Characterizations of indicator functions of fractional factorial designs

青木 敏[*] [†]

1 はじめに

多項式環のグレブナー基底の理論を統計学の諸問題に適用する研究は，1990 年代に誕生し，計算代数統計という魅力的な融合分野の発展へと繋がった．その発端となった研究のひとつ，Pistone and Wynn ([8]) は，実験計画法における母数の識別可能性の代数幾何学的な記述方法を与えたものである．以来，計算代数統計において，実験計画法は重要な応用分野のひとつである．一部実施計画の指示関数は，Fontana, Pistone and Rogantin ([4]) により，2 水準計画に関して与えられた．ここで示された，計画とその指示関数の 1 対 1 対応により，一部実施計画における様々な概念は，対応する指示関数の性質に翻訳することができる．例えば図 1 の 2 つの 2 水準計画 F_1 と F_2 の指示関数はそれぞれ

F_1

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	1	1	1	1
1	1	−1	1	−1
1	−1	1	−1	1
1	−1	−1	−1	−1
−1	1	1	−1	−1
−1	1	−1	−1	1
−1	−1	1	1	−1
−1	−1	−1	1	1

F_2

x_1	x_2	x_3	x_4
1	1	1	1
1	1	−1	−1
1	−1	1	−1
−1	1	−1	−1
−1	−1	1	−1
−1	−1	−1	1

図 1: 2 水準一部実施計画の例．左 (F_1) は定義関係が $x_1x_2x_4 = x_1x_3x_5 = 1$ で与えられるレギュラーな一部実施計画．右 (F_2) はレギュラーでない一部実施計画の例.

$$F_1: \quad f_1(x_1,x_2,x_3,x_4,x_5) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4}(x_1x_2x_4 + x_1x_3x_5 + x_2x_3x_4x_5)$$
$$F_2: \quad f_2(x_1,x_2,x_3,x_4) = \frac{3}{8} - \frac{1}{8}x_4 + \frac{1}{8}(x_1x_2 + x_1x_3 - x_2x_3) + \frac{1}{8}(x_1x_3x_4 + x_2x_3x_4) + \frac{3}{8}x_2x_3x_4$$

[*]神戸大学大学院理学研究科

[†]本原稿は，投稿中の論文 [1] の内容の要約です.

となる．これが指示関数であることは，例えば，F_1 の 8 点については $f_1(x_1,\ldots,x_5)=1$，F_1 に含まれない 24 点については $f_1(x_1,\ldots,x_5)=0$ となることから確認できる．このように，n 個の 2 水準因子の一部実施計画の指示関数は，水準を $\{+1,-1\}$ に取ることにより，$x_1,x_2,\ldots,x_n$ の平方自由な多項式

$$f(x_1,\ldots,x_n)=\sum_{\boldsymbol{a}\in\{0,1\}^n}\theta_{\boldsymbol{a}}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}} \tag{1}$$

として一意的に表現できる．ここで，$\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}}=\prod_{i=1}^{n}x_i^{a_i}$，$\boldsymbol{a}=(a_1,\ldots,a_n)\in\{0,1\}^n$ とおいた．指示関数の係数 $\{\theta_{\boldsymbol{a}}\}_{\boldsymbol{a}\in\{0,1\}^n}$ は，その計画のすべての情報をもっている．例えば，上の指示関数 f_1，f_2 から，計画 F_1，F_2 について以下が分かる．

- 定数項 $\theta_{(0,\ldots,0)}$ は，その計画の一部実施度を表す．例えば，F_1 は 2^5 完全実施計画の 1/4 実施計画であり，F_2 は 2^4 完全実施計画の 3/8 実施計画である．

- 1 次の項 $\theta_{\boldsymbol{a}}, \sum_j a_j=1$ は，対応する因子の水準の「バランス」を表す．例えば F_1 は，$\theta_{(1,0,0,0,0)}=\cdots=\theta_{(0,0,0,0,1)}=0$ から，いずれの因子についても 2 水準が同数づつ現れる計画（equireplicated 計画）であることが分かる．一方 F_2 は，$\theta_{(1,0,0,0)}=\theta_{(0,1,0,0)}=\theta_{(0,0,1,0)}=0$ から，因子 x_1,x_2,x_3 については水準数が同数であるが，$\theta_{(0,0,0,1)}\neq 0$ から，因子 x_4 については水準数が不揃いな計画であることが分かる．

