加した場合の結果である。

図 15 能力頁からの項目値の推定結果の変化

元々の問題の値は変わっていないが（繰り込み誤差のため多少変化している）、新しい問題の値が求まっている。

この分析の本質は、項目値から能力値を求める場合、同じ受験結果の受験者の能力値は他の受験者と独立に不变であり、能力値から項目値を求める場合、同じ受験結果の問題の項目値は他の問題とは独立に不变であることである。この独立性により、異なった問題でも同じ評価基準で能力を評価できることになる。

最後に少しデータを変えて実験してみる。図 16 に元の難易度データとそれから求めた能力値を示す。

図 16 元の難易度データと能力値

この難易度に対して問題 10 の値を-1 に変えて、易しい判定の問題にしてみた。それに対する

る能力値の推定結果が図 17 である。

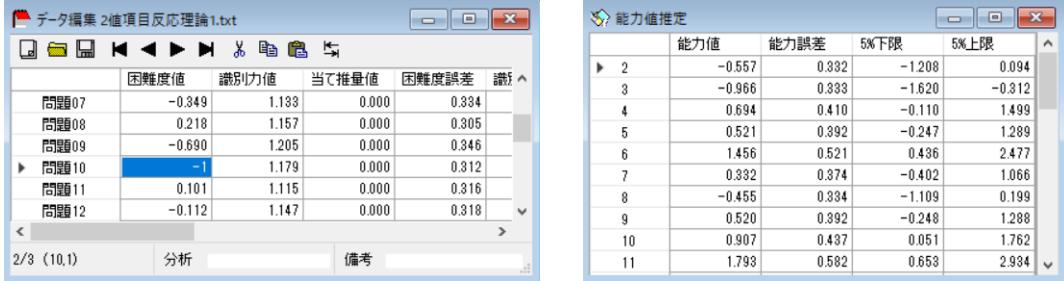


図 17 問題 10 を易しい判定の問題に変えたデータと能力値

さらに、元の難易度に対して問題 10 の値を 1 に変えて、難しい判定の問題にしてみた。それに対する能力値の推定結果が図 18 である。



図 18 問題 10 を易しい判定の問題に変えたデータと能力値

図 17 の能力値は全体的に下がり、図 18 の能力値は全体的に上がっている。問題の難易度によって、推定される能力値は変化する。

32.3 EMアルゴリズムを利用したベイズ推定法の理論

1) 項目パラメータの周辺尤度関数を利用した項目値の推定

受験者を i 、問題を r とした場合の解答データを $u_{ir} = \{0, 1\}$ (不正解 0, 正解 1) とする。

問題 r について、能力値 θ_i の受験者 i の正解確率 $P_r(\theta_i)$ を以下のように仮定する。

$$P_r(\theta_i) = g_r + \frac{1 - g_r}{1 + \exp[-D a_r(\theta_i - b_r)]}, \quad Q_r(\theta_i) = 1 - P_r(\theta_i)$$

ここで、 b_r を困難度パラメータ、 a_r を識別力パラメータ、 g_r を当て推量パラメータと呼び、これらをまとめて項目パラメータと呼ぶ。これらのパラメータの値の組み合わせで、よく利用されるのが以下のモデルである。

$$\text{1PL モデル} \quad a_r = 1, \quad g_r = 0 \quad P_r(\theta_i) = \frac{1}{1 + \exp[-D(\theta_i - b_r)]}$$

$$\text{2PL モデル} \quad g_r = 0 \quad P_r(\theta_i) = \frac{1}{1 + \exp[-D a_r(\theta_i - b_r)]}$$

$$\text{3PL モデル} \quad \text{制約なし} \quad P_r(\theta_i) = g_r + \frac{1 - g_r}{1 + \exp[-D a_r(\theta_i - b_r)]}$$

今、受験生 i の解答データ $\mathbf{u}_i = (u_{i1}, u_{i2}, \dots, u_{in})$ が得られたとき、受験生の能力パラメータ

θ 、 n 個の問題の項目パラメータ $\mathbf{d}_r = (b_r, a_r, g_r)$ ($r = 1, \dots, n$) の確率分布は、各問題が独立と仮定して以下で与えられる。

$$\begin{aligned} P(\mathbf{d}, \theta | \mathbf{u}_i) &= P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}, \theta) f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}) f(\theta) / G(\mathbf{u}_i) \\ &= \prod_{r=1}^n P_r(\theta)^{u_{ir}} Q_r(\theta)^{1-u_{ir}} f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) \times f(\theta) / G(\mathbf{u}_i) \end{aligned}$$

ここに、受験生の能力パラメータ θ の事前分布の密度関数を $f(\theta)$ 、各問題の項目パラメータの事前分布の密度関数を $f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) = f_b(b_r) f_a(a_r) f_g(g_r)$ とし、問題ごとの関数形は同じものとしている。また、分母については以下である。

$$\begin{aligned} G(\mathbf{u}_i) &= \int \cdots \int P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}, \theta) f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}) f(\theta) d\mathbf{d} d\theta \\ &= \int \left[\prod_{r=1}^n \int P_r(\theta)^{u_{ir}} Q_r(\theta)^{1-u_{ir}} f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) d\mathbf{d}_r \right] f(\theta) d\theta \end{aligned}$$

これは定数となり、最尤法の議論とは無関係になる。

今、項目パラメータと能力パラメータを同時に求めることは難しいので、項目パラメータについての周辺分布を求め、それを尤度関数にする。受験生 i のデータ出現の周辺分布は以下となる。

$$P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}) = \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}, \theta) f(\theta) d\theta = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{r=1}^n P_r(\theta)^{u_{ir}} Q_r(\theta)^{1-u_{ir}} f(\theta) d\theta$$

以後、表示の簡単のため、以下と定義する。

$$P(\mathbf{u}_i | \theta) \equiv P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}, \theta), \quad P(\mathbf{u}_i) \equiv P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d})$$

また能力パラメータの事前分布は標準正規分布と仮定する。

$$f(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\theta^2/2)$$

この周辺分布を使った尤度関数を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} L &= \prod_{i=1}^N G(\mathbf{u}_i) P(\mathbf{d} | \mathbf{u}_i) = \prod_{i=1}^N P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}) \times \prod_{r=1}^n f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) = \prod_{i=1}^N P(\mathbf{u}_i) \times \prod_{r=1}^n f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) \\ &= \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta) d\theta \right] \times \prod_{r=1}^n f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) \equiv L_1 \times L_2 \end{aligned}$$

これを用いると、対数尤度関数は以下となる。

$$\begin{aligned} \log L &= \log L_1 + \log L_2 = \sum_{i=1}^N \log P(\mathbf{u}_i) + \sum_{r=1}^n \log f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) \\ &= \sum_{i=1}^N \log \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta) d\theta + \sum_{r=1}^n \log f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) \end{aligned}$$

対数尤度関数はこのように 2 つの部分に分かれるので、当面第 1 項について計算を進める。

対数尤度 L_1 を用いてスコアベクトルを計算する。ここでは詳細な例として識別度パラメータでの微分を考える。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 &= \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial a_r} \log P(\mathbf{u}_i) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{P(\mathbf{u}_i)} \frac{\partial}{\partial a_r} P(\mathbf{u}_i) \\
&= \sum_{i=1}^N \frac{1}{P(\mathbf{u}_i)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial a_r} P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta) d\theta \\
&= \sum_{i=1}^N \frac{1}{P(\mathbf{u}_i)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial a_r} [\log P(\mathbf{u}_i | \theta)] \times P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta) d\theta \\
&= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial a_r} [\log P(\mathbf{u}_i | \theta)] \times \frac{P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta)}{P(\mathbf{u}_i)} d\theta
\end{aligned}$$

この式の最後の部分にベイズの定理を用いると、

$$P(\theta | \mathbf{u}_i) = \frac{P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta)}{P(\mathbf{u}_i)}, \quad P(\mathbf{u}_i) = \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta) d\theta$$

この関係をスコアベクトルに代入すると以下のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 = \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial a_r} [\log P(\mathbf{u}_i | \theta)] \times P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta$$

さらに、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial a_r} [\log P(\mathbf{u}_i | \theta)] \times P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\
&= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{P(\mathbf{u}_i | \theta)} \frac{\partial}{\partial a_r} P(\mathbf{u}_i | \theta) \times P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\
&= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{P(\mathbf{u}_i | \theta)} \frac{\partial}{\partial a_r} \prod_{r'=1}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} \times P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \times \prod_{r=1}^n f_{\mathbf{d}_r}(\mathbf{d}_r)
\end{aligned}$$

以下、参考文献 [2] の議論に従って計算を進める。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_r} \prod_{r'=1}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} &= \prod_{r' \neq r}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} \frac{\partial}{\partial a_r} [P_r(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}}] \\
&= \prod_{r' \neq r}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} \left[\frac{\partial}{\partial a_r} \{P_r(\theta)^{u_{ir'}}\} Q_r(\theta)^{1-u_{ir'}} + P_r(\theta)^{u_{ir'}} \frac{\partial}{\partial a_r} \{Q_r(\theta)^{1-u_{ir'}}\} \right]
\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_r} P_r(\theta) &= \frac{\partial}{\partial a_r} \left[g_r + \frac{1-g_r}{1+\exp\{-Da_r(\theta-b_r)\}} \right] \\
&= \frac{D(1-g_r)(\theta-b_r) \exp\{-Da_r(\theta-b_r)\}}{[1+\exp\{-a_r(\theta-b_r)\}]^2} = D(1-g_r)(\theta-b_r) P_r^*(\theta) Q_r^*(\theta) \\
&= D(\theta-b_r) [P_r(\theta) - g_r] Q_r(\theta) \equiv M_r(\theta)
\end{aligned}$$

とすると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_r} \prod_{r'=1}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} &= \prod_{r' \neq r}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} M_r(\theta) \\
&\quad \times \left[u_{ir'} P_r(\theta)^{u_{ir'}-1} Q_r(\theta)^{1-u_{ir'}} - (1-u_{ir'}) P_r(\theta)^{u_{ir'}} Q_r(\theta)^{-u_{ir'}} \right]
\end{aligned}$$

