

### 3 . 実験計画法 ( Design of Experiments )

実験計画法とは本来は実験の実行に予想外の因子の影響をさけるための計画であるが、より良い回帰式を得るためのより良い実験値を集める手法でもある。実験計画法は既に品質工学の分野で広く用いられている[1]-[3]。ここでは応答曲面を求める場合に限定して解説する。

式(2.2.7)において、回帰式の各係数の分散を小さくするには、 $\sigma^2$  と  $(X^T X)^{-1}$  の対角成分を小さくすれば良いことがわかる。 $\sigma^2$  は応答  $y$  に関連するが、 $(X^T X)^{-1}$  は実験点の座標だけに起因しており、この  $(X^T X)^{-1}$  の対角成分を最小化すれば、 $y$  の分散が未知であっても回帰係数分散を相対的に最小化可能である。実験計画には多くの種類があるが、全ての実験計画では、この  $(X^T X)^{-1}$  の対角成分を最小化することを目的としている。

#### 3 . 1 水準 ( Level )

実験計画法においては、連続変数の場合においても無限の組み合わせを考慮することが実用的でないことから水準という離散化された変数で考える。水準を用いて変数を離散化することは離散化によってノイズに強くなるという利点も有している。また、定量的でない変数も水準化することで擬似的に定量化可能である。

例えば、ある炉の反応を応答曲面で最適化する場合を例に取る。温度  $T$  と圧力  $P$  は定量的な変数である。これに触媒  $A$  社と  $B$  社という因子があったとする。温度  $T$  は炉の温度調節が精度が無いので 120、125、130 の 3 通り ( 3 水準 ) とし、それぞれ 1, 0, 1 の水準とする。圧力は 5 気圧、5.2 気圧、5.4 気圧とし、それぞれ -1, 0, 1 の水準とする。触媒は 2 社なので  $A$  社を -1、 $B$  社を 1 とする。このように水準を定義することで、実用的な組み合わせ数で、しかも実験誤差などに左右されにくいデータをとることができる。また、2 値程度の簡単な定性的データも定量化できる。ただし、定性的データが多数ある場合には水準の割り振りが単純ではない。これについては本書を越えているので、数量化などについて学習されたい。

この例では、 $3 \times 3 \times 2$  の 18 通りの水準の組み合わせがある。18 通り程度であれば、全てを実行可能であり、通常すべての場合を実行して応答曲面を求める。これを全因子計画 ( Full Factorial Design ) と呼ぶ。

#### 3 . 2 直交計画 ( Orthogonal Design )

直交計画は 1 次多項式 ( 線形重回帰 ) の実験計画に使われる。実験点の座標の集合  $X$  を直交にとることで  $X^T X$  は対角行列になる。例えば変数の範囲を -1 から 1 までに規格化された 3 つの変数  $x_1, x_2, x_3$  の線形重回帰では、未知係数が定数項を含めて 4 個であるので、経験的にその 2 倍の 8 個の実験点が必要と判断される。3 変数直交計画で 8 個の実験計画を行なった場合、2 水準全因子計画 ( 2-level full factorial designs ) と同じになる。ここで、2 水準とは因子の取り得る水準 ( Level ) が -1 と 1 などのように 2 つだけしかないということである。

4 変数以上では変数の数を  $k$  とすると、未知係数が  $k+1$  であるのに対して、直交計画の可能実験点は  $2^k$  で増加するため、2 水準の全因子計画と異なる。

3 変数で上記の表を使用した場合、 $(X^T X)^{-1}$  は  $I/8$  ( $I$  は単位行列) となり、係数の分

散は で最小となる．表 3.2.1 に 2 水準の L8 直交表を示す．

表3.2.1 L 8 直交表

No.	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	-1	1	1	1	1
3	-1	1	1	-1	-1	1	1
4	-1	1	1	1	1	-1	-1
5	1	-1	1	-1	1	-1	1
6	1	-1	1	1	-1	1	-1
7	1	1	-1	-1	1	1	-1
8	1	1	-1	1	-1	-1	1
列名	a	b	ab	C	ac	bc	abc

主効果だけの 1 次多項式による応答曲面（線形重回帰）の場合，L8 直交表では 7 つの変数の応答曲面まで変数を割り付けることができる．ただし，7 変数の場合には未知係数が 8 個であるので，飽和回帰になる（残差ゼロ）．7 変数未満の主効果だけの応答にはどの列に変数を割り付けても問題はない．

変数間に交互作用が無視できない場合には，直交表の列に変数を割り付ける際に注意する必要がある．例として(1)～(7)の各列に変数 A, B, C, D, E, F, G を割り当てる場合を考える．この応答には A と B に交互作用があるとする．3 列目の C の場合， $A \times B$  の作用は次のようになる．

