

Orthogonal Fractional Factorial Structureを持つ Designについて

広大理 西井龍映

Fractional Factorial Design (FFD) の良さについては, Resolution & sample size N を固定した Design の class \mathcal{D} の A^- , D^- , E^- -optimality 等が考えられていて, それらは information matrix の固有値の函数となっている。また

(A): 考えてある parameter を互いに無相関で推定できる (すべての parameter は交絡 (confound) しない)。

(B): 各 factor's level がすべて等しいとき, Factor's permutation group に対する invariant test ができる。

とくに良さもあり, (B) は balanced array で, (A) の level が等しいとき orthogonal array で, level が等しくないときは \mathcal{D} で定義する orthogonal array \mathcal{D}' [Theorem 1.2] でかつそのときの \mathcal{D}' 満足されることがわかる。これは条件 (A) をゆるくした良さである。

(C): ある parameter の set と他の parameter の set が互いに無相関で推

定まる。

といふ性質をもつ Design について考えてみる。

1. $s_1 s_2 \cdots s_m$ Fractional Factorial Design

m 個の factor F_i は equi-spaced quantitative factor とし、 F_i の level は $\mathbb{Z}_{s_i} = \{0, 1, \dots, s_i - 1\}$ の元と考える。处理組合せ $\tau = (t_1, t_2, \dots, t_m) \in \mathbb{Z}_{s_1} \times \mathbb{Z}_{s_2} \times \cdots \times \mathbb{Z}_{s_m}$ の effect を $\eta(\tau)$ 、それらを (t_1, \dots, t_m) の辞書式順序で縦に並べた vector を $\eta(t)$ とし、 η は parameter of vector。

$\eta = \begin{bmatrix} \eta(E_1, \dots, E_m) \\ \vdots \\ \eta(E_{s_1}) \end{bmatrix}$ ($s_1 \times s_2 \times \cdots \times s_m \times 1$) (η と同じ順序) が次のよう分解されると仮定する。

$$\eta = D_1 \otimes D_2 \otimes \cdots \otimes D_m \otimes \theta$$

ただし $D_i = (d_i(\alpha, \beta))_{\alpha, \beta \in \mathbb{Z}_{s_i}}$ は $s_i \times s_i$ 対称正則行列で、column vector は互いに直交し、 $d_i(\alpha, \alpha) = 1$ ($\forall \alpha \in \mathbb{Z}_{s_i}$)、 $d_i(\alpha_i + \alpha, \beta) = (-1)^{\beta} d_i(\alpha, \beta)$

を満たすとする。通常考えられる D_i は直交多項式により定まる行列であり、それらはこの条件を満足する。たとえば $s_i = 2, 3, 4$ のときには $D_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$, $D_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$, $D_4 = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 3 \\ 1 & 1 & -1 & -3 \\ 1 & 3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ である。

3. D_i の条件から α_i が oddかつ $\beta \neq \text{odd} (\mathbb{Z} \text{ の元とみる})$ のとき

$$d_i\left(\frac{\alpha_i+1}{2}, \beta\right) = 0$$

$\ell(\alpha, \dots, \alpha)$ は general mean, $A(\alpha_1, \dots, \alpha_p; \beta)$ は Factor F_i の main effect

$f(\alpha_1, \dots, \alpha_p; \beta) = A(\alpha_1 + \beta, \dots, \alpha_p + \beta)$ は Factor $F_1 \cdots F_p$ 間の interaction と呼ばれる。実際的な立場からは、高次の interaction は main effect 等

の依次の interaction らべると十分小さく、またその解釈も困難なことから、それを無視可能として data の解析を行う。 $\lambda \in \mathbb{R}^{(l+1)-\text{factor interaction}}$ 以上は negligible つまり $\Theta_e = \{\theta(E_1, \dots, E_m) \mid (E_1, \dots, E_m) \text{のうち非0なる要素は } l \text{ 以下}\}$ に含まれる parameter をすべて、又は一部分を推定することを目的とする。

sample size が N の design T は、それより処理組合せ (assembly) を row vector にもつような $N \times m$ 行列と同一視する。 T による観測値ベクトル $y(T)$ は Θ_e に含まれる parameter によつて

$$y(T) = E_T \theta_e + e(T) \quad (E(e(T)) = 0, V(e(T)) = \sigma^2 I_N)$$

ある回帰式があつてはめられる。 $E_T E_T' = M_T$ とかいて、 M_T (information matrix) の性質を調べることになる。

$l = m$ のとき、 M_T の要素 γ (parameter pair $(\alpha(\beta), \beta(\beta))$) に対応する γ のを $\gamma(\alpha, \beta)$ とかくことにし、特に $\beta = 0$ のときの $\gamma(\alpha, 0)$ は $\gamma(\alpha)$ とかく。任意の assembly t に対し、 T がそれを何回含むか。その回数を $\lambda(t)$ (0 から N までの integer) であらわせば、次の Lemma が成り立つ。

