Coxeter 群の基本ルートを用いた D 最適実験計画の構成および分類定理

神戸大学大学院システム情報学研究科　　澤　正憲

$n \geq 3$ を自然数とし，単位球体 $\mathcal{B}^n := \{(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid x_1^2 + \cdots + x_n^2 \leq 1\}$ 上の t 次多項式回帰モデル

$$Y(\boldsymbol{x}) = \sum_i \theta_i f_i(\boldsymbol{x}) + \epsilon(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in \mathcal{B}^n$$

を考える．ただし，f_i は次数 t 以下の多項式からなる実ベクトル空間の基底をなし，ϵ は

$$E[\epsilon(\boldsymbol{x})] = 0, \qquad E[\epsilon(\boldsymbol{x})\epsilon(\boldsymbol{y})] = \sigma^2 \delta_{\boldsymbol{xy}} \qquad (\sigma^2 \text{ は未知の母分散})$$

を満たす確率変数とする．Fisher 情報行列の行列式の値を最大化するような有限個の観測点の配置を D 最適近似計画 (D-optimal approximate design) という．D 最適近似計画の構成問題は，1960 年代初期の Kiefer の仕事以降，実験計画法の分野を中心として広く研究されてきた．Karlin-Studden の定理 (1966) より，所望の点配置の探索は多重同心球面上の D 最適近似計画の構成問題に帰着されるが，代数的組合せ論や数値解析学の視点からは，これは多重同心球面上の特殊な測度に関する矩形求積公式（cubature formula）の構成問題として理解することができる．

D 最適近似計画の構成法に関する先行研究の多くは 2 次回帰モデルに関するものであるが，3 次回帰モデルに関する文献も幾つか発表されており，例えば Gaffke-Heiligers (1995)，Pukelsheim (2006), Hirao-Sawa-Jimbo (2015) などがある．しかしながら，4 次以上の場合，D 最適近似計画の（組織的）構成法に関する結果は講演者の知る限りほとんど知られていない．

そこで，本研究では，有限既約鏡映群の軌道分解を用いて D 最適近似計画の構成法を提案し，$t \geq 4$ の（次数 4 以上の）最適近似計画の例を発見することを主要な目的とする．さらに提案手法から構成可能な次数最大の D 最適近似計画を分類することも重要な目的として位置付ける．なお，有限既約鏡映群は $A_n, B_n, D_n, H_3, H_4, F_4, E_6, E_7, E_8$ に分類されることがよく知られている．それぞれの群について特殊な軌道の解析を行うことによって，以下の結果を得た：

- 有限既約鏡映群に対応する正多胞体およびそれらに準ずる多胞体上の特殊な点配置（コーナーベクトル）を用いて，D 最適近似計画の構成法（コーナーベクトル法）を与えた．B_n 型群（超八面体群）の場合，提案手法は実験計画法における古典的なアプローチに等しく，統計サイドでは Gaffke-Heiligers (1995) などの顕著な業績が知られている．また，A_n 型の場合，我々の手法は Scheffé (1958) の $\{n, 2\}$-lattice design の一般化と見なすことができる．そして，H_4 型と E_8 型の場合，提案手法から次数 5, 6 の最適近似計画を得ることに成功した．
- 一般に，$\mathcal{B}_n$ 上の t 次最適近似計画の探索は $O(n^{2t})$ の計算量を要するが，超八面体のコーナーベクトルを組み合わせて得られる近似計画の計算量は $O(t)$ のオーダーで十分であることが知られている (Gaffke-Heiligers の定理)．D_n 型群と A_n 型群に対して，Gaffke-Heiligers の定理の類似を証明した．
- 各鏡映群について，提案手法から得られる D 最適近似計画の最大次数を決定した．
- 群 H_3, H_4, F_4 について，提案手法から得られる D 最適近似計画で次数最大のものを完全に分類した．

本講演では，時間の許す範囲内で，上述の成果の幾つかを報告したい．これは平尾将剛氏（愛知県立大学）との共同研究である．