- 2 次の項 $\theta_{\boldsymbol{a}}, \sum_j a_j=2$ は，対応する 2 つの因子の「直交性」を表す．例えば F_1 は，$\theta_{(1,1,0,0,0)}=\cdots=\theta_{(0,0,0,1,1)}=0$ から，直交計画であることが分かる．一方 F_2 は，$\theta_{(1,0,0,1)}=\theta_{(0,1,0,1)}=\theta_{(0,0,1,1)}=0$ より，因子 x_4 は他の 3 因子のいずれとも直交しているが，$\theta_{(1,1,0,0)},\theta_{(1,0,1,0)},\theta_{(0,1,1,0)}\neq 0$ より，因子 x_1,x_2,x_3 は互いに直交しないことが分かる．

このように，2 水準計画については，直交性（分解能，aberration）の概念は，指示関数の係数と直接的な関係がある．特に，2 水準計画のレギュラーな一部実施計画については，その指示関数の構造は完全に解明されている（[10]）．

[4] では，上記の指示関数の性質を，以下のように，計画の分類に利用した．2 水準計画の指示関数 (1) において，その係数 $\{\theta_{\boldsymbol{a}}\}_{\boldsymbol{a}\in\{0,1\}^n}$ は，代数方程式系

$$\theta_{\boldsymbol{a}}=\sum_{\boldsymbol{a}'\in\{0,1\}^n}\theta_{\boldsymbol{a}'}\theta_{\boldsymbol{a}+\boldsymbol{a}'},\quad \boldsymbol{a}\in\{0,1\}^n, \tag{2}$$

を満たす．ここで，和 $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{a}'$ は「mod 2」での演算と定義する．この代数方程式系に，直交性などの性質に対応する制約を加えた代数方程式系を考えれば，その解は，与えられた性質をもつすべての計画に対応する．つまり，代数方程式系を解いてすべての計画を列挙し，それを同値類に分類すればよい．「代数方程式系の求解」は，グレブナー基底の理論が適用されるもっとも基本的な問題である．

本研究では，上記の理論を一般の計画に拡張する．一般の計画では，計画の直交性などの概念と指示関数の係数との関係は，自明ではない．例えば，定義関係が $x_1+x_2+x_3=$

$x_1+2x_2+x_4=0 \pmod 3$ で表されるレギュラーな 3 水準計画の指示関数は，以下のように複雑な形になる．

$$
\begin{aligned}
& f(x_1,x_2,x_3,x_4) \\
= \ & 1-x_1^2-x_2^2-x_3^2-x_4^2+x_1^2x_2^2+x_1^2x_3^2+x_1^2x_4^2+x_2^2x_3^2+x_2^2x_4^2+x_3^2x_4^2 \\
& +\frac{1}{4}(x_1^2x_2x_3-x_1^2x_2x_4+x_1^2x_3x_4+x_1x_2^2x_3+x_1x_2^2x_4-x_2^2x_3x_4 \\
& \quad +x_1x_2x_3^2-x_1x_3^2x_4+x_2x_3^2x_4-x_1x_2x_4^2-x_1x_3x_4^2-x_2x_3x_4^2) \\
& -\frac{3}{4}(x_1^2x_2^2x_3^2+x_1^2x_2^2x_4^2+x_1^2x_3^2x_4^2+x_2^2x_3^2x_4^2)
\end{aligned}
$$

多水準計画の指示関数について，[7] は，水準に複素数を用いる方法を提案した．これは，例えば 3 水準計画では，$\{-1,0,1\}$ などの代わりに，1 の 3 乗根 $w=\exp(2\pi\sqrt{-1}/3)$ をもちいて水準を $\{1,w,w^2\}$ ととるものである．また [2] は，実数係数で指示関数を構築する方法を提案した．本研究では，有理数係数で指示関数を構築する方法を提案する．これは，標準的な計算代数ソフトウェアが，係数体として有理数体あるいは有限体 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ での計算を実装していることが理由である．本研究では，2 水準計画における代数方程式系 (2) や，直交性などの性質に対応する制約を，一般の計画の指示関数について拡張する．

2　一部実施計画の指示関数

まず，計画の指示関数に関する基本的な結果をまとめる．これらは，計画上の補間多項式の理論にもとづく結果であり，[8] により示されたグレブナー基底の統計学への最初の応用でもある．詳しくは，[6] あるいは [3] の Chapter 5 などを参照されたい．

