応答曲面の観点からみた最適計画の比較

M2012MM031 奥村和也

指導教員：松田眞一

1 はじめに

最適計画はモデルを基に計画を評価する基準を定めて，その基準で最適化する計画である．1959 年に最適計画は初めて提案されたが，多くの繰り返し計算を必要とし，計算が困難であることから，当初は理論的な面での研究しかあまりされなかった．それでも，1990 年半ば頃より，計算機器の発達にともない，最適計画は実用化されるようになってきた．そして現在では，計画の良し悪しを評価する基準として，A 最適基準や D 最適基準など多くの最適基準が用いられている．しかし，何を目的にするかで，計画を最適化する基準が変わることから，どの最適基準が一番よいかということは一概には言えない．そこで今回の研究では，応答曲面の観点からどの計画が最適であるかについての比較を行う．

2 応答曲面について

応答曲面法とは，予測される応答 y と予測変数 $x_1, \cdots, x_n$ の関係について，実験計画にしたがってデータを収集し，それを解析することで応答と量的な因子の関係を探索する一連の方法である．

$$
\begin{aligned}
y = {} & a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_nx_n \\
& + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \cdots + a_{nn}x_n^2 \\
& + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + \cdots + a_{n-1n}x_{n-1}x_n + \varepsilon
\end{aligned} \tag{1}
$$

ここで，ε は誤差と呼ばれる．a_ix_i は因子 x_i の 1 次の効果を，$a_{ii}x_i^2$ は因子 x_i の 2 次の効果を表し，$a_{ij}x_ix_j$ は因子 x_i と x_j の 1 次 × 1 次の交互作用を表している．応答曲面法において関数の形に特に制限はないが，一般的には 1 次項，2 次項，積項までである．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．(山田 [1]，轟 [2] 参照)

3 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いくつか用意しておき，その中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, I 最適基準などが有名であり，下記に説明する．

3.1 基本概念

X を計画行列とすると，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 σ と正方行列 X^TX の逆行列からなる．X, y は，実験点数を n とすると，次のように定義される．

$$
X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{bmatrix} \tag{2}
$$

$$
y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{3}
$$

この分散を小さくするには σ を小さくすることも重要であるが，$(X^TX)^{-1}$ 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 $(X^TX)^{-1}$ は近似モデルと実験点の座標だけで決定される．X^TX を実験点数 n で割ったものは情報行列と呼ばれている．

$$
M(\xi) = \frac{X^TX}{n} \tag{4}
$$

ξ は連続計画であり，n 個の異なる点での試行を持つならば，w_i を結合させた重みとして，次のように表すことができる．

$$
\xi = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ w_1 & w_2 & \cdots & w_n \end{bmatrix} \tag{5}
$$

(山田 [1] 参照)

4 最適基準の種類

4.1 A 最適基準

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り，情報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．

$$
\min[tr(M^{-1}(\xi))] \tag{6}
$$

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．(山田 [1] 参照)

4.2 D 最適基準

D 最適基準は情報行列の行列式を最大化する最適化基準である．

$$\max|M(\xi)| \tag{7}$$

変数の座標範囲が -1〜1 に正規化されている場合，D 最適性の優劣を表す D_{eff}(Defficiency) は次の式で表すことができる．

$$D_{eff} = \frac{(|X^T X|)^{1/p}}{n} \tag{8}$$

ここで，p は未知係数の数である．D_{eff} は最大値が 1 となり，大きいほど良い実験計画となる．

一般に逆行列の各成分にはその行列の行列式の逆数が掛けられる．D 最適基準は $(X^T X)$ 行列の行列式を最大化することで $(X^T X)^{-1}$ 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 最適基準は情報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．

D 最適計画は固有である必要はない．もし ξ_1^* と ξ_2^* が最適計画であるならば，計画

$$\xi^* = c\xi_1^* + (1-c)\xi_2^* \quad (0 \le c \le 1) \tag{9}$$

もまた D 最適である．(Atkinson and Donev[3] 参照)

