

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

山口 純輝^{†*a)} 風間 皐希^{†b)} 鎌塚 明^{††c)} 斎藤 翔太^{†d)}
松嶋 敏泰^{†e)}

A Note on Mixed Level Experimental Designs Using Augmented Orthogonal Arrays

Junki YAMAGUCHI^{†*a)}, Koki KAZAMA^{†b)}, Akira KAMATSUKA^{††c)},
Shota SAITO^{†d)}, and Toshiyasu MATSUSHIMA^{†e)}

あらまし 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してきた。本研究では、Augmented Orthogonal Arrays (拡張直交配列、AOA) を計画と対応させる構成法を提案する。更に、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) と対応させる構成法を提案する。これにより、上記の範囲が従来より拡張された。

キーワード 実験計画法、直交計画、直交配列、拡張直交配列、一般化拡張直交配列

1. まえがき

推測統計学の一分野である実験計画法は、構造式（モデル）のパラメータを実験結果から推定するための実験において、より少ない実験回数で、より高い精度で推定できるような計画を求める分野である。実社会では研究開発等の実験の場において利用される[1]。実験計画法の用語を例で説明する（[1], [2] 等参照）。例えば、ある化学製品の製造において、温度と触媒の種類による作用が製品の収率にどの程度影響を与えるかを明らかにするための実験を考える。温度は 100 度と 200 度の 2 種類、触媒の種類は A と B と C の 3 種類を取りうるとする。このとき、因子 1（温度）は水準

数が 2、因子 2（触媒）は水準数が 3 である。温度、触媒による特性値（収率）への影響が効果であり、特に温度のみまたは触媒のみによる影響がそれぞれ因子 1 または 2 の主効果、温度と触媒の組合せによる影響が因子 1, 2 の 2 因子交互作用効果である。実験では、最初にどの主効果、交互作用効果が存在するかという前提条件を仮定した下で、因子を説明変数、特性値を目的変数とした構造式を設定する。そしてどの温度、触媒の組合せで実験するか計画を立てて実験し、実験結果から構造式のパラメータである各効果を推定する。

実験計画法では、実験回数が少ないほど推定の精度は低くなるという評価基準のトレードオフが生じる。そこで、同じ実験回数の中で各効果に後述の線形変換を施すことで得られた実数値の線形不偏推定量の分散の最大値が最小となる計画を考える。本研究ではこのような計画を最適な計画と呼ぶ。

水準数、因子数、実験回数、前提条件を何らかの値に固定した場合に、ある範囲で直交する直交計画が最適な計画の一つとなる[2]。しかし、値によってはそのような最適な直交計画の構成法が知られていない。したがって、最適な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することは重要な課題であると考えられる。定性的に述べると、

[†] 早稲田大学基幹理工学研究科、東京都

School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University, 3-4-1 Okubo, Shinjuku-ku, Tokyo, 169-8555 Japan

^{††} 早稲田大学グローバルエデュケーションセンター、東京都

Global Education Center (GEC), Waseda University, 1-104 Totsukamachi, Shinjuku-ku, Tokyo, 169-8050 Japan

* 現在、鹿島建設株式会社

a) E-mail: jpb-mmy.wst100@fuji.waseda.jp

b) E-mail: kwaazsaemdaa@fuji.waseda.jp

c) E-mail: kamatsuka@aoni.waseda.jp

d) E-mail: shota@aoni.waseda.jp

e) E-mail: toshimat@waseda.jp

より一般的な構造式における最適な直交計画の構成法の研究が課題であるといえる。

従来, 全ての因子の水準数が等しく, 更に構造式において前提条件が均一であるときの最適な直交計画の構成法が研究されてきた. ただし, 構造式において, ある自然数 k に対して k 個以下の全ての因子の交互作用効果のみを仮定するとき, 本研究では前提条件が均一であるという. 例えば Orthogonal Arrays (直交配列, OA) に計画を対応させる方法がある [4].