括弧は、 $u_{ir} = 1$ のとき 1、 $u_{ir} = 0$ のとき -1 であるから、 $(-1)^{u_{ir}+1}$ でおきかえ、以下を得る。

$$\frac{\partial}{\partial a_r} \prod_{r'=1}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} = (-1)^{u_{ir}+1} M_r(\theta) \prod_{r' \neq r}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}}$$

以上をまとめると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{P(\mathbf{u}_i | \theta)} \frac{\partial}{\partial a_r} \prod_{r'=1}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} \times P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{u_{ir}+1} M_r(\theta)}{P(\mathbf{u}_i | \theta)} \left[\prod_{r' \neq r}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} \right] P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{u_{ir}+1} M_r(\theta)}{P(\mathbf{u}_i | \theta)} \frac{P(\mathbf{u}_i | \theta)}{P_r(\theta)^{u_{ir}} Q_r(\theta)^{1-u_{ir}}} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= \sum_{i=1}^N (-1)^{u_{ir}+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M_r(\theta)}{P_r(\theta)^{u_{ir}} Q_r(\theta)^{1-u_{ir}}} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \end{aligned}$$

ここで、

$$(-1)^{u_{ir}+1} P_r(\theta)^{1-u_{ir}} Q_r(\theta)^{u_{ir}} = u_{ir} - P_r(\theta)$$

と表せることより、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] \frac{M_r(\theta)}{P_r(\theta) Q_r(\theta)} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= D(1-g_r) \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] (\theta - b_r) \frac{P_r^*(\theta) Q_r^*(\theta)}{P_r(\theta) Q_r(\theta)} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= D(1-g_r) \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] (\theta - b_r) w_r(\theta) P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \end{aligned}$$

同様にして、 b_r の微分については、

$$\frac{\partial}{\partial b_r} \log L_1 = -D a_r (1-g_r) \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] w_r(\theta) P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta$$

次に、 g_r の微分については、

$$\begin{aligned} M_r(\theta) &= \frac{\partial}{\partial g_r} P_r(\theta) = \frac{\partial}{\partial g_r} \left[g_r + \frac{1-g_r}{1+\exp\{-a_r(\theta-b_r)\}} \right] = Q_r^*(\theta) \\ \frac{\partial}{\partial g_r} \prod_{r'=1}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} &= (-1)^{u_{ir}+1} M_r(\theta) \prod_{r' \neq r}^n P_{r'}(\theta)^{u_{ir'}} Q_{r'}(\theta)^{1-u_{ir'}} \end{aligned}$$

を用いると以下となる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial g_r} \log L_1 &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[u_{ir} - P_r(\theta)] M_r(\theta)}{P_r(\theta) Q_r(\theta)} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[u_{ir} - P_r(\theta)] Q_r^*(\theta)}{P_r(\theta) Q_r(\theta)} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= \frac{1}{1-g_r} \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[u_{ir} - P_r(\theta)]}{P_r(\theta)} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \end{aligned}$$

以上まとめると、今後の基本となる以下の式を得る。

対数尤度関数の 1 階微分

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial b_r} \log L_1 &= -D a_r (1 - g_r) \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] w_r(\theta) P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ \frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 &= D (1 - g_r) \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] (\theta - b_r) w_r(\theta) P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ \frac{\partial}{\partial g_r} \log L_1 &= \frac{1}{1 - g_r} \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[u_{ir} - P_r(\theta)]}{P_r(\theta)} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta\end{aligned}$$

次に情報行列を得るために、対数尤度の 2 階微分を計算する必要があるが、計算の高速化と安定化のために以下の EM アルゴリズムを利用する。EM アルゴリズムはパラメータ推定ステップを 2 段階に分ける方法で、ある段階で暫定的に求まったパラメータを使って、ある統計量を計算し (E ステップ)、その後はその統計量を既知として最尤法の計算を進め (M ステップ)、結果が得られた段階で、再度その結果を使って E ステップを実行し、これを繰り返す手法である。

E ステップ

得られたデータと暫定的なパラメータの値を用いて、各問題についての暫定的サンプルサイズ $f_r(\theta)$ と暫定的正答数 $r_r(\theta)$ とを以下のように計算する。

$$f_r(\theta) = \sum_{i=1}^N P(\theta | \mathbf{u}_i), \quad r_r(\theta) = \sum_{i=1}^N u_{ir} P(\theta | \mathbf{u}_i)$$

M ステップ

上の結果を使うと対数尤度関数は以下のように書き換えられる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial b_r} \log L_1 &= -D a_r (1 - g_r) \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] P(\theta | \mathbf{u}_i) w_r(\theta) d\theta \\ &= -D a_r (1 - g_r) \int_{-\infty}^{\infty} [r_r(\theta) - f_r(\theta) P_r(\theta)] w_r(\theta) d\theta \\ \frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 &= D (1 - g_r) \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} [u_{ir} - P_r(\theta)] P(\theta | \mathbf{u}_i) (\theta - b_r) w_r(\theta) d\theta \\ &= D (1 - g_r) \int_{-\infty}^{\infty} [r_r(\theta) - f_r(\theta) P_r(\theta)] (\theta - b_r) w_r(\theta) d\theta \\ \frac{\partial}{\partial g_r} \log L_1 &= \frac{1}{1 - g_r} \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[u_{ir} - P_r(\theta)]}{P_r(\theta)} P(\theta | \mathbf{u}_i) d\theta \\ &= \frac{1}{1 - g_r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[r_r(\theta) - f_r(\theta) P_r(\theta)]}{P_r(\theta)} d\theta\end{aligned}$$

この $f_r(\theta)$ と $r_r(\theta)$ を定数のように考えるので、補遺の関係などを使って 2 階微分は比較的

容易に求められる。注意することは、異なる問題についての 2 階微分は 0 であることである。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial b_r^2} \log L_1 &= D(1-g_r) \frac{\partial}{\partial b_r} \int_{-\infty}^{\infty} [r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)](\theta - b_r)w_r(\theta)d\theta \\
&= \frac{D^2 a_r^2}{(1-g_r)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Q_r(\theta)}{P_r(\theta)^2} \{P_r(\theta) - g_r(\theta)\}[r_r(\theta)g_r - f_r(\theta)P_r(\theta)^2]d\theta \\
\frac{\partial^2}{\partial a_r^2} \log L_1 &= D(1-g_r) \frac{\partial}{\partial a_r} \int_{-\infty}^{\infty} [r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)](\theta - b_r)w_r(\theta)d\theta \\
&= \frac{D^2}{(1-g_r)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Q_r(\theta)}{P_r(\theta)^2} (\theta - b_r)^2 \{P_r(\theta) - g_r\}[r_r(\theta)g_r - f_r(\theta)P_r(\theta)^2]d\theta \\
\frac{\partial^2}{\partial g_r^2} \log L_1 &= \frac{\partial}{\partial g_r} \frac{1}{1-g_r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)]}{P_r(\theta)} d\theta \\
&= \frac{1}{(1-g_r)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)]P_r(\theta) - r_r(\theta)Q_r(\theta)}{P_r(\theta)^2} d\theta \\
\frac{\partial^2}{\partial b_r \partial a_r} \log L_1 &= D(1-g_r) \frac{\partial}{\partial b_r} \int_{-\infty}^{\infty} [r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)](\theta - b_r)w_r(\theta)d\theta \\
&= -\frac{D}{(1-g_r)^2} \int_{-\infty}^{\infty} (P_r(\theta) - g_r)[(1-g_r)(r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)) \\
&\quad + \frac{D a_r(\theta - b_r)Q_r(\theta)}{P_r(\theta)} \{(r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta))P_r(\theta) - r_r(\theta)(P_r(\theta) - g_r)\}]d\theta \\
\frac{\partial^2}{\partial a_r \partial g_r} \log L_1 &= \frac{\partial}{\partial a_r} \frac{1}{1-g_r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)]}{P_r(\theta)} d\theta \\
&= -\frac{D}{(1-g_r)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Q_r(\theta)r_r(\theta)}{P_r(\theta)^2} (\theta - b_r)[P_r(\theta) - g_r]d\theta \\
\frac{\partial^2}{\partial b_r \partial g_r} \log L_1 &= \frac{\partial}{\partial b_r} \frac{1}{1-g_r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[r_r(\theta) - f_r(\theta)P_r(\theta)]}{P_r(\theta)} d\theta \\
&= \frac{D a_r}{(1-g_r)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Q_r(\theta)r_r(\theta)}{P_r(\theta)^2} [P_r(\theta) - g_r]d\theta
\end{aligned}$$

次に、対数尤度関数の事前分布部分の微分を求める。我々は参考文献[2]に従い、事前分布として以下を仮定している。

難易度パラメータ 正規分布

$$f_b(b_r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_b} \exp\left[-\frac{(b_r - \mu_b)^2}{2\sigma_b^2}\right]$$

識別力パラメータ 対数正規分布

$$f_a(a_r) = \frac{1}{a_r \sqrt{2\pi\sigma_a^2}} \exp\left[-\frac{(\log a_r - \mu_a)^2}{2\sigma_a^2}\right]$$

当て推量パラメータ β 分布

$$f_g(g_r) = \frac{(\alpha + \beta - 1)!}{\alpha! \beta!} g_r^{\alpha-1} (1-g_r)^{\beta-1}$$

これより、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial b_r} \log L_2 &= -\frac{b_r - \mu_b}{\sigma_b^2}, & \frac{\partial^2}{\partial b_r^2} \log L_2 &= -\frac{1}{\sigma_b^2} \\ \frac{\partial}{\partial a_r} \log L_2 &= -\frac{1}{a_r} - \frac{\log a_r - \mu_a}{a_r \sigma_a^2}, & \frac{\partial^2}{\partial a_r^2} \log L_2 &= \frac{1}{a_r^2} - \frac{1 - \log a_r + \mu_a}{a_r^2 \sigma_a^2} \\ \frac{\partial}{\partial g_r} \log L_2 &= \frac{\alpha - 1}{g_r} - \frac{\beta - 1}{1 - g_r} & \frac{\partial^2}{\partial g_r^2} \log L_2 &= -\frac{\alpha - 1}{g_r^2} - \frac{\beta - 1}{(1 - g_r)^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial a_r \partial b_r} \log L_2 &= \frac{\partial^2}{\partial a_r \partial g_r} \log L_2 = \frac{\partial^2}{\partial b_r \partial g_r} \log L_2 = 0 \end{aligned}$$

