拡張直交配列を用いた混合水準の実験計画法に関する一考察

横井　稜

富山県立大学　情報基盤工学講座

June 25, 2020

まえがき

実験計画法では，最適な混合系直交計画を構成可能な水準数，因子数，実験回数，前提条件の値の範囲を拡張していくことが重要な課題である．従来は，Orthogonal Arrays (直交配列，OA) を利用して構成する方法が提案されてきた．

本研究では，Augmented Orthogonal Arrays (拡張直交配列，AOA) を計画に対応させる新たな計画の構成法と，AOA の定義を拡張して新たに提案した行列 Generalized Augmented Orthogonal Arrays (一般化拡張直交配列，GAOA) を計画に対応させる新たな計画の構成法を提案する．

2.1 実験計画法の問題設定

説明変数ベクトルは離散変数ベクトル x ←水準組み合わせ
目的変数は連続変数 $y_{\boldsymbol{x}}$ ←特性値
$\boldsymbol{x} = (x_1, ..., x_n) \in \Omega = \prod_{i=1}^{n} \mathbb{F}_{q_i}$ を $n \in \mathbb{N}$ 次元ベクトル，$Y_{\boldsymbol{x}}$ をベクトル $\boldsymbol{x} \in \Omega$ に依存する連続確率変数，$y_{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}$ を確率変数 $Y_{\boldsymbol{x}}$ の実現値とする．
ただし，$q_1, ..., q_n$ を素数の累乗とし，位数 q_i の体を $\mathbb{F}_{q_i}$ と表す．任意のベクトル $\boldsymbol{x} \in \Omega$ に対し，確率変数 $Y_{\boldsymbol{x}}$ が以下で定まると仮定する．

$$Y_{\boldsymbol{x}} = \theta_0 + \sum_{k=1}^{n} \sum_{\{i_1,...,i_k\} \in A} \theta^{i_1,...,i_k}_{x_{i_1},...,x_{i_k}} + \epsilon$$

←構造式

2.1 実験計画法の問題設定

ここで，非空集合 $A \subset 2^{[n]}$ は，$J' \subset J \in A$ を満たす任意の集合 J, J' について，$J \in A$ を満たすとする．ただし，$[n] = \{1, ..., n\}$．また，θ_0 を実定数とし，$\theta^{i_1,...,i_k}_{x_{i_1},...,x_{i_k}}$ を $(i_1, x_{i_1}), ..., (i_k, x_{i_k})$ に依存する実定数とする．更に，偶然誤差 ϵ を，平均 0，分散 σ^2 の正規分布に従う連続確率変数とする．更に，任意の $k \in [n], i_1, ..., i_k \in A, x_{i_1} \in \mathbb{F}_{q_{i_1}}, ..., x_{i_k} \in \mathbb{F}_{q_{i_k}}$ について次式が成立するとする．

$$\sum_{x_{i_1} \in \mathbb{F}_{q_{i_1}}} \theta^{i_1,...,i_k}_{x_{i_1},...,x_{i_k}} = \ldots = \sum_{x_{i_k} \in \mathbb{F}_{q_{i_k}}} \theta^{i_1,...,i_k}_{x_{i_1},...,x_{i_k}} = 0.$$

2.1 実験計画法の問題設定

更に，各 $i \in [n]$ を因子と呼び，以降，因子であることを強調したい場合，F_i と書く．更に，各 $i \in [n]$ において $x_i \in \mathbb{F}_{q_i}$ を因子 F_i の水準と呼び，水準 x_i が取りうる値全体の個数 q_i を因子 F_i の水準数と呼ぶ．更に，θ_0 を中心効果と呼び，$\theta^{i_1,\dots,i_k}_{x_{i_1},\dots,x_{i_k}}$ を因子 $F_{i_1},\dots,F_{i_k}$ の水準を $x_{i_1},\dots,x_{i_k}$ としたもとでの因子 $F_{i_1},\dots,F_{i_k}$ の k 因子交互作用効果と呼ぶ．$k=1$ の時は主効果となる．

$$\sum_{x_{i_1}\in\mathbb{F}_{q_{i_1}}} \theta^{i_1,\dots,i_k}_{x_{i_1},\dots,x_{i_k}} = \dots = \sum_{x_{i_k}\in\mathbb{F}_{q_{i_k}}} \theta^{i_1,\dots,i_k}_{x_{i_1},\dots,x_{i_k}} = 0.$$

