数理解析研究所講究録
第 1700 巻 2010 年 92-101

離散可積分系を用いた多項式回帰モデルの D-optimal design の構成

京都大学情報学研究科　關戸 啓人 (Hiroto Sekido)
Depart. of Appl. Math. and Phys., Grad. School of Informatics, Kyoto Univ.

1 はじめに

有限区間 $[a, b]$ で定義された確率分布関数 $\mu(x)$ が与えられたとき，通常のモーメント c_k に加えてカノニカルモーメント p_k を定義することができる．カノニカルモーメント p_k は $0 \leq p_k \leq 1$ を満たし，通常のモーメントを正規化した量と見ることができる．カノニカルモーメントのカノニカルとはこの性質に由来するものである．また，カノニカルモーメントは $d\mu(x)$ を測度関数とする直交多項式や，$\mu(x)$ の Stieltjes 変換の連分数表示などとより直接的に関係しており，通常のモーメントと比べ $\mu(x)$ をより本質的に表す量と見ることもできる．カノニカルモーメントの種々の性質は Skibinsky [5, 6, 7] などによって調べられた．また，カノニカルモーメントとその応用についてまとめた本として Dette and Sttuden [1] がある．カノニカルモーメントの応用先は，単純なランダムウォークや出生死滅過程などの他，本稿で取り扱う実験計画がある．

実験計画とは，良い回帰式を得るためのデータ収集の手法を考える学問であり，品質工学などと関係が深い．実験計画の分野の 1 つに optimal design がある．ここでいう design とはデータを観測する点の集合のことであり，optimal design とは最も高い精度で未知変数を推定できる design のことである．optimal design を用いることによって，限られた実験回数で，より良い推定値を得ることができる．optimal design の定式化において，最適の基準はいくつかあるが，本稿ではフィッシャー情報行列の行列式によって定義される D-optimal design を取り上げる．D-optimal design は Kiefer [2] によって定式化されており，推定量の $(1-\alpha)$-信頼楕円の体積を最小化するという意味をもっている．

多項式回帰モデルに対する D-optimal design，および D_s-optimal design は目的関数をカノニカルモーメントで書き下すことによって求められることが Studden [8] によって発見された．本稿では，多項式回帰モデルにおいて事前情報が与えられた場合のモデルを定式化し，その D-optimal design を求めるアルゴリズムを提案する．そのアルゴリズムで重要な役割を果たすのはカノニカルモーメントと離散可積分系との関係である．

2 準備

最初に線形回帰モデルと D-optimal design の定義を紹介する．また，カノニカルモーメントのいくらかの性質を紹介すると当時に，Studden [8] によって多項式回帰モデルに対する D-optimal design がどのように求められたかを紹介する．

2.1 線形回帰モデルと D-optimal design

線形回帰モデルは

$$
\begin{aligned}
Y &= \theta^{\mathrm{T}} f(x) + \varepsilon \\
&= \begin{pmatrix} \theta_0 & \theta_1 & \cdots & \theta_{m-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0(x) \\ f_1(x) \\ \vdots \\ f_{m-1}(x) \end{pmatrix} + \varepsilon
\end{aligned} \tag{2.1}
$$

であらわされ，$f(x) = (f_0(x), f_1(x), \ldots, f_{m-1}(x))^{\mathrm{T}}$ は既知の関数からなるベクトル，$\theta = (\theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_{m-1})^{\mathrm{T}}$ は未知係数のベクトル，ε は誤差項である．Y と ε のみ確率変数であることに注意する．(2.1) が意味することは，点 x で観測したら反応 Y が得られるということである．目的は，実験を行い，それにより得られたデータから未知変数 θ_k を推定することである．本稿では，実験可能な観測点の集合を $\mathcal{X} = [0,1]$ とする．また，誤差項の平均は 0，分散は x に依らない正定数とし，実験ごとに独立と仮定する．

有限区間 $[0,1]$ 上の確率測度全体の集合を $\mathcal{P}_{[0,1]}$ と書き，$\mu \in \mathcal{P}_{[0,1]}$ に対応する確率分布関数を $\mu(x)$ と書くことにする．実験回数を n 回とし，n 個の観測点 $x_1, x_2, \ldots, x_n \in [0,1]$ と 1 つの確率測度 $\mu \in \mathcal{P}_{[0,1]}$ を

$$
\mu(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{U(x - x_k)}{n},
$$

で関連付ける．ただし，

$$
U(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ 1 & (x \geq 0) \end{cases}
$$

