直交型実験計画の自動構成に関する提案

筑波大学社会工学系 藤 原 良

Some Ideas for Computer Construction of Orthogonal Arrays

Ryoh FUJI-HARA

1. は じ め に

近年コンピュータが身近に使えるようになったおかげで、実験計画の計画作りに関してもコンピュータを使って構成しようという動きが出てきた [須田 (1983), 須田・宮崎 (1987)]. 特に、実験計画法の中でも、直交実験と呼ばれるタイプの研究がさかんである。基本的な方法は、[Fuji-Hara (1978), 高橋 (1979, p.137), 高橋 他 (1976)] にあるように、因子を有限射影幾何の点に割りつけ、有限射影幾何のベクトル表現を用いて、直交表を生成するという方法である。しかし割りつけのとき、特定の因子間に2次の交互作用があると仮定し、それも推定できるような直交表を生成したい。これが割りつけを複雑なものにしている。いま行なわれている方法を簡単に述べる。まず、次の前提をおく。

- (1) 因子 $F_1, F_2, \dots, F_m$ の主効果は全て推定可能とする。(主効果同士又は2次の交互作用と交絡しない)
- (2) 水準数は各因子とも素数又は素数巾 (q) とする。
- (3) $M = \{1, 2, \dots, m\}$ の対 $\{i, j\}$, $i \neq j$ の集合 I が与えられ、2次の交互作用 $F_i \times F_j$, $\{i, j\} \in I$ の効果が全て推定可能とする。

これらの条件は、 M, I そして q によって特徴づけられる。 M と I は、 M を頂点集合、 I を辺集合とする単純グラフとして表現することができる。これを " $G=(M, I)$ " 又は単に " G " と書く。実験モデルを次のように仮定する。

$$\begin{aligned}
 y(r_1, r_2, \dots, r_m) = & \mu && \text{(一般平均)} \\
 & + \sum_{i \in M} \alpha_i(r_i) && \text{(主効果)} \\
 & + \sum_{\{i, j\} \in I} \gamma_{ij}(r_i, r_j) && \text{(2 次の交互作用効果)} \\
 & + \dots && \\
 & + \varepsilon(r_1, r_2, \dots, r_m) && \text{(誤差)}
 \end{aligned}$$

Key words: Orthogonal array, projective geometry, design of experiment, spread, matching

$S = \{0, 1, \dots, q-1\}$, $r_i \in S$ とすれば,

$$\sum_{a \in S} a_i(a) = 0, \quad i \in M$$

$$\sum_{a \in S} r_{ij}(a, b) = \sum_{b \in S} r_{ij}(a, b) = 0, \quad \{i, j\} \in I$$

これらの主効果及び交互作用効果が, 全て推定可能な直交表 A は, 次の性質を満たさねばならない.

- (1) A は $N \times m$ の配列で, 各要素は S の値を 1 つとる (N は実験回数).
- (2) A のどの 2 列をとっても, $S \times S$ の各要素が行として同数回現われる.
- (3) $\{i, j\} \in I, k \neq i, j$ のとき A の第 i, j, k の列には $S^3 = S \times S \times S$ の要素が行として同数回現われる.
- (4) $\{i, j\}, \{k, l\} \in I, \{i, j\} \cap \{k, l\} = \emptyset$ のとき, A の第 i, j, k, l 列には S^4 の各要素が行として同数回現われる.

このような, 直交表を構成する手法として, 因子 $F_1, F_2, \dots, F_m$ を有限射影幾何 $PG(n, q)$ の点に割りつける方法以外に系統的な方法はまだ知られていない.

因子 $F_1, F_2, \dots, F_m$ の射影幾何への割りつけとは, 次の各条件を満たす M から射影幾何の点集合 V への写像 φ を定めることである.