上の式は，各 $\theta^{i_1,\dots,i_k}_{x_{i_1},\dots,x_{i_k}}$ が因子 $F_{i_1},\dots,F_{i_k}$ の交互作用効果により生じる中心効果 θ_0 からの差を表すことを意味する
更に，集合 $A \subset 2^{[n]}$ を，前提条件の集合と呼ぶ．これは，$i_1,\dots,i_k \in A$ を満たす因子 $F_{i_1},\dots,F_{i_k}$ の交互作用効果を仮定するという前提条件の集合を表す

例

[例 2.1]　$n=5$, $q_1=\cdots=q_4=5$, $q_5=25$ とする．$A = \{\{1\},\ldots,\{5\},\{1,2\},\{1,3\},\{1,4\},\{2,3\},\{2,4\},\{3,4\}\}$，すなわち，任意の $\boldsymbol{x}=(x_1,\ldots,x_5)\in\Omega$ に対し，$Y_{\boldsymbol{x}} = \theta_0 + \theta^1_{x_1} + \cdots + \theta^5_{x_5} + \theta^{1,2}_{x_1,x_2} + \theta^{1,3}_{x_1,x_3} + \theta^{1,4}_{x_1,x_4} + \theta^{2,3}_{x_2,x_3} + \theta^{2,4}_{x_2,x_4} + \theta^{3,4}_{x_3,x_4} + \epsilon$ と仮定する．これは，因子 $F_1,\ldots,F_5$ の主効果と，因子 F_1 と F_2，F_1 と F_3，F_1 と F_4，F_2 と F_3，F_2 と F_4，F_3 と F_4 の 2 因子交互作用効果を仮定することを意味する．また，$\theta^{3,4}_{0,x_4} + \cdots + \theta^{3,4}_{4,x_4} = \theta^{3,4}_{x_3,0} + \cdots + \theta^{3,4}_{x_3,4} = 0$ 等が成立する．

定義 2.1

[定義 2.1]（計画） 全ての行ベクトルが Ω の元である $N \times n$ 行列 X を計画と呼び，N を実験回数と呼ぶ.

次に，実験の流れを述べる．最初に，集合 A を定め構造式 (1) を仮定する．ただし，各効果は未知だが式 (2) を満たし，偶然誤差 ϵ は平均 0, (既知の) 分散 σ^2 の正規分布に従うと仮定する．次に構造式 (1) を基に計画 X を定める．最後に，実験を行い，得た実験結果 $(\boldsymbol{x}, y_{\boldsymbol{x}})_{\boldsymbol{x}\in\tilde{X}}$ から全ての $\{i_1,\ldots,i_k\}\in A$, $k\in[n]$ と全ての $x_{i_1}\in\mathbb{F}_{q_1}\backslash\{0\},\ldots,x_{i_k}\in\mathbb{F}_{q_{i_k}}\backslash\{0\}$ に対して実数値 $\bar{\theta}^{i_1,\ldots,i_k}_{x_{i_1},\ldots,x_{i_k}}$ の推定値を求める．ただし，行列 X の行全体の集合を $\tilde{X}(\subset\Omega)$ と表す．期待値が真のパラメータの値になることが望ましいため，推定量は線形不偏推定量 [2] とする．また，推定の精度を高めるため，パラメータの真の値からの推定値のばらつき，すなわち，推定量の分散は小さくすることが望ましい．

定理 2.1 および定義 2.2

[定理 2.1]　[2], [7] 実験回数が N である任意の計画 X に対し，全ての $\{i_1, \ldots, i_k\} \in A$，$k \in [n]$ における因子 $F_{i_1}, \ldots, F_{i_k}$ の k 因子交互作用効果の線形不偏推定量 $\hat{\theta}^{i_1,\ldots,i_k}_{x_{i_1},\ldots,x_{i_k}}$ の分散の最大値は以下を満たす.

$$\max V\left[\hat{\theta}^{i_1,\ldots,i_k}_{x_{i_1},\ldots,x_{i_k}}\right] \geq \frac{q_{i_1}\cdots q_{i_k}}{N}\sigma^2. \tag{3}$$

ただし，左辺の最大値は，$x_{i_1} \in \mathbb{F}_{q_{i_1}} \setminus \{0\}, \ldots, x_{i_k} \in \mathbb{F}_{q_{i_k}} \setminus \{0\}$ となる範囲のもとでとる.

[定義 2.2]（最適な計画）　定理 2.1 の条件のもと，式 (3) の等号を満たす計画 X を本研究では最適な計画と呼ぶ.