$x_1,\ldots,x_n$ を n 個の因子とする．$j=1,\ldots,n$ について，因子 x_j の水準の集合を $A_j \subset \mathbb{Q}$ とおく．$\mathbb{Q}$ は有理数体である．A_j の要素数を $r_j=\#A_j$ とし，$r_j \geq 2$ と仮定する $(j=1,\ldots,n)$．$D=A_1\times\cdots\times A_n$ を，因子 $x_1,\ldots,x_n$ の完全実施計画という．後のため，添字集合を $\mathcal{I}=\{(i_1,\ldots,i_n)\in[r_1]\times\cdots[r_n]\}$ と定義する．ここで自然数 k について $[k]=\{1,2,\ldots,k\}$ とした．$\mathcal{I}$ を使い，計画 D を $D=\{\boldsymbol{d_i}\in\mathbb{Q}^n \ : \ \boldsymbol{i}\in\mathcal{I}\}$ と表す．$j=1,\ldots,n$ について，水準を $A_j=[r_j]$ とすれば，$\mathcal{I}$ は D と一致する．

D の部分集合を一部実施計画という．一部実施計画 $F\subset D$ は，$\mathcal{I}$ の部分集合 $\mathcal{I}'$ をもちいて $F=\{\boldsymbol{d_i}\in D \ : \ \boldsymbol{i}\in\mathcal{I}'\}$ と表すことができる．計画に含まれる点の数を計画のサイズという．特に，完全実施計画 D のサイズを $m=\prod_{j=1}^n r_j$ とおく．

係数を $\mathbb{Q}$ にとる n 変数多項式環を $\mathbb{Q}[x_1,\ldots,x_n]$ とおく．計画 $F\subset\mathbb{Q}^n$ について，F の各点で 0 となる $\mathbb{Q}[x_1,\ldots,x_n]$ の多項式の集合を

$$
I(F)=\{f\in\mathbb{Q}[x_1,\ldots,x_n] \ : \ f(\boldsymbol{d})=0,\ \forall\boldsymbol{d}\in F\}
$$

と書く．$I(F)$ は多項式環 $\mathbb{Q}[x_1,\ldots,x_n]$ のイデアルであり，計画 F の計画イデアルとよぶ．計画イデアルは，計画を代数的に扱うための基本的な道具であり，[8] により導入された．すべての $f\in I(F)$ について $f(\boldsymbol{d})=0$ となる点 $\boldsymbol{d}\in\mathbb{Q}^n$ の集合は，F に他ならない．

完全実施計画 D の計画イデアルは $I(D)=\left\langle x_j^{r_j}-g_j,\ j=1,\dots,n\right\rangle$ と書ける．ただし g_j は次数が r_j よりも小さい $\mathbb{Q}[x_j]$ の多項式である．つまり $G=\left\{x_j^{r_j}-g_j,\ j=1,\dots,n\right\}$ は $I(D)$ の生成系である．さらに G は，任意の単項式順序に関する $I(D)$ の被約グレブナー基底である．G の元のイニシャル単項式の集合は $\{x_j^{r_j},\ j=1,\dots,n\}$ であり，これらで割り切れない単項式の集合を

$$\mathrm{Est}(D)=\left\{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}}=\prod_{j=1}^{n}x_j^{a_j}\ :\ \boldsymbol{a}\in L\right\},$$

$$L=\{\boldsymbol{a}=(a_1,\dots,a_n)\in\mathbb{Z}_{\geq 0}^n\ :\ 0\leq a_j\leq r_j-1,\ j=1,\dots,n\}$$

と書く．$\mathbb{Z}_{\geq 0}$ は非負整数を表す．このとき L は m 個の元からなる．計画 $D=\{\boldsymbol{d_i}\in\mathbb{Q}^n\ :\ \boldsymbol{i}\in\mathcal{I}\}$ と L から，モデル行列を $X=[\boldsymbol{d_i^a}]_{\boldsymbol{i}\in\mathcal{I};\boldsymbol{a}\in L}$ と定義する．ここで，$\boldsymbol{d_i^a}=\prod_{j=1}^n d_{\boldsymbol{i}j}^{a_j}$ であり，$d_{\boldsymbol{i}j}$ は因子 j の実験 $\boldsymbol{i}\in\mathcal{I}$ に対応する水準である．$\mathcal{I}$ と L の元を適当に順序付けて，X を $m\times m$ 行列とみる．X は非特異行列となる．

