

Orthogonal Fractional Factorial Structure を持つ Design について

広 大 理      西 井 龍 映

Fractional Factorial Design (FFD) の良さとしては, Resolution と sample size  $N$  を固定した Design の class での A-, D-, E-optimality 等が考えられていて, それらは information matrix の固有値の関数となっている。また

- (A): 考えている 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 の level がすべて等しいとき, Factor の permutation group に対し invariant test ができる。

とこの良さもあり, (B) は balanced array で, (A) は level が等しいとき orthogonal array で, level が等しくないときはここで定義する orthogonal array で [Theorem 1.2] でかつそのときのみ満足されることがわかっていて, ここでは条件 (A) をゆるくした良さがある

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

定できる。

という性質をもつ 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、その

level は  $Z_{d_i} = \{0, 1, \dots, d_i - 1\}$  の元と考える。処理組合せ  $\pm = (t_1, t_2, \dots, t_m)$

$\in Z_{d_1} \times Z_{d_2} \times \cdots \times Z_{d_m}$  の effect を  $\eta(\pm)$ 、それらを  $(t_1, \dots, t_m)$  の辞書式順序

で縦に並べた vector を  $\underline{\eta}$  とし、 $\underline{\eta}$  は parameter の vector

$\underline{\theta} = \left[ \theta(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m) \right]_{\varepsilon_i \in Z_{d_i}}$  ( $d_1 \times \cdots \times d_m \times 1$ ) ( $\underline{\eta}$  と同じ順序) で次のように分解さ

れておくと仮定する。

$$\underline{\eta} = D_1 \otimes D_2 \otimes \cdots \otimes D_m \underline{\theta}$$

ただし  $D_i = (d_i(\alpha, \beta))_{\alpha, \beta \in Z_{d_i}}$  は  $d_i \times d_i$  実正則行列で、column vector

は互いに直交し、 $d_i(\alpha, 0) = 1$  ( $\forall \alpha \in Z_{d_i}$ )、 $d_i(d_i - 1 - \alpha, \beta) = (-1)^\beta d_i(\alpha, \beta)$

を満たすものとする。通常考えられている  $D_i$  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

えば  $d_i = 2, 3, 4$  のときは  $D_2 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ ,  $\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ ,  $\begin{bmatrix} 1 & -3 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 3 \\ 1 & 1 & -1 & -3 \\ 1 & 3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$  であ

る。  $D_i$  の条件から  $d_i$  が odd かつ  $\beta \neq \text{odd}$  ( $Z$  の元とみよ) のとき

$$d_i\left(\frac{d_i-1}{2}, \beta\right) = 0 \quad \text{となる。}$$

$\theta(0, \dots, 0)$  は general mean,  $\theta(0, \dots, \varepsilon_i, \dots, 0) (\varepsilon_i \neq 0)$  は Factor  $F_i$  の main effect

$\theta(0, \dots, \varepsilon_i, \dots, \varepsilon_j, \dots, 0) (\varepsilon_i \neq 0, \dots, \varepsilon_j \neq 0)$  は Factor  $F_i, \dots, F_j$  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

の低次の interaction に比べると十分小さく、またその解釈も困難なことから、それらを無視可能として data の解析を行う。そこで  $(l+1)$ -factor interaction 以上は negligible つまり  $\Theta_l = \{ \theta(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m) \mid (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m) \text{のうち非0なる要素は } l \text{以下} \}$  に含まれる parameter のすべて、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、それの処理組合せ (assembly) を row vector に基づくような  $N \times m$  行列と同一視する。  $T$  による観測値ベクトル  $y(T)$  は  $\Theta_l$  に含まれる parameter によって

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

なる回帰式が当てはめられる。  $E_T E_T' = M_T$  とおいて、  $M_T$  (information matrix) の性質を調べることにする。

