科学技術振興機構
戦略的創造研究推進事業
研究領域「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」

越境する数学

現代の産業社会とグレブナー基底の調和

日比孝之

大阪大学大学院情報科学研究科情報基礎数学専攻

2011 年 9 月 7 日

グレブナー基底とは？

連立方程式

$$
\begin{aligned}
f_1(x,y,z) &= x^2+y^2+z^2-1 = 0\\
f_2(x,y,z) &= x^3+y^3+z^3-2 = 0\\
f_3(x,y,z) &= x^4+y^4+z^4-3 = 0
\end{aligned}
$$

呪文を唱えると

$$
\begin{aligned}
g_1(x,y,z) &= 0\\
g_2(y,z) &= 0\\
g_3(z) &= 0
\end{aligned}
$$

$\{g_1, g_2, g_3\}$ **を** $\{f_1, f_2, f_3\}$ **のグレブナー基底と呼ぶ。**

$$g_1(x,y,z) = -4x-4y+3z^{11}+3z^{10}-3z^9-8z^8-8z^7+13z^6-9z^5+4z^4+5z^3-z^2-2z+6$$

$$g_2(y,z) = -4y^2+(3z^{11}+3z^{10}-3z^9-8z^8-8z^7+13z^6-9z^5+4z^4+5z^3-z^2-2z+6)y+(-6z^{11}-6z^{10}+6z^9+19z^8+22z^7-23z^6+16z^5-21z^4-16z^3-10z^2)-4$$

$$g_3(z) = 3z^{12}-6z^{10}-8z^9-3z^8+24z^7-14z^6+24z^5-9z^4-12z^2-4$$

プロジェクトの組織

理論系

2000年　日比　孝之　1990年

大杉　英史

渋田　敬史

岡崎　亮太

応用系

竹村　彰通

青木　敏

栗木　哲

大津　起夫

只木孝太郎

沼田　泰英

計算系

高山　信毅

野呂　正行

野海　正俊

濱田　龍義

武田　朗子

中山　洋将

西山　絢太

寄り合い所帯の仮想研究所

プロジェクトの概要

- **グレブナー基底の一般ユーザーのための環境整備**
  『グレブナー道場』共立出版 2011年9月20日
  準拠する**「道場マルチメディア」**（**ポスター発表**）

- **国際会議開催**（2010年）**報告集出版**（2012年）

- **計算代数統計の世界的研究拠点の形成**
  ☆ “素手”で計算できる**トーリックイデアル**の**グレブナー基底「辞書」**の作成
  ☆ **医学統計**、**教育統計**における（漸近理論による近似ではなく）**マルコフ基底**を使う正確検定の実施
  ☆ センター試験の科目選択問題の大規模な統計学的検証（教育現場への問題提起、**ポスター発表**）

- **Risa/Asirの進化**

  （以下、世界最高速度の実装記録を保持）

  ☆ Ｄイデアル積分アルゴリズム

  ☆ 有理数体上のシチジー計算アルゴリズム

  ☆ 準素成分の個数が数百に及ぶイデアルも効率的に分解できる準素分解アルゴリズム

- **D加群のグレブナー基底と積分アルゴリズム**

  ☆ 不完全Ａ超幾何系の提唱

  ☆ **ホロノミック勾配降下法**（詳細は後述）

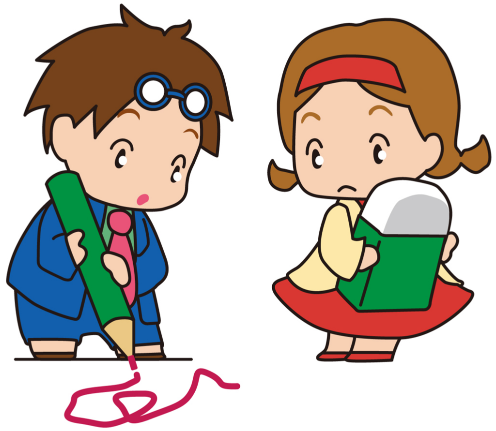
- **若手研究者育成**

  ポスドク（特任助教を含む）を**７名**雇用

  （内、**２名**はパーマネントの職に就いている。）

歴史的背景

1964 年　廣中平祐の特異点解消論文
1965 年　Bruno Buchberger の学位論文
1986 年　**"Macaulay"**（Bayer＆Stillman）
第１のブレークスルー
1991 年　整数計画（Conti＆Traverso）
1995 年　**凸多面体への応用**（Sturmfels）
第２のブレークスルー
1998 年　**統計学への応用**（Diaconis＆Sturmfels）
第３のブレークスルー
2008 年　JST CREST Gröbner Bases
第４のブレークスルーへの挑戦
2014 年　国際会議「グレブナー基底の５０年」



