Orthogonal arrays : theory and applications

A.S.Hedayat, N.J.A.Sloane, John Stufken

1 概論

1940 年代、一連の論文 (Rao, 1946a, 1947, 1949) により、C.R.Rao はいくつかの配列を示した。これらは**直交配列**（*orthogonal arrays, OA's*）として知られるようになった。多くの優れた統計学者や数学者がこの興味深い分野において、様々な業績を残している。

これまでに多くの文献が直交配列を扱かっているが、用語の不統一等により、混乱した状態が続いている。本書の出版により、我々はこの混乱を乗り越えたいと思う。直交配列におけるこれまでの成果や、関連のある分野について、まとまった考え方を示していく。これまで直交配列になんらかの関わりを持った人だけでなく、まだ直交配列の神秘に触れたことのない人にとっても、本書は役立つだろう。

直交配列が**実験計画法**（*design of experiments*）に果たした偉大な業績が、本書を書く動機となっている。本書が、読者が現在直面している難問を解決する助けとなることを願う。

本章ではこれより、直交配列のいくつかの基本的な定義、用語、特性を示していく。

S を水準 s の集合とする（**水準**は *symbols,levels,settings*）。「level」という用語は、直交配列が最も威力を発揮する分野、実験計画法において使用されている。実験計画法では、**因子**（*factors,variables*）の水準が、**特性値**（*response*）にどのような影響を及ぼすかを研究する。通常、我々は水準を $0, 1, ..., s-1$ のように表記する。これら水準の集まりは**ガロア郡**（*Galois field*）である。しかし当面は、ガロア郡の知識は必要ない。本書を通して、ab 個の**要素**（*elements*）を持ち、各要素は水準の集合 S に属し、a 行と b 列から成り、任意の行と任意の列の交点にただ一つの要素があるものを、要素が集合 S に属する、$a \times b$ の配列、あるいは**行列**（*matrix*）と表現する。また、直交配列の定義は次の通りである。

定義 1.1.　要素が集合 S に属する $N \times k$ の配列 A が、次の条件を満たす時に、水準数 s、強度 t（ここで $0 \leq t \leq k$)、指数 λ の直交配列であると言う（**強度**は *strength*、**指数**は *index*)。— A の任意の部分配列 $N \times t$ において、同じ要素を持つ行がちょうど λ 個ある（訳注：A の任意の列において、S の全ての要素が少なくとも一回は現れることを前提としている)。

もし $\lambda = 1$ の場合、直交配列は**単指数**（*index unity*）を持つという。整数値である N, k, s, t, λ を直交配列のパラメータといい、我々はこのような直交配列を $OA(N, k, s, t)$ と表記する。この表記に λ は登場しない。

なぜなら λ は他のパラメータから容易に算出されるからである—式 1.1 を見よ。

もう少し砕けた言い方で直交配列を説明するならこうだ。直交配列の任意の t 個の列に注目すると、行方向に可能な全ての組み合わせが観察される。さらに、全ての組合せはそれぞれ同じ数だけ出現する。単指数の直交配列の場合、全ての組合せはちょうど一回づつ出現する。

直交配列の著述家の中には、$N \times k$ よりも $k \times N$ の表記を好むものがいる。$k \times N$ 表記は、一般に行が少なくなるが、統計学者にとっては不自然なものだ。特に、行が一回の実験での水準の組合せ、列が因子を表す統計ソフトを使用する場合はなおさらである。我々は配列の表記時、紙面節約の為に**転置行列**（*transposed array*）を示すことがある。この場合は「**転置表記**（*transposed*）」との注を示す。

$OA(N, k, s, t)$ という表記は、全く知られていないわけではないが、一般的でもない。これまでの文献には、他の様々な表記法が使用されている。中でも $L_N(s^k)$ のような表記が最も多い—例えば、田口と Wu(1985)。この表記は簡潔であるが、不完全である（なぜなら、パラメータ t が欠落している）。また、下付き文字と上付き文字を使用しており、あまり好ましくない（訳注：この点に関しては、理由がよくわからない）。この他にも L_N、$L_N(\lambda \times s^k)$、$L_{\lambda \times s^t}(k)$、$s - OA(t, k, \lambda)$、$OA(N, k, s, t) : \lambda$、$OA(N, s^k, t)$、$OA_\lambda(t, k, s)$、$OA(s, k, \lambda)$ のような表記がある。我々は今後、$OA(N, k, s, t)$ の表記に統一することを提案する。

