5B-07

複素空間での直交計画の最適性に関する一考察

浮田 善文† 松嶋 敏泰††
† 横浜商科大学 †† 早稲田大学 基幹理工学研究科

1 はじめに

実験計画法の成果をデータサイエンスに適用することができれば、目的に必要なデータを効率良く収集することが期待できる。データ収集後には、機械学習による知識獲得などが行われるが、機械学習では基底関数などで複素数が用いられることも多い [1]。データサイエンスでのデータ収集に実験計画法の成果を適用する場合、機械学習においても実数のみの処理に限定されてしまうという問題があった。そこで本論文では、実用面でも広く利用されている直交計画について、複素数を用いる基底関数に適応する場合の性質を明らかにする。さらにこれまでに知られている直交計画の最適性 [2, 3] が複素空間でも同様に成り立つことを示す。

2 準備

2.1 指標による関数の表現

G を（演算を掛け算の記号で表した）有限アーベル群であるとし、S^1 を複素平面内の単位円周とする。G 上の指標 [4] とは、複素数値関数 $\mathcal{X}: G \to S^1$ で、次の条件を満たすもののことである：

$$\mathcal{X}(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x}') = \mathcal{X}(\boldsymbol{x})\mathcal{X}(\boldsymbol{x}') \quad \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}' \in G. \tag{1}$$

また、G の指標群は $\{\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) | \boldsymbol{a} \in G\}$ で表すことができ、次式が成立する。

$$\frac{1}{|G|} \sum_{\boldsymbol{x} \in G} \mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})\mathcal{X}^*_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1, & \boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}, \\ 0, & \boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{b}, \end{cases} \tag{2}$$

ここで $\mathcal{X}^*_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x})$ は $\mathcal{X}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x})$ の複素共役である。このとき、任意の関数 $f: G \to C$ (C は複素数体) は、指標の線形結合により、

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{a} \in G} f_{\boldsymbol{a}} \mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}), \tag{3}$$

で一意に表現可能で、係数 $f_{\boldsymbol{a}}$ は次式で与えられる。

$$f_{\boldsymbol{a}} = \frac{1}{|G|} \sum_{\boldsymbol{x} \in G} f(\boldsymbol{x})\mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}). \tag{4}$$

2.2 ガロア体上の直交基底関数

q 個の元からなる体をガロア体といい、$GF(q)$ で表す。なお、ガロア体の位数 q は、$q = p^m$ でなければならない。ただし、p は素数である。

ガロア体上においても式 (2) は成立し、次式で与えられる [5]。

$$\frac{1}{q^n} \sum_{\boldsymbol{x} \in GF(q)^n} \mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})\mathcal{X}^*_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1, & \boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}, \\ 0, & \boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{b}, \end{cases} \tag{5}$$

式 (3)、式 (4) についても同様に成立する。

2.3 直交基底関数により表現されるモデル [5]

$F_1, F_2, \ldots, F_n$ をモデルに含まれる n 個の因子とする。各因子の水準は $GF(q)$ により表現され、水準組合せは、$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in GF(q)^n$ で表現されるものとする。

ここで、集合 $A \subseteq \{0,1\}^n$ はモデルに含まれる因子と因子間の交互作用を表す集合とする。例えば、$A = \{000, 100, 010, 001, 110\}$ は、全体平均、因子 F_1、因子 F_2、因子 F_3、因子 F_1 と因子 F_2 の交互作用を示している。

また、$I_A = \{(b_1a_1, b_2a_2, \ldots, b_ba_n) | \boldsymbol{a} \in A, b_i \in GF(q)\}$ と定義すると、集合 A に含まれる因子の主効果と交互作用効果は、$\{f_{\boldsymbol{a}} | \boldsymbol{a} \in I_A\}$ により表現される。

このとき、水準組み合わせ $\boldsymbol{x}$ での実験結果を $t(\boldsymbol{x})$ で表し、以下のモデルを仮定する。

$$t(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{a} \in I_A} f_{\boldsymbol{a}} \mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) + \epsilon_{\boldsymbol{x}}, \tag{6}$$

ここで $\epsilon_{\boldsymbol{x}}$ は平均 0、分散 σ^2 で独立な偶然誤差である。

本稿においては、式 (6) における集合 A は事前に与えられるものとする。このもとで、まず実験する水準組合せの集合である実験計画 $X = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_N\}, X \subseteq GF(q)^n$ を決定する。その後、実験を行い、得られたデータ $\{(\boldsymbol{x}, t(\boldsymbol{x})) | \boldsymbol{x} \in X\}$ から、各効果の推定等を行う。

このため、大きさ N の実験計画 X をどのように決めるかが重要となる。直交計画は同じ大きさの実験計画の中で、効果の不偏推定量の分散の最大値が最小となることが知られている [2, 3]。次章では、直交計画の最適性が複素空間でも同様に成り立つことを示す。

A Note on Optimality of Orthogonal Designs in Complex Space

† Yoshifumi Ukita
Department of Management and Information, Yokohama College of Commerce
†† Toshiyasu Matsushima
Department of Applied Mathematics, Waseda University