- (1) φ は M から $PG(n, q)$ の点集合への単射
- (2) $\{i, j\} \in I$ について, $\varphi(i)$ と $\varphi(j)$ を通る直線は $k \in M - \{i, j\}$ なるどの $\varphi(k)$ も通らない.
- (3) $\{i, j\}, \{k, l\} \in I$ かつ, $\{i, j\} \cap \{k, l\} = \emptyset$ なら, $\varphi(i)$ と $\varphi(j)$ を通る直線は $\varphi(k)$ と $\varphi(l)$ を通る直線と交わらない.

この割りつけを行なう方法として, 現在, 次の 2 つの方法がよく行なわれている.

ランダム, 割りつけ

- a₁) 因子にあらかじめ順序をつけておき, その順序で割りつけを行なう. 今, $F_1, F_2, \dots, F_m$ の順とする.
- a₂) 射影幾何の全ての点に関する配列を用意し, 割りつけ可能か不可能かのチェックをいれられるデータ構造を用意する.
- a₃) F_i を割りつけるとき, 割りつけ可の点の内から, ランダムに 1 点を選び, その点に F_i を割りつける.
- a₄) F_i を割りつけたとき, もし F_i が $F_j, j < i$ との間に交互作用の存在を仮定しているとき, $\varphi(j), \varphi(i)$ を通る直線上の点を全て割りつけ不可にする. もしその点が既に不可になっていたら a₃ にもどる.
- a₅) a₃) と a₄) を繰り返す. もし全ての因子を割りつける前に, 割りつけ可の点が無くなったなら, 別の乱数列を用いて, F_1 より割りつけなおす.

バック・トラッキング法

- a₃') a₃) で割りつけ可の点を選ぶとき, ランダムではなく, ある特定の順に選ぶ.
- a₄') a₄) で割りつけの点が無くなったとき, 1 つ前に割りつけた因子を次の点に割りつけなおして, また繰り返す. (注 2 点を通る直線を求める方法は [Fuji-Hara (1978)] に述べてある.)

これらの方法は、もちろん多項式オーダーではなく、たとえ割りつけが、ある $PG(n, q)$ 上で理論上可能でも、 G が複雑であれば、かなりの時間がかかる。この問題は、任意の単純グラフの射影幾何への埋め込み問題であり、近いうちに多項式オーダーのアルゴリズムが開発されるという望みはあまりない。たとえば、完全グラフ K_m が $PG(n, q)$ へ埋め込めるかどうか一般には解けていない。

ここで述べた方法は、射影幾何上の点と直線の結合関係のみを利用して、割りつけを行なっている。もし、 a_3 や a_3^2 で選ぶ点の範囲に制約をつけることができれば、繰り返し数を減らすことができるはずである。そこで、ここでは射影幾何上の構造をもっと積極的に利用して割りつけを改善する方法をいくつか提案する。

2. 有限射影幾何の構造

この節では、割りつけに利用できそうな有限射影幾何 $PG(n, q)$ の構造に関して述べる。コンピュータを使って割りつけの対象とする射影幾何は、一般に3次元以上であると考えてよい。平面の場合は、田口グラフのリストなどもあり、コンピュータを利用しなくても、割りつけることが可能である。

2.1 Spread

Spread とは、互いに交わらない直線の集合で、幾何上のどの点も、そのどれかの直線上にある。

例 1 $PG(3, 3)$ の点を $GF(3)$ 上の最小多項式

$\alpha^4 = \alpha + 1$ を用いて構成すると、原始根 α の巾乗の形を $\alpha^0, \alpha^1, \dots, \alpha^{39}$ で表現できる。いま点を巾のみで表現すると、 $PG(3, 3)$ 上の全ての直線は

0 1 4 13   0 2 17 24   0 6 11 32   0 10 20 30

の4本の直線を元に $+1 \pmod{40}$ することによりサイクリックに生成できる [高橋 (1979) 参照]。

ここで、0 10 20 30 より生成できる直線は10本で次のようになる。

0	10	20	30	5	15	25	35
1	11	21	31	6	16	26	36
2	12	22	32	7	17	27	37
3	13	23	33	8	18	28	38
4	14	24	34	9	19	29	39

