

Title	最適条件を求める手法
Sub Title	Methods for finding maxima
Author	小谷津, 孝明(Koyazu, Takaaki)
Publisher	慶應義塾大学大学院社会学研究科
Publication year	1962
Jtitle	慶應義塾大学大学院社会学研究科紀要：社会学心理学教育学 (Studies in sociology, psychology and education). No.1 (1962. ) ,p.21- 35
JaLC DOI	
Abstract	
Notes	論文
Genre	Departmental Bulletin Paper
URL	<a href="https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=AN0006957X-00000001-0021">https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=AN0006957X-00000001-0021</a>

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

# 最適条件を求める手法

Methods for Finding Maxima

小谷 津 孝 明

Takaaki Koyazu

## 最適条件を求める手法

心理学においては、定量的或は定性的手段を通じて広義の行動乃至は反応を、有機体が置かれる場・刺激条件の函数として追求することが一つの目的とされる。例えば、仮現運動視実験において、特定時相における運動印象の特性値  $\varphi$  が、用いられる二光点刺激の強度  $i$ 、提示時間を内包した提示間隔  $g$ 、二点間距離  $S$  の或る函数  $\varphi = f_0 \left( \frac{S}{ig} \right)$  として追求されたことは、Korte の法則として良く知られている処であり、一般的には、刺激条件と反応との間の対応関係—函数形  $f_0$ —の追求が問題とされている。

一方、産業分野にあっては、例えば、冶金の際の合金の強度が原鉄の含有量  $g$ 、炉温度  $F$ 、焼入時間  $T$  等により影響されることが予測される場合、これらの条件—変数—をどの値に決定すれば最も強い合金が得られるか、即ち強度という特性値に影響を与える複数ケの条件の最も適当な組合せを如何に決定すべきかが当面の問題であって、函数形  $f(g, F, T)$  の数学的記述そのものは究極の問題ではない場合がある。斯かる事態は、産業（労働）心理領域においても見出される。例えば vigilance task における照明の最適条件、流れ作業における belt-conveyer の速度条件、計器読取に関するパネル角度及び配置の最適条件等、一度決定された条件にその後の作業が全て依存し

てしまう場合には、斯様な条件の最適組合せに対して相当な考慮が払われて然るべきであろう。

倍、この際もう一つの重要な問題が同時に処理されねばならない。それは、反応を代表する特性値の問題である。dial-reading を例にとれば、特性値を正読（又は誤読）率にとる時、これを最大（又は最小）にする条件の組合せを追求すれば充分である様に見えるが、人間の作業行動の持続性を考えると特性値に対して疲労度を考慮する必要が起るなど、特性値そのものの定量化が問題となってくる訳である。ここでは一応特性値はきちんと定量化され得たものとして扱い、それを最大（最小）にするような最適条件の組合せを求める手法を実験計画の立場から眺めてみようと思う。

### I 要因計画法の適用

先づ考えられる手法は、特性値に関係をもちそのような因子  $(x_1, x_2, \dots, x_1, \dots, x_k)$  水準の全ゆる組合せを作り夫々に対する実験結果の特性値のうち、最大なものを与える組合せを選ぶことである。これを2因子  $(x_1$  については5水準、 $x_2$  については4水準) の場合について示すと Fig. 1 のような場合で  $5 \times 4 = 20$  個の実験点のうちで最大の特性値を与えた実験点を最適条件の組合せとして選ぶものであって従来要因計画法 (Factorial Design) の名で呼ばれた手法であることは言を待たぬ。

この方法は、明らかに最適点  $P_m$  (最適組合せを空間中の一点として表わした点) を直接求めん

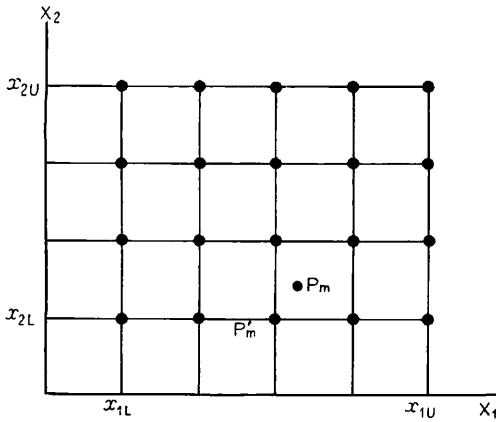


Fig. 1

とするものではなく、むしろ $P_m$ を充分内包するであろうような $X_1, X_2$ の範囲 $x_{1U} \sim x_{1L}, x_{2U} \sim x_{2L}$ を経験的に予測し、そこに適当な水準間隔の網の目を張って実験を行い $P_m$ に最も近似する点 $P'_m$ を求めんとするものである。明らかにこの方法には、

1. 真の最適点 $P_m$ が、作られたデザインの中になく、即ち、 $P_m$ からずっと離れた領域で実験が行われてしまう可能性がある。
2. 実験領域が
  - a. 狭すぎると、結果の特性値がみな同程度の値となり、どれが $P'_m$ であるか判定が困難となり、目こぼしをする。
  - b. 広すぎると、實際上因子水準の間隔を、そう細かくとる訳にもいかないので、 $P'_m$ の $P_m$ に対する近似度が悪くなる。
3.  $P_m$ の推定精度を良くしようとしたり、因子の数が多いと、実験のサイズが膨大となる(実験のサイズは因子の数を $k$ 、水準を $n$ 段階にとると $n^k$ である)。

等の欠陥が存在する。

II 因子水準逐次変化法

これらの欠陥を補うべく、Friedman (1947)等は、因子水準逐次変化法 (Sequential Design) とも云うべき方法を提唱した。これによると、

1. 予め因子水準の最適組合せを技術的、経験的知見から推定し、それらを、反応の特性値 $y_1$ に対して重要な影響をもつ因子から順に並べる $\rightarrow P_{m1}(X_{11}, X_{21} \dots X_{i1} \dots X_{k1})$ 。

2. そのうち最初の因子水準 $X_{i1}$ を最低3段階以上変化させ、他の因子は全て頭初的水準に固定したまゝという組合せ

$$(X_{11} X_{21} \dots X_{i1} \dots X_{k1})$$

$$(X_{12} X_{21} \dots \dots \dots X_{k1})$$

$$(X_{13} X_{21} \dots \dots \dots X_{k1})$$

で実験を行い夫々に対する反応 $y$ を求め

3. それらが、この変化域内での最適点を囲んでいるものなら、その位置は反応群 $y'_s$ に抛物線

$$Y = \alpha_0 + \alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_1^2$$

を当て嵌めることにより推定の道が開けるといように考える。即ち、係数 $\alpha_2$ の正負に従って $Y$ は極小(又は極大)点を持つから、その時の $X_1$ 軸上の座標 $\hat{x}_1$ を考えればよい訳で

$$\frac{dY}{dX_1} = 2\alpha_2 X_1 + \alpha_1 = 0 \text{ から}$$

$$\hat{x}_1 = -\frac{\alpha_1}{2\alpha_2} \text{ が与えられる。}$$

4. 次に、 $X_1$ は $\hat{x}_1$ に、( $X_3, X_4 \dots X_k$ )は頭初的水準( $X_{31}, X_{41} \dots X_{k1}$ )に固定し、前同様な手続で $X_2$ のみ変化させて $\hat{x}_2$ を求める。
5. これを全ての因子について行い、最適点を得る為の組合せとして $P_{m2}(\hat{x}_1, \hat{x}_2 \dots \hat{x}_1 \dots \hat{x}_k)$ を得る。

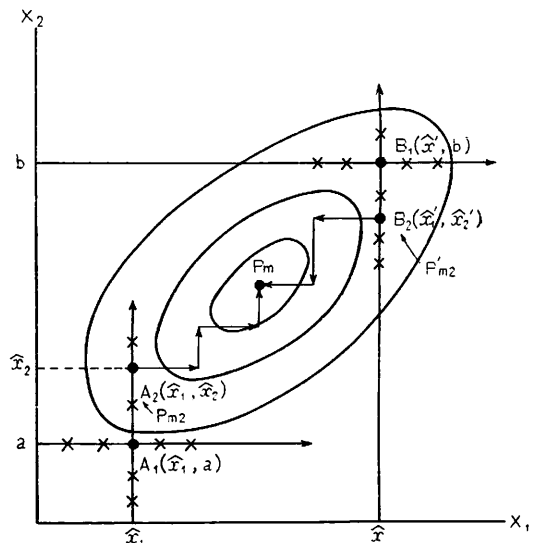


Fig. 2

格、これが果して正しい最適組合せであるか否かは、次の様な2因子の例 Fig. 2 から批判されるであろう。図は最適点  $P_m$  を中心に、それから離れる程、特性値  $y$  が小さく(又は大きく)なる様な場合を考え、等しい値を示す因子水準組合せ同志を地理図における等高線と同様に表したものであるが、 $x_1$  を求める為に、最初  $x_{21}$  を  $x_2$  軸上の  $a$  水準にとった場合と  $b$  水準にとった場合とでは最適点として選ばれる点が、まるで異ってくるばかりか、真の最適点からはおよそ離れた点をとってしまうという奇妙な事態にぶつかる。

