

〈総合報告〉 Optimum Design について

竹 内 啓*

§ 0. は し が き

実験計画法は、Fisher⁷⁾によってその原理が確立されて以来、いろいろな型の配置や、その解析法が開発され研究されてきたが、それらの配置は、直観的な思いつきや、或いは解析計算の便宜の上から導入された場合が多く、その「良さ」についての吟味はあまりなされていなかった。しかし最近になって、この問題がようやく吟味されるようになり、いくつかの結果が得られている。しかしこれまでのところでは、まだその研究は散発的であり、実験計画の配置の理論の全体を充分カバーするには至っていない。この問題の困難なところは、現実において実験計画の目的とするところ、および実際の制約条件を、明確に数学的に定式化することが極めて難しく、また極度に単純化されたモデルにおいては、その結果が直観的に自明であるようなものしか得られないところにある。従って配置のよさを論ずる理論は、実際に使われている配置を合理化するためには役立つにしても、それにもとづいて適当な配置を探し出すことができるような指針としての役を果すには至っていない。このような点は今後の理論の課題として、重要な問題であると思われるが、特にこれまでこの問題を論ずる観点が、ともすれば抽象的な理論の側に傾きすぎる傾向があったので、むしろ実際の分野において求められている情報の性質をくわしく吟味することが必要であると思われる。

以下配置の optimality に関するこれまでの理論の大要をのべて、今後の研究のための参考としたい。

§ 1. 定 式 化

実験計画法においては、通常観測値に対して、次のような回帰モデルが想定される。

$$y = \sum_j x_j \theta_j + \varepsilon \quad (1)$$

ここに $\theta_j (j=1 \cdots p)$ は未知のパラメーターであって、実験の目的はこれらの全部或いは一部の値について、何等かの情報を得ることにある、 x_j は定数であって、その値は実験の方法、すなわち配置によって定められるものと仮定する、 ε は誤差であって、平均 0、分散 σ^2 とする。 ε については正規分布が仮定される場合が多いが、推定の問題だけを考える限りでは、正規性の仮定は必ずしも必要でない。

実験を n 回行うことが許されるにすれば、その結果 $y_i, i=1 \cdots n$ は

* 東京大学経済学部 昭和 36 年 7 月 10 日受理

$$y_i = \sum_j x_{ij}\theta_j + \varepsilon_i \quad (2)$$

と表わされる。ここで $E(\varepsilon_i \varepsilon_j) = 0 \quad i \neq j$ とする。これをベクトルと行列記号で

$$y = X\theta + \varepsilon \quad (3)$$

と表わすことにしよう。問題はこの係数行列 X を一定の制約条件の下でどのように定めるのが optimum かということである。

制約条件としては次のような形のものを仮定しよう。すなわち X の行ベクトル $x_i' (i=1 \cdots n)$ はそれぞれ各回の実験の条件に対応するが、これらのベクトルがすべて一定の p 次元空間の部分集合 \mathcal{X} 中の点でなければならないとする。問題は \mathcal{X} および n が与えられたとき、最適のベクトルの組 x_1, x_2, \dots, x_n をえらぶことである。

このような制約条件の定式化は必ずしも最も一般の場合を表わしているとはいえないことに注意を要する。すなわちここでは x_1, \dots, x_n がはそれぞれ互いに独立にとれるかのように想定されているが、実際には同一条件での実験回数には制限がするような場合が多い。

さてよく知られているように、 θ の推定量(最良線型不偏推定量、もし ε に正規性が仮定されているならば一様最小分散不偏推定量) $\hat{\beta}$ は正規方程式

$$(X'X)\hat{\beta} = X'y \quad (4)$$

の解として得られる。

$X'X$ が正則である場合には、 $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$ となり、かつ $\hat{\beta}$ の分散共分散行列は $(X'X)^{-1}$ になる。従って $\hat{\beta}$ の分散は $X'X$ だけと依存する。さらに ε に正規性を仮定すると、実は $y'y$ と(4)の右辺のベクトル $X'y$ とが完備充足統計量をなすことが示される。そうしてそれらの分布は行列 $X'X$ とパラメーター θ, σ^2 だけで定められるから、配置の性質を論ずるには、実は $X'X$ だけを考えればよく、もとの X 自体を考える必要はないことになる。

§ 2. 二つの配置の比較

二つの対称行列 A, B に対して、 $A-B$ が non negative definite のとき、 $A-B \geq 0$ または $A \geq B$ と表わすことにする(もし strictly positive definite なら $A > B$)。

二つの配置 X および X^* について、もし $(X'X)^{-1} \leq (X'^*X^*)^{-1}$ ならば X によって表わされる配置から得られる推定量の分散は、すべて X^* によって表わされる配置から得られる推定量の分散よりつねに小さい。従ってその場合には、前者の方が後者よりよいということができる。

ところで、一般に

$$[\text{補助定理}] \quad A \geq B > 0 \quad \text{ならば} \quad A^{-1} \leq B^{-1}$$

が成り立つから、 $(X'X)^{-1} \leq (X'^*X^*)^{-1}$ は $X'X \geq X'^*X^*$ と同値である。

更に $X'X$ が正則でない場合もふくめて考えると、その場合には、 θ は完全に estimable にはならないが、

$$(X'X)b = c$$

となるようなベクトル b, c が存在するとき、 $c'\theta$ は estimable でその分散は $b'(X'X)b\sigma^2$ で与

えられることも周知である。

〔補助定理〕 $A \geq B \geq 0$ ならば $Ab_1 = Bb_2$ のとき、 $b_1Ab_1 \leq b_2Bb_2$

によって、上記の比較の基準は $(X'X)$ が非正則な場合にも成立することがわかる。

以上は推定値の分散についてだけの比較であるが、正規性の仮定が成立するときは、実はより強い定理が成立する。それにはまず Blackwell²⁹⁾ による実験の比較の概念を導入しなければならない。

〔定義〕 二つの実験 e_1 および e_2 があって、それによって得られる観測値のベクトル y_1 および y_2 の分布はいずれもパラメータ θ に依存するものとする。もし y_1 および θ と無関係な確率変数 z から、 $y' = f(y_1, z)$ を定義して、 y' が y_2 とすべての θ の値に対して同一の分布に従うようにすることができるならば、 e_1 は e_2 に対して充分 sufficient であるという。