なお, 直交計画は符号理論と深い関係がある. 例えば, OA は, 後述する強さ t の直交計画に対応するが, Reed Solomon 符号にも対応する [4]. 他にも, 不均一誤り訂正符号と直交計画の関係が示されている [3].

本研究では, 構造式において前提条件が均一ではないときの最適な混合系直交計画の構成法を考える. ただし, 本研究では, 因子によって水準数が異なる実験を混合水準の実験と呼び, そのときの直交計画を混合系直交計画と呼ぶ. 一般的な混合系直交計画の構成法の提案は難しいが, 特別な場合においては構成法が研究されてきた. 従来, OA を利用して構成する方法として, 多水準作成法 [1] 等が提案されている.

本研究では, 従来 [5], [6] で構成が研究されてきた 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. また, 最適な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が提案法で従来より拡張されたこと, すなわち, より一般的な構造式で最適な直交計画を提案法で構成可能であることを示す.

本論文は次のように構成される. 2. では, 実験計画法の問題設定と直交計画に関する準備を行う. 3. では, 直交計画の構成法の従来研究を述べる. 4. では, 本研究として, AOA を利用した最適な混合系直交計画を提案する. 5. では, 本研究として, AOA の定義を拡張した概念である GAOA, 及びそれを利用した最適な混合系直交計画を提案する.

2. 準 備

本節では, 実験計画法の問題設定を述べた後, そのもとで最適な直交計画について定義する. 更に, 直交計画と対応する直交配列について定義する.

2.1 実験計画法の問題設定

本節では, 実験計画法の問題設定及び計画の最適性に関する定理を述べる.

最初に, [2], [7] に基づき本研究の実験計画法における説明変数ベクトルと目的変数の関係を述べる. 説明変数ベクトルは離散変数ベクトル \mathbf{x} , 目的変数は連続変数 $y_{\mathbf{x}}$ とする. $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \Omega \stackrel{\text{def}}{=} \prod_{i=1}^n \mathbb{F}_{q_i}$ を $n \in \mathbb{N}$ 次元ベクトル, $Y_{\mathbf{x}}$ をベクトル $\mathbf{x} \in \Omega$ に依存する連続確率変数, $y_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}$ を確率変数 $Y_{\mathbf{x}}$ の実現値とする. ただし, q_1, \dots, 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 $\mathbf{x} \in \Omega$ に対し, 確率変数 $Y_{\mathbf{x}}$ が

$$Y_{\mathbf{x}} = \theta_0 + \sum_{k=1}^n \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \in A} \theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} + \epsilon \quad (1)$$

で定まると仮定する. 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, $[n] \stackrel{\text{def}}{=} \{1, \dots, n\}$. また, θ_0 を実定数とし, $\theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ を $(i_1, x_{i_1}), \dots, (i_k, x_{i_k})$ に依存する実定数とする. 更に, 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 $k \in [n]$, $\{i_1, \dots, i_k\} \in A$, $x_{i_1} \in \mathbb{F}_{q_{i_1}}, \dots, x_{i_k} \in \mathbb{F}_{q_{i_k}}$ について次式 (2) が成立するとする.

$$\sum_{x_{i_1} \in \mathbb{F}_{q_{i_1}}} \theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} = \dots = \sum_{x_{i_k} \in \mathbb{F}_{q_{i_k}}} \theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} = 0. \quad (2)$$

関係式 (1) を構造式と呼ぶ. また, ベクトル $\mathbf{x} \in \Omega$ を実験する水準組合せと呼び, 実数値 $y_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}$ を水準組合せが \mathbf{x} のもとでの特性値と呼ぶ. 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, $\theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ 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. 特に, $k = 1$ の場合の $\theta_{x_i}^i$ を, 因子 F_i の主効果と呼ぶ. 式 (2) は, 各 $\theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ 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 [7] 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. 集合