定義 2.3 および定義 2.4

[定義 2.3]（行列の直交）$t \in [n]$，$i_1, \ldots, i_t \in [n]$ とする．行列 X の第 $i_1, \ldots, i_t$ 列から成る $N \times t$ 部分行列が $\prod_{l=1}^{t} \mathbb{F}_{q_{i_l}}$ の全ての元を丁度同じ回数だけ含むとき，本研究では行列 X は第 $i_1, \ldots, i_t$ 列で直交するという．

計画 X が第 $i_1, \ldots, i_t$ 列で直交するとき，因子 $F_{i_1}, \ldots, F_{i_t}$ においてどの水準の組合せでも同じ回数（$N/(q_{i_1} \ldots q_{i_t})$ 回）だけ実験できる．

[定義 2.4]（直交計画 [2]）因子の集合の集合 $D \subset 2^{[n]}$ をとる．任意の $L = \{i_1, \ldots, i_{|L|}\} \in D$ に対し，第 $i_1, \ldots, i_{|L|}$ 列が直交する計画を本研究では集合 D での直交計画と呼ぶ．

定理 2.2

[定理 2.2]（[2], [7]）　前提条件の集合 $A \subset 2^{[n]}$ から一意に定まる集合 D_A を式 (4) で定義する．

$$D_A \overset{\text{def}}{=} \{J \triangle K \subseteq 2^{[n]} \mid J, K \in A\}. \tag{4}$$

ただし，△ は対称差を表す．集合 D_A での直交計画は，最適な計画である．

最初に，本節における構造式の仮定を述べる．

[仮定 3.1]　ある素数の累乗 q と $k \in [n]$ が存在し，$q_1 = \cdots = q_n = q$，$A = \left\{J \subseteq 2^{[n]} \mid k \geq |J|\right\}$ を満たすとする．これは，ある $k \in [n]$ に対し，全ての k 因子以下の交互作用効果の存在を仮定し，それ以外の交互作用効果の存在は仮定しないことを意味する．

[定義 3.1]（強さ t の直交計画 [2]）　$t \in [n]$ とする．集合 $D \stackrel{\text{def}}{=} \left\{L \subseteq 2^{[n]} \mid t \geq |L|\right\}$ での直交計画を強さ t の直交計画と呼ぶ．

定理 2.2 より，仮定 3.1 のもとでは，強さ $2k$ の直交計画，すなわち $D_A = \left\{L \subseteq 2^{[n]} \mid 2k \geq |L|\right\}$ での直交計画が最適であることが示される [2].

[定義 3.2]（Orthogonal Arrays [4]） 任意の $t \in [n]$ 列が直交するような体 $\mathbb{F}_q$ 上 $N \times n$ 行列 X を **Orthogonal Arrays (直交配列，OA)** と呼び，OA (N, n, q, t) と書く．

上記の定義からわかるとおり，OA(N, n, q, t) の行ベクトル全体の集合は，実験回数 N，因子数 n，水準数 q，強さ t の直交計画となる [4]．すなわち，強さ t の直交計画を構成するには，それに対応する OA を構成すればよい．OA の構成法については，従来様々な方法が提案されている [4].

最初に，本節における構造式の仮定を述べる．

[仮定 3.2]　ある素数の累乗 q と $t, s \in \mathbb{N}$ が存在し，$n \geq t \geq s$，$q_1 = \cdots = q_{n-1} = q$，$q_n = q^{t-s}$ 及び

$$A = \left\{ J \subseteq 2^{[n]} \,\middle|\, \left(|J| \leq \left\lfloor \frac{s+1}{2} \right\rfloor \right) \vee \left(|J| \leq \left\lfloor \frac{t}{2} \right\rfloor \wedge n \notin J \right) \right\} \quad (5)$$

を満たすとする．ただし，$\lfloor \cdot \rfloor$ は床関数を表す．これは，因子 F_1 から因子 F_n までは $\left\lfloor \frac{s+1}{2} \right\rfloor$ 因子以下の交互作用効果の存在を仮定し，更に因子 F_1 から因子 F_{n-1} までは $\left\lfloor \frac{t}{2} \right\rfloor$ 因子以下の交互作用効果の存在を仮定し，それ以外の交互作用効果の存在は仮定しないことを意味する．

[系 3.1]　式 (6) の集合 D での直交計画は仮定 3.2 のもとで最適な計画である．

$$D=\left\{L\subseteq 2^{[n]}\,\middle|\,(|L|\leq s+1)\vee(|L|\leq t\wedge n\notin L)\right\}. \tag{6}$$