この概念の意味は次の定理によって明らかになる。すなわちパラメータ θ に関する任意の決定問題 (decision problem) に対して、

〔定理〕 e_1 が e_2 に対して充分であるならば、 e_2 における任意の決定函数 (decision function) $\delta_2(y_2)$ に対して、必ず e_1 における決定函数 $\delta_1(y_1)$ が対応して、すべての θ に対して

$$r(\delta_1, \theta) \leq r(\delta_2, \theta)$$

となる。ここに r は危険函数 risk function を表わす。

すなわち e_1 を用いるとき、 e_2 を用いるよりも一様に損失を小さくすることができる。さて

〔定理 1〕³¹⁾ 二つの実験 X_1, X_2 に対して、 $X_1'X_1 \geq X_2'X_2$ ならば、正規性の条件の下で、 X_1 を与える実験は X_2 を与える実験に対して充分である。

従って前者はどのような観点からしても (仮説検定の検出力等々) 前者は後者よりより多く、或いは少くとも同じ程度の情報を与えることになる。

従ってあらゆる可能な実験 X に対して、つねに $X^*X^* \geq X'X$ となるような実験 X^* が存在するならば、それはいかなる意味でも最良の配置を表わすと考えられよう。しかし不幸にしてこのような配置は一般には存在しない。

〔定理 2〕⁵⁾ $\tilde{X}^{29)} = (x_1, \dots, x_n)'$ $X = (x_1, \dots, x_n)'$ とする。もし $\tilde{x}_i = k_i x_i, i=1, \dots, n, |k_i| \geq 1$ ならば、 $\tilde{X}'\tilde{X} \geq X'X$

〔証明〕 $X'X = \sum x_i x_i'$ $\tilde{X}'\tilde{X} = \sum \tilde{x}_i \tilde{x}_i' = \sum k_i^2 x_i x_i'$ $\tilde{X}'\tilde{X} - X'X = \sum (k_i^2 - 1) x_i x_i' \geq 0$

この定理によって、個々の観測値に対応するベクトル x_i はなるべく長さが長くなるようにとることがよいことがわかる。

§ 3. 最適性の基準——秤量問題

どのような観点からしても最良と見なされるような配置が存在するのは、例外的な場合に限られるから、改めて何らかの基準を導入して最適な配置が一つ定められるようにしよう。

まず θ の値が完全に推定されることを要求される場合を考えよう。

最適性の基準としては次のようなものが考えられる。

- I. β の一般化分散を最小にする
- II. $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)$ とするとき, $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ の分散の平均を最小にする。
- III. $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ の分散のうち最大なものを最小にする
- IV. β_i の一次結合 $b'\beta$ (ただし $b'b=1$ とする)

の分散の最大値を最小にする。

このことは $D=X'X$, また D の固有根を $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ とするとき,

- I. $|D| = \prod \lambda_i$ を最大にする
- II. $\sum \lambda_i^{-1}$ を最小にする
- IV. $\min \lambda_i$ を最大にする

ことと同値である。

さてベクトル x の取り得る範囲 x に対して $\rho = \sup_{x \in X} \|x\|$ とおく

[定理 3] もし $\|x_i^*\| = \rho$ $i=1, \dots, n$ で, かつ $X^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)'$ とするとき $X^{*'}X^* = \rho^2 I$ ならば X^* は上記の I, II, III, IV の意味で最適であり, かつ最適なものにはこれに限られる。

[証明] 任意の配置 X について, $t_r X'X = t_r \sum x_i x_i' = \sum x_i' x_i \leq n\rho^2$. $t_r D = t_r X'X = \pi$ とおくと, $\sum \lambda_i = \pi$, かつ $\lambda_i > 0$ だから

- I. $\prod \lambda_i \leq (\pi/p)^p$
- II. $\sum \lambda_i^{-1} \geq p^2/\pi$
- III. $t_r D^{-1} = \sum \lambda_i^{-1} \geq p^2/\pi$, D^{-1} の対角要素のうち最大なものは $t_r D^{-1}/p$ より小さくない。
- IV. $\min \lambda_i \leq \pi/p$

いずれも等号は $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_p$ のとき, すなわち $X'X$ が対角行列の定数倍になるときに限られる(証終)。

この定理の適用される場合として, Hotelling の秤量問題¹¹⁾があげられる。

[定理 4]¹⁷⁾²⁴⁾ $p=n=4m$, $x_{ij} = \pm 1, 0$ の場合, もし $x_{ij}^* = \pm 1$, $X^* = \{x_{ij}\}$, $X^{*'}X^* = nI$ となるような配置 X^* が存在すればそれは最適である。

このような配置を表わす行列 X^* は Hadamard 行列と呼ばれている。 $n \leq 100$ の範囲では $n=92$ を除いて Hadamard 行列を作り得ることが確かめられている²⁷⁾。Hadamard 行列から, $+1$ ばかりからなる 1 列を除いた $n \times (n-1)$ の行列は, 水準数 2, 強さ 2 の直交配列表をなしている。(ただし直交配列表では, 通常 $+1, -1$ ではなく, $0, 1$ 或いは $1, 2$ が用いられるが) $n=2^q$ の場合, および $n=r+1$ r =素数の場合は, Hadamard 行列を作ることは容易である。 $n=2^q$ の場合は, 後にのべる直交配列表に, $+1$ のみからなる一列をつけ加えることによって作られるので, 後者の場合をのべよう。

まず第 1 行と第 1 列に全部 $+1$ を並べる。残りのところには第 i 行第 j 列に $\binom{i-j}{r} \binom{q}{r}$ は

平方剰余記号を表わす) に等しい値をならべればよい。ただし $\left(\frac{0}{r}\right) = -1$ としておく。

$n=12=11+1$ の場合について考えると、 $\left(\frac{x}{p}\right) = +1$ となるのは、 $x=1, 3, 4, 5, 9$ の場合であるから、結局次のような Hadamard 行列が得られる。

