

3つの因子 (Glucana、GlyGlyおよびpH)を以下の低水準、中央及び高水準と変化させて、 γ -GT値を計測する

	低水準	中央値	高水準	実験幅
	-1	0	1	
Glucana	1	6	11	5
GlyGly	50	150	250	100
pH	7.2	7.9	8.6	0.7

-1, 0, 1に置き換え

$$\frac{\text{実測値} - \text{中央値}}{\text{実験幅} (\text{高水準} - \text{低水準})}$$

Glucana	GlyGly	pH	x1	x2	x3	γ -GT計測値
1	50	7.2	-1	-1	-1	44.8
11	50	7.2	1	-1	-1	43.1
1	250	7.2	-1	1	-1	44.3
11	250	7.2	1	1	-1	80.9
1	50	8.6	-1	-1	1	61
11	50	8.6	1	-1	1	85
1	250	8.6	-1	1	1	46.6
11	250	8.6	1	1	1	86.9
1	150	7.9	-1	0	0	57.6
11	150	7.9	1	0	0	94.8
6	50	7.9	0	-1	0	79.7
6	250	7.9	0	1	0	95.7
6	150	7.2	0	0	-1	73.8
6	150	8.6	0	0	1	93
6	150	7.9	0	0	0	97.3
6	150	7.9	0	0	0	98.5
6	150	7.9	0	0	0	98.6
6	150	7.9	0	0	0	99.5

一般的に2次回帰の近似式が適用

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i X_i + \sum_{1 \leq i < j} b_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} X_i^2$$

計測値	x1	x2	x3	x1 ²	x2 ²	x3 ²	x1x2	x1x3	x2x3
44.8	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
43.1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
44.3	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1
80.9	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1
61.0	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1
85.0	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1
46.6	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1
86.9	1	1	1	1	1	1	1	1	1
57.6	-1	0	0	1	0	0	0	0	0
94.8	1	0	0	1	0	0	0	0	0
79.7	0	-1	0	0	1	0	0	0	0
95.7	0	1	0	0	1	0	0	0	0
73.8	0	0	-1	0	0	1	0	0	0
93.0	0	0	1	0	0	1	0	0	0
97.3	0	0	0	0	0	0	0	0	0
98.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
98.6	0	0	0	0	0	0	0	0	0
99.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Excelの分析ツールを用いて重回帰分析を実行

実行結果

回帰統計	
重相関 R	0.98617
重決定 R2	0.972531
補正 R2	0.941628
標準誤差	5.166862
観測数	18

分散分析表					
	自由度	変動	分散	観測された分散比	有意 F
回帰	9	7561.384	840.1538	31.47059912	2.65E-05
残差	8	213.5717	26.69647		
合計	17	7774.956			

	係数	標準誤差	t	P-値	下限 95%	上限 95%	下限 95.0%	上限 95.0%
切片	96.3369	2.032633	47.39513	4.343E-11	91.64965	101.0242	91.64965	101.0242
x1	13.64	1.633905	8.348097	3.20969E-05	9.872207	17.40779	9.872207	17.40779
x2	4.08	1.633905	2.497085	0.03711024	0.312207	7.847793	0.312207	7.847793
x3	8.56	1.633905	5.238982	0.000784261	4.792207	12.32779	4.792207	12.32779
x1 ²	-17.9988	3.138832	-5.73424	0.000436826	-25.237	-10.7606	-25.237	-10.7606
x2 ²	-6.49881	3.138832	-2.07045	0.072178078	-13.737	0.739351	-13.737	0.739351
x3 ²	-10.7988	3.138832	-3.44039	0.008818727	-18.037	-3.56065	-18.037	-3.56065
x1x2	6.825	1.826762	3.736119	0.005737182	2.61248	11.03752	2.61248	11.03752
x1x3	3.675	1.826762	2.011757	0.079062625	-0.53752	7.88752	-0.53752	7.88752
x2x3	-6.225	1.826762	-3.40767	0.009254955	-10.4375	-2.01248	-10.4375	-2.01248

$$Y = 96.3 + 13.6x_1^2 + 4.08x_2^2 + 8.56x_3^2 + 6.83x_1x_2 + 3.68x_1x_3 - 6.23x_2x_3 - 18.0x_1^2 - 6.50x_2^2 - 10.8x_3^2$$

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i X_i + \sum_{1 \leq i < j}^n b_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} X_i^2$$

$$\hat{Y} = b_0 + \mathbf{x}' \mathbf{b} + \mathbf{x}' \hat{\mathbf{B}} \mathbf{x}$$

$$\mathbf{x}' = (x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_k)$$

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix} \quad \hat{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12}/2 & \dots & b_{1k}/2 \\ b_{21}/2 & b_{22} & \dots & b_{2k}/2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1}/2 & b_{k2}/2 & \dots & b_{kk} \end{pmatrix}$$

\hat{Y} を微分して0のときに最大 γ -GTとなる

$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x} = 0$$

\hat{Y} が最大になる場合の停留点の x_s は、

$$x_s = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \hat{\mathbf{B}}^{-1} \mathbf{b}$$