これは，定理 2.2 において，式 (5) の集合 A から定まる集合 D_A が $D_A\subset D$ を満たすことから明らか．

[例 3.1]　例 2.1 では，$q=5, t=3, s=1$ である．

最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

最初に，AOA の定義を述べる．

[定義 4.1]（AOA [5]） 有限体上 $q^t \times n$ 行列 X が次の条件を満たすとき，この行列 X を **Augmented Orthogonal Arrays** (拡張直交配列，**AOA**) と呼び，AOA $(q^t, n-1, q, t, s)$ と書く．

（1） 第 1 列から第 $n-1$ 列は体 $\mathbb{F}_q$ の元から，第 n 列は体 $\mathbb{F}_{q^{t-s}}$ の元からなる．

（2） 第 1 列から第 $n-1$ 列のうちの任意の t 列は直交する．

（3） 第 1 列から第 $n-1$ 列のうちの任意の s 列と第 n 列は直交する．

最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

[補題 4.1]　計画 X は，AOA $(q^t, n-1, q, t, s)$ であるならば，式 (6) の集合 D での直交計画であるので，仮定 3.2 のもとで最適な計画である．

したがって，AOA $(q^t, n-1, q, t, s)$ が構成できれば，**3.1** の対応と同様に混合水準の計画にこの AOA を対応させることで，最適な直交計画を構成できる．

最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

[命題 4.1]（[5]） 行列 G を体 $\mathbb{F}_q$ 上 $t \times (n+t-s)$ 行列とする．第 1 列から第 n 列のうち，任意の t 列が体 $\mathbb{F}_q$ 上一次独立であり，かつ第 1 列から第 n 列のうち任意の s 列と第 $n+1$ 列から第 $n+t-s$ 列が体 $\mathbb{F}_q$ 上一次独立であるような行列 G が存在するとき，AOA (q^t, n, q, t, s) は存在する．

最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

[例 4.1]　$\mathbb{F}_{25} = \mathbb{F}_5(\alpha)$ とし，$\alpha \in \mathbb{F}_{25}$ は体 $\mathbb{F}_5$ 上既約多項式 $x^2 + 2 = 0$ の根とする．$q = 5$，$n = 5$，$t = 4$，$s = 2$ とする．$\alpha_0 = 1, \alpha_1 = 2, \alpha_2 = 3, \alpha_3 = 4$ とし，体 $\mathbb{F}_5$ 上 4×2 行列 G_1 の任意の第 (i, j) 成分は α_{i-1}^j であるとする．生成行列 G を

$$G = (I_4 \mid G_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

と定めると，次の行列は AOA $(5^4, 4, 5, 4, 2)$ となる．

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \alpha + 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2\alpha + 4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3\alpha + 4 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \alpha+1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2\alpha+4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3\alpha+4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4\alpha+1 \\ & \vdots & & & \vdots \end{pmatrix}. \tag{10}$$

上記の行列 (10) に対応する集合は，例 2.1 における前提条件 A から定まる集合 D_A での直交計画になり，したがって最適な計画である．

命題 4.1 の行列 G を生成行列と呼ぶ．AOA の構成の問題は生成行列の構成の問題に帰着できる．

最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

[命題 4.2]（[5]） q を奇数，更に $3 \leq t \leq q$ とする．このとき，AOA $(q^t, q, q, t, 1)$ は存在する．一方，$\mathrm{OA}(q^t, q+t-1, q, t)$ は存在しない．

命題 4.2 の証明では，AOA の存在は，生成行列 G を実際に構成することで証明している．この方法で構成された AOA に対応させることで計画を構成する方法を本研究では**方法 4.2** と呼ぶ．

[定理 4.1] q を奇数，更に $3 \leq t \leq q$ とする．$n = q+1$，$s = 1$ とする．このとき，仮定 3.2 のもとで最適な計画を，方法 4.2 で構成できる．一方，多水準作成法では構成できない．

最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

[命題 4.3]（[5]） $s \leq q-1$ とする．このとき，AOA $(q^{q+1}, q+1, q, q+1, s)$ は存在する．一方，OA $(q^{q+1}, 2(q+1)-s, q, q+1)$ は存在しない．

命題 4.3 の証明では，AOA の存在は，生成行列 G を実際に構成することで証明している．この方法で構成された AOA に対応させることで計画を構成する方法を本研究では**方法 4.3** と呼ぶ．先と同様に，次の定理が成立する．

[定理 4.2] $s \leq q-1$ とする．$n = q+2$，$t = q+1$ とする．このとき，仮定 3.2 のもとで最適な計画を，方法 4.3 で構成できる．一方，多水準作成法では構成できない．

