数理解析研究所講究録
1040巻 1998年 162-171

実験計画最適化の行列計算アルゴリズム

岡山理科大学　理学部　岩崎義光（Yoshimitsu Iwasaki）
大学院　小原徹也（Tetsuya Kohara）

1. 技術開発からHadamard 行列に至る道

技術のあらゆる分野で日夜研究開発に鎬を削っている集団がある。彼らは迅速なる製品開発の命を受けている。望むところは最小の実験で最大の効果を上げることである。実験の規模、すなわち、実験数Nは何から決まるかといえば、実験に取り上げる因子数nと各因子の水準数$v_j(j=1,2,\cdots,n)$から決まる。いま、交互作用を含む２次以上の効果は微小量として無視できるとすると、主効果のみ取り上げることとなる。主効果が求まるためには、

$$N \geq 1+\sum_{j=1}^{n}(v_j-1)$$

でなければならない。これより、与えられた因子数とその水準数に対して、最小の実験規模が決まる。同一回数の実験から最大の成果を引き出すには、因子の水準が実験結果に与える主効果を最も精度良く求めることである。いま、第i番目の実験データy_iの構造式を、

$$y_i = m+\sum_{j=1}^{n} a_{l_{ij}}^{(j)}$$

とする。ここに、mは各因子の平均効果の和で、$a_{l_{ij}}^{(j)}$は第i番目の実験での第j因子の水準l_{ij}の、平均効果からの効果のずれで純効果と呼ぶ。全実験につきまとめると、実験方程式

$$\mathbf{y} = m\mathbf{1}_N + X\mathbf{a}$$

を得る。ここに、

$$\mathbf{y} = (y_1 y_2 \cdots y_N)^T、\mathbf{1}_N = (11\cdots1)^T、X：N\times(N-1)\text{行列、}$$
$$\mathbf{a} = \left(a_1^{(1)}\cdots a_{v_1-1}^{(1)} a_1^{(2)}\cdots a_1^{(n)}\cdots a_{v_n-1}^{(n)}\right)^T$$

である。行列Xの成分は１、-１もしくは０である。$\tilde{X}=(\mathbf{1}_N X)$、$\mathbf{b}=(m\,\mathbf{a}^T)^T$とおけば、$\tilde{X}$は$N$次正方行列、$\mathbf{b}$は$N$次ベクトルで、それぞれ実験行列、効果ベクトルと呼ぶ。実験方程式は$\mathbf{y}=\tilde{X}\mathbf{b}$と書ける。実験により明かにしたいのは効果ベクトル$\mathbf{b}$であり、実験行列が正則ならば実験結果$\mathbf{y}$から$\mathbf{b}$は一意に決まる。ところが、実験条件をうまくとらないと、$\tilde{X}$は正則であるにもかかわらず、実験結果の変化は小さく、実験に伴う誤差範囲の程度であれば、正確に効果ベクトルを求めることはできない。実験から得られる効果ベクトルの精度は実験行列$\tilde{X}$に依存する。すなわち、$\tilde{X}$により効果ベクトル求解の精度が決まる。いま、効果ベクトル$\mathbf{b}$を単位ベクトル$\mathbf{e}_i=(0\cdots01^{(i}0\cdots0)^T$ $(i=1,2,\cdots,N)$とする。$\tilde{X}\mathbf{e}_i$は$\tilde{X}$の第i列$\mathbf{x}_i$で、効果ベクトルの求解精度は任意の２列ベクトル$\mathbf{x}_i$、$\mathbf{x}_j$のなす角が、$\pi/2$に近いほど良く、０もしくはπに近くなるにしたがって悪くなる。内積$(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$でいえば、内積が０に近いほど精度が良い。行列$M=\tilde{X}^T\tilde{X}$を用いれば、$M$の成分から$\mathbf{b}$の求解精度が評価できることになる。$M$を評価行列と呼ぶことにする。$M$は対称行列である。いま、$N$次元実ベクトル空間に$N$個の$\mathbf{x}_i$ベクトルから成る平行２$N$超面体$\gamma$を作ると、$(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$が０に近いほど、または、$\mathbf{x}_i$、$\mathbf{x}_j$が直交に近いほど、すなわち、$\gamma$が$N$次元超立方体に近いほど$\mathbf{b}$の求解精度が増す。この精度のクライテリオンとしては、行列式$|\tilde{X}|$の絶対値abs$|\tilde{X}|$がγの体積に等しい

から、Mの行列式$|M|$もしくは$\mathrm{abs}|\tilde{X}|$をとることもできて、$|M|$もしくは$\mathrm{abs}|\tilde{X}|$が最大は、γがN次元超立方体と同値である。$\mathrm{abs}|\tilde{X}|$を感度と呼び、$S(\tilde{X})$と書く。しかし、$\tilde{X}$の成分は1、-1か0であるから、実ベクトル空間は離散的な$\mathbf{Z}$-加群の空間としなければならない。実験計画最適化（D-最適化）、すなわち、$\mathbf{b}$の求解精度最良化は、問題自体の明快さに比べ解決は容易ではない。

