

D-optimal designs and group divisible designs

田村宏樹 (Hiroki Tamura)
 東北大学大学院情報科学研究科

1 Introduction

\mathcal{X}_n を成分が全て ± 1 である n 次正方行列の集合とし、その中で最大の行列式 $md(n)$ を持つものを n 次の D-optimal design と呼ぶ。 $md(n)$ の上限は Hadamard や Ehlich[4, 5] らによって、以下のように与えられている。

$n \pmod 4$	$md(n)^2$ の上限	上限を満たす行列の Gram 行列
0	n^n	nI_n
1	$(2n-1)(n-1)^{n-1}$	$(n-1)I_n + J_n$
2	$(2n-2)^2(n-2)^{n-2}$	$((n-2)I_{n/2} + 2J_{n/2}) \otimes I_2$
3	$\det D_n(l)$	$D_n(l)$
<small>($l = 6$ for $15 \leq n \leq 59$, $l = 7$ for $63 \leq n$)</small>		

但し、 I_k は k 次の単位行列、 J_k は k 次の成分がすべて 1 の正方行列、 $D_n(l)$ は対角成分が n 、対角ブロックの非対角成分が 3、その他の成分が -1 であり、各ブロックの大きさが、 $[n/l]$ または $[n/l] + 1$ となる $l \times l$ のブロック構造をもった n 次の正方行列である。特に n が l の倍数であるときは、 $n = kl$ とおくと $D_n(l) = [(n-3)I_k + 4J_k] \otimes I_l - J_n$ と表される。

$n \equiv 3 \pmod 4$ の場合、現在まで上限を満たす行列の存在は知られていないが、存在するための n に関する必要条件として、 n が 63 以上の 7 の倍数かつ $4n/7 - 3$ が平方数であることが、Cohn によって示された [3]。

2 非存在定理と group divisible design との関連

Definition 1. (P, S, A) が group divisible design $GDD(v, k, m, n, \lambda_1, \lambda_2)$ とは、

- P は点の集合で、 $|P| = v = mn$
- S は P の、 m 点ずつの部分集合 (group) への分割
- A は P の、 $k (\geq 2)$ 点部分集合 (ブロック) のクラス

- 同一 group の異なる 2 点を共に含むブロックは丁度 λ_1 個
- 異なる group の 2 点を共に含むブロックは丁度 λ_2 個

$|P| = |A|$ のとき、group divisible design を square、さらに点とブロックを入れ替えても group divisible design であるとき、symmetric という。

GDD($v, k, m, n, \lambda_1, \lambda_2$) のインシデンス行列 B は、 $BB^T = ((r - \lambda_1)I_m + (\lambda_1 - \lambda_2)J_m) \otimes I_n + \lambda_2 J_v$ を満たす。

Group divisible design の存在に関する Bose と Connor の定理 [1, Theorem 9] の一般化として、次が成り立つ。

Theorem 1. $n = kl$ を奇数とし、 a, b, c を 0 でない整数かつ、 $a, a+bk, a+bk+cn$ がいずれも正とする。このとき $XX^T = (aI_k + bJ_k) \otimes I_l + cJ_n$ を満たす n 次の正方整数行列 X が存在する必要条件は、

- (1) $a + bk + cn$ が平方数かつ、
- (2) $(a, (-1)^{\frac{k-1}{2}}k)_p = (a + bk, (-1)^{\frac{l-1}{2}}l)_p$ がすべての奇素数 p に対し成り立つ。

$(\cdot, \cdot)_p$ は Hilbert 記号を表す。

ここで、 $a = n - 3, b = 4, c = -1$ とおくと

Cororally 2. $n = kl \equiv 3 \pmod{4}$ とする。 $XX^T = D_n(l)$ を満たす n 次の正方整数行列 X が存在する必要条件は、

- (1) $4k - 3$ が平方数かつ、
- (2) $(n - 3)x^2 + (-1)^{\frac{k-1}{2}}y^2 = (n + 4k - 3)z^2$ が非自明な整数解を持つ。

Cororally 2 の条件を満たす (k, l) の組は、 n が小さい方から、 $(k, l) = (3, 13), (21, 3), (7, 13), (7, 17), (3, 49), (7, 21), (7, 25), (13, 15), (73, 3), (7, 37), (3, 109), (13, 27), (7, 53), (7, 57), (13, 31), (31, 13), (7, 61), (3, 145), (7, 73), (73, 7), \dots$ となる。特に、

Cororally 3. $XX^T = D_n(7)$ を満たす n 次の正方整数行列 X が存在するならば、 $n \geq 511$ 。

$(k, l) = (3, 13)$ については $XX^T = D_n(l)$ を満たす \mathcal{X}_n の元 X が、group divisible design より得られ、その行列式 $2^{50} \cdot 3^{33}$ はこれまでに知られている $md(39)$ の下限 $2^{38} \cdot 3^{34} \cdot 1241$ [6] よりも大きい。

一般に、square GDD($n, \frac{n-t}{2}, k, l, \frac{n-2t+b+c}{4}, \frac{n-2t+c}{4}$) (但し、 $t^2 = a + bk + cn$) が存在すれば、そのインシデンス行列中の 0 を -1 で置き換えることにより、 $XX^T = (aI_k + bJ_k) \otimes I_l + cJ_n$ を満たす X が得られる。その逆が成り立つかどうかは分からないが、ある条件下では、そのような X が存在すれば group divisible design に由来していることが示される。

Theorem 4. $n = kl = a + b + c$ とし、 $X \in \mathcal{X}_n$ が $XX^T = (aI_k + bJ_k) \otimes I_l + cJ_n$ を満たすとする。このとき、以下のいずれかを満たせば、 X は square GDD($n, \frac{n-t}{2}, k, l, \frac{n-2t+b+c}{4}, \frac{n-2t+c}{4}$) (但し、 $t^2 = a + bk + cn$) に由来する。