多項式環 $\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]$ の，計画イデアル $I(D)\in\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]$ による剰余環を

$$\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]/I(D)=\{[f]\ :\ f\in\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]\}$$

と定義する．ただし $[f]=\{g\in\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]\ :\ f-g\in I(D)\}$ と定義する．二つの多項式モデル f と g が D 上で交絡するとは，$f-g\in I(D)$ であることと同値である．従って，剰余環の元 $[f]\in\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]/I(D)$ は，D 上で f と交絡する多項式 $g\in\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]$ の集合となる．$\mathrm{Est}(D)$ は，剰余環 $\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]/I(D)$ の $\mathbb{Q}$-ベクトル空間としての基底をなす．詳しくは [6] の Theorem 15 を参照されたい．

完全実施計画 $D=\{\boldsymbol{d}_i\in\mathbb{Q}^n\ :\ \boldsymbol{i}\in\mathcal{I}\}$ 上で観測される有理数の値をとる観測値を $\boldsymbol{y}=(y_{\boldsymbol{i}})_{\boldsymbol{i}\in\mathcal{I}}$ とする．ここで，多項式 $f\in\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]$ を，D 上の応答関数，つまり，D 上の $\mathbb{Q}$ 値関数全体なすベクトル空間の元とみる．応答 $\boldsymbol{y}$ の補間多項式とは，多項式 $f\in\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]$ で $f(\boldsymbol{d_i})=y_{\boldsymbol{i}}$，$\boldsymbol{i}\in\mathcal{I}$ を満足するものをいう．このとき，$\mathrm{Est}(D)$ が $\mathbb{Q}[x_1,\dots,x_n]/I(D)$ の基底をなすことから，$\boldsymbol{y}$ の補間多項式は一意的な表現

$$f(x_1,\dots,x_n)=\sum_{\boldsymbol{a}\in L}\theta_{\boldsymbol{a}}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}},\tag{3}$$

をもつことが従う．ここで，$m\times 1$ 列ベクトル $\boldsymbol{\theta}=(\theta_{\boldsymbol{a}})_{\boldsymbol{a}\in L}$ は，$m\times 1$ 列ベクトル $\boldsymbol{y}$ から $\boldsymbol{\theta}=X^{-1}\boldsymbol{y}$ と定まる．詳しくは [6] の Theorem 26 を参照されたい．

定義 1 ([4])**.** $F\subset D$ を一部実施計画とする．F の指示関数とは，D 上の応答関数 f で

$$f(\boldsymbol{d})=\begin{cases}1, & \text{if } \boldsymbol{d}\in F,\\ 0, & \text{if } \boldsymbol{d}\in D\setminus F\end{cases}$$

を満足するものをいう．

上述の補間多項式の理論より，指示関数は以下のように構成できる．一部実施計画 $F \subset D$ を，添字集合の部分集合 $\mathcal{I}' \subset \mathcal{I}$ をもちいて $F = \{\boldsymbol{d_i} \in D \ : \ \boldsymbol{i} \in \mathcal{I}'\}$ と書く．このとき，応答 $\boldsymbol{y} = (y_{\boldsymbol{i}})_{i \in \mathcal{I}}$ を

$$y_{\boldsymbol{i}} = \begin{cases} 1, & \text{if } \boldsymbol{i} \in \mathcal{I}' \\ 0, & \text{if } \boldsymbol{i} \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{I}' \end{cases} \tag{4}$$

と定めれば，計画 F の指示関数は $\boldsymbol{y}$ の補間多項式に他ならない．補間多項式の表現の一意性より，指示関数の表現も一意的となる．

3　直交計画の指示関数の特徴付け

一般の設定で，計画と指示関数の関係を考える，まず，2 水準計画についての代数方程式系 (2) を一般の場合に拡張する．多項式 $f \in \mathbb{Q}[x_1, \ldots, x_n]$ が，ある一部実施計画 $F \subset D = \{\boldsymbol{d_i} \in \mathbb{Q}^n \ : \ \boldsymbol{i} \in \mathcal{I}\}$ の指示関数であることと，$f^2 - f \in I(D)$ であること，つまり f と f^2 が剰余環 $\mathbb{Q}[x_1, \ldots, x_n]/I(D)$ の同じ同値類に属すことは同値である．従って，式 (3) で表される f が，ある計画の指示関数であるとき，

$$\begin{aligned} \sum_{\boldsymbol{a} \in L} \theta_{\boldsymbol{a}} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}} &= \left(\sum_{\boldsymbol{a} \in L} \theta_{\boldsymbol{a}} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}} \right)^2 \mod I(D) \\ &= \sum_{\boldsymbol{a}_1 \in L} \sum_{\boldsymbol{a}_2 \in L} \theta_{\boldsymbol{a}_1} \theta_{\boldsymbol{a}_2} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2} \mod I(D) \end{aligned}$$

