数理解析研究所講究録
第 1844 巻 2013 年 23-38

最適計画の構成法とその関連した話題

東京女子大学・現代教養学部　平尾　将剛*
Masatake Hirao
Department of Mathematics, School of Arts and Sciences,
Tokyo Woman's Christian University
名古屋大学大学院・情報科学研究科　澤　正憲
Masanori Sawa
Graduate School of Information and Science, Nagoya University
名古屋大学大学院・情報科学研究科　神保　雅一
Masakazu Jimbo
Graduate School of Information and Science, Nagoya University

概要

本論文では球上での実験計画の構成法を考察する．実験計画法とは，実験対象の特徴を上手く抽出するために，どのような観測値を取れば良いかを与える方法である．特にここでは実験領域を球に限定し，3 次の Φ_p 最適性を持つ回転可能計画を代数的方法及び組合せ論的方法から構成する．

キーワード: 実験計画法，最適計画，回転可能計画，cubature 公式，Euclid 空間上のデザイン

1　序

本論文で考察の対象とするのは**実験計画**の構成法である．実験計画法とは，統計的データ解析を行なう上で実験対象の特徴を的確に捉えた観測値を得るための方法の一つである．特に本論文では n 次元実ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ 上の n 次直交群 $O(\mathbb{R}^n)$ の作用で不変な領域 Ω 上での実験計画に焦点を絞る．これは例えば大変大袈裟だが，地球上を取り巻く二酸化炭素濃度を計り知りたい場合は 2 次元単位球面 $S^2=\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3 \mid \|\boldsymbol{x}\|^2=1\}$，地球内部の温度を計り知りたい場合は 3 次元単位球 $B^3=\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3 \mid \|\boldsymbol{x}\|\leq 1\}$ をそれぞれ**実験領域**と考え，これらを統一的に扱いたいがためである．

[1]〒 167-8585 東京都杉並区善福寺 2-6-1 東京女子大学現代教養学部数理科学科
e-mail: hirao@lab.twcu.ac.jp

さて，実験対象の特徴を巧く捉えたデータを集めるにはどうすれば良いのだろうか．例えば，先ほどの例を用い考えてみると地球上の二酸化炭素濃度を知りたいのに，日本だけにおいて観測値を取ってみても，それは偏った観測値であることは明白であるだろう．そこで問題はどこで観測すれば良いかである．直感的にはその観測場所は実験領域上に均等に配置されるのが良いのではないかと推測されるだろう．後述するが，実はこの観測問題はある**ユークリッド空間上のデザイン**として実現される．すなわち，ある多重同心球面上の **cubature 公式**から実現されるのである．Cubature 公式とは積分の値を離散集合上での被積分関数の重み付き平均をとることによって表す積分近似公式の一つである．このことはまさに有限箇所での観測を持って全体を巧く推定できるということに対応しているように見えないだろうか．

話を更に簡単にするために，実験領域を n 次元球

$$B^n = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{x}\| \leq 1\}$$

に限定し，以下で与える多項式回帰モデルに基づきデータ解析を行なうことを考える．$\mathcal{P}_t(B^n)$ を高々t 次の多項式空間を B^n に制限した空間，$N = \dim(\mathcal{P}_t(B^n)) = \binom{n+t}{t}$ とおき，$f_1, f_2, \ldots, f_N$ を $\mathcal{P}_t(B^n)$ の基底とする[1]．このとき，B^n 上の多項式回帰モデルを次式で与える．

$$Y(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\theta} \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}) + \epsilon(\boldsymbol{x}). \tag{1.1}$$

ただし，基底を並べたベクトルを $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_N)$ 未知パラメータを並べたベクトルを $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_N)$ とする．また $\epsilon(\boldsymbol{x})$ を各点 $\boldsymbol{x} \in B^n$ における観測誤差とし，各点 $\boldsymbol{x} \in B^n$ において独立で，期待値，分散がそれぞれ

$$E[\epsilon(\boldsymbol{x})] = 0, \quad E[\epsilon(\boldsymbol{x})\epsilon(\boldsymbol{y})] = \begin{cases} \sigma^2 & \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \\ 0 & \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{y} \end{cases}$$

を満たす確率変数とする．

ここで B^n 上の確率測度 ξ を**計画**と呼ぶ．例えば，計画が離散測度 $\xi(\boldsymbol{x}) = m^{-1} \sum_{i=1}^m \delta_{\boldsymbol{x}_i}(\boldsymbol{x})$ で与えられる場合[2]，これは各 $\boldsymbol{x}_i$ において均等に観測することを表している．このように計画 ξ の台は実験する場所を表し，そこでの重みは総実験回数に対する各地点での実験回数の割合を表していると解釈できる．したがって，特に有理数重みの計画が重要であることが Neumaier-Seidel [23] にも明記されている．後述するように**情報行列**

$$\mathbf{M}(\xi) = \int_{\boldsymbol{x} \in B^n} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})' \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) d\xi(\boldsymbol{x}).$$

が未知パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の推定を行う際に重要となる．$\boldsymbol{\theta}$ が推定可能であるためには，$\mathbf{M}(\xi)$ が正定値行列となるように ξ を制限する必要がある．このとき，多項式空間上の双一次形式

$$\langle f, g \rangle_\xi = \int_{\boldsymbol{x} \in B^n} f(\boldsymbol{x}) g(\boldsymbol{x}) d\xi(\boldsymbol{x})$$

は自然に $\mathcal{P}_t(B^n)$ 上の内積を定める．このように内積を定める ξ を **t 次の計画**と呼ぶ [23]．

---

[1] 次節で我々が採用した基底の取り方について述べる．

[2] $\delta_{\boldsymbol{x}_i}$ は点 $\boldsymbol{x}_i$ におけるディラック測度とする．

統計的データ解析の目的の一つは観測地点 $\boldsymbol{x}$ とその応答 $Y(\boldsymbol{x})$ の関係を上手く表すことである．そこで本論文ではその方法の一つとして未知パラメータの推定精度を上げるような統計的基準を満たす計画を構成することを考えたい．多くの場合，最適性基準は情報行列 $\mathbf{M}(\xi)$ の固有値を用い表されることが多い[3]．実験計画法において良く用いられる最適性基準として情報行列の逆行列を最小化する **D 最適性基準**，情報行列の逆行列のトレースを最小化する **A 最適性基準**，そして情報行列の最小固有値を最大化する **E 最適性基準**がある．ここではこれらの最適性基準を統一的に扱うため，Kiefer [19] により提案された Φ_p 最適性基準を紹介する．$\lambda_1(\xi),\ldots,\lambda_N(\xi)$ を情報行列 $\mathbf{M}(\xi)$ の固有値とし，最適性関数 Φ_p を次で定義する[4]．

$$\begin{aligned}
\Phi_p(\xi) &= \left(N^{-1}\mathrm{tr}(\mathbf{M}^{-p}(\xi))\right)^{1/p} = \left(N^{-1}\sum_{i=1}^{N}\lambda_i^{-p}(\xi)\right)^{1/p}, \quad 0<p<\infty,\\
\Phi_0(\xi) &= \lim_{p\to+0}\Phi_p(\xi) = \left(\det\mathbf{M}^{-1}(\xi)\right)^{1/N},\\
\Phi_\infty(\xi) &= \lim_{p\to+\infty}\Phi_p(\xi) = \max_{1\le i\le N}\lambda_i^{-1}(\xi).
\end{aligned}$$