いま、問題を簡単にするため因子の実験水準はすべて2水準とすると、$\tilde{X}$の成分は1か-1である。また、第1回目の実験に用いる水準は第1水準と定義し直せば、$\tilde{X}$の第1行の成分はすべて1にすることができる。$\tilde{X}$のN個の列ベクトルがN次元超立方体を形成するように$\tilde{X}$を決められれば、これが最適実験計画である。$\tilde{X}$の列ベクトル$\mathbf{x}_i$がN次元超立方体を形成するとき、$\tilde{X}$はHadamard行列である。ただし、Hadamard行列の次数Nは3以上の場合$N \equiv 0\ (\mathrm{mod}.4)$すなわち4の倍数でなければならない[1]。逆は、Sylvester予想といわれ未解決である。Hadamard行列の具体例は$N=2$もしくは$N=4n\ (1 \le n \le 67)$の範囲で知られている。現状、一般解を与えるエレガントなアルゴリズムはなく、Nの個々の場合につき探索している。$N \equiv i\ (\mathrm{mod}.4)\ (i=1,2)$に対しては

$$|M| = |\tilde{X}|^2 \le (N-i)^{N-i}(2N-i)^i \quad (i=1,2) \qquad (1)$$

がいえる[2]。$N \equiv 1\ (\mathrm{mod}.4)$ では、$|\tilde{X}|$が整数であるから（$|\tilde{X}| \in \mathbf{Z}$）、$2N-1$は平方数でなければならず、$N = 2s(s+1)+1\ (s \in \mathbf{Z}^+)$のとき、かつ、このときにかぎって式（1）の右辺が平方数となる。この場合、N＝5、13、25につき$\tilde{X}$の最適解（D-最適行列）が知られ、$N \equiv 2\ (\mathrm{mod}.4)$では、22、34を除く$N \le 54$に対して最適解が知られているにすぎない[3]。

2. 評価行列の性質

2．1　行列成分の間の関係

実験行列$\tilde{X}$の最適化をしたいのであるが、直接は厄介なので、同一の次数で、より取り扱いの容易な評価行列Mの性質を調べ、$\tilde{X}$の最適化のための必要条件をMにつき探る。

実験行列$\tilde{X}$の列ベクトル$\mathbf{x}$の成分が-1となる添字の集合を$C(\mathbf{x})$とすると、

$$C(\mathbf{x}) \overset{\mathrm{def}}{=} \left\{ j \mid x_j = -1, \mathbf{x} = (x_j) \right\}$$

である。まず、つぎの命題が成り立つ。2集合C_1、C_2の対称差を$C_1 \ominus C_2 \overset{\mathrm{def}}{=} (C_1 \cup C_2) \setminus (C_1 \cap C_2)$とし、集合$C$の位数を$|C|$と表す。

命題1　$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = m_{ij} \iff \left| C(\mathbf{x}_i) \ominus C(\mathbf{x}_j) \right| = \dfrac{N - m_{ij}}{2}$　（1）

証明　$\mathbf{x}_i = \left(x_k^{(i)}\right)$とすると、

$$x_k^{(i)} x_k^{(j)} = -1 \iff k \in C(\mathbf{x}_i) \ominus C(\mathbf{x}_j)$$

である。$n = \left| C(\mathbf{x}_i) \ominus C(\mathbf{x}_j) \right|$とおけば、$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = N - 2n$であるから、命題が成立。□

式（1）で$\left| C(\mathbf{x}_i) \ominus C(\mathbf{x}_j) \right|$は整数であるから、つぎの命題が成り立つ。

命題2　$N \equiv m_{ij}\ (\mathrm{mod}.2)$

すなわち、

$$N：偶（奇）数 \Rightarrow m_{ij}：偶（奇）数$$

命題3　$(\mathbf{1}_N, \mathbf{x}_j) = m_j \iff \left| C(\mathbf{x}_j) \right| = \dfrac{N - m_j}{2}$

証明　式（1）で、$\mathbf{x}_i = \mathbf{1}_N$とすると、$C(\mathbf{x}_i) = \varnothing$であるからいえる。□

定理1　$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = m_{ij}$のとき、　$m_{ij} + m_{ik} - m_{jk} \equiv N \quad (\mathrm{mod}.4)$