LEMMA 1.1

$$\gamma = D_1' \otimes D_2' \otimes \cdots \otimes D_m' \lambda$$

ただし $\gamma = \begin{bmatrix} \gamma(d_1, \dots, d_m) \end{bmatrix}$, $\lambda = \begin{bmatrix} \lambda(t_1, \dots, t_m) \end{bmatrix}$

④ $\gamma(\lambda) = \sum_{t_1, \dots, t_m} d_1(t_1, \lambda_1) \cdots d_m(t_m, \lambda_m) \lambda(t_1, \dots, t_m)$ であるから。

この Lemma を使うことにより, $2l \leq m$ を満たす l に対し

THEOREM 1.2 T の resolution $\# \Theta_L$ (M_T が正則) のときすべての推定量が互いに無相関, すなわち M_T が対角行列であるための必要十分条件は, T のどの $2l$ 個の column からなる $N \times 2l$ の行列もすべてのあらわれうる $1 \times 2l$ の row vector を同じ目数 (どの column を選ぶかには依存する) 含む (orthogonal array) となることである。

以上の Lemma, Theorem 1.1 は D_i について $d_i(\alpha, \beta) = (-1)^{\beta} d_i(\alpha + \beta)$ を要求する必要はない。次は fold-over design の一般化である。

DEFINITION T を A_1, \dots, A_m FFD とする。 T が d -symmetric design ($1 \leq d \leq m$) であるとは, m 個のうちの任意の d 個の factor F_{i_1}, \dots, F_{i_d} について, $\sum \lambda(t_1 - t_{i_1} \dots t_{i_d} \dots t_m) = \sum \lambda(t_1, \dots, A_1 - t_{i_1}, \dots, A_d - t_{i_d}, \dots, t_m)$ が任意の $(t_{i_1}, \dots, t_{i_d}) \in \mathbb{Z}_{A_1} \times \dots \times \mathbb{Z}_{A_d}$ について成立するときをいう。ただし \sum は $\{t_1, \dots, t_d\}$ 以外のすべての t について \mathbb{Z}_m 内の要素を動いたときの和とする。

parameter $\theta(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m)$ は $\sum \varepsilon_i$ (\mathbb{Z} の元との和) が odd 又は even かに応じて odd 又は even parameter と呼ばれる。parameter の set Θ_L は odd parameter の set L even parameter の union $\Theta_{L0} \cup \Theta_{Le}$ と分

割され縦ベクトルに並べたものをそれぞれ $\underline{\theta}_{\text{lo}}, \underline{\theta}_{\text{le}}$ とする。

THEOREM 1.3. T を Resolution Θ_L の FFD とする ($2l \leq m, m \geq 3$). T による $\underline{\theta}_L = \left(\begin{smallmatrix} \underline{\theta}_{\text{lo}} \\ \underline{\theta}_{\text{le}} \end{smallmatrix} \right)$ の推定量が $\text{Cov}(\hat{\underline{\theta}}_{\text{lo}}, \hat{\underline{\theta}}_{\text{le}}) = 0$ を満たすための必要十分条件は、 T が $2l$ -symmetric design である = である。
($\lambda_1 = \dots = \lambda_m = 2$ のときは $2l$ を $2l-1$ におきかえればよい)

証明 $m=2l$ ($m > 2l$ のときは同様、記号が複雑になるので省略)