が成り立つ．ここで，G に関する $\displaystyle\sum_{\boldsymbol{a}_1 \in L} \sum_{\boldsymbol{a}_2 \in L} \theta_{\boldsymbol{a}_1} \theta_{\boldsymbol{a}_2} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2}$ の標準表示を

$$r = \sum_{\boldsymbol{a} \in L} \mu_{\boldsymbol{a}} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}} \tag{5}$$

と書く．つまり，$\displaystyle\sum_{\boldsymbol{a}_1 \in L} \sum_{\boldsymbol{a}_2 \in L} \theta_{\boldsymbol{a}_1} \theta_{\boldsymbol{a}_2} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2}$ を $I(D)$ の被約グレブナー基底 G で割ったときの一意的な余りを r とおく．このとき以下がいえる．

命題 1 ([4] の Proposition 3.7 の一般化)**.** 式 *(3)* で与えられる多項式 f が，ある計画の指示関数であることは，代数方程式系

$$\theta_{\boldsymbol{a}} = \mu_{\boldsymbol{a}}, \quad \boldsymbol{a} \in L \tag{6}$$

を満足することと同値である．ただし $\mu_{\boldsymbol{a}}$ は式 *(5)* で与える．

証明.　グレブナー基底の性質より．詳しくは [3] の Chapter 2 を参照されたい．　□

次に，与えられた性質を持つ計画の指示関数の構造を考える．これは，代数方程式系 (6) に付け加える制約として表現される．ここで，式 (3) の指示関数の係数 $\boldsymbol{\theta}$ が $\boldsymbol{\theta} = X^{-1}\boldsymbol{y}$

により与えられたことに注目する．与えられた計画に対して式 (4) で $\{0,1\}^m$ のベクトル $\boldsymbol{y} = (y_i)_{i \in \mathcal{I}}$ を定義するとき，計画の性質は定数ベクトル $\boldsymbol{c} \in \mathbb{Q}^m$ をもちいた

$$\boldsymbol{c}^T \boldsymbol{y} = s, \ s \in \mathbb{Q} \tag{7}$$

の形で与えられる．例えば，サイズが s の計画に対応する $\boldsymbol{y} \in \{0,1\}^m$ は，制約 $\mathbf{1}_m^T \boldsymbol{y} = s$ を満たす（$\mathbf{1}_m = (1, \ldots, 1)^T$ は $m \times 1$ 列ベクトル）．また，直交計画などの性質も，対比ベクトル $\boldsymbol{c}$ を使って式 $\boldsymbol{c}^T \boldsymbol{y} = 0$ の形で与えられる．

対比ベクトル $\boldsymbol{c}$ は，対比行列として以下で定義する．以下の定義において．各 $J \subset [n]$ と $\boldsymbol{i} = (i_1, \ldots, i_n) \in \mathcal{I}$ について，$\boldsymbol{i}$ の添字 $\prod_{j \in J} [r_j]$ への制限を $\boldsymbol{i}_J$ と書く（例えば，$n = 4$，$J = \{1, 2, 4\}$ のとき，$\boldsymbol{i}_J = (i_1, i_2, i_4)$ などである）．さらに，J と $\tilde{\boldsymbol{i}}$ の最初の成分を区別して $J = (j_1, J_2)$，$\tilde{\boldsymbol{i}} = (\tilde{i}_1, \tilde{\boldsymbol{i}}_2)$ と書く．