A に仮定する性質は、複数の因子の交互作用効果を仮定する場合、その因子の組合せの中に含まれる因子の組合せの交互作用効果も仮定することを意味する。また、確率変数 ϵ を偶然誤差と呼ぶ。

[例 2.1] $n = 5, q_1 = \dots = q_4 = 5, q_5 = 25$ とする。
 $A = \{\{1\}, \dots, \{5\}, \{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}\}$ 、すなわち、任意の $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_5) \in \Omega$ に対し、 $Y_{\mathbf{x}} = \theta_0 + \theta_{x_1}^1 + \dots + \theta_{x_5}^5 + \theta_{x_1, x_2}^{1, 2} + \theta_{x_1, x_3}^{1, 3} + \theta_{x_1, x_4}^{1, 4} + \theta_{x_2, x_3}^{2, 3} + \theta_{x_2, x_4}^{2, 4} + \theta_{x_3, x_4}^{3, 4} + \epsilon$ と仮定する。これは、因子 F_1, \dots, 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、 $\theta_{0, x_4}^{3, 4} + \dots + \theta_{4, x_4}^{3, 4} = \theta_{x_3, 0}^{3, 4} + \dots + \theta_{x_3, 4}^{3, 4} = 0$ 等が成立する。

式 (2) から、 $i_1, \dots, i_k \in A, k \in [n]$ となる全ての i_1, \dots, i_k 及び $x_{i_1} \in \mathbb{F}_{q_{i_1}} \setminus \{0\}, \dots, x_{i_k} \in \mathbb{F}_{q_{i_k}} \setminus \{0\}$ となる全ての x_{i_1}, \dots, x_{i_k} について交互作用効果 $\theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ を求めると、他の交互作用効果も求められる。以降は上記の範囲の交互作用効果にのみ着目する。更に、本研究では、交互作用効果 $\theta_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ に対して、構造行列を正規直交化するような線形変換をすることで得られる実数値 $\bar{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ に着目する [2]。

次に、計画について定義する。

[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。

[2] は計画 X を集合 Ω の部分集合としたが、本研究では簡単な記述のため行列とする。

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 $(\mathbf{x}, y_{\mathbf{x}})_{\mathbf{x} \in \tilde{X}}$ から全ての $\{i_1, \dots, i_k\} \in A, k \in [n]$ と全ての $x_{i_1} \in \mathbb{F}_{q_{i_1}} \setminus \{0\}, \dots, x_{i_k} \in \mathbb{F}_{q_{i_k}} \setminus \{0\}$ に対して実数値 $\bar{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ 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。

次に、実験計画法における評価基準について述べる。本研究における評価基準は、各実数値 $\bar{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ の線形不偏推定量 $\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ の分散 $V[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}]$ の最大値と、実験回数 N とする。評価基準に関して、以

下の定理が成立する。

[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 $\{i_1, \dots, i_k\} \in A, k \in [n]$ における因子 F_{i_1}, \dots, F_{i_k} の k 因子交互作用効果の線形不偏推定量 $\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}$ の分散の最大値は以下を満たす。

$$\max V[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}] \geq \frac{q_{i_1} \cdots q_{i_k}}{N} \sigma^2. \quad (3)$$

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

本研究では、分散 $V[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k}]$ の最大値を取るときは、常に上記の範囲のもとでとる。

[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。

2.2 直交計画

本節では、直交計画を定義し、直交計画の最適性について述べる。

[定義 2.3] (行列の直交) $t \in [n], i_1, \dots, i_t \in [n]$ とする。行列 X の第 i_1, \dots, i_t 列から成る $N \times t$ 部分行列が $\prod_{i=1}^t \mathbb{F}_{q_{i_1}}$ 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, \dots, i_t 列で直交するという。