+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
+	-	-	+	-	-	-	+	+	+	-	+
+	+	-	-	+	-	-	-	+	+	+	-
+	-	+	-	-	+	-	-	-	+	+	+
+	+	-	+	-	-	+	-	-	-	+	+
+	+	+	-	+	-	-	+	-	-	-	+
+	+	+	+	-	+	-	-	+	-	-	-
+	-	+	+	+	-	+	-	-	+	-	-
+	-	-	+	+	+	-	+	-	-	+	-
+	-	-	+	+	+	+	-	+	-	-	+
+	+	-	-	-	+	+	+	-	+	-	-
+	-	+	-	-	-	+	+	+	-	+	-

$p=n$ が偶数或いは半偶数の場合には、ちょうど上記の定理の二つの条件を満すような配置は存在しない。

[定理 5] $p=n=4m+2$ のとき、 $X^*X^*=(n-1)I$

$p=n=2m+1$ のとき、 $X^*X^*=(n-1)I+E$

となるような配置 X^* は IV の意味で最適である。

ここに E は 1 のみを並べた正方行列である。

[証明] $X'X=nI$ になるような X が存在しない場合。 $D=X'X$ の固有限のうち最小のものは $n-1$ を越えないことを証明すればよい。もし $\lambda_i > n-1$ $i=1, 2, \dots, n$ ならば、 $D-(n-1)I > 0$ でなければならない。しかるに D の要素はすべて整数、かつ $D \leq np$ だから、行列 $D-(n-1)I$ の対角要素はすべて 1 を越えないか、或いは少くとも 1 つ 0 になる。もし対角要素に 0 のものが存在すれば positive definite でないことは明らか。またすべてが 1 であるならば、非対角要素に 0 でないものが存在するから、やはり positive definite でないことになる(証終)。

実際にこのような形の配置が存在することは、次のような例で確かめられる²⁸⁾。

$n=6$ の場合

0	1	1	1	1	1
1	0	1	-1	-1	1
1	1	0	1	-1	-1
1	-1	1	0	1	-1

$$\begin{matrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \end{matrix}$$

$n=5$ の場合

$$\begin{matrix} -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \end{matrix}$$

しかしこのような場合に I, II, III の意味での optimum な配置がどうなるかははっきりしていない。また一般に異なる意味での optimum な配置は必ずしも一致するとは限らない。

§ 4. ばねばかりによる秤量

次に上と似たような問題で, $x_{ij}=1, 0$ の場合を考えよう。これは天秤のように両側にのせることは許されず, はかりにどれとどれをのせるかをえらぶことができるだけである。

いま

$$D = X'X = \begin{bmatrix} r_1 & l_{12} & \dots & l_p \\ l_{21} & r_2 & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ l_{p1} & \dots & \dots & r_p \end{bmatrix}$$

と表わし, $\bar{r} = \frac{1}{p} \sum r_i, \bar{l} = \frac{1}{p(p-1)} \sum l_{ij}$ と定義すれば

[補助定理] $\min \lambda_i \leq \bar{r} - \bar{l}$
 $\max \lambda_i \geq \bar{r} + (p-1)\bar{l}$

証明は, $D - (\bar{r} - \bar{l})I$, および $\{\bar{r} + (p-1)\bar{l}\}I - D$ が strictly positive definite にはなり得ないことを示せばよい。

[補助定理] $|D| \leq (\bar{r} - \bar{l})^{p-1} \{\bar{r} + (p-1)\bar{l}\}$

これから次の定理が得られる。

[定理 6]¹⁾ $p=2m$ のとき, $r_i \equiv \bar{r} = n/2$,

$l_{ij} \equiv \bar{l} = n(m-2)/4(m-1)$ となるような配置 X が存在すれば, それは IV の意味で最適である。

また $p=2m+1$ のときは, $r_i \equiv \bar{r} = p(p \pm 1)/2n, l_{ij} \equiv \bar{l} = (p \pm 1)(\bar{r} - 1)/2(p-1)$ となるような配置 X が IV の意味で最適である。

ここで一回に同時にはかりにのせるものが, 一つのブロックをなすとすれば, 上記のような配置は結局, $v=p, b=n, r=\bar{r}, k=v\bar{r}/b, \lambda=\bar{l}$ の BIB 配置をなしていることを意味している。

よりくわしくいえば, p が偶数のときは $k=p/2, p$ が奇数のときは $k=(p \pm 1)/2$ の BIB 配置をなすものが IV の意味で最適である。

$p=2m$ の場合には、 $n=4m-2$ の場合、上記のような BIB が m の値が小さい範囲では大い存在する。特に $4m \times 4m$ の Hadamard 行列が存在する場合には、これから次のようにして上記のような配置に表わす $n \times p$ の行列 X が作られる。すなわち 1 行目と 2 行目を除き、次に残りの $4m-2$ 行の行列から、2 行目のところに $-$ があつた列だけをえらび出す。そうして得られた $(4m-2) \times 2$ の行列で、 -1 を 0 に書きかえればよい。例えば先に得られた 12×12 の Hadamard 行列の 2-12 行から、2, 3, 5, 6, 11 列をえらんで、次のような配置が作られる。

$$\begin{array}{cccccc} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}$$

また $p=4m-1$ のときは $4m \times 4m$ の Hadamard 行列から $n=4m-1$, $k=2m-1$ の BIB 配置が、その第 1 行と第 1 列を除き、 -1 を 0 にかえることによって、 $k=2m$ の BIB 配置は -1 を $+1$ に $+1$ を 0 にかえることによって得られる。

〔定理 7〕¹⁾ $p=2m+1$ のとき、 $k=m+1$ の BIB 配置をなす X は I の意味で最適である。

$p=2m$ のときには、 I の意味で最適なものがあるかどうかは明確でない。はっきり最適とされるものは n がかなり大きい場合に始めて存在することが示される。

§ 5. nuisance parameter が存在する場合——ブロック実験の場合

次に θ の全部が推定すべきものとされるのではなく、興味の対象となるのは θ の一部 θ_0 である場合を考えよう。すなわち $\theta' = (\theta_0', \theta_1')$ であつて θ_1 は nuisance parameter である場合である。その場合 X の方もこの分割に対応して $X = (X_0, X_1)$ と分割すれば

$$y = X_0\theta_0 + X_1\theta_1 + \varepsilon$$

と表わされる。そうして θ_0 の推定量 $\hat{\beta}_0$ は、

$$\{X_0'X_0 - X_0'X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_0\}\hat{\beta}_0 = \{X_0' - X_0'X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1\}y \quad (1)$$