定義 2. $m \times m$ 行列 C を，$C^T = \left[\mathbf{1}_m \mid C_1^T \mid C_2^T \mid \cdots \mid C_n^T\right]$ と定め，これを対比行列とよぶ．ここで，C_k は $v_k \times m$ 行列で，

$$v_k = \sum_{J \subset [n], \# I = k} \left(\prod_{j \in J} (r_j - 1) \right)$$

である．C_k^T は，$m \times 1$ 列ベクトルの集合

$$\left\{ \boldsymbol{c}_{J(\tilde{\boldsymbol{i}})} = \{c_{J(\tilde{\boldsymbol{i}})}(\boldsymbol{i})\}_{i \in \mathcal{I}} \ : \ J \subset [n], \# J = k, \tilde{\boldsymbol{i}} \in \prod_{j \in J} [r_j - 1] \right\}$$

からなる．ただし，$\# J = 1$ について

$$c_{J(\tilde{i})}(\boldsymbol{i}) = \begin{cases} 1, & \boldsymbol{i}_J = 1, \\ -1, & \boldsymbol{i}_J = \tilde{i} + 1, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

$\# J \geq 2$ について

$$c_{J(\tilde{\boldsymbol{i}})}(\boldsymbol{i}) = \begin{cases} c_{J_2(\tilde{\boldsymbol{i}}_2)}(\boldsymbol{i}), & \text{if } i_{j_1} = \tilde{i}_1, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

と定める．

対比行列をもちいて，計画のサイズ，直交性を表現する．ここで，計画 $F \subset D$ が強度 t ($t \leq n$) の直交計画であるとは，任意の t 個の因子について，すべての水準の組み合わせが同数ずつ F に含まれることをいう．この定義は直交配列の理論に関する用語であり，詳しくは [9] の Chapter 7 を参照されたい．

命題 2. $\boldsymbol{y} \in \{0,1\}^m$ を式 *(4)* で与えられる D 上の応答とするとき，一部実施計画 $F = \{\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{i}} \in D \ : \ \boldsymbol{i} \in \mathcal{I}'\}$ がサイズ s で強度 t の直交計画であることは，

$$C\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_m^T \boldsymbol{y} \\ C_1 \boldsymbol{y} \\ \vdots \\ C_t \boldsymbol{y} \\ C_{t+1}\boldsymbol{y} \\ \vdots \\ C_m \boldsymbol{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s \\ \mathbf{0}_{v_1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{v_t} \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}$$

と同値である．ただし $\mathbf{0}_\ell = (0,\ldots,0)^T$ は成分が 0 の $\ell \times 1$ 列ベクトルである．

命題 2 と $\boldsymbol{\theta} = X^{-1}\boldsymbol{y}$ より，代数方程式系 (6) に追加する，サイズ s，強度 t $(t \le n)$ の直交性の制約は

$$\mathbf{1}_m^T X\boldsymbol{\theta} = s,\ C_\ell X \boldsymbol{\theta} = \mathbf{0}_{v_\ell},\ \ \ell = 1,\ldots,t$$

となる．

さらに，直交性に対応する，指示関数の別表現を与える．指示関数 (3) に対して，非特異な線型変換 $\boldsymbol{\theta} \mapsto \boldsymbol{\mu} = CX\boldsymbol{\theta}$ を考え，対応する変数 $\boldsymbol{z}$ を $\boldsymbol{z} = ((CX)^{-1})^T \boldsymbol{x}$ で定義する．このとき，指示関数の $\boldsymbol{z} = \{z_{J(\tilde{\boldsymbol{i}})} \ : \ J \subset [n], \tilde{\boldsymbol{i}} \in \prod_{j\in J}[r_j - 1]\}$ に関する表現

$$f(\boldsymbol{z}) = \sum_{J \subset [n], \tilde{\boldsymbol{i}} \in \prod_{j\in J}[r_j-1]} \mu_{J(\tilde{\boldsymbol{i}})} z_{J(\tilde{\boldsymbol{i}})} \tag{8}$$

を，対比表現とよぶ．

対比表現から，計画のサイズと直交性を直接読み取ることができる．例えば，対比表現の定数項 $\mu_\emptyset$ は計画のサイズを表す．また，

$$\mu_{J(\tilde{\boldsymbol{i}})} = 0 \ \ \text{for } \#J = 1, \tilde{\boldsymbol{i}} \in \prod_{j\in J}[r_j - 1]$$

は equireplicated 計画に対応する．

指示関数，あるいはその対比表現について，代数方程式系の解を求めることで，与えられたサイズ，直交性の性質をもつ一部実施計画のリストを得ることができる．さらに，得られた解集合について，水準の入れ替えや（可能な）因子の入れ替えによる群作用の同値類を考えることで，与えられた性質をもつ計画の分類が得られる．ただし，同値類への分類は，3 水準以上の因子を含む場合には自明ではない．詳しくは，[1] を参照されたい．