証明　座標軸の取り換えにより、$\mathbf{x}_i = \mathbf{1}_N$とできる。$(\mathbf{1}_N, \mathbf{x}_j) = m_j$とすると、

$$m_j + m_k - m_{jk} \equiv N \pmod{4}$$

をいえばよい。一般に、2集合C_1、C_2に対して

$$2|C_1 \cap C_2| = |C_1| + |C_2| - |C_1 \ominus C_2|$$

であるから、

$$2|C(\mathbf{x}_j) \ominus C(\mathbf{x}_k)| = \tfrac{1}{2}\{N - (m_j + m_k - m_{jk})\}$$

となり、いえた。□

系1　$m_{ij} = m_{ik} = m_{jk} = 0 \;\Rightarrow\; N \equiv 0 \pmod{4}$

すなわち、$\tilde{X}_N$に、互いに直交する3つの列ベクトルが存在すれば、Nは4の倍数である。

定理2　3次以上のHadamard行列の次数は4の倍数である。

Sylvesterは別の証明を与えた[1]。また、系1の対偶をとれば、つぎの系を得る。

系2　$N \equiv 0 \pmod{4}$のとき、

$$m_{ij} = m_{ik} = 0 \;\Rightarrow\; m_{jk} \neq 0$$

すなわち、Nが4の倍数でなければ、$\tilde{X}_N$の異なる3つの列ベクトルが互いに直交することはない。

命題4　$N \not\equiv 0 \pmod{4}$、すなわち、$N \equiv 2 \pmod{4}$のとき、

$$M = \begin{pmatrix} A_k & O_{k\,N-k} \\ O_{N-k\,k} & A_{N-k} \end{pmatrix}$$、A_k、A_{N-k}：対角成分Nのk次、$N-k$次対称行列

$O_{k\,l}$：成分0の$k \times l$型行列

$\Rightarrow A_k$、A_{N-k}の成分は0でない

注意：Mに$m_{ij} = 0\,(i \neq j)$なる成分があることから、$N \not\equiv 0 \pmod{4} \Leftrightarrow N \equiv 2 \pmod{4}$

証明　系2からいえる。□

命題5　$m_{ij} - m_{ik} \equiv m_j - m_k \pmod{4}$

証明　$m_{ij} \equiv m_i + m_j - N \pmod{4}$

$m_{ik} \equiv m_i + m_k - N \pmod{4}$

よりいえる。□

命題6　$m_{ij} + m_{ik} + m_{jk} \equiv 3N \pmod{4}$

または、　$m_{ij} + m_{ik} + m_{jk} \equiv -N \pmod{4}$

証明　$m_{ij} \equiv m_i + m_j - N \pmod{4}$

から、　$m_{ij} + m_{ik} + m_{jk} \equiv 2(m_i + m_j + m_k) - 3N \pmod{4}$

命題2から、$m_i \equiv m_j \equiv m_k \equiv N \pmod{2}$　である。したがって、

$$2(m_i + m_j + m_k) \equiv 6N \pmod{4}$$

□

定理3　$m_{i\mu} + m_{i\nu} + m_{j\mu} + m_{j\nu} \equiv 0 \pmod{4}$

証明　$m_{i\mu} + m_{i\nu} + m_{j\mu} + m_{j\nu} \equiv 2(m_i + m_j + m_\mu + m_\nu) - 4N \pmod{4}$

$m_i + m_j + m_\mu + m_\nu \equiv 4N \pmod{2}$

$\equiv 0 \pmod{4}$　□

系3

$$\left.\begin{aligned} m_{i\mu} + m_{i\nu} + m_{j\mu} + m_{j\nu} &\equiv 0 \pmod{4} \\ m_{j\mu} + m_{j\nu} + m_{k\mu} + m_{k\nu} &\equiv 0 \pmod{4} \end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow \quad m_{i\mu} + m_{i\nu} + m_{k\mu} + m_{k\nu} \equiv 0 \pmod{4}$$

証明　　$m_{i\mu}+m_{i\nu}+m_{k\mu}+m_{k\nu}\equiv -2\left(m_{j\mu}+m_{j\nu}\right)\pmod{.4}$

$m_{j\mu}+m_{j\nu}\equiv 2N\pmod{.2}$

からいえる。 □

定理3で　$i=1$　とすると、

系4　　$m_{ij}\equiv -\left(N+m_{1i}+m_{1j}\right)\pmod{.4}$

となり、つぎの定理を得る。

定理4　評価行列Mの第1行が与えられると、Mのすべての成分は法4で一意に決まる。

1）$N\equiv 1,3\ (\mathrm{mod}.4)$のとき、$m_{ij}\equiv \pm 1\ (\mathrm{mod}.4)\ (i\neq j)$であるから、

$\left(m_{1\mu},m_{1\nu}\right)\equiv(1,1)\quad\Rightarrow\left(m_{i\mu},m_{i\nu}\right)\equiv(1,1)$、または、$(-1,-1)$

$\left(m_{1\mu},m_{1\nu}\right)\equiv(1,-1)\quad\Rightarrow\left(m_{i\mu},m_{i\nu}\right)\equiv(1,-1)$、または、$(-1,1)$

