

実験計画法入門

第2章 1 因子実験（完全無作為化法）



1 因子実験 ... 因子を一つだけとりあげ、そのいくつかの水準の間の比較をする実験

いま、1つの因子 A だけをとってあげ、その水準を A_1, A_2, \dots, A_a とする。また、各水準で n 回の繰り返し実験をすることとする。つまり、全体で an 回の実験を行うことになる。

この an 回の実験のやり方として、次の3つの方法がある。

- 完全無作為化法
- 乱塊法
- ラテン方格法

完全無作為化法

完全無作為化法 ... an 回の実験すべてをランダムな順序で行う実験のやり方

これは、とりあげた因子の水準を変えるということ以外の実験の場の変動をランダム化することによって確率的な変動をするものとなり、実験誤差に含めて考えることができるという方法である。



例題 2.1

ある化学工程から生産される製品の強度を高めるための実験をする。因子として反応温度 (A) だけを取りあげ、これの最適条件を見出すために、水準として 120°C (A_1)、 140°C (A_2)、 160°C (A_3)、 180°C (A_4) の 4 水準を選んだ。各水準の繰り返し数は 5 回とし、合計 20 回の実験をランダムな順序ですることにした。その順番を乱数表を使って決めたところ表 2.1 のようになった。

順番	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
水準	A_2	A_3	A_4	A_4	A_4	A_3	A_3	A_2	A_1	A_1	A_4	A_3	A_3	A_2	A_1	A_1	A_1	A_4	A_2	A_2
	第 1 日				第 2 日				第 3 日				第 4 日				第 5 日			

表 2.1 完全無作為化法による実験

実験は1日に4回しかできないので実験の期間は5日となる。この実験によって得られたデータが表 2.2 である。

水準	A_1	A_2	A_3	A_4
繰	7.9	8.0	8.3	8.3
	7.5	8.6	8.9	7.8
返	7.9	8.1	8.5	7.8
	7.6	8.4	8.4	7.9
し	7.7	8.1	8.4	8.1

表 2.2 製品の強度

こういった場合の実験データは一般に x_{ij} で表す。添字 i は因子の水準を、添字 j は繰返しを表す。実験データは一般に表 2.3 のようにまとめられる。

水準	A_1	A_2	...	A_i	...	A_a
繰 返 し	x_{11}	x_{21}	...	x_{i1}	...	x_{a1}
	x_{12}	x_{22}	...	x_{i2}	...	x_{a2}
	⋮	⋮		⋮		⋮
	x_{1n}	x_{2n}	...	x_{in}	...	x_{an}
和	$x_{1\cdot}$	$x_{2\cdot}$...	$x_{i\cdot}$...	$x_{a\cdot}$
平均	$\bar{x}_{1\cdot}$	$\bar{x}_{2\cdot}$...	$\bar{x}_{i\cdot}$...	$\bar{x}_{a\cdot}$

表 2.3 完全無作為化法による実験データ

補足

$$x_{i.} = \sum_{j=1}^n x_{ij} = A_i \text{ 水準でのデータの和}$$

$$\bar{x}_{i.} = \frac{1}{n} x_{i.} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij} = A_i \text{ 水準でのデータの平均値}$$

$$x_{..} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n x_{ij} = \text{全データの和}$$

$$\bar{x}_{..} = \frac{1}{an} x_{..} = \frac{1}{an} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n x_{ij} = \text{全データの平均値}$$

データの構造模型

データの構造模型を次のように設定する。

$$x_{ij} = \mu_i + e_{ij} \quad (2.1)$$

未知母数

- μ_i : A_i 水準での真の特性値
- e_{ij} : データ x_{ij} に含まれている実験誤差

ここで μ_i を次のように変形する。

$$\begin{aligned} \mu_i &= \bar{\mu}_{\cdot} + (\mu_i - \bar{\mu}_{\cdot}) \\ &= \mu + \alpha_i \end{aligned} \quad (2.2)$$