は単位ステップ関数である．このとき，approximate D-optimal design はフィッシャー情報行列

$$
M_f(\mu) = \int_0^1 f(x) f(x)^{\mathrm{T}} \mathrm{d}\mu(x)
$$

の行列式を最大化する [0,1] 上の確率測度と定義される．つまり，以下の最適問題の最適解を approximate D-optimal design と呼ぶ．

$$
\boxed{\begin{array}{c} \text{maximize } |M_f(\mu)| \\ \text{subject to } \mu \in \mathcal{P}_{[0,1]} \end{array} \qquad (2.2)}
$$

本来なら，μ の取り得る確率の値は $1/n$ の倍数のみであるべきだが，その制約条件を取り除いてある．これが，approximate と呼ばれるゆえんである．approximate D-optimal design は，実験回数 n などには依存せず，$f(x)$ のみに依存することに注意する．本稿では，approximate D-optimal design を単に D-optimal design と呼ぶ．詳しい D-optimal design の定式化の方法などは Pukelsheim [4] や Dette and Studden [1, Section 5] などを参照されたい．

2.2 多項式回帰モデルに対する D-optimal design

多項式回帰モデルとは，線形回帰モデルにおいて $f(x) = (1, x, \ldots, x^{m-1})^{\mathrm{T}}$ とした場合である．簡単のため，多項式回帰モデルを PRM と書くことにする．モーメント $c_k = \int_0^1 x^k \mathrm{d}\mu(x)$ からなるハンケル行列式を

$$H_m(\mu) = |c_{i+j}|_{i,j=0}^{m-1} = \begin{vmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{m-1} \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m-1} & c_m & \cdots & c_{2m-2} \end{vmatrix} \tag{2.3}$$

と書くことにすると，PRM に対する D-optimal design は以下の最適問題の最適解となる．

$$\boxed{\begin{aligned} &\text{maximize } H_m(\mu) \\ &\text{subject to } \mu \in \mathcal{P}_{[0,1]}. \end{aligned} \qquad (2.4)}$$

目的関数 $H_m(\mu)$ はモーメントを用いて陽に書かれているが，実行可能領域 $\mathcal{P}_{[0,1]}$ はモーメントで書くと複雑になる．そのため，Studden [8] はカノニカルモーメントを用いて PRM に対する D-optimal design を求めた．

カノニカルモーメントの定義を紹介する．確率測度 $\mu \in \mathcal{P}_{[0,1]}$ が与えられたとき，$c_0, c_1, \ldots, c_{k-1}$ をモーメントとしてもつ $[0,1]$ 上の確率測度の中で k 次のモーメントの最大値を c_k^+，最小値を c_k^- と書くことにする．確率測度 μ のカノニカルモーメントは

$$p_k = \frac{c_k - c_k^-}{c_k^+ - c_k^-}, \quad k = 1, 2, \ldots, N, \tag{2.5}$$

で定義される．N は $c_{j+1}^- = c_{j+1}^+$ となる最小の j であり，恒に $c_k^- < c_k^+$ であるとき，$N = \infty$ とする．

カノニカルモーメントは

$$\begin{cases} p_k \in (0,1), & k = 1, 2, \ldots, N-1, \\ p_N \in \{0,1\}. \end{cases} \tag{2.6}$$

を満たし，逆に，(2.6) を満たすカノニカルモーメントが与えられたとき，対応する確率測度はただ1つ存在する．

モーメントのなすハンケル行列式を

$$H_k^{(n)} = |c_{i+j+n}|_{i,j=0}^{k-1}, \quad \overline{H}_k^{(n)} = |c_{i+j+n} - c_{i+j+n+1}|_{i,j=0}^{k-1},$$
$$k = 1, 2, \ldots, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

で定義すると，カノニカルモーメントは

$$p_{2k-1} = \frac{H_k^{(1)} \overline{H}_{k-1}^{(0)}}{H_k^{(0)} \overline{H}_{k-1}^{(1)}}, \quad p_{2k} = \frac{H_{k+1}^{(0)} \overline{H}_{k-1}^{(1)}}{H_k^{(1)} \overline{H}_k^{(0)}}, \quad k = 1, 2, \ldots. \tag{2.7}$$

と表されることが知られている．ただし，$H_0^{(n)} = 1$, $H_{-1}^{(n)} = 0$ とする．また，ζ_k を

$$\begin{aligned} &\zeta_0 = 0, \quad \zeta_1 = p_1, \\ &\zeta_k = (1 - p_{k-1}) p_k, \quad k = 2, 3, \ldots, N. \end{aligned} \tag{2.8}$$