計画 X が第 i_1, \dots, i_t 列で直交するとき、因子 F_{i_1}, \dots, F_{i_t} においてどの水準の組合せでも同じ回数 $(N / (q_{i_1} \cdots q_{i_t}))$ 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 $L = \{i_1, \dots, i_{|L|}\} \in D$ に対し、第 $i_1, \dots, i_{|L|}$ 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] ([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。

$$D_A \stackrel{\text{def}}{=} \{J \Delta K \subseteq 2^{[n]} \mid J, K \in A\}. \quad (4)$$

ただし、 Δ 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。

3. 従来研究

本節では、直交計画の構成法に関する従来研究を述べる。本研究では、 $q_1 = \dots = q_n = q$ を満たす q が存在するときの直交計画を同水準系直交計画と呼び、そうでないときの直交計画を混合系直交計画と呼ぶ。

3.1 最適な同水準系直交計画とその構成法

本節では、最適な同水準系直交計画を導出し、それを Orthogonal Arrays (OA) に計画を対応させること

で構成する従来の方法を述べる。

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、 $q_1 = \dots = q_n = q$ 、 $A = \{J \subseteq 2^{[n]} \mid k \geq |J|\}$ 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。

次に、強さ t の直交計画について定義する。

[定義 3.1] (強さ t の直交計画 [2]) $t \in [n]$ とする。集合 $D \stackrel{\text{def}}{=} \{L \subseteq 2^{[n]} \mid t \geq |L|\}$ 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 $D_A = \{L \subseteq 2^{[n]} \mid 2k \geq |L|\}$ での直交計画が最適であることが示される [2]。

次に、強さ t の直交計画の構成法について述べる。この計画は、次に定義する Orthogonal Arrays (OA) を利用することで構成できる。

[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]。

3.2 最適な混合系直交計画とその構成法

本節では、最適な混合系直交計画とその構成法に関する従来研究について述べる。

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、 $n \geq t \geq s$ 、 $q_1 = \dots = q_{n-1} = q$ 、 $q_n = q^{t-s}$ 及び

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

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。

次に、仮定 3.2 のもとで最適な計画について述べる。

[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。

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

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。

また、この計画を利用したときの推定精度を述べる。 $n \in \{i_1, \dots, i_k\} \in A$ のとき、任意の $k \in \left[\left\lfloor \frac{s+1}{2} \right\rfloor \right]$ について、式 (7) が成立する。

$$\max V \left[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} \right] = \frac{q^{k-1+t-s}}{N} \sigma^2. \quad (7)$$

また、 $n \notin \{i_1, \dots, i_k\} \in A$ のとき、任意の $k \in \left[\left\lfloor \frac{t}{2} \right\rfloor \right]$ について、式 (8) が成立する。

$$\max V \left[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} \right] = \frac{q^k}{N} \sigma^2. \quad (8)$$

次に、式 (6) の集合 D での直交計画の構成に関する従来研究 [1] について述べる。[1] では、OA $(N, n+t-s-1, q, t)$ の第 n 列から第 $n+t-s-1$ 列に対して $\mathbb{F}_q^{t-s} \rightarrow \mathbb{F}_q^{t-s}$ の変換をすることでできた N 行 n 列の行列を計画に対応させる方法を採用している。本研究ではこれを多水準作成法と呼ぶ。ただし、この方法で構成できる直交計画の実験回数 N は限られた値しかとることができない。

4. 本提案 1: 最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

本節では、本提案として、仮定 3.2 のもとで最適な計画の構成法を述べる。更に、補足として、従来法との比較について述べる。

4.1 最適な混合系直交計画の AOA を利用した構成法

本節では、仮定 3.2 のもとで最適な計画を、AOA に計画を対応させることで構成する方法を提案する。

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。

次に, AOA と計画についての関係を述べる。

[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。

次に, AOA に関する命題 4.1, 4.2, 4.3 と, 計画の二つの構成法 (方法 4.2, 方法 4.3) を述べる。

[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。

(証明) 集合 $\{mG \mid m \in \mathbb{F}_q^t\} \subset (\mathbb{F}_q^{n+t-s})$ の要素全体を $q^t \times (n+t-s)$ 行列に並べ, 第 $n+1$ 列から第 $n+t-s$ 列に対して $\mathbb{F}_q^{t-s} \rightarrow \mathbb{F}_q^{t-s}$ の変換をすると AOA (q^t, n, q, t, s) となる。 \square