この10本の直線は互いに交わらず、かつ $PG(3, 3)$ の全ての点を被覆しているので spread である。

spread の存在は、 n が奇数であることが必要十分条件である [Hirschfeld (1983) 参照]。 $PG(n, q)$ の spread に含まれる直線の数、 $(q^{n+1}-1)/(q^2-1)$ 本である。次元 n が偶数のときは spread は存在しないが、partial spread と呼ばれる直線の集合がある。partial spread とは、単に互いに交わらない直線の集合である。次元が偶数 $(2k)$ のときの partial spread の直線の最大数は $\sum_{i=1}^{k-1} q^{2i+1} + 1$ となる [Beutelspacher (1980)]。

spread の中にもいくつかの興味深い構造がある。\$\mathcal{S}\$ を 1 つの spread とする。もし、\$\mathcal{S}\$ の \$q+1\$ 本の直線集合 \$\mathcal{R}\$ が次の性質を満たすなら、\$\mathcal{R}\$ を **regulus** と呼ぶ：

もし、\$\mathcal{S}\$ 以外の直線 \$l\$ が \$\mathcal{R}\$ の 3 直線と交わるなら、\$l\$ は \$\mathcal{R}\$ の全ての直線と交わる (\$l\$ は \$\mathcal{R}\$ を横断するという)。

例 2 例 1 の spread より

$$\mathcal{R} = \{\{0, 10, 20, 30\}, \{1, 11, 21, 31\}, \{4, 14, 24, 34\}, \{13, 23, 33, 3\}\}$$

の 4 直線を \$\mathcal{R}\$ として選ぶと、\$\mathcal{S}\$ 以外の直線で \$\mathcal{R}\$ と 3 直線以上で交わる直線は次の 4 直線のみである。

$$0 \quad 1 \quad 4 \quad 13 \quad 10 \quad 11 \quad 14 \quad 23 \quad 20 \quad 21 \quad 24 \quad 33 \quad 30 \quad 31 \quad 34 \quad 3$$

これらは、\$\mathcal{R}\$ と 3 直線以上で交わるという条件で探したが、実際はどれも、\$\mathcal{R}\$ の全ての直線と交わっている。このことから \$\mathcal{R}\$ は **regulus** であるといえる。これを図示すると次のようになる。

regulus を横断する直線の集合は又 **regulus** になる。つまり、\$\mathcal{S}\$ 中の **regulus** \$\mathcal{R}\$ をそれを横断する **regulus** と入れ換えてもまた **spread** である [Bruck (1967)]。ある **spread** \$\mathcal{S}\$ について、もしその中の任意の 3 直線に対し、それらを含む **regulus** が必ず 1 つ \$\mathcal{S}\$ に含まれているとき、\$\mathcal{S}\$ は **regular spread** と呼ばれる。\$PG(3, q)\$ には **regular spread** が存在することが知られている [Bruck (1967)]。

例 1 の **spread** は **regular spread** である。一般に、例 1 と同様に、\$PG(n, q)\$ の点を整数表現すると、\$n\$ が奇数のとき、点集合

$$\{0, d, 2d, \dots, gd\} \quad d = v/(q+1), v = (q^{n+1}-1)/(q-1)$$

は、使った最小多項式によらず、1 つの直線である。この直線から \$+1 \pmod{v}\$ によってサイクリックに生成される \$d\$ 個の直線は **spread** になる [高橋 (1979) 参照]。\$n=3\$ のとき、この **spread** は **regular** である。また \$n=3\$ のときの **regular spread** の分類は完全にされており、全ての **regular spread** をつくすことも可能である [Beutelspacher (1974)]。

regular spread \$\mathcal{S}\$ の直線を点、**regulus** をブロックとすれば、**regular spread** の定義より、任意の 3 点 (3 直線) を含むブロック (**regulus**) が必ず 1 つ存在することがいえるので、これはブロック・デザインの用語でいう、3-design である。