4　$2^3 \times 3$，$2^4 \times 3$ 計画の一部実施計画の分類

計算代数ソフトウェア Macaulay2 ([5]) をもちいて，与えられた直交性をもつ一部実施計画の列挙，分類を行った．以下の計算は，laptop 計算機（2.80 GHz CPU，8 GB メモリ）上にインストールした仮想マシン (vmware) 上で行った．仮想マシンのメモリは 512 MB である．

4.1 $2^3 \times 3$ 計画の強度 2 の直交計画

$2^3 \times 3$ 計画の一部実施計画のうち，強度 2 の直交計画を列挙する．まず，可能なサイズを確認するために，サイズ s に関する消去を行ったところ，計算時間は 0.1 秒未満で

$$I \cap \mathbb{Q}[s] = \langle\ s^3 - 36s^2 + 288s\ \rangle = \langle\ s(s-12)(s-24)\ \rangle$$

を得た．つまり，可能な計画サイズは $s = 12$ のみである．この計画サイズを固定して直交計画を求めたところ，解は 44 個あり，以下の 3 つの同値類に分類された．

- Type (a): 2 relations.

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}x_1x_2x_3$$
$$12 - 3z_{123(111)},$$

- Type (b): 6 relations.

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}x_1x_2x_3 - \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4 - \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4^2$$
$$12 - z_{123(111)} - z_{1234(1112)},$$

- Type (c): 36 relations.

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}x_1x_2x_3 - \frac{1}{2}x_1x_3x_4 - \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4^2$$
$$12 - z_{123(111)} + z_{134(111)} + 2z_{134(112)} + z_{1234(1111)} + z_{1234(1112)},$$

Type(a)

x_1	x_2	x_3	x_4
1	1	1	−1
1	1	1	0
1	1	1	1
1	−1	−1	−1
1	−1	−1	0
1	−1	−1	1
−1	1	−1	−1
−1	1	−1	0
−1	1	−1	1
−1	−1	1	−1
−1	−1	1	0
−1	−1	1	1

Type(b)

x_1	x_2	x_3	x_4
1	1	1	−1
1	1	1	0
1	1	−1	1
1	−1	1	1
1	−1	−1	0
1	−1	−1	−1
−1	1	1	1
−1	1	−1	0
−1	1	−1	−1
−1	−1	1	−1
−1	−1	1	0
−1	−1	−1	1

Type(c)

x_1	x_2	x_3	x_4
1	1	1	−1
1	1	1	0
1	1	−1	1
1	−1	1	−1
1	−1	−1	0
1	−1	−1	1
−1	1	1	1
−1	1	−1	0
−1	1	−1	−1
−1	−1	1	1
−1	−1	1	0
−1	−1	−1	−1

図 2: $2^3 \times 3$ の一部実施計画のうち強度 2 の直交計画

上のリストのうち，Type (a) は $x_1x_2x_3 = 1$ で与えられるレギュラーな一部実施計画のクラスで，Type (b), Type (c) はレギュラーでない一部実施計画のクラスである．図 2 における両者の違いは第 4 列のみであり，(x_1, x_2, x_3) の水準が一意な行について，x_4 の水準がすべて等しいのが Type (b)，x_4 の水準が 2 通りあるのが Type (c) である．また，直交表 $OA(12, 3^1 2^4)$ から列を選んでできる計画は，すべて Type (c) に分類される．

4.2 $2^4 \times 3$ 計画の強度 3 の直交計画

同様に $2^4 \times 3$ 計画の一部実施計画を考える．このサイズでは，強度 2 の直交計画は計算困難であり，強度 3 の直交計画の列挙を行った．可能なサイズは $s = 24$ のみであり，以下の 3 つの同値類に分類される 56 個の解が得られた.

- Type (a): 2 relations.

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4$$
$$24 + 3z_{1234(1111)},$$

- Type (b): 6 relations.

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4 - \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4x_5 + \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4x_5^2$$
$$24 - z_{1234(1111)} + z_{12345(11111)} + z_{12345(11112)},$$

- Type (c): 48 relations.

