

実験計画法における非直交反復実験の解析（第1報）

ダイキン工業(株) 平野 智也 *

一般財団法人日本科学技術連盟 DE・O部会 和田 武夫

ユニチカ(株) 松本 哲夫

1. 諸言

要因配置実験では、交互作用の検出や実験誤差把握のために繰り返しや反復をすることが多い。

なかでも、反復間誤差の検出が可能であることから、単なる繰り返し実験より反復実験のほうが一般に有効であるとされている。

反復実験を行う場合において、一般には同じ水準組み合わせで反復がなされるが、反復実験のもう一つのメリットは、第1反復の実験結果を第2反復の実験計画に活用できることである。すなわち、第2反復では、第1反復と全く同じではなく、最適値、あるいは、重要と考える水準組み合わせなどの方向、すなわち、実験者が望む実験配置へと改変できる融通性にあると考えられる。

誤差項と交互作用項を区別するためには、必ずしもすべての水準組み合わせで複数回実験する必要はなく、最適条件や重要と思われる組み合わせ条件を中心に必要数繰り返すほうが効率的である。

過去に、直交性を多少犠牲にしても実験効率自体を上げるための計画についての芳賀の研究¹⁾があるが、実務的な対応として最適条件を求める実験計画については検討されていない。

本報では、かかる実験計画に焦点を当て、実務における反復実験の新たな計画について検討した。

ただし、ここで扱う実験計画は一般に非直交計

画となるため、汎用の分散分析では解析ができない。そこで、非直交計画でも分散分析ができる一般線形モデル(以下、GLM)に基づく解析ソフトとして、Microsoft® Excelのマクロ機能を活用した専用ソフト²⁾を用意し、実務担当者でも簡単に、かつ、汎用手順で分散分析や区間推定などが定型的に行えるようにした。

2. 平方和の考え方

非直交計画の分散分析を行う場合、繰り返し数が不揃いの多元配置実験などでは、要因効果の各平方和と誤差平方和の総計が必ずしも総平方和に等しくならない。このときの平方和の計算に関してはYatesをはじめいろいろな方法が提案されているが、ここでは、SAS統計分析(SAS Institute Japan Ltd.)のGLMにならって、4つの方法のうち、Type IIの考え方を基本とした。

3. 非直交計画の狙い

2元配置(各3水準)で例示すると、通常反復実験では、図1に示すように同じ水準組み合わせで反復がなされる。一方、図2のように第1反復実験が終了した時点で、最適条件が A_2B_2 であればよいが、そうでない場合、仮に矢印(A_3B_3)の方向に最適条件があるようであれば、実験者は、第2反復では異なる実験配置、例えば、図3の●のように実験条件をシフトしたいと考えるのが自然であろう。このように計画しても、複数の実験条件($A_2B_2 \sim A_3B_3$ の4条件)で複数のデータがあるので、自由度の問題はあるが、誤差の見積もりは可能である。

Analysis of replicated data in non-orthogonal design of Experiments (1st report)

*TOMOYA Hirano (Daikin Industries, Ltd)

TAKEO Wada (JUSE DE・O Meeting)

TETSUO Matsumoto (Unitika, Ltd)

さて、実験条件のシフトは図4に示すとおり、一般性を失うことなく、①右下(左上)、②左下(右上)、③真下(真上)、④右(左)にシフトする場合の4つに集約される。次節では、①右下(左上)について具体例を挙げて考察するが、この計画には、以下のメリットがあると考えられる。

- (a) 新たな最適条件を発見できる
- (b) 結果的に水準が増え、幅広く実験できる
- (c) 特別な費用はかからない
- (d) 交互作用が無視できるなら実測値のない条件での推定ができる (A_1B_4 , A_4B_1)
- (e) 誤差や反復間変動も検出できる
- (f) 適用の場に応じた実験者の工夫が盛り込める