から得られる。ただしここで $X_1'X_1$ が正則なことが仮定されているが、 $X_1'X_1$ が非正則の場合にも、 θ_1 を適当に定義しなおして、パラメータの次元を変えれば正則にできる。或いはそれが不可能ならば、 θ_0 と θ_1 が交絡してしまうことになる。ここでは交絡する場合は除いて考える。

そうすると、(1)の左辺の係数行列は、分散行列を決定するものとして、先の $X'X$ と同じ役

割を果すことになる。それを改めて D とおく。

さて一般にこのような場合には D は正則でないのが普通である。 θ_0 の次元が q である場合に推定すべきものはその対比 contrast すなわち $c'\theta_0 (c'1=0)$ という形の量である場合が最も多い。すべての対比が推定可能であることを要求されるならば、 $\text{rank } D=q-1$ でなければならない。そうしてこの場合最適な配置の満たす条件としては、次のようなものが考えられる。

V. D の固有根を $\lambda_0=0, \lambda_1, \dots, \lambda_{q-1}$ とするとき $\prod_{i=1}^{q-1} \lambda_i$ を最大にする

VI. $\min_{i \neq 0} \lambda_i$ を最大にする。これはあらゆる対比 $c'\theta_0$ の推定量(ただし $c'e=1$ としておく)の分散の最大値を最小にすることに等しい。

VII. $\theta_0=(\theta_1 \dots \theta_v)$ とするとき、 $\theta_i - \theta_j, i, j=1, 2, \dots, v$ の推定値の分散の中で、最大なものを最小にする。

このような形の問題として定式化されるものは、ブロック実験である。すなわち $\theta_1 \dots \theta_v$ を品種効果を表わすパラメーター、 $\theta_{v+1} \dots \theta_{v+b}$ をブロック効果を表わすパラメーターとすれば、上記の行列は次のような性質を持つ。(一般平均はブロック効果と一諸にしておく)、まず第 i 品種のくり返えて数を r_i 、ブロックの大きさを k (すべて等しいと仮定する)とすると、

$$X_0'X_0 = \begin{bmatrix} r_1 & & & \\ & r_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & r_v \end{bmatrix} \quad X_1'X_1 = \begin{bmatrix} k & & \\ & k & \\ & & \dots \\ & & & k \end{bmatrix}$$

また $X_0'X_1 = \{n_{ij}\} = N$ は incidence 行列、すなわち $n_{ij}=j$ ブロックにおける i 品種のくり返し数、となっている。

従って $D = R - \frac{1}{k} NN'$ となる。ここに R は対角行列である。

問題は v, b, k を与えた上で、上記の V または VI、または VII の意味で最適な配置を求めることである。

まず $D1=1'D=0$ となることを注意しておこう。次に $k < v$ と仮定する。そのとき、

[定理 8]¹²⁾¹⁹⁾²¹⁾²⁶⁾ もし v, b, k をパラメーターとする BIB 配置が存在するならば、それは V, VI, VII の意味で最適である。

[証明] V, VI だけを証明しておこう。

まず $\sum \lambda_i = t_i D \leq \left(1 - \frac{1}{k}\right) \sum r_i = b(k-1)$ 等号はすべての $n_{ij}=1, 0$ の場合。従って

$$\lambda_i \equiv b(k-1)/(v-1)$$

ならば V, VI の意味で最適になることがわかる。BIB 配置がこの条件を満たすことは明らかである。またこのことから、もし BIB 配置が存在するならば、最適なものも BIB のみであることも明らかである。

BIB 配置が存在するための必要条件の一つは明らかに、会合数 $\lambda = \sum_k n_{ik}n_{jk} = r(k-1)/(v-1)$ が整数になることであるがそれは勿論充分条件ではない。BIB 配置の作り方にはいろいろな方法があるが、ここではそれにくわしくふれる余地がないので、差集合(difference set)による方法だけをのべておこう²³⁾。

まず v を法(mod)にする整数の剰余類を考える。今、大きさの整数の組が l 個あったとき、

$$(d_{11}, d_{12}, \dots, d_{1k}) (d_{21}, d_{22}, \dots, d_{2k}) \dots (d_{r1}, \dots, d_{rk})$$

$$\text{もし} \quad d_{ij} - d_{i'j'} \quad i=1, \dots, l \\ j, j'=1, \dots, k$$

のような差をすべて作ったとき、 v を法として $1, 2, \dots, v-1$ がすべて λ 回ずつ表われるならば、これを差集合と呼ぶ。

もし差集合が作れたならば、それから、

$$(d_{i1}+c, d_{i2}+c, \dots, d_{ik}+c) \quad i=k, \dots, l \\ c=0, 1, \dots, v-1$$

といろんな形の数の組に対応する品種の組み合わせたブロックとすれば、 $v, k, b=lv, \lambda=\lambda$ の BIB 配置が構造される。例えば $v=7$ のとき

$$(0, 1, 3)$$

は差集合をなす。なぜなら

$$0-1 \equiv 6, 0-3 \equiv 4, 1-3 \equiv 5 \\ 1-0 \equiv 1, 3-0 \equiv 3, 3-1 \equiv 2 \pmod{7}$$

でちょうど 1 から 6 までが 1 回ずつ表われるからである。従ってこれから、 $v=b=7, k=r=3, \lambda=1$ の BIB 配置が次のように構成される。

$$(0, 1, 3) \quad (1, 2, 4) \quad (2, 3, 5) \quad (3, 4, 6) \\ (4, 5, 0) \quad (5, 6, 1) \quad (6, 0, 2)$$

差集合の作り方にもいろいろあるが、詳細は省略する。

BIB 配置が存在しない場合に関しては次の定理が成立つ。

[定理 9]³⁰⁾ もし $\lambda_2 = \lambda_1 + 1$ の GD PBIB が存在するならば、それは VI、および VII の意味で最適である。