理論系を媒介とする
計算系と応用系の連携

第４のブレークスルー への挑戦

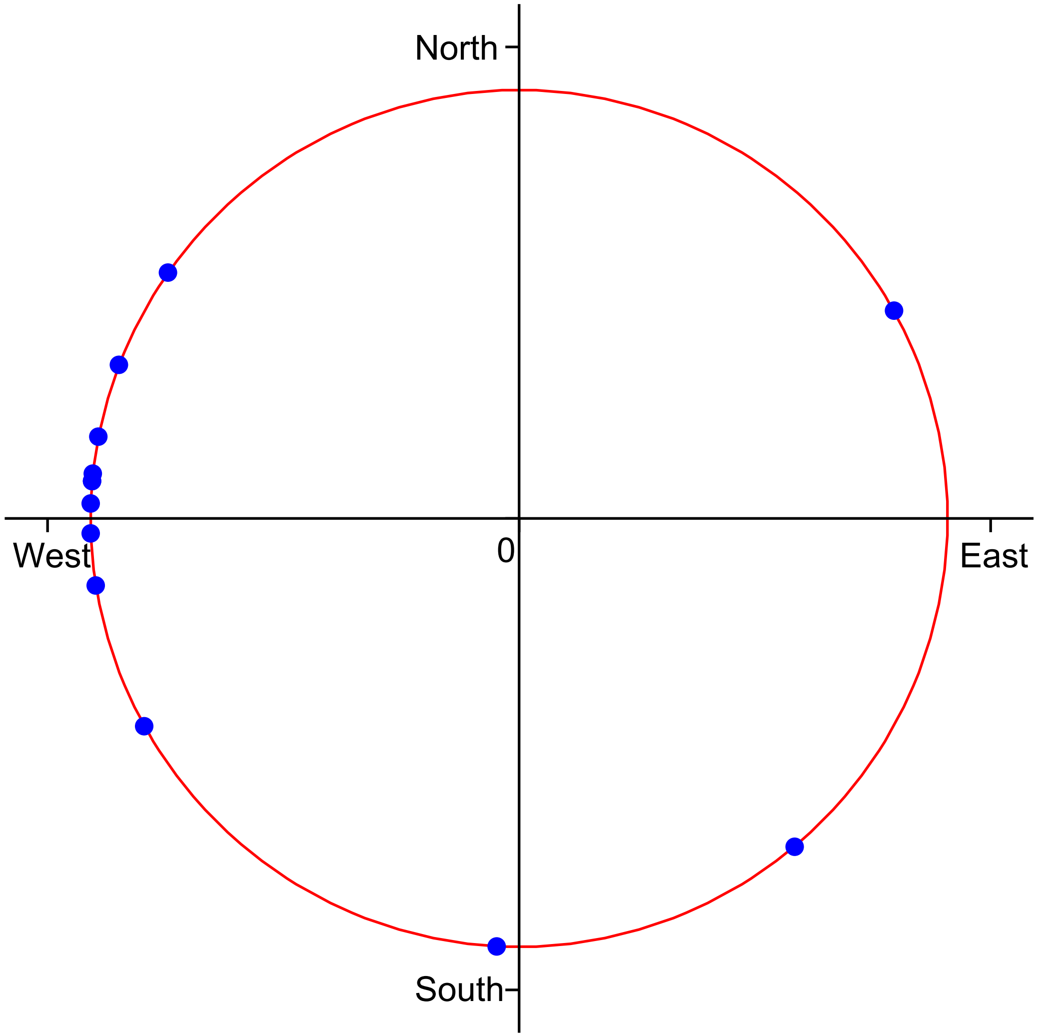
ホロノミック勾配降下法
の魅力と偉力

（短時間で簡単に解説できる）**方向統計学**における円周 $\mathbb{S}^1$ 上の**フォン・ミーゼス分布**のパラメータ最尤推定の具体例を使ってホロノミック勾配降下法を紹介する。

確率密度函数 $\propto f(t;\theta_1,\theta_2) = \exp(\theta_1 \cos t + \theta_2 \sin t)$

$$F(\theta_1,\theta_2) = \int_0^{2\pi} f(t;\theta_1,\theta_2)\,dt$$

観測データ T **の確率** $\quad p(T;\theta_1,\theta_2) = \dfrac{f(T;\theta_1,\theta_2)}{F(\theta_1,\theta_2)}$