定義から明らかなように $\Phi_0,\Phi_1,\Phi_\infty$ はそれぞれ D, A, E 最適性基準と同値である．Φ_p-最適性基準に関しては，例えば，[11, 12] とその参考文献も参照して欲しい．

t 次の計画 ξ の中で $\Phi_p(\xi)$ が最小となる ξ を **t 次の Φ_p-最適計画**という．また計画 ξ が**回転可能**であるとは，

$$\mathbf{M}(\xi)=\mathbf{M}(\xi\circ\gamma), \quad \forall\gamma\in O(\mathbb{R}^n)$$

を満たすときをいう[5]．

Galil-Kiefer の一連の研究 [11, 12] において良く知られているように，回転可能性を持つ Φ_p 最適計画は多重同心球面上に台を持つことが知られている[6]．そこで本論文では**最適計画を探すクラスを回転可能計画に制限**し，多重同心球面上の連続な最適計画 [7]から離散的な最適計画の構成法を与える．

離散的な Φ_p 最適計画の存在及び構成法に関する先行研究の多くは 2 次回帰モデルの場合に集中しており，Farrell et al. [10]，Pesotchinsky [25] などの多くの顕著な成果が発表されている．また，3 次以上の回帰モデルに対する Φ_p 最適計画に関する結果の多くは低次元に限定されたものでしかない [9, 16]．これを受け，本論文では一般次元における 3 次 の Φ_p 最適性を持つ離散的な回転可能計画の構成法を与える．そのため，Neumaier-Seidel [22] により定義された離散的な回転可能計画の一般化であるユークリッド空間上のデザインに焦点を当てる．

以下，本論文では次節を構成法のための準備の節とし，モデル (1.1) の詳細を説明，さらに連続型の 3 次の Φ_p 最適性を持つ回転可能計画の特徴付けを行なう．3 節において代数的方法，組合せ論的方法による構成法を与え，実際にその数値計算結果を最後の補遺で紹介する．

[3]多項式回帰モデルに対する最適計画の理論は K. Smith の 1918 年の論文 [27] まで遡るとのことだが私自身は未見である．

[4]情報行列 $\mathbf{M}(\xi)$ の対角化行列 P に対し，$M^{-p}(\xi)=P^{-1}\mathrm{diag}(m_1^{-p},\ldots,m_N^{-p}(\xi))P$ と置く．

[5]Box-Hunter [6] による同値な定義も知られている．また，Kiefer [18] も参照されたい．

[6]例えば，[8, 17, 23] も参照されたい．

[7]勿論，正確には最適回転可能計画だが，このことを単に最適計画と呼ぶことにする．Galil-Kiefer [11] に依れば，実務上この制限は問題無いとのことである．

2 準備

2.1 多項式回帰モデルと最小二乗法

我々は論文 [15] において，単位球 B^n 上の多項式回帰モデル $Y(\boldsymbol{x})$ を，Zernike 多項式型の基底を採用し構成した．この特殊な基底は球面上の調和多項式と深く関与しており，直交群 $O(\mathbb{R}^n)$ の作用で不変な実験領域上の計画との相性が良い．詳細は Dette et al. [8], Bannai-Bannai [3], Neumaier-Seidel [23] を参照されたい．

さて，モデルの設定に戻る．$\mathrm{Harm}_l(\mathbb{R}^n)$ を l 次の斉次調和多項式空間とし，$N_l = \dim(\mathrm{Harm}_l(\mathbb{R}^n))$ とする[8]．ここで単位球面 $S_1 = S_1^{n-1} = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n-1} \mid \|\boldsymbol{x}\| = 1\}$ 上での測度を $\rho = \rho_1$ とし，$|S_1| = \int_{S_1} d\rho(\boldsymbol{x})$ とする．さらに $\phi_{l,i}, i = 1, \ldots, N_l$ を $\mathrm{Harm}_l(\mathbb{R}^n)$ の正規直交基底とする．すなわち，

$$\frac{1}{|S_1|}\int_{\boldsymbol{x}\in S_1} \phi_{l,i_1}(\boldsymbol{x})\phi_{l,i_2}(\boldsymbol{x})d\rho(\boldsymbol{x}) = \delta_{i_1,i_2}$$

を満たす．ここで $\delta_{i,j}$ はクロネッカーの記号である．

例えば，良く知られたように（[2, 3, 23]），

$$\mathcal{B}_t(\mathbb{R}^n) = \left\{\|\boldsymbol{x}\|^{2j}\phi_{l,i}(\boldsymbol{x}) \mid 0 \le l \le t, 0 \le j \le \left\lfloor\frac{t-l}{2}\right\rfloor, 1 \le i \le N_l\right\}$$

は多項式空間 $\mathcal{P}_t(\mathbb{R}^n)$ の基底である．そこでこの基底を用いると，未知パラメータ $\{\theta_{i,j,l}\}$ に対し，我々のモデルは次のように表すことができる．

$$Y(\boldsymbol{x}) = \sum_{l=0}^{t}\sum_{j=0}^{\lfloor\frac{t-l}{2}\rfloor}\sum_{i=1}^{N_l}\theta_{i,j,l}\|\boldsymbol{x}\|^{2j}\phi_{l,i}(\boldsymbol{x}) + \epsilon(\boldsymbol{x}).$$

未知パラメータの推定値は最小二乗法により求める．すなわち，未知パラメータの推定値は次式を最小にするように決定する．

$$\int_{\boldsymbol{x}\in B^n}\left(Y(\boldsymbol{x}) - \sum_{l=0}^{t}\sum_{j=0}^{\lfloor\frac{t-l}{2}\rfloor}\sum_{i=1}^{N_l}\theta_{i,j,l}\|\boldsymbol{x}\|^{2j}\phi_{l,i}(\boldsymbol{x})\right)^2 d\xi(\boldsymbol{x}).$$

一般に実験領域 Ω 上の計画 ξ に対して，未知パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の最小二乗推定量は

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(\int_{\boldsymbol{x}\in\Omega} Y(\boldsymbol{x})\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})d\xi(\boldsymbol{x})\right)\mathbf{M}^{-1}(\xi)$$

で与えられる．また我々の観測誤差 $\epsilon(\boldsymbol{x})$ の仮定の下では容易に $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は不偏推定量であること，すなわち，$E[\hat{\boldsymbol{\theta}}] = \boldsymbol{\theta}$ であることが分かる．さらに計画が $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ 上の一様な離散測度 $\xi(\boldsymbol{x}) = m^{-1}\sum_{i=1}^{m}\delta_{\boldsymbol{x}_i}(\boldsymbol{x})$ で与えられるとき，推定量のばらつきを表す $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ の分散・共分散行列は

$$V(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{\sigma^2}{m}\mathbf{M}^{-1}(\xi)$$

[8]最初の幾つかを具体的に書き出すと，$N_0 = 1$, $N_1 = n$, $N_2 = \frac{1}{2}(n-1)(n+2)$, $N_3 = \frac{1}{6}(n-1)n(n+4)$ である．