証明は省略する。ここに $\lambda_2 = \lambda_1 + 1$ の GD(group divisible) PBIB というのは、 $v = m \times n$ 品種が m 個ずつの n グループにわかれ、同じグループの中では会合数が λ 異なるグループの間では λ_2 に等しくなっているような配置をいう。

$\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 1$ となるような GD PBIB が適交配列表から簡単に作られることを示しておこう。今水準数 $r, N \times n$ (ただし $N = r^2$) の直交配列表が存在したとき、その n 列を n グループに、各列の各水準をグループ内の各品種に、 N 行を各ブロックに対応させるとこのような PBIB が作られる。例えば $r=3$ として、

直交配列表

1	1	1	1
1	2	2	2
1	3	3	3
2	1	2	3
2	2	3	1
2	3	1	2
3	1	3	2
3	2	1	3
3	3	2	1

から, $v=3 \times 4$, $k=4$, $b=9$, $r=3$, $\lambda_1=0$, $\lambda_2=1$ の PBIB₂配置が次のように作られる.

(1, 4, 7, 10)	(1, 5, 8, 11)	(1, 6, 9, 12)
(2, 4, 8, 12)	(2, 5, 9, 10)	(2, 6, 7, 11)
(3, 4, 9, 11)	(3, 5, 7, 12)	(3, 6, 8, 10)

§ 6. 最適性の基準の吟味

最適性の基準をこれまで, もっぱら推定量の分散の点から考えてきた. しかし別の観点から問題を考えることもできる. 例えば, 仮説 $\theta_0=0$ を F -検定によって検定するときの検出力を問題にするならば, 基準 VI は, $\theta_0'\theta_0=c$ という球面の上での検出力の下限を最大にすることに等しく, また V は検出力を表わす曲面の Gauß 曲率を最大にすることと同値である²⁾. そうしてこのような観点からすれば, F -検定自体が $\theta_0'\theta_0=c$ の上での検出力の下限を最大にするような性質のものであるから, 基準 VI を考えることは自然であるということになる. もしある特定の方向の検出力を大きくしたいということであれば, 他の検定方式を考えなければならない(例えば Tukey のステューデント化されたレンジによるなど). そうして最適な配置というものは, そのような検定の検出力を最大にするという観点から考えねばならない.

最適性の基準を吟味する場合のもう一つの問題は, randomize された配置をどのように考えるかということである. すなわち配置をランダムに定める, すなわち X を何等かの機構によって確率的に定める場合である¹²⁾¹³⁾³²⁾.

この場合, 推定量の分散共分散は, X を与えたときの分散共分散の平均となる.

[定理 10] もし定理 3 の条件を満たすような X が存在するならば, それは randomize された配置の中でも最適である.

[証明] $X'X=D$ とおけば, β の分散共分散行列は $E(D^{-1})\sigma^2$ となる. ところで, つねに $t_r D^{-1} \geq p^2/\pi$ だから, $t_r E(D^{-1}) \geq p^2/\pi$ このことから X^* は randomize された配置の間で考えても, I, II, III, IV の意味で最適であることがわかる.

〔定理 11〕 BIB 配置は randomize された配置の中でも最適である。

従って推定量の分散で考える限り問題は生じない。しかし仮説検定の問題として検出力について考えると、新たな問題が生ずる。

まずこの場合、解析法自体に 2 通り考えられること、すなわち、 X を確率的に定めた後は、 X を与えられたものとして条件付に普通の解析法を適用する場合、および解析にあたって X の分布を考慮に入れる場合の 2 通りがあることに注意しよう²²⁾。ここでは前者の場合について考える。

仮説 $\theta = \theta^*$ を検定するとき、対立仮説 $\theta = \theta^* + \Delta\theta$ のもとでの F 検定の検出力は、自由度が一定ならば、非心パラメーター $\phi = (\Delta\theta)' X' X (\Delta\theta)$ にのみ依存することはよく知られている。従って $\Delta\theta$ が小さいときは、その検出力は、

$$\alpha + b\phi + 0(\|\Delta\theta\|^2) \quad (1)$$

となる。

〔定理 12〕 X がある一定の確率分布は従って分布するとし、 $X_0 = E(X)$ とおく。そのとき、 X を用いた場合の検定の F 検出力の平均の Gauß 曲率は、 X_0 を用いた場合の F 検出力の平均の曲率より大きい。よりくわしくいえば $\|\Delta\theta\|$ が小さいときの局所的検出力は、前者の方が後者よりつねに大きい。

〔証明〕 $X_0' X_0$ が正則な場合だけを考える(非正則な場合も同じ)。

後者の場合の局所的検出力は、

$$\alpha + b(\Delta\theta)' X_0' X_0 (\Delta\theta) + 0(\|\Delta\theta\|^2) \quad (2)$$

に等しい。また前者の場合、 $X' X$ が正則ならば局所的検出力は、(1)式で与えられ、もし $X' X$ が非正則ならば、自由度が変わるが、その場合 F 分布の分子の自由度が減り、分母の自由度が増すから、検出力は(1)式より大きくなる。いづれにしてもそれは(2)より小さくならない。従って前者の場合検出力の平均は

$$\alpha + bE(\phi) + 0(\|\Delta\theta\|^2) = \alpha + b(\Delta\theta)' E(X' X) (\Delta\theta) + 0(\|\Delta\theta\|^2) \quad (3)$$

より小さくなることはない。しかるに

$$E(X' X) - X_0' X_0 = E(X - X_0)' (X - X_0) \geq 0$$

だから $\|\Delta\theta\|$ が小さいとき、(3)は(2)より大きくなる。

従って、局所的検出力を考える限りでは、なるべく非対称的な配置を対称的に確率化する方が、対称的な配置をとるよりよいということになる。

更に議論を細かく進めると、 v, k, b, r をパラメーターとする BIB をとる代りに、 v 品種の中から k 個だけをランダムにえらび、それを全部のブロックにいわれると、局所的検出力がよくなることが示されている²¹⁾。

しかしこのような一見奇妙な結論は、局所的検出力を基準として考えたためであって、仮説から遠いところでは、明らかに対称的な配置の方がよい。なぜなら仮説から無限に離れたところで