で定義すると

$$\zeta_{2k-1} = \frac{H_k^{(1)} H_{k-1}^{(0)}}{H_k^{(0)} H_{k-1}^{(1)}}, \quad \zeta_{2k} = \frac{H_{k+1}^{(0)} H_{k-1}^{(1)}}{H_k^{(1)} H_k^{(0)}}, \quad k = 1, 2, \ldots. \tag{2.9}$$

と表される．

逆に，(2.9) から，H_m をカノニカルモーメントで書き表すと

$$\begin{aligned} H_m &= \prod_{k=1}^{m-1} (\zeta_{2k-1} \zeta_{2k})^{m-k} \\ &= \left(\prod_{j=1}^{m-1} (1 - p_{2j})^{m-j-1} p_{2j}^{m-j} \right) \prod_{j=1}^{m-1} ((1 - p_{2j-1}) p_{2j-1})^{m-j}, \end{aligned} \tag{2.10}$$

となり，PRM に対する D-optimal design のカノニカルモーメントは

$$p_{2j-1} = \frac{1}{2}, \quad p_{2j} = \frac{m-j}{2(m-j)-1}, \quad j = 1, 2, \ldots, m-1.$$

であることがわかる．

この結果は，Dette and Studden [1] に詳しくまとめられている．

3 事前情報付き多項式回帰モデルに対する D-optimal design

本章では $(m+d_1+d_2+\ldots+d_l-1)$ 次の多項式回帰モデルにおいて

$$h(\lambda_r), h'(\lambda_r), \ldots, h^{(d_r-1)}(\lambda_r), \quad 1 \le r \le l, \quad d_r \ge 0$$

が実験を行う前に事前情報として与えられた場合の D-optimal design の構成法を提案する．ただし，$h(x)=E[Y]=\theta^{\mathrm{T}}f(x)$ であり，λ_r は相異なる実数である．このモデルを簡単のため $\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ と書くことにする．$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ は，既に通常の多項式回帰モデルではないことに注意する．

$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ は，上記の条件では，線形回帰モデルとして一意に表すことができない．しかし，D-optimal design の性質を利用することで，$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ に対する D-optimal design を考えることは可能となる．このことは，3.2 節にて説明する．

$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ に対する D-optimal design を構成するにあたって，カノニカルモーメントと離散可積分系との関係が重要な役割を果たす．本章では最初にそれを説明する．

3.1 カノニカルモーメントと離散可積分系

カノニカルモーメントのハンケル行列式表示 (2.7) を見ると，離散ロトカ・ボルテラ方程式の行列式解とほとんど一致していることに気づく．つまり，$p_k^{(n)}$ を

$$p_{2k}^{(n)} = \frac{H_{k+1}^{(n)}\overline{H}_{k-1}^{(n+1)}}{H_k^{(n+1)}\overline{H}_k^{(n)}}, \quad p_{2k+1}^{(n)} = \frac{H_{k+1}^{(n+1)}\overline{H}_k^{(n)}}{H_{k+1}^{(n)}\overline{H}_k^{(n+1)}}, \quad k,n=0,1,2,\ldots$$

で定めると，離散ロトカ・ボルテラ方程式において，離散パラメータを適当に定めた式

$$p_k^{(n+1)} = \frac{1-p_{k+1}^{(n)}}{1-p_{k-1}^{(n+1)}}p_k^{(n)}, \quad k,n=0,1,\ldots$$

を満たす．ここで，$p_k^{(0)}=p_k$ はカノニカルモーメントそのものである．また，ζ_k は同様に離散戸田格子方程式と関連付けることができる．

$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ を考えるために，モーメントの線形結合で書ける量を定義する．モーメント c_k が与えられたとき，$c_k^{s,t_1,t_2,\ldots,t_l}$ を

$$\begin{aligned} c_k^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} &= c_{k+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} - \lambda_r c_k^{s,t_1,\ldots,t_l}, \quad r=1,2,\ldots,l \\ c_k^{s+1,t_1,\ldots,t_l} &= c_{k+1}^{s,t_1,\ldots,t_l}, \\ c_k^{0,0,\ldots,0} &= c_k, \end{aligned} \tag{3.1}$$