であることも分かる．ここでは省略するが，各点に対して有理数重みを持つ計画に対しては，$V(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ は情報行列 $\mathbf{M}(\xi)$ の逆行列によって表される．また，計画が連続的な場合においては，後述する **Tchakaloff の定理**より，同じ性質を持つ離散型の計画を（また，有理数重みを持つ計画を近似する計画を）構成することができる．そこで，先に紹介した Φ_p 最適性基準はこの推定量の**ばらつき** $V(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ **を** p **毎それぞれの意味で小さくするもの**であることに注意されたい．

2.2 回転可能計画と $O(\mathbb{R}^n)$ 不変計画

計画 ξ に対して，

$$\int_{\gamma\in O(\mathbb{R}^n)} \xi\circ\gamma d\gamma,$$

を $O(\mathbb{R}^n)$ **不変計画**という，また明らかに $O(\mathbb{R}^n)$ 不変計画は回転可能計画である．

ここで先と同様に半径 r の $(n-1)$ 次元球面

$$S_r = S_r^{n-1} = \{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{x}\| = r\}$$

上での測度を ρ_r とし，$|S_r| = \int_{S_r} d\rho_r(\boldsymbol{x})$ とする[9]．このとき，$O(\mathbb{R}^n)$ 不変計画 $\bar{\xi}$ は次のように表されることが知られている [17, 18, 23].

$$\bar{\xi}(A) = \int_0^1 \rho(r^{-1}(A\cap S_r))\tau(dr), \quad \forall A\in\mathcal{B}(B^n).$$

ここで $\rho=\rho_1$，τ は区間 $[0,1]$ 上の確率測度，そして $\mathcal{B}(B^n)$ は B^n のボレル可測集合である．このとき，次の定理から $O(\mathbb{R}^n)$ 不変計画は有限個の多重同心球面上に台を持つことがわかる．

定理 2.1 ([23]). $\bar{\xi}$ を B^n 上の t 次の $O(\mathbb{R}^n)$ 不変計画であるとする．このとき，

$$\int_{\boldsymbol{x}\in B^n} f(\boldsymbol{x})d\bar{\xi}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{\lfloor t/2\rfloor+1} \frac{W_i}{|S_{r_i}|}\int_{\boldsymbol{x}\in S_{r_i}} f(\boldsymbol{x})d\rho_{r_i}(\boldsymbol{x}), \qquad \sum_{i=1}^{\lfloor t/2\rfloor+1} W_i = 1$$

を満たす正の実数 r_i, W_i が存在する．

詳細は省略するが[10]，**Kiefer の最適性における一般同値命題** [19] を用いることにより，同心球面の半径に関して更なる情報を得ることができる．

定理 2.2. ξ^* を B^n 上の 3 次の Φ_p 最適な $O(\mathbb{R}^n)$ 不変計画であるとする．このとき，ξ^* は次のように表すことができる．

$$\int_{x\in B^n} f(\boldsymbol{x})d\xi^*(\boldsymbol{x}) = \frac{1-W}{|S_1|}\int_{\boldsymbol{x}\in S_1} f(\boldsymbol{x})d\rho(\boldsymbol{x}) + \frac{W}{|S_r|}\int_{\boldsymbol{x}\in S_r} f(\boldsymbol{x})d\rho_r(\boldsymbol{x}),$$

ただし，r, W はそれぞれ $0<r<1$, $0<W<1$ を満たす実数である．

---

[9] $r=0$ のときは便宜的に $\frac{1}{|S_r|}\int_{\boldsymbol{x}\in S_r} f(\boldsymbol{x})d\rho_r(\boldsymbol{x}) = f(0)$ とする．

[10] 例えば，Pukelsheim [26] を参照されたい．

この定理より3次のΦ_p最適な$O(\mathbb{R}^n)$不変計画は2つの異なる球面を台に持つことが分かるが，そのうち一方の半径は必ず1になり，他方の半径rは区間$(0,1)$のいずれかの値をとる．測度の不変性から，$O(\mathbb{R}^n)$不変計画の情報行列の固有値はrとWの2変数関数となり，それ故にΦ_p関数もまたrとWの2変数関数として記述されることが分かる．こうしてrとWの関数としてΦ_p関数の極値を求めれば，Φ_p関数の最小値，すなわち，Φ_p最適性を持つ$O(\mathbb{R}^n)$不変計画を決定することができる[11]．具体的な計算結果については補遺で紹介する．

2.3 ユークリッド空間上の最適デザインとその構成点数

最適計画を実際に応用する場合には連続測度としての実験計画を離散測度で近似することが重要である．こうして最適計画の理論とcubature公式の理論が自然に結びつき，さらに定理2.2から多重同心球面上の積分に対するcubature公式，すなわち，ユークリッド空間上のデザインが必要となる．そこで先ず始めに定義から復習する．

Xを$\mathbb{R}^n$の有限部分集合とし，wをX上の正値重み関数とする．Xの動径集合を$\{\|\boldsymbol{x}\| \mid \boldsymbol{x} \in X\} = \{r_1, \ldots, r_q\}, r_1 > \cdots > r_q$，とし，$X_i = X \cap S_{r_i}, W_i = \sum_{\boldsymbol{x}\in X_i} w(\boldsymbol{x})$，そして，$S = \cup_{i=1}^q S_{r_i}$とする．

定義 2.3. (X, w)を重み付き有限集合であるとする．任意の$f \in \mathcal{P}_t(\mathbb{R}^n)$に対して，

$$\sum_{i=1}^{q} \frac{W_i}{|S_{r_i}|} \int_{\boldsymbol{x}\in S_{r_i}} f(\boldsymbol{x}) d\rho_{r_i}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{x}\in X} w(\boldsymbol{x}) f(\boldsymbol{x})$$

が成り立つとき，(X, w)をq重同心球面S上のt-デザインという．

定義 2.4. (X, w)をq重同心球面上の$2t$-デザインであるとする．B^n上のΦ_p最適性を持つt次の$O(\mathbb{R}^n)$不変計画が存在し，任意の$f \in \mathcal{P}_{2t}(\mathbb{R}^n)$に対して，

$$\int_{\boldsymbol{x}\in B^n} f(\boldsymbol{x}) d\xi^*(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{q} \frac{W_i}{|S_{r_i}|} \int_{\boldsymbol{x}\in S_{r_i}} f(\boldsymbol{x}) d\rho_{r_i}(\boldsymbol{x})$$

が成り立つとき，(X, w)をΦ_p最適性を持つB^n上の$2t$-デザインという．

ここでΦ_p最適性を持つ離散的計画を構成するために必要な点の個数について述べる．Tchakaloff [29] はΦ_p最適性を持つB^n上の$2t$-デザインXで$\lfloor t/2 \rfloor + 1$重同心球面上に台を持つもので

$$|X| \leq \binom{n+2t}{2t} (= \dim \mathcal{P}_{2t}(\mathbb{R}^n)) \tag{2.1}$$

を満たすものが存在することを示した[12]．また，同様の主張がD最適性基準の場合にNeumaier-Seidel [23] によって示されている．

[11] 我々が2.1節で定義したようにZernike多項式型の基底を採用した理由の一つは，Φ_p関数の極値の計算が他の場合と比べて若干容易だからである．

[12] Tchakaloff [29] の元々の主張はΦ_p最適性を考慮していないことに注意する．

与えられた正整数 t に対して，Φ_p 最適性を持つ B^n 上の $2t$-デザインがどれだけ少ない点の個数で構成できるかは自然な問題である．次の不等式はフィッシャー型の下界としてよく知られたものである [4, 7].