$l = m$  のとき、  $M_T$  の要素が parameter の pair  $(\beta(d), F(d))$  に対応するものを  $F(d, d)$  とかくことにし、特に  $\beta = 0$  のときの  $F(d, d)$  は  $\gamma(d)$  とおく。任意の assembly  $\pm$  に対し、  $T$  がそれを何回含むか、その回数を  $\lambda(\pm)$  (0 から  $N$  までの integer) であらわせば、次の Lemma が成立する。

LEMMA 1.1

$$Y = D_1' \otimes D_2' \otimes \dots \otimes D_m' \Delta$$

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

$$\textcircled{?} \quad \gamma(d) = \sum_{t_1, \dots, t_m} d_1(t_1, d_1) \dots d_m(t_m, d_m) \lambda(t_1, \dots, t_m) \text{ であるから。}$$

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 が  $\mathcal{O}_2$  ( $M_T$  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 を同じ回数 (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 には  $D_i$  について  $d_i(\alpha, \beta) = (-1)^\beta d_i(\alpha + \beta)$  を要求する必要はない。これは fold-over design の一般化である。

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

parameter  $\theta(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m)$  は  $\sum \varepsilon_i$  ( $\mathbb{Z}$  の元としての和) が odd 又は even かに対応して odd 又は even parameter と呼ばれる。parameter の set  $\mathcal{H}_o$  は odd parameter の set と even parameter の union  $\mathcal{H}_{eo} \cup \mathcal{H}_{ee}$  と分

割られ縦ベクトルに並べたものをそれぞれ  $\underline{A}_{e_0}, \underline{A}_{e_e}$  とする。

THEOREM 1.3.  $T$  を Resolution  $\mathcal{A}_e$  の FFD とする ( $2l \leq m, \mu_i \geq 3$ ).  $T$  による  $\underline{A}_e = \begin{pmatrix} \underline{A}_{e_0} \\ \underline{A}_{e_e} \end{pmatrix}$  の推定量が  $\text{Cov}(\hat{\underline{A}}_{e_0}, \hat{\underline{A}}_{e_e}) = 0$  を満たすための必要十分条件は、 $T$  が  $2l$ -symmetric design であることである。

( $\mu_1 = \dots = \mu_m = 2$  のときは  $2l$  を  $2l-1$  に置きかえればよい)

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

( $\Rightarrow$ )  $\underline{A}_e$  は  $\underline{A}_{e_0}$  と  $\underline{A}_{e_e}$  2つに分割されていて  $\text{Cov}(\hat{\underline{A}}_{e_0}, \hat{\underline{A}}_{e_e}) = 0$  より

$M_T$  の  $\underline{A}_{e_0}$  と  $\underline{A}_{e_e}$  に対応する行列は  $0$  である。すなわち

$E(\Delta, \beta) = 0 \quad \forall \alpha \in \mathcal{A}_{e_0}, \forall \beta \in \mathcal{A}_{e_e}$  を意味し、このことは任意

の  $\sum \varepsilon_i$  が odd となる integer ( $0 \leq \varepsilon_i \leq \mu_i - 1$ ) について  $\chi(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m) = 0$  となることを含む。Lemma 1.1の式を  $\Delta$  について解いて

$$\underline{\lambda} = E_1 \otimes \dots \otimes E_m \quad \chi$$

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

$E_i = (e_i(\alpha, \beta))_{\alpha, \beta \in \mathcal{Z}_{\mu_i}}$  の要素も  $e_i(\alpha, \beta) = (-1)^\beta e_i(\mu_i - 1 - \alpha, \beta)$  を満たす行列となっている。  $e_1(\alpha_1, \beta_1) e_2(\alpha_2, \beta_2) \dots e_m(\alpha_m, \beta_m) = e(\Delta, \beta)$  とおくと

$$\lambda(\pm) = \sum_{\sum \varepsilon_i: \text{even}} e(\pm, \varepsilon) \chi(\varepsilon)$$