即ち、上述の方法は、最初  $x_{21}$  を  $a$  水準に固定し  $x_1$  の最適水準を求めると点  $A_1(\hat{x}_1, a)$  が定まるから、次に  $\hat{x}_1$  は  $x_1$  に固定し、 $x_2$  の水準を  $a$  の周囲で変化させることにより、最大の  $y$  が得られる点  $A_2(\hat{x}_1, \hat{x}_2)$  を求め、これをもって最適点  $P_{m2}$  とする訳で、もし  $x_{21}$  が最初  $b$  水準に選ばれた場合には、同様な過程を経て  $B_2$  点が最適点と決定されてしまうことになり、矛盾するばかりか真の最適点  $P_m$  からひどく離れた偽の点を掴んでしまうことがある。

6. これを防ぐ為に Friedman 等は、次のステップとして、頭初の推定最適点  $P_{m1}(x_{11}, x_{21}, \dots, x_{k1})$  と  $P_{m2}(x_1, x_2, \dots, x_k)$  とを比較し、両者が近接しているか、又は、両者に対する実験結果—特性値—が改善されていなかった場合には、 $P_{m2}$  は  $P_{m1}$  に対して no-gain と結論し、実験を打ち切るが、逆の場合には、 $P_{m2}$  を新たな出発点として前同様な手順で  $P_{m3}(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_k)$  を追求する。

7. このような手続を反復してゆくことにより遂には最適点  $P_m$  に達するという操作を加え更に、

8. 実験点の移動に関して、例えば、3 ラウンドでは、最初の2 ラウンドの結果から定義されるベクトルに沿ってこれを移動し、その歩巾については、 $(\hat{x}_i - \hat{x}_i)$  に比例するようにとる。

といった方法を改善策として考えたが、その場合のベクトルが常に  $P_m$  に向って最短距離を指向しているという保証はない。そこで、ある因子の最

適水準を決定するのに残余の諸因子水準を固定するといった static な操作を止め、反応を、それに影響を持つ全ての因子水準  $x_i$  のある函数、

$$y = \phi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k) + z$$

として考え、常に  $x_i$  の変化は反応  $y$  の増し分を最大\*1 にする様、全体として行うことを 1951 年に Box 及び Wilson が主張した。彼等の方法は最大傾斜線登頂法 (Method of Steepest Ascent) と呼ばれる。

### III Method of Steepest Ascent

特性値  $y$  を、それを規定する諸因子水準  $X$  の函数、 $y_v = \phi(x_{1v}, x_{2v}, \dots, x_{iv}, \dots, x_{kv}) + z_v$  (1)

但し、 $x_{iv}$ :  $v$  番目の観察における  $i$  番目の element の水準、 $z_v$ : 誤差項。

として考えた時、Box 等の表現によれば、 $\phi$  を Response Surface と呼ぶ。今この  $\phi$  に対する近似式として、 $P_m$  に近接していない実験領域では、 $y$  が  $x$  の変化に対して、ほぼ直線的に増加するものと考え、一次の多項式を採用し、 $P_m$  の近辺においては、 $\phi$  が  $P_m$  を最大点とする曲面を構成すると考え、二次の多項式を採用した。即ち始めの幾ラウンドかにおいては

$$y_v = \sum_{i=0}^k \alpha_i x_{iv} + z_v^{*2} \quad (2)$$

を実験結果に当て嵌め、当て嵌りが悪くなったら、

$$y_v = \alpha_0 x_{0v} + \sum_{i=1}^k \sum_{w=1}^2 \alpha_{i,w} x_{iv}^w + \sum_{i \neq j} \alpha_{i,j} x_{iv} x_{jv} + z_v \quad (3)$$

を用い、 $\frac{\partial y_v}{\partial x_{iv}} = 0$  を  $i=1 \sim k$  の全てについて計算

し、これらを満足するように解けば  $y_v$  の最大値  $P_m$  が求まるという順である。ここにおいて、(2) 及び (3) 式の当て嵌りの検定と、未知数  $\alpha$  の推定が問題となろう。

#### (A) 一次多項式における係数 $\alpha_i$ の推定

[註] \*1 特性値として、誤読率、生産費、疲労等といったものを考える場合には、 $y$  が最小になる点を求める訳で、その場合には  $-y$  を改めて特性値として考えれば、一般には  $y$  を最大にするといっても良からう。

\*2 但し  $x_{iv}$  はダミー変数 (dummy variable) で常に 1。

適当な実験計画の下で  $x_{iv}$  の適当な組合せに対する測定値  $y_v$  が必要な数だけ得られておれば、一次の多項式によって近似される  $\phi$  のパラメータ  $\alpha_i$  の推定は容易である。即ち、測定値  $y_v$  の列ベクトルを  $Y$ 、変数  $x_{iv}$  を要素とするマトリクスの転置行列を  $X$ 、係数  $\alpha_i$  の列ベクトルを  $A$ 、誤差項の列ベクトルを  $Z$  で表せば、(2) 式は、

$$Y = XA + Z \quad (4)$$

と書けるが、これから  $(k+1)$  個の  $\alpha$  の最小自乗解  $\hat{\alpha}$  を求めると (Appendix 参照)、

$$\hat{A} = (X'X)^{-1} \cdot X'Y \quad (5a)$$

即ち

$$[\hat{\alpha}_i] = \{[x_{iv}][x_{vj}]\}^{-1}[x_{iv}][y_v] \quad (5b)$$

ところで

$$[\sum_v x_{iv}x_{vj}]^{-1} = [h_{ij}] = H \quad (6)$$

を定義すれば  $\hat{A}$  の各要素は

$$\hat{\alpha}_i = \sum_j h_{ij} (\sum_v x_{jv} y_v)^* \quad (7)$$

で与えられる。

但、(6) 式において  $x_{iv}$  が相互に独立 (orthogonal) であれば、

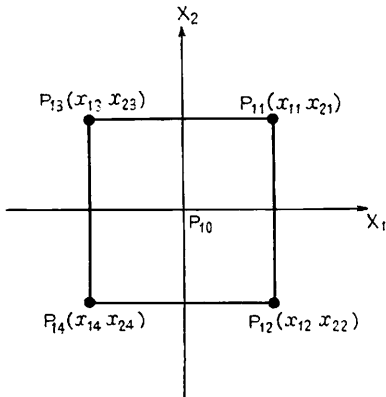


Fig. 3

$$\left. \begin{aligned} \sum_{v,i \neq j} x_{iv}x_{vj} &= 0 \\ \therefore \sum_{i \neq j} h_{ij} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

従って、(7) 式は

$$\hat{\alpha}_i = h_{ij} \sum_v x_{jv} y_v \quad (9)$$

となり、 $\alpha_i$  の最小自乗解が求った訳である。

ところで、 $\alpha_i$  を推定する為に必要な測定値  $y_v$

\*3  $j$  も  $i$  も同種類の suffix.

を求める為の「適当な実験計画」とは、2 因子を 2 水準で変化させる場合を例にとると、Fig. 3 に示すように、 $P_{11} \sim P_{14}$  (但し、 $P_{1v}$  の suffix は第 1 ラウンド  $v$  番目の実験であることを示す) の  $2^2=4$  個の実験点 (各点は、2 因子水準の組合せを示す) を考えた方が良い。その場合、 $P_{10}$  を実験の中心点という。もし、この  $P_{10}$  に相当する実験を追加すれば、その観測値  $y$  は、誤差を無視すれば、 $\alpha_0$  を推定する為の情報を提供してくれることは (2) 式において、 $x_{iv}=0$  ( $i \neq 0$ ) とおけば、容易に解るのであろう。

但、各因子水準が素量 (original value) ( $x_{iv}$ ) で表わされずに、次のように簡略化された値 (coded value)