$$|X| \geq \binom{n+t}{t} (= \dim \mathcal{P}_t(\mathbb{R}^n)). \tag{2.2}$$

この下界は統計的には次のような意味を持つ：今，我々の考えているモデル (1.1) は $N\ (= \binom{n+t}{t})$ 個の未知パラメータ達 $\boldsymbol{\theta}$ を持つので，もしこれらの未知パラメータを推定するためには，我々は少なくとも N 個のデータが無ければならない．

(2.1)，(2.2) から Φ_p 最適性を持つ B^n 上の $2t$-デザイン X に対して次の評価式が成り立つ．

$$\binom{n+t}{t} \leq |X| \leq \binom{n+2t}{2t}.$$

次章において，上の不等式を満たすようなデザインの構成法を与える[13].

3 最適デザインの構成法

3.1 不変式論

G を n 次直交群 $O(\mathbb{R}^n)$ の部分群とする．$f \in \mathcal{P}_t(\mathbb{R}^n)$ に対して，$\gamma \in G$ の f への作用を

$$(\gamma f)(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}^{\gamma^{-1}}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n,$$

で定める．任意の $\gamma \in G$ に対して $\gamma f = f$ を満たす多項式は G 不変であるという．$\mathcal{P}_t(\mathbb{R}^n)$, $\mathrm{Harm}_t(\mathbb{R}^n)$ の G 不変多項式からなる部分空間をそれぞれ $\mathcal{P}_t(\mathbb{R}^n)^G, \mathrm{Harm}_t(\mathbb{R}^n)^G$ と表す．

ユークリッド空間上のデザイン (X, w) は次の条件 (i), (ii) を満たすとき，G **不変である**という．

(i) X は G-軌道 $\boldsymbol{x}_1^G, \boldsymbol{x}_2^G, \ldots, \boldsymbol{x}_M^G$ の和集合で表される．

(ii) 各軌道 $\boldsymbol{x}_i^G$ 及び $\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}' \in \boldsymbol{x}_i^G$ に対して，$w(\boldsymbol{y}) = w(\boldsymbol{y}')$.

次は Sobolev の定理 [28] として知られている．

定理 3.1 ([28])**.** G を $O(\mathbb{R}^n)$ の部分群とする．このとき，次は同値である．

(i) 球面上の t-デザイン (X, w) が G 不変である．

(ii) 任意の $1 \leq l \leq t$，$\phi \in \mathrm{Harm}_l(\mathbb{R}^n)^G$ に対して，$\sum_{\boldsymbol{x} \in X} w(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x}) = 0$.

野崎-澤 [24] により，Sobolev の定理は多重同心球面上のデザインに対して拡張された．

[13] 推定精度は観測数が多ければ多いだけ良くなる．実務上，低次元・低次数における実験計画が用いられることが多いが，そのような場合，**誤差の自由度**が最低限 5 以上であることが必要だと経験的に知られているとのことである．ここで誤差の自由度とは，(観測数)−(パラメータ数) で与えられる量である．

定理 3.2 ([24]). G を $O(\mathbb{R}^n)$ の部分群，$X = \cup_{k=1}^{M} r_k \boldsymbol{x}_k^G$ とする．ただし，$\boldsymbol{x}_k \in S_1$，$r_k > 0$ とする．このとき次は同値である．

(i) (X, w) はユークリッド空間上の G 不変 t-デザインである．

(ii) 任意の $1 \le l \le t, 0 \le j \le \lfloor \frac{t-l}{2} \rfloor$，$\varphi \in \mathrm{Harm}_l(\mathbb{R}^n)^G$ に対して，$\sum_{\boldsymbol{x} \in X} w(\boldsymbol{x}) \|\boldsymbol{x}\|^{2j} \varphi(\boldsymbol{x}) = 0$.

以下，G を既約鏡映群とする．そのような鏡映群は完全に分類されることが知られている [5]. 整数 $1 = d_1 \le d_2 \le \cdots \le d_n$ を G の exponent とする．

定理 3.3 ([13]). $q_i = \dim(\mathrm{Harm}_i(\mathbb{R}^n)^G)$ とする．このとき次が成り立つ：

$$\sum_{i=0}^{\infty} q_i \lambda^i = \prod_{i=2}^{n} \frac{1}{1 - \lambda^{1+d_i}}.$$

次節において，B 型ワイル群 $\mathcal{B}_n$ に対して不変なユークリッド空間上の最適性を持つデザインの構成法を与える．$\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ を $\mathbb{R}^n$ の標準基底とする．$\mathcal{B}_n$ の基本ルートは $\alpha_i := \boldsymbol{e}_i - \boldsymbol{e}_{i+1}$, $1 \le i \le n-1$, $\alpha_n := \sqrt{2}\boldsymbol{e}_n$ で与えられることに注意する [5].

G の基本ルート $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ に対して，ベクトル $\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \ldots, \boldsymbol{z}_n$ を

$$\boldsymbol{z}_i \perp \alpha_j \Longleftrightarrow i \neq j$$

により定める．$\boldsymbol{z}_i$ 達は **corner vector** と呼ばれる．

Sobolev の定理に基づいてユークリッド空間上のデザインを構成するためには，どのような群及び起点に着目するかが重要である．古典的な手法として超八面体群と超八面体の頂点達に着目する**超八面体法**が知られている．次の Bajnok の定理は超八面体法から得られる t-デザインの t の上限を与える [1].

定理 3.4 (Bajnok の定理). 任意の自然数 $n \ge 3$ に対して，超八面体法から得られる S^{n-1} 上の t-デザインの t の上界は高々7 である．

ここで $\boldsymbol{z}_k = k^{-1/2} \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{e}_i$ とし，$\mathcal{X}(\mathcal{B}_n, J) = \bigcup_{k \in J} r_k \boldsymbol{z}_k^{\mathcal{B}_n}$ とする．ただし，$r_k > 0$, $J \subset \{1, 2, \ldots, n\}$ とする[14]

ここで 2 重同心球面 $S_1 \cup S_r$, $(0 < r < 1)$ 上の $\mathcal{B}_n$ 不変な 6-デザイン $(\mathcal{X}(\mathcal{B}_n, J), w)$ について考察する．

$$X_1 = \bigcup_{k \in J \setminus \tilde{J}} \boldsymbol{z}_k^{\mathcal{B}_n}, \quad X_2 = \bigcup_{k \in \tilde{J}} r \boldsymbol{z}_k^{\mathcal{B}_n},$$

とする．ただし $\tilde{J} \subset J$ とする．次の命題は次節で与えるデザインの構成に対して重要である．

[14] ここでは J の元に重複を許すとする．また，$|\mathcal{X}(\mathcal{B}_n, J)| = \sum_{k \in J} 2^k \binom{n}{k}$ が成り立つ．