「強度」と「指数」という用語は、2 つのパラメータ t と λ を表す用語として広く使用されている。しかし他の 3 つのパラメータについては、文献により様々な用語が使用されている。行数を表すパラメータ N は、**配列のサイズ**（*size of array*）、**実験数**（*number of runs or observations*）、**集合数**（*number of assemblies*）、**水準の組合せ数**（*number of level or treatment combinations*）。列数を表すパラメータ k は**制約数**（*number of constraints*）、**因子数**（*number of factors or variables*）。s は**シンボル数**（*number of symbols*）、**水準数**（*number of levels*）。我々は 3 つのパラメータ N, k, s をそれぞれ、**実験数**（*number of runs*）、**因子数**（*number of factors*）、**水準数**（*number of levels*）と一貫して呼ぶことにする。

例 1.2. 配列 1.3. は、水準数 2、強度 3、指数 1、実験数 8、因子数 4 の直交配列 $OA(8, 4, 2, 3)$ である。読者は各自これを確認せよ。

配列 1.3. $OA(8, 4, 2, 3)$

0	0	0	0
0	0	1	1
0	1	0	1
0	1	1	0
1	0	0	1
1	0	1	0
1	1	0	0
1	1	1	1

例 1.4. 全ての $N \times k$ 配列は強度 0 である。強度 1 の直交配列は簡単に得られる。例として $OA(2, 12, 2, 1)$ を示す。

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

例 1.5.　$OA(4,3,2,2)$ はそれほど簡単ではない。

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{array}$$

一般的に、強度の大きい直交配列ほど、作るのが難しい。

注記　「直交（$orthogonal$）」という言葉はいろいろな意味があるが、一般的には「垂直（$perpendicular$）」という意味である。二つのベクトル $u=(u_1,\ldots,u_m)$ と $v=(v_1,\ldots,v_m)$ が直交とは、2 つの内積が 0、すなわち

$$u\cdot v = uv^T = u_1v_1+\cdots+u_mv_m = 0$$

が成立することである（ここで T は転置を表している)。しかし、「直交配列」とは、その列や行が、上記の意味で直交している訳ではない（もっとも、配列の列や行に、内積を適用できるものではないが)。「直交」という言葉は、統計学においては違った意味となる。Bush(1950) が「直交配列」なる言葉を使った理由もよくわかるのだが、この点に関しては 11 章で論ずることにする。問題 1.8 と 1.9 は、その理由をいくらか示唆している（訳注：本書の参考文献リストによると、タイトルに「直交配列」が含まれる文献が初めて出現するのは 1950 年である)。

次章以降で、我々は様々な直交配列の特性を見ていくが、それらの特性は、あるものは一般的であり、またあるものは付帯する仮定の元でのみ成立する。しかし、以下に示す 9 個の特性は、定義 1.1. より直接導かれるものである。これらの確認は、読者に委ねる（問題 1.1.)。

1. 直交配列のパラメータは、以下の等式を満たす。

$$\lambda = N/s^t \tag{1.1}$$

2. 強度 t の直交配列は、同時に強度 $t', 0\le t' < t$ の直交配列でもある。強度 t' と見なした場合の指数 λ' は、$\lambda' = \lambda s^{t-t'}$ である。ここで、λ は強度 t と見なした時の指数である。

   強度が 4 の直交配列を、強度が 2 と言うのは、300 馬力の車が 10 馬力あると言うのと同じである。間違ってはいないが、誤解を招く表現ではある（訳注：しかし、強度をこのように、値の集合と解釈しないと、本書は理解出来ない。よってここは重要なポイントである)。

