

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 5 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2023

課題番号：17K00048

研究課題名（和文）計算代数手法による実験計画法の新展開

研究課題名（英文）A new approach to design of experiments by computational algebraic methods

研究代表者

青木 敏 (AOKI, Satoshi)

神戸大学・理学研究科・教授

研究者番号：90332618

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000 円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、複数の多水準因子に対する実験計画法の理論に関連した諸問題を、計算代数の手法を利用して定式化し、新たな結果を得ることを目標とした。研究期間における最も重要な結果は、一部実施計画を代数的に特徴付けることにより、計画をイデアルの零点として計算する方法論を確立したことである。この結果に基づき、応用上重要と思われるいくつかの問題に対して、与えられた特徴を持つ一部実施計画に対応する多項式環のイデアルを定義し、その零点を計算代数手法により列挙して、さらにそれを同値類に分類することで、新たな結果を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題で取り組んだ実験計画法は、応用統計学の重要な一分野である。実験計画法の理論は、数理統計学の研究者だけでなく、広く現場の技術者に理解されるべきものである、という側面がある。そのため、従来の実験計画法の研究は、普及を念頭に置いた、分かりやすい理論構築や使い方の整備が重視されてきた側面があり、一方で、一般的な設定における理論の整備などの数学的な研究が、不十分な面があったといえる。本研究で考えた多水準因子の実験計画も、従来は2水準や3水準因子についての使いやすい手法の整備が重視されていた。それに対し本研究では、完全に一般的な設定でいくつかの結果を得ることに成功した。

研究成果の概要（英文）：The aim of this research is to formulate problems related to the theory of experimental design for several multi-level factors using computational algebraic techniques and obtain new results. The most important result during this research period is the establishment of a methodology for characterizing fractional factorial designs as zeros of polynomial ideals. Based on this result, for several problems that are considered important in applications, new results were obtained by defining ideals of polynomial rings corresponding to fractional factorial designs with given characteristics, enumerating their zeros using computational algebraic techniques, and further classifying them into equivalence classes.

研究分野：計算代数統計

キーワード：計算代数 実験計画法 グレブナー基底 イデアル 直交計画

## 1. 研究開始当初の背景

実験計画法は、効率よくデータを得るための実験方法の設計(計画)の理論、および、データを適切に解析するための方法論の総称である。1920年代に農事試験の分野で誕生した後、工学、医学など幅広い分野で発展を遂げ、特に日本において品質管理という斬新な分野を開拓した実験計画法は、統計学の最も重要な応用分野の1つである。しかし一方で、実験計画法の理論は、統計学者と現場の技術者を中心に発展を遂げており、数学的な記述、解明という面では、その歴史の長さに対し、未だ黎明期にあるといえる。

## 2. 研究の目的

研究代表者は、分割表など離散データ解析手法の研究に加え、計算代数統計とよばれる、代数学を統計学の諸問題に応用する研究を行っている。本課題では、この計算代数統計を、実験計画法の諸問題に応用し、新たな成果を得ることを目的とした。本課題は、実験計画法において特に数学的整備が遅れていると思われる分野である、一部実施計画の一般的な枠組みにおける理論展開に関する研究に、重点的に取り組んだ。特に、従来の一部実施計画の理論では、現場での普及や応用上の使いやすさの点から、2水準あるいは3水準の因子のような限定された場合の方法論の整備が重視されていたことに注目し、一般的な設定における結果を得ることを目指した。

## 3. 研究の方法

一部実施計画の理論を一般的な枠組みで構築するために、多項式環の代数の理論(グレブナー基底の理論)を用いるのが、本研究の特徴である。一部実施計画の計画点を零点とする多項式の集合を、その計画の計画イデアルとよぶ。従来の一部実施計画の理論が、定義関係にもとづく(2水準または3水準の)レギュラーな計画等の一部にクラスに限定されていたのに対し、計画イデアルは、完全に一般的な枠組みでの記述を可能とする。また、代数的な定式化の応用として、一部実施計画の代数構造を利用した最適計画の探索手法の構築がある。これは、直交性などの、一部実施計画のもつ性質を、代数方程式に反映させることにより、与えられた性質をもつ一部実施計画をイデアルの零点として定義し、その列挙を、素イデアル分解などの計算代数手法により実行する、という方法である。