次に互いに共通な直線を持たない複数の **spread** に関して述べよう。もし \$PG(n, q)\$ の全ての直線が \$r\$ 個の **spread** \$\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_r, r = (q^n-1)/(q-1)\$ に分割できるとき、その分割を **resolution** あるいは **parallelism** と呼ぶ。\$PG(n, q)\$ の **parallelism** は \$n=2^i-1, i=2, 3, \dots\$ のときと、\$q=2, n=\text{odd}\$ のときしか存在が知られていない [Baker (1976), Beutelspacher (1974)]。これ

らのケース以外でも、互いに共通直線を持たない spread をいくつか構成することができる。いまのところ、次のことが言える：

$PG(2k+1, q)$, $k \geq 1$ で、少なくとも $q^2 + q + 1$ 個の互いに共通直線を持たない spread が存在する。

partial spread に関しても、互いに共通直線を持たない 2 つの partial spread は存在するが、そのときカバーされている点集合が同じになるようにできるかどうかは未だ解決されていない。

2.2 Fan

$PG(n, q)$ の t 次元部分空間を t -flat と呼ぶ。特にその中で、0, 1, 2-flat を各々点、直線、平面と呼ぶ。今、 T を t -flat とする。 u -flat の集合 $U_1, U_2, \dots, U_l$ が $U_i \cap U_j = T$, $i \neq j$ を満たすとき、その u -flat の集合を fan と呼ぶ。射影幾何の性質より $u \geq t+1$ であることはすぐにわかる。最も簡単な fan はある 1 点を共有する直線の集合である。これはまた pencil と呼ばれる。

fan 中の u -flat の個数 l の最大数は

$$(q^{k+1} - 1) / (q - 1), \quad u = n - k, \quad k \geq 1$$

である。

3. 割 り つ け

第 2 節で述べた、射影幾何上の構造を利用して、割りつけ法を改善するためのいくつかの案をこの節で述べる。

3.1 Spread の利用

spread $\mathcal{S}$ を利用するため、まず、主効果と 2 次の交互作用効果を表現したグラフ G を考える。(グラフ理論上の用語は Bondy and Murty (1976) 又は Wilson (1985) を参照)

(i) グラフ G の上でまず最大マッチングを見つける。

グラフのマッチングとは、辺の部分集合で、互いに共通点を持たないものをいう。最大マッチングとはマッチングの最大辺数を持つものをいう。最大マッチングを見つけるには、多項式オーダーのアルゴリズムが知られている [Edmond (1965)]。

(ii) 今 G の最大マッチングを $\mathcal{M}$ としたとき、割りつけを行う原則として、 $\mathcal{M}$ に含まれる辺 $e = \{v_1, v_2\}$ に対して spread $\mathcal{S}$ のどれかの直線上に点 v_1, v_2 を割りつける。

このとき、2 つの問題が出てくる。第 1 は $\mathcal{M}$ の辺 e を $\mathcal{S}$ のどの直線に割りつけるか、第 2 に、その直線上のどの点に v_1, v_2 を割りつけるかということである。まず第 1 の問題を解決するために

次のことを行なう。

(iii) グラフ G を最大マッチング $\mathcal{M}$ の全ての辺について G を縮約 (contract) する。

グラフ G を辺 $e = \{v_1, v_2\}$ で縮約するとは、点 v_1, v_2 を 1 つの点 v' としてしまい、辺 $\{v_1, v_2\}$ は取り除く。 v_1 又は v_2 に結合していた G の他の辺は v' に結合するグラフ G' にする。 G' は多重辺を持ったグラフとなる。

(例)

もし、 $\mathcal{S}$ が regular spread なら、任意の $\mathcal{S}$ の 3 直線に対して、それらを含む regulus が存在する。そこで、regular spread を用いるときは、 G' で最も複雑な 3 点、上の例では w_1, w_2, w_3 が regulus に割りつけできなければ G は $\mathcal{S}$ への割りつけは不可能である。またそれが可能の時、その他の G' の点、例えば w_4 は w_1, w_2, w_3 を割りつけた regulus 以外の直線に割りつけるのが楽である。あるいは、1 つの regulus へ割りつけられるだけ割りつけて、他の直線が割りつけやすくなることもできる。