4.3 I 最適基準

I 最適基準は予測値の分散をデータ領域内において平均した値を最小化する最適化基準である．

$f'(x)$ が因子の組み合わせを表す行ベクトルであるとき，次の基準を最小化する．

$$I = \int_R f'(x)(X^T X)^{-1} f(x) dx = tr[(X^T X)^{-1} M] \tag{10}$$

この式で，

$$M = \int_R f(x) f'(x) dx \tag{11}$$

は計画に依存しない情報行列である．(SAS[4] 参照)

5 R での実行例

5.1 手段

R のパッケージで，一部実施要因計画を生成する AlgDesign を使用する．具体的にはまず，AlgDesign の中にある関数 gen.factorial を使用して完全要因計画 () を生成する．その後，関数 optFederov() に結果を渡し，A, D, I 最適計画を作成する．(Web[5] 参照)

5.2 実行結果

計画の水準をそれぞれ５，６，４とする．

```
> levels.design=c(5,6,4)
```

完全要因計画を作成する

引数

levels: 変数の水準のベクトル
varNames: 変数の名前

```
> f.design<-gen.factorial(levels=levels.design,
  varNames=c("A","B","C"))
```

D 最適計画を作成する

引数

data: 候補リスト

nTrials: 最終的な計画の試行回数

evaluateI: 他の基準に加えて，I を評価して，記録するかどうか

criterion: どの基準か (A，D，I)

```
> fract.designD<-optFederov(data=f.design,nTrials=
sum(levels.design),evaluateI=TRUE,criterion="D")
```

値

D: 一般化された分散の k 乗根

A: 平均係数の分散

I: X 上の平均予測の分散

Ge: X 上のミニマックス正規化分散

Dea: 近似理論計画のための D 効率の下方限界

design: 計画

rows: 計画の行番号の数値ベクトル

```
> fract.designD
$D$
[1] 5.012749

$A$
[1] 0.3586167

$I$
[1] 2.71328

$Ge$
[1] 0.886

$Dea$
[1] 0.879

$design$
     A  B  C
1   -2 -5 -3
5    2 -5 -3
6   -2 -3 -3
10   2 -3 -3
25   2  3 -3
26  -2  5 -3
30   2  5 -3
56  -2  5 -1
91  -2 -5  3
95   2 -5  3
96  -2 -3  3
100  2 -3  3
116 -2  5  3
119  1  5  3
120  2  5  3

$rows$
 [1]   1   5   6  10  25  26  30  56
      91  95  96 100 116 119 120
```

6 シミュレーション

6.1 解析方法

３つの水準でのフルの行列を作り，その行列をランダムに並び替え，指定した計画の数と基準で最適計画を作成する．作成した最適計画の応答曲面を求め，その推定値を取り出し，指定した繰り返し回数での平均と標準偏差を求める．そして，３つ (１次項、２次項、積項) の標準偏差の平均を総合の値として比較する．総合の値を比較するにあたってそれぞれの項に掛ける係数は，１次項が２次項，積項の影響を受けないように 1，２次項，積項は順に 0.5，0.1 とする．水準数は，応答曲面で２次項まで考慮することと実際的な利用から，３水準から５水準の範囲で検討した．なお，応答曲面を計算する際，２水準しか登場しない場合など全てを推定できない場合があることから，計算を行った後，次元数をチェックし，正しい次元に満たない場合はエラーとして，別に記録するようにした．そのエラーの数が繰り返しの回数の 10 %に満たない場合のみ標準偏差を採用した．そして，２つ以上の基準でエラーが起こらない範囲で，水準と計画の数を変化させ，繰り返し回数を 100 回として解析を行った．

6.2 解析手順

プログラムの説明を手順で示す．

手順１

AlgDesign パッケージを呼び出し，使用する変数の初期化をする．

手順２

指定した水準での完全要因計画を作成し，計画の数と同じ数の一様乱数を生成する．その一様乱数を元に計画行列の行をランダムに並び替え，指定した基準の最適計画を作成する．作成した最適計画とその行の数を取り出す．

