

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 6 日現在

機関番号：32612

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2019

課題番号：15K15952

研究課題名(和文) 応答曲面法に関する統計学的研究

研究課題名(英文) A study on statistical response surface methodology

研究代表者

松浦 峻 (MATSUURA, Shun)

慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授

研究者番号：70583368

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円

研究成果の概要(和文)：応答曲面法は、製品特性や品質特性(応答)と、(複数の)設計因子の値との関係について、実験計画法によって(主に)2次曲面の式を推定し、応答の予測や最適化を行う統計理論・手法の体系である。応答曲面法で用いられる実験計画は応答曲面計画、応答と設計因子間の関係式は応答曲面式と呼ばれる。本研究では、推定する応答曲面式のパラメータ数が実験回数より多い過飽和応答曲面計画における変数選択法、応答が複数あり互いに相関を持つときの応答曲面式の同時推定、欠測データが生じた場合の応答曲面式の予測精度の評価、を中心に応答曲面法に関連する統計学的手法・多変量解析手法の提案と発展を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、製品・工程の設計で用いられる応答曲面法に関連する統計的品質管理手法、多変量解析手法の基礎的研究に取り組み、新たな解析手法の提案およびその理論の発展を行った。具体的には、過飽和応答曲面計画、多応答曲面の同時推定、調合誤差因子実験、欠測データを伴う応答曲面推定などに関する統計学的課題に対して成果を得た。これらの研究成果は、品質管理・工程設計において応答曲面法がより有効に活用されるための基礎を提供すると考える。

研究成果の概要(英文)：Response surface methodology is composed of statistical theories and methods for estimating a functional relationship of (mainly) a second-order model between a product or quality characteristic (response) and the values of factors by the design of experiments and conducting prediction and optimization of the response. Experimental designs used in response surface methodology are called response surface designs and a functional relationship between the response and the factors is called a response surface model. In this research, statistical methods and multivariate analysis in response surface methodology were proposed and developed, such as variable selection methods for supersaturated response surface designs with more estimated parameters than experimental runs, simultaneous estimation of response surface models for multivariate responses having correlations, and evaluation of the prediction variance of the estimated response surface model with missing data.

研究分野：統計科学

キーワード：応答曲面法 実験計画法 中心複合計画

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

統計的品質管理,という言葉で代表されるように,製造業では昔から工程設計や品質管理に統計解析手法が活用されており,その重要性は製品の多特性化,多様化や,それに伴う製品設計サイクルの短期化によって増してきている(限られた回数の実験データから可能な限り高精度な推定を行って設計をしたい)。

近年,応答曲面法による製品設計がよく用いられている。応答曲面法は,製品特性や品質特性(応答)と,(複数の)設計因子の値との関係について,実験計画法によって(主に)2次曲面の式を推定し,応答の予測や最適化を行う統計理論・手法の体系である。応答曲面法で用いられる実験計画は応答曲面計画,応答と設計因子間の関係式は応答曲面式と呼ばれる。より具体的には,制御因子(工程の設計を決める因子)および誤差因子(実験ではその値を制御するが,実際の工程では制御できない因子)を(通常)複数個ずつ取り上げ(誤差因子は取り上げないこともある),応答曲面計画に従って制御因子と誤差因子を様々な値に設定して実験を行い,各実験で応答の値を測定し,得られた実験データを用いて応答曲面式を推定する。そして,推定された応答曲面式に基づき,応答の予測や最適化を行う。誤差因子を取り上げている場合は,応答の値が誤差因子の値の変化に対して頑健(ロバスト)で(応答分散を小さくし),かつ目標値に近くなるような制御因子の値を決定することが多い。

具体的には「研究の目的」の欄で述べるが,この応答曲面法について統計学的な観点での課題が多く残されている。本研究では応答曲面法に関連する統計的品質管理手法,多変量解析手法の基礎的研究に取り組み,新たな解析手法の提案およびその理論の発展を行う。