Table I

実験点	因子水準			測定値
	$x_{0v}$	$x_{1v}$	$x_{2v}$	
$P_{11}$	1	1	1	$y_1$
$P_{12}$	1	1	-1	$y_2$
$P_{13}$	1	-1	1	$y_3$
$P_{14}$	1	-1	-1	$y_4$
matrix	X			Y

$$x_{iv} = \frac{2(x_{iv} - \bar{x}_i)}{\text{因子水準のステップ}} \quad (10)$$

で定義されている時には、 $x_{iv}$  は 1 か -1 かで表わされるから、実験点及び測定値との関係は、ダミー変数  $x_{0v}$  を併記すると Table I に示すようになる。同表中央の列はマトリクス X に他ならぬから、この場合には

$$X'X = \begin{bmatrix} 4 & & \\ & 4 & \\ & & 4 \end{bmatrix} \quad (11)$$

従って、(6) 式より

$$H = \begin{bmatrix} 1/4 & & \\ & 1/4 & \\ & & 1/4 \end{bmatrix} \quad (12)$$

はいずれも  $3 \times 3$  の対角行列となり、一次係数  $\alpha_i$  の推定値は、(9) 式から

$$\hat{\alpha}_i = 1/4 \sum_v x_{jv} y_v \quad (13)$$

で得られることになる。これは又、Table I におけるマトリクス X が、丁度  $2^2$  のサイズの直交配列表であることを知っていれば、測定値  $y_v$  に

特定の因子水準の coded value の符号を付けた値が、その因子に対する一次係数を決定する為の情報を与えてくれることが容易に理解出来る。即ち、例えば因子1に対しては

$$\hat{\alpha}_1 = (y_1 + y_2 - y_3 - y_4) / 4 \quad (14)$$

が、その係数の推定値である。ここにおいて、分母の4は、 $\alpha_1$ を推定する為に用いられるところの相互に独立な情報の数で、丁度  $H^{-1} = X'X$  の対角線上の要素に当たっている。

Table II

実験点 $P_{1v}$	因子水準 $x_{0v}$	$x_{1v}$	$x_{2v}$	$x_{3v}$	測定値 $y_v$
$P_{11}$	1	-1	-1	-1	$y_1$
$P_{12}$	1	1	-1	-1	$y_2$
$P_{13}$	1	-1	1	-1	$y_3$
$P_{14}$	1	1	1	-1	$y_4$
$P_{15}$	1	-1	-1	1	$y_5$
$P_{16}$	1	1	-1	1	$y_6$
$P_{17}$	1	-1	1	1	$y_7$
$P_{18}$	1	1	1	1	$y_8$
matrix	Y				X

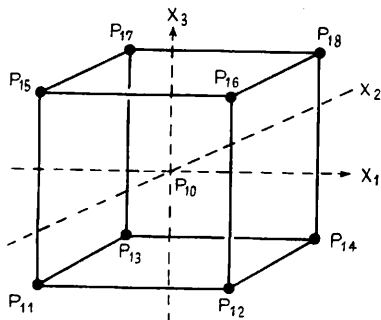


Fig. 4

他方、3因子2水準の場合の実験点と、因子水準のマトリクスXを示せば、Fig. 4, Table IIのようである。この場合

$$H = (X'X)^{-1} = \left[ \begin{matrix} 1/8 & 1/8 & 1/8 & 1/8 \end{matrix} \right] \quad (15)$$

は4×4の対角行列となり、因子iに対する一次係数は

$$\hat{\alpha}_i = 1/8 \sum x_{iv} y_v \quad (16)$$

例えば、因子2に対しては

$$\hat{\alpha}_2 = (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_8) / 8 \quad (17)$$

が、その係数の推定値となるであろう。

尚、この間の事情は直交配列の立場からは次のように理解されるであろう。今、個々の測定値 $y_v$ の構造を、2因子の場合はTable I及び(2)式に従って展開すると、

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + z_1 \\ y_2 &= \alpha_0 + \alpha_1 - \alpha_2 + z_2 \\ y_3 &= \alpha_0 - \alpha_1 + \alpha_2 + z_3 \\ y_4 &= \alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2 + z_4 \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

従って係数 $\alpha$ の推定値は、(18)式を解くことによって(誤差 $z_v$ が無視されうるなら)

$$\left. \begin{aligned} \hat{\alpha}_0 &= (y_1 + y_2 + y_3 + y_4) / 4 \\ \hat{\alpha}_1 &= (y_1 + y_2 - y_3 - y_4) / 4 \\ \hat{\alpha}_2 &= (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) / 4 \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

で与えられるが、これら(19)式は(18)式を一々解かなくとも、直交配列表の性質によりTable Iから直ちに書き下せるのである。即ち、 $x_2$ に対する係数の推定値に対しては、同表中の因子水準 $x_{2v}$ の列の符号を測定値に乗じたものを、推定に当って動員される相互に独立な情報—この場合は実測値—の数で割ってやれば良いのである。こうすれば、 $\alpha_0, \alpha_1$ 等の係数が夫々、+が2個、-が2個となって打ち消し合い、余計な係数が $\alpha_2$ の推定に混入して来ることがないのである。

3因子2水準の場合にも同様にTable IIから

$$\left. \begin{aligned} \hat{\alpha}_0 &= (y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8) / 8 \\ \hat{\alpha}_1 &= (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8) / 8 \\ \hat{\alpha}_2 &= (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_8) / 8 \\ \hat{\alpha}_3 &= (-y_1 - y_2 - y_3 - y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8) / 8 \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

が、夫々の因子に対する一次係数の推定値となる。

儲、このようにして、一次係数が推定された後では、残された問題は、実験値 $y_v$ が構成するResponse Surface  $\phi$ が真に $x_{iv}$ の一次の多項式によって表され得るか否かを検討すること、即ち最小自乗法的に決定された理論直線にどの程度実験値が当て嵌っているかの検定—直線性の検定—である。

(B) 当て嵌りの検定

Response Surface  $\phi$ が $x_{iv}$ の一次の多項式によって表わされるか否かを検討する為には、最小

自乗法的に決定された理論値  $\hat{y}_v$  からの逸脱の測度として  $\sum(y_v - \hat{y}_v)^2$  を考え 反覆実験による誤差分散との比が F 分布を為すことを用いられよう。  
ところが (2) 式のままでは、同一条件下での反覆実験を示す suffix が付いていないことから明らかなように、F-ratio の誤差項の推定が不可能である\*4。そこで、今、反覆を示す suffix を t (=1~T) で表し、 $y_v$  の構造を

$$y_{vt} = \mu_v + Z_{vt} \tag{21a}$$

(但し、 $Z_{vt}$  は、 $N(0, \sigma_v^2)$  で互に独立。  
 $\mu_v$  と  $Z_{vt}$  とは独立。)

と考え、それに対する確率模型として

$$Y_{vt} = \mu_v + Z_{vt} \tag{21b}$$

を与えれば

$f = NT$  の  $\sigma^2\chi^2$  分布

$$\begin{aligned} &\sum_v \sum_t (Y_{vt} - \mu_v)^2 \\ &\quad \text{独立} \\ &f = N \text{ の } \sigma^2\chi^2 \text{ 分布} \quad f = N(T-1) \text{ の } \sigma^2\chi^2 \text{ 分布} \\ &= T \sum_v (\bar{Y}_v - \mu_v)^2 + \sum_v \sum_t (Y_{vt} - \bar{Y}_v)^2 \end{aligned} \tag{22}$$

において、左辺が自由度  $f = NT$  の  $\sigma^2\chi^2$  分布、右辺 1 第項が  $f = N$ 、2 項が  $f = N(T-1)$  の  $\sigma^2\chi^2$  分布をなすことは、 $\chi^2$  分布の加法性から明らかである。従って誤差項としては、

$$U^2 = \frac{1}{N(T-1)} \sum_v \sum_t (Y_{vt} - \bar{Y}_v)^2 \tag{23}$$

をとれば、 $U^2$  が  $\sigma^2$  の不偏推定値に当る。

一方、(22) 式右辺第 1 項は、 $Y_v$  の  $x_{iv}$  への経験的回帰直線

$$\hat{y}_v = \sum_i \hat{\alpha}_i x_{iv} \tag{24}$$

に相当する確率変数を  $\hat{Y}_v$  で表せば

$$\begin{aligned} T \sum_v (\bar{Y}_v - \mu_v)^2 &= T \sum_v \{(\bar{Y}_v - \hat{Y}_v) + (\hat{Y}_v - \mu_v)\}^2 \\ &= T \sum_v \{(\bar{Y}_v - \hat{Y}_v) + (\sum_i \hat{\alpha}_i x_{iv} - \sum_i a_i x_{iv})\}^2 \\ &= T \sum_v (\bar{Y}_v - \hat{Y}_v)^2 + T \sum_v \{\sum_i (\alpha_i - a_i) x_{iv}\}^2 \end{aligned} \tag{25a}$$

と分解されるが故に、(25a) 式右辺の第 1 項は、自由度  $(N-k-1)$ 、第 2 項は  $(k+1)$  の  $\sigma^2\chi^2$  分

\*4 簡便には  $l'$  回の中心点実験の繰り返しを行うことによって得られる反応値の散らばりの平方和は  $(l'-1)$  の自由度において実験誤差の測度を与えるであろう。