対数尤度関数 $L = L_1 + L_2$ の微分は上に述べた 2 つの微分の和になる。特に、情報行列 \mathfrak{J} は以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} \mathfrak{J}(3n \times 3n) &= - \begin{pmatrix} \partial^2 L / \partial \mathbf{b}^2 & \partial^2 L / \partial \mathbf{a} \partial \mathbf{b} & \partial^2 L / \partial \mathbf{g} \partial \mathbf{b} \\ \partial^2 L / \partial \mathbf{b} \partial \mathbf{a} & \partial^2 L / \partial \mathbf{a}^2 & \partial^2 L / \partial \mathbf{g} \partial \mathbf{a} \\ \partial^2 L / \partial \mathbf{b} \partial \mathbf{g} & \partial^2 L / \partial \mathbf{a} \partial \mathbf{g} & \partial^2 L / \partial \mathbf{g}^2 \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{b}^2 + \partial^2 L_2 / \partial \mathbf{b}^2 & \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{a} \partial \mathbf{b} & \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{g} \partial \mathbf{b} \\ \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{b} \partial \mathbf{a} & \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{a}^2 + \partial^2 L_2 / \partial \mathbf{a}^2 & \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{g} \partial \mathbf{a} \\ \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{b} \partial \mathbf{g} & \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{a} \partial \mathbf{g} & \partial^2 L_1 / \partial \mathbf{g}^2 + \partial^2 L_2 / \partial \mathbf{g}^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

ここで、各小行列は異なる問題では 2 階微分が 0 となるため、対角行列となる。

ニュートン・ラフソン法の反復の式は、

$$\begin{aligned} {}^t \mathbf{d} &= (b_1 \cdots b_n \ a_1 \cdots a_n \ g_1 \cdots g_n), \\ {}^t \mathbf{u} &= (\partial L / b_1 \cdots \partial L / b_n \ \partial L / a_1 \cdots \partial L / a_n \ \partial L / g_1 \cdots \partial L / g_n) \end{aligned}$$

として、次のように与えられる。

$$\mathbf{d}^{(m)} = \mathbf{d}^{(m-1)} + (\mathfrak{J}^{(m-1)})^{-1} \mathbf{u}^{(m-1)}$$

以上で EM アルゴリズムの手続きは終わりである。上の手続きをパラメータが収束するまで繰り返す。収束した値 $\hat{b}_r, \hat{a}_r, \hat{g}_r$ はパラメータの最尤推定値を与えるが、その分散は最終的な情報行列 \mathfrak{J} を用いて、以下のように与えられる。

$$Var[\hat{b}_r] = (\mathfrak{J}^{-1})_{r,r}, \quad Var[\hat{a}_r] = (\mathfrak{J}^{-1})_{n+r, n+r}, \quad Var[\hat{g}_r] = (\mathfrak{J}^{-1})_{2n+r, 2n+r}$$

2) 項目値が既知の場合の能力値の推定

前項では何も分からぬ状態から項目パラメータを推定した。ここでは、この推定された項目値から能力パラメータの値を推定する方法を考える。

今、能力値 θ の受験者 i の結果 \mathbf{u}_i の実現確率を以下と仮定する。

$$P(\mathbf{u}_i | \theta) = \prod_{r=1}^n P_r(\theta)^{u_{ir}} Q_r(\theta)^{1-u_{ir}}$$

ベイズの定理を使うと θ の密度関数は以下となる。

$$P(\theta | \mathbf{u}_i) = \frac{P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta)}{P(\mathbf{u}_i)}, \quad P(\mathbf{u}_i) = \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta) d\theta$$

項目値が既知であるので、分母の積分は定数となる。

尤度関数を以下のように定義すると、

$$\begin{aligned} L &= \prod_{i=1}^N P(\mathbf{u}_i) P(\theta_i | \mathbf{u}_i) = \prod_{i=1}^N P(\mathbf{u}_i | \theta_i) f(\theta_i) \\ &= \prod_{i=1}^N \prod_{r=1}^n P_r(\theta_i)^{u_{ir}} Q_r(\theta_i)^{1-u_{ir}} \times f(\theta_i) \end{aligned}$$

対数尤度関数は以下となる。

$$\log L = \sum_{i=1}^N \sum_{r=1}^n [u_{ir} \log P_r(\theta_i) + (1-u_{ir}) \log Q_r(\theta_i)] + \sum_{i=1}^N \log f(\theta_i)$$

補遺の関係を使うと

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \log L &= D \sum_{r=1}^n \frac{a_r P_r^*(\theta_i) [u_{ir} - P_r(\theta_i)]}{P_r(\theta_i)} - \theta_i \\ &= D \sum_{r=1}^n \frac{a_r [P_r(\theta_i) - g_r] [u_{ir} - P_r(\theta_i)]}{(1-g_r) P_r(\theta_i)} - \theta_i \end{aligned}$$

さらに、

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} \log L &= D^2 \sum_{r=1}^n \frac{a_r^2 P_r^*(\theta_i) Q_r^*(\theta_i)}{P_r(\theta_i)^2} [u_{ir} g_r - P_r(\theta_i)^2] - 1 \\ &= D^2 \sum_{r=1}^n \frac{a_r^2 [P_r(\theta_i) - g_r] Q_r(\theta_i)}{(1-g_r)^2 P_r(\theta_i)^2} [u_{ir} g_r - P_r(\theta_i)^2] - 1 \end{aligned}$$

ここでも他の受験者と独立の仮定より、情報行列の対角成分以外は 0 となる。

$$\mathfrak{I}(N \times N) = - \begin{pmatrix} \partial^2 \log L / \partial \theta_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \partial^2 \log L / \partial \theta_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \partial^2 \log L / \partial \theta_N^2 \end{pmatrix}$$

以上より、ニュートン・ラフソン法を用いて能力パラメータの推定ができる。

3) 能力値が既知の場合の項目値の推定

この場合は以下のベイズの定理を利用する。

$$P(\mathbf{d} | \mathbf{u}_i, \theta_i) = P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}, \theta_i) f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}) / G(\mathbf{u}_i | \theta_i) = \prod_{r=1}^n P_r(\theta_i)^{u_{ir}} Q_r(\theta_i)^{1-u_{ir}} f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}_r) / G(\mathbf{u}_i | \theta_i)$$

ここに、

$$G(\mathbf{u}_i | \theta_i) = \int \cdots \int P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}, \theta_i) f_{\mathbf{d}}(\mathbf{d}) d\mathbf{d}$$

これを用いて、尤度関数を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} L &= \prod_{i=1}^N \prod_{r=1}^n G(\mathbf{u}_i | \theta_i) P(\mathbf{d}_r | \mathbf{u}_i, \theta_i) = \prod_{i=1}^N \prod_{r=1}^n P(\mathbf{u}_i | \mathbf{d}_r, \theta_i) f_d(\mathbf{d}_r) \\ &= \prod_{i=1}^N \prod_{r=1}^n P_r(\theta_i)^{u_{ir}} Q_r(\theta_i)^{1-u_{ir}} f_d(\mathbf{d}_r) \end{aligned}$$

これを用いると対数尤度関数は以下となる。

$$\log L = \log L_1 + \log L_2 = \sum_{i=1}^N \sum_{r=1}^n [u_{ir} \log P_r(\theta_i) + (1-u_{ir}) \log Q_r(\theta_i)] + \sum_{r=1}^n \log f_d(\mathbf{d}_r)$$

補遺で与えた関係式などから、以下を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial b_r} \log L_1 &= -a_r(1-g_r) \sum_{i=1}^N [u_{ir} - P_r(\theta_i)] w_r(\theta_i) \\ \frac{\partial}{\partial a_r} \log L_1 &= (1-g_r) \sum_{i=1}^N [u_{ir} - P_r(\theta_i)] (\theta_i - b_r) w_r(\theta_i) \\ \frac{\partial}{\partial g_r} \log L_1 &= \frac{1}{1-g_r} \sum_{i=1}^N \frac{[u_{ir} - P_r(\theta_i)]}{P_r(\theta_i)} \\ \frac{\partial^2}{\partial b_r^2} \log L_1 &= (1-g_r) \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial b_r} [u_{ir} - P_r(\theta_i)] (\theta_i - b_r) w_r(\theta_i) \\ &= \frac{a_r^2}{(1-g_r)^2} \sum_{i=1}^N \frac{Q_r(\theta_i)}{P_r(\theta_i)^2} (P_r(\theta_i) - g_r) [u_{ir} g_r - P_r(\theta_i)^2] \\ \frac{\partial^2}{\partial a_r^2} \log L_1 &= (1-g_r) \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial a_r} [u_{ir} - P_r(\theta_i)] (\theta_i - b_r) w_r(\theta_i) \\ &= \frac{1}{(1-g_r)^2} \sum_{i=1}^N \frac{Q_r(\theta_i)}{P_r(\theta_i)^2} (\theta_i - b_r)^2 (P_r(\theta_i) - g_r) [u_{ir} g_r - P_r(\theta_i)^2] \\ \frac{\partial^2}{\partial g_r^2} \log L_1 &= \frac{\partial}{\partial g_r} \left[\frac{1}{1-g_r} \sum_{i=1}^N \frac{[u_{ir} - P_r(\theta_i)]}{P_r(\theta_i)} \right] \\ &= \frac{1}{(1-g_r)^2} \sum_{i=1}^N \frac{[u_{ir} - P_r(\theta_i)] P_r(\theta_i) - u_{ir} Q_r(\theta_i)}{P_r(\theta_i)^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial b_r \partial a_r} \log L_1 &= (1 - g_r) \frac{\partial}{\partial b_r} \sum_{i=1}^N [u_{ir} - P_r(\theta_i)] (\theta_i - b_r) w_r(\theta_i) \\
&= -\frac{1}{(1 - g_r)^2} \sum_{i=1}^N (P_r(\theta_i) - g_r) [(1 - g_r)(u_{ir} - P_r(\theta_i)) \\
&\quad + \frac{a_r(\theta_i - b_r) Q_r(\theta_i)}{P_r(\theta_i)} \{(u_{ir} - P_r(\theta_i)) P_r(\theta_i) - u_{ir} (P_r(\theta_i) - g_r)\}] \\
\frac{\partial^2}{\partial a_r \partial g_r} \log L_1 &= \frac{\partial}{\partial a_r} \frac{1}{1 - g_r} \sum_{i=1}^N \frac{[u_{ir} - P_r(\theta_i)]}{P_r(\theta_i)} \\
&= -\frac{1}{(1 - g_r)^2} \sum_{i=1}^N \frac{Q_r(\theta_i) u_{ir}}{P_r(\theta_i)^2} (\theta_i - b_r) [P_r(\theta_i) - g_r] \\
\frac{\partial^2}{\partial b_r \partial g_r} \log L_1 &= \frac{\partial}{\partial b_r} \frac{1}{1 - g_r} \sum_{i=1}^N \frac{[u_{ir} - P_r(\theta_i)]}{P_r(\theta_i)} \\
&= \frac{a_r}{(1 - g_r)^2} \sum_{i=1}^N \frac{Q_r(\theta_i) u_{ir}}{P_r(\theta_i)^2} [P_r(\theta_i) - g_r]
\end{aligned}$$