次に、縮約されたグラフ G' の多重辺をもう少し細かく分類してみよう。 G' で多重辺となった場合、もとのグラフ G では、同型を除いて次のような結合関係になっている。

$\mathcal{S}$ がもし、regular spread なら、どの $\mathcal{S}$ のどの 3 直線についても、それを含む regulus が必ず 1 つ存在する。このことから $\mathcal{S}$ の 2 直線については、それらを含む regulus は $q+1$ 個 ($PG(3, q)$ で) 存在する。このことから、(1) の type では、 $\{a, b\}, \{c, d\}$ を $\mathcal{S}$ の 2 直線に割りつけたとき、 $\{b, c\}$ と $\{b, d\}$ は異なる regulus を横断する。これら 2 つの regulus へは $\mathcal{M}$ の他の辺は割りつけることはできない。(2) の type では、 $\{a, c\}, \{b, d\}$ が同一の regulus を横断するように割りつけられる。同様に、(3), (4) では共に 2 つの regulus のみを横断するように割りつけられる。このように $\mathcal{S}$ の直線をできるだけ、割りつけ可能のまま残すようにしていけば、より複雑なグラフも、割りつけやすくなるであろう。

3.2 共通直線を持たない2つの spread の利用

第2節で、互いに共通直線を持たない2つの spread 又は partial spread が存在することを述べた。ここで、それを割りつけに利用することを提案する。

(i) 共通直線を持たない2つの spread $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ から次のような2部グラフ H を作る。

$\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ の直線の集合を各々 V_1, V_2 とする。そして、 H は $V_1 \cup V_2$ を点とし、 H の辺に関しては、 $v_1 \in V_1, v_2 \in V_2$ に対し、 v_1 と v_2 が交わる時、そしてその時に限り H の辺とする。

もし、 $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ が共に spread なら、 H は次数 $q+1$ の正則2部グラフとなる。又 $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ が partial spread なら最大次数 $q+1$ の単なる2部グラフである。

(ii) グラフ G より共通辺を持たない2つの最大マッチング $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ を見つける。そして次のグラフ E を作る： $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ の辺集合を各々 X_1, X_2 とする。 $X_1 \cup X_2$ を E の点とし、 $x_1 \in X_1, x_2 \in X_2, x_1$ と x_2 が G で共通点を持っているときそして、そのときに限り E で辺 $\{x_1, x_2\}$ が存在する。

もし、 $\mathcal{M}_1$ と $\mathcal{M}_2$ が共に G の最大マッチングでかつ G の全ての辺を覆っているなら、 E は次数2の正則2部グラフとなる。つまりこのとき E はサーキットの集まりとなる。もし G が連結グラフなら1つのサーキットである。もし $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ が共に最大マッチングでないとき、 E は最大次数2の2部グラフになる。

(iii) 次のようなグラフ E からグラフ H への準同型写像 π を考える：

(a) $\pi: X_1 \cup X_2 \rightarrow V_1 \cup V_2$

(b) $\{x, y\}$ が E の辺であり、そのときにかぎり H の辺 $\{\pi(x), \pi(y)\}$ が存在する。

もし、2つのマッチング $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ で全ての辺をつくしているときは、(iii) の対応づけができれば、もとの射影幾何にもどせば、割りつけができていくことになる。また、 $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ 以外に G に点又は辺が残っているときは、その点に関して、従来の方法で割りつけを試みることができる。但し、もしグラフ G の次数の分布にかなりバラツキがあるときは最大マッチングで被覆されない点が増えるのでこの方法はあまり向かない。

3.3 fan の利用

H を G の部分グラフとしよう。もし、 H の辺全てを取り除くことによって G がいくつかの成分からなる非連結グラフとなるとき、 H をカット部分グラフと呼ぶ。

(例)

次の原則に従って G を $PG(n, q)$ の fan に割りつける。

(i) カット部分グラフを fan の共通部分に割りつけ、非連結成分を他の互いに交わらない部分にそれぞれ割りつける。

(例)

例えば $PG(3, 3)$ の fan は下図のような pencil 又は plane fan の 2 種類しかないので, カット部分グラフ H は 1 つの点からなるグラフか, 又は 2 点と 1 つの辺からなるグラフでなくてはならない.