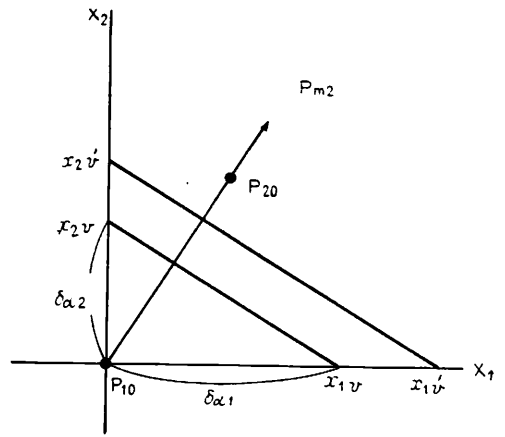


Fig. 5

布に従い、前者と (23) 式  $U^2$  の組合せの比から、それが自由度  $(N-k-1)$ 、 $N(T-1)$  の F 分布をなすことを用いて、Response Surface  $\phi$  の直線性の検定が可能となる訳である。実際の計算には、確率変数  $Y_{vt}$ 、 $\bar{Y}_v$  等の代りに  $y_{vt}$ 、 $\bar{y}_v$  等の実測値を用いるが故に、

$$\begin{aligned} &f = N-1 \text{ の } \sigma^2\chi^2 \text{ 分布} \quad f = N-k-1 \text{ の } \sigma^2\chi^2 \text{ 分布} \\ &T \sum_v (\bar{y}_v - \bar{y})^2 = T \sum_v (\bar{y}_v - \hat{y}_v)^2 \\ &f = k \text{ の } \sigma^2\chi^2 \text{ 分布} \\ &+ T \sum_v \{\sum_i (\hat{\alpha}_i - a_i) x_{iv}\}^2 \end{aligned} \tag{25b}$$

となることは勿論である。

尚、誤差項を得る為に  $T$  個の全実験を反覆することの手数を節約する為に、所謂、一部実施の方法が試みられている。

(c) 最大傾斜線登頂の方向

上記の検定法により、反応の特性値が実験誤差範囲内で刺激水準の線型函数として認められ得るかを検定したら、その結果如何により異ったステップを取らねばならぬ。

i) 一次多項式が当て嵌った場合

最初の実験結果に一次多項式が当て嵌ったということは、一再び 2 因子 2 水準の場合を例にとれば一反応値  $y_v$  が  $x_{1v}$ 、 $x_{2v}$  に対して、夫々の係数  $\alpha_1$ 、 $\alpha_2$  に相当する分だけ依存することを示すものであるから、Fig. 5 の様に  $X_1$ 、 $X_2$  両因子の関係を図示し、そこに増加傾向を示す  $y_v$  のみを取り上げれば、矢印 (これが  $P_m$  への最大傾斜線に他ならない) の様になり、 $x_{1v}$ 、 $\alpha_1$  の間には、

一般に

$$\frac{x_{iv}}{x_{jv}} = \frac{\hat{\alpha}_i}{\hat{\alpha}_j} \quad (26)$$

が成り立つことは、自明である。

諸、実験の目的は、反応特性値  $y$  を出来るだけ大きくすることにあるから、同図矢印方向に実験点を移動させる必要が起る。(P<sub>10</sub>→P<sub>20</sub> への移動)。それには、各因子の水準を (26) 式に従って、 $\hat{\alpha}_i$  に比例する様に決定すれば良い訳である。このことは、又次の様にも理解が可能である。即ち、当て嵌められた一次多項式 (24) において、次の実験点として反応  $y_v$  を最大にする様な  $x_{iv}$  の組合せが選ばれる為には

$$\frac{\partial y_v}{\partial x_{iv}} = \hat{\alpha}_i \quad (27)$$

から推察される様に、最大傾斜線上の  $x_i$  の変化は  $\hat{\alpha}_i$  に比例するのであろう。これで次の実験点への移動方向は決定されたが、次に移動距離を定めねばならない。今、最初の実験の中心点 P<sub>10</sub> ( $x_{10} x_{20} \dots x_{10} \dots x_{k0}$ ) を原点 (0, 0, ..., 0) と考え、次に移動すべき実験の中点を P<sub>20</sub> ( $x'_{10} x'_{20} \dots x'_{10} \dots x'_{k0}$ ) とすれば、P<sub>10</sub>→P<sub>20</sub> への移動距離は

$$S(P_{10}-P_{20}) = \sqrt{\sum_i^k (x'_{i0})^2} \quad (28)$$

で表わされるが、ここで、実験者が前もって  $S(P_{10}-P_{20})$  の大きさを決定したとすると、P<sub>20</sub> で得られるべき  $y_v$  を最大にする  $x'_{i0}$  の値は、

$$x'_{i0} = \xi \frac{\partial y_v}{\partial x_{iv}} = \xi \hat{\alpha}_i \quad (29)$$

但し、 $\xi$  は (28) 式を満足させる様な比例定数で

$$\xi = \frac{S(P_{10}-P_{20})}{\sqrt{\sum_i \hat{\alpha}_i^2}} \quad (30)$$

斯くして、 $\xi$  を適当に決定することにより、次の実験—P<sub>m</sub> に一步近ずいた実験点—へ移動するのである。

尚、この際、新たな実験点 P<sub>20</sub> に対しては、 $y'_0$  の予測が可能\*5 であるから、同点においては実験を P<sub>20</sub> だけに限って行い、実測値  $y'_0$  と予測値  $y'_0$  との比較から両者が殆んど一致していたら、再び実験点を移動 (即ち、 $\xi$  を大きく) して

測定し、又両者が明らかに離れていたら中止する。そして、ここで又新たに 2<sup>k</sup> 型の因子実験 (2<sup>2</sup>型については前述) を行い、再び一次多項式 (24) が充分当て嵌るようだったら、上述の方式に従って実験点を移動し、繰り返してテストを行う。

但し、2<sup>k</sup> 型因子実験の結果が一次多項式に fit していても、その場合の全ての係数  $\hat{\alpha}_i$  が非常に小さくなって来たら、それは、各因子水準の変化が反応特性値に影響を及ぼす程度が減少して来たこと、換言すれば、 $y$  の増大傾向に関して、一程の高原状態に達したものと見ることが出来るからその場合には、実験のデザインについて、じっくり検討を加え、そこが真の P<sub>m</sub> であるか否かを見究める必要が起る。

ii) 一次多項式が当て嵌らなかった場合

他方、因子実験の結果が一次式で近似出来ないことが判明したら、それは、Response Surface が二次以上の curvature を持つものと判断し、差し当り二次多項式 (3) 式の当て嵌めを考える。

(D) 二次多項式における係数  $\alpha$  の推定

係、二次多項式を、反応特性値  $y_v$  に当て嵌めようとなると、 $y_v$  を得る為の実験計画においては、因子水準  $x_i$  は一般的には、最低3段階にわたって変化されねばならぬ。

ところが、その際の実験のサイズは 3<sup>k</sup> となるから  $y_v$  に影響を持つ因子数が大なる場合には、実験の手数が膨大になるおそれがある。更に又、3<sup>k</sup> 型因子実験では、後述するように、各因子の二次係数  $\alpha_i$  の推定精度が低くなる。

これらの理由から、因子の数が2個の場合と3個場合或いはそれ以上の場合について別に眺めてみることにする。前者の場合には、二次式の当て嵌めに関する概略的理解と、そこに表れる曲面の性質の図示が、後者の場合には、実験のサイズを小さくする為の実験計画上の工夫が中心的話題となるであろう。

i) 2因子3水準実験における諸係数  $\alpha$  の推定

この場合には、実験のサイズは 3<sup>2</sup>=9 で、たいした手数でもないので普通の因子実験を行い (3)

\*5 (24) 式に新しい実験点における各因子水準のレベル及び推定された一次係数を代入すればよい。



式を最小自乗法的に当て嵌めることを先づ試みてみよう。その際の際験的回帰曲線としては

$$\hat{y}_v = \hat{\alpha}_0 x_{0v} + \sum_{i=1}^2 \sum_{w=1}^2 \hat{\alpha}_{iwx} \bar{x}_{iw} + \alpha_{1x2} x_{1v} x_{2v} \quad (31)$$

を考えれば良いわけで、今便宜上、 $x_{0v}, \bar{x}_{iw}, x_{1v} x_{2v}$ の構成するマトリクスを  $X$  夫々の水準に対する係数  $\alpha_{1w}, \alpha_{1x2}$  を要素とする列ベクトルを  $A$ 、即ち

$$X = \begin{pmatrix} x_{01} & x_{11} & x_{21} & x_{11}^2 & x_{21}^2 & x_{11} \times x_{21} \\ x_{02} & x_{12} & x_{22} & x_{12}^2 & x_{22}^2 & x_{12} \times x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{0v} & x_{1v} & x_{2v} & x_{1v}^2 & x_{2v}^2 & x_{1v} \times x_{2v} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{0N} & x_{1N} & x_{2N} & x_{1N}^2 & x_{2N}^2 & x_{1N} \times x_{2N} \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{01} \\ \alpha_{11} \\ \alpha_{21} \\ \alpha_{12} \\ \alpha_{22} \\ \alpha_{1 \times 2} \end{pmatrix} \quad (32)$$