(\Rightarrow) $\underline{\theta}_L$ は $\underline{\theta}_{\text{lo}}$ と $\underline{\theta}_{\text{le}}$ 2つに分割されていて $\text{Cov}(\hat{\underline{\theta}}_{\text{lo}}, \hat{\underline{\theta}}_{\text{le}}) = 0$ より M_T の $\underline{\theta}_{\text{lo}}$ と $\underline{\theta}_{\text{le}}$ に対応する行列は 0 である。すなわち
 $e(d, \beta) = 0, \forall d \in \Theta_{\text{lo}}, \forall \beta \in \Theta_{\text{le}}$ を意味し、このことは任意の $\sum \varepsilon_i$ が odd となる integer ($0 \leq \varepsilon_i \leq \lambda_i - 1$) について $\gamma(E_1, \dots, E_m) = 0$ となることを含む。Lemma 1.1 の式を Δ について解いて

$$\Delta = E_1 \otimes \dots \otimes E_m \quad \underline{\gamma}$$

を得る。ただし $E_i = D_i (D_i' D_i)^{-1}$ で $D_i' D_i$ は D_i の column vector が直交しているという条件から対角行列であり、そのため $E_i = (e_i(d, \beta))_{d, \beta \in \Theta_{\text{lo}}}$ の要素も $e_i(d, \beta) = (-1)^\beta e_i(\lambda_i - 1 - d, \beta)$ を満たす行列となつて γ は $e_1(d_1, \beta_1) e_2(d_2, \beta_2) \dots e_m(d_m, \beta_m) = e(\Delta, \underline{\gamma})$ とおくと

$$\lambda(\pm) = \sum_{\varepsilon: \text{even}} e(\pm, \varepsilon) \gamma(\varepsilon) = \sum_{\varepsilon: \text{even}} e(\pm, \varepsilon) \underline{\gamma}(\varepsilon)$$

が成立する。 $\pm^* = (\lambda_1 - t_1, \dots, \lambda_m - t_m)$ とおくと $e(\pm^*, \varepsilon) = (-1)^{\sum \varepsilon_i} e(\pm, \varepsilon)$ が E_i の性質よりわかるから

$$\lambda(\pm^*) = \sum_{\varepsilon: \text{even}} e(\pm^*, \varepsilon) \gamma(\varepsilon) = \sum_{\varepsilon: \text{even}} e(\pm, \varepsilon) \underline{\gamma}(\varepsilon)$$

という等式が成立する。故に $\lambda(\pm) = \lambda(\pm^*)$ がすべての \pm につい
て成立するから T は $2l$ -symmetric design である

(\Leftarrow) $\lambda(\pm) = \lambda(\pm^*)$ が常に満たされていふから $\sum \varepsilon_i$ が odd とな
る任意の $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m)$ に対して

$$\begin{aligned}\gamma(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m) &= \sum_{\pm} d(\pm, \varepsilon) \lambda(\pm) = \frac{1}{2} \sum_{\pm} \{ d(\pm, \varepsilon) \lambda(\pm, \varepsilon) + d(\pm^*, \varepsilon) \lambda(\pm^*, \varepsilon) \} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\pm} \{ d(\pm, \varepsilon) + d(\pm^*, \varepsilon) \} \lambda(\pm, \varepsilon) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\pm} (1 + (-1)^{\sum \varepsilon_i}) d(\pm, \varepsilon) \lambda(\pm, \varepsilon) \\ &= 0\end{aligned}$$

又 $\varepsilon(a, b)$ ($a \in \Theta_{e,0}$, $b \in \Theta_{e,e}$) は $\{ \gamma(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m) \mid \sum \varepsilon_i : \text{odd} \}$ の元の一
次結合で表わせることは、 $(d_i(a\beta)d_i(0, \beta'), \dots, d_i(A_{i-1}, B)d_i(A_i, B))'$ ($\beta, \beta' \in \mathbb{Z}_{q_i}$)

というベクトルも D_i の column vector と同様な性質を満たす

$(\beta + \beta')$ が odd か even かによつて同符号か異符号) ことから示すこと
ができる。故に $\varepsilon(a, b) = 0$ すなはち $\text{Cov}(\hat{\theta}_{e,0}, \hat{\theta}_{e,e}) = 0$

2. 2^m -Balanced Fractional Factorial Design

この章では特に $A = \dots = A_m = 2$ の場合について考えてみる。
 $\theta(i_0 \dots i_{l-1} i_l \dots i_p)$ を $\theta(i_0 \dots i_p)$ と略記する。また design T と 1 つ balanced
design を考えるべく $\gamma_p = \gamma(i_0 \dots i_{l-1} i_l \dots i_p)$, $r_0 = \gamma(0 \dots 0) (= N)$ と略記する。

Balanced Design の解析の手法(山本・白倉・栗田(1976))により次
の 2 つの Theorem を得る。

THEOREM 2.1. T を index set $\{\mu_0, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4\}$ を持つ Resolution R_2 の 2^m -Balanced Fractional Factorial Design とする。 T によると main effect と two-factor interaction の推定量の相関が 0 であるための必要十分条件は index が $\mu_0 = \mu_4, \mu_1 = \mu_3$ の関係を持つことである。