C[-]: A-B-, A-B-, A+B+, A+B+

C[+]: A-B+, A-B+, A+B-, A+B-

ここで，C[-]は変数 C の-1 の場合，C[+]は C の 1 の場合であり，A-B+は A が-1, B が +1 を意味している．この関係から明らかかなように A, B の影響が平等ではない．これに対して，4 列目の変数 D の場合， $A \times B$  の作用は次のようになる．

D[-]: A-B-, A-B+, A+B-, A+B+

D[+]: A-B-, A-B+, A+B-, A+B+

この結果から，D[-]と D[+]で A, B の影響は平等に現れていることがわかる．

直交表には通常列名が付いている．列名，a, b, c はそれぞれ独立した変数を割り付けることが可能である．それに対して，(3), (5), (6), (7)列は交互作用を表しており，交互作用がある場合にはこれらの列に変数を割り付けることができない．

このように主効果だけまたは 1 次の交互作用までの 1 次モデルでは直交計画は非常に効果的であるが，2 次以上の多項式回帰モデルでは実験点が不足してしまう．この場合には 3 水準直交表などの多水準直交表を用いる．3 水準直交表の一例として L27 を表 3.2.2 に示す．

表3.2.2 L27 直交表

No.	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
4	-1	0	0	0	-1	-1	-1	0	0	0	1	1	1
5	-1	0	0	0	0	0	0	1	1	1	-1	-1	-1
6	-1	0	0	0	1	1	1	-1	-1	-1	0	0	0
7	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	0	0	0
8	-1	1	1	1	0	0	0	-1	-1	-1	1	1	1
9	-1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	-1	-1	-1
10	0	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1
11	0	-1	0	1	0	1	-1	0	1	-1	0	1	-1
12	0	-1	0	1	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0
13	0	0	1	-1	-1	0	1	0	1	-1	1	-1	0
14	0	0	1	-1	0	1	-1	1	-1	0	-1	0	1
15	0	0	1	-1	1	-1	0	-1	0	1	0	1	-1
16	0	1	-1	0	-1	0	1	1	-1	0	0	1	-1
17	0	1	-1	0	0	1	-1	-1	0	1	1	-1	0
18	0	1	-1	0	1	-1	0	0	1	-1	-1	0	1
19	1	-1	1	0	-1	1	0	-1	1	0	-1	1	0
20	1	-1	1	0	0	-1	1	0	-1	1	0	-1	1
21	1	-1	1	0	1	0	-1	1	0	-1	1	0	-1
22	1	0	-1	1	-1	1	0	0	-1	1	1	0	-1
23	1	0	-1	1	0	-1	1	1	0	-1	-1	1	0
24	1	0	-1	1	1	0	-1	-1	1	0	0	-1	1
25	1	1	0	-1	-1	1	0	1	0	-1	0	-1	1
26	1	1	0	-1	0	-1	1	-1	1	0	1	0	-1
27	1	1	0	-1	1	0	-1	0	-1	1	-1	1	0
列名	A	b	Ab	a <sup>2</sup> b	c	ac	a <sup>2</sup> c	bc	Abc	a <sup>2</sup> bc	b <sup>2</sup> c	ab <sup>2</sup> c	a <sup>2</sup> b <sup>2</sup> c

ただし，単純な多項式を回帰モデルに用いた場合には，多水準の直交表を用いても  $(X^T X)^{-1}$  は対角行列にはならず，直交実験とはならない．そこで，2次以上の多項式には直交多項式を用いる．一般にはチェビシエフ (Chebyshev) の直交多項式が多く用いられる．直交多項式と直交表を用いることで直交実験となる[4]．

チェビシエフの直交関数を用いた応答曲面では，等間隔の水準（実験点を離散化した点）を用いる．2変数  $x_1, x_2$  の等間隔水準の区間の場合，チェビシエフの直交関数は次式になる．

$$\begin{aligned}
 y = & b_{00} + b_{10}(x_1 - \bar{x}_1) + b_{01}(x_2 - \bar{x}_2) + b_{11}(x_1 - \bar{x}_1)(x_2 - \bar{x}_2) \\
 & + b_{20}[(x_1 - \bar{x}_1)^2 - \frac{a_1^2 - 1}{12}h_1^2] + b_{02}[(x_2 - \bar{x}_2)^2 - \frac{a_2^2 - 1}{12}h_2^2] + \dots
 \end{aligned}
 \tag{3.2.1}$$

ここで， $\bar{x}_1, \bar{x}_2$  はそれぞれ変数  $x_1, x_2$  の平均値， $a_1, a_2$  はそれぞれの変数の水準数， $h_1, h_2$  は水準間隔である．この直交多項式の係数は， $x_1 = x_1 - \bar{x}_1, x_2 = x_2 - \bar{x}_2$ ， $x_3 = (x_1 - \bar{x}_1)(x_2 - \bar{x}_2)$ ， $x_4 = [(x_1 - \bar{x}_1)^2 - \frac{a_1^2 - 1}{12}h_1^2]$ ， $x_5 = [(x_2 - \bar{x}_2)^2 - \frac{a_2^2 - 1}{12}h_2^2]$  と置き換えることにより線形重回帰に変換できる．この際， $(X^T X)^{-1}$  行列は対角行列となり，それぞれの変数は互いに直交する．このため，直交表で直交関数を用いた場合には，t 値が回帰モデルの他の項の影響を受けない．つまり変数の追加や削除が独立に行うことができ

る .