B	-17.9988	3.4125	1.8375
	3.4125	-6.49881	-3.1125
	1.8375	-3.1125	-10.7988

=MINVERSE(E2:G4)

b	13.64	B ⁻¹	-0.06172	-0.03176	-0.00135
	4.08		-0.03176	-0.19486	0.05076
	8.56		-0.00135	0.05076	-0.10746

xs	0.491	=-0.5*MMULT(E6#,E10:E12)
	0.397	
	0.366	

$$x_s = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.491 \\ 0.397 \\ 0.366 \end{pmatrix}$$

$$Y = 96.3 + 13.6x_1^2 + 4.08x_2^2 + 8.56x_3^2 + 6.83x_1x_2 + 3.68x_1x_3 - 6.23x_2x_3 - 18.0x_1^2 - 6.50x_2^2 - 10.8x_3^2$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.491 \\ 0.397 \\ 0.366 \end{pmatrix}$$

$x_2 = 0.397$ に固定して、 x_1 と x_3 を $-1 \sim 1$ の範囲で変化させて以下の表を作成

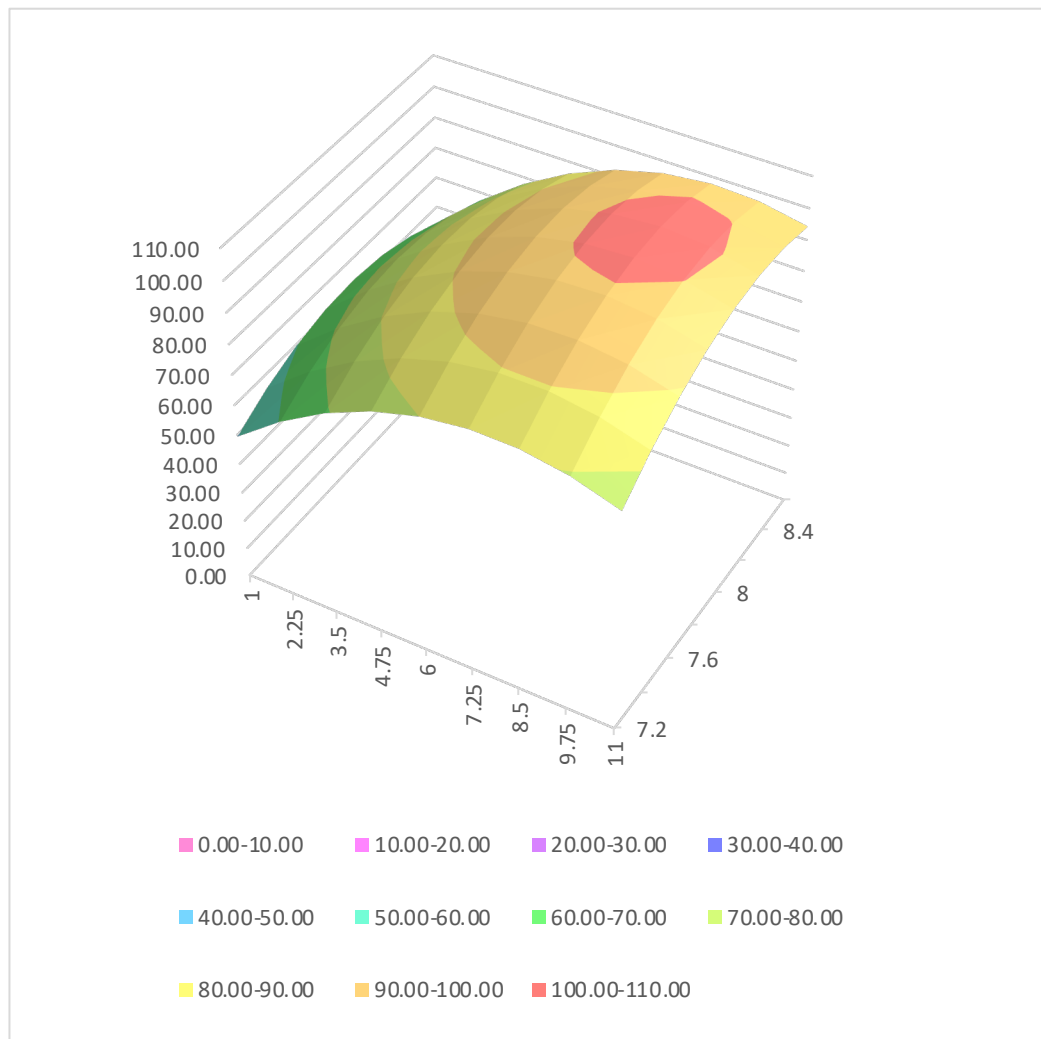
$$x_3 = \frac{\square - 7.9}{0.7}$$

$$x_1 = \frac{\square - 6}{5}$$

	低水準	中央値	高水準	実験幅
	-1	0	1	
Glucana	1	6	11	5
GlyGly	50	150	250	100
pH	7.2	7.9	8.6	0.7

		Glucana								
		1	2.25	3.5	4.75	6	7.25	8.5	9.75	11
pH	7.2	49.37	60.41	69.21	75.75	80.04	82.09	81.88	79.43	74.72
	7.4	55.35	66.66	75.71	82.52	87.07	89.38	89.44	87.24	82.80
	7.6	59.57	71.13	80.45	87.52	92.34	94.91	95.23	93.30	89.11
	7.8	62.02	73.85	83.43	90.76	95.84	98.67	99.25	97.59	93.67
	8	62.71	74.80	84.65	92.24	97.58	100.68	101.52	100.11	96.46
	8.2	61.64	73.99	84.10	91.95	97.56	100.91	102.02	100.88	97.48
	8.4	58.80	71.42	81.79	89.90	95.77	99.39	100.76	99.88	96.75
	8.6	54.20	67.08	77.71	86.09	92.22	96.10	97.74	97.12	94.25

3Dプロット



等高線