3. もし配列 $A_i, i=1,\ldots,r$ が $OA(N_i,k,s,t_i)$ ならば、これら r 個からなる配列

$$A = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_r \end{bmatrix}$$

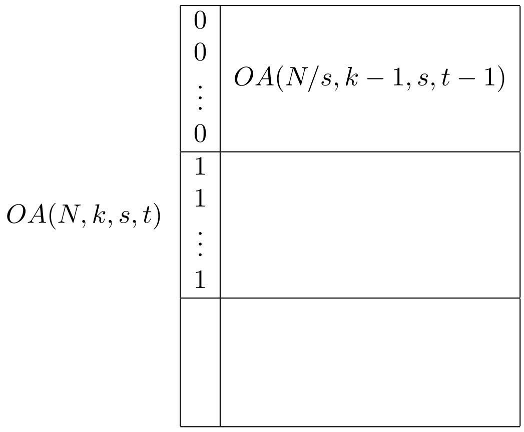
   は $OA(N,k,s,t), N=N_1+\cdots+N_r$ であり、$t \ge min\{t_1,\ldots,t_r\}$ である。さらに、もしも $r=s$ で、かつ、それぞれの A_i が $OA(N,k,s,t)$ であった場合、A_1 の各行に要素 0 を追加、A_2 の各行に要素 1 を追加、. . .、A_r の各行に要素 $(r-1)$ を追加すると、$OA(sN,k+1,s,t)$ が得られる。

4. 直交配列の行や列を置換しても、同じパラメータの直交配列が得られる。

5. 直交配列の任意の一つの列内で、水準の置換をしても、同じパラメータの直交配列が得られる。

6. $OA(N,k,s,t)$ の任意の部分配列 $N \times k'$ は、$OA(N,k',s,t'), t' = min\{k',t\}$ である。

7. $OA(N,k,s,t)$ の行の中から、0 で始まる行（あるいは、他の任意の水準でもよい）が集まるように行の置換を行い、左の列を取り除くと、$OA(N/s,k-1,s,t-1)$ が得られる（訳注：$t=0$ の場合を考えると、$OA(N,k,s,0)$ から $OA(N/s,k-1,s,-1)$ が得られることになり、明らかにおかしい。よって、$t>0$ を前提にしていると考えるべきであろう）。



8. ある直交配列 A について、$\mathcal{C}$ は取り得る全ての行の集合とする（訳注：取り得る全ての行の組合せ数は s^k 個)。$c \in \mathcal{C}$ とし、f_c は c が A で出現している頻度とする。また f を、全ての $c \in \mathcal{C}$ についての f_c の中の最大値とする。全ての $c \in \mathcal{C}$ について、$f - f_c$ の頻度をもつ配列を A の**補完**（*set-theoretic complement,complement*）と呼ぶ。$OA(N,k,s,t)$ の補完は $OA(fs^k - N,k,s,t)$ である。

9. より一般的に、$A = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}$ が $OA(N,k,s,t)$ であり、ここで A_1 は $OA(N_1,k,s,t_1)$ とする。すると A_2 は $OA(N-N_1,k,s,t_2), t_2 \geq min\{t,t_1\}$ である。

7 と 9 の特性は、3 の特性の逆である。

数学的（*mathematical*）な立場と、**統計学的**（*statistical*）な立場の違いにより、解釈の異なる点がある。数学的には二つの配列が本質的に異なるかどうかをどうやって考えるだろうか。ここで、次の定義をする。

定義 1.6.　二つの直交配列において、もしも一方の直交配列が、他方の直交配列の列の置換、行の置換、水準の置換により得られるのであれば、これら二つの直交配列は**同型**（*isomorphic*）であるという。

例 1.7.　配列 1.3 と配列 1.8 は同型である。問題 2.15 で、これら直交配列のパラメータと同じパラメータを持つ直交配列は、同型であることを見る。

配列 1.8.　もう一つの $OA(8,4,2,3)$

$$\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

しかしながら、統計学的に二つの配列が本質的に異なるかどうかを考える場合、行の置換はあってもかまわないが、列と水準の置換は許されない。行の置換で等しくなる二つの配列は、11 章で述べるように、実験計画法で使用される場合は同等である。