2. 研究の目的

本研究では,応答曲面法に関連する新たな統計的品質管理手法,多変量解析手法の提案とその理論の発展を目指す。具体的には,以下の課題に取り組む。

(1) 過飽和応答曲面計画の構成と解析法

過飽和実験計画とは,行の数(実験回数)よりも列の数(パラメータの数)のほうが多い実験計画のことである。少ない回数の実験で多くの因子を取り扱うための実験計画として注目されており,応答曲面推定のための過飽和実験計画(過飽和応答曲面計画)も議論されているが,取り上げた因子の中で応答に影響する因子が少数である場合を除き,応答曲面推定の精度は悪いことが報告されている。本研究では,応答に影響する因子がある程度多いときでも良い推定精度を示すような過飽和応答曲面計画の構成と,そのデータの解析法を提案することを課題とする。

(2) 調合誤差因子実験と直積実験の比較

設計現場では,実験回数の削減のため,取り上げた複数の誤差因子を1つの調合誤差因子にまとめて実験を実施することがあり,これは調合誤差因子実験と呼ばれる。これに対し,誤差因子を調合せずに全てを直交表の実験計画に割り付ける場合は直積実験と呼ばれる。前者のほうが実験回数は少なくなるが,推定精度が大きく悪化する可能性がある。本研究では,調合誤差因子実験によって得られる応答のデータと直積実験によって得られる応答のデータの関係について明らかにすることを課題とする。

(3) 多応答曲面の同時推定

製品設計において考慮すべき品質特性は,しばしば多数存在する。その場合,応答曲面法を実施する際,1回の実験ごとに多数の応答を測定し,実験結果を基に各応答のモデル式を推定する。従来,各応答の実験データを個別に扱って,それぞれの応答曲面式を推定することが多いが,共通の実験による応答間には通常は相関が生じる。本研究では,応答間に相関構造を仮定した多応答曲面モデルを基に,より高精度なパラメータの推定量を構築することを課題とする。

(4) 統計的管理図の発展

応答曲面法を用いて工程の設計が行われた後,実際に工程が狙った品質特性を維持できるかどうかについて,しばしば統計的管理図でモニタリングが行われ,応答曲面法による工程設計と統計的管理図によるモニタリングを繰り返すことで製品設計の作り込みがなされることがある。本研究では,統計的管理図について,従来の研究を発展させ,応答曲面法との設計サイクルの効率化を推し進めることを課題とする。

3. 研究の方法

本研究は,理論的な観点で進めるのが主であるため,統計学,多変量解析,品質管理に関する書籍,文献を参照しながら,紙,鉛筆,計算機,ソフトウェアを用いて研究を進める。得られた成果はまず,国内外の品質管理,統計学関連の研究会および学会で発表し,他の研究者との意見交換を行う。その後,論文としてまとめ,主に国際的学術雑誌へ投稿する。

4. 研究成果

(1) 過飽和応答曲面計画の構成と解析法

設計因子の数を p とおくと、2次の応答曲面式は、設計因子の主効果 (p 個)、2因子間交互作用効果 ($p(p-1)/2$ 個)、2次効果 (p 個)、および定数項からなる式であり、推定するパラメータは $p+p(p-1)/2+p+1=(p+1)(p+2)/2$ 個となる。これらのパラメータ全てを通常の最小2乗法等で推定するためには、少なくとも $(p+1)(p+2)/2$ 回以上の実験回数の応答曲面計画を用いる必要がある。よく用いられる応答曲面計画として、中心複合計画があり、これはある大きさ以上の2水準直交表から適切に(主効果だけでなく2因子間交互作用効果も推定が可能となるResolution Vと呼ばれる条件を満たすように) p 列を選び、それに2次効果を推定するための軸上実験(1つの因子の値をプラスとマイナスに大きく振り、他の因子の値を0にした実験を各因子ごとに行う実験)、および全ての因子の値を0に設定した中心点繰り返し実験を合わせることで構成される。中心複合計画はパラメータ数 $(p+1)(p+2)/2$ よりも実験回数が多い計画である。これに対し、過飽和応答曲面計画は、パラメータ数よりも少ない実験回数の計画であり、パラメータ推定の際は適切な変数選択等を行う必要が生じる。