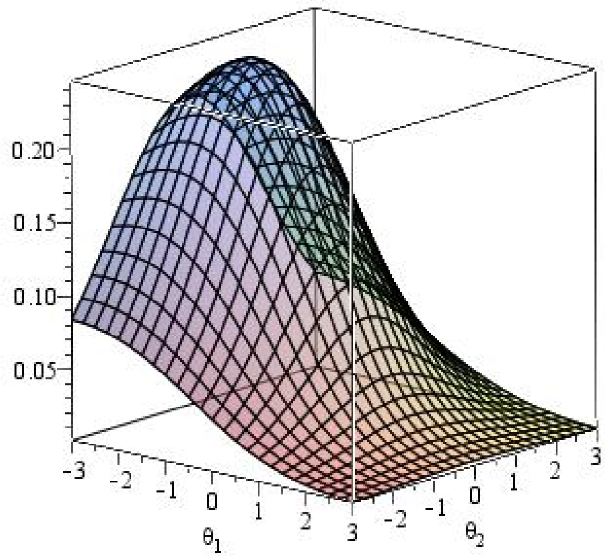


札幌上空約１万メートル地点における午前９時の風向きの１３日間のデータ
（２０１１年１月１日から１４日（１１日は除外）；気象庁の気象統計情報から）

最尤法とは？　$T_1, \ldots, T_N$ が観測データ（$N = 13$）

尤度函数　$L(\theta_1, \theta_2) = \prod_{i=1}^{N} p(T_i; \theta_1, \theta_2)$

を最大化する θ_1 と θ_2 をパラメータの推定値とする。



ホロノミック勾配降下法

（第１段） $\cos t = \frac{1-u^2}{1+u^2}$ $\sin t = \frac{2u}{1+u^2}$

$$F(\theta_1, \theta_2) = \int_{-\infty}^{\infty} g(u, \theta_1, \theta_2)\, du$$

（第２段） $\partial_u = \partial/\partial u$, $\partial_1 = \partial/\partial\theta_1$, $\partial_2 = \partial/\partial\theta_2$

$$D_3 = \mathbb{C}\langle u, \theta_1, \theta_2, \partial_u, \partial_1, \partial_2\rangle$$

$$D_2 = \mathbb{C}\langle \theta_1, \theta_2, \partial_1, \partial_2\rangle$$

函数 g を零化するホロノミックイデアル $I \subset D_3$ を探す。すると $J = (I + \partial_u D_3) \cap D_2$ は F を零化するホロノミックイデアル（Bernstein）である。このとき、D加群のグレブナー基底を使う**積分アルゴリズム**（大阿久俊則）から J が計算可能。

（第３段） イデアル J の $\mathbb{C}(\theta_1, \theta_2)\langle\partial_1, \partial_2\rangle$ におけるグレブナー基底と**標準単項式**の集合 S を計算。イデアル J がホロノミックであることから S は有限集合。

実際、$S = \{1, \partial_2\}$ である。$V = \begin{bmatrix} F \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_2} \end{bmatrix}$ と置く。

（第４段） グレブナー基底による割り算を実行し

$$\frac{\partial V}{\partial \theta_1} = P_1 V, \quad \frac{\partial V}{\partial \theta_2} = P_2 V$$

を満たす２行２列の**パフィアン行列** P_1, P_2 を導く。

（第５段）パフィアン系がわかれば、函数 F の任意回数の偏微分の値は F と $\frac{\partial F}{\partial \theta_2}$ の値で表現可能。