が成立する。  $\pm^* = (\mu_1 - 1 - \varepsilon_1, \dots, \mu_m - 1 - \varepsilon_m)$  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

$$\lambda(\pm^*) = \sum_{\sum \varepsilon_i: \text{even}} e(\pm^*, \varepsilon) \chi(\varepsilon) = \sum_{\sum \varepsilon_i: \text{even}} e(\pm, \varepsilon) \chi(\varepsilon)$$

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

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

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

又  $\varepsilon(\alpha, \beta)$  ( $\theta(\alpha) \in \mathbb{H}_{2,0}$ ,  $\theta(\beta) \in \mathbb{H}_{2,e}$ ) 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、 $(d_i(\alpha, \beta) d_i(0, \beta'), \dots, d_i(\alpha, \beta) d_i(\alpha, \beta'))$  ( $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}_2$ )

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 かによって同符号か異符号) によって示すことができる。故に  $\varepsilon(\alpha, \beta) = 0$  となつて  $\text{Cov}(\hat{\theta}_{2,0}, \hat{\theta}_{2,e}) = 0$ 。

## 2. $2^m$ -Balanced Fractional Factorial Design

この章では特に  $\lambda_1 = \dots = \lambda_m = 2$  の場合について考えてみる。

$\theta(0 \dots 1 \dots 1 \dots 0)$  を  $\theta(i_1 \dots i_p)$  と略記する。また design  $T$  として balanced design を考えるので  $\gamma(10 \dots 0) = \gamma(010 \dots 0) = \dots = \gamma(0 \dots 01)$  等が成り立つが、それらを  $\gamma_p = \gamma(0 \dots 1 \dots 1 \dots 0)$ ,  $\gamma_0 = \gamma(0 \dots 0) (= N)$  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。



$$K_0 = \begin{bmatrix} \sigma_0 & \sqrt{m} \sigma_1 & \sqrt{\binom{m}{2}} \sigma_2 \\ \sigma_0 + (m-1) \sigma_2 & m \sqrt{\frac{m-1}{2}} \sigma_1 & \\ (\text{sym.}) & \sigma_0 + 2(m-2) \sigma_2 + \binom{m-2}{2} \sigma_4 & \end{bmatrix} \quad \text{となり. 前と同じ理由で } (K_0^{-1})_{23} = 0$$

であるから  $\begin{bmatrix} \sigma_0 & \sqrt{m} \sigma_1 \\ \sqrt{\binom{m}{2}} \sigma_2 & m \sqrt{\frac{m-1}{2}} \sigma_1 \end{bmatrix} = 0$  故に  $\sigma_1(\sigma_0 - \sigma_2) = 0$ ,  $K_1$  が positive definite なるので  $\sigma_0 - \sigma_2 > 0$  がわかっている。故に  $\sigma_1 = \sigma_3 = 0$ 。この

ことを  $\{\mu_0, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4\}$  と  $\{\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4\}$  との間の関係式に代入する。ことにより  $\mu_0 = \mu_4 = \frac{1}{6} \{\sigma_0 + 6\sigma_2 + \sigma_4\}$ ,  $\mu_1 = \mu_3 = \frac{1}{6} \{\sigma_0 - \sigma_4\}$  となり  $T$  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ってしまう。

THEOREM 2.2.  $T$  を strength  $2l$ , resolution  $\Theta_l$  の  $2^m$ -BFFD ( $6 \leq 2l \leq m$ ) 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 との covariance が 0 となるための必要十分条件は  $T$  が strength  $2l-1$  の orthogonal array であることである。つまり  $T$  の index set を  $\{\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{2l}\}$  とすれば  $\mu_0 = \mu_2 = \dots = \mu_{2l}$ ,  $\mu_1 = \mu_3 = \dots = \mu_{2l-1}$  が成り立っていることと必要十分であるということになる。