命題 3.5. 上の設定の下で $(X_1 \cup X_2, w)$ は $\mathcal{B}_n$ 不変な 6-デザインであると仮定する．このとき次の等式が成り立つ．

$$0 = \sum_{k\in J\setminus\tilde{J}} w_k \frac{2^{k+1}}{k^2}\binom{n-1}{k-1}\left(1-3\frac{k-1}{n-1}\right) = \sum_{k\in\tilde{J}} v_k \frac{2^{k+1}}{k^2}\binom{n-1}{k-1}\left(1-3\frac{k-1}{n-1}\right), \tag{3.1}$$

$$\begin{aligned} 0 = &\sum_{k\in J\setminus\tilde{J}} 3w_k \frac{2^{k+1}}{k^3}\binom{n-1}{k-1}\left(1-15\frac{k-1}{n-1}+30\frac{(k-1)(k-2)}{(n-1)(n-2)}\right) \\ &+\sum_{k\in\tilde{J}} 3v_k r^6 \frac{2^{k+1}}{k^3}\binom{n-1}{k-1}\left(1-15\frac{k-1}{n-1}+30\frac{(k-1)(k-2)}{(n-1)(n-2)}\right), \end{aligned} \tag{3.2}$$

$$W = 1 - \sum_{k\in J\setminus\tilde{J}} w_k 2^k \binom{n}{k} = \sum_{k\in\tilde{J}} v_k 2^k \binom{n}{k}, \tag{3.3}$$

ただし，$w(\boldsymbol{x}) = w_k, k \in J\setminus\tilde{J}$, $w(\boldsymbol{x}) = v_k, k\in\tilde{J}$ とする．

証明: 対称群 $\mathcal{S}_n$ に対して，

$$\mathrm{sym}(f) := \frac{1}{|(\mathcal{S}_n)_f|}\sum_{g\in\mathcal{S}_n} f(\boldsymbol{x}^g)$$

とし，$(\mathcal{S}_n)_f := \{g\in\mathcal{S}_n \mid f(\boldsymbol{x}^g) = f(\boldsymbol{x})\}$ とする．定理 3.3 より，$\dim(\mathrm{Harm}_2(\mathbb{R}^n)^{\mathcal{B}_n}) = 0$, $\dim(\mathrm{Harm}_4(\mathbb{R}^n)^{\mathcal{B}_n}) = 1$，そして

$$\dim(\mathrm{Harm}_6(\mathbb{R}^n)^{\mathcal{B}_n}) = \begin{cases} 1 & n\geq 3; \\ 0 & n=2 \end{cases}$$

が成り立つ．すなわち，$\mathrm{Harm}_4(\mathbb{R}^n)^{\mathcal{B}_n}, \mathrm{Harm}_6(\mathbb{R}^n)^{\mathcal{B}_n}$ はそれぞれ次の f_4, f_6 から張られる空間である：

$$f_4(\boldsymbol{x}) := \mathrm{sym}(x_1^4) - \frac{6}{n-1}\mathrm{sym}(x_1^2x_2^2),$$

$$f_6(\boldsymbol{x}) := \mathrm{sym}(x_1^6) - \frac{15}{n-1}\mathrm{sym}(x_1^2x_2^4) + \frac{180}{(n-1)(n-2)}\mathrm{sym}(x_1^2x_2^2x_3^2), \quad n\geq 3,$$

である．このとき定理 3.2 より，$f_4(\boldsymbol{x}), f_4(\boldsymbol{x})\|\boldsymbol{x}\|^2$, $f_6(\boldsymbol{x})$ から (3.1), (3.2) が得られる．さらに (3.3) は W の定義から得られる．

3.2 代数的構成法

先の命題 3.5 を用い，Φ_p 最適性を持つ $S_1\cup S_r$ 上の $\mathcal{B}_n$ 不変 6-デザインを構成する（以降，Φ_p 最適 $\mathcal{B}_n$ 不変 6-デザインということにする）．Bajnok [1] により，必要な $\mathcal{B}_n$ 軌道の個数は少なくも 3 以上であることが分かっている．また詳細は省略するが我々 [15] の考察により，$|J| = 3$

の場合は Φ_p 最適デザインは存在しないではないかと思われる[15]．そこでここでは $|J| \geq 4$ の場合を考察する．また簡単のために $|J \setminus \tilde{J}| > |\tilde{J}|$ であることを約束する．

3.2.1 $|J| \geq 4$ の場合

命題 3.6. $(Y_i, w_i), i = 1, 2,$ を単位球面 S_1 上の 6 デザイン，r を正の実数とする．このとき，ある重み関数 w が存在して $(Y_1 \cup rY_2, w)$ は 2 重同心球面 $S_1 \cup S_r$ 上の 6 デザインである．

証明: 任意の 6 次以下の斉次多項式 f に対して，

$$\begin{aligned}\frac{W_1}{|S_1|}\int_{S_1} f(\boldsymbol{x})d\rho(\boldsymbol{x}) + \frac{W_2}{|S_r|}\int_{S_r} f(\boldsymbol{x})d\rho_r(\boldsymbol{x}) &= \frac{W_1}{|S_1|}\int_{S_1} f(\boldsymbol{x})d\rho(\boldsymbol{x}) + \frac{r^t W_2}{|S_1|}\int_{S_1} f(\boldsymbol{x})d\rho(\boldsymbol{x}) \\ &= W_1 \sum_{\boldsymbol{x}\in Y_1} w_1(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x}) + r^t W_2 \sum_{\boldsymbol{x}\in Y_2} w_2(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x}) \\ &= \sum_{\boldsymbol{x}\in Y_1}(W_1 w_1(\boldsymbol{x}))f(\boldsymbol{x}) + \sum_{\boldsymbol{x}\in Y_2}(W_2 w_2(\boldsymbol{x}))f(r\boldsymbol{x}).\end{aligned}$$

したがって，$(Y_1 \cup rY_2, w)$ は 6 デザインである．ここで重み関数 w は $w(\boldsymbol{x}) = W_1 w_1(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x} \in Y_1$, $w(\boldsymbol{x}) = W_2 w_2(r^{-1}\boldsymbol{x})$, $r^{-1}\boldsymbol{x} \in Y_2$ である．

命題 3.6 を用いることによって，多くの Φ_p 最適 $\mathcal{B}_n$ 不変 6 デザインを構成することができる．例えば，次のような無限系列が得られる．

定理 3.7. $n = 3m + 2, (n \geq 5)$ とし，p を任意の非負実数とする．

(i) $J = \{1, 1, m+2, m+2\}$，$\tilde{J} = \{1, m+2\}$ とする．このとき，Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザイン $(X_1 \cup X_2, w)$ を構成することができる．さらに任意の $\gamma \in O(\mathbb{R}^n)$ に対して，$(X_1 \cup X_2^\gamma, w)$ もまた Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザインである．

(ii) m を偶数とし，$J = \{1, (m+2)/2, m+2, 3m+2\}$ $\tilde{J} = \{(m+2)/2, 3m+2\}$ とする．このとき，Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザイン $(X_1 \cup X_2, w)$ を構成することができる．さらに任意の $\gamma \in O(\mathbb{R}^n)$ に対して，$(X_1 \cup X_2^\gamma, w)$ もまた Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザインである．