は、対称的な配置では検出力が1になるが、randomize された場合には必ずしも1にならないからである。

次に第二の解析法、すなわち解析の段階でも X の分布に考慮に入れて検定方式を定めるとすると、局所的検出力については一戸よい結果が得られる。しかしそれについてはまだあまりよくわかっていない。

§ 7. 直交配列の最適性

§5の結果はいくつかの方向に拡張することができる。まず $v > k$ の仮定は本質的な必要でないことは容易にわかる。

次に2方制約の場合、すなわち $k \times l$ の矩形の団場に品種を入れる場合を考えよう。第 i 品種が第 t も行に入れられる回数を n_{it} 、第 s 列に入れられる回数を m_{is} とし、 $r_i = \sum_t n_{it} = \sum_s m_{is}$

$$\lambda_{ij} = \sum_t n_{it} n_{jt}, \quad \lambda'_{ij} = \sum_s m_{is} m_{js}$$

とおく。そうすると、品種効果に対応する行列 $D = \{d_{ij}\}$ の元は

$$d_{ij} = \delta_{ij} r_i - \lambda_{ij} / e - \lambda'_{ij} / k + r_i r_j / kl$$

と表わされる。(ただし $\delta_{ij} = 1, i=j; \delta_{ij} = 0, i \neq j; k \leq v$ の場合、

[定理 13]¹⁴⁾²²⁾ $l/v = f$ が整数ならば $m_{is} = 0, 1$.

$$n_{it} \equiv f, \quad \text{かつ} \quad \lambda_{ij}' \equiv \lambda$$

となるような配置が V, VI, VII の意味で最適である。

[証明] まず t, D が m_{is}, n_{it} が上記の条件を満たすときに最大になることがわかる。次に $\lambda_{ij}' \equiv \lambda$ ならば D のすべての固有根が等しくなって最適性が証明される。

$k=l=v$ ならば、このような条件を満たし配置はラテン方格である。それは直交配列の一種と考えることができる。 $f=1$ (すなわち $l=v$)で $k < v$ のときは Youden 方格である。Youden 方格は $v=b$ の SBIB から作ることができる。例えば先にあげた $v=b=7, k=r=3, \lambda=1$ の配置から Youden 方格ができることは容易に確かめられる。 $f > 1$ の場合は Shrikhande 方格と呼ばれる。それは $v, b=fv, k, r=fk, \lambda$ の BIB から作ることができる。例えば、 $v=9$ のとき、 4×18 の Shrikhande 方格が存在する。

1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	2	3	4	5	6	7	8	8	9
2	3	4	5	6	7	8	9	1	4	5	6	7	8	9	1	1	2	3
3	4	5	6	7	8	9	1	2	5	6	7	8	9	1	2	2	3	4
5	6	7	8	9	1	2	3	4	8	9	1	2	3	4	5	5	6	7

次に、多数の因子が存在する場合を考えよう。ある特定の因子について分析する場合、もし因子間の交互作用を無視することが許されるならば、他の因子の効果はすべて nuisance parameter と考えることができるから、§5の考え方が適用できる。この場合行列 X の元を定義するとき、 i 水準からなる第 i 因子の第 k 水準が j 番目の実験において用いられているならば、それに対応

する元を $1 - \frac{1}{l_i}$ (1でなく) そうでなければ $-\frac{1}{l_i}$ とおくのが便利である。そうすると因子効果の推定に関しては、1, 0とおいた場合と同一の結果が得られることが確かめられる。そこで推定量の分散を決定する行列は、このように定義した X について

$$\begin{bmatrix} X_0'X_0, & X_0'X_1 \\ X_1'X_0, & X_1'X_1 \end{bmatrix}$$

という形になる。ところで β_0 の分散を決定する行列 D に対して、

[補助定理] $D \leq X_0'X_0$. ただし、もしての因子の各水準が、他のすべての因子についてそのすべての水準と等しい回数ずつ同時に実験されるならば、等号が成立する。

このことから次の定理が容易に示される。

[定理 14]²⁵⁾ もし交互作用が存在しないならば、直交配列は、すべての因子について最適性の条件 V, VI, VII を満す。

直交配列表の作り方はいろいろあり得るが、普通には因子の水準数が等しく、しかもそれが奇数、あるいは素数の巾である場合が用いられる。 p が素数のとき、 p 水準で、 $p^k \times (p^k - 1) / (p - 1)$ の直交配列表を作ることは容易である。例えば $p=3$ $k=3$ の場合を考えると、まづ3次元射影幾何 $PG(3, 3)$ の点 $(1, 0, 0)(0, 1, 0)(0, 0, 1)(1, 1, 0)(1, 0, 1)(0, 1, 1)(1, 2, 0)(1, 0, 2)(0, 1, 2)(1, 1, 1)(1, 1, 2)(1, 2, 1)(2, 1, 1)$ を 13 列に対応させる。次に各座標に対応して互いに直交する 27 個の数字からなる 3 つの列を定め、各列には、それぞれの座標に対応する列に座標の値を乗じて加えたものをかけばよい。(勿論 mod 3 の剰余類で考えて) 例えば

```

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 1 1 0 2 2 1 2 1 1
0 0 2 0 2 2 0 1 1 2 1 2 2
0 1 0 1 0 1 2 0 1 1 1 2 1
0 1 1 1 1 2 2 2 0 2 0 0 2
0 1 2 1 2 0 2 1 2 0 2 1 0
0 2 0 2 0 2 1 0 2 2 2 1 2
0 2 1 2 1 0 1 2 1 0 1 2 0
0 2 2 2 2 1 1 1 0 1 0 0 1
1 0 0 1 1 0 1 1 0 1 1 1 2
1 0 1 1 2 1 1 0 2 2 0 2 0
1 0 2 1 0 2 1 2 1 0 2 0 1
1 1 0 2 1 1 0 1 1 2 2 0 0
1 1 1 2 2 2 0 0 0 0 1 1 1
1 1 2 2 0 0 0 2 2 1 0 2 2
1 2 0 0 1 2 2 1 2 0 0 2 1