4) 項目値と能力値の相互変換

項目値と能力値が両方不明の場合、能力値を積分した周辺尤度関数を用いて項目値を推定したが、これを用いて与えた能力値から項目値を推定すると少し違いがある。この違いを修正しておかなければ、項目値と能力値の相互変換は成立しない。そのため、最初の1回目は周辺尤度関数を使って項目値と能力値を求め、後は、能力値から項目値、項目値から能力値と、値が収束するまでこれを繰り返す。この処理によって、相互変換可能な項目値と能力値が得られる。

参考文献

- [1] 共用試験事後評価解析委員会 試験信頼性向上専門部会、項目反応理論についての説明書(学生版) Ver1.1, http://www.med.oita-u.ac.jp/mededuc/cbt/riron_about.pdf (2020.9 参照)
- [2] 豊田秀樹、項目反応理論 [理論編]，朝倉書店, 2005
- [3] 村木英治、項目反応理論、朝倉書店, 2011

補遺 計算に利用する関係

ここでは、2 値項目反応理論の計算に用いられた関係式をまとめておく。

$$\begin{aligned}
 P(\theta | \mathbf{u}_i) &= \frac{P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta)}{P(\mathbf{u}_i)} = \frac{P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta)}{\int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{u}_i | \theta) f(\theta) d\theta}, \quad P(\mathbf{u}_i | \theta) = \prod_{r=1}^n P_r(\theta)^{u_{ir}} Q_r(\theta)^{1-u_{ir}} \\
 w_r(\theta) &= \frac{P_r^*(\theta) Q_r^*(\theta)}{P_r(\theta) Q_r(\theta)} = \frac{P_r(\theta) - g_r}{(1-g_r)^2 P_r(\theta)}, \quad f(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\theta^2/2) \\
 P_r(\theta) &= g_r + \frac{1-g_r}{1+\exp[-Da_r(\theta-b_r)]}, \quad P_r^*(\theta) = \frac{1}{1+\exp[-Da_r(\theta-b_r)]} = \frac{P_r(\theta) - g_r}{1-g_r} \\
 Q_r(\theta) &= 1 - P_r(\theta), \quad Q_r^*(\theta) = \frac{Q_r(\theta)}{1-g_r} = \frac{1-P_r(\theta)}{1-g_r} \\
 \frac{\partial}{\partial a_r} P_r(\theta) &= \frac{D(\theta-b_r)[P_r(\theta) - g_r]Q_r(\theta)}{1-g_r}, \quad \frac{\partial}{\partial b_r} P_r(\theta) = -\frac{Da_r[P_r(\theta) - g_r]Q_r(\theta)}{1-g_r} \\
 \frac{\partial}{\partial g_r} P_r(\theta) &= Q_r^*(\theta) = \frac{Q_r(\theta)}{1-g_r} \\
 \frac{\partial}{\partial a_r} w_r(\theta) &= \frac{D(\theta-b_r)g_rQ_r(\theta)}{(1-g_r)P_r(\theta)} w_r(\theta), \quad \frac{\partial}{\partial b_r} w_r(\theta) = -\frac{Da_r g_r Q_r(\theta)}{(1-g_r)P_r(\theta)} w_r(\theta) \\
 \frac{\partial}{\partial g_r} w_r(\theta) &= -\frac{Q_r(\theta) - P_r(\theta)}{P_r^*(\theta)} w_r(\theta)^2 = -\frac{(1-g_r)[Q_r(\theta) - P_r(\theta)]}{P_r(\theta) - g_r} w_r(\theta)^2 \\
 \frac{\partial}{\partial \theta_i} P_r(\theta_i) &= (1-g_r)Da_r P_r^*(\theta_i) Q_r^*(\theta_i) = \frac{Da_r[P_r(\theta_i) - g_r]Q_r(\theta_i)}{1-g_r} \\
 \frac{\partial}{\partial \theta_i} Q_r(\theta_i) &= -(1-g_r)Da_r P_r^*(\theta_i) Q_r^*(\theta_i) = -\frac{Da_r[P_r(\theta_i) - g_r]Q_r(\theta_i)}{1-g_r}
 \end{aligned}$$

3.3. 多変量分散分析

多変量分散分析は通常の分散分析の 1 変量から多変量への拡張である。1 元配置の場合、通常の分散分析は水準で分けられたデータの水準平均間の分散と水準内誤差の分散の合計を比較するが、多変量分散分析は多変量であるため、それらの共分散を比較する。比較には共分散行列から求められる Wilks の Λ (ラムダ) と呼ばれる統計量を用いる。但し、後に述べるように、検定には近似的に求められる χ^2 統計量や F 統計量を用いることが多い。また、この方法では水準間の差は確かめられるが、どの変量の影響が強いか分からぬため、変量の寄与に関する検定も行う。水準間または誤差の共分散行列が得られた場合、それが何元配置の水準であるかに関わらず、基本的に手順は同じである。

このプログラムには、1 元配置多変量分散分析、繰り返しのない 2 元配置多変量分散分析、繰り返しのある 2 元配置多変量分散分析が含まれるが、繰り返しのない 2 元配置多変量分散分析は、対応のある 1 元配置多変量分散分析として利用することもできる。このプログラムでは後者を意識して実行画面を作っている。ここで利用した理論とデータは、参考文献[1]に従っている。表現を簡単にするために、以後分かり易い場合は「多変量」の文字を除くことがある。また、以後は変量の代わりに変数を使うことが多い。

3.3.1 プログラムの利用法

メニュー「分析－多変量解析他－実験計画手法－多変量分散分析」を選択すると図 1 のような分析実行画面が表示される。

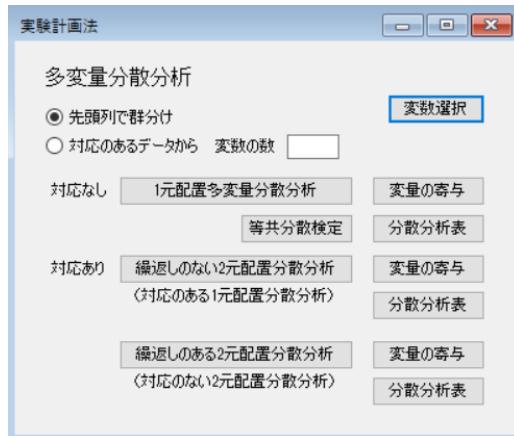


図 1 分析実行画面

これは、対応のない 1 元配置、繰り返しのない 2 元配置（対応のある 1 元配置）、繰り返しのある 2 元配置に分かれている。使い方は 1 変量の実験計画法とほとんど同じであるが、比較する変数の数が複数になる。データには比較のために、参考文献 [1] で与えられる例のデータを用いている。

1 元配置の問題では図 2 のようなデータを用いる。水準が分類の変数、 $x1, x2$ が比較する変数である。ここでは、4 つの水準で 2 つの変数を分類したことになっている。

図 2 1元配置のデータ（多変量分散分析 0.txt 1 頁目）

変数選択すべてを選び、「先頭列で群分け」ラジオボタンを選んで、「1元配置多変量分散分析」ボタンをクリックすると、図 3 のような結果が表示される。

図 3 1元配置分散分析結果

ここでは、右端に与えられた Wills Λ の値から 2 つの近似で計算された結果が表示されている。一般に Rao 近似の結果の方が良いと言われている。また、図 4 に単独の変数について通常の 1 元配置分散分析を行った結果を示すが、多変量の方が確率の小さな値が得られている。即ち、多変量分散分析はより有意差の出やすい検定になっている。

図 4 単独の変数での 1元配置分散分析結果（左 x1 のみ、右 x2 のみ）

図 3 の結果への各変数の寄与は、「変量の寄与」ボタンで得られる。結果を図 5 に示す。

図 5 変量の寄与結果

これはすべての変数を使った場合とその中の 1 つの変数を除いた場合の結果の比較で、その変数に有意な影響力があるかどうかを調べている。これによると、2つの変数とも有意な影響力を持っているといえる。

分析実行画面の 1 元配置のところにある「分散分析表」ボタンをクリックすると、これらの検定に使われた分散分析表が図 6 のように表される。結果は、水準間と誤差に分かれる。

		積和行列	自由度
▶	水準間	x1 x2	3
x1		1221.6250 272.9375	
x2		272.9375 108.5938	
誤差		x1 x2	28
x1		1623.2500 642.8750	
x2		642.8750 322.8750	
計		x1 x2	31
x1		2844.8750 915.8125	
x2		915.8125 431.4688	

図 6 1 元配置分散分析の分散分析表結果

1 元配置の場合だけであるが、1 変数の場合の等分散の検定の拡張版である等共分散の検定も加えてある。図 7 にその結果を示す。

Bartlett 等共分散検定		
	χ ² 値	自由度
▶	16.9262	9

図 7 等共分散検定結果

これには等共分散でない場合の対策がないため、1 元配置多変量分散分析の検定の正当性を保証する 1 つの手法と解釈してもらいたい。

次に対応のある場合の、繰り返しのない 2 元配置分散分析（対応のある 1 元配置分散分析）について説明する。図 8 にそのデータを示す。

データ編集 多変量分散分析 0.txt										
	x1	x2	x3	x1	x2	x3	x1	x2	x3	
▶ 1	18	8	3	5	8	1.2	17	10	1.4	
2	19	8	8.5	6	12	1	18	12	2.2	
3	15	7	6	7	12	0.2	17	8	3.2	
4	15	9	5.2	4	4	0.2	16	6	3.8	