[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。

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

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。

[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, AOA $(q^t, q+t-1, q, t)$ 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。また, 多水準作成法で AOA $(q^t, q, q, t, 1)$ に対応する計画を構成するためには OA $(q^t, q+t-1, q, t)$ が存在する必要があるが, 命題 4.2 によると OA $(q^t, q+t-1, q, t)$ が存在しない。よって, 命題 4.2 の仮定のもとでは, 方法 4.2 では AOA $(q^t, q, q, t, 1)$ に対応する計画を構成可能であり, 多水準作成法では構成不可能である。したがって, 定理 4.1 が成立する。

[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。

また, 命題 4.2 と同様に命題 4.3 が成立する。

[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。

定理 4.1, 4.2 により, 最適な直交計画を方法 4.2, 方法 4.3 で構成可能だが, 多水準作成法で構成不可能な水準数, 因子数, 実験回数, 前提条件の値の範囲が存在することが示された。

4.2 従来法との比較

本節では, 補足として, 従来法と提案法を, 構成した計画の実験回数で比較する。

最初に, 多水準作成法と方法 4.2 を比較をした場合に得られる系を述べる。

[系 4.1] q を奇数で, $3 \leq t \leq q$ とする。水準数 q , 因子数 $q+1$, 強さ t , $s=1$ とする。多水準作成法で構成できる最適な計画の実験回数の下限を N_{min} , 方法 4.2 で構成できる最適な計画の実験回数を N_2 とお

く。このとき, $N_{min} > N_2$ が成立する。

(証明) 方法 4.2 では, 水準数 q , 因子数 $q+1$, 強さ t , $s=1$ を設定したもとで実験回数 $N_2 = q^t$ の直交計画が構成できる。一方, 多水準作成法で構成すると, 命題 4.2 より, 多水準作成法においてもととなる OA $(q^t, q+t-1, q, t)$ は存在しない。よって, 水準数 q , 因子数 $q+t-1$, 強さ t を固定したもとで行数が q^t より大きい OA から作る必要がある。多水準作成法において, もととなる OA と構成できる AOA の行数は等しいため, $N_{min} > N_2 = q^t$ が成立する。□

一般的に N_{min} を陽に記述することは難しい [8]。そこで, 系 4.1 の具体例を考察する。

[例 4.2] $q=5$, $t=4$ とすると, 方法 4.2 で AOA $(5^4, 5, 5, 4, 1)$ に対応する計画を構成できる。この計画は最適なので, 5 水準をもつ 5 つの因子間の任意の 2 因子交互作用効果と, 5^3 水準をもつ因子の主効果を最良の精度で求めることができる。これに対して, 従来の多水準作成法からこの AOA を構成するには, OA $(5^4, 8, 5, 4)$ が必要となる。しかし, $q=5$, $t=4$, $N=5^4$ を固定したもとで選ぶことができる最大因子数は 6 である [8] ため, この OA は存在しない。 $q=5$, $t=4$ で $n=8$ を満足するには $N=5^5$ の OA が必要となる。この OA によって構成される AOA の行数も 5^5 なので, 従来の方が実験回数が多い。

次に, 多水準作成法と方法 4.3 を比較をした場合に得られる系を述べる。証明は系 4.1 と同様である。

[系 4.2] $s \leq q-1$ とする。水準数 q , 因子数 $q+2$, 強さ $q+1$, s のパラメータを設定する。多水準作成法で構成できる計画の実験回数の下限を N'_{min} , 方法 4.3 で構成できる計画の実験回数を N_3 とおく。このとき, $N'_{min} > N_3$ が成立する。