	B ₁	B ₂	B ₃
A ₁	○	○	○
A ₂	○	○	○
A ₃	○	○	○

	B ₁	B ₂	B ₃
A ₁	○	○	○
A ₂	○	○	○
A ₃	○	○	○

図1 通常の反復実験

図2 第1反復終了時

	B ₁	B ₂	B ₃	B ₄
A ₁	○	○	○	
A ₂	○	●	●	●
A ₃	○	●	●	●
A ₄		●	●	●

図3 配置の改変

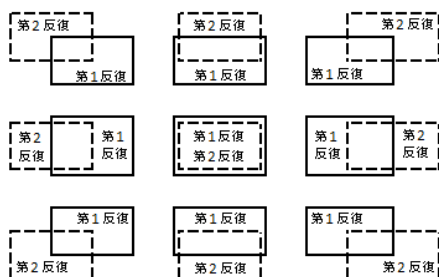


図4 実験条件のシフト方向

4. 解析の具体例とその考察

前節で述べた考え方による具体的な実践結果を示し、考察した。検討に際しては、予め、表1に示すAB各4水準で A_3B_3 が最適条件となるデータを各条件で2個ずつ用意し、想定する実験計画に対して解析結果を比較した。

因みに、各4水準のデータセットのABに関する立体棒グラフを図5に示しておく。

4.1 通常の反復実験

固有技術から最適条件が A_2B_2 にあるとの予断のもと、通常のAB各3水準($A_1 \sim A_3$, $B_1 \sim B_3$)の反復実験(反復数2回)を行ったとする。その分散分析の結果を表2に示す。因子A,Bともに高度に有意となり、有意でない交互作用 $A \times B$ 、および、反復Rはプールした。プーリング後の分散分析結果を表3に、プーリング後の要因効果をもとにした各条件の母平均の推定値と95%信頼区間を表4に示す。

表1 A,B 各4水準のデータセット

A	B	n	y
1	1	1	46.0
1	2	1	51.0
1	3	1	71.5
1	4	1	56.5
2	1	1	63.0
2	2	1	64.0
2	3	1	84.5
2	4	1	70.5
3	1	1	103.5
3	2	1	88.0
3	3	1	118.5
3	4	1	105.0
4	1	1	71.5
4	2	1	68.0
4	3	1	89.5
4	4	1	81.0

A	B	n	y
1	1	2	53.0
1	2	2	46.0
1	3	2	63.5
1	4	2	50.5
2	1	2	56.0
2	2	2	60.0
2	3	2	75.5
2	4	2	52.5
3	1	2	91.5
3	2	2	103.0
3	3	2	120.5
3	4	2	91.0
4	1	2	68.5
4	2	2	76.0
4	3	2	92.5
4	4	2	68.0

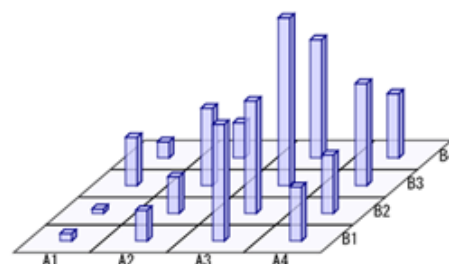


図5 A,B 各4水準の立体棒グラフ

表2 通常の反復実験の分散分析表1

因子	S	ϕ	V	F	検定
R	24.5	1	24.5	0.64	
A	7828.0	2	3914.0	103.00	**
B	1640.3	2	820.2	21.58	**
$A \times B$	26.7	4	6.7	0.18	
e	304.0	8	38.0		
T	9823.5	17			

表3 通常の反復実験の分散分析表2

因子	S	ϕ	V	F	検定
A	7828.0	2	3914.0	143.26	**
B	1640.3	2	820.2	30.02	**
e	355.2	13	27.3		
T	9823.5	17			

表4より、最適条件がA₃B₃、母平均が117.7、95%信頼区間幅±5.95と推定できた。

図6に1回目の実験結果の立体棒グラフを示す。最適条件が実験前の予断に反し、A₂B₂からA₃B₃へシフトしているが、直交実験を踏襲したことで、各因子は第1～第3水準の効果しか推定できず、A₃B₃が最適値か、あるいは、第4水準側に更なる最適な水準があるかどうかを見極めることができなかったという不充足感が残る。