3　複素空間での直交計画の最適性

定理 1. 大きさ N のどのような計画 $X = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_N\}$ に対しても、$f_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{a} \in I_A)$ の最小二乗推定量 $\hat{f}_{\boldsymbol{a}}$ の分散 $V(\hat{f}_{\boldsymbol{a}})$ について、次式が成立する。

$$V(\hat{f}_{\boldsymbol{a}}) \geq \frac{\sigma^2}{N}. \tag{7}$$

また、式 (7) で等号が成り立つための必要十分条件は、任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in I_A$ に対し、

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)\mathcal{X}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}_i) = \begin{cases} 1, & \boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}, \\ 0, & \boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{b}, \end{cases} \tag{8}$$

が成立することである。

（定理 1 の証明）

$\hat{f}_{\boldsymbol{a}} = \sum_{i=1}^{N} c_i t(\boldsymbol{x}_i)$ を $f_{\boldsymbol{a}}$ の最小二乗推定量とする。これは不偏推定量であるため $E(\hat{f}_{\boldsymbol{a}}) = f_{\boldsymbol{a}}$ であり

$$\begin{aligned} & E(\hat{f}_{\boldsymbol{a}}) \\ &= E\left(\sum_{i=1}^{N} c_i \left(\sum_{\boldsymbol{b}\in I_A} f_{\boldsymbol{b}}\mathcal{X}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}_i) + \epsilon_{\boldsymbol{x}_i}\right)\right) \\ &= E\left(\sum_{i=1}^{N} c_i \left(f_{\boldsymbol{a}}\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i) + \sum_{\boldsymbol{b}\neq\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\in I_A} f_{\boldsymbol{b}}\mathcal{X}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}_i) + \epsilon_{\boldsymbol{x}_i}\right)\right) \end{aligned}$$

より、

$$\sum_{i=1}^{N} c_i \mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i) = 1, \tag{9}$$

$$\sum_{i=1}^{N} c_i \mathcal{X}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}_i) = 0, \quad (\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in I_A). \tag{10}$$

ここで $\epsilon_{\boldsymbol{x}_i}(i = 1, \cdots, N)$ は独立、従って $t(\boldsymbol{x}_i)(i = 1, \cdots, N)$ は独立であり

$$V(\hat{f}_{\boldsymbol{a}}) = \sum_{i=1}^{N} |c_i|^2\sigma^2. \tag{11}$$

コーシーの不等式より、

$$\sum_{i=1}^{N}|c_i|^2 \sum_{i=1}^{N} |\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)|^2 \geq \left|\sum_{i=1}^{N} c_i\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)\right|^2 = 1. \tag{12}$$

式 (12) と $\sum_{i=1}^{N} \mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i) = \sum_{i=1}^{N} |\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)|^2 = N$ を使うことで、式 (11) は

$$V(\hat{f}_{\boldsymbol{a}}) \quad \geq \quad \frac{\sigma^2}{N}, \tag{13}$$

となり、式 (7) が得られる。

また、式 (12) の等号が成立するには、$c_i = c\mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)$ でなければならないため、式 (9) に代入すると

$$\sum_{i=1}^{N} c\mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i) = 1 \tag{14}$$

この式と $\sum_{i=1}^{N} \mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)\mathcal{X}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i) = N$ より、$c = 1/N$ となる。これより

$$c_i = \frac{1}{N}\mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i) \tag{15}$$

が得られる。また、式 (15) を式 (10) に代入することで、次式が成立する。

$$\sum_{i=1}^{N} \mathcal{X}^*_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_i)\mathcal{X}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}_i) = 0, \quad (\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{a}) \tag{16}$$

以上より、定理 1 が証明される。

また、直交計画の定義 [5] により、A に対する直交計画は、任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in I_A$ に対し式 (8) を満たす。これより、次の定理が成り立つ。

定理 2. A に対する大きさ N の直交計画が存在すれば、これにより得られるデータに基づく、効果 $f_{\boldsymbol{a}}$ の最小二乗推定量 $\hat{f}_{\boldsymbol{a}}$ の分散 $V(\hat{f}_{\boldsymbol{a}})$ は、式 (7) の右辺に到達する。すなわち、

$$V(\hat{f}_{\boldsymbol{a}}) = \frac{\sigma^2}{N}. \tag{17}$$

4　おわりに

本稿では、これまでに知られている直交計画の最適性が複素空間でも同様に成り立つことを示す定理を導出した。今後の課題として、各因子で水準数が異なる場合への拡張、機械学習でのデータ収集に直交計画を適用する場合の性質を明らかにすること等があげられる。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP17K00316、横浜商科大学特別研究助成金の助成を受けたものです。

参考文献

[1] C. M. Bishop: Pattern Recognition and Machine Learning, Springer (2006).

[2] S. Moriguti: Optimality of Orthogonal Designs, Res. Stat. Appl. Res., JUSE, Vol.3 (1954).

[3] 高橋磐郎: 組合せ理論とその応用, 岩波全書 (1979).

[4] E. M. Stein and R. Shakarchi: Fourier Analysis: An Introduction, Princeton University Press (2003).

[5] Y. Ukita, T. Saito, T. Matsushima and S. Hirasawa: A Note on a Sampling Theorem for Functions over $GF(q)^n$ Domain, *IEICE Trans. Fundam.*, Vol.E93-A, No.6, pp.1024-1031 (2010).