ただし

$$\bar{\mu}_{\cdot} = \frac{1}{a} \sum_{i=1}^a \mu_i, \quad \mu = \bar{\mu}_{\cdot}, \quad \alpha_i = \mu_i - \bar{\mu}_{\cdot}$$

- μ は A_i 水準での真の特性値 $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_a$ の平均であることから、**一般平均**と呼ばれる。

- α_i は μ_i の $\bar{\mu}$ からのずれであることから、**Aの主効果**と呼ばれる。

また、 $\sum_{i=1}^a \alpha_i = 0$ である。

- 誤差 e_{ij} は実験順序の無作為化により確率変数の実現値とみなすことができる。そこで、誤差 e_{ij} は互いに独立で正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従う変数であると仮定する。

↑
誤差分散と呼ぶ

以上のことをまとめると、データの構造モデルは次のようになる。

$$x_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij} \quad (2.3)$$

μ : 一般平均

α_i : A の主効果

e_{ij} : 誤差、正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従う



分散分析

ここでは、水準 A_1, A_2, \dots, A_a の間に違いがあるかどうかを調べる。

この問題に対して A の主効果 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_a$ はすべて等しいという仮説

$$H_0 : \alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_a = 0$$

を検定する。

この検定は分散分析法に基づいてなされる。



一般にデータ x_1, x_2, \dots, x_n が与えられているとする。

データのばらつきは、個々のデータの全体の平均値からの偏差の2乗和

$$\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}.)^2$$

としてはかられる。

今の場合の全実験データのばらつきは

$$S_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}..)^2$$

によってはかられる。

この S_T を総平方和と呼ぶ。

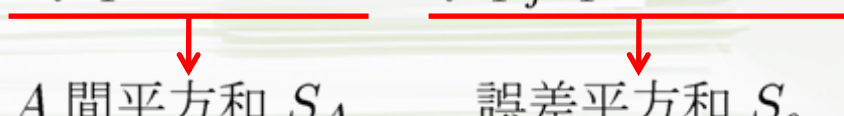
次に、この総平方和 S_T をばらつきを与える原因別に分解する。そこで考えられる次の2つの原因に分解する。

(1). 水準の変化による原因

(2). 実験誤差による原因

この2つに総平方和を分解すると次のようになる。

$$\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{..})^2 = n \sum_{i=1}^a (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})^2 + \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{i.})^2 \quad (2.4)$$



A 間平方和 S_A 誤差平方和 S_e

(2.4) 式の証明

$$x_{ij} - \bar{x}_{..} = (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..}) + (x_{ij} - \bar{x}_{i.})$$

と分解し、この両辺を2乗すると

$$(x_{ij} - \bar{x}_{..})^2 = (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})^2 + (x_{ij} - \bar{x}_{i.})^2 + 2(\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})(x_{ij} - \bar{x}_{i.})$$

となる。ここで、両辺の i 、 j についての和をとると

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{..})^2 &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})^2 + \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{i.})^2 \\ &\quad + 2 \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})(x_{ij} - \bar{x}_{i.}) \end{aligned}$$

両辺の各項を見てみると

$$\text{左辺} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{..})^2 = S_T$$

$$\text{右辺第一項} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})^2 = \underline{n} \sum_{i=1}^a (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})^2 = S_A$$

$$\text{右辺第二項} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{i.})^2 = S_e$$

$$\text{右辺第三項} = 2 \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})(x_{ij} - \bar{x}_{i.}) = 2 \sum_{i=1}^a (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..}) \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{i.})$$

$$= 2 \sum_{i=1}^a (\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..}) \left[\sum_{j=1}^n x_{ij} - n\bar{x}_{i.} \right] = 0$$

0

よって成立。

分散分析表

変動因	平方和	自由度	平均平方	F_0	平均平方の期待値
A 間	S_A	$a - 1 (= \phi_A)$	$\frac{S_A}{a - 1} (= V_A)$	V_A/V_e	$\sigma^2 + n\sigma_A^2$
誤差	S_e	$a(n - 1) (= \phi_e)$	$\frac{S_e}{a(n - 1)} (= V_e)$		σ^2
総	S_T	$an - 1 (= \phi_T)$			