表4 通常の反復実験における母平均の推定

No	要因		母平均	信頼区間		
	A	B		幅	下限(95%)	上限(95%)
1	A ₁	B ₁	48.5	5.95	42.55	54.45
2	A ₁	B ₂	48.3	5.95	42.38	54.29
3	A ₁	B ₃	68.7	5.95	62.72	74.62
4	A ₂	B ₁	60.5	5.95	54.55	66.45
5	A ₂	B ₂	60.3	5.95	54.38	66.29
6	A ₂	B ₃	80.7	5.95	74.72	86.62
7	A ₃	B ₁	97.5	5.95	91.55	103.45
8	A ₃	B ₂	97.3	5.95	91.38	103.29
9	A ₃	B ₃	117.7	5.95	111.72	123.62

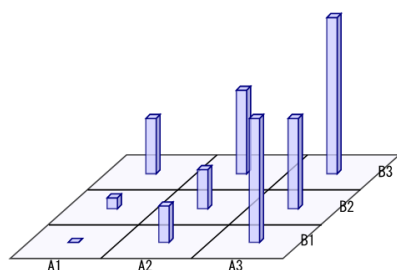


図6 1回目の実験結果の立体棒グラフ

4.2 非直交計画の反復実験

4.1節の不充足感を解消するため、2回目の実験ではAB各3水準をA₂～A₄、B₂～B₄へと実験条件を改変し、実験を行ったとする。その分散分析結果を表5に示す。因子Aが高度に有意となり、因子Bは有意となった。また、交互作用A×Bと反復Rについては有意でなく、これらをプールした結果、因子Bも高度に有意となった。プーリング後の分散分析結果を表6に、プーリング後の要因効果をもとにした各条件の母平均と95%信頼区間の推定値を表7に示す。

表7より、最適条件がA₃B₃、母平均118.5、95%

信頼区間幅±5.40であると推定できた。

なお、本計画は非直交計画であり、前記の解析ソフトを用いて分散分析や推定を行った。

表5 非直交反復実験の分散分析表1

因子	S	ϕ	V	F	検定
R	2.000	1	2.000	0.037	
A	6158.22	3	2052.74	38.250	**
B	1979.89	3	659.96	12.297	*
A×B	76.78	7	10.97	0.204	
e	161	3	53.67		
T	8509.28	17			

表6 非直交反復実験の分散分析表2

因子	S	ϕ	V	F	検定
A	6366.38	3	2122.13	98.10	**
B	2009.80	3	669.93	30.97	**
e	237.95	11	21.63		
T	8509.28	17			

表7 非直交反復実験における母平均の推定

No	要因		母平均	信頼区間		
	A	B		幅	下限(95%)	上限(95%)
1	A ₁	B ₁	50.4	7.44	42.97	57.84
2	A ₁	B ₂	49.0	6.98	41.98	55.95
3	A ₁	B ₃	69.1	6.98	62.15	76.11
4	A ₁	B ₄	41.5	9.03	32.50	50.56
5	A ₂	B ₁	62.3	6.98	55.32	69.28
6	A ₂	B ₂	60.9	5.40	55.47	66.26
7	A ₂	B ₃	81.0	5.40	75.63	86.42
8	A ₂	B ₄	53.4	6.98	46.44	60.41
9	A ₃	B ₁	99.8	6.98	92.82	106.78
10	A ₃	B ₂	98.4	5.40	92.97	103.76
11	A ₃	B ₃	118.5	5.40	113.13	123.92
12	A ₃	B ₄	90.9	6.98	83.94	97.91
13	A ₄	B ₁	76.0	9.03	67.00	85.06
14	A ₄	B ₂	74.6	6.98	67.61	81.57
15	A ₄	B ₃	94.8	6.98	87.77	101.74
16	A ₄	B ₄	67.2	7.44	59.72	74.59

この非直交実験計画では、直交性に拘泥せずに2回目の実験条件を所望の方向にシフトしたことで、ABの各第4水準側の推定も可能となり、4.1節の実験計画と同回数の実験で第4水準側には最適な水準がなくA₃B₃条件が最適水準であると見極めることができた。

4.3 解析結果に対する考察

① A、Bの検定結果の影響について

表2、表5を比較すると、非直交計画の反復実験では、通常の反復実験に比べ、各因子の検定結果が有意となりにくい傾向にあるようだ。

通常の反復実験ではすべての水準組み合わせで2個のデータがあるのに対し、非直交計画ではそれができるのは4条件の水準組み合わせだけとなり、

誤差の自由度が小さくなって、誤差分散の見積もりや検定の検出力に影響していると思われる。

一方、要因A, Bの自由度は通常の反復実験では $\phi_A = \phi_B = 2$ に対し、非直交計画では $\phi_A = \phi_B = 3$ となるが、こちらについては実際の水準間の要因効果の大小によるため、議論は避ける。