証明: $n = 3m + 2$ のとき，命題 3.5 と同様の議論により，X_1，X_2 がそれぞれ単一球面上の 6 デザインであることが分かる．任意の $\gamma \in O(\mathbb{R}^n)$ に対して，X_2^γ もまた単一球面上の 6 デザインであることに注意すると，命題 3.6 から題意が示される．

次節において，定理 3.7 から得られたデザインを再構成し，数の少ないデザインを与える方法を示す．

前節の最後に示した命題 3.5 を用いると，以下の $|J| = 5$ の場合のデザインが得られる．

[15]例えば，$n = 3m + 1$ としたとき，Φ_∞ 最適 $\mathcal{B}_n$ 不変 6 デザインが存在するためには，

$$7mk_1k_3 = -76(m+1)\{3(m+1-k_1)(m+1-k_3) + 2(k_1-1)(k_3-1) + 2m\}$$

を満たす正整数 $m, k_1, k_2 (\leq n)$ が存在しなければならないが，計算機により $m \leq 2012$ まではそのような整数組は存在しないことを確かめている．

定理 3.8. $p \in \{0, 1, \infty\}$ とし，$m, n, J, \tilde{J}$ を次のように選ぶ：

(i) $n = 3m,\ 1 \le m \le 10.\ J = \{1, 1, m+1, 3m, 3m\},\ \tilde{J} = \{1, 3m\}$.

(ii) $n = 3m+1,\ 1 \le m \le 10.\ J = \{1, 1, m+1, 3m+1, 3m+1\},\ \tilde{J} = \{1, 3m+1\}$.

(iii) $n = 6, 7.\ J = \{1, 2, 3, 4, 5\}, \tilde{J} = \{2, 5\}$.

(iv) $n = 8.\ J = \{1, 2, 3, 5, 7\}$ *and* $\tilde{J} = \{3, 7\}$, *or* $J = \{1, 2, 3, 6, 7\}$ *and* $\tilde{J} = \{3, 7\}$.

(v) $n = 10.\ J = \{1, 2, 3, 5, 7\}$ *and* $\tilde{J} = \{3, 5\}$, *or* $J = \{2, 3, 4, 7, 8\}$ *and* $\tilde{J} = \{3, 7\}$.

このとき，Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザイン $(X_1 \cup X_2, w)$ を構成することができる．

さらに命題 3.6 を再度用いることにより，以下の $|J| = 5$ の場合のデザインが得られる．

定理 3.9. $p \in \{0, 1, \infty\}$ とし，$m, n, J, \tilde{J}$ を次のように選ぶ：

(i) $n = 3m+2,\ m \ge 1.\ J = \{1, 1, m+1, m+2, 3m+2\}$ *and* $\tilde{J} = \{1, m+1\}$.

(ii) $n = 3m+2,\ m \ge 3.\ J = \{1, 2, m+1, m+2, 3m+1\}$ *and* $\tilde{J} = \{1, m+2\}$.

(iii) $n = 6m+2,\ m \ge 1.\ J = \{1, m+1, 2m+1, 6m+2, 6m+2\}$ *and* $\tilde{J} = \{m+1, 6m+2\}$.

(iv) $n = 6m+2,\ m \ge 1.\ J = \{1, m+1, m+2, 6m, 6m+2\}$ *and* $\tilde{J} = \{m+1, 6m+2\}$.

このとき，Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザイン $(X_1 \cup X_2, w)$ を構成することができる．さらに任意の $\gamma \in O(\mathbb{R}^n)$ に対して，$(X_1 \cup X_2^{\gamma}, w)$ もまた Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザインである．

3.3 組合せ論的構成法

t, k, v, λ を整数とし，$0 \le t \le k \le v$ を満たすとする．v 個の要素からなる有限集合 V および V の k 個の要素からなる部分集合（k 元部分集合）の族 $\mathcal{B}$ は，V の t 元部分集合 T を含む $\mathcal{B}$ の要素が T の選び方に依らずに一定（λ 個）であるとき **t-(v, k, λ) デザイン**という．V の要素を**処理**，$\mathcal{B}$ の要素を**ブロック**，パラメータ λ を**会合数**という．

良く知られたように t-(v, k, λ) デザインの全ブロック数は

$$b = \lambda \frac{\binom{v}{t}}{\binom{k}{t}} = \lambda \frac{v(v-1)\cdots(v-t+1)}{k(k-1)\cdots(k-t+1)}.$$

で与えられる（例えば，[20] を参照されたい．）．

t-(v, k, λ) デザインの**結合行列**は $v \times b$ 行列 $I = [(v_i, B_j)]$ で表すことができる．

$$(v_i, B_j) = \begin{cases} 1 & v_i \in B_j, \\ 0 & v_i \notin B_j. \end{cases}$$

s, l, L, μ を非負整数とする．全ての成分が 1 もしくは -1 の $L \times l$-行列が，強さ s，制約数 l，指標 μ の直交配列 $OA(L, l, 2, s)$ であるとは，$L \times l$ 行列の任意の s 列を取ってきたとき，L 行の中に 2^s 個の $(-1, 1)$ からなる s 個の組がちょうど μ 回であることをいう．ここで直交配列の定義から $\mu = L/2s$ であることに注意する．

ここでは G を $\mathbb{R}^n$ の全ての座標置換からなる群[16]，$\tau(\boldsymbol{x})$ を $\boldsymbol{x}$ の非零な要素とし，

$$v_k^{(\alpha,\beta)} = \alpha \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{e}_i + \beta \sum_{i=k+1}^{n} \boldsymbol{e}_i$$

とする．

Victoir [30] は組合せ t デザイン及び直交配列[17]を用い，与えられた cubature 公式を再構成し，近似点の個数が少ない cubature 公式を構成する方法を与えた．ここではそれをユークリッド空間上の $\mathcal{B}_n$ 不変デザインに対して応用する．

定理 3.10. (i) ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ 上の $2t$ デザインで

$$\sum_{i=1}^{p} \frac{W_i}{|S_{r_i}|} \int_{\boldsymbol{x}\in S_{r_i}} f(\boldsymbol{x}) d\rho_{r_i}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{l} \frac{\Lambda_i}{2^i \binom{n}{i}} \sum_{\boldsymbol{x}\in (v_{k_i}^{(\alpha_i,\beta_i)})^G} f(\boldsymbol{x}) + \sum_{\boldsymbol{x}\in X \setminus \cup_{i=1}^{l} (v_{k_i}^{(\alpha_i,\beta_i)})^G} w(\boldsymbol{x}) f(\boldsymbol{x}).$$