ここで, 系 4.2 の具体例を考察する。

[例 4.3] $q=5$, $s=3$ とすると, 方法 4.3 で AOA $(5^6, 6, 5, 6, 3)$ に対応する計画を構成できる。この計画は最適なので, 5 水準をもつ 6 個の因子間の任意の 3 因子交互作用効果と, 5^3 水準をもつ因子を含んだ任意の 2 因子交互作用効果を最良の精度で求められる。これに対して, 従来の多水準作成法からこの AOA を構成するには, OA $(5^6, 9, 5, 6)$ が必要となる。しかし, 命題 4.3 よりこの OA は存在しないので, $q=5$, $t=6$ で $n=9$ を満たすには少なくとも $N > 5^6$ を満たす必要がある。この OA によって構成される AOA の行数も 5^6 より大きいため, 従来法の方が実験回数が多い。

以上より, 方法 4.2 及び方法 4.3 の方が多水準作成

法より少ない実験回数の最適な計画を構成できることが示された。

5. 本提案 2: 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

本節では, 本提案として, 前節までの水準数, 因子数, 実験回数, 前提条件の値の範囲を更に拡張した値の範囲を仮定し, その仮定のもとで最適な混合系直交計画の構成法を提案する。

5.1 構造式の仮定と最適な混合系直交計画

最初に, 本節における構造式の仮定を述べる。

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

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

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を全て仮定し, 更に因子 F_{t+1} から因子 F_{t+b} までは $\left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor$ 因子以下の交互作用効果の存在を全て仮定し, それ以外の交互作用は仮定しないことを意味する。

仮定 5.1 は $b=1$ ならば仮定 3.2 に一致する。

次に, 仮定 5.1 のもとで最適な計画について述べる。これは系 3.1 と同様に, 次のことが示される。

[系 5.1] 式 (12) の集合 D での直交計画は仮定 5.1 のもとで最適な計画である。

$$D = \left\{ L \subseteq 2^{[t+b]} \mid \left(L \subseteq 2^{[t]} \wedge |L| \leq t \right) \vee \left(i \in [b] \wedge L \subseteq 2^{[t] \cup \{t+i\}} \wedge |L| \leq s_i + 1 \right) \vee \left(L \subseteq 2^{[t+b] \setminus [t]} \wedge |L| \leq b \right) \right\} \quad (12)$$

この計画を利用したときの推定精度を述べる。 $\{i_1, \dots, i_k\} \subseteq [t]$ を満たす $\{i_1, \dots, i_k\} \in A$ の場合, 任意の $k \in \left[\left\lfloor \frac{t}{2} \right\rfloor \right]$ について, 式 (13) が成立する。

$$\max V \left[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} \right] = \frac{q^k}{N} \sigma^2. \quad (13)$$

更に, $\{i_1, \dots, i_k\} \subseteq [t] \cup \{t+j\}, j \in [b]$ であるよう

な $\{i_1, \dots, i_k\} \in A$ の場合, 任意の $k \in \left[\left\lfloor \frac{s_j+1}{2} \right\rfloor \right]$ について, 式 (14) が成立する.

$$\max V \left[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} \right] = \frac{q_{i_1} \cdots q_{i_k}}{N} \sigma^2. \quad (14)$$

そして, $\{i_1, \dots, i_k\} \subseteq [t+b] \setminus [t]$ であるような $\{i_1, \dots, i_k\} \in A$ の場合, 任意の $k \in \left[\left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor \right]$ について, 式 (15) が成立する.

$$\max V \left[\hat{\theta}_{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}}^{i_1, \dots, i_k} \right] = \frac{q_{i_1} \cdots q_{i_k}}{N} \sigma^2. \quad (15)$$

5.2 最適な混合系直交計画の GAOA を利用した構成法

本節では, GAOA なる行列を提案し, 仮定 5.1 のもとで最適な直交計画を, 前節と同様に, GAOA に計画に対応させることで構成する方法を提案する.