で表現すれば、実験値  $y_v$  の構成するマトリクスは、 $Z$  を誤差項を要素とするマトリクスとして、

$$Y = XA + Z \quad (33)$$

で表されるから、各因子水準に対応する係数の最小自乗解は、一次多項式の係数を決定する際に用いた方法と、基本的にはまったく同じ過程を経て

$$A = (X'X)^{-1} X'Y \quad (34)$$

で与えられる筈である。

この時推定さるべき係数は6個であるから、もし2因子実験で一次多項式の係数を推定する際に用いた実験のサイズ  $2^2=4$  では、6個の係数全てを推定することは出来ない。然し、上の場合のように3水準で各因子を変化させるならば、実験のサイズは  $3^2=9$  であるから、9個の測定値からの情報があるわけで、6個全ての係数の推定値が充分に求められることになる。

ただ注意すべきは、(34)式を用いる場合には、(5a)式の場合と同じように、(8)式からくる制限事項のもとに、行列  $X$  が独立性 (orthogonality) を満していなければならぬから、coded value で表わされた  $X$  は、Table III 中央部に示

Table III

実験点	因子水準						測定値
	$x_{0v}$	$x_{1v}$	$x_{2v}$	$x_{1v}^2$	$x_{2v}^2$	$x_{1v} x_{2v}$	
$P_{21}$	1	1	1	1	1	1	$y_1$
$P_{22}$	1	1	0	1	-2	0	$y_2$
$P_{23}$	1	1	-1	1	1	-1	$y_3$
$P_{24}$	1	0	1	-2	1	0	$y_4$
$P_{25}$	1	0	0	-2	-2	0	$y_5$
$P_{26}$	1	0	-1	-2	1	0	$y_6$
$P_{27}$	1	-1	1	1	1	-1	$y_7$
$P_{28}$	1	-1	0	1	-2	0	$y_8$
$P_{29}$	1	-1	-1	1	1	1	$y_9$
mat- rix	X						Y

すような行列が考えられる。従って、この場合

$$X'Y = \begin{pmatrix} y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8 + y_9 \\ y_1 + y_2 + y_3 & -y_7 - y_8 - y_9 \\ y_1 & -y_3 + y_4 & -y_6 + y_7 & -y_9 \\ y_1 + y_2 + y_3 - 2y_4 - 2y_5 - 2y_6 + y_7 + y_8 + y_9 \\ y_1 - 2y_2 + y_3 + y_4 - 2y_5 + y_6 + y_7 - 2y_8 + y_9 \\ y_1 - & -y_3 & & -y_7 & +y_9 \end{pmatrix} \quad (35)$$

となるから、この列ベクトルの各要素を、そこに動員された情報の数で除してやれば良いわけである。ところで

$$H = (X'X)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & & & & & \\ & \frac{1}{6} & & & & \\ & & \frac{1}{6} & & & \\ & & & \frac{1}{18} & & \\ & & & & \frac{1}{18} & \\ & & & & & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (36)$$

が、その情報の逆数を要素とするマトリクスである筈であるから、(36)と(35)式の積で、諸係数の推定値が得られるというふうに考え易い。然しながら、これは部分的にしか正しくない。その理由は、マトリクス  $X$  が直交性を満している点が良いのだが、その4列及び5列の coded values が他列のそれのよりに (1, 0, -1) の形で記入されていないことにある。その影響は、(32)式右辺のマトリクスの4行及び5行の各要素の内容を見れば解るように、例えば  $\alpha_{12}$  の推定に当って情報を与えてくれる9つの実測値のうち、 $y_4, y_8, y_6$  の3個は重複して使われるという面に現れて来ている

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{01} &= (y_1+y_2+y_3+y_4+y_5+y_6+y_7+y_8+y_9)/9 \\ \alpha_{11} &= (y_1+y_2+y_3 \quad \quad \quad -y_7-y_8-y_9)/6 \\ \alpha_{21} &= (y_1 \quad -y_3+y_4 \quad \quad \quad -y_6+y_7 \quad -y_9)/6 \\ \alpha_{12} &= (y_1+y_2+y_3-2y_4-2y_5-2y_6+y_7+y_8+y_9)/6 \\ \alpha_{22} &= (y_1-2y_2+y_3+y_4-2y_5+y_6+y_7-2y_8+y_9)/6 \\ \alpha_{1 \times 2} &= (y_1 \quad -y_3 \quad \quad \quad -y_7 \quad \quad \quad +y_8) 4 \end{aligned} \right\} (37)$$

$$\left. \begin{aligned} V(\alpha_{01}) &= \{(1)^2+(1)^2+(1)^2+(1)^2+(1)^2+(1)^2+(1)^2+(1)^2+(1)^2\} \sigma^2/9^2 = 1/9 \sigma^2 \\ V(\alpha_{11}) &= \{(1)^2+(1)^2+(1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2+(-1)^2+(-1)^2\} \sigma^2/6^2 = 1/6 \sigma^2 \\ V(\alpha_{21}) &= \{(1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2+(1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2+(1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2\} \sigma^2/6^2 = 1/6 \sigma^2 \\ V(\alpha_{12}) &= \{(1)^2+(1)^2+(1)^2+(-2)^2+(-2)^2+(-2)^2+(1)^2+(1)^2+(1)^2\} \sigma^2/6^2 = 1/2 \sigma^2 \\ V(\alpha_{22}) &= \{(1)^2+(-2)^2+(1)^2+(1)^2+(-2)^2+(1)^2+(1)^2+(-2)^2+(1)^2\} \sigma^2/6^2 = 1/2 \sigma^2 \\ V(\alpha_{1 \times 2}) &= \{(1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2 \quad \quad \quad +(-1)^2\} \sigma^2/4^2 = 1/4 \sigma^2 \end{aligned} \right\} (38)$$

ゝる。このことは、 $\alpha_{12}$  の推定に際しての相互に独立な情報の数が  $(9-3)=6$  個に減ったことを示すものである\*6。 $\alpha_{22}$  についても、同じことが云える。このことを斟酌して、 $\alpha_{12}$  及び  $\alpha_{22}$  の推定においては、(35) 式のマトリクスの4列及び5列の要素を18でなく6で除してやらねばならぬ。従って、諸係数の推定値は、(37) 式のように計算する必要があるのである。

3因子、4因子……などの実験においても基本的には上のような過程を踏めばよいわけであるが、(37) 式の計算過程からも推察されるように、諸係数に対する分散は、(38) 式のように計算されるから2次係数の推定精度は他に較べて、いささか低くなってしまふ。

(D) 節で  $y_v$  を得る為の実験計画に工夫が必要であると述べた理由の一つは、実は、この点を指したのである。これについては、後述することにし次には、斯くして得られた、二次曲面の性質を幾何学何学的表現により理解したいと思う。

ii) 二次曲面の性質

説明の便宜上、やはり2因子の場合について述べると、i) で得られた各係数の推定値  $\alpha_{iw}$  を (3) 式に代入した (31) 式で表される二次多項式に実測値  $y_v$  が当て嵌められたならば、 $\hat{y}$  の極大点、即ち、 $P_m$  (因子水準の最適組合せを表わす点) は、 $\hat{y}$  (31) 式を  $x_i$  について代る代る微分することによって得られる筈である。そこで、(31) 式

をほどくと

$$\hat{y} = \hat{\alpha}_{01} + \hat{\alpha}_{11}X_1 + \hat{\alpha}_{21}X_2 + \hat{\alpha}_{12}X_1^2 + \hat{\alpha}_{22}X_2^2 + \hat{\alpha}_{1 \times 2}X_1X_2 \quad (39)$$

であるから

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial X_1} &= \hat{\alpha}_{11} + 2\hat{\alpha}_{12}X_1 + \hat{\alpha}_{1 \times 2}X_2 = 0 \\ \frac{\partial y}{\partial X_2} &= \hat{\alpha}_{21} + 2\hat{\alpha}_{22}X_2 + \hat{\alpha}_{1 \times 2}X_1 = 0 \end{aligned} \right\} (40a)$$

即ち

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{11} & 2\hat{\alpha}_{12} & \hat{\alpha}_{1 \times 2} \\ \hat{\alpha}_{21} & \hat{\alpha}_{1 \times 2} & 2\hat{\alpha}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (40b)$$