$\left(m_{1\mu},m_{1\nu}\right)\equiv(-1,-1)\quad\Rightarrow\left(m_{i\mu},m_{i\nu}\right)\equiv(1,-1)$、または、$(-1,-1)$

2）$N\equiv 2\ (\mathrm{mod}.4)$のとき、$m_{ij}\equiv 0,2\ (\mathrm{mod}.4)\ (i\neq j)$であるから、

$\left(m_{1\mu},m_{1\nu}\right)\equiv(0,0)\Rightarrow\left(m_{i\mu},m_{i\nu}\right)\equiv(0,0)$、または、$(2,2)$

$\left(m_{1\mu},m_{1\nu}\right)\equiv(0,2)\Rightarrow\left(m_{i\mu},m_{i\nu}\right)\equiv(0,2)$、または、$(2,0)$

$\left(m_{1\mu},m_{1\nu}\right)\equiv(2,2)\Rightarrow\left(m_{i\mu},m_{i\nu}\right)\equiv(0,0)$、または、$(2,2)$

となる。

2．2　評価行列式の上界

$M=\tilde{X}^T\tilde{X}$ から$|M|$は平方数でなければならない。$N\equiv 1\ (\mathrm{mod}.4)$ では

$$|M|\leq (N-1)^{N-1}(2N-1)\quad\left(=:N=2s(s+1)+1\left(s\in\mathbf{Z}^+\right)\right)$$

が成り立ち、等号は、$N=2s(s+1)+1$で、Mが

$$\begin{pmatrix} N & 1 & \cdots & 1\\ 1 & \ddots & \ddots & \vdots\\ \vdots & \ddots & \ddots & 1\\ 1 & \cdots & 1 & N\end{pmatrix}$$

のとき成り立つ[2]。ただし、$N\neq 2s(s+1)+1$　のときは、まだよく分かっていない。例えば、$N=9$の最適行列に対する評価行列$M_0(9)$は

$$|M_0(9)|=\begin{vmatrix} 9 & 1 & \cdots & 1 & 5\\ 1 & \ddots & 1 & \cdots & 1\\ \vdots & \ddots & 9 & \ddots & \vdots\\ 1 & \cdots & 1 & \ddots & 1\\ 5 & 1 & \cdots & 1 & 9\end{vmatrix}=14336^2$$

である。

$N\equiv 2\ (\mathrm{mod}.4)$ のときは、

$$|M|\leq (N-2)^{N-2}(2N-2)^2$$

で、等号は

$$M=\begin{pmatrix} A & O\\ O & A\end{pmatrix}、A=\begin{pmatrix} N & & 2\\ & \ddots & \\ 2 & & N\end{pmatrix}$$

のとき成り立つ[2]。

ところが、$N\equiv 3\ (\mathrm{mod}.4)$に対しては、よい評価式がない。$N\equiv i\ (\mathrm{mod}.4)\ (i=0,1,2)$では、

$$|M|\leq (N-i)^{N-i}(2N-i)^i$$

が成り立つので、$N\equiv 3\,(\mathrm{mod}.4)$ に対しても成り立つのではないかと予想される。ただし、$N\equiv 3\,(\mathrm{mod}.4)$のとき、$(2N-3)^3$は平方数にならないから等号の成立することはなく、

$$|M|<(N-3)^{N-3}(2N-3)^3$$

となると予想される。

3. 最適実験行列探索法

評価行列の性質から、最適実験行列の探索法を探ってみる。

3．1 評価行列式の最大値探索法

実験行列の最適化は$\mathbb{C}_N=\left\{\tilde{X}_N \middle| x_{ij}=\pm 1\right\}$ とすると、集合$\mathbb{C}_N$の位数$|\mathbb{C}_N|$は$|\mathbb{C}_N|=\begin{pmatrix}2^N\\N\end{pmatrix}$であり、$|\mathbb{C}_N|=201376\,(N=5)$、$74974368\,(N=6)$、$\sim 9.45\times 10^{10}\,(N=7)$であって、$\mathbb{C}_N$のすべての行列につき行列式を計算するのは好ましくない。技術開発に求められるのは最適実験行列を一つ見つければよいのであるから、最適化に関して$|M|$の最大値が分かっていると、その値を実現したとき探索をやめることができる。しかし、多くの場合、$\max\left\{|M_N| \,\middle|\, M_N=\tilde{X}_N^T\tilde{X}_N\,,\tilde{X}_N\in\mathbb{C}_N\right\}$ は知られていない(第２．２項）。

$|M_N|$を大きくするには、M_Nの成分の絶対値$|m_{ij}|\,(i\neq j)$ を小さく取ることである。Nに対して、以下の方法で$|M_N|$の上界と上界を与えるM_Nの成分を求める。M_Nの対角成分はNである。