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 $(q^t, n-b, q, t, (s_1, \dots, s_b))$ 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.

$b=1$ のとき, GAOA $(q^t, n-b, q, t, (s_1, \dots, s_b))$ は AOA $(q^t, n-1, q, t, s_1)$ に一致する.

GAOA と計画の関係は次のとおりである.

[補題 5.1] 計画 X は, GAOA $(q^t, n-b, q, t, (s_1, \dots, s_b))$ 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.

以降, GAOA の具体的な構成法を述べる.

[補題 5.2] $\beta \stackrel{\text{def}}{=} bt - \sum_{i=1}^b s_i$ 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 $(q^t, n-b, q, t, (s_1, \dots, s_b))$ 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.

これは命題 4.1 と同様に証明できる. 上記の行列 G を **GAOA の生成行列** と呼ぶ. 前節と同様に GAOA の構成の問題を生成行列 G の構成の問題に帰着できる.

生成行列 G は, 補題 5.3 のように構成すればよい. [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, $\alpha_0 = 1, \alpha_1, \dots, \alpha_{t-1} \in \mathbb{F}_q \setminus \{0\}$ 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.

(証明) 行列 G が条件 (1), (2), (3) を満たすことを示す.

(1) 第 0 ブロックは単位行列であるため明らか.

(2) 任意の $i \in [b]$ を取る. 第 0 ブロックのうちの任意の s_i 列及び第 i ブロックからなる $t \times t$ 部分行列を V_i とすると, 余因子展開とヴァンデルモンドの行列式から, 行列 V_i の行列式が 0 でないことが示される. よって行列 V_i の全ての列が体 \mathbb{F}_q 上一次独立であることが示される.

(3) $t \times \beta$ 行列 W を行列 G の第 1 ブロックから第 b ブロックまでの全ての列から成る行列とし, 行列 W の任意の $\beta \times \beta$ 部分行列を W' とすると, (2) と同様に, 行列 W' の全ての列が体 \mathbb{F}_q 上一次独立であることが示される. よって, 行列 W の全ての列が体 \mathbb{F}_q 上一次独立であることが示される. \square

この生成行列 G で構成された GAOA に対応させることで計画 X を構成する方法を **方法 5.3** と呼ぶ. $b=1, n-1=q+1=t$ ならば方法 5.3 は方法 4.3 に一致する.

[例 5.1] 例 4.1 と同様に, $q=5, t=4, \alpha \in \mathbb{F}_{25}, \alpha_1=2, \alpha_2=3, \alpha_3=4$ とする. $b=s_1=s_2=2$ とする. 式 (16) の行列 G が生成行列である行列 (17) は GAOA $(5^4, 4, 5, 4, (2, 2))$ である.

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 4 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3 & 4 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 1 & 4 & 1 \end{pmatrix} \quad (16)$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \alpha+1 & \alpha+1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2\alpha+4 & 3\alpha+1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3\alpha+4 & 2\alpha+1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4\alpha+1 & 4\alpha+1 \\ \vdots & & & & \vdots & \end{pmatrix}. \quad (17)$$

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。

よって, 最適な直交計画を方法 4.3 で構成可能な水準数, 因子数, 実験回数, 前提条件の値の範囲より, 方法 5.3 で構成可能な範囲のほうが広いことが示された。

6. む す び

本研究では, 計画の構成法として, AOA を利用する方法 4.2 と方法 4.3 を提案した. また, 最適な直交計画を多水準作成法では構成不可能な水準数, 因子数, 実験回数, 前提条件の値の範囲の一部において, 最適な直交計画を方法 4.2 と方法 4.3 で構成可能であることを示した.