を  $x_i$  について解けば、 $y$  即ち2次曲面——quadratic response surface——の最大点、換言すれば、 $P_m$  を約束する因子水準の最適組合せが決定されるのである。その時、 $P_m$  の周辺部がどのような曲面を構成しているかを知る為には、(39) 式を適当な変数変換の方式に従って、

$$\hat{y} = \lambda_1 X_1^2 + \lambda_2 X_2^2 + K \quad (41)$$

(但し、 $K = \text{const.}$ )

のような形に書き換え、この式が  $\lambda_i$ 、 $X_i$  の条件如何により、どのような性質の空間を表現しているかを検討すれば良い。これを表にして示すと、Table IV の如くである。

そして、例えば、自分の問題にしている曲面が、Fig. 6 (a) や (b) のような場合だったら、推定値  $\hat{y}$  (34) 式から得られる一の確認実験、或は response surface そのものをより正確に決定するための追加実験を計画するとか、同図 (c) の

\*6 これは、丁度、統計的検定論における自由度 (degree of freedom) の概念に相当する

Table IV

$\lambda_i$ の条件	$x_i$ の条件	曲面の性質
$\text{all } \lambda_i < 0$	$X_1 = X_2 = 0$	$\hat{y}$ は max. point. 従ってこの点 $P(X_1=0, X_2=0)$ が実験点として採用されていれば、最適点 $P_m$ の定位が成功する。
$\text{all } \lambda_i < 0$ $\lambda_1 = \lambda_2$	$X_i \neq 0$	Fig.6 (a) $\lambda X_1^2 + \lambda X_2^2 = (\hat{y} - K) < 0$ 従って、等高線は円。
$\text{all } \lambda_i < 0$ $\lambda_1 > \lambda_2$	$X_1 \neq X_2$ $X_i = 0$	Fig.6 (b) $\lambda_1 X_1^2 + \lambda_2 X_2^2 = (\hat{y} - K)$ 等高線は楕円。
$\text{all } \lambda_i < 0$ $\lambda_2 = 0$	$X_1 \neq X_2$ $(X_1 = 0)$	Fig.6 (c) 反応は、 $X_2$ の変化には無関係で $X_1$ が const. なら常に const. 就中 $X_1 = 0$ を満足するような全ゆる $X_1, X_2$ の組合せにより $P_m$ が得られる。Box 等は、この場合の等高線を stationary ridge をと呼んだ。
$\text{all } \lambda_i < 0$ $\lambda_2 \rightarrow 0$	(然し、推定最適点が真の $P_m$ よりずっと離れた所にある時)	Fig.6 (d), (e). $\lambda_2$ が 0 に近い (e) の場合、(c) の場合に似ている。rising ridge. いずれも steepest ascent を繰り返すべき。
$\lambda_i > 0 \dots (\lambda_1)$ $\lambda_j < 0 \dots (\lambda_2)$	$X_i \neq 0$	Fig.6 (f) $X_1$ の矢印方向では $P_m$ は最大、 $X_2$ の方向では最小、即ち $P_m$ は鞍点 (saddle point, minimax) に当る。

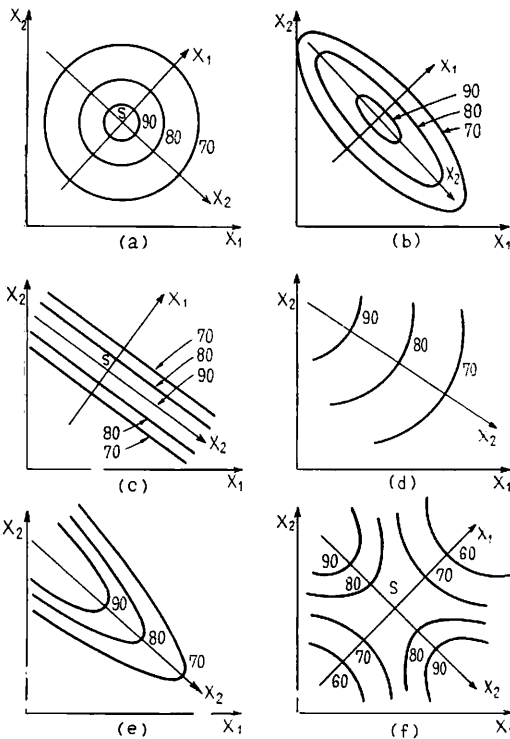


Fig. 6

ような場合には、実験の中心点の大巾な移動を試みるとかいった具合に、次の段階へ進む処置を取ることが出来る。

iii) 2 因子 3 水準実験における諸係数  $\alpha$  の推定 II

3 因子 (一般には k 因子) 3 水準の場合にも基本的には i) の場合と同じように  $3^3$  型の因子実験を組んで、27 種の実験を行い、それらの結果に対して (3) 式を当て嵌めれば良い訳である。但し、(29) 式に相当するマトリクス  $\mathbf{X}$  については、その要素間に独立性が保証されていなければならぬこと及び 2 次係数の算出法における自由度の問題に注意すべきことは勿論である。実際に使用すべき  $\mathbf{X}$  及び自由度については Table V に示した。

然しながら、推定さるべき係数の数がたかだか 10 個であるのに 27 個の実験が行われて  $(27-10) = 17$  個の情報に誤差の推定にまわされるのでは、誤差の推定が余程重要な意味を持つ (検定における精度を高めようといった) ことのない限り、実験の手数からいって相当なロスである。而も、このロスは、因子の数 k が大きくなる程急激に増大する  $\{(3^k - (1 + 2k + kC_2))\}$ 。これに加えて、 $3^k$  型因子実験で前述のように各係数の推定精度が異なって来てしまうという弊害もある。

そこで、Box 及び Wilson (1951) は、複合実験 (Composite Designs) と呼ぶ方法を考えた。こ

Table v

実験点 P <sub>2v</sub>	因子水準										測定値 Y <sub>v</sub>
	X <sub>0</sub>	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>1</sub> <sup>2</sup>	X <sub>2</sub> <sup>2</sup>	X <sub>3</sub> <sup>2</sup>	X <sub>1</sub> X <sub>2</sub>	X <sub>2</sub> X <sub>3</sub>	X <sub>1</sub> X <sub>3</sub>	
P <sub>2 1</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	Y <sub>1</sub>
P <sub>2 2</sub>	1	1	1	0	1	1	-2	1	0	0	Y <sub>2</sub>
P <sub>2 3</sub>	1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	Y <sub>3</sub>
P <sub>2 4</sub>	1	1	0	1	1	-2	1	0	0	1	Y <sub>4</sub>
P <sub>2 5</sub>	1	1	0	0	1	-2	-2	0	0	0	Y <sub>5</sub>
P <sub>2 6</sub>	1	1	0	-1	1	-2	1	0	0	-1	Y <sub>6</sub>
P <sub>2 7</sub>	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	Y <sub>7</sub>
P <sub>2 8</sub>	1	1	-1	0	1	1	-2	-1	0	0	Y <sub>8</sub>
P <sub>2 9</sub>	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	1	-1	Y <sub>9</sub>
P <sub>2 10</sub>	1	0	1	1	-2	1	1	0	1	0	Y <sub>10</sub>
P <sub>2 11</sub>	1	0	1	0	-2	1	-2	0	0	0	Y <sub>11</sub>
P <sub>2 12</sub>	1	0	1	-1	-2	1	1	0	-1	0	Y <sub>12</sub>
P <sub>2 13</sub>	1	0	0	1	-2	-2	1	0	0	0	Y <sub>13</sub>
P <sub>2 14</sub>	1	0	0	0	-2	-2	-2	0	0	0	Y <sub>14</sub>
P <sub>2 15</sub>	1	0	0	-1	-2	-2	1	0	0	0	Y <sub>15</sub>
P <sub>2 16</sub>	1	0	-1	1	-2	1	1	0	-1	0	Y <sub>16</sub>
P <sub>2 17</sub>	1	0	-1	0	-2	1	-2	0	0	0	Y <sub>17</sub>
P <sub>2 18</sub>	1	0	-1	-1	-2	1	1	0	1	0	Y <sub>18</sub>
P <sub>2 19</sub>	1	-1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	Y <sub>19</sub>
P <sub>2 20</sub>	1	-1	1	0	1	1	-2	-1	0	0	Y <sub>20</sub>
P <sub>2 21</sub>	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	Y <sub>21</sub>
P <sub>2 22</sub>	1	-1	0	1	1	-2	1	0	0	-1	Y <sub>22</sub>
P <sub>2 23</sub>	1	-1	0	0	1	-2	-2	0	0	0	Y <sub>23</sub>
P <sub>2 24</sub>	1	-1	0	-1	1	-2	1	0	0	1	Y <sub>24</sub>
P <sub>2 25</sub>	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	Y <sub>25</sub>
P <sub>2 26</sub>	1	-1	-1	0	1	1	-2	1	0	0	Y <sub>26</sub>
P <sub>2 27</sub>	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	Y <sub>27</sub>
自由度	27	18	18	18	18	18	18	12	12	12	
matrix	X										Y