H が点のときは, G はスター型でなければならない.

スター型グラフ

また H が 2 点と 1 つの辺からなるとき, H に接する成分は次のどちらかでなくてはならない.

また成分の個数も fan に含まれる t -flat の個数以下でなければならない.

4. お わ り に

前節で述べた 3 つの方法を, 組み合わせれば, 全てのグラフ G にとはいかないが, かなりのタイプのグラフに適応できるはずである. spread 又は partial spread を利用するときは, regulus の情報をデータベースとして持っておくと, 縮約された点を spread のどの直線に割りつけるとよ

いかということをも早く見つけることができる. regular spread の場合 ($PG(3, q)$ のとき) は 3-design になるので, その block 情報を持っていればよい. また regulus を横断する直線の情報も持っていれば, 助かるはずである. partial spread に関しては, どの直線が regulus かあらかじめ調べて, おぼえておく必要がある.

ここで述べた案は, 1 節の a_3 や a'_3 で点を選ぶときに, spread, あるいは fan 上に制限することによって, サーチを早くしようという考えである. 当然制限をもうけることによって, 1 節で述べた従来の方法では割りつけ可だが, 3 節の方法では不可能, つまり実用的な時間では終わらない場合もでてくる. もちろん従来の方法も割りつける因子に順序をつけているので, 完全サーチにはなっていない. どんなケースが従来の方法より早くなっているのか, 又その逆はどんなケースかを, 須田 (1983) や須田・宮崎 (1987) での実験データと比較するのは興味ある課題である.

参 考 文 献

- Baker, R.D. (1976): Partitioning the planes of $AG_{2m}(2)$ into 2-design, *Discrete Math.* Vol. 15, 205-211
 Beutelspacher, A. (1974): On parallelisms in finite projective spaces, *Geometriae Dedicata* Vol. 3, 35-40
 Beutelspacher, A. (1980): Blocking and partial spreads in finite projective spaces, *Geometriae Dedicata* Vol. 9, 425-449
 Bondy, J.A. and Murty, U.S.R. (1976): *Graph Theory with Applications*, Gresham Press
 Bruck, R.H. (1967): Construction Problems of Finite Projective Planes, Proc. Conf. Combinatorics, held at the University of North Carolina at Chapel Hill University of North Carolina Press
 Edmond, J. (1965): Path, tree and flowers, *Canad. J. Math.* Vol. 17, 449-467
 Fuji-Hara, R. (1978): On automatical construction for orthogonal design of experiments, *Rep. Stat. Appl. Res., JUSE*, Vol. 25, No. 1, 13-25
 Hirschfeld, J.W.P. (1979): *Projective geometries over Finite Field*, Oxford University Press
 Hirschfeld, J.W.P. (1986): *Finite Projective Space of Three Dimension*, Oxford University Press
 須田健二 (1983): 「パソコンによる直交実験の計画と解析」日科技連品質管理 Vol. 34 5月臨時増刊号 803-807.
 須田健二, 宮崎晴夫 (1987): 「直交配列を用いた実験計画における要因割りつけのコンピュータ・アルゴリズムについて」日本経営工学会誌, Vol. 37, No. 6, 345-352.
 高橋磐郎 (1979): 「組合せ理論とその応用」岩波全書.
 高橋磐郎, 藤原 良, 杉本英二, 須田健二, 神保雅一 (1976): 「直交実験の自動計画と Maximal 3, 4-linearly independent set」京都大学数理解析研究所講究録, No. 285, 13-22.
 Wilson, R.J. (1985): *Introduction to Graph Theory*, 3ed (訳: 斉藤伸自, 西関隆夫「グラフ理論入門」近代科学社)

(1987 年 6 月 26 日受付 1988 年 1 月 29 日最終修正)

著者連絡先: 茨城県新治郡桜村 筑波大学社会工学系