定義 1.9.　二つの直交配列において、もしも一方の直交配列が、他方の直交配列の行の置換により得られるのであれば、これら二つの直交配列は**統計的に同等**（*statistically equivalent*）であるという。

明らかに、配列 1.3 と配列 1.8 は、統計的に同等ではない。

これまで述べた直交配列は、より一般的な「直交配列」の特殊なケースと考えることも出来る。これより、より一般的な直交配列の三つの例を示す。また、これら以外のものも次章以降で示していく。

例 1.10.　配列 1.11. に示すように、A を 8×5 の配列とする。A は強度 2 の**混合系直交配列**（*mixed* or *asymmetrical orthogonal array*）という。

配列 1.11.　混合系直交配列

$$\begin{array}{ccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

全ての因子が、同じ水準数を持っているわけではないが、この配列は、任意の二つの列に注目すると、行方向に全ての組み合わせが観察される。さらに、全ての組合せはそれぞれ同じ数だけ出現している。しかしながら、組合せ数は、列の選び方により異なる。混合系直交配列については、9 章でより詳しく検討する。

例 1.12.　配列 1.13. に示すように、A を 9×4 の配列とする。四つの全ての列で、水準 2 である。しかし行数が奇数であるので、強度 1 の直交配列ですらない。

配列 1.13.　直交主効果計画

0	0	0	0
0	0	0	0
0	1	0	0
0	0	1	0
0	0	0	1
0	1	1	1
1	1	0	0
1	0	1	0
1	0	0	1

しかし、この配列は、これまでにない直交の性質を持っている。例えば、最初の二つの列では、$(0,0),(0,1),(1,0),(1,1)$ の組合せの行がそれぞれ $4,2,2,1$ 回づつ現れる。これらの組合せの出現回数は、それぞれの列での水準頻度の積に比例する。この例ではそれぞれ $36,18,18,9$ 回である（各列において、水準 0 は 6 回、水準 1 は 3 回現れる）。他の任意の二つの列のおいても、同様である。このような配列を、強度 2 の**直交主効果計画**（*orthogonal effects plan, orthogonal main-effects plan*）といい、11 章でより詳しく検討する。

例 1.14. 配列 1.15. は、例 1.10. と例 1.12. の配列の特徴を併せ持っている。この配列を強度 2 の**混合型直交主効果計画**（*mixed orthogonal effects plan, mixed orthogonal main-effects plan*）という。

配列 1.15. 混合型直交主効果計画

0	0	0	0	0
0	1	1	1	1
0	0	0	1	1
0	1	1	0	0
1	0	1	0	1
1	1	0	1	0
2	0	1	1	0
2	1	0	0	1

このような配列についても、11 章でより詳しく検討する。

これらの配列は興味深いが、本書では定義 1.1. の意味での直交配列を主に取り扱う。しかし、より一般的な直交配列についての関心も忘れない。

1.1 問題

1.1. この章で述べた、直交配列の 9 個の特性を確認せよ。

1.2. 紙面の節約の為に、以下の配列は転置表示されている。もし可能であれば、これらの配列を $OA(16,4,4,2)$ として完成させよ。

a.

0	0	3	2	2	3	3	2	1	0	0	1	1	2
2	1	3	1	3	0	2	2	3	3	0	1	0	0
2	1	0	3	1	3	1	0	2	3	0	0	1	2
2	1	2	2	0	1	3	1	1	3	0	3	2	3

b.

$$
\begin{array}{cccccccccccccc}
2 & 2 & 0 & 0 & 1 & 3 & 3 & 2 & 3 & 2 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
0 & 3 & 1 & 0 & 0 & 3 & 2 & 1 & 0 & 2 & 2 & 3 & 1 & 3 \\
1 & 2 & 2 & 0 & 2 & 0 & 2 & 3 & 3 & 0 & 1 & 3 & 0 & 1 \\
3 & 2 & 1 & 2 & 0 & 0 & 3 & 0 & 1 & 1 & 0 & 3 & 3 & 2
\end{array}
$$

c.