1° $m_{1j}\,(1<j\leq N)$ を $m_{1j}\equiv N\,(\mathrm{mod}.4)$ かつ $|m_{1j}|$ 最小となるように与える。

2° $m_{ij}\equiv N-\left(m_{1i}-m_{1j}\right)$ $(\mathrm{mod}.4)$ かつ $|m_{ij}|$ 最小となるように$m_{ij}\,(j>i\geq 2)$を決める。

3° $|M_N|$ は平方数か。$|M_N|$ が平方数であれば、$|M_N|$の上界として取り上げる。平方数でなければ、操作１°、２°で絶対値$|m_{1j}|$は変えず、符号の異なる数値を与え、$|M_N|$ が平方数となるかを調べる。平方数でない場合には、

4° $m_{1j}\to m_{1j}\pm 2$ と置き換え、$|M_N|$は平方数かを調べる。

5° $m_{ij}\to m_{ij}\pm 4\,(j>i\geq 2)$ と置き換え、$|M_N|$ は平方数かを調べる。平方数でなければ、$m_{ij}\to m_{ij}\pm 4\,(j>i\geq 2)$ と置き換える成分の数をふやしつつ、$|M_N|$が平方数となるか調べる。

上記の操作により、$|M_N|$の上界を決める。ただし、$|M_N|$が平方数は、実験行列が存在するための必要条件であり、上界を実現する$\tilde{X}_N$の存在は保証されていない。

3．2 実験行列の最適化

N次の最適実験行列をD_N、$D_N^TD_N$を$M_0(N)$とする。まず、特殊な場合のD_N構成法を記す。

3．2．1 D_NからのD_{2N}構成法

$\tilde{X}_{2N}=\begin{pmatrix}D_N & D_N\\ D_N & -D_N\end{pmatrix}$に取ると、$\tilde{X}_{2N}^T\tilde{X}_{2N}=\begin{pmatrix}2D_N^TD_N & \mathrm{O}\\ \mathrm{O} & 2D_N^TD_N\end{pmatrix}$である。$N=2s(s+1)+1$ $\left(s\in\mathbf{Z}^+\right)$のときは、$D_N=\begin{pmatrix}N & & 1\\ & \ddots & \\ 1 & & N\end{pmatrix}$であり、$M_0(2N)=\tilde{X}_{2N}^T\tilde{X}_{2N}$ となって(第２．２項）、$D_{2N}=\begin{pmatrix}D_N & D_N\\ D_N & -D_N\end{pmatrix}$となる。実際、$|D_{2N}|^2=2^{2N}|D_N|^4=(2N-2)^{2N-2}(2\cdot 2N-2)^2$となり、評価行列式最大である。

3．2．2 帰納的構成法

D_Nが決まり、D_NからD_{N+1}を構成するのに、D_NがD_{N+1}の小行列となるように構成する方法を考える。

$$\begin{pmatrix} & & 1 \\ & D_N & \pm 1 \\ & & \vdots \\ 1 & \pm 1 \cdots & \pm 1 \end{pmatrix}$$

の形で $\tilde{X}_{N+1}$ の最適化を図る。決定すべき成分数は $2N-1$ である。上の形の行列 $\tilde{X}_{N+1}$ の第2列から第 N 列ベクトルの１つを $\mathbf{x}_j$ とする。第 $N+1$ 列ベクトルを $\mathbf{x}_k$ おき、これを決定したい。$\mathbf{x}_k$ の取り方は、$\mathbf{x}_k$ の -1 の成分の取り方で決まる。$\tilde{X}_{N+1}$ の最適化のためには、$|C(\mathbf{x}_k)|$ は $N/2$ に近い数として、$\tilde{X}_{N+1}$ の第１列ベクトルとできるだけ直交するようにする。$|C(\mathbf{x}_k)|$ が与えられると、$C(\mathbf{x}_k)$ の決定は $C(\mathbf{x}_j)$ から $|C(\mathbf{x}_j)\cap C(\mathbf{x}_k)|$ 個取り、残り $|C(\mathbf{x}_k)|-|C(\mathbf{x}_j)\cap C(\mathbf{x}_k)|$ 個を $\Omega_N \setminus C(\mathbf{x}_j)$ から取る。ここに、$\Omega_N = \{2,\cdots N\}$ である。したがって、$\mathbf{x}_k$ の取り方は、$\lambda = |C(\mathbf{x}_j)\cap C(\mathbf{x}_k)|$ とおくと、

$$\kappa = \begin{pmatrix} |C(\mathbf{x}_j)| \\ \lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} N-1-|C(\mathbf{x}_j)| \\ |C(\mathbf{x}_k)|-\lambda \end{pmatrix}$$