図 8 繰返しのない 2 元配置のデータ（多変量分散分析 0.txt 2 頁目）

これは対応する変数データを横に並べた形式である。通常は 1 変数なので、分かり易いがこれは 3 つの変数が 3 組並んでるので、少し見づらい。

「対応のあるデータから」ラジオボタンを選択し、右の「変数の数」テキストボックスにこの場合の「3」を入力し、「繰返しのない 2 元配置分散分析」ボタンをクリックすると、図 9 の結果を得る。

多変量分散分析結果 (列:水準, 行:ブロック)				
	自由度	検定値	確率	WilksΛ
▶ Bartlett 近似	χ ² 検定			
水準間	6	23.4760	0.0007	0.0091
ブロック間	9	8.9570	0.4413	0.1962
Rao 近似	F 検定			
水準間	[6,8]	12.6139	0.0011	
ブロック間	[9,9]	1.0463	0.4737	

図 9 繰返しのない 2 元配置分散分析結果

結果は、1 変数の場合と同様に水準間とブロック間で与えられる。対応のある検定の場合、ブロックはレコードとみなされ、水準間の検定が重要になる。ここでは、水準間とブロック間の Wilks Λ が 2 つ表示されている。水準間では 2 つの近似とも有意な差が見られるが、ブ

ロック間には差が見られない。

水準間やブロック間の差への各変数の寄与は図 10 で与えられる。これはすべての変数を使った場合とその中の 1 つの変数を除いた場合の結果の比較で、その変数に有意な影響力があるかどうかを調べている。

変数の寄与		自由度	F検定値	確率
▶ 水準間				
x1		[2,4]	37.0120	0.0026
x2		[2,4]	0.1507	0.8647
x3		[2,4]	3.0380	0.1576
▶ ブロック間				
x1		[3,4]	0.6863	0.6057
x2		[3,4]	0.7319	0.5847
x3		[3,4]	1.0934	0.4483

図 10 変量の寄与結果

これによると、水準間の変数 x1 のみが全体の中で有意な影響力を持っているといえる。そこで、比較的影響の強い変数 x1, x3 を単独で調べてみる。図 11 の結果を見ると、2 つの変数とも単独で有意な影響を持っていることが分かる。そのため、多変量の結果は、相対的に比べた影響の強さを表しているものと解釈される。

多変量分散分析結果 (列:水準, 行:ブロック)				
	自由度	検定値	確率	Wilks λ
▶ Bartlett近似	χ^2 検定			
水準間	2	22.1446	0.0000	0.0250
ブロック間	3	5.2300	0.1557	0.4473
Rao近似	F検定			
水準間	[2,6]	117.2264	0.0000	
ブロック間	[3,6]	2.4717	0.1592	

多変量分散分析結果 (列:水準, 行:ブロック)				
	自由度	検定値	確率	Wilks λ
▶ Bartlett近似	χ^2 検定			
水準間	2	9.4599	0.0088	0.2067
ブロック間	3	2.5307	0.4698	0.6775
Rao近似	F検定			
水準間	[2,6]	11.5161	0.0088	
ブロック間	[3,6]	0.9520	0.4731	

図 11 変数 1 (左) と変数 3 (右) の単独の検定結果

これらの検定に利用された分散分析表は「分散分析表」ボタンをクリックすると図 12 のように表される。結果は水準間、ブロック間、誤差に分かれる。

繰返しのない2元配置分散分析表				
	積和行列		自由度	
▶ 水準間				
x1	345.1667	-14.6667	105.0333	2
x2	-14.6667	2.6667	-10.7333	
x3	105.0333	-10.7333	51.2017	
ブロック間	x1	x2	x3	3
x1	10.9167	17.3333	2.2083	
x2	17.3333	28.6667	5.0667	
x3	2.2083	5.0667	6.3492	
誤差	x1	x2	x3	6
x1	8.8333	2.6667	-0.6333	
x2	2.6667	37.3333	-11.0667	
x3	-0.6333	-11.0667	13.3383	
計	x1	x2	x3	11
x1	364.9167	5.3333	106.6083	
x2	5.3333	68.6667	-16.7333	
x3	106.6083	-16.7333	70.8892	

図 12 繰返しのない 2 元配置分散分析の分散分析表結果

次に繰返しのある 2 元配置多変量分散分析について見ておく。図 13 にデータを示す。



	水準1	水準2	x1	x2	x3	x4
5		1	1	35.8	32.5	14.4
6		1	2	36.1	33	14.4
7		1	1	35.3	32.5	14.1
8		1	2	36.7	33.3	14.7
9		1	1	36.8	33.5	14.2
10		1	2	36.1	33.3	14.5
11		2	1	37	33.2	14.7
12		2	2	35.7	32.8	14.5
13		2	1	36.4	33.2	14.5
14		2	2	36.3	33.3	14.7

図 13 繰返しのある 2 元配置のデータ（多変量分散分析 0.txt 3 頁目）

「先頭列で群分け」ラジオボタンに戻し、すべての変数を選択する。「繰返しのある 2 元配置分散分析」ボタンをクリックすると図 14 の結果を得る。



	自由度	検定値	確率	WilksΛ
▶ Bartlett近似				
水準1水準	8	66.0275	0.0000	0.0532
水準2水準	4	2.5268	0.6398	0.8915
交互作用	8	10.6140	0.2245	0.6239
Rao近似				
水準1水準	[8,42]	17.5214	0.0000	
水準2水準	[4,21]	0.6390	0.6405	
交互作用	[8,42]	1.3965	0.2262	

図 14 繰返しのある 2 元配置分散分析結果

2 元配置の問題であるので、2 つの水準間の比較と交互作用間の比較がある。ここでは水準 1 だけに差が見られる。変数の影響を調べるために、「変量の寄与」ボタンをクリックすると図 15 の結果を得る。



	自由度	F検定値	確率
▶ 水準1水準			
x1	[2:21]	4.7882	0.0194
x2	[2:21]	10.3453	0.0007
x3	[2:21]	7.1839	0.0042
x4	[2:21]	13.1758	0.0002
水準2水準			
x1	[1:21]	0.9631	0.3376
x2	[1:21]	2.4617	0.1316
x3	[1:21]	0.5313	0.4741
x4	[1:21]	1.6567	0.2121
交互作用			
x1	[2:21]	2.1432	0.1422
x2	[2:21]	1.0710	0.3607
x3	[2:21]	0.9141	0.4162
x4	[2:21]	0.8029	0.4613

図 15 変量の寄与結果

水準 1 では各変数が有意な影響を示しているが、水準 2 や交互作用では有意な影響はない。最後に、これらの分析に使った分散分析表は「分散分析表」ボタンをクリックすると得られるが、図が大きくなるため省略する。結果は、水準 1、水準 2、交互作用、誤差に分かれる。

33.2 多変量分散分析の理論

多変量分散分析は、基本的に変数についての添え字が増える（ベクトルになる）だけなので、大きな違いは共分散を扱う部分である。検定には積和行列を利用した Wilks の Λ が使われるが、ここでは、この Λ を用いた Bartlett の近似や Rao の近似という検定方法を紹介する^[1]。

1) 1 元配置多変量分散分析

データを以下のように与える。

$$x_{jr\lambda} \quad (j=1, \dots, p; r=1, \dots, a; \lambda=1, \dots, n_r)$$

ここで、 j は変数、 r は水準、 λ は水準別の個体とする。

モデルとして以下の形を考え、水準別に α_{jr} の違いを比べる。

$$x_{jr\lambda} = \mu_j + \alpha_{jr} + \varepsilon_{jr\lambda}$$

$$\sum_{r=1}^a n_r \alpha_{jr} = 0$$

まず、変数についての種々の平均を以下のように定義する。

$$\bar{x}_{jr\cdot} = \frac{1}{n_r} \sum_{\lambda=1}^{n_r} x_{jr\lambda}, \quad \bar{x}_{j\cdot\cdot} = \frac{1}{n} \sum_{r=1}^a n_r \bar{x}_{jr\cdot} = \frac{1}{n} \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^{n_r} x_{jr\lambda} \quad \text{ここに、 } n = \sum_{r=1}^a n_r$$

これらを用いた平方和積和行列（以下、略して積和行列または SSP 行列と呼ぶ）を以下のように定義する。

総積和行列（総 SSP 行列）

$$S_{jk}^T = \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^{n_r} (x_{jr\lambda} - \bar{x}_{j\cdot\cdot})(x_{kr\lambda} - \bar{x}_{k\cdot\cdot})$$

水準間積和行列（水準間 SSP 行列）

$$S_{jk}^a = \sum_{r=1}^a n_r (x_{jr\cdot} - \bar{x}_{j\cdot\cdot})(x_{kr\cdot} - \bar{x}_{k\cdot\cdot})$$

誤差積和行列（誤差 SSP 行列）

$$S_{jk}^e = \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^{n_r} (x_{jr\lambda} - \bar{x}_{j\cdot\cdot})(x_{kr\lambda} - \bar{x}_{k\cdot\cdot})$$

積和行列間の関係は以下のように与えられる。

$$S_{jk}^T = S_{jk}^a + S_{jk}^e$$

これらの自由度も以下のように分解できる。

$$n-1 = (a-1) + (n-a) = \phi_a + \phi_e$$

ここに、 $\phi_a = a-1$ は水準間の自由度、 $\phi_e = n-a$ は誤差の自由度である。

これらの積和行列を使って、検定の基本となる Wilks の Λ 統計量を計算する。

$$\Lambda = |\mathbf{S}^e| / |\mathbf{S}^a + \mathbf{S}^e| = |\mathbf{S}^e| / |\mathbf{S}^T| \sim U_{p, \phi_a, \phi_e}$$

この Λ の従う分布は U 分布と呼ばれ、3つの自由度を持つ。1 つは p で変数の数（共分

散行列の次数)、もう 1 つは ϕ_a で水準間の自由度、最後は ϕ_e で誤差の自由度である。U 分布はある変換により χ^2 分布や F 分布に近似できることが知られているが、我々は検定に以下の統計量を利用している。

Bartlett(1947)の近似

$$\Lambda \sim U_{p,h,e} \text{ のとき, } \chi_0^2 = -\{e - (p-h+1)/2\} \log_e \Lambda \sim \chi_{ph}^2$$

