１．応答曲面

１．１ 応答曲面入門

応答曲面（Response Surface）とは，ｎ個（ｎ＞１）の予測変数（Predictor variables）ｘ$_{\mathrm{i}}$（i=1…n）から予測される応答（Response）ｙの関係式を近似したものである．

$$y = f(x_1 \cdots x_n) + \varepsilon \tag{1.1.1}$$

ここで，εは誤差(error)と呼ばれる．応答曲面法において関数の形に特に制限はない．応答曲面法は製品プロセスの最適化やばらつきの減少などの品質工学の分野において特にアメリカで実用化されている手法である．プロセスの最適化を用いて実用例をごく簡単に説明する．

（実用例）

化学プラントの製造プロセスにおいて，不純物含有量 N を減少させたい．不純物は炉中のプロセスで製造されている．変更可能な変数としては炉温度 T，炉内圧力 P，流入速度 M とする．現状の値からの許容される変更は小さい．そこで，応答を２次多項式で近似する．

$$N = \beta_0 + \beta_1 T + \beta_2 P + \beta_3 M + \beta_4 T^2 + \beta_5 P^2 + \beta_6 M^2 + \beta_7 TP + \beta_8 PM + \beta_9 MT \tag{1.1.2}$$

複数の実験を行い，最小２乗法で式(1.1.2)の未知係数の推定を実施すれば，N の近似式が得られる．その後，各変数の許容変動範囲を拘束条件として式（1.1.2）を最小化する T,P,M の組み合わせを求めれば良い．

この際，直感的に明らかなように，実施する実験が例えば許容範囲のある点の周囲だけに固まっている場合，例えば T_0，P_0，M_0 周辺だけに実験が偏る場合，得られた近似式はその点のごく近傍では高い精度で近似されているが，離れた点では近似が著しく悪化している場合が多い．このような近似度の偏りを防止し，さらに近似式の係数の推定分散を最小にする実験点を選択する手法が実験計画法である．

したがって，通常は，目標とする応答に対して変数を選択後，実験計画を実施し，実験（または解析），その結果を用いて最小２乗法に基づき近似式の推定，統計的検定を行い，有効な近似式に対して最適化を行う．

先にも述べたように，応答曲面法においては近似関数の形状は固定されていない．一般の品質工学分野では，取り扱いが簡単であるので多項式が多く用いられている．しかし，変数変換を行うことで線形化可能な非線形関数も多く用いられる．例えば，指数関数，べき乗関数，有理関数，対数関数，ロジスティック関数などである．また，非線形回帰の手法を用いることで，一般的な有理関数やニューラルネットワークなども応答曲面に適用できる．ただし，非線形回帰では一般的に有効な実験計画法が無く，また統計的評価も一般に困難であるため線形関数を用いる際の有力なツールが使用できないという欠点を持っている．

極端な例として，式(1.1.1)でε=0 の補間法も応答曲面の一つと言える．例えば，多変数のスプライン補間やラグランジュ補間なども応答曲面と言える．しかし，一般に近似関数化したい応答は実験誤差や解析誤差あるいは不連続性などを持っているため，単に補間法を適用することは好ましくない場合が多い．また実験や解析の点数も一般

には少なく，補間モデルと実際の関数形との差異に起因する補間の信頼性の観点から実際にはあまり適用されない．もちろん誤差を含まないで大量の測定が可能な場合や誤差をも含めて完全に離散データを連続関数化したい場合には補間法が適用されるべきである．