手順３

最適計画の行の数まで１次項，２次項，積項の計算を繰り返す．さらに，最適計画の行の数までそれぞれの項に係数を掛けたものを足し，さらに平均 0，標準偏差 0.05 の正規乱数のベクトルを誤差項として足す．

$$
\begin{aligned}
y = {} & 1 \times x_1 + 1 \times x_2 + 1 \times x_3 \\
& +0.5 \times x_1^2 + 0.5 \times x_2^2 + 0.5 \times x_3^2 \\
& +0.1 \times x_1 x_2 + 0.1 \times x_1 x_3 + 0.1 \times x_2 x_3 \\
& +rnorm(1, 0, 0.05) \qquad (12)
\end{aligned}
$$

手順４

応答曲面を計算し，推定値の次元数を取り出す．もし次元数が正しい場合はそれぞれの項の推定値を取り出し，それ以外ならばエラーの数として記録する．手順２～手順４の作業を指定した回数分繰り返す．

手順５

それぞれの項の推定値の平均と標準偏差を求める．さらに，項ごとの標準偏差の平均を求める．繰り返し回数，水準，初期値，基準，計画の数，係数のパラメータを指定し，エラーの数が繰り返しの回数の 10 %に満たない場合のみ結果として採用する．

6.3 ３つの水準が全て同じ場合

水準が (3,3,3) の場合，計画の数が 12 以下だと２つ以上の基準でエラーが出る．また，26 以上だと D, A, I の結果が同じになる．計画の数は３置きで解析を行った．なお，計画の数の間の取り方として，半分より小さい場合は採用しなかった．(数の間が５の場合，3 は採用するが，2 は採用しないで，7 で解析を行った．)

・水準が (3,3,3) の場合

表１ 水準が (3,3,3) での３つの基準の比較 (縦列:計画の数)

	D	A	I	ベスト
13	0.0285	0.0276	0.0268	I
16	0.0230	0.0230	0.0225	I
19	0.0195	0.0192	0.0196	A
22	0.0168	0.0170	0.0170	D
25	0.0167	0.01651	0.01650	I

D が１個，A が１個，I が３個で，水準が (3,3,3) では I が最もよくなる傾向がある．

３つの水準が全て同じ場合，ベストの数は次のようになる．

表２ ３つの水準が全て同じ時のベストの数の比較

	D	A	I
(3,3,3)	1	1	3
(4,4,4)	3	4	3
(5,5,5)	5	5	2

6.4 ２つの水準が同じ場合

２つの水準が同じ場合，ベストの数は次のようになる．

表３ ２つの水準が同じ時のベストの数の比較

	D	A	I
(3,3,4)	2	0	3
(3,3,5)	2	2	3
(4,4,3)	5	0	2
(4,4,5)	3	1	4
(5,5,3)	4	0	2
(5,5,4)	4	1	2

6.5 ３つの水準が全て異なる場合

水準が (3,4,5) の場合，計画の数が 20 以下だと２つ以上の基準でエラーが出る．また，60 だと D, A, I の結果が同じになる．計画の数は５置きで解析を行った．NA はエラーが出て，３つの項の標準偏差の平均が出なかったものである．

・水準が (3,4,5) の場合

表 4 水準が (3,4,5) での 3 つの基準の比較 (縦列:計画の数)

	D	A	I	ベスト
21	0.01271	NA	0.01219	I
25	0.00853	NA	0.00884	D
30	0.00798	NA	0.00793	I
35	0.00747	NA	0.00715	I
40	0.00637	0.00834	0.00629	I
45	0.00602	0.00694	0.00620	D
50	0.00551	0.00594	0.00552	D
55	0.00541	0.00528	0.00550	A
59	0.00529	0.00526	0.00527	A