となるものが存在すると仮定する．ただし，$\Lambda_i = \sum_{\boldsymbol{x}\in (v_{k_i}^{(\alpha_i,\beta_i)})^G} w(\boldsymbol{x})$ とする．更に処理数 n，ブロックサイズ k_i，ブロック数 b_i で結合行列が I_i, $i = 1, \ldots, l$, である組合せ t デザインが存在すると仮定する．J_{n,b_i} を $n \times b_i$ を全ての成分が 1 の行列とし，Y_i を $\alpha_i I_i + (\beta_i - \alpha_i) J_{n,b_i}$ の行ベクトルとする．このとき，

$$\sum_{i=1}^{p} \frac{W_i}{|S_{r_i}|} \int_{\boldsymbol{x}\in S_{r_i}} f(\boldsymbol{x}) d\rho_{r_i}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{l} \frac{\Lambda_i}{b_i} \sum_{\boldsymbol{x}\in Y_i} f(\boldsymbol{x}) + \sum_{\boldsymbol{x}\in X \setminus \cup_{i=1}^{l} (v_{k_i}^{(\alpha_i,\beta_i)})^G} w(\boldsymbol{x}) f(\boldsymbol{x})$$

はユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ の $2t$ デザインをなす．
(ii) ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ 上の $2t$ デザインで

$$\sum_{i=1}^{p} \frac{W_i}{|S_{r_i}|} \int_{\boldsymbol{x}\in S_{r_i}} f(\boldsymbol{x}) d\rho_{r_i}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{l} \frac{\Lambda_i}{2^{\tau(\boldsymbol{x}_i)}} \sum_{\boldsymbol{x}\in \boldsymbol{x}_i^{(\mathbf{Z}/2\mathbf{Z})^n}} f(\boldsymbol{x})$$

となるものが存在すると仮定する．更に直交配列 $OA(|Y_i|, \tau(\boldsymbol{x}_i), 2, 2t)$ でそれぞれの行が Y_i, $i = 1, \ldots, l$ であるものが存在すると仮定する．このとき，

$$\sum_{i=1}^{p} \frac{W_i}{|S_{r_i}|} \int_{\boldsymbol{x}\in S_{r_i}} f(\boldsymbol{x}) d\rho_{r_i}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{l} \frac{\Lambda_i}{|Y_i|} \sum_{\boldsymbol{x}\in Y_i} f(\boldsymbol{x})$$

はユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ の $2t$ デザインをなす．

---

[16] 対称群 $\mathcal{S}_n$ と同型であることに注意．
[17] 直交配列を用いた再構成法は Kôno [21] でも実験計画の文脈で用いられている．

定理 3.10 はデザインを再構成するのに点の数を少なくさせるが，半径及び同一球面内の重みの総和は変化させない．したがって，次の定理が成り立つ．

定理 3.11. (X, w) を Φ_p 最適 $\mathcal{B}_n$ 不変 $2t$ デザインであるとしたとき，定理 *3.10* より再構成されたデザインは Φ_p 最適性を保存する．

例 3.12. 定理 *3.7* を用いると，$n = 8, J = \{2,2,8,8\}$，$\tilde{J} = \{2,8\}$ の場合に 736 点からなる Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザインを得ることが出来る．これは $n = 8$ の場合の Φ_p 最適 $\mathcal{B}^n$ 不変 6 デザイン中で最小点数のものである．これに対し，$OA(2^7, 8, 2, 6)$[18]を用いると 480 点からなる Φ_p 最適 6 デザインを構成することができる．また，480 点からなる Φ_p 最適 6 デザインは $J = \{1,1,4,4\}$，$\tilde{J} = \{1,4\}$ の場合に今度は 3-$(8,4,1)$ デザインを用いる事により構成することができる．

4 まとめと今後の課題

1. 本論文では Kiefer の Φ_p 最適性を満たす 3 次の回転可能計画の構成法を代数的方法及び組合せ論的方法により与えた．このとき，代数的方法から群の作用に従い，ある程度サイズの大きい計画を大量に作り出し，それを基に組合せ論的方法をサイズの小さい計画を作り出すことに成功した．

2. 本論文では計画の「良さ」の基準として，Kiefer の Φ_p 最適性基準にのみ焦点を当てたが，統計的データ解析ではその他にも様々な基準が用意されている．ここで 2.1 節の記号を思い出すと，未知パラメータの最小二乗推定量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ に対して，各 $\boldsymbol{x} \in B^n$ における**予測値**は $\hat{Y}(\boldsymbol{x}) = \hat{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{f}^T(\boldsymbol{x})$ であった．点 $\boldsymbol{x}$ における**予測分散**は，$\mathrm{Var}[\hat{Y}(\boldsymbol{x})] = \sigma^2 \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \mathrm{M}^{-1}(\xi) \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x})$ で与えられる．このとき，

- G 最適性基準 ： $\max_{\boldsymbol{x} \in B^n} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \mathrm{M}^{-1}(\xi) \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x})$ を最小化;
- I 最適性基準 ： $\int_{\boldsymbol{x} \in B^n} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \mathrm{M}^{-1}(\xi) \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = \mathrm{tr} \mathbf{M}_f \mathbf{M}^{-1}(\xi)$ を最小化;（ここで $\mathbf{M}_f = \int_{\boldsymbol{x} \in B^n} \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}$.）

さらに A, I 最適性基準を一般化した

- L 最適性基準 ： $\mathrm{tr} CM^{-1}(\xi)$ を最小化;（ここで C は半正定値対称行列.）

等の最適性基準に対して最適計画を構成する問題は応用上も重要だろうと思われる．さらにその際に必要な同心球面の個数が Φ_p 最適性基準を扱うときと異なるような状況が現れたら面白いだろう[19]．

3. これまで多くの場合，我々のモデル (1.1) に於いてもそうであるように，最適計画を構成する問題は各観測値は独立であるという強力な仮定の下で考察されてきた．しかしながら，より推定精度を高めるためには各観測値に相互作用を持つモデルを考えることが効果的かつ必要だと考えている．その場合，どのような相互作用を持つモデルが自然だと見做されるのだろうか．

[18] このような直交配列の存在性は例えば [14] を参照されたい．

[19] 我々は論文 [15] の中でロバスト最適計画についても考察しているのだが，その設定ではドラスティックに物事は変わらないようである．最近知ったのだが，ベイズ最適計画というのもあるようだ．これ対しても同様に物事は進むであろうか？

A 低次元空間における Φ_p 最適デザイン

以下に 2 次元以上 10 次元以下における定理 3.7 (i) 及び，定理 3.8 (i), (ii) で得られる Φ_p 最適デザインのパラメータを列記する．

D 最適デザイン ($p = 0$)

n	R	W	w_i, w_j, w_k $(i < j < k)$	v_i, v_j $(i < j)$
3	0.278016	0.206892	0.0376824, 0.030383, 0.0253022	0.0137928, 0.0155169
4	0.288626	0.148446	0.0176663, 0.0178151, 0.0078025	0.00618525, 0.00618525
5	0.294688	0.111555	0.0121651, 0.00912379	0.00212066, 0.00159049
6	0.298514	0.0868358	0.00758083, 0.00429128, 0.00211857	0.00180908, 0.00101761
7	0.301102	0.0694851	0.00467904, 0.00227048, 0.000536389	0.00110294, 0.000422218
8	0.302946	0.056848	0.0039298, 0.00078596	0.000236867, 0.0000473734
9	0.304312	0.0473633	0.00270439, 0.000395326, 0.000208946	0.000478417, 0.0000756871
10	0.305356	0.040065	0.00189739, 0.000217931, 0.0000425401	0.000333875, 0.000032605