で定義する．また，$c_k^{s,t_1,t_2,\ldots,t_l}$ のハンケル行列式を

$$H_k^{s,t_1,\ldots,t_l} = \left|c_{i+j}^{s,t_1,\ldots,t_l}\right|_{i,j=0}^{k-1}$$

で定義し，$\zeta_k^{s,t_1,\ldots,t_l}$, $\xi_{r,k}^{s,t_1,\ldots,t_l}$ を

$$\begin{aligned}
\zeta_{2m}^{s,t_1,\ldots,t_l} &= \frac{H_{m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} H_{m-1}^{s+1,t_1,\ldots,t_l}}{H_m^{s+1,t_1,\ldots,t_l} H_m^{s,t_1,\ldots,t_l}}, \quad \zeta_{2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} = \frac{H_{m+1}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} H_m^{s,t_1,\ldots,t_l}}{H_{m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} H_m^{s+1,t_1,\ldots,t_l}}, \\
\xi_{r,2m}^{s,t_1,\ldots,t_l} &= \frac{H_{m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} H_{m-1}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l}}{H_m^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} H_m^{s,t_1,\ldots,t_l}}, \\
\xi_{r,2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} &= \frac{H_{m+1}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} H_m^{s,t_1,\ldots,t_l}}{H_{m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} H_m^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l}}, \quad r = 1, 2, \ldots, l
\end{aligned} \tag{3.2}$$

で定義する．$\zeta_k^{0,0,\ldots,0} = \zeta_k$ であることに注意する．(3.1) は，それぞれパラメータ $0, \lambda_1, \ldots, \lambda_l$ でのクリストッフェル変換を表しており，(3.2) は，不等間隔離散戸田格子方程式の行列式解となっている．つまり，

$$\begin{aligned}
&\zeta_{2m}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} + \zeta_{2m+1}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} = \zeta_{2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} + \zeta_{2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l}, \\
&\zeta_{2m+1}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} \zeta_{2m+2}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} = \zeta_{2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l} \zeta_{2m+3}^{s,t_1,\ldots,t_l}, \\
&\xi_{r,2m}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} + \xi_{r,2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} = \xi_{r,2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} + \xi_{r,2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l}, \\
&\xi_{r,2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} \xi_{r,2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} = \xi_{r,2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l} \xi_{r,2m+3}^{s,t_1,\ldots,t_l}, \\
&\zeta_{2m}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} + \zeta_{2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} = \xi_{r,2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} + \xi_{r,2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l} + \lambda_r, \\
&\zeta_{2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} \zeta_{2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l} = \xi_{r,2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l} \xi_{r,2m+3}^{s,t_1,\ldots,t_l}, \\
&\xi_{r,2m}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} + \xi_{r,2m+1}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} + \lambda_r = \zeta_{2m+1}^{s,t_1,\ldots,t_l} + \zeta_{2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l}, \\
&\xi_{r,2m+1}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} \xi_{r,2m+2}^{s+1,t_1,\ldots,t_l} = \zeta_{2m+2}^{s,t_1,\ldots,t_l} \zeta_{2m+3}^{s,t_1,\ldots,t_l}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

などの関係式が成り立つ．クリストッフェル変換と不等間隔離散戸田格子方程式の行列式解との関係は Nakamura [3] に詳しく書かれている．

3.2 D-optimal design の定式化

前述の通り $\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)}, \ldots, \lambda_l^{(d_l)})$ は，線形回帰モデルとして一意に表すことができない．しかし，D-optimal design は $f_0(x), f_1(x), \ldots, f_{m-1}(x)$ の張る空間のみによって決まるという性質 (Dette and Studden [1, Theorem 5.5.1]) がある．つまり，A を正則行列とし，$f(x)$ のかわりに $Af(x)$ を考えても D-optimal design は不変である．よって，$f(x)$ で特徴づけられる線形回帰モデルと $Af(x)$ で特徴づけられる線形回帰モデルを同一視することにする．すると，$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)}, \ldots, \lambda_l^{(d_l)})$ はただ 1 つの線形回帰モデルと対応付けることができ，D-optimal design を考えることができる．

では，実際に $\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)}, \ldots, \lambda_l^{(d_l)})$ に対する D-optimal design を定式化する．

Theorem 3.1. $\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ に対する *D-optimal design* は以下の最適問題の最適解となる.

$$\boxed{\begin{array}{l} \textit{maximize } H_m^{0,2d_1,\ldots,2d_l}(\mu) \\ \textit{subject to } \mu \in \mathcal{P}_{[0,1]}. \end{array} \qquad (3.4)}$$

Proof. $\Lambda(d_1,d_2,\ldots,d_l;x)$ で

$$\Lambda(d_1,d_2,\ldots,d_l;x) = (x-\lambda_1)^{d_1}(x-\lambda_2)^{d_2}\cdots(x-\lambda_l)^{d_l}$$

を表すことにし，$g_m(x)$ で通常の多項式回帰モデルの基底

$$g_m(x) = (1,x,\ldots,x^{m-1})^{\mathrm{T}}$$

を表すことにする．示すべきことは，$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ の基底が

$$\Lambda(d_1,d_2,\ldots,d_l;x)g_m(x) \tag{3.5}$$

となることである.