以下では２変数の多項式，ロジスティック曲線，ニューラルネットワークを例に，その関数形の例を図示する．

１．２　多項式

２変数ｘ$_1$，x_2 の多項式の一般形は次式で表される．

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 \qquad (1.2.1)$$

β_3～β_5が全て０の時には式(1.2.1)は単なる平面となり，ここでは省略する．

x_1x_2 の項は交互作用項（interaction term）と呼ばれている．簡単な例として，β_3とβ_4が０の場合の一例を図 1.2.1 に示す．

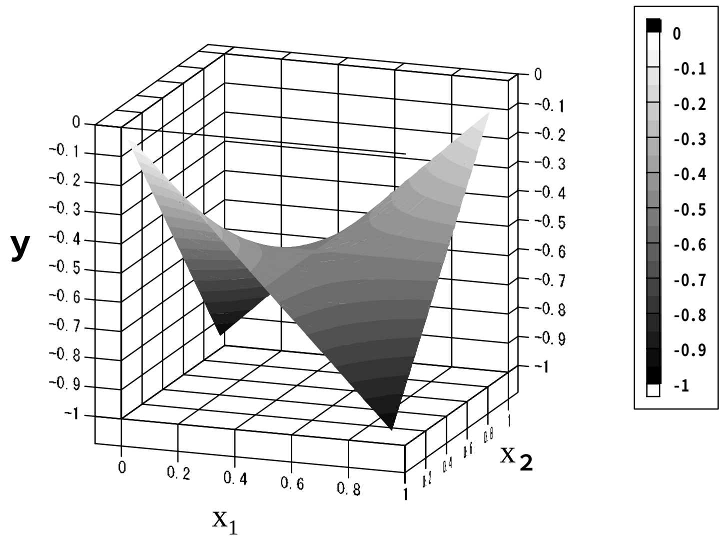

図 1.2.1　交互作用を持つ曲面の例

図 1.2.1 は４点（x_1,x_2,y）＝(0,0,0),(1,1,0),(0,1,1),(1,0,1)を通る曲面で，次式で表される．

$$y = -x_1 - .x_2 + 2x_1x_2 \qquad (1.2.2)$$

式(1.2.1)はパーセプトロンニューラルネットワークに不可能[1.1]な X ・ OR(排他的論理和)の判別が可能な関数である．例えば，（x_1,x_2）=(1,1)，(0,0)は０，(1,0),(0,1)は１という値を計算しており，計算結果を判別とみなすと，排他的論理和を判別していることがわかる．このように，１次の交互作用が含まれるだけでかなり複雑な曲面を描くことが可能となる．

２次多項式（Quadratic polynomials）の場合には，丘型，円筒型，鞍型などのさらに複雑な曲面を描くことが可能となる．例として，丘型の曲面を図 1.2.2 に示す．

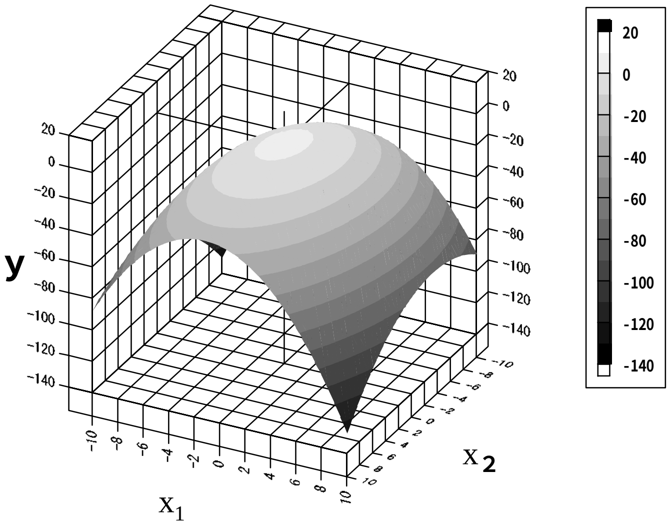

図 1.2.2　2 次多項式曲面（丘型）の例

なお，図 1.2.2 は次式の曲面である．

$$y = 2 + 0.1x_1 + 0.05x_2 - 0.2x_1x_2 - 0.3x_1^2 - 0.8x_2^2 \qquad (1.2.3)$$

参考文献

[1.1]　中野馨，飯沼一元，ニューロンネットグループ，桐谷滋：「入門と実習ニューロコンピュータ」技術評論社，（1988）．