## 4. 研究成果

本課題で得られた研究成果で最も重要なのは、複数の多水準因子に関する完全に一般的な設定において、与えられた性質をもつ一部実施計画を、多項式環のイデアルの零点として特徴づける方法を構築したことである。この成果は、先行研究で2水準計画について得られていた結果を、一般の多水準計画に拡張して得られたものであり、計画上の応答空間の代数構造の理論に基づく。より具体的には、まず、水準を有理数にとる一部実施計画を、有理係数多項式環の指示関数として表す。指示関数は、組合せ配置計画上で定義される多項式関数で、一部実施計画の計画点で1、それ以外の点で0の値を取るものである。計画とその指示関数は、一対一に対応する。指示関数は、もともとは2水準計画に対して先行研究により提案されたものであり、また、2水準計画の指示関数の係数は、その計画の直交性(aberration, resolutionなどの概念)と直接的な関係があることが知られていた。しかし、水準数が一般の計画に対する指示関数については、その性質は複雑であり、知られていなかった。本課題で得られた最初の重要な結果は、この指示関数の構造を、一般的な設定下で解明したものである。具体的には、多項式関数が、ある一部実施計画の指示関数となるための必要十分条件を、その多項式関数の係数が満足する代数方程式系として与えることに成功した。さらに、この代数方程式系に、計画の持つ性質に対応する制約(代数方程式)を追加することにより、与えられた性質を持つ計画(の指示関数の係数)を零点とする多項式環イデアルが定義されることになる。このイデアルは、ゼロ次元イデアルであり、その零点列挙は、計算代数における基本的な問題となる。本課題では、この方法論に基づいて、応用上重要と思われるいくつかの設定における、与えられた直交性をもつ一部実施計画の列挙、分類に成功した。まず、素朴なグレブナー基底の計算により得られた結果として、2水準因子4個、3水準因子1個からなる強度3の直交計画が、56個の零点に対応し、それらが3個の同値類に分類されること、などを示した。以下はこの3種類の計画点を表にしたものである。56個の零点は、(1)を代表点とする2個、(2)を代表点とする6個、(3)を代表点とする48個の計画からなる同値類に分類される。

(1)

X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>
-1	-1	-1	-1	-1
-1	-1	-1	-1	0
-1	-1	-1	-1	1
-1	-1	1	1	-1
-1	-1	1	1	0
-1	-1	1	1	1
-1	1	-1	1	-1
-1	1	-1	1	0
-1	1	-1	1	1
-1	1	1	-1	-1
-1	1	1	-1	0
-1	1	1	-1	1
1	-1	-1	1	-1
1	-1	-1	1	0
1	-1	-1	1	1
1	-1	1	-1	-1
1	-1	1	-1	0
1	-1	1	-1	1
1	1	-1	-1	-1
1	1	-1	-1	0
1	1	-1	-1	1
1	1	1	1	-1
1	1	1	1	0
1	1	1	1	1

(2)

X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>
-1	-1	-1	-1	-1
-1	-1	-1	1	0
-1	-1	-1	1	1
-1	-1	1	-1	1
-1	-1	1	-1	0
-1	-1	1	1	-1
-1	1	-1	-1	1
-1	1	-1	-1	0
-1	1	-1	1	-1
-1	1	1	-1	-1
-1	1	1	1	0
-1	1	1	1	1
1	-1	-1	-1	1
1	-1	-1	-1	0
1	-1	-1	1	-1
1	-1	1	-1	-1
1	-1	1	1	0
1	-1	1	1	1
1	1	-1	-1	-1
1	1	-1	1	0
1	1	-1	1	1
1	1	1	-1	1
1	1	1	-1	0
1	1	1	1	-1

(3)

X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>
-1	-1	-1	-1	1
-1	-1	-1	1	0
-1	-1	-1	1	-1
-1	-1	1	-1	1
-1	-1	1	-1	0
-1	-1	1	1	-1
-1	1	-1	-1	-1
-1	1	-1	-1	0
-1	1	-1	1	1
-1	1	1	-1	-1
-1	1	1	1	0
-1	1	1	1	1
1	-1	-1	-1	-1
1	-1	-1	-1	0
1	-1	-1	1	1
1	-1	1	-1	-1
1	-1	1	1	0
1	-1	1	1	1
1	1	-1	-1	1
1	1	-1	1	0
1	1	-1	1	-1
1	1	1	-1	1
1	1	1	-1	0
1	1	1	1	-1

一方で、同じサイズの問題に対する強度2の直交計画の列挙では、計算量の問題が生じ、素朴なグレブナー基底計算による変数消去が困難となる。この問題に対しては、計算代数の手法である素イデアル分解に、素朴な場合分けを組み合わせることで取り組み、結果として、63個の同値類からなる35200個の零点として得られることを示した。また、応用上重要な成果として、タグチメソッドの理論で使われる、外側-内側配置の問題に対して、新たな結果を得た。外側-内側配置とは、複数の制御因子と誤差因子に対する一部実施計画として、誤差因子による変動を積極的に利用するためのタグチメソッドの方法論では、制御因子を内側の直交表に、誤差因子を外側の直交表に割り付けて、その直積で定義される配置(一部実施計画)を使う、というものである。本課題では、この問題に対し、制御因子の内側配置は直交表への割り付けを残す一方、誤差因子の水準を自由に(非直積型として)選択する、という方針で、性質の良い一部実施計画を選択するための方法論を整備した。具体的な例としては、いずれも2水準の6個の制御因子と3個の誤差因子に対して、性質の良い非直積型配置を代数計算により求め、これが単一の同値類からなることを示した。得られた非直積型計画は、24個の実験点からなり、従来の直積型の実験点のサイズ(32個)を削減している。以下はこの非直積型配置の代表元を表したものである(が計画点を表す)。