[仮定 5.1]　ある素数の累乗 q と，$t, b, s_1, \ldots, s_b \in \mathbb{N}$ が存在し，$t \geq s_1, \ldots, t \geq s_b$，$n = t + b$，$q_1 = \cdots = q_t = q, q_{t+1} = q^{t-s_1}, q_{t+2} = q^{t-s_2}, \ldots, q_{t+b} = q^{t-s_b}$ 及び

$$A = \left\{ J \subseteq 2^{[t+b]} \,\middle|\, \left(J \subseteq 2^{[t]} \wedge |J| \leq \left\lfloor \frac{t}{2} \right\rfloor \right) \vee \left(i \in [b] \wedge J \subseteq 2^{[t] \cup \{t+i\}} \wedge |J| \leq \left\lfloor \frac{s_i + 1}{2} \right\rfloor \right) \vee \left(J \subseteq 2^{[t+b] \setminus [t]} \wedge |J| \leq \left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor \right) \right\} \tag{11}$$

を満たすとする．これは，因子 F_1 から因子 F_t までは $\left\lfloor \frac{t}{2} \right\rfloor$ 因子以下の交互作用効果の存在を全て仮定し，更に各 $i \in [b]$ に対し，因子 F_1 から因子 F_t まで及び因子 F_{t+i} では $\left\lfloor \frac{s_i+1}{2} \right\rfloor$ 因子以下の交互作用効果の存在

最初に，GAOA の定義を述べる．

[定義 5.1]（GAOA）　$q^t \times n$ 行列 X が次の条件を満たすとき，行列 X を **Generalized Augmented Orthogonal Arrays (一般化拡張直交配列，GAOA)** と呼び，GAOA $\left(q^t, n-b, q, t, (s_1, \ldots, s_b)\right)$ と書く．

（1）　第 1 列から第 t 列までは体 $\mathbb{F}_q$ の元，任意の $i \in [b]$ に対し第 $t+i$ 列は体 $\mathbb{F}_{q^{t-s_i}}$ の元からなる．

（2）　第 1 列から第 t 列が直交する．

（3）　任意の $i \in [b]$ について，第 1 列から第 t 列のうち任意の s_i 列と第 $t+i$ 列が直交する．

（4）　第 $t+1$ 列から第 $t+b$ 列が直交する．

仮定を拡張した最適な混合系直交計画の GAOA を利用した構成法

[補題 5.1]　計画 X は, GAOA $\left(q^t, n-b, q, t, (s_1, \ldots, s_b)\right)$ であるならば, 式 (12) の集合 D での直交計画であるので, 仮定 5.1 のもとで最適な計画である.

[補題 5.2]　$\beta \stackrel{\mathrm{def}}{=} bt - \sum_{i=1}^{b} s_i$ とおく．条件 (1), (2), (3) を全て満たす体 $\mathbb{F}_q$ 上 $t \times (t+\beta)$ 行列 G が存在するとき，GAOA $\left(q^t, n-b, q, t, (s_1, \ldots, s_b)\right)$ は存在する．ただし，行列 G の第 1 列から第 t 列から成る行列を第 0 ブロックと呼び，任意の $i \in [b]$ について，第 $it - \sum_{l=1}^{i-1} s_l + 1$ 列から第 $(i+1)t - \sum_{l=1}^{i} s_l$ 列から成る行列を第 i ブロックと呼ぶ．

（1）　第 1 列から第 t 列が体 $\mathbb{F}_q$ 上一次独立である．

（2）　任意の $i \in [b]$ について第 0 ブロックのうちの任意の s_i 列と第 i ブロックが体 $\mathbb{F}_q$ 上一次独立である．

（3）　第 1 ブロックから第 b ブロックまでの全ての列が体 $\mathbb{F}_q$ 上一次独立である．

[補題 5.3]　体 $\mathbb{F}_q$ 上 $t \times (t+\beta)$ 行列 G の第 0 ブロックは t 次単位行列とし，任意の $i \in [b]$ について，第 i ブロックの第 (j,k) 成分を $\alpha_{j-1}^{(i-1)t-\sum_{l=1}^{i-1} s_l+k}$ とする．ただし，$q \geq t+1 \geq \beta+1$ とし，$\alpha_0 = 1, \alpha_1, \ldots, \alpha_{t-1} \in \mathbb{F}_q \backslash \{0\}$ は互いに相異なるとする．このとき，行列 G は補題 5.2 の条件 (1), (2), (3) を満たす．

補題 5.1，5.2，5.3 から次の定理が示される．

[定理 5.1]　$q \geq t+1 \geq \beta+1$ ならば，仮定 5.1 のもとで最適な計画を構成できる．