証明 (\Leftarrow) $\mu_0 = \mu_4, \mu_1 = \mu_3$ ならば T は 4-symmetric design である。故に Theorem 1.3 より odd parameter $\theta(1), \dots, \theta(m)$ と even parameter $\theta(0 \cdots 0), \theta(12), \dots, \theta(m-1, m)$ の推定量の相関は 0 である。また 3 人 main effect と two factor interaction の推定量の相関は 0 である。

(\Rightarrow) T は Resolution R_2 の BFFD であるから T の information matrix M_T は直交行列 $P_2 ((1 + \binom{m}{1}) \times (1 + \binom{m}{1} + \binom{m}{2}))$ によると

$$M_T = P_2 \begin{bmatrix} K_0 & & \\ & K_1 & \\ & & K_2 \end{bmatrix} P_2$$

$K_0: 3 \times 3$
 $K_1: 2 \times 2$
 $K_2: 1 \times 1$

と分解される。 M_T^{-1} と P_2 を用いて $K_i \rightarrow K_i^{-1}$ ($i=0, 1, 2$) に換えて表現できること。仮定より main effect と two factor interaction に対応する M_T^{-1} の submatrix が 0 であるから $K_1^{-1} = \begin{bmatrix} * & 0 \\ 0 & *$ となり

$$K_1 = \begin{bmatrix} r_0 - r_2 & \sqrt{m-2}(r_1 - r_3) \\ \sqrt{m-2}(r_1 - r_3) & r_0 + (m-4)r_2 - (m-3)r_4 \end{bmatrix}$$

が与えられていくので $r_1 = r_3$ である。

この関係を K_0 に代入すると

$$K_0 = \begin{bmatrix} r_0 & \sqrt{m}r_1 & \sqrt{\binom{m}{2}}r_2 \\ r_0 + (m-1)r_2 & m\sqrt{\frac{m-1}{2}}r_1 & \\ (\text{sym.}) & r_0 + 2(m-2)r_2 + \binom{m-2}{2}r_4 & \end{bmatrix}$$

となり。前と同じ理由で $(K_0^\top)_{2,3} = 0$

であるから $\begin{bmatrix} r_0 & \sqrt{m}r_1 \\ \sqrt{\binom{m}{2}}r_2 & m\sqrt{\frac{m-1}{2}}r_1 \end{bmatrix} = 0$ 故に $r_1(r_0 - r_2) = 0$, K_1 が positive

definite なつて " $r_0 - r_2 > 0$ " がわかつて いる。故に $r_1 = r_3 = 0$. この

ことを $\{\mu_0, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4\}$ と $\{r_0, r_1, r_2, r_3, r_4\}$ との間の関係式に代入
すまないと $\mu_0 = \mu_4 = \frac{1}{8}\{r_0 + 6r_2 + r_4\}$, $\mu_1 = \mu_3 = \frac{1}{16}\{r_0 - r_4\}$

つまり T は 4-symmetric design であることが証明された。

[注] 結局 main effect の推定量は general mean の推定量とも無相
関になつてしまふ。

THEOREM 2.2. T が strength $2l$, resolution R_l の 2^m -BFFD ($6 \leq l \leq m$) とする。

任意の p, q ($1 \leq p \leq q \leq l$) に対し、すべての p -factor interaction と
 q -factor interaction と covariance が 0 となるための 必要十分条件

は T が strength $2l-1$ の orthogonal array であることがある。

つまり T の index set を $\{\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{2l}\}$ とすれば $\mu_0 = \mu_1 = \dots = \mu_{2l}$
 $\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_{2l-1}$ が成り立つて いることと必要十分であるとい
うこととなる。

証明 (\Leftarrow) T が strength $2l-1$ の orthogonal array であれば

$$M_T = \begin{bmatrix} N & 0 & 0 \\ 0 & N & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$

$$M_T^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{N}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{N} & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$

であるから

γ -factor interaction と δ -factor interaction とは無相関である。

$$(\rightarrow) M_T^{-1} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & \theta(\alpha-\alpha') & * & * \\ \hline * & e(i) & * & C \\ \hline & 0 & 0 & 0 \\ \hline \end{array} = P_l' \begin{bmatrix} K_0^{-1} & & & \\ & K_1^{-1} & \cdots & \\ & \vdots & & \\ & K_{l-1}^{-1} & & \\ \hline 0 & & & \\ \hline & 0 & & \\ \hline \end{bmatrix} P_l$$