A 最適デザイン ($p = 1$)

n	R	W	w_i, w_j, w_k $(i < j < k)$	v_i, v_j $(i < j)$
3	0.267598	0.612618	0.0182232, 0.0152046, 0.0119485	0.0408412, 0.0459463
4	0.280498	0.576042	0.0085676, 0.0090973, 0.0018351	0.0240018, 0.0240018
5	0.290130	0.543289	0.00652445, 0.00489334	0.00776126, 0.00582095
6	0.297686	0.513879	0.00388155, 0.00234224, 0.00101226	0.0107058, 0.00602202
7	0.303809	0.487376	0.0024411, 0.00128155, 0.000145995	0.00773613, 0.00296149
8	0.308889	0.463396	0.00223585, 0.00044717	0.00193082, 0.000386164
9	0.313180	0.441612	0.00149247, 0.000237018, 0.000104875	0.00446073, 0.000705701
10	0.316859	0.421747	0.00106214, 0.000134166, 0.0000133306	0.00351455, 0.000343218

E 最適デザイン ($p = \infty$)

n	R	W	w_i, w_j, w_k $(i < j < k)$	v_i, v_j $(i < j)$
3	0.25	0.746667	0.0118413, 0.0100952, 0.00764286	0.0497778, 0.056
4	0.25	0.746667	0.00503472, 0.00552083, 0.000633711	0.0311111, 0.0311111
5	0.25	0.746667	0.00361905, 0.00271429	0.0106667, 0.008
6	0.25	0.746667	0.00196528, 0.00124219, 0.000484375	0.0155556, 0.00875
7	0.25	0.746667	0.0011532, 0.000645292, 0.0000325817	0.0118519, 0.00453704
8	0.25	0.746667	0.00105556, 0.000211111	0.00311111, 0.000622222
9	0.25	0.746667	0.000637141, 0.000109816, 0.0000399913	0.00754209, 0.00119318
10	0.25	0.746667	0.000428571, 0.0000600907, 2.17036×10^{-6}	0.00622222, 0.000607639

参考文献

[1] B. Bajnok, Orbits of the hyperoctahedral group as Euclidean designs, *J. Algebraic Combin.* 25 (2007), 375–397.

[2] E. Bannai, E. Bannai, On Euclidean tight 4-designs, *J. Math. Soc. Japan* 6 (2005), 775–804.

[3] E. Bannai, E. Bannai, On optimal tight 4-designs on 2 concentric spheres, *European J. Combin.* 27 (2006), 179–192.

[4] Ei. Bannai, Etsu. Bannai, M. Hirao, M. Sawa, Cubature formulas in numerical analysis and Euclidean tight designs, *European J. Combin.* 31 (2010), 423–441.

[5] N. Bourbaki, *Lie Groups and Lie Algebras*: Chapters 4-6 (Elements of Mathematics), Springer, 2002.

[6] G.E.P Box, J.S. Hunter, Multi-factor experimental designs for exploring response surfaces, *Ann. Math. Statist.* 28 (1957), 195–241.

[7] P. Delsarte, J.J. Seidel, Fisher type inequalities for Euclidean t-designs, *Lin. Algebra Appl.* 114–115 (1989), 213–230.

[8] H. Dette, V.B, Melas, A. Pepelyshev, Optimal designs for statistical analysis with Zernike polynomials, *Statistics* 41 (2007), 453–470.

[9] N.R. Draper, Third Order Rotatable Designs in Three Factors: Analysis, *Technometrics*, 4 (1962), 219–234.

[10] R.H. Farrell, J. Kiefer, A. Walbran, Optimum multivariate designs, Proc. Fifth Berkeley Sympos. 1 (1967), 113–138.

[11] Z. Galil, J. Kiefer, Comparison of rotatable designs for regression on balls. I. Quadratic, *J. Stat. Plann. Inference* 1 (1977), 27–40.

[12] Z. Galil, J. Kiefer, Extrapolation designs and Φ_p-optimum designs for cubic regression on the q-ball, *J. Statist. Plann. Inference* 3 (1979), 27–38.

[13] J.M. Goethals, J.J. Seidel. Cubature formulae, polytopes, and spherical designs. The geometric vein, pp. 203–218, Springer, New York-Berlin, 1981.

[14] A. Hedayat, N.J.A. Sloane, J. Stufken, Orthogonal Arrays: Theory and Applications, Springer-Verlag, New-York, 1999.

[15] M. Hirao, M. Sawa, M. Jimbo, Constructing Φ_p-optimal rotatable designs on the unit ball via algebraic and combinatorial approaches, in preparation.

[16] S. Huda, A method for construction of third order rotatable designs, *Aligarh J. Statist.* 15–16 (1995–96), 19–25.

[17] S. Karlin, W.J. Studden, Tchebycheff systems: With applications in analysis and statistics, Pure and Applied Mathematics, Vol. XV Interscience Publishers John Wiley & Sons, New York-London-Sydney 1966.

[18] J. Kiefer, Optimum experimental designs V, with applications to systematic and rotatable designs, Proc. 4th Berkeley Sympos. 1 (1960), 381–405.

[19] J. Kiefer, General equivalence theory for optimum designs (approximate theory), *Annals of Statistics* 2 (1974), 849–879.

[20] G.B. Khosrovshahi, R. Laue, t-Designs with $t \geq 3$, in: C. J. Colbourn, J. H. Dinitz (eds.), Handbook of Combinatorial Designs (2nd ed.). CRC Press, Boca Raton, USA, 2007, pp. 79–101.

[21] K. Kôno, Optimal design for quadratic regression on k-cube, Mem. Fac. Sci. Kyushu Univ. Ser. A, 16 (1962), 114–122.

[22] A. Neumaier, J.J Seidel, Discrete measures for spherical designs, eutactic stars and lattices, *Nederl. Akad. Wetensch. Indag. Math.* 50 (1988), 321–334.

[23] A. Neumaier, J.J. Seidel, Measures of strength $2e$ and optimal designs of degree e, *Sankhyâ Ser.* A 54 (1992), 299–309.

[24] H. Nozaki, M. Sawa, Note on cubature formulae and designs obtained from group orbits, *Canad. J. Math.*, http://dx.doi.org/10.4153/CJM-2011-069-5.

[25] L. Pesotchinsky, Φ_p-optimal second order designs for symmetric regions, *J. Statist. Plann. Inference* 2 (1978), 173–188.

[26] F. Pukelsheim, Optimal design of experiments, Reprint of the 1993 original. Classics in Applied Mathematics, 50. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2006.

[27] K. Smith, On the standard deviations of adjusted and interpolated values of an observed polynomial function and its constants and the guidance they give towards a proper choice of the distribution of observations, *Biometrika* 12 (1918), 1–85.

[28] S.L. Sobolev, Cubature formulas on the sphere which are invariant under transformations of finite rotation groups (in Russian), *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 146 (1962), 310–313.

[29] V. Tchakaloff, Formules de cubatures mcaniques coefficients non ngatifs, *Bull. Sci. Math.* 81 (1957), 123–134.

[30] N. Victoir, Asymmetric cubature formulae with few points in high dimension for symmetric measures, *SIAM J. Numer. Anal.* 42 (2004), 209–227.