D が 3 個，A が 2 個，I が 4 個で，水準が (3,4,5) では I が最もよくなる傾向がある．

6.6 考察

水準の与え方と基準の種類との関係は以下のようになる．重み付き平均は，D だと 9/27+20/40+3/9=1.17 が計画 1 回あたりの平均となる．

表 5 水準の与え方とベストの数との比較

	D	A	I
3 つ全て同じ	9	10	8
2 つが同じ	20	4	16
3 つ全て異なる	3	2	4
総計	32	16	28
重み付き平均	1.17	0.69	1.14

表 5 より，3 つの水準が全て同じ場合は A 最適が最もよくなり，2 つの水準が同じ場合は D 最適が最もよくなり，3 つの水準が全て異なる場合は I 最適が最もよくなることが分かった．また，総計と重み付き平均は D 最適が最も高くなり，全体としては，D 最適が最もよくなるということが分かった．

次に，項ごとの標準偏差の平均の値でのベストの数と基準の種類との関係は以下のようになる．

・3 つの水準が全て同じ場合

表 6 3 つの水準が全て同じ時の項ごとのベスト数比較

	D	A	I
1 次項	11	11	5
2 次項	11	7	9
積項	9	9	9
総計	31	27	23

総計は，表 5 では A 最適が最もよくなったが，個別にみた表 6 では D 最適が最もよくなった．これは，A 最適が最もよくはならなくときでも，それに近い値を出していることが要因として考えられる．

項ごとの水準の与え方と基準の種類との関係は以下のようになる．重み付き平均は，D だと 31/81+51.5/120+9/27=1.15 となる．

表 7 項ごとの水準の与え方とベストの数との比較

	D	A	I
3 つ全て同じ	31	27	23
2 つが同じ	51.5	23.5	45
3 つ全て異なる	9	6	12
1 次項	31.5	24.5	20
2 次項	35	11	30
積項	25	21	30
総計	91.5	56.5	80
重み付き平均	1.15	0.75	1.10

総計としては，表 5 でみても，表 7 でも D 最適が最もよくなった．よって，応答曲面の観点から考えると D 最適基準が最も適していると考えられる．解析を行う前は，A 最適が元々応答曲面を意識した計画であることから，A 最適が最もよくなるのではないかと考えられたが，実際に解析を行ってみると D 最適が最もよくなり自らの予想とは反した結果になった．

基準 A は，他の 2 つの基準 D, I と比べて少ない計画の数ではエラーが出やすく，若干劣るということが分かった．解析を行うにあたって，水準を増やすと，比較をするのに最低限必要な計画の数が増えてしまう傾向がある．また計画の数が多いと，誤差は少なくなる傾向がある．よって，水準を増やさないほうが計画の数は少なくて済むが，水準を減らすと誤差が大きくなるという問題がある．また逆に水準が多いと，水準が少ない時と同じくらいの誤差になるのに計画の数が多くなってしまう．(例えば，水準が (3,3,5) の時に計画の数が 19 で済んだのが，水準が (4,4,4) の時に 55 必要になる．) よって，解析を行う人にとっての誤差の許容範囲により，水準と計画の数の決定の仕方が変わってくる．

7 おわりに

本研究を通して，計算機支援の実験計画である最適計画についてある程度理解できたと思う．最適計画の方法については，日本語の文献が少なく，英語の文献を読むところから始まったこともあり，理論の学習に多くの時間を費やしてしまったところがあった．また，解析基準の種類にある，G 最適基準と Q 最適基準は計算コストがかかるため取り上げられなかったのは残念である．

参考文献

[1] 山田秀: 実験計画法，日科技連，2004.

[2] 轟章: 応答曲面法，http://todoroki.arrow.jp/response/responsesurface.pdf

[3] A.C.Atkinson,A.N.Donev: Optimum Experimental Designs，Oxford Science Publications，1992.

[4] JMP10 実験計画法 (DOE) ガイド，SAS，2012.

[5] AlgDesign R：http://rss.acs.unt.edu/Rdoc/library/AlgDesign/html/00Index.html