過飽和応答曲面計画の一つの構成法として、アダマール行列(ただし、行列の大きさは行の数(および列の数)が p より大きく、かつ8で割ったら4余るものを用いる必要がある)から p 列を選んで、それに軸上実験と中心点繰り返し実験を加える方法がある。本研究では、この方法によって構成される過飽和応答曲面計画において、 $k(<p)$ 個の因子からなる応答曲面計画を取り出したときのD最適規準の(p 個から k 個の因子を選ぶ全通りの)幾何平均の値を求め、これが最大となるように、アダマール行列から p 列を選んで過飽和応答曲面計画を構成することを提案した。また、過飽和応答曲面計画のデータ解析に関して、従来、F検定に基づいたステップワイズな変数選択法によって重要な効果を選択することがなされていたが、重要な効果の数が大きいとき、変数選択の精度が悪いということが報告されていた。本研究では、リッジ回帰を基に重要な効果を選択する方法を過飽和応答曲面計画のデータ解析に適用し、F検定に基づくステップワイズ法と比較を行い、中心点繰り返し実験の数が4~6回程度以上であれば、重要な効果の数が大きいときにはリッジ回帰に基づく変数選択が有効であることを示した。

また、リッジ回帰による方法とは異なり、得られるパラメータの推定量の分散共分散行列の式を用いて、残差分散と多重共線性の両者に基づく変数選択規準を提案した。数値シミュレーションおよび実データへの適用を行い、この規準により多重共線性を抑えつつデータへの当てはまりが良いような変数の組み合わせが選択されることを示した。

(2) 調合誤差因子実験と直積実験の比較

直積実験では、制御因子を内側直交表あるいは応答曲面計画(行の数を m とおく)に、誤差因子を外側直交表(行の数を n とおく)に割り付け、直積の組み合わせ全ての $m \times n$ 回の実験を行う。これに対し、調合誤差因子実験では、誤差因子の値の設定を調合し、2通りのみの設定を用いるため、実験回数は $m \times 2$ 回となる。調合誤差因子実験は近年幅広く普及してきているが、しばしば直積実験と調合誤差因子実験では、得られる制御因子の最適な値が大幅に異なる結果になることがある。

本研究では、その理由の解明のため、直積実験と調合誤差因子実験で得られる応答分散の相関係数の式表現を導き、誤差因子の主効果および制御因子と誤差因子間の交互作用効果との関連性を示した。得られた式表現を基に、その相関係数の値が1になる条件や、正になる条件を与え、さらに、応答に影響する因子が少数である場合における性質について考察した。

(3) 多応答曲面の同時推定

応答曲面法において複数の応答を取り上げる場合がある。このとき、応答曲面計画において同じ実験で得られた応答間に相関が生じることが想定される。そのような構造の統計モデルの一つとしてSeemingly Unrelated Regressionモデルが知られている。

本研究では、Seemingly Unrelated Regressionモデルにおいて、多応答の分散共分散行列を推定する問題を議論し、スタイン損失関数および一次変換に関する共変性の下での最良共変推定量を導出し、最尤推定量など従来の推定量との比較を数値シミュレーションおよび中心複合計画への適用を通じて行った。また、得られた分散共分散行列の最良共変推定量を基に計算される相関係数行列が持つ性質について調べた。

さらに、先行研究で得られていたSeemingly Unrelated Regressionモデルの偏回帰係数ベクトルの最良共変推定量が、上記の分散共分散行列の最良共変推定量を用いた一般化最小2乗推定量で表されることを示した。偏回帰係数ベクトルの推定に関して、損失関数としてより一般的なリスク行列を用いた場合や、重要な効果の変数選択規準についても考察を行った。

(4) 統計的管理図の発展

統計的管理図において観測される連続的な時系列データあるいは関数データについて、そのデータが正規分布に従っていると仮定できるかどうかの問題となることがある。

本研究では、関数データ(時系列データ)の正規性の仮説検定手法を提案し、その検定統計量の漸近分布の導出を行い、提案手法の検出力を調べた。また、関連する話題として、位置母数、

尺度母数，回転母数を持つ多次元確率分布のprincipal points(主要点)の推定問題を扱い，多変量管理図への適用について議論を行った．

(5) 欠測データが生じた場合の応答曲面推定(研究が進捗する中で追加で生じた課題)

応答曲面法において，しばしば応答曲面計画の観測データに欠測が生じる場合がある．中心複合計画など設計因子の値の設定のバランスが取れた応答曲面計画を用いていたとしても，欠測データが存在することで，そのバランスが崩れ，応答曲面の推定精度さらに応答の予測精度が大きく悪化する可能性がある．