更に, 本研究では, 方法 4.3 を特別な場合として含む計画の構成法として, GAOA を利用する方法 5.3 を提案した. また, 最適な直交計画を方法 4.3 で構成可能な水準数, 因子数, 実験回数, 前提条件の値の範囲は, 方法 5.3 によって拡張されたことも示した.

以上より, 方法 4.2 と方法 5.3 を利用すると, 最適な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が従来より拡張されることが示された. すなわち, 従来より一般的な構造式での最適な直交計画をこれらの方法で構成可能であることが示された.

謝 辞 本研究は, JSPS 科研費 JP16K00195, JP16K00417, JP17K00316, JP17K06446, JP18K11585, の助成による.

文 献

- [1] 田口玄一, 実験計画法 上, 丸善, 1976.
- [2] 高橋聰郎, 組合せ理論とその応用, 岩波全書, 岩波書店, 1979.
- [3] 斎藤友彦, 松嶋敏泰, 平澤茂一, “誤り訂正符号を利用した直交計画の構成法に関する一考察,” 第 25 回情報理論とその応用シンポジウム予稿集, pp.663–666, 2002.
- [4] A.S. Hedayat, N.J.A. Sloane, and J. Stufken, Orthogonal arrays and hadamard matrices, pp.145–166, Springer New York, New York, NY, 1999.
- [5] D.R. Stinson, “Ideal ramp schemes and related combinatorial objects,” Discrete Math., vol.341, no.2, pp.299–307, 2018.
- [6] X. Wang, L. Ji, Y. Li, and M. Liang, “Constructions of augmented orthogonal arrays,” J. Combinatorial Designs, vol.26, no.11, pp.547–559, 2018.
- [7] 浮田善文, 松嶋敏泰, 平澤茂一, “直交計画を用いたブル関数の学習に関する一考察,” 信学論 (A), vol.J86-A, no.4, pp.482–490, April 2003.

- [8] 須田健二, 五味 弘, “有限射影幾何を用いたソフトウェアテスト向けの直交表自動生成プログラムの開発とその応用,” 情処学論, vol.57, no.8, pp.1800–1809, 2016.

(2019 年 4 月 1 日受付)



山口 純輝

2017 早大・基幹理工・応用数理学科卒.
2019 同大学院基幹理工学研究科修了.



風間 露希

2014 早大・基幹理工・応用数理学科卒.
2016 同大学院基幹理工学研究科修了.
2016 同大・基幹理工学研究科・博士後期課程入学. 符号理論及び情報理論とその応用に関する研究に従事.



鎌塚 駿明

2012 早大・基幹理工・応用数理学科卒.
2014 同大学院基幹理工学研究科修了. 同大・基幹理工学研究科・博士後期課程入学.
2015 同大グローバルエデュケーションセンター助手, 2018 同センター講師 (任期付), 現在に至る. 博士 (工学). 符号理論及び情報理論とその応用に関する研究に従事.



斎藤 翔太

2013 早大・基幹理工・応用数理卒. 2018 同大学院・博士後期課程修了. 博士 (工学). 同年同大講師 (任期付), 現在に至る. 情報理論とその応用に関する研究に従事. 2018 SITA 若手論文賞受賞. IEEE 会員.



松嶋 敏泰 (正員)

1978 早大・理工・工業経営卒. 1980 同大学院修士課程. 同年日本電気 (株) 入社. 1986 早大大学院・理工学研究科・博士後期課程入学. 1989 横浜商科大学講師. 1991 同大助教授. 1992 早大・理工・工業経営学科 (現在, 経営システム工学科) 助教授. 1997 同大教授, 2007 同大・基幹理工学部・応用数理学科教授, 現在に至る. 知識情報処理及び情報理論とその応用に関する研究に従事. 工博. 2001 ハワイ大客員研究員, 2010 カリフォルニア大バークレイ校客員教員. IEEE, 人工知能学会, 情報処理学会, OR 学会, 日本経営工学会等各会員.