帰納法で示す．帰納法の仮定として，$\mathrm{PRM}_{m+1}(\lambda_1^{(d_1-1)},\lambda_2^{(d_2)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ の基底が

$$\Lambda(d_1-1,d_2,\ldots,d_l;x)g_{m+1}(x)$$

であるとする．ただし，d_1 は正整数とする．ここで，$h^{(d_1-1)}(\lambda_1)$ の値が事前情報として与えられたとき，基底が (3.5) をなることを示す.

$\mathrm{PRM}_{m+1}(\lambda_1^{(d_1-1)},\lambda_2^{(d_2)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ を基底とする線形回帰モデルは

$$Y = \theta^{\mathrm{T}}(\Lambda(d_1-1,d_2,\ldots,d_l;x)g_{m+1}(x)) + \varepsilon \tag{3.6}$$

となる．また，$h^{(d_1-1)}(\lambda_1)$ にライプニッツの法則を適応することにより

$$\begin{aligned} h^{(d_1-1)}(\lambda_1) &= \frac{\mathrm{d}^{d_1-1}}{\mathrm{d}x^{d_1-1}}\Lambda(d_1-1,d_2,\ldots,d_l;x)(\theta^{\mathrm{T}}g_{m+1}(x))\Big|_{x=\lambda_1} \\ &= \sum_{k=0}^{d_1-1} C(d_1-1,k)\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\Lambda(d_1-1,d_2,\ldots,d_l;x)\frac{\mathrm{d}^{d_1-1-k}}{\mathrm{d}x^{d_1-1-k}}(\theta^{\mathrm{T}}g_{m+1}(x))\Big|_{x=\lambda_1} \\ &= \mathrm{const.}\times\theta^{\mathrm{T}}g_{m+1}(\lambda_1). \end{aligned}$$

となり，最終的に

$$\theta_0 = \mathrm{const.} - \theta_1\lambda_1 - \theta_2\lambda_1^2 - \cdots - \theta_m\lambda_1^m$$

を得る．const. は $h^{(d_1-1)}(\lambda_1)$ の値から計算できる定数である．これを，(3.6) に代入すると

$$Y - \text{const.} = \Lambda(d_1-1, d_2, \ldots, d_l; x)(\theta_1(x-\lambda_1) + \cdots + \theta_m(x^m - \lambda_1^m)) + \varepsilon$$

となるが，実験により得られた y_i から $y_i - \text{const.}$ は容易に計算可能であり，これは

$$Y = \Lambda(d_1-1, d_2, \ldots, d_l; x)(\theta_1(x-\lambda_1) + \cdots + \theta_m(x^m - \lambda_1^m)) + \varepsilon \tag{3.7}$$

と本質的に同じモデルである．

線形回帰モデル (3.7) の基底は

$$f(x) = \Lambda(d_1-1, d_2, \ldots, d_l; x)(x-\lambda_1, x^2-\lambda_1^2, \ldots, x^m-\lambda_1^m)^{\mathrm{T}}$$

であるが，正則行列 A を

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\lambda_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\lambda_1 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & -\lambda_1 & 1 \end{pmatrix}$$

で定義すると

$$Af(x) = \Lambda(d_1-1, d_2, \ldots, d_l; x)(x-\lambda_1)g_m(x) = \Lambda(d_1, d_2, \ldots, d_l; x)g_m(x).$$