通りある。$N \equiv i\,(\mathrm{mod}.4)$ $(0 \le i \le 3)$ とする。命題６から、$m_{1j}+m_{1k}+m_{jk} \equiv -i\,(\mathrm{mod}.4)$ である。評価行列の非対角成分は絶対値を小さく取りたい。これより、(m_{1j}, m_{1k}, m_{jk}) が決まり、$\mathbf{x}_j$ の第 $N+1$ 成分が与えられ、$|C(\mathbf{x}_j)| = \frac{1}{2}(N-m_{1j})$ から $|C(\mathbf{x}_j)|$、$|C(\mathbf{x}_k)|$ が求まる。$N = 4s+i\,(s \in \mathbf{Z}^+)$ とおくと、$|C(\mathbf{x}_j)| = \frac{1}{2}(N-m_{1j})$、$\lambda = \frac{1}{4}\{N-(m_{1j}+m_{1k}-m_{jk})\}$ から $\mathbf{x}_k$ の探索数 κ の表を得る(表１）。

３．２．３　具体例

最適実験行列 D_N、同評価行列 $M_0(N)$ を、$N \le 11$ に対して以下に列記する。感度 S、直交度 $P\left(\overset{\mathrm{def}}{=} S/N^{\frac{N}{2}}\right)$ は表２に示す。

$D_1 = (1)$

$D_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

$D_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$

$D_4 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$

$D_5 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$

$D_6 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$

$M_0(1) = (1)$

$M_0(2) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

$M_0(3) = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \\ 1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$

$M_0(4) = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$

$M_0(5) = \begin{pmatrix} 5 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 5 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 5 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 5 \end{pmatrix}$

$M_0(6) = \begin{pmatrix} 6 & 2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & 6 \end{pmatrix}$

$$D_7=\begin{pmatrix}1&1&1&1&1&1&1\\1&-1&1&-1&-1&-1&1\\1&1&-1&-1&1&-1&-1\\1&-1&-1&1&1&1&1\\1&1&-1&1&-1&-1&1\\1&1&-1&-1&-1&1&-1\\1&-1&1&1&-1&-1&-1\end{pmatrix}\qquad M_0(7)=\begin{pmatrix}7&1&-1&1&-1&-1&1\\1&7&-3&-1&1&1&-1\\-1&-3&7&1&-1&-1&1\\1&-1&1&7&1&1&3\\-1&1&-1&1&7&3&1\\-1&1&-1&1&3&7&1\\1&-1&1&3&1&1&7\end{pmatrix}$$

$$D_8=\begin{pmatrix}1&1&1&1&1&1&1&1\\1&-1&-1&-1&-1&1&1&1\\1&1&-1&-1&1&1&-1&-1\\1&-1&-1&1&1&-1&1&-1\\1&1&-1&-1&-1&1&-1&1\\1&1&-1&1&-1&-1&-1&1\\1&-1&1&1&-1&1&-1&-1\\1&-1&1&-1&1&-1&-1&1\end{pmatrix}\qquad M_0(8)=\begin{pmatrix}8&0&0&0&0&0&0&0\\0&8&0&0&0&0&0&0\\0&0&8&0&0&0&0&0\\0&0&0&8&0&0&0&0\\0&0&0&0&8&0&0&0\\0&0&0&0&0&8&0&0\\0&0&0&0&0&0&8&0\\0&0&0&0&0&0&0&8\end{pmatrix}$$

$$D_9=\begin{pmatrix}1&1&1&1&1&1&1&1&1\\1&-1&-1&-1&-1&1&1&1&-1\\1&1&-1&-1&1&1&-1&-1&-1\\1&-1&1&1&1&-1&1&-1&-1\\1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1&1\\1&1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1\\1&-1&1&1&-1&1&-1&-1&1\\1&-1&-1&-1&1&-1&-1&1&1\\1&1&-1&1&-1&-1&-1&1&-1\end{pmatrix}\qquad M_0(9)=\begin{pmatrix}9&1&-1&-1&-1&-1&-1&1&-1\\1&9&-1&-1&-1&-1&-1&1&-1\\-1&-1&9&5&1&1&1&-1&1\\-1&-1&5&9&1&1&1&-1&1\\-1&-1&1&1&9&1&1&-1&1\\-1&-1&1&1&1&9&1&-1&1\\-1&-1&1&1&1&1&9&-1&1\\1&1&-1&-1&-1&-1&-1&9&-1\\-1&-1&1&1&1&1&1&-1&9\end{pmatrix}$$