本研究では，中心複合計画において，欠測データが存在する場合の応答の予測精度の式を導出し，欠測データが存在しない場合の予測精度との比較を行い，それらの差(予測精度の悪化量)を求めた．得られた予測精度の悪化量の式を基に，予測応答を求める設計因子の値の変化によって，どのように応答の予測精度の悪化量が大きくなるか，あるいは小さくなるかについて考察を行った．特に，中心複合計画が回転可能性と呼ばれる条件を満たすとき，予測精度の悪化量の式が，欠測が生じた実験における設計因子の値のベクトルおよび予測応答を求める設計因子の値のベクトルのそれぞれのノルムと両ベクトルの内積のみに依存する関数として表されることを示した．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Shun Matsuura, Hiroshi Kurata	4. 巻 29
2. 論文標題 Covariance matrix estimation in a seemingly unrelated regression model under Stein's loss	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Statistical Methods and Applications	6. 最初と最後の頁 79-99
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10260-019-00473-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kohei Fujiwara, Shun Matsuura	4. 巻 49
2. 論文標題 Prediction variance of a central composite design with missing observation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Communications in Statistics - Theory and Methods	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/03610926.2019.1625925	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Manabu Kuroki, Shun Matsuura	4. 巻 48
2. 論文標題 Predictive principal variable selection for linear regression analysis	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Japanese Society for Quality Control	6. 最初と最後の頁 90-104
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shun Matsuura, Haruka Yamashita, Kimberly K. J. Kinateder	4. 巻 52
2. 論文標題 A statistical test for the hypothesis of Gaussian random function	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Statistics: A Journal of Theoretical and Applied Statistics	6. 最初と最後の頁 801-817
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/02331888.2018.1435659	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shun Matsuura	4. 巻 47
2. 論文標題 Correlation coefficient of response variances in compound noise and product array experiments	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Communications in Statistics - Theory and Methods	6. 最初と最後の頁 725-738
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/03610926.2017.1313985	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shun Matsuura, Shogo Tajima, Hideo Suzuki	4. 巻 2
2. 論文標題 Selection of active effects based on a ridge regression in supersaturated response surface designs	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Total Quality Science	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.17929/tqs.2.1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計11件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 松浦 峻, 倉田 博史
2. 発表標題 SURモデルにおける偏回帰係数ベクトルのリスク行列の下での最適な推定量について
3. 学会等名 2019年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松浦 峻, 黒木 学, 山下 遥
2. 発表標題 複数の目的変数を解析対象とした予測型主変数選択規準について
3. 学会等名 日本品質管理学会第49回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shun Matsuura, Thaddeus Tarpey
2. 発表標題 Estimation of principal points for multivariate location-scale-rotation families and applications
3. 学会等名 5th Institute of Mathematical Statistics Asia Pacific Rim Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松浦 峻, 倉田 博史
2. 発表標題 位置尺度分布族におけるprincipal pointsのある種の共変性の下での最適な推定量
3. 学会等名 2018年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤原 康平, 松浦 峻
2. 発表標題 中心複合計画において欠損がある場合の推定精度に関する研究
3. 学会等名 日本品質管理学会第48回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松浦 峻, 倉田 博史
2. 発表標題 SURモデルにおける相関係数が既知のときの分散共分散行列の最良共変推定について
3. 学会等名 2017年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松浦 峻, 倉田 博史
2. 発表標題 応答曲面法におけるSURモデルを用いた解析とその精度に関する研究
3. 学会等名 日本品質管理学会第47回年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松浦 峻, 倉田 博史
2. 発表標題 Seemingly Unrelated Regression Modelにおける偏回帰係数ベクトルと分散共分散行列の最良共変推定量について
3. 学会等名 研究集会「公的大規模データの利用におけるプライバシー保護の理論と応用」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松浦 峻
2. 発表標題 調合誤差因子実験の性質について
3. 学会等名 第11回日本統計学会春季集会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松浦 峻
2. 発表標題 制御因子と誤差因子の主効果および交互作用効果からなる加法モデルにおける調合誤差因子実験と直積実験の関連性について
3. 学会等名 日本品質管理学会第110回研究発表会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shun Matsuura, Shogo Tajima, Hideo Suzuki
2. 発表標題 Construction method and ridge regression for a supersaturated response surface design
3. 学会等名 Asian Network for Quality Congress 2015 (国際学会)
4. 発表年 2015年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----