となる．これは (3.5) と一致しており，示すべきことであった．

□

3.3 *D*-optimal design の構成法

本節では，目的関数 $H_m^{0,2d_1,\ldots,2d_l}(\mu)$ をカノニカルモーメントを用いて表すアルゴリズムを提案する．

最初に，目的関数 $H_m^{0,2d_1,\ldots,2d_l}(\mu)$ を不等間隔離散戸田格子方程式の行列式解 $\zeta_k^{s,t_1,\ldots,t_l}$, $\xi_{r,k}^{s,t_1,\ldots,t_l}$ を用いて書き下す．これは，(2.10) とほぼ同様に

$$\begin{aligned} H_m^{s,t_1,\ldots,t_l} &= (c_0^{s,t_1,\ldots,t_l})^m \prod_{k=1}^{m-1} (\zeta_{2k-1}^{s,t_1,\ldots,t_l} \zeta_{2k}^{s,t_1,\ldots,t_l})^{m-k} \\ &= (c_0^{s,t_1,\ldots,t_l})^m \prod_{k=1}^{m-1} (\xi_{r,2k-1}^{s,t_1,\ldots,t_l} \xi_{r,2k}^{s,t_1,\ldots,t_l})^{m-k}, \quad 1 \le r \le l \end{aligned} \tag{3.8}$$

が成り立つ．

次に，$\zeta_k^{s,t_1,\ldots,t_l}$，$\xi_{r,k}^{s,t_1,\ldots,t_l}$ を不等間隔離散戸田格子方程式 (3.3) を用いて $\zeta_k^{0,0,\ldots,0}$ で書きなおす．また，$c_0^{s,t_1,\ldots,t_l}$，$c_0^{s,t_1,\ldots,t_l}$ についても

$$\zeta_1^{s,t_1,\ldots,t_l} = \frac{c_0^{s+1,t_1,\ldots,t_l}}{c_0^{s,t_1,\ldots,t_l}}, \quad \xi_{r,1}^{s,t_1,\ldots,t_l} = \frac{c_0^{s,t_1,\ldots,t_r+1,\ldots,t_l}}{c_0^{s,t_1,\ldots,t_l}} \tag{3.9}$$

を用いて $\zeta_k^{0,0,\ldots,0}$ で書きなおす．(3.9) は (3.2) より得られる．

最後に，$\zeta_k^{0,0,\ldots,0} = \zeta_k$ を (2.8) を用いてカノニカルモーメント p_k で書きなおす．

その後，目的関数 $H_m^{0,2d_1,\ldots,2d_l}(\mu)$ を最大化するカノニカルモーメントを何らかの方法で計算する必要があるが，以上をまとめると，$\mathrm{PRM}_m(\lambda_1^{(d_1)},\ldots,\lambda_l^{(d_l)})$ に対する D-optimal design の構成するためのアルゴリズムは以下のようになる．

1) (3.8) を用いて，目的関数 $H_m^{0,2d_1,\ldots,2d_l}(\mu)$ を不等間隔離散戸田方程式の変数 $\zeta_k^{s,t_1,\ldots,t_l}$，$\xi_{r,k}^{s,t_1,\ldots,t_l}$ を用いて書き下す．
2) 不等間隔離散戸田方程式 (3.3) および (3.9) を用いて，目的関数を $\zeta_k^{0,0,\ldots,0}$ のみを使って書きなおす．
3) (2.8) を用いて，目的関数をカノニカルモーメント p_k のみを使って書きなおす．
4) 目的関数を最大化するカノニカルモーメントを求める．

References

[1] H. Dette, W. Studden, *The Theory of Canonical Moments with Applications in Statistics, Probability and Analysis*, Wiley, New York, 1997.

[2] J. C. Kiefer, Optimum Experimental Designs, *J. Roy. Stat. Soc. Ser. B*, **21**, No. 2, (1959), pp. 272–319.

[3] Y. Nakamura, *Functional Mathematics for Integrable Systems* (in Japanese), Kyoritsu Publishing Co., Tokyo, 2006. (中村佳正, 可積分系の機能数理, 共立出版, 2006.)

[4] F. Pukelsheim, *Optimal Design of Experiments*, Wiley, New York, 1993.

[5] M. Skibinsky, The range of the $(n+1)$th moment for distributions on $[0,1]$, *J. Appl. Prob.*, **4**, No. 3, (1967), 543–552.

[6] M. Skibinsky, Extreme nth moments for distributions on $[0,1]$ and the inverse of a moment space map, *J. Appl. Prob.*, **5**, No. 3, (1968), 693–701.

[7] M. Skibinsky, Some striking properties of binomial and beta moments, *Ann. Math. Stat.*, **40**, No. 5 (1969), pp.1753–1764.

[8] W. J. Studden, D_s-optimal designs for polynomial regression using continued fractions, *Ann. Stat.*, **8**, No. 5, (1980), 1132–1141.