$$D_{10}=\begin{pmatrix}1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\1&-1&-1&1&-1&1&1&1&-1&-1\\1&1&-1&-1&1&1&-1&-1&-1&-1\\1&-1&1&1&1&-1&1&-1&-1&-1\\1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1&-1&1\\1&1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1&-1\\1&-1&1&1&-1&1&-1&-1&-1&1\\1&-1&-1&-1&1&-1&-1&1&1&1\\1&1&-1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1\\1&-1&1&-1&-1&1&1&-1&1&-1\end{pmatrix}\qquad M_0(10)=\begin{pmatrix}10&0&0&0&-2&0&0&-2&-2&-2\\0&10&-2&-2&0&-2&-2&0&0&0\\0&-2&10&2&0&2&2&0&0&0\\0&-2&2&10&0&2&2&0&0&0\\-2&0&0&0&10&0&0&2&2&2\\0&-2&2&2&0&10&2&0&0&0\\0&-2&2&2&0&2&10&0&0&0\\-2&0&0&0&2&0&0&10&2&2\\-2&0&0&0&2&0&0&2&10&2\\-2&0&0&0&2&0&0&2&2&10\end{pmatrix}$$

$$\tilde{X}_{11}=\begin{pmatrix}1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\1&-1&-1&1&-1&1&1&1&-1&-1&-1\\1&1&-1&-1&1&1&-1&-1&-1&-1&1\\1&-1&1&1&1&-1&1&-1&-1&-1&1\\1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1&-1&1&-1\\1&1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1&-1&-1\\1&-1&1&1&-1&1&-1&-1&-1&1&-1\\1&-1&-1&-1&1&-1&-1&1&1&1&-1\\1&1&-1&1&-1&-1&-1&-1&1&-1&1\\1&-1&1&-1&-1&1&1&-1&1&-1&1\\1&1&1&1&1&1&1&-1&1&-1&-1\end{pmatrix}\qquad M_{11}=\begin{pmatrix}11&1&1&1&-1&1&1&-3&-1&-3&-1\\1&11&-1&-1&1&-1&-1&-1&1&-1&1\\1&-1&11&3&1&3&3&-1&1&-1&1\\1&-1&3&11&1&3&3&-1&1&-1&1\\-1&1&1&1&11&1&1&1&3&1&3\\1&-1&3&3&1&11&3&-1&1&-1&1\\1&-1&3&3&1&3&11&-1&1&-1&1\\-3&-1&-1&-1&1&-1&-1&11&1&3&-3\\-1&1&1&1&3&1&1&1&11&1&3\\-3&-1&-1&-1&1&-1&-1&3&1&11&-3\\-1&1&1&1&3&1&1&-3&3&-3&11\end{pmatrix}$$

ここに、$N=11$の場合のみいままでに得られた最良解を記した。

3．2．4　注意

（1）評価行列の上界

評価行列Mの非対角成分の絶対値が1ではあるが、行列式が最大にならない例：

$$M_7 = \begin{pmatrix} 7 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 7 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 7 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 7 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 7 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 7 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 7 \end{pmatrix}、\left|M_7\right| = 512^2 < \left|M_0(7)\right| = 576^2$$

実験行列が分かっていて、評価行列の非対角成分の絶対値が1ではあるが、行列式が最大にならない例：

$$\tilde{X}_{11} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & - & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}、M_{11} = \begin{pmatrix} 11 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 11 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 \end{pmatrix}$$

$$\left|M_{11}\right| = 248832^2 < 294912^2$$

評価行列式が現状最大の294912^2より大きい平方数でありながら、対応する実験行列の見つかっていない例：

$$M_{11}^{(1)} = \begin{pmatrix} 11 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 11 & 3 & 3 & 3 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 3 & 11 & 3 & 3 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 3 & 3 & 11 & 3 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 3 & 3 & 3 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 \end{pmatrix} M_{11}^{(2)} = \begin{pmatrix} 11 & -3 & -3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -3 & 11 & 3 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -3 & 3 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 11 & 3 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 3 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 11 \end{pmatrix}$$

$$\left|M_{11}^{(1)}\right| = \left|M_{11}^{(2)}\right| = 331776^2 > 294912^2$$

（2）D_NからD_{2N}の構成

$N=3$のとき、$D_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$であり、$\tilde{X}_6 = \begin{pmatrix} D_3 & D_3 \\ D_3 & -D_3 \end{pmatrix}$からは、$\left|\tilde{X}_6\right|^2 = 128^2 < \left|D_6\right|^2 = 160^2$となり、$N=6$の最適行列にはならない。

（3）帰納的構成法

$D_1 \sim D_7$までは帰納的に構成できるが、$N=7$では

$$M_0(7)=\begin{pmatrix} 7 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 7 & -3 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -3 & 7 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 7 & 1 & 1 & 3 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 7 & 3 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 3 & 7 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 3 & 1 & 1 & 7 \end{pmatrix}$$

となり、成分の絶対値が3となる成分が異なる行に2個以上あるのでD_7をD_8の小行列となるようには取れない。M_Nのij成分$m_{ij}^{(N)}$に対して、$m_{ij}^{(N+1)}=m_{ij}^{(N)}\pm1$の関係があるからである。$D_8$から$D_9$、$D_{10}$から$\tilde{X}_{11}$ $\left(\left|\tilde{X}_{11}\right|=294912\right)$は帰納的に構成できる。$D_9$から$D_{10}$は、$M_9$の成分に5があり、$M_{10}$の非対角成分の絶対値が0か2であるので帰納的構成法が適用できない。

参考文献

[1] Sylvester, J. J., Thoughts on inverse orthogonal matrices, simultaneous sign-successions and tesselated pavements in two or more colours, with applications to Newton's rule, ornamental tile-work and the theory of numbers. Phil. Mag., **4**, 461-475, 1867.