表 2.4 完全無作為化法の分散分析表



期待値の計算の証明

$$\begin{aligned} E\{V_A\} &= E\left\{\frac{S_A}{a-1}\right\} = \frac{n}{a-1} E\left\{\sum_{i=1}^a (\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot})^2\right\} \\ &= \frac{n}{a-1} E\left\{\sum_{i=1}^a (\alpha_i + \bar{e}_i - \bar{e}_{\cdot\cdot})^2\right\} \\ &= \frac{n}{a-1} E\left\{\sum_{i=1}^a \alpha_i^2 + 2 \sum_{i=1}^a \alpha_i (\bar{e}_i - \bar{e}_{\cdot\cdot}) + \sum_{i=1}^a (\bar{e}_i - \bar{e}_{\cdot\cdot})^2\right\} \\ &= \frac{n}{a-1} \left[E\left\{\sum_{i=1}^a \alpha_i^2\right\} + 2 \sum_{i=1}^a \alpha_i E\left\{\bar{e}_i - \bar{e}_{\cdot\cdot}\right\} + E\left\{\sum_{i=1}^a (\bar{e}_i - \bar{e}_{\cdot\cdot})^2\right\} \right] \end{aligned}$$

α_i は母数なので、 $E\left\{\sum_{i=1}^a \alpha_i^2\right\} = \sum_{i=1}^a \alpha_i^2$ となる。

また、誤差 e_{ij} は正規分布に従うという仮定、すなわち $E(e_{ij}) = 0$ の仮定から $E\{\bar{e}_{i.} - \bar{e}_{..}\} = 0$ となる。ゆえに

$$2 \sum_{i=1}^a \alpha_i E\left\{\bar{e}_{i.} - \bar{e}_{..}\right\} = 0$$

また

$$E\left\{\sum_{i=1}^a (\bar{e}_{i.} - \bar{e}_{..})^2\right\} = (a-1)\text{Var}\{\bar{e}_{i.}\} = (a-1)\frac{\sigma^2}{n}$$

以上のことから、

$$E\{V_A\} = \frac{n}{a-1} \left[\sum_{i=1}^a \alpha_i^2 + (a-1)\frac{\sigma^2}{n} \right] = \sigma^2 + n\sigma_A^2$$

を得る。 $E\{V_e\}$ についても同様にできる。

最適水準の決定

検定をした結果、因子 A の水準間に有意な差があると判定されたとする。このとき、水準間の差や最適水準はどれか？といった問題が起こる。いま、 A の主効果を α_i とおいているので、 α_i を推定することとなる。

ここでは、 α_i の代わりに α_i に定数 μ を加えた $\mu + \alpha_i$ を A の主効果と考えることにする。

まずは $\mu + \alpha_i$ の点推定を考える。

$$\bar{x}_{i.} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\mu + \alpha_i + e_{ij}) = \mu + \alpha_i + \bar{e}_{i.}$$

から

$$E\{\bar{x}_{i.}\} = E\{\mu + \alpha_i + \bar{e}_{i.}\} = \mu + \alpha_i \quad (2.5)$$

$$\text{Var}\{\bar{x}_{i.}\} = \text{Var}\{\bar{e}_{i.}\} = \frac{1}{n} \sigma^2 \quad (2.6)$$

を得る。

次に $\mu + \alpha_i$ の区間推定を考える。 $\mu + \alpha_i$ の 95 % 信頼区間は、分散分析表から V_e は σ^2 の普遍推定量であることと、 V_e の自由度が $a(n - 1)$ であることがわかるので

$$\bar{x}_i. \pm t(a(n - 1), 0.05) \sqrt{\frac{V_e}{n}}$$

で与えられる。

まとめると

点推定 : A_i 水準でのデータの平均値 = \bar{x}_i

信頼区間 (95%) : $\bar{x}_i. \pm t(a(n - 1), 0.05) \sqrt{\frac{V_e}{n}}$