となる直交行列 P_l' が存在することが知られている。

ただし K_i は $(l-i+1) \times (l-i+1)$ 行列で、この場合の M_T^{-1} の形から $1 \leq i \leq l-1$ なる i に対して K_i^{-1} (K_i も) は対角行列である。ここで $(l-1)$ -factor interaction と l -factor interaction 全体に対応する M_T の sub-matrix $M_T(l-1, l)$ をみると その行列は $\gamma_1, \gamma_3, \dots, \gamma_{2l-1}$ を要素にもつていて K_i ($1 \leq i \leq l-1$) の非対角成分がすべて 0 であることがわかる。すなはち $\gamma_1, \gamma_3, \dots, \gamma_{2l-1}$ の $(l-1)$ 本の一次独立な contrast が 0 であることがわかる。 $(K_i$ の $(l-i, l-i+1)$ 成分は $\gamma_1, \gamma_3, \dots, \gamma_{2l-1}$ の contrast が生成されるから)。故に $\gamma_1 = \gamma_3 = \dots = \gamma_{2l-1}$ が示された。

同様に M_T の sub-matrix $M_T(l-2, l)$ を考えるなどにより $\gamma_2 = \gamma_4 = \dots = \gamma_{2l-2}$ を示すことができる。さらに K_1 の (1,2) 成分が $\sqrt{m-2}(\gamma_1 - \gamma_3)$ で K_1 が対角行列であることがから $\gamma_1 = \gamma_3$ すなはち $\gamma_1 = \gamma_2 = \dots = \gamma_{2l-1}$ ($= \gamma$ とおく) がわかる。ここで K_0^{-1} は M_T^{-1} の仮定により $K_0^{-1} = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & \cdots & a_l \\ a_1 & b_1 & 0 & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_l & 0 & \cdots & b_l \end{bmatrix}$ となっていて K_0 は N, γ で $\begin{bmatrix} N & \sqrt{m}\gamma \\ \sqrt{m}\gamma & N + (m-1)\gamma \\ \vdots & \vdots \\ \sqrt{(l-1)}\gamma & \sqrt{\frac{m-1}{2}}\gamma \end{bmatrix}$ と表わせると γ と仮定し $K_0 K_0^{-1}$ の (1,2) 成分と (3,2) 成分を具体的に書き表わすと

$$\begin{cases} N a_1 + \sqrt{m} \gamma b_1 = 0 \quad \cdots \textcircled{1} \\ \sqrt{\binom{m}{2}} \gamma a_1 + m \sqrt{\frac{m}{2}} \gamma b_1 = 0 \end{cases} \quad \text{を得る。} \quad \gamma \neq 0 \Leftrightarrow a_1 = -\sqrt{m} b_1$$

$\therefore n$ を \textcircled{1} 式に代入して $\sqrt{m}(n-N)b_1 = 0$. K_0^{-1} は positive definite

より $b_1 > 0$ 故に $N = \gamma = n$ は M_T が non-singular (resolution $2\ell+1$)

であることは矛盾する。故に $\gamma = 0$ すなはち $\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_{2\ell} = 0$

が示された。これは T が strength $2\ell+1$ の orthogonal array である

ことを意味する。 T は strength 2ℓ の Balanced array で index が $\{u_0, u_1, \dots, u_{2\ell}\}$ であるから strength $2\ell+1$ と \pm の Balanced array

と \pm の index は $\{u_0+u_1, u_1+u_2, \dots, u_{2\ell-1}+u_{2\ell}\}$ であり orthogonal array であるためには $u_0+u_1 = u_1+u_2 = \dots = u_{2\ell-1}+u_{2\ell}$ でなければならぬ。故に $u_0 = u_2 = \dots = u_{2\ell}$, $u_1 = u_3 = \dots = u_{2\ell-1}$ が成立する

明された。

REFERENCE

Yamamoto, S., Shirakura, T. and Kuwada, M. (1976). Characteristic polynomials of the information matrices of balanced fractional 2^m factorial designs of higher $(2\ell+1)$ resolution, "Essays in Probability and Statistics" (S. Ikeda et al., Eds.), birthday column in honor of Professor J. Ogawa, Shinko Tsusho Co. Ltd., Tokyo, 73-94.