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4 - \frac{1}{2}x_1x_2x_4x_5 + \frac{1}{2}x_1x_2x_3x_4x_5^2$$
$$24 - z_{1234(1111)} - z_{1245(1111)} - 2z_{1245(1112)} - z_{12345(11112)},$$

Type(a)

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
−1	−1	−1	−1	−1
−1	−1	−1	−1	0
−1	−1	−1	−1	1
−1	−1	1	1	−1
−1	−1	1	1	0
−1	−1	1	1	1
−1	1	−1	1	−1
−1	1	−1	1	0
−1	1	−1	1	1
−1	1	1	−1	−1
−1	1	1	−1	0
−1	1	1	−1	1
1	−1	−1	1	−1
1	−1	−1	1	0
1	−1	−1	1	1
1	−1	1	−1	−1
1	−1	1	−1	0
1	−1	1	−1	1
1	1	−1	−1	−1
1	1	−1	−1	0
1	1	−1	−1	1
1	1	1	1	−1
1	1	1	1	0
1	1	1	1	1

Type(b)

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
−1	−1	−1	−1	−1
−1	−1	−1	1	0
−1	−1	−1	1	1
−1	−1	1	−1	1
−1	−1	1	−1	0
−1	−1	1	1	−1
−1	1	−1	−1	1
−1	1	−1	−1	0
−1	1	−1	1	−1
−1	1	1	−1	−1
−1	1	1	1	0
−1	1	1	1	1
1	−1	−1	−1	1
1	−1	−1	−1	0
1	−1	−1	1	−1
1	−1	1	−1	−1
1	−1	1	1	0
1	−1	1	1	1
1	1	−1	−1	−1
1	1	−1	1	0
1	1	−1	1	1
1	1	1	−1	1
1	1	1	−1	0
1	1	1	1	−1

Type(c)

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
−1	−1	−1	−1	1
−1	−1	−1	1	0
−1	−1	−1	1	−1
−1	−1	1	−1	1
−1	−1	1	−1	0
−1	−1	1	1	−1
−1	1	−1	−1	−1
−1	1	−1	−1	0
−1	1	−1	1	1
−1	1	1	−1	−1
−1	1	1	1	0
−1	1	1	1	1
1	−1	−1	−1	−1
1	−1	−1	−1	0
1	−1	−1	1	1
1	−1	1	−1	−1
1	−1	1	1	0
1	−1	1	1	1
1	1	−1	−1	1
1	1	−1	1	0
1	1	−1	1	−1
1	1	1	−1	1
1	1	1	−1	0
1	1	1	1	−1

図 3: $2^4 \times 3$ の一部実施計画のうち強度 3 の直交計画

$2^3 \times 3$ 計画のときと似た結果となった.

参考文献

[1] S. Aoki (2018). Characterizations of indicator functions of fractional factorial designs. submitted. arXiv:1810.08417.

[2] S. W. Cheng and K. Q. Ye. (2004). Geometric isomorphism and minimum aberration for factorial designs with quantitative factors. *The Annals of Statistics*, **32**, 2168–2185.

[3] D. Cox, J. Little, and D. O'Shea. (2007). *Ideals, varieties, and algorithms, An introduction to computational algebraic geometry and commutative algebra*, Third ed., Springer-Verlag.

[4] R. Fontana, G. Pistone and M. P. Rogantin. (2000). Classification of two-level factorial fractions. *Journal of Statistical Planning and Inference*, **87**, 149–172.

[5] D. R. Grayson and M. E. Stillman. Macaulay2, a software system for research in algebraic geometry. Available at `http://www.math.uiuc.edu/Macaulay2/`.

[6] G. Pistone, E. Riccomagno and H. P. Wynn. (2001). *Algebraic Statistics: Computational Commutative Algebra in Statistics*. Chapman & Hall, London.

[7] G. Pistone and M. P. Rogantin. (2008). Indicator function and complex coding for mixed fractional factorial designs. *Journal of Statistical Planning and Inference*, **138**, 787–802.

[8] G. Pistone and H. P. Wynn. (1996). Generalised confounding with Gröbner bases. *Biometrika*, **83**, 653–666.

[9] C. F. Jeff Wu and M. S. Hamada. (2009). *Experiments: Planning, analysis, and parameter design optimization*. 2nd ed. Wiley Series in Probability and Statistics: Texts and References Section. John Wiley & Sons Inc., New York. A Wiley-Interscience Publication.

[10] K. Q. Ye. (2003). Indicator function and its application in two-level factorial designs. *Annals of Statistics*, **31**, 984–994.