```

1	2	1	0	2	0	2	0	1	1	2	0	2
1	2	2	0	0	1	2	2	0	2	1	1	0
2	0	0	2	2	0	2	2	0	2	2	2	1
2	0	1	2	0	1	2	1	2	0	1	0	2
2	0	2	2	1	2	2	0	1	1	0	1	0
2	1	0	0	2	1	1	2	1	0	0	1	2
2	1	1	0	0	2	1	1	0	1	2	2	0
2	1	2	0	1	0	1	0	2	2	1	0	1
2	2	0	1	2	2	0	2	2	1	1	0	0
2	2	1	1	0	0	0	1	1	2	0	1	1
2	2	2	1	1	1	0	0	0	0	2	2	2

(1, 0, 0)(0, 1, 0)(0, 0, 1)(1, 1, 0)(1, 0, 1)(0, 1, 1)(1, 2, 0)
 (1, 0, 2)(0, 1, 2)(1, 1, 1)(1, 1, 2)(1, 2, 1)(2, 1, 1)

§ 8. 多項式回帰の場合

次に X の形が特定の場合として、多項式回帰を考えよう。まず一変数の場合、すなわち

$$y_i = \alpha_0 + \alpha_1 x_i + \alpha_2 x_i^2 + \cdots + \alpha_p x_i^p + \varepsilon$$

となる場合を想定する。問題は $a \leq x \leq b$ ($-1 \leq x \leq 1$ とし一般性を失わない) の範囲に n 個の点 x_1, x_2, \dots, x_n えらんで、なるべくこの回帰が精度よく推定されるようにすることである。これに関連して次の定理が有効である。

〔定理 15〕⁸⁾ $n \geq p+1$ のとき、任意の x_1, \dots, x_n の組に対して、それと推定値の分散共分散を全く等しくするような組 x'_1, \dots, x'_n で、互いに異なる値をとるものが $p+1$ 個しかないようなものが必ず存在する。

従って問題は $p+1$ 個の点をどう定めるか、また n 個をそれらの点にどう配分するかということになる。これに関連して次の二つの最適性の基準を定める。

I. 係数 $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_p$ の推定量の一般化分散を最小する。

II. y の期待値の推定量 $E(y) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \cdots + \alpha_p x^p$ の分散の $-1 \leq x \leq 1$ における上限を最小にする。

定理 15⁹⁾¹⁰⁾ $L_p(x)$ を p 次の Legendre 多項式とする。 $x = \pm 1$ 、および $L_p'(x) = 0$ の根に等しい $p-1$ 個の点で同じ回数ずつくり返す実験は、上記の I および II の意味で最適である。

証明はかなり解析的な計算を必要とするので省略する。

例えば $p=3$ とすると、 $L_3(x) = c(5x^3 - 3x)$ だから $x = \pm 1$ 、および $L_3'(x) = 3c(5x^2 - 1) = 0$ の根、すなわち $x = \pm 1/\sqrt{5}$ の 4 点に同じ回数の実験と割りつけるのが最適ということになる。

この問題をもう少し一般化すると次のようになる。 $f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)$ を x の連続関数と

して,

$$y = \alpha_1 f_1(x) + \cdots + \alpha_k f_k(x) + \varepsilon$$

と表わされるものとする。そうして $\alpha_1, \cdots, \alpha_k$ が推定すべきパラメータである。そのとき,

〔補助定理〕 α_k の分散は次の値の逆数に比例する。

$$\min_i \sum_r \{f_k(x_r) - \sum_{j \neq k} c_j f_j(x_r)\}^2$$

ここに x_1, \cdots, x_n は n 回の実験に対応する点である。このことを用いて、次のことが示される。

〔定理 16〕¹⁴⁾ もし c_1^*, \cdots, c_{k-1}^* がチェビシエフ系をなし、すべての x_r^* がチェビシエフ点に属しそうして、

$$\sum_r f_k(x_r^*) f_i(x_r^*) = 0, \quad i=1, 2, \cdots, k-1$$

ならば、このような配置は α_k の分散を最小にする。ここに c_1^*, \cdots, c_{k-1}^* がチェビシエフ系をなすとは、 $\min_i \max_x |f_k(x) - \sum c_j f_j(x)| = \max_x |f_k(x) - \sum c_j^* f_j(x)|$ となることであり、かつ x_r がチェビシエフ点であるとは、

$$|f_k(x_r^*) - \sum c_j^* f_j(x_r^*)| = \max_x |f_k(x) - \sum c_j^*(x)| = m$$

となることである。

〔説明〕 任意の x_1, x_2, \cdots, x_n に対し、

$$\begin{aligned} \min_i \sum_r [f_k(x_r^*) - \sum_j c_j f_j(x_r^*)]^2 &= \sum_r [f_k(x_r^*) - \sum_j c_j f_j^*(x_r^*)]^2 \\ &= nm^2 \geq \sum_r [f_k(x_r) - \sum_j c_j^* f_j(x_r)]^2 \\ &\geq \min_i \sum_r [f_k(x_r) - \sum_j c_j f_j(x_r)]^2 \end{aligned}$$

補助定理から $\hat{\alpha}_k$ の分散が最小になることが示される。

$f_i(x) = x^{i-1}$ のとき、 c_j^* はチェビシエフ多項式の係数として与えられる。そうしてチェビシエフ点は $\cos j\pi/(k-1)$, $0 \leq j \leq k-1$ という形で表わされる k 個の点からなり、そうして定理の条件を満たす点の取り方は、 $-1, 1$ に 1 その他の点に 2 の割合で割当てることとなる。

例えば、 $y = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \alpha_3 x^3 + \varepsilon$

のとき $\hat{\alpha}_3$ の分散を最小にするには、3 次のチェビシエフ多項式 $x^3 - \frac{3}{4}x$ から、チェビシエフ点は ± 1 , および $\pm \frac{1}{2}$ であることがわかるから、 $x = \pm 1$ にそれぞれ 1 回、 $\pm \frac{1}{2}$ にそれぞれ 2 回割る当てればよい。