（グレブナー基底による割り算の有効性）

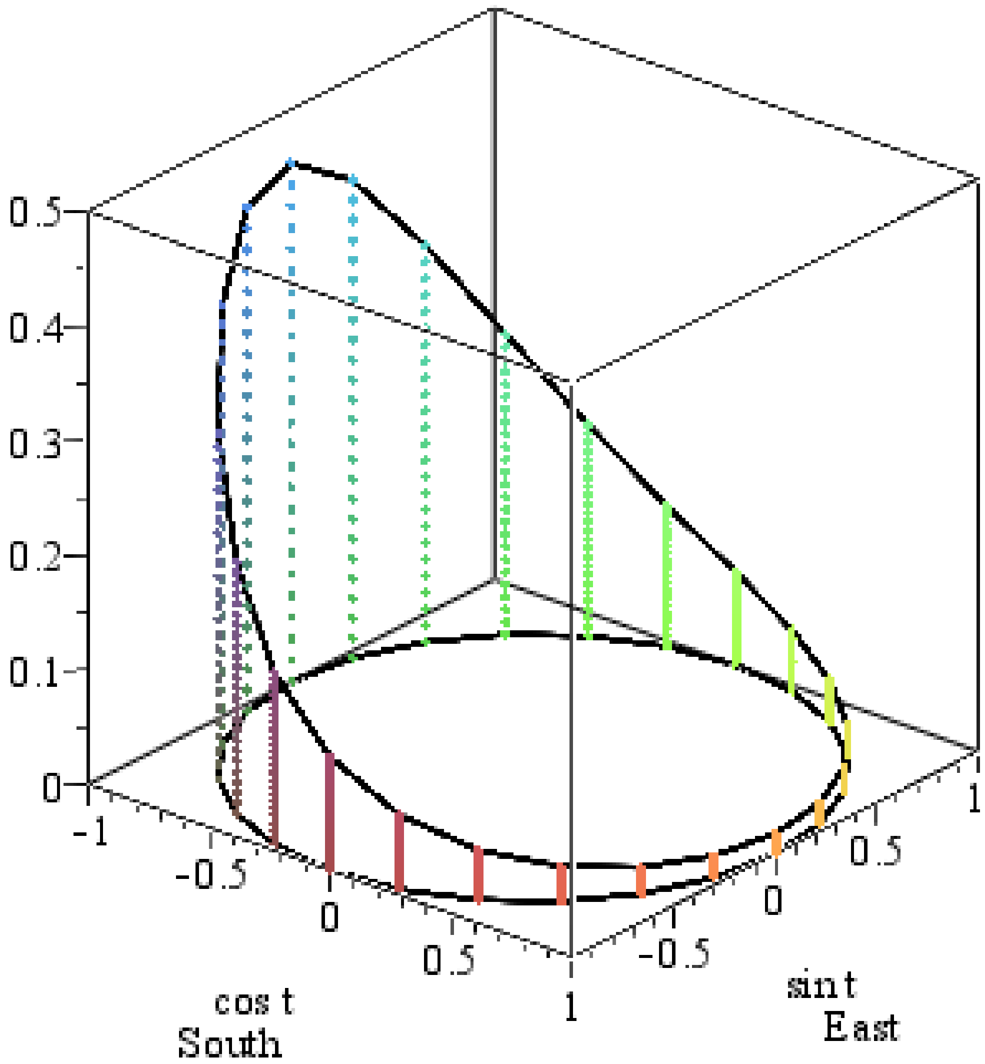
（第６段） $L(\theta_1, \theta_2)$ の最大化を $L(\theta_1, \theta_2)^{-1/N}$

$$= F(\theta_1, \theta_2) \exp\left(-\frac{\theta_1}{N} \sum_{i=1}^{N} \cos T_i - \frac{\theta_2}{N} \sum_{i=1}^{N} \sin T_i\right)$$

の最小化に変更。しかし、標準単項式の集合は不変。すると、$F(\theta_1, \theta_2)$ のパフィアン系から $L(\theta_1, \theta_2)^{-1/N}$ のパフィアン系が導け、**高階微分の値の計算が可能**。

（第７段） 但し、効率性を考慮し、**勾配**（１階微分）、**ヘシアン**（２階微分）などの計算から探索方向を決定し、その後、**４次ルンゲ・クッタ法**を使って動く。この操作を反復し、最小となる点を探す。

$\boxed{\textbf{答}}$ $\theta_1 = -1.62,\ \theta_2 = -0.10$


0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
-1
-0.5
0
0.5
1
cos t
South
-0.5
0
0.5
1
sin t
East

　ホロノミック勾配降下法は、Zeilberger を創始者とする holonomic function approach の潮流に乗る研究であり、指数型分布族の基準化定数、最尤推定量の計算のための、従来の手法の限界を遥かに越える、全く新しい汎用的な方法である。

　ホロノミック勾配降下法は、Zeilberger を創始者とする holonomic function approach の潮流に乗る研究であり、指数型分布族の基準化定数、最尤推定量の計算のための、従来の手法の限界を遥かに越える、全く新しい汎用的な方法である。

　更に、**Risa/Asir** などにおける、微分作用素環のグレブナー基底の高速計算の実装の下、球面 $\mathbb{S}^n$ 上の**フィッシャー・ビンガム分布**など**空間統計学**で重要なパラメータ次元の高い分布でも、適用可能である。

　ホロノミック勾配降下法は、Zeilberger を創始者とする holonomic function approach の潮流に乗る研究であり、指数型分布族の基準化定数、最尤推定量の計算のための、従来の手法の限界を遥かに越える、全く新しい汎用的な方法である。

　更に、**Risa/Asir** などにおける、微分作用素環のグレブナー基底の高速計算の実装の下、球面 $\mathbb{S}^n$ 上の**フィッシャー・ビンガム分布**など**空間統計学**で重要なパラメータ次元の高い分布でも、適用可能である。

　代数、計算、統計の三重奏であり、推定理論を扱う広範な学術領域に**越境**する新展開を誘い、逆に、推定理論からＤ加群の計算数学への魅惑的なフィードバックもあるなど、その華麗なる**調和**から、プロジェクトが目指す**「第４のブレークスルー」**となる可能性を秘める。

これもグレブナー基底
あれもグレブナー基底
たぶんグレブナー基底
きっとグレブナー基底