一般の直交表直交関数近似においては , 多項式の係数は表計算で簡単に求めることができる . 直交表の交互作用列成分はこの表計算時に簡便な計算手法のために使用される .

以上のように直交表を用いる実験計画は 1 次多項式では広く用いられているが , 2 次以上の回帰モデルでは直交関数を使用することに制限されている . 直交表実験計画は 3 水準直交表以上では実験数が多くなる . このため , 実験に誤差を多く含む場合に有効である .

### 3 . 3 中央複合計画(Central Composite Design)

CCD は 2 次多項式の実験計画で最も多く用いられている . CCD は 2 水準全因計画と 2 k 軸上の距離 の点からなる . 例えば , 2 変数 ( k=2 ) で = 2 の場合 , CCD は表 3.3.1 のようになる .

表3.3.1 CCD ( 2 変数 ) = 2

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$x_1$	1	1	-1	-1	0	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	0	0	0	0
$x_2$	1	-1	-1	1	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	0	0	0	0	0

これを行列形式で書くと次式になる .

$$\mathbf{X} = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & x_1x_2 \\ \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1.414 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1.414 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1.414 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1.414 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$X^T X$  行列は次式になる .

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 & 8 & 8 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & 12 & 4 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & 4 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

このように、CCD では  $X^T X$  行列は対角行列にはならない。CCD では分散を最小化すると同時に分散の方位依存性を無くしている。つまりどの方位にも分散が等しくなるように回転可能にしている。この回転可能設計 (rotatable design) という点が CCD の最重要点である。中央実験点がないと  $X^T X$  が特異行列になるため、少なくとも1つの実験点が中央に必要である。設計変数の外側に実験点を配置できない場合には、±2の点を±1とするように座標変換するか±2を±1と置き換える。±2を±1に変換すると、本来の設計変数の範囲の正方形に内接する円を近似空間に選択しなおしていることに相当する。±2を±1と置き換えることは正方形の辺上の中点に実験点を配置することに相当する。4辺の中点に実験点を配置すると回転可能性は若干低下してしまうが中央点付近の回転可能性は十分に高い。

2変数以上の場合の CCD については付録を参照されたい。

### 3.4 計算機支援計画

電子計算機の発展に伴い、表を用いた実験計画から計算機支援の実験計画が注目されるようになってきた。計算機支援の実験計画は、あらかじめ実験計画の候補点を多数用意しておき、そのなかから次に述べる最適性を用いて最適実験計画の組み合わせを求めるものである。計算機支援の実験計画は計算機の発展によって最近用いられるようになった。計算機支援の方法は使用法が簡単であり、現在は多く用いられている。計算機支援実験計画はいくつか提案されており、アルファベットを用いて命名されている。A, D, G, Q 最適基準が有名であり、下記に説明する。なお、これら以外にも、存在し、これは最後に述べる。

#### i) A 最適基準 (A-Optimality)

A 最適基準は応答曲面の係数の分散を最小化する最適化基準である。正規方程式で求められる応答曲面の各項の係数の分散は応答  $y$  の分散 と正方マトリックス  $X^T X$  の逆行列からなる。この分散を小さくするには  $X^T X$  を小さくすることも重要であるが、 $(X^T X)^{-1}$  の対角成分を大きくすれば係数の分散は相対的に小さくすることができる。この  $(X^T X)^{-1}$  は近似モデルと実験点の座標だけで決定される。 $X^T X$  を実験数  $k$  で除したものはモーメント行列と呼ばれている。

$$\mathbf{M} = \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{X}}{n} \quad (3.4.1)$$

A 最適基準はこのモーメント行列の逆行列の対角成分の和 (trace) に着目し、これを最小化する実験計画の最適基準である。

$$\text{Min}[\text{trace}(\mathbf{M}^{-1})] \quad (3.4.2)$$

A 最適基準は対角成分だけを考慮し、応答曲面の各項の係数の共分散は考慮しない。このため、A 最適な実験計画でも共分散の絶対値が大きい場合が存在し得る。共分散の絶対値が大きいことはその変数  $x_i$  と  $x_j$  の実験計画に偏りがあることを意味する。つまり回転可能性という観点からは良好ではない実験計画になり得る。

ii) D 最適基準 (D-Optimality)