の方法は、二次多項式の当て嵌めにも拘らず、実験水準を3個以上とらずに、先づ、2<sup>k</sup>型計画を行って、それでは二次係数の推定には足りぬ情報を、少数個の新しい実験を附加することによって提供しようとするものである。このやり方には、中心複合実験(Central Composite Design)と、非心(Non-contral)複合実験の2通りがあるが、これは求めている最適点 P<sub>m</sub> が design の中心点に近いことが予測される場合と、中心点以外の他の1点に近い場合とにそれぞれ対応するものである。

今、前者の場合においては、2<sup>k</sup>型計画に次のような(2k+1)の実験点(因子水準組合せ)が加えられる。

$$\begin{aligned}
 &(0, 0, 0, \dots, 0); (-S, 0, \dots, 0); (S, 0, \dots, 0) \\
 &(0, -S, \dots, 0); (0, S, \dots, 0) \\
 &\vdots \\
 &\vdots (0, 0, \dots, -S); \\
 &\quad (0, 0, \dots, S)
 \end{aligned}$$

この場合、中心点から実験点までの距離を示す S の取り方の一つの方法として、その計画に回転性 rotatability を与えるようにすることを Box 等は主張した。回転性を与えるということは、加え

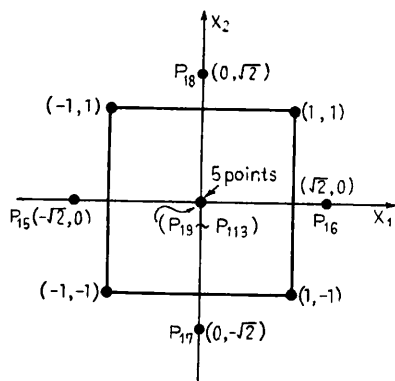
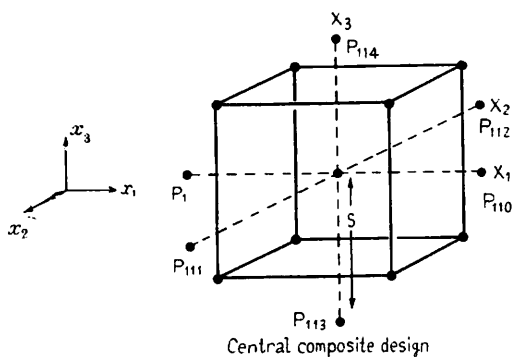


Fig.7



- = Points of initial 2<sup>3</sup> factorial
- × = Additional points added for composite design

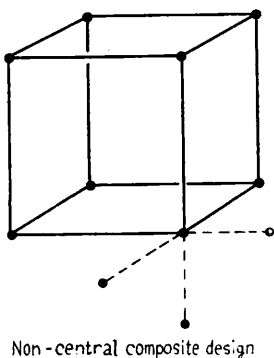


Fig. 8

られるべき実験点における実験誤差が実験の中心点に対して、出来るだけ均等な影響を及ぼすように、実験計画を組むことを意味して居り、2因子の場合には Table VI 及び Fig. 7 に示すように、P<sub>15</sub> ~ P<sub>18</sub> の4点 (star と呼ばれる) を新しい実験点として加え、更に中心点で5回程度の繰り返しを加えれば良からうという。中心点の繰り返し数

Table VI

実験点 P <sub>1v</sub>	因子水準						測定値 Y <sub>v</sub>	
	X <sub>0v</sub>	X <sub>1v</sub>	X <sub>2v</sub>	X <sup>2</sup> <sub>1v</sub>	X <sup>2</sup> <sub>2v</sub>	X <sub>1v</sub> X <sub>2v</sub>		
P <sub>11</sub>	1	1	1	2 <sup>2</sup> 型 実験	1	1	1	Y <sub>1</sub>
P <sub>12</sub>	1	1	-1		1	1	-1	Y <sub>2</sub>
P <sub>13</sub>	1	-1	1		1	1	-1	Y <sub>3</sub>
P <sub>14</sub>	1	-1	-1		1	1	1	Y <sub>4</sub>
P <sub>15</sub>	1	-√2	0	追 加 実 験	2	0	0	Y <sub>5</sub>
P <sub>16</sub>	1	√2	0		2	0	0	Y <sub>6</sub>
P <sub>17</sub>	1	0	-√2		0	2	0	Y <sub>7</sub>
P <sub>18</sub>	1	0	√2		0	2	0	Y <sub>8</sub>
P <sub>19</sub>	1	0	0		0	0	0	Y <sub>9</sub>
P <sub>110</sub>	1	0	0		0	0	0	Y <sub>10</sub>
P <sub>111</sub>	1	0	0		0	0	0	Y <sub>11</sub>
P <sub>112</sub>	1	0	0		0	0	0	Y <sub>12</sub>
P <sub>113</sub>	1	0	0		0	0	0	Y <sub>13</sub>
matrix	X						Y	

Table VII

因子の 数 k	2 <sup>k</sup> 型因 子実験 の数	starS の数	中心点	実験総 数	S の大きさ
3	8	6	6	20	2 <sup>3/4</sup> = 1.682
4	16	8	7	31	2 <sup>4/4</sup> = 2.000
5	16	10	6	32	2 <sup>4/4</sup> = 2.000
6	32	12	9	53	2 <sup>5/4</sup> = 2.378

は、既に行われた P<sub>11</sub> ~ P<sub>18</sub> 等の点における実験誤差と、中心点の誤差とが等しくなるに充分な数であれば良い。

この計画においては、総実験数は 13 個であって、2<sup>3</sup> 型の因子実験とくらべて少しも実験数の節約になっていない。然し、一般に因子が k 個の場合についての中心複合実験の内容は、Table VII に示す通りで、k が 3 より大の時の実験の size は小さくなり、通常の因子実験のサイズよりも、極めて節約される。3 因子の場合の中心複合実験の模型は Fig. 8 上段に示した。同図下段は、非心複合実験の例で、この方法が使用されるのは、P<sub>m</sub> が特定の実験点に近いことが予測される場合で、追加するべき実験の数は、中心複合実験の場合よりも少なくて済む。

ところで、2 因子中心複合実験における諸係数の推定法は、次の通りである。

この実験の場合には、前の場合と異って、マト

Table VIII

実験点 P <sub>1v</sub>	因子水準				x <sup>2</sup> <sub>1v</sub>	x <sup>2</sup> <sub>2v</sub>	x <sup>2</sup> <sub>3v</sub>	x <sub>1v</sub> x <sub>2v</sub>	x <sub>1v</sub> x <sub>3v</sub>	x <sub>2v</sub> x <sub>3v</sub>	測定値 y <sub>v</sub>
	x <sub>0v</sub>	x <sub>1v</sub>	x <sub>2v</sub>	x <sub>3v</sub>							
P <sub>11</sub>	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	y <sub>1</sub>
P <sub>12</sub>	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	y <sub>2</sub>
P <sub>13</sub>	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	y <sub>3</sub>
P <sub>14</sub>	1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	y <sub>4</sub>
P <sub>15</sub>	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	y <sub>5</sub>
P <sub>16</sub>	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	y <sub>6</sub>
P <sub>17</sub>	1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	y <sub>7</sub>
P <sub>18</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	y <sub>8</sub>
P <sub>19</sub>	1	-1.682	0	0	2.828	0	0	0	0	0	y <sub>9</sub>
P <sub>110</sub>	1	1.682	0	0	2.828	0	0	0	0	0	y <sub>10</sub>
P <sub>111</sub>	1	0	-1.682	0	0	2.828	0	0	0	0	y <sub>11</sub>
P <sub>112</sub>	1	0	1.682	0	0	2.828	0	0	0	0	y <sub>12</sub>
P <sub>113</sub>	1	0	0	-1.682	0	0	2.828	0	0	0	y <sub>13</sub>
P <sub>114</sub>	1	0	0	1.682	0	0	2.828	0	0	0	y <sub>14</sub>
P <sub>115</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y <sub>15</sub>
P <sub>116</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y <sub>16</sub>
P <sub>117</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y <sub>17</sub>
P <sub>118</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y <sub>18</sub>
P <sub>119</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y <sub>19</sub>
P <sub>120</sub>	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y <sub>20</sub>
matrix	X										Y

リクス X としては、Table VI の中央に示すような要素の集合を定める。今、X' × Y の要素を

$$X'Y = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_{11} \\ F_{21} \\ F_{22} \\ F_{32} \\ F_{1 \times 2} \end{pmatrix} \quad (42)$$