Rao(1951)の近似

$$\Lambda \sim U_{p,h,e} \text{ のとき, } F_0 = \frac{bc-d}{ph} \frac{1-\Lambda^{1/c}}{\Lambda^{1/c}} \sim F_{ph, bc-d}$$

ここに、

$$b = e - (p-h+1)/2, \quad d = ph/2 - 1$$

$$c = \begin{cases} \sqrt{(p^2h^2-4)/(p^2+h^2-5)} & \text{for } p^2+h^2 \neq 5 \\ 1 & \text{for } p^2+h^2 = 5 \end{cases}$$

$bc-d$ が整数でないときは、自由度の部分についてのみ小数部を切り捨てている。

さて、上の方法では変数全体としての検定は行えるが、どの変数が検定結果に影響を与えるか分からぬ。そのため変数の重要性について以下の検定を行う。

積和行列の (l,l) 成分を取り除いた行列を右肩に (l) を付けて以下のように表す。

$$S_{jk}^{T(l)} = S_{jk}^T \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{a(l)} = S_{jk}^a \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{e(l)} = S_{jk}^e \Big|_{j,k \neq l}$$

この行列を用いて作った $\Lambda^{(l)}$ は以下である。

$$\Lambda^{(l)} = |\mathbf{S}^{e(l)}| / |\mathbf{S}^{T(l)}|$$

変数の重要性の検定には、この $\Lambda^{(l)}$ を用いて以下の関係を利用する。

$$F^{(l)} = \frac{n-p-a+1}{a-1} \frac{\Lambda^{(l)} - \Lambda}{\Lambda} \sim F_{a-1, n-p-a+1}$$

最後に、等分散の検定を拡張した等共分散の検定について述べておく。帰無仮説と対立仮説は以下である。

帰無仮説：すべての水準の分散共分散は等しい。

対立仮説：分散共分散の異なる水準がある。

検定は以下の統計量を利用して行う。

$$\chi^2 = (1-c) \left[(n-a) \log |\mathbf{S}| - \sum_{r=1}^a (n_r - 1) |\mathbf{S}_r| \right] \sim \chi_{p(p+1)(a-1)/2}^2$$

ここに、

$$c = \frac{2p^2 + 3p - 1}{6(p+1)(a-1)} \left[\sum_{r=1}^a \frac{1}{n_r - 1} - \frac{1}{n-a} \right]$$

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{S}_r)_{jk} &= \frac{1}{n_r - 1} \sum_{\lambda=1}^{n_r} (x_{jr\lambda} - \bar{x}_{j\cdot\lambda})(x_{kr\lambda} - \bar{x}_{k\cdot\lambda}) \\
 (\mathbf{S})_{jk} &= \frac{1}{n-a} \sum_{r=1}^a (n_r - 1) (\mathbf{S}_r)_{jk} \\
 &= \frac{1}{n_r - 1} \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^{n_r} (x_{jr\lambda} - \bar{x}_{j\cdot\lambda})(x_{kr\lambda} - \bar{x}_{k\cdot\lambda})
 \end{aligned}$$

ここで 1 変数の Bartlett の等分散性の検定との関係を見ておく。

$p=1$ とおくと、

$$c = \frac{1}{3(a-1)} \left[\sum_{r=1}^a \frac{1}{n_r - 1} - \frac{1}{n-a} \right]$$

一方、水準間の等分散の検定である Bartlett の検定は、以下の性質を利用していた^[2]。

$$\chi^2 = \frac{1}{C} \left[(n-a) \log V_E - \sum_{r=1}^a (n_r - 1) \log V_r \right] \sim \chi^2_{a-1} \text{ 分布}$$

ここに、 V_E ， V_r ， C は n を全データ数として以下のように与えられる。

$$\begin{aligned}
 V_E &= \frac{1}{n-a} \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^{n_r} (x_{r\lambda} - \bar{x}_r)^2, \quad V_r = \frac{1}{n_r - 1} \sum_{\lambda=1}^{n_r} (x_{r\lambda} - \bar{x}_r)^2, \\
 C &= 1 + \frac{1}{3(a-1)} \left[\sum_{r=1}^a \frac{1}{n_r - 1} - \frac{1}{n-a} \right]
 \end{aligned}$$

今回の検定の式と比較すると、以下の関係を得る。

$$C = 1 + c$$

ここで $c \ll 1$ とすると $1/C \approx 1 - c$ となり、近似的に一致する。より正確な方に統一した方がよいが、現段階ではどちらに統一すべきか不明である。

2) 繰返しのない 2 元配置多変量分散分析（対応のある 1 元配置多変量分散分析）

手法は 1 元配置の場合とほぼ同じであるので、以後はまとめた形式で紹介する。

データ

$$x_{jr\lambda} \quad (j=1, \dots, p; r=1, \dots, a; \lambda=1, \dots, n)$$

j : 変数, r : 水準, λ : ブロック (対応のある場合は個体とみなす)

モデル

$$x_{jr\lambda} = \mu_j + \alpha_{jr} + \beta_{j\lambda} + \varepsilon_{jr\lambda}$$

$$\sum_{r=1}^a \alpha_{jr} = 0, \quad \sum_{\lambda=1}^n \beta_{j\lambda} = 0$$

変数平均

$$\bar{x}_{jr\cdot} = \frac{1}{n} \sum_{\lambda=1}^n x_{jr\lambda}, \quad \bar{x}_{j\cdot\lambda} = \frac{1}{a} \sum_{r=1}^a x_{jr\lambda}, \quad \bar{x}_{j\cdot\cdot} = \frac{1}{a} \sum_{r=1}^a \bar{x}_{jr\cdot} = \frac{1}{na} \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^n x_{jr\lambda}$$

総積和行列（総 SSP 行列）

$$S_{jk}^T = \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^n (x_{jr\lambda} - \bar{x}_{j..})(x_{kr\lambda} - \bar{x}_{k..})$$

水準間積和行列（水準間 SSP 行列）

$$S_{jk}^a = n \sum_{r=1}^a (x_{jr..} - \bar{x}_{j..})(x_{kr..} - \bar{x}_{k..})$$

ブロック間積和行列（ブロック間 SSP 行列）

$$S_{jk}^r = a \sum_{\lambda=1}^n (x_{j..\lambda} - \bar{x}_{j..})(x_{k..\lambda} - \bar{x}_{k..})$$

誤差積和行列（誤差 SSP 行列）

$$S_{jk}^e = \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^n (x_{jr\lambda} - \bar{x}_{jr..} - \bar{x}_{j..\lambda} + \bar{x}_{j..})(x_{kr\lambda} - \bar{x}_{kr..} - \bar{x}_{k..\lambda} + \bar{x}_{k..})$$

積和行列の関係

$$S_{jk}^T = S_{jk}^a + S_{jk}^r + S_{jk}^e$$

自由度の分解

$$na - 1 = (a - 1) + (n - 1) + (a - 1)(n - 1) = \phi_a + \phi_r + \phi_e$$

Willks の Λ

$$\Lambda_a = |\mathbf{S}^e| / |\mathbf{S}^a + \mathbf{S}^e| \sim U_{p, \phi_a, \phi_e}$$

$$\Lambda_r = |\mathbf{S}^e| / |\mathbf{S}^r + \mathbf{S}^e| \sim U_{p, \phi_r, \phi_e}$$

ここに、

$$\phi_a = a - 1, \quad \phi_r = n - 1, \quad \phi_e = (a - 1)(n - 1),$$

以後の近似計算は 1 元配置の場合に従う。

変数の重要性についての検定

積和行列の (l, l) 成分を取り除いた行列を右肩に (l) を付けて以下のように表す。

$$S_{jk}^{T(l)} = S_{jk}^T \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{a(l)} = S_{jk}^a \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{r(l)} = S_{jk}^r \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{e(l)} = S_{jk}^e \Big|_{j,k \neq l}$$

これらの行列を用いて作った $\Lambda_a^{(l)}$ と $\Lambda_r^{(l)}$ は以下である。

$$\Lambda_a^{(l)} = |\mathbf{S}^{e(l)}| / |\mathbf{S}^{a(l)} + \mathbf{S}^{e(l)}|$$

$$\Lambda_r^{(l)} = |\mathbf{S}^{e(l)}| / |\mathbf{S}^{r(l)} + \mathbf{S}^{e(l)}|$$

変数の重要性の検定には、この $\Lambda_a^{(l)}$ と $\Lambda_r^{(l)}$ を用いて以下の関係を利用する。

$$F_a^{(l)} = \frac{\phi_e - (p - 1)}{\phi_a} \frac{\Lambda_a^{(l)} - \Lambda_a}{\Lambda_a} \sim F_{\phi_a, \phi_e - (p - 1)}$$

$$F_r^{(l)} = \frac{\phi_e - (p - 1)}{\phi_r} \frac{\Lambda_r^{(l)} - \Lambda_r}{\Lambda_r} \sim F_{\phi_r, \phi_e - (p - 1)}$$

3) 繰返しのある多変量 2 元配置分散分析

データ

$$x_{jrs\lambda} \quad (j=1, \dots, p; r=1, \dots, a; s=1, \dots, b; \lambda=1, \dots, n_{rs})$$

モデル

$$\begin{aligned} x_{jrs\lambda} &= \mu_j + \alpha_{jr} + \beta_{js} + \gamma_{jrs} + \varepsilon_{jrs\lambda} \\ &= \mu_j + \alpha_{jr} + \beta_{js} + (\alpha\beta)_{jrs} + \varepsilon_{jrs\lambda} \\ \sum_{r=1}^a \alpha_{jr} &= 0, \quad \sum_{s=1}^b \beta_{js} = 0, \quad \sum_{r=1}^a \gamma_{jrs} = \sum_{s=1}^b \gamma_{jrs} = 0 \end{aligned}$$