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

$$M_T = \begin{array}{c|c} \begin{matrix} N & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & N \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ * \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 0 & & * \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ * \end{matrix} \end{array} \quad \text{となる。} \quad M_T^{-1} = \begin{array}{c|c} \begin{matrix} \frac{1}{N} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & \frac{1}{N} \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ * \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 0 & & * \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ * \end{matrix} \end{array} \quad \text{であるから}$$



$p$ -factor interaction と  $q$ -factor interaction とは無相関である。

$$(\rightarrow) \quad M_T^{-1} = \begin{array}{c} \{0 \dots 0\} \{x \dots x\} \\ \{0 \dots 0\} \{x \dots x\} \\ \{0 \dots 0\} \{x \dots x\} \end{array} = P'_l \begin{bmatrix} K_0^{-1} & & & \\ & K_1^{-1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & K_{l-1}^{-1} \\ & & & & 0 \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & K_l^{-1} \\ & & & & & & & K_{l-1}^{-1} \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} P_l$$

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  $i$  については  $K_i^{-1}$  ( $K_i$  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  $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{2^{l-1}}$  を要素にもっており、 $K_i$  ( $1 \leq i \leq l-1$ ) の非対角成分がすべて 0 であることから、 $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{2^{l-1}}$  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  $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{2^{l-1}}$  の contrast を生成されるから)。故に  $\gamma_1 = \gamma_2 = \dots = \gamma_{2^{l-1}}$  が示された。

同様に  $M_T$  の sub-matrix  $M_T(l-2, l)$  を考えることにより

$\gamma_2 = \gamma_4 = \dots = \gamma_{2^{l-2}}$  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  $K_1$  も対角行列であることから  $\gamma_1 = \gamma_3$  すなわち  $\gamma_1 = \gamma_2 = \dots = \gamma_{2^{l-1}}$  ( $= \gamma$  とおく) がわかる。ここで  $K_0^{-1}$  は  $M_T^{-1}$  の仮定により

$$K_0^{-1} = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & \dots & a_l \\ a_1 & b_1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ a_l & 0 & & b_l \end{bmatrix} \quad \text{となっていて} \quad K_0 \text{ は } N \times l \quad \begin{bmatrix} N & \sqrt{m}r \\ \sqrt{m}r & N + (m-1)r \\ \sqrt{(2)}r & \sqrt{(2)}r \\ \vdots & \vdots \end{bmatrix} \quad \text{と表}$$

わせる。もし  $\gamma \neq 0$  と仮定し  $K_0^{-1}$  の  $(1, 2)$  成分と  $(3, 2)$  成分を具体的に書き表わすと

$$\begin{cases} Na_1 + \sqrt{m}\delta b_1 = 0 & \text{--- ①} \\ \sqrt{\frac{m}{2}}\delta a_1 + m\sqrt{\frac{m}{2}}\delta b_1 = 0 \end{cases} \text{を得る。 } \delta \neq 0 \text{ なら } a_1 = -\sqrt{m}b_1$$

これを①式に代入して  $\sqrt{m}(\delta - N)b_1 = 0$ .  $K_0^{-1}$  は positive definite であり  $b_1 > 0$  故に  $N = \delta$  となり  $M_T$  が non-singular (resolution II) であることは矛盾する。故に  $\delta = 0$  となり  $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{2l} = 0$  が示された。これは  $T$  が strength  $2l-1$  の orthogonal array であることを意味する。  $T$  は strength  $2l$  の Balanced array であるから index が  $\{\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{2l}\}$  であるから strength  $2l-1$  のときの Balanced array としての index は  $\{\mu_0 + \mu_1, \mu_0 + \mu_2, \dots, \mu_{2l-1} + \mu_{2l}\}$  であり orthogonal array であるためには  $\mu_0 + \mu_1 = \mu_0 + \mu_2 = \dots = \mu_{2l-1} + \mu_{2l}$  が必要ではない。故に  $\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_{2l}$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_{2l-1}$  が証明された。

## REFERENCE

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