(1) $c, b + cl \neq 0$ かつ $XX^T = X^T X$

(2) $c \neq 0$ かつ X を $k \times k$ ずつの小行列に分割したとき、各行列の中で列の総和は一定

(3) n が奇数、 $b \neq 0$ で $(a, b) = 4$ かつ (ac, t^2) が平方因子を含まない
特に、(1) と (3) においては、GDD は symmetric となる。

3 Ehlich ブロック行列

この節では、 $D_n(l)$ より一般的に、各ブロックの大きさが k_1, \dots, k_l である Ehlich ブロック行列 $D_n(k_1, \dots, k_l)$ について述べる。 $XX^T = Y := D_n(k_1, \dots, k_l)$ を満たす \mathcal{X}_n の元 X が存在する必要条件は、 $\det Y$ が平方数かつ、 Y が単位行列と有理同値となることである。また、 v^T を X の列ベクトル、 $\hat{v} = (\hat{v}_1 \cdots \hat{v}_l)$ を v をサイズ k_1, \dots, k_l に分割して、各小ベクトルごとの成分の総和をとったものとする、

Lemma 5. 正則行列 A が $AA^T = B$ を満たしているとき、 v^T を A の列ベクトルとすると、 $vB^{-1}v^T = 1$ が成り立つ。

から、 \hat{v} の候補 $\{u^{(1)}, \dots, u^{(s)}\}$ が求められ、

Lemma 6. $v^{(1)T}, \dots, v^{(n)T}$ を X のすべての列ベクトルとすると、

$$\sum_{i=1}^n v^{(i)T} v^{(i)} = Z := (Z_{ij})_{i,j=1,\dots,l}$$

ここで $Z_{ii} = k_i(n + 3k_i - 3)$, $Z_{ij} = -k_i k_j$ ($i \neq j$)。

より、 Z は $u^{(i)T} u^{(i)}$ たちの非負整数係数の一次結合で表されなければならない。これらの条件から、 $XX^T = D_n(k_1, \dots, k_l)$ となる $X \in \mathcal{X}_n$ が存在する可能性のある (k_1, \dots, k_l) を列挙すると、

n	k_1, \dots, k_l	行列式 / 2^{n-1}	存在	対称
7	2,2,2,1	9	○	○
	3,3,1	8	○	○
	1, ..., 1	8	○	○
	4,3	7	○	○
	7	5	○	○
11	5,2,2,2	320	○	○
	1, ..., 1	243	○	○

n	k_1, \dots, k_t	行列式 / 2^{n-1}	存在	対称
15	4,4,4,3	25515	○	○
	1, ..., 1	16384	○	○
19	10,3,3,3	3211264	○	○
	1, ..., 1	1953125	○	○
23	1, ..., 1	362797056	○	○
27	7,7,7,6	198087192576	○	○
	9,8,6,4	195910410240		
	10,10,4,3	191556845568		
	11,10,3,3	189380063232		
	14,7,6	182849716224	○	○
	18,3,3,3	176319369216		
	1, ..., 1	96889010407	○	○
31	9,9,9,4	75960984159088	○	○
	16,5,5,5	73248091867692		
	13,11,5,2	73248091867692		
	21,7,3	66465861139202	○	○
	31	52223176609373	○	○
	1, ..., 1	35184372088832	○	○
35	7,7,5,4,4,4,2,2	39582418599936000		×
	7,7,7,4,4,2,2,2	39582418599936000		×
	7,7,7,6,2,2,2,2	39582418599936000		×
	11,11,11,2	37436171902517248		
	4,4,4,4,4,1, ..., 1	34665798542819328		×
	1, ..., 1	16677181699666569	○	○

表中の「対称」は、 $XX^T = X^T X$ なる X が存在するか否かを表す。

$(k_1, \dots, k_t) = (1, \dots, 1)$ については $n+1$ 次の Hadamard 行列の存在と同値である。 $(k_1, \dots, k_t) = (2, 2, 2, 1), (5, 2, 2, 2), (4, 4, 4, 3)$ はそれぞれ、 $n = 7, 11, 15$ の D-optimal design に相当する [7]。また、 $(k_1, \dots, k_t) = (7, 7, 7, 6), (9, 9, 9, 4)$ はそれぞれ、 $n = 27, 31$ のこれまでに知られている [6] よりも大きな行列式の値を与える。

参考文献

- [1] R.C. Bose and W.S. Connor, Combinatorial properties of group divisible incomplete block designs, Ann. Math. Stat. **23** (1952), 367–383.
- [2] W.S. Connor, Some relations among the blocks of symmetrical group divisible designs, Ann. Math. Stat. **23** (1952), 602–609.

- [3] J.H.E. Cohn, Almost D-optimal designs, *Utilitas Math.* **57** (2000), 121–128.
- [4] H. Ehlich, Determinantenabschätzungen für binäre Matrizen, *Math. Z.* **83** (1964), 123–132.
- [5] H. Ehlich, Determinantenabschätzungen für binäre Matrizen mit $N \equiv 3 \pmod{4}$, *Math. Z.* **84** (1964), 438–447.
- [6] W. P. Orrick, B. Solomon, R. Dowdeswell, and W. D. Smith, New lower bounds for the maximal determinant problem, arXiv preprint [math.CO/0304410](https://arxiv.org/abs/math.CO/0304410).
- [7] W. P. Orrick, The maximal $\{-1,1\}$ -determinant of order 15, arXiv preprint [math.CO/0401179](https://arxiv.org/abs/math.CO/0401179).