D 最適基準はモーメント行列の行列式を最大化する実験計画の最適化基準である。

$$\text{Max} |\mathbf{M}| \quad (3.4.3)$$

変数の座標範囲が  $-1 \sim 1$  に正規化されている場合、D 最適性の優劣を表す  $D_{\text{eff}}$  (D-efficiency) は次式で定義される。

$$D_{\text{eff}} = \frac{(\text{Det}[\mathbf{X}^T \mathbf{X}])^{1/p}}{n} \quad (3.4.4)$$

ここで、 $p$  は未知係数の数である。 $D_{\text{eff}}$  は最大値が 1 となり、大きいほど良い実験計画となる。例えば、変数が 2、実験数が 9 個 (中央点実験数 1) の CCD の  $D_{\text{eff}}$  は 0.9862、中央点実験数を 2 とした場合には 0.9964 である。

一般に逆行列の各成分にはその行列の行列式の逆数がかけられる。D 最適基準は  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$  行列の行列式を最大化することで  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$  行列の全成分を相対的に最小化している。これによって、D 最適基準はモーメント行列の対角成分だけでなく、共分散成分も含んでいる。つまり D 最適基準は係数全体の分散を考慮した一般化分散を最小化させている。このため、D 最適基準で選択された点は回転可能性という点からも良好な実験計画である。

ii) G 最適基準と Q 最適基準 (G-Optimality and Q-Optimality)

実験点数  $n$  で規格化された推定値分散  $v(x) = n \text{Var}[\hat{y}(x)] / \sigma^2$  は次式で表される。

$$v(x) = \frac{n \text{Var}[\hat{y}(x)]}{\sigma^2} = \mathbf{x}_m^t (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_m \quad (3.4.5)$$

ここで、 $\mathbf{x}_m$  は設計空間内のある点の座標ベクトルである。G 最適基準はこの推定値分散の最大値を最小にする実験計画である。

$$\text{Min} [\text{Max} v(x)] \quad (3.4.6)$$

G 最適基準では、設計空間内の最大の推定値分散点を探索し、その後その値を最小にする実験計画を行う。このため、計算コストがかかるので一般にはあまり適用されない。

Q 最適基準は設計空間内で推定値分散を積分し、その積分値を最小化する実験計画である。

$$\text{Min} \left[ \frac{1}{K} \int_R v(x) dx \right] \quad (3.4.7)$$

ただし、 $R$  は設計空間全体の集合であり、 $K$  は空間の積分値である。

$$K = \int_R dx \quad (3.4.8)$$

Q 最適基準は推定値分散を平均的に最小化するため有効であるが，設計空間全体の推定値分散を計算するため，計算コストが高く，あまり用いられていない。

これら A, D, G, Q の他に， $X^T X$  マトリックスの固有値の最小値を最大化する実験計画（E 最適基準）や， $(X^T X)^{-1}$  マトリックスの対角成分の最大値を最小化する実験計画（minimax 基準）などがある。

一般には計算機支援実験計画には D 最適計画が用いられる。推定値の分散を比較してみると，直交表 + 直交関数は推定値分散が方位依存性を有している。つまり方位によって推定値の分散が異なり，回転可能でない実験計画になっている。また，L27 直交表 + 2 次直交関数の  $D_{\text{eff}}$  は 0.462 であり，CCD + 2 次多項式の  $D_{\text{eff}}$  は 0.996 である。このことから，D 最適であるほど推定値分散の方位依存性は少ないということがわかる。直交表 + 直交関数は計算が簡単であり，さらに高次の多項式にも対応できるという利点を有している。CCD は 2 次多項式だけに有効であり，それ以外には D 最適基準が必要である。CCD も D 最適も計算が複雑であり，また D 最適基準では近似に必要な実験点数を選択する必要がある。点の選択によっては必ずしも回転可能とはならない。このような点から，どちらも長所短所があるので，設計者の都合の良い方法を用いれば良い。ただし D 最適基準は，設計空間が不規則に離散的であったり，拘束条件がある場合に唯一有効な方法である。

#### 参考文献

- [1] 田口玄一（1976）：第 3 版実験計画法 上・下，丸善
- [2] Douglas C. Montgomery(1996):Design and Analysis of Experiments 4th edition, John Wiley & Sons. Inc.
- [3] Raymond H. Myers and Douglas C. Montgomery (1995) :Response Surface Methodology Process and Product Optimization Using Designed Experiments, Wiley Series in Probability and Statistics, John Wiley & Sons. Inc.
- [4] 柏村孝義，白鳥正樹，干強：実験計画法による非線形問題の最適化，朝倉書店 p119，朝倉書店