② 誤差分散と反復間変動について

前記①にも記載したが、誤差分散は各水準組み合わせでの複数のデータから求められるが、今回の非直交計画では2個のデータを持つ水準組み合わせが4条件しかないため、自由度が小さくなる。また、反復Rの検出力も要因A,B同様に低下すると考えられる。

③ 交互作用がないとき、実験データの少ない条件における母平均の推定

交互作用がある場合は、実験データの少ない条件で母平均を推定することができないが、交互作用がないときは、実験データの少ない条件でも母平均を推定できる。ここでの母平均の推定値は、 A_1B_4 が41.5(32.5 ~ 50.6), A_4B_1 が76.0(67.0~85.1)と推定される。また、個々のデータの予測は、 A_1B_4 が27.9~55.2, A_4B_1 が62.4~89.7と推定される。

実際のデータは A_1B_4 が56.5と50.5, A_4B_1 が71.5と68.5であり、「不自然」というほどではなく、受け入れ可能な推定値とみてよい。とはいえ、実験データの少ない条件での推定は飽くまで参考値と扱うべきであろう。

④ 自由度の配分と推定精度（交互作用の有/無）

通常の反復実験での自由度の配分は、 $\phi = 17$, $\phi_A = \phi_B = 2$, $\phi_R = 1$, $\phi_{A \times B} = 4$, $\phi_e = 8$ であり、非直交計画での自由度の配分は、 $\phi = 17$, $\phi_A = \phi_B = 3$, $\phi_R = 1$, $\phi_{A \times B} = 7$, $\phi_e = 3$ である。

前記①, ②で考察したように交互作用がある場合の非直交計画では誤差の自由度が小さく、検定における検出力や推定精度への影響がでるが、交互作用を無視できると、誤差の自由度に通常求められる $\phi_e = 5 \sim 6$ 程度以上を確保でき、検出力や推定精度にも実務上、大きな問題は生じないものと考えられる。

したがって、交互作用がある場合には、前記の

自由度の問題等を認識して本法を用いるとよい。

そして、交互作用が無視できる場合は、今回の事例のように反復実験のスライドは特に有用である。

5. 結言

以上のように、実験計画法における非直交反復実験には実務的に見るべきものがあると思われる。今後、以下の点について検討を重ね、本報の手法を一般化していきたいと考えている。

- (a) データセット数を増して汎用性を確認する
- (b) その他の実験条件のシフト方向を検討する
- (c) 図1の計画から、図7のように実験数を絞っていく方法等をケーススタディーする

	B ₁	B ₂	B ₃
A ₁	○	○○	○
A ₂	○○	○○	○○
A ₃	○	○○	○

図7 実験数の削減

6. 謝辞

本研究を行うに当たり、日本科学技術連盟DE・O部会の諸氏ならびに日本科学技術連盟大阪事務所の山田ひとみ氏、岡田拓治氏より有益なご助言を得た。ここに深甚なる謝意を表する次第である。

7. 参考文献

- [1] 芳賀敏郎,『SAS/QCによる実験の計画 非直交計画の紹介』,日本SASユーザー会論文集(1992)
- [2] 松本哲夫,植田敦子,小野寺孝義,榊秀之,西敏明,平野智也,『実務に使える実験計画法』,日科技連出版社 (in press)
- [3] 楠正,辻谷将明,松本哲夫,和田武夫,『応用実験計画法』,日科技連出版社(1995)
- [4] パソコン統計解析ハンドブック V 多変量分散分析・線形モデル編, 田中豊, 垂水共之, 脇本和昌 編, 共立出版(1984)
- [5] 広津千尋,『実験データの解析』,共立出版(1992)
- [6] R.G.Miller Jr., "Beyond Anova", John Wiley & Sons, Inc.(1988)

[7] Yates,'The analysis of replicated experiments when the field results are incomplete',Emp.Jour.of Exp.Agri.(1933)