変数平均

$$\begin{aligned} n_{r\cdot} &= \sum_{s=1}^b n_{rs}, \quad n_{\cdot s} = \sum_{r=1}^a n_{rs}, \quad n = n_{\cdot\cdot} = \sum_{r=1}^a \sum_{s=1}^b n_{rs} \\ \bar{x}_{jrs\cdot} &= \frac{1}{n_{rs}} \sum_{\lambda=1}^{n_{rs}} x_{jrs\lambda}, \quad \bar{x}_{j\cdot\cdot} = \frac{1}{n} \sum_{r=1}^a \sum_{s=1}^b \sum_{\lambda=1}^{n_{rs}} x_{jrs\lambda} \\ \bar{x}_{j\cdot\cdot} &= \frac{1}{n_{r\cdot}} \sum_{s=1}^b n_{rs} \bar{x}_{jrs\cdot} = \frac{1}{n_{r\cdot}} \sum_{s=1}^b \sum_{\lambda=1}^{n_{rs}} x_{jrs\lambda}, \quad \bar{x}_{\cdot s\cdot} = \frac{1}{n_{\cdot s}} \sum_{r=1}^a n_{rs} \bar{x}_{jrs\cdot} = \frac{1}{n_{\cdot s}} \sum_{r=1}^a \sum_{\lambda=1}^{n_{rs}} x_{jrs\lambda} \end{aligned}$$

積和行列の関係

$$\begin{aligned} S_{jk}^T &= \sum_{r=1}^a \sum_{s=1}^b \sum_{\lambda=1}^{n_{rs}} (x_{jrs\lambda} - \bar{x}_{j\cdot\cdot})(x_{krs\lambda} - \bar{x}_{k\cdot\cdot}) \\ &= \sum_{r=1}^a n_{r\cdot} (\bar{x}_{j\cdot\cdot} - \bar{x}_{j\cdot\cdot})(\bar{x}_{k\cdot\cdot} - \bar{x}_{k\cdot\cdot}) + \sum_{s=1}^b n_{\cdot s} (\bar{x}_{j\cdot\cdot} - \bar{x}_{j\cdot\cdot})(\bar{x}_{k\cdot\cdot} - \bar{x}_{k\cdot\cdot}) \\ &\quad + \sum_{r=1}^a \sum_{s=1}^b n_{rs} (\bar{x}_{jrs\cdot} - \bar{x}_{j\cdot\cdot} - \bar{x}_{s\cdot\cdot} + \bar{x}_{j\cdot\cdot})(\bar{x}_{krs\cdot} - \bar{x}_{k\cdot\cdot} - \bar{x}_{s\cdot\cdot} + \bar{x}_{k\cdot\cdot}) \\ &\quad + \sum_{r=1}^a \sum_{s=1}^b \sum_{\lambda=1}^{n_{rs}} (x_{jrs\lambda} - \bar{x}_{jrs\cdot})(x_{krs\lambda} - \bar{x}_{krs\cdot}) \\ &= S_{jk}^a + S_{jk}^b + S_{jk}^{ab} + S_{jk}^e \end{aligned}$$

自由度の分解

$$n-1 = (a-1) + (b-1) + (a-1)(b-1) + (n-ab) = \phi_a + \phi_b + \phi_{ab} + \phi_e$$

Willks の Λ

$$\begin{aligned} \text{A 間} \quad \Lambda_a &= |\mathbf{S}^a| / |\mathbf{S}^a + \mathbf{S}^e| \sim U_{p, \phi_a, \phi_e} \\ \text{B 間} \quad \Lambda_b &= |\mathbf{S}^b| / |\mathbf{S}^b + \mathbf{S}^e| \sim U_{p, \phi_b, \phi_e} \\ \text{AB 間} \quad \Lambda_{ab} &= |\mathbf{S}^{ab}| / |\mathbf{S}^{ab} + \mathbf{S}^e| \sim U_{p, \phi_{ab}, \phi_e} \end{aligned}$$

ここに、

$$\phi_a = a-1, \quad \phi_b = b-1, \quad \phi_{ab} = (a-1)(b-1), \quad \phi_e = n-ab,$$

以後の近似計算は 1 元配置の場合に従う。

変数の重要性についての検定

積和行列の (l, l) 成分を取り除いた行列を右肩に (l) を付けて以下のように表す。

$$S_{jk}^{T(l)} = S_{jk}^T \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{a(l)} = S_{jk}^a \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{b(l)} = S_{jk}^b \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{ab(l)} = S_{jk}^{ab} \Big|_{j,k \neq l}, \quad S_{jk}^{e(l)} = S_{jk}^e \Big|_{j,k \neq l}$$

これらの行列を用いて作った $\Lambda_a^{(l)}$, $\Lambda_b^{(l)}$, $\Lambda_{ab}^{(l)}$ は以下である。

$$\Lambda_a^{(l)} = |\mathbf{S}^{e(l)}| / |\mathbf{S}^{a(l)} + \mathbf{S}^{e(l)}|$$

$$\Lambda_b^{(l)} = |\mathbf{S}^{e(l)}| / |\mathbf{S}^{b(l)} + \mathbf{S}^{e(l)}|$$

$$\Lambda_{ab}^{(l)} = |\mathbf{S}^{e(l)}| / |\mathbf{S}^{ab(l)} + \mathbf{S}^{e(l)}|$$

変数の重要性の検定には、この $\Lambda_a^{(l)}$, $\Lambda_b^{(l)}$, $\Lambda_{ab}^{(l)}$ を用いて以下の関係を利用する。

$$F_a^{(l)} = \frac{\phi_e - (p-1)}{\phi_a} \frac{\Lambda_a^{(l)} - \Lambda_a}{\Lambda_a} \sim F_{\phi_a, \phi_e - (p-1)}$$

$$F_b^{(l)} = \frac{\phi_e - (p-1)}{\phi_b} \frac{\Lambda_b^{(l)} - \Lambda_b}{\Lambda_b} \sim F_{\phi_b, \phi_e - (p-1)}$$

$$F_{ab}^{(l)} = \frac{\phi_e - (p-1)}{\phi_{ab}} \frac{\Lambda_{ab}^{(l)} - \Lambda_{ab}}{\Lambda_{ab}} \sim F_{\phi_{ab}, \phi_e - (p-1)}$$

参考文献

- [1] 田中豊, 脇本和昌, 垂水共之, パソコン統計解析ハンドブック V 多変量分散分析・線形モデル編, 共立出版, 1989.
- [2] 福井正康, 総合マニュアル 03_1【多変量解析 1】

https://www.heisei-u.ac.jp/ba/fukui/gmanual/gmanual03_1.pdf

3.4. 周波数時系列推定

これまでの C.Analysis における時系列分析はデータの変動に合わせて、傾向変動、振幅変動、周期変動を求めることが目標であり、時系列データの具体的な数式の表現はあまり気にしていなかった。今回の周波数時系列推定は時系列分析の手法を使って、時系列データの数式化を行おうとする分析である。

分解については、傾向変動+振幅変動×周期変動、と仮定するのは同じであるが、傾向変動では、移動平均や局所重回帰分析などの数式で表せないものや複雑なものは省いて、単純に、定数、1次式近似、2次式近似のみにしている。振幅変動についても、1次近似、2次近似、指数近似だけである。また、周期変動は複数の振動数への分解は含まず、単純に1つの振動数の $A \cos(\omega t + \phi)$ のモデルに限定している。理論の詳細は多変量解析の時系列分析のところで述べているのでここでは省略する。

3.4.1 プログラムの利用法

メニュー [分析－多変量解析－時系列手法－周波数時系列推定] または、メニュー [分析－科学・工学他－周波数時系列推定] を選択すると、図 1 のような分析実行画面が表示される。

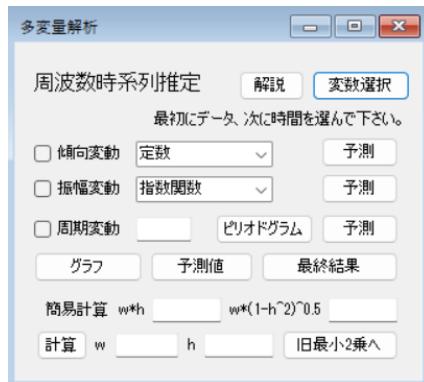


図 1 分析実行画面

データとしては、等間隔の時間を含む図 2 のような形式のデータを想定している。

データ編集 周波数時系列推定 1.txt		
	Time	w20Hz_d0.01
1	1.05	-13.12404385
2	1.051	-10.7618173
3	1.052	-8.234391988
4	1.053	-5.585441224
5	1.054	-2.855268555
6	1.055	-0.0870253
7	1.056	2.675646526
8	1.057	5.389301969
9	1.058	8.011376062
10	1.059	10.5008512

図 2 データ (周波数時系列推定 1.txt)

データの形を見る場合、データの変数と時間の変数の順番で変数選択し、傾向変動などの

チェックボックスにチェックを入れずそのまま「グラフ」のボタンをクリックする。結果は図 3 のように表される。

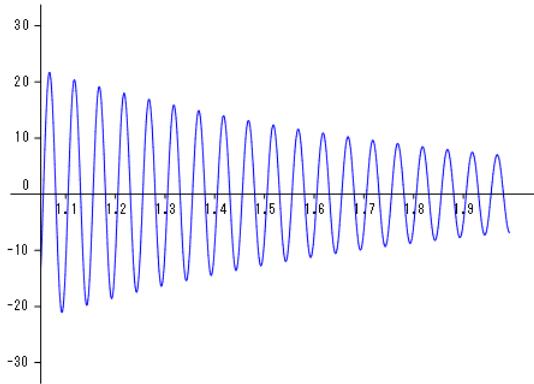


図 3 データの形状

デフォルトではデータ 100 個につき 1 つの割合で、切りのいい値で x 軸に目盛りが付いているが、変更する場合は、グラフ出力のメニュー [設定一軸設定] の中の x 軸の「目盛間隔」を変更し「再描画」する。

実際の分析作業はまず傾向変動から推定する。もちろん、傾向変動を考えない場合は、以下の作業を飛ばしてもよい。まず「傾向変動」チェックボックスにチェックを入れ、予測式として、コンボボックスから、定数、1 次関数、2 次関数のうちの 1 つを選択し、「予測」ボタンをクリックする。例えば 1 次関数を選択した結果を図 4 に示す。

傾...		推定値
▶	b0	1.5306
	b1	-0.9133
	書式	b0+b1*t

図 4 傾向変動結果

傾向変動を指定しない場合、傾向変動は 0 とする。

傾向変動のチェックはそのままにして、次に振幅変動に進む。振幅変動を推定する場合は、「振幅変動」チェックボックスにチェックを入れるが、傾向変動がある場合は、データ値から傾向変動を引いた値を新たにデータとしている。傾向変動には、1 次関数、2 次関数、指數関数があるが、ここでは「指數関数」を選択することにする。「予測」ボタンをクリックした結果は図 5 のようになる。