と書くことにすれば、一次係数及び交互作用項 x<sub>1</sub>x<sub>2</sub> に対する係数の推定値は

$$\hat{\alpha}_{11} = \frac{1}{8}F_{11}$$

$$\alpha_{1 \times 2} = \frac{1}{4}F_{1 \times 2} \quad (43)$$

で与えられることは、マトリクス X の第 2, 3, 6 の各列が、他のどの列に対しても独立性を保持していることから明らかである。

然し、α<sub>01</sub>、及び α<sub>12</sub>、α<sub>22</sub> の推定については、同

マトリクスの第 4 及び 5 列が第 2 及び 3 列それぞれの行の 2 乗となっており、独立性が満たされていないところから (即ち、ダミー係数と 2 次係数とは抱き合せた形で推定されているので)

$$\left. \begin{aligned} \hat{\alpha}_{01} &= \frac{1}{5}F_0 - \frac{1}{10}(F_{12} + F_{22}) \\ \hat{\alpha}_{12} &= \frac{1}{8}F_{12} + \frac{3}{160}(F_{12} + F_{22}) - \frac{1}{10}(F_0) \end{aligned} \right\} (44)$$

で与えられる。

3 因子の中心複合実験も同様にして、2<sup>3</sup> 型因子実験に (2 × 3 + 1) = 7 個の実験点を附加し、Table VIII 中央に示すようなマトリクス X を作る。この場合、実験の中心点から追加実験点 (star) までの距離 S は、Table VII に従って S = 2<sup>1/2</sup> = 1.682 に定められ、中心点では、6 回の繰り返しが試みられる。

次にこの表から、マトリクス X, Y の積を作ってその要素を

$$\mathbf{XY} = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_{11} \\ F_{21} \\ E_{31} \\ F_{12} \\ F_{22} \\ F_{32} \\ F_{1 \times 2} \\ F_{1 \times 3} \\ F_{2 \times 3} \end{pmatrix} \quad (45)$$

と書くことにすれば、3 因子に対する諸係数の推定値は、

$$\left. \begin{aligned} \hat{\alpha}_0 &= 0.166338F_0 - 0.056791 \\ &\quad \times (F_{12} + F_{22} + F_{32}) \\ \hat{\alpha}_{11} &= 0.073224F_{11} \\ \hat{\alpha}_{12} &= 0.0625F_{12} + 0.006889(F_{12} \\ &\quad + F_{22} + F_{32}) - 0.056791 F_0 \\ \hat{\alpha}_{i \times j} &= 0.125 F_{i \times j} \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

で計算されうることになる。

このように中心複合実験の一つの特徴は、既に一次多項式の当て嵌めの為に以前に行われた因子実験の測定値を再び用いるところにあるから、この実験計画を企てるには、測定値が時間的趨勢 (time trend) を持たないということが前提条件となる。

然し、1 回に全実験がどうしても終了出来ないような場合に、日による外部条件の変動の影響を、実験誤差に混入させない為には、2<sup>2</sup> 又は 2<sup>3</sup> 型因子実験と追加実験とを夫々ブロック因子として取り扱うことを考えれば良いであろう。例えば、2 因子の計画をたてるには 2<sup>2</sup> 因子実験と何回かの中心点における実験を 1 ブロックにまとめ、star と

Table IX

$x_{0v}$	2 因子実験 ブロック I		追加実験 ブロック II	
1	1	1	$-\sqrt{2}$	0
1	1	-1	$\sqrt{2}$	0
1	-1	1	0	$-\sqrt{2}$
1	-1	-1	0	$\sqrt{2}$
1	0	0	0	0
1	0	0	0	0

幾つかの中に点を 1 ブロックにまとめることにし Table IX を作る。同表に示されるように 12 個の実験組合せを順次遂行すれば、時間的趨勢の効果を実験誤差から除去することが出来る。諸係数の計算は、基本的には、前の場合と同じように、先づ、ブロックを無視して  $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$  のマトリクスの積を、やはり (42) 式のように表わせば、各係数の推定値は

$$\left. \begin{aligned} \hat{\alpha}_0 &= \frac{1}{4}F_0 - \frac{1}{8}(F_{12} + F_{22}) \\ \hat{\alpha}_{11} &= \frac{1}{8}F_{11} \\ \hat{\alpha}_{12} &= \frac{1}{8}F_{12} + \frac{8}{250}(F_{12} + F_{22}) - \frac{1}{8}F_0 \\ \hat{\alpha}_{1 \times 2} &= \frac{1}{4}F_{1 \times 2} \end{aligned} \right\} \quad (47)$$

で得られるであろう。

このようにして、二次多項式の諸係数の推定が終れば、最後の段階として、(39, 40a, b) 式で行ったように、この多項式を各水準  $x_i$  について、代る代る微分し、0 とおいた  $k$  個の方程式を解くことによって、最適条件の組合せが決定されるのである。

以上、反応の特性値を最大にするような最適条件の組合せを求める手法を、Box 等によって展開されて来た Method of Steepest Ascent を中心に述べて来たが、彼等の方法の骨子は (1) 反応の特性値を、諸条件の組合せが構成する空間上の一点として捉え、(2) 両者を結びつける函数式を、最適点に余り近接していない領域では、諸条件の一次の多項式として、又その当て嵌りが悪くなってくる最適点の近傍では、反応空間が曲面を構成するものと考え、二次の多項式として表現し、(3) これらの函数式を規定する係数の推定を行う為の実験計画の合理化をはかり、(4) 二次多項式の係数の推定が終ったら、この二次式を各条件の水準について偏微分し、これを 0 とおくことによって特性値を最大にする条件の組合せを決定するという工合である。特に、(2)、(3) から察知されたように、最適点に達するまでの実験過程において、出来るだけ無駄な手数を省くような考慮がなされて居る。それは先づサイズの小さな因

子型実験を行って、その結果について分析を行い(一次多項式の当て嵌め)、次の実験に進む時に、この結果を利用して計画をたてる。即ち、二次係数の推定の為のデータとして、積極的に、前実験の結果を動員するというように、逐次、最適点に近づこうとするところにある。これは、Iに述べた要因配置法の適用による最適点の推定法が、予め、条件の範囲を固定し、その上でのみ最適点を予測しようとする静的(static)な性格に比べ、非常に動的であると云わねばならない。それだけに前述の如く、測定にあたっての特性値に及ぼす time trend の影響には相当の注意が払われるべきであろう。

Appendix

一般に、 $y_{ij}$ ,  $x_{ik}$ ,  $a_{kj}$ ,  $z_{ij}$  を夫々要素とするマトリクス、 $Y$ ,  $X$ ,  $A$ ,  $Z$  (但し  $Z$  は誤差項の集合) の間に、

$$Y = XA + Z$$

なる関係がある時、 $X$  に対する係数の集合  $A$  を、最小自乗法を用いて決定するには、

$$Z = Y - XA$$

に着目し、

$$Q = \sum_i \sum_j z_{ij}^2$$

を最小にするように、 $A$  を定めればよい。

それには、

$$Q = \sum_i \sum_j (y_{ij} - \sum_k x_{ik} a_{kj})^2$$

を、 $a_{kj}$  について、偏微分し、それが 0 となるような  $a_{kj}$  を求めればよい訳で、

$$\frac{\partial Q}{\partial a_{kj}} = -2 \sum_i x_{ik} (y_{ij} - \sum_k x_{ik} a_{kj}) = 0$$

ところで、 $(y_{ij} - \sum_k x_{ik} a_{kj})$  は  $(Y - XA)$  に対応するから、全体としては

$$X'(Y - XA) = 0$$

$$\therefore X'Y = X'XA$$

$$\therefore \hat{A} = (X'X)^{-1}X'Y$$

で、係数  $a_{kj}$  の最小自乗解が求まる。

参考文献

1. Box, G.E.P., & Wilson, K.B.  
On the experimental attainment of optimum conditions. Jour. Roy. Stat. Soc., 1951 B, 13, 1-45.
2. Box, G. E. P.  
Multifactor designs of first order. Biometrika, 1952 39, 49-57.
3. Box, G.E.P.  
The exploration and exploitation of response surfaces: some general considerations and examples. Biometrics 1954 10, 16-60.
4. Cochran, W.G., & Cox, G.M. Experimental designs. Wiley, 1957.
5. Friedman, M, & Savage, L.J. Planning experiments seeking maxima. In Techniques of statistical analysis McGraw-Hill, New York, 1947
6. 印東太郎  
確率および統計  
コロナ社, 1957.
7. 北川敏男, 三留三千男  
実験計画要因配置表  
培風館, 1953.
8. 西垣久実  
マトリクスとその応用  
コロナ社, 1956.
9. 島田正三  
やさしい直交配列の話  
日本規格協会, 1958.
10. 田口玄一  
実験計画法, 上, 下  
丸善株式会社, 1958.
11. 統計科学協会  
偏回帰係数の検定  
新編統計数値表, 1952, 114.