X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>	X <sub>6</sub>						
-1	-1	-1	1	1	1						
-1	-1	1	1	-1	-1						
-1	1	-1	-1	1	-1						
-1	1	1	-1	-1	1						
1	-1	-1	-1	-1	1						
1	-1	1	-1	1	-1						
1	1	-1	1	-1	-1						
1	1	1	1	1	1						

この方法論により、実験回数の効率的な削減の可能性が示されたことは、応用上の意義がある成果であると考えられる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Satoshi Aoki and Masayuki Noro	4. 巻 5
2. 論文標題 Use of primary decomposition of polynomial ideals arising from indicator functions to enumerate orthogonal fractions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Statistics and Data Science	6. 最初と最後の頁 165-179
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s42081-022-00149-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wada Yuki, Takehara Tsunayoshi, Suzuki Takeyuki, Aoki Satoshi, Hibi Takayuki, Sako Makoto, Tsujino Hirofumi, Tsutsumi Yasuo, Arisawa Mitsuhiro	4. 巻 40
2. 論文標題 Carbon-Carbon Bond Formation between Nitrogen-Containing Heterocyclic Carbene Ligand on Ruthenium Carbene Catalysts and 1,4-Naphthoquinone via Intramolecular Carbon(sp <sup>3</sup> )-Hydrogen Bond Activation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 2901 ~ 2908
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.organomet.1c00350	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 今井大樹, 青木敏	4. 巻 49
2. 論文標題 計画上の分散分析モデルと多項式モデル	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 応用統計学	6. 最初と最後の頁 127--154
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Satoshi Aoki	4. 巻 203
2. 論文標題 Characterizations of indicator functions and contrast representations of fractional factorial designs with multi-level factors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Planning and Inference	6. 最初と最後の頁 91--105
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jspi.2019.03.003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Satoshi Aoki and Takayuki Hibi	4. 巻 8
2. 論文標題 Markov bases for two-way change-point models of ladder determinantal tables	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Algebraic Statistics	6. 最初と最後の頁 56--73
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18409/jas.v8i1.55	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Aoki Satoshi, Noro Masayuki	4. 巻 14
2. 論文標題 Use of indicator functions to enumerate cross-array designs without direct product structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Algebraic Statistics	6. 最初と最後の頁 167 ~ 179
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2140/astat.2023.14.167	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 青木敏、野呂正行
2. 発表標題 非直積型配置による統計解析
3. 学会等名 日本品質管理学会 第131回研究発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 青木敏、野呂正行
2. 発表標題 直積構造をもたない内側・外側配置
3. 学会等名 確率・統計・行列ワークショップ
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 マルコフ連鎖モンテカルロ法のための計算代数
3. 学会等名 組合せ遷移 第26回セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 青木敏、野呂正行
2. 発表標題 素イデアル分解を利用した一部実施計画の分類
3. 学会等名 2021年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 実験計画法と計算代数
3. 学会等名 Workshop: シミュレーションとモデリングのための計算代数2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 計画上の分散分析モデルと多項式モデル
3. 学会等名 2020年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 Characterizations of indicator functions of fractional factorial designs
3. 学会等名 MACS SG4 & 11 Joint Seminar, 数学と統計・データ科学 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Satoshi Aoki
2. 発表標題 Algebraic methods in the design of experiments
3. 学会等名 ISSAC 2019, The 44th International Symposium on Symbolic & Algebraic Computation. Beihang University, Beijing, China. (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 Characterizations of indicator functions for fractional factorial designs
3. 学会等名 統計関連学会連合大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 Characterizations of indicator functions of fractional factorial designs
3. 学会等名 実験計画法ならびに情報数理と関連する組合せ構造2018 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 Characterizations of indicator functions of fractional factorial designs
3. 学会等名 科研費シンポジウム「融合する統計科学」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Aoki
2. 発表標題 Characterizations of indicator functions of fractional factorial designs
3. 学会等名 Computational and Methodological Statistics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 青木敏
2. 発表標題 Characterizations of indicator functions of fractional factorial designs
3. 学会等名 MACS SG4 & 11 Joint Seminar: 数学と統計・データ科学 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 青木敏、日比孝之
2. 発表標題 分配束に付随するイデアルのグレブナー基底と統計モデル
3. 学会等名 統計関連学会連合大会
4. 発表年 2017年



## 〔図書〕 計5件

1. 著者名 青木敏、竹村彰通、原尚幸	4. 発行年 2019年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 272
3. 書名 代数的統計モデル、理論統計学教程・数理統計の枠組み	

1. 著者名 青木敏	4. 発行年 2018年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 168
3. 書名 計算代数統計 --- グレブナー基底と実験計画法 ---	

1. 著者名 宮川雅巳、青木敏	4. 発行年 2018年
2. 出版社 朝倉書店	5. 総ページ数 145
3. 書名 分割表の統計解析 --- 二元表から多元表まで ---	

1. 著者名 青木敏、竹村彰通	4. 発行年 2018年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 166
3. 書名 確率・統計II	

1. 著者名 青木敏、竹村彰通	4. 発行年 2018年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 166
3. 書名 東京大学工学教程、確率・統計II	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会 Current topics on algebraic statistics and related fields	開催年 2018年～2018年
---	--------------------

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------