振...		推定値
▶	b0	38.0187
	b1	-1.1965
	書式	b0*exp(b1*t)

図 5 振幅変動結果

ここで、元々の時系列分析では、振幅変動を振幅の平均値で割る処理をしているが、ここではそのままの値を使うことにしている。振幅変動を指定しない場合、振幅変動は 1 とする。

最後に周期変動の設定であるが、データは、元のデータから傾向変動を引き、それを振幅変動で割ったものとする。周期変動は以下の形に限定している。

$$A \cos(\omega t + \phi)$$

ここで、 ω は角振動数（周期を T とすると $\omega = 2\pi/T$ ）、 ϕ は初期位相である。これまでの時系列分析では、複数の周期の三角関数の和として周期変動を扱ってきたが、ここでは式として与えることが目的なので、1つの周期に固定している。その周期を表す n ($T = n\Delta T$ の n 、 ΔT はデータの時間間隔) は「ピリオドグラム」ボタンをクリックすることによって図 6 のように求められる。

ピリオドグラムデータ		
	周期(時点)	スペクトル
14	67.429	0.658
15	62.933	1.473
16	59.000	-0.576
17	55.529	7.310
18	52.444	141.967
19	49.684	233.994
20	47.200	96.066
21	44.952	-2.844
22	42.909	2.184
23	41.043	0.614

図 6 ピリオドグラム結果

ここで、「スペクトル」の一番大きいところの「周期(時点)」の値が n の値である。ここではその値を 50 として以下の処理に進む。求めた 50 の値を「周期変動」の後ろのテキストボックスに入力して、「予測」ボタンをクリックする。結果は図 7 のようになる。

周期変動結果	
	予測値
振幅:A	1.9951
角振動数:ω	125.6637
位相:φ	4.0411
書式	$A \cos(\omega t + \phi)$

図 7 周期変動結果

最後に「最終結果」ボタンをクリックすると図 8 のような結果を得る。

最終結果	
予測形式	傾向変動 + 振幅変動 × 周期変動
傾向変動	1次関数: $-0.9133t + 1.5306$
振幅変動	指數関数: $38.0187 \cdot \exp(-1.1965t)$
周期変動	$1.9951 \cdot \cos(125.6637t + 4.0411)$
振幅変動 × 周期変動	$75.8507 \cdot \exp(-1.1965t) \cdot \cos(125.6637t + 4.0411)$
実測・予測	$r = 0.9993 \quad r^2 = 0.9985$

図 8 最終結果

結果は式として与えられ、モデルの正確さは実測・予測の寄与率 r^2 の値で判定できる。ここで、周期変動のピリオドグラムの値が 1 つの整数に定まらないときは、値を少しづつ変えて上の処理を行い、最良の r^2 が与えられる値を用いるとよい。

この結果の当てはまりをグラフとして見ようと思えば「グラフ」ボタンを、数値としてみ

ようと思えば「予測値」ボタンをクリックする。結果をそれぞれ図 9 と図 10 に示す。

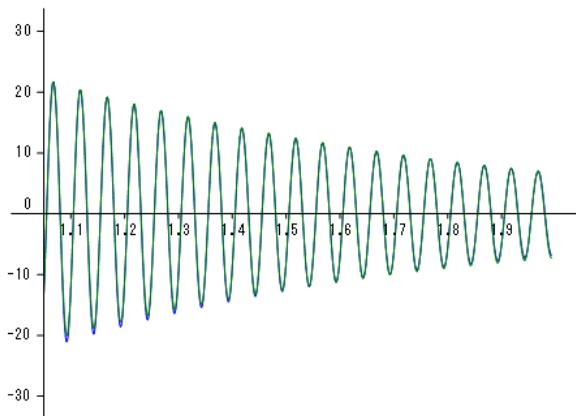


図 9 当てはまりのグラフ表示

元のグラフは青色、予測値のグラフは緑色である。この場合、両者はほぼ重なり合っている。

予測値と残差								
	時間	実測値	傾向変動	振幅変動	周期変動	予測値	残差	
▶	0	1.050	-13.124	0.572	10.824	-1.241	-12.860	-0.264
	1	1.051	-10.761	0.571	10.811	-1.035	-10.622	-0.199
	2	1.052	-8.234	0.570	10.798	-0.813	-8.213	-0.021
	3	1.053	-5.585	0.569	10.785	-0.579	-5.672	0.087
	4	1.054	-2.855	0.568	10.772	-0.335	-3.038	0.183
	5	1.055	-0.087	0.567	10.759	-0.086	-0.354	0.267
	6	1.056	2.676	0.566	10.747	0.165	2.338	0.338
	7	1.057	5.389	0.565	10.734	0.413	4.996	0.394
	8	1.058	8.011	0.564	10.721	0.654	7.577	0.434
	9	1.059	10.501	0.563	10.708	0.885	10.042	0.459
	10	1.060	12.819	0.563	10.695	1.102	12.352	0.467

図 10 当てはまりの数値表示

ここまでが時系列分析の処理である。

我々はさらにこれについて最小 2 乗法を用いて精密化してみよう。分析実行画面の下にある「旧最小 2 乗へ」ボタンをクリックすると、図 11 のような旧バージョンの非線形最小 2 乗法の画面が表示される。

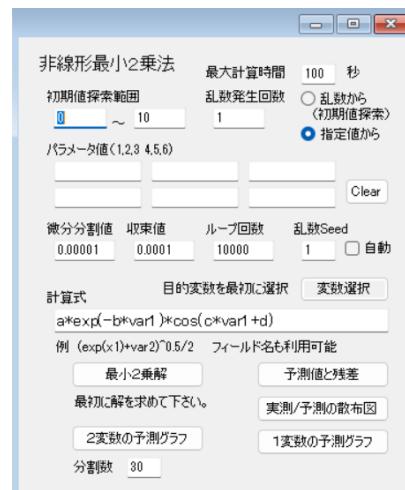


図 11 非線形最小 2 乗法の初期画面

ここでは、「計算式」として予測式の振幅変動（指数関数）と周期変動の部分が表示され、「指定値から」のボタンが設定されている。利用者は、これに（ある場合は）傾向変動の式を加え、初期値を図 12 のように数式内のパラメータの文字列としての昇順で加える。初期値の値としては大体の値でよい。そのまま「最小 2 乗解」ボタンをクリックすると右に与えた最小 2 乗解が得られる。

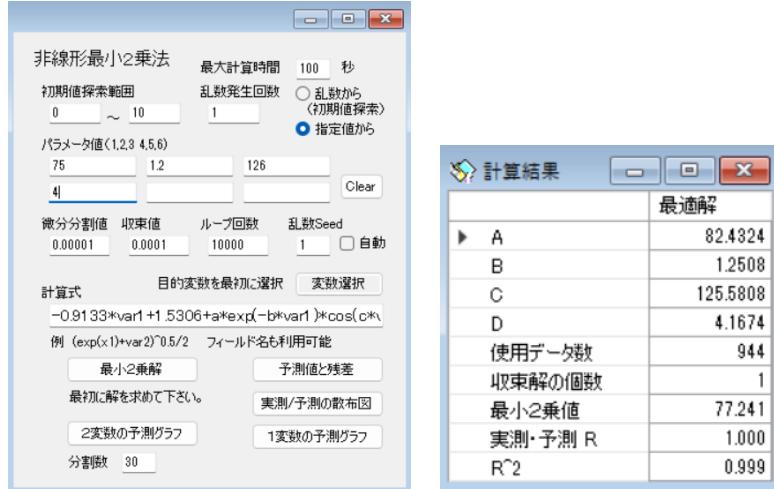


図 12 非線形最小 2 乗法の設定画面と最小 2 乗解

この場合傾向変動を考えているが、実は傾向変動を考えない方がより正確な値が得られる。周波数時系列推定の結果は図 13 である。

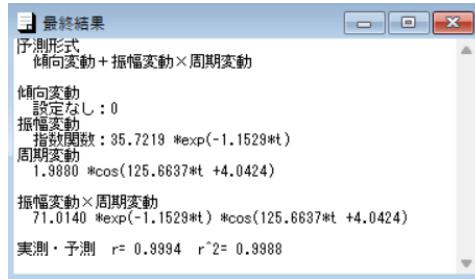


図 13 周波数時系列推定の結果

これを用いた非線形最小 2 乗法の設定画面と結果を図 14 に示す。

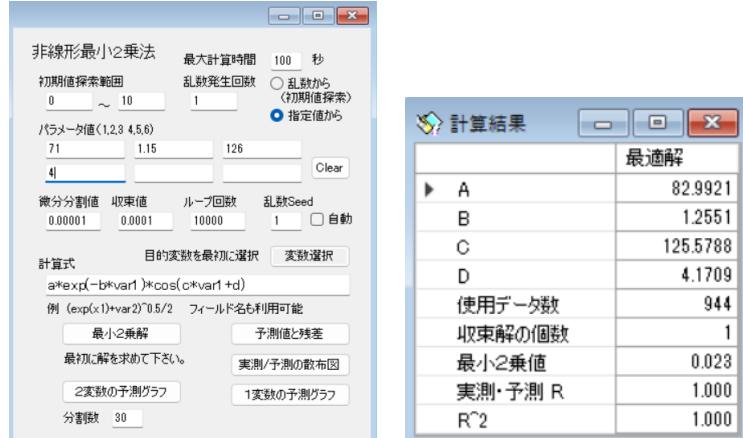


図 14 傾向変動を加えない非線形最小 2 乗法の設定画面と最小 2 乗解

結果の最小 2 乗値をみれば正確さの違いははっきりとしている。

もちろん傾向変動の部分を、パラメータを加えた式として表すことも可能である。その際は、パラメータの文字列としての昇順に気を付けて初期値を与える。パラメータは 1 文字とは限らず、例えば、 $a0, a1, a2$ なども可能である。

最後に、減衰を持つ 1 質点系の振動の理論的な帰結として、以下のような振幅変動と周期変動を考えることがある。

$$Ae^{-h\omega t} \cos(\sqrt{1-h^2}\omega t + \phi)$$

この場合は、 $h\omega$ と $\sqrt{1-h^2}\omega$ がすでに求まっているのでその値から h と ω を解いてやればよい。結果はすぐに求まるが、周波数時系列推定の「簡易計算」のところに値を代入して、「計算」ボタンをクリックし、右のテキストボックスに結果を表示させることもできる。