[2] Wojtas, M., On Hadamard's inequality for the determinants of order non-divisible by 4, Colloquium Mathematicum, **12**, 73-83, 1964.

[3] Moyssiadis, C. and Kounias, S., Exact D-optimal *N* obsevations 2^k designs of resolution III, when $N\equiv1$ or 2 mod 4, Math. Operationsforsch. u. Statist., Ser. Statist., Berlin, **14**[3], 367-379, 1983.

表2　感度S、直交度Pと評価行列の上界μ_iのまとめ†)

N	S	P	$\sqrt{\mu_0}$	$\sqrt{\mu_1}$	$\sqrt{\mu_2}$	$\sqrt{\mu_3}$
1	1	1.000				
2	2	1.000				
3	4	0.770				
4	16	1.000	16			
5	48	0.859		48		
6	160	0.741			160	
7	576	0.635				$176\sqrt{11}$ =583.7
8	4096	1.000	4096			
9	14336	0.728		$4096\sqrt{17}$	=16888.2	
10	73728	0.737			73728	
11	294912††	0.552				$77824\sqrt{19}$ =339227.

†) $P\stackrel{\text{def}}{=}S/N^{\frac{N}{2}}$、$\mu_i\stackrel{\text{def}}{=}(N-i)^{N-i}(2N-i)^i\quad(i=0,1,2,3)$　　††) 現状最大値

表１　最適実験行列の列ベクトル探索数

i	m_{1j}	m_{1k}	m_{jk}	$\lvert C(\mathbf{x}_j)\rvert$	$\lvert C(\mathbf{x}_k)\rvert$	λ	κ	s			
								1	2	3	4
0							N	**4**	**8**	**12**	**16**
	0	0	0	$2s$	$2s$	s	$\binom{2s}{s}\binom{2s-1}{s}$	2	18	200	2450
1							N	**5**	**9**	**13**	**17**
	1	1	1	$2s$	$2s$	s	$\binom{2s}{s}^2$	4	36	400	4900
	1	-1	-1	$2s$	$2s+1$	s	$\binom{2s}{s}\binom{2s}{s+1}$	2	24	300	3920
	-1	1	-1	$2s+1$	$2s$	s	$\binom{2s+1}{s}\binom{2s-1}{s}$	3	30	350	4410
	-1	-1	1	$2s+1$	$2s+1$	s	$\binom{2s+1}{s}\binom{2s-1}{s}$	3	30	350	4410
2							N	**6**	**10**	**14**	**18**
	0	0	2	$2s+1$	$2s+1$	$s+1$	$\binom{2s+1}{s+1}\binom{2s}{s}$	6	60	700	8820
	0	0	-2	$2s+1$	$2s+1$	s	$\binom{2s+1}{s}\binom{2s}{s+1}$	3	40	525	7056
	2	0	0	$2s$	$2s+1$	s	$\binom{2s}{s}\binom{2s+1}{s+1}$	6	60	700	8820
	0	2	0	$2s+1$	$2s$	s	$\binom{2s+1}{s}\binom{2s}{s}$	6	60	700	8820
	-2	0	0	$2(s+1)$	$2s+1$	$s+1$	$\binom{2(s+1)}{s+1}\binom{2s-1}{s}$	6	60	700	8820
	0	-2	0	$2s+1$	$2(s+1)$	$s+1$	$\binom{2s+1}{s+1}\binom{2s}{s+1}$	3	40	525	7056
3							N	**7**	**11**	**15**	**19**
	1	1	-1	$2s+1$	$2s+1$	s	$\binom{2s+1}{s}\binom{2s+1}{s+1}$	9	100	1225	15876
	1	-1	1	$2s+1$	$2(s+1)$	$s+1$	$\binom{2s+1}{s+1}^2$	9	100	1225	15876
	-1	1	1	$2(s+1)$	$2s+1$	$s+1$	$\binom{2(s+1)}{s+1}\binom{2s}{s}$	12	120	1400	17640
	-1	-1	-1	$2(s+1)$	$2(s+1)$	$s+1$	$\binom{2(s+1)}{s+1}\binom{2s}{s}$	6	80	1050	14112