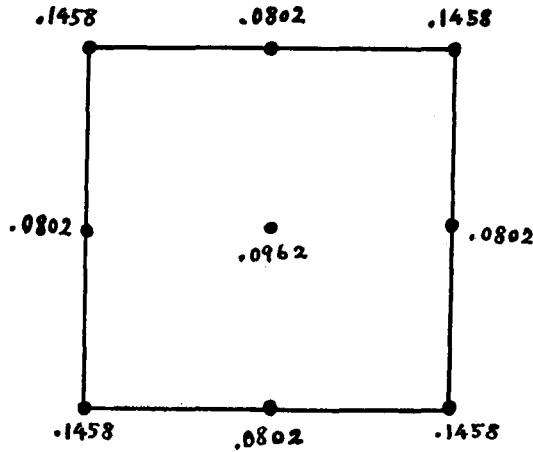
ところで x は 1 次元の量でなくても、2 次元以上のベクトルであってもよい。また f も連続関数であればよい。その場合上記の I と II にあたる条件を定式化することは簡単であろう。ところで

〔定理 17〕¹⁷⁾ このように定義された最適性の定義 I および II は同値である。

ことが成立している。

一般にこのような意味での最適な配置を見出すことはかなり困難である。

例えば、 x が 2 次元の正方形の範囲に入るベクトルで、回帰式が 2 次式で与えられるとき、最適な配置は、次のような 9 点にそれぞれ数字で示した比率で実験を割りつけることになる。



文 献

- 1) Banerjee, K. S. "Some contributions to Hotelling's weighing designs," Sankhya vol 10 1950.
- 2) Blackwell, D. "Comparison of experiments." Proceedings of 2nd Berkeley Symposium.
- 3) Chernoff, H. "Locally optimum designs for estimating parameter," Ann. Math. Stat. vol 24 1953.
- 4) Ehrenfeld, S. "On the efficiency of experimental designs," Ann. Math. Stat. vol 26 1955.
- 5) " " "Complete class theorems in experimental designs," Proceedings of 3rd Berkeley Symposium.
- 6) Elfving, G. "Optimum allocation in linear regression theory," Ann. Math. Stat. vol 23 1952.
- 7) Fisher, R. A. "Design of experiments."
- 8) de la Garza, A. "Spacing of information in polynomial regression," Ann. Math. Stat. vol 25 1954.
- 9) Guest, P. G. "The spacing of observations in polynomial regression," Ann. Math. Stat. vol 29 1958.
- 10) Hoel, P. G. "Efficiency problems in polynomial estimation," Ann. Math. Stat. vol 29 1958.
- 11) Hotelling, H. "Some improvements in weighing and other experimental techniques," Ann. Math. Stat. vol 16 1945.
- 12) Kiefer, J. "On the nonrandomized optimality and randomized nonoptimality of symmetrical designs," Ann. Math. Stat. vol 29 1958.
- 13) " " "Optimum experimental designs," Jour. Roy. Stat. Soc. Ser. B vol 21 1959.
- 14) Kiefer, J. & Wolfowitz. "Optimum designs in regression problems" Ann. Math. Stat. vol 30 1959.
- 15) " " " — II. Ann. Math. Stat. vol. 32 1961.
- 16) Kiefer, J. & Wolfowitz. "The equivalence of two extremum problems," Can. Jour. Math. vol

- 12 1960.
- 17) Kishen, K. "On the design of experiments for weighing and making other types of measurements." *Ann. Math. Stat.* vol 16 1945.
 - 18) Kempthorne, O. "The efficiency factor of an incomplete block design." *Ann. Math. Stat.* vol 27 1956.
 - 19) Kshrisager, A. M. "A note on incomplete block designs," *Ann. Math. Sta.* vol 29 1958.
 - 20) Mann, H. B. "Design and analysis of experiments."
 - 21) Masuyama, M. "On the optimality of balanced incomplete block designs," *Rept. Stat. Appl. Res. JUSE* 1957 vol 4.
 - 22) Masuyama, M. & Okuno, T. "On the optimality of Latin, Youden, and Shrikhande squares" ibi'd
 - 23) 増山元三郎. 実験計画法, 現代応用数学 10—C.
 - 24) Mood, A. M. "On Hotelling weighing problem," *Ann. Math. Stat.* vol 17 1946.
 - 25) Moiguti, S. "On the optimality of orthogonal designs" *Rep. Stat. Appl. Res. JUSE* vol 4 1957.
 - 26) Mote, V. L. "On a minimax property of a balanced incomplete design." *Ann. Math. Stat.* vol 29 1958.
 - 27) Plackett, R. L. and Burman, J. P. "Designs of optimum multifactorial experiments" *Biometrika.* vol 33 1946.
 - 28) Raghavarao, D. "Some optimum weighing designs." *Ann. Math. Stat.* vol 30 1959.
 - 29) Stone, M. "Application of a measure of information to the design and comparison of regression experiments." *Ann. Math. Stat.* vol 30 1959.
 - 30) Takeuchi, K. "On the optimality of certain type of PBIB designs." (to be published in *Rep Stat Appl. Res. JUSE*)
 - 31) Takeuchi, K. "A note on sufficiency in normal regression problems." (to appear)
 - 32) Takeuchi, K. "On a special class of regression problems and its applications: some remarks about general models" *Rept Stat, Appl, Res. JUSE* vol 8 1961.
 - 33) Wald A. "On the efficient design of statistical investigations": *Ann Math, Stat.* vol 14 1943.

▶ ニュース ◀ 日本ロケット協会主催による第3回“ロケットと宇宙学の国際シンポジウム”が8月28日～9月1日、日本都市センターで東京大学生産研究所高木昇教授を主宰者として開かれたが、このうち OR (Reliability) に関係ある部会は下記のとおり。

Session (g) Reliability (9月1日 13.⁰⁰～16.⁰⁰)

Chairman: Leslie W. Ball (ボーイング航空機)

△ 関本忠男 (日本電気):

Operations Research in the Process of Guidance

△ J. W. Griswold (ボーイング航空機):

A Design Assurance Program to Accelerate Reliability

△ L. V. Toralballa (ニューヨーク大学):

The Reliability of Multi-Jet Rocket Engines

△ Theodore O. Wright (米空軍)

A Mathematical Approach for Optimum Checkout System Design Criteria

△ Leslie W. Ball (ボーイング航空機):

Aerospace Program Management to Achieve Reliability