$$
\begin{array}{cccccccccccccccc}
1 & 1 & 0 & 0 & 3 & 2 & 0 & 0 & 2 & 2 & 3 & 3 & 3 & 2 & 1 & 1 \\
1 & 3 & 3 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 3 & 3 & 2 & 1 & 2 & 0 & 2 \\
2 & 3 & 1 & 3 & 3 & 1 & 0 & 2 & 3 & 2 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 1
\end{array}
$$

d.

$$
\begin{array}{cccccccccccccccc}
0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 & 3 & 2 & 3 & 2 & 2 & 1 & 0 & 3 & 3 & 0 \\
2 & 3 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 3 & 1 & 2 & 1 & 0 & 3 & 2 & 3 & 1 \\
1 & 0 & 1 & 3 & 1 & 0 & 3 & 2 & 0 & 0 & 3 & 2 & 3 & 2 & 1 & 2
\end{array}
$$

e.

$$
\begin{array}{ccccccccccccccc}
1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 3 & 1 & 1 & 1 & & 3 & 3 & \\
2 & 1 & 1 & 0 & & 2 & 3 & 1 & 0 & & 1 & 0 & 3 & 2 & 0 \\
1 & 0 & 3 & 1 & 2 & 0 & 1 & 1 & 0 & 3 & 2 & & 0 & 2 & \\
0 & 3 & 0 & 3 & & 1 & 1 & 2 & 2 & & 1 & 0 & 0 & 3 & 1
\end{array}
$$

1.3. 問題 1.2. で、$OA(16,4,4,2)$ として完成することの出来た直交配列の中から、さらに $OA(16,5,4,2)$ に拡張することの出来るものはあるか？（もっと一般的に、全ての $OA(16,4,4,2)$ は $OA(16,5,4,2)$ に拡張出来るだろうか？）

1.4. 次の直交配列のパラメータを述べよ。

$$
\begin{array}{ccccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\
0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 0
\end{array}
$$

1.5. 問題 1.4. の直交配列の部分配列で、より大きな強度を持つものはあるか？

1.6. $OA(16,4,2,2)$ の例を挙げよ。

1.7. (i) $OA(16,4,2,3)$ の例を挙げよ。(ii) $OA(8,4,2,1)$ の部分配列を持ち、この部分配列を除くと $OA(8,4,2,3)$ となる $OA(16,4,2,1)$ の例を挙げよ。この例は、特性 9 で、A_2 の強度が $min\{t,t_1\}$ を超える例である。

1.8. この問題では、本書を通して使用されるいくつかの記法を紹介する。1_N をサイズ N で要素が 1 の列ベクトル、I_N を $N\times N$ の単位行列、J_N を $N\times N$ で要素が 1 の行列とする。

A を $N\times k$ で要素が 1 あるいは -1 の行列とする。以下が同等であることを示せ。

(i) A は $OA(N,k,2,2)$ である

(ii) $X^TX = NI_{k+1}$、ここで $X=[1_N\ \ A]$

(iii)

$$A_T\left(I_N-\frac{1}{N}J_N\right)A=NI_k$$

1.9. A を $N\times k$ で要素が 1 あるいは -1 の配列とし、また $A^{(2)}$ を $N\times\binom{k}{2}$ で（訳注：$\binom{k}{2}$ は配列ではなく、${}_kC_2$ のことである）、$A^{(2)}$ の要素は A の二つの列の要素の積であるとする。すなわち、$A=(a_{ij})$ とすると、$A^{(2)}$ は列

$$\begin{bmatrix} a_{1u}a_{1v} \\ \vdots \\ a_{Nu}a_{Nv} \end{bmatrix}$$

を持つ。ここで $1\leq u<v\leq k$ である。$Y=[1_N\ \ A^{(2)}]$ とし、また $P_Y=Y(Y^TY)^-Y^T$ とする。ここで $^-$ は一般逆行列であることを示す。

A が $OA(N,k,2,3)$ であるのは

$$A^T(I-P_Y)A=NI_k$$

の時に限ることを示せ。