

令和 2 年 6 月 15 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05279

研究課題名(和文) 統計応用を目指した多変数超幾何方程式系の研究

研究課題名(英文) Study of multi-variable hypergeometric differential equations for statistics

研究代表者

高山 信毅 (Takayama, Nobuki)

神戸大学・理学研究科・教授

研究者番号：30188099

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：holonomic系のPfaffian方程式への変形問題に関して、A-超幾何系に対する新しいアルゴリズムを提案した。行列超幾何 $2F_1$ のPfaffian方程式を導いた。Wishart行列の最大固有値で表されるあるrandom多様体のEuler標数の期待値関数を積分表示した。さまざまな条件のもとその積分がみだすholonomic系を求め数値解析を遂行した。中国剰余定理を用いた差分方程式のエラーフリーの高速計算法を与え二元分割表の正規化定数とその微分の計算への有効性を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Holonomic系のPfaffian方程式を導出するという古典的な問題に関して、新しい計算アルゴリズムを与えるとともに、行列超幾何関数や対称性が高いEuler標数の期待値関数については理論的な結果を得た。これらは統計分布の正規化定数の数値評価問題に適用可能である。

研究成果の概要(英文)：We gave a new algorithm to translate an A-hypergeometric system to a Pfaffian equation. A Pfaffian equation for the matrix  $2F_1$  is derived. We show that the expectation of a random manifold defined by Wishart matrix and its maximal eigenvalue is expressed by an integral. We studied holonomic systems for the integral under several conditions on the Wishart matrix and performed a numerical analysis of them. An error free method to solve systems of difference equations is given. It utilizes the Chinese remainder theorem. It is demonstrated that the method is useful to evaluate the normalizing constant and its derivatives for two way contingency tables.

研究分野：解析学

キーワード：多変数超幾何関数 ホロノミック勾配法 二元分割表 Wishart行列

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景.

ランダム多様体の Euler 標数の期待値による  $p$  値の近似計算法は 2000 年前後から本格的研究がはじまった強力な手法である. 申請者は, 2016 年 4 月より, 科学研究費基盤研究 (B) “期待オイラー標数法の深化と実用化, および関連する数理の展開” (代表, 栗木哲 (統計数理研究所)) の連携研究者として, 上記の Euler 標数の期待値の計算法の研究に参加していた. その中でさまざまな超幾何積分の問題に出会った.

### 2. 研究の目的.

本研究では統計への応用から生じた上記のような多重積分の問題の解決を目指して, 多変数超幾何方程式系を研究を進める. この側面から最も重要な問題は “解の数値を高い精度で得る” ことである. この立場で超幾何方程式論を見直すと, 新しい視点からの理論的問題および計算の問題が浮かび上がってくる. 我々が考察する多変数超幾何方程式系は, 具体的には主に  $A$ -超幾何方程式系または不完全  $A$ -超幾何方程式系である.

### 3. 研究の方法.

さまざまな戦略で “解の数値を高い精度で得る” ことに挑んだ.

(1) この研究にはさまざまな角度からの総合的アプローチが不可欠である. そのために, 毎年 9 月のはじめに超幾何学校 (最新の研究の学校形式による紹介) および 1 月のはじめに超幾何方程式研究会 (研究発表) を開催する.

(2) (不完全)  $A$ -超幾何微分方程式系などを数値解析的に扱いやすい Pfaffian 系 (Runge-Kutta 法が適用しやすい形など), 差分 Pfaffian 系 (隣接関係式) に変形する手法を考察する. Pfaffian 系の構成問題は伝統的問題であるが, それなしには数値解析は困難である.

(3) 初期値のエラーが (不完全)  $A$ -超幾何方程式系でどのように伝搬するか調べる.

(4) 対称性が高い場合には, 青本, 金子らが 1980 年代後半から研究している Selberg 型積分とわれわれの問題が関連していることがわかりつつある. 対称性が高い場合に,  $|t_i^2 - t_j^2|$  の部分を展開せずに, Pfaffian の構成や特殊値の問題を考察することは興味深いし, 数値計算のためにも有用である.

### 4. 研究成果

研究方法 (1) の超幾何学校については最先端の研究内容を紹介する講義録を六甲レクチャーノートとして公開準備中である. また下記のさまざまな研究成果を得るにあたり参考にするとともに, 多角的に刺激をうけた.

研究方法 (2) の holonomic 系の Pfaffian 方程式への変形問題に関して, 下記の成果 (3) において  $A$ -超幾何系に対する新しいアルゴリズムを提案した. また成果 (4) においては行列超幾何  ${}_2F_1$  の Pfaffian 方程式の数値計算に適した形を導いた. 成果 (2) においては holonomic 系の積分の満たす微分方程式の計算アルゴリズムの最新の成果 (C.Kouchan, HolonomicFunctions.m) を活用して  $2 \times 2$  で平均が 0 とは限らない場合の Wishart 行列の最大固有値で定まるある多様体の Euler 標数の期待値が満たす rank 10 の常微分方程式の導出に成功した.

研究方法 (3) の数値エラーの研究に関しては, 成果 (1) で中国剰余定理を用いたエラーフリーな差分方程式の解の高速計算法を与え二元分割表の正規化定数とその微分の計算への有効性を示した. また論文は準備中であるが, defusing method という行列階乗の固有値解析を援用する常微分方程式の安定解法を提

案し, Holonomic gradient method に出現する数値解析で不安定性が発生する常微分方程式に適用して有効性を確認した.

研究方法 (4) の対称性の高い場合の研究に関しては, 成果 (2) で平均 0, 共分散行列がスカラー行列の場合の Wishart 分布の最大固有値がきめるある多様体の Euler 標数の期待値関数が青本, 金子の Selberg 型積分に帰着することを示し, 期待値関数の不完全ガンマ関数の和による公式を導出した.

Holonomic 系の Pfaffian 方程式を導出するという古典的な問題に関して, 新しい計算アルゴリズムを与えるとともに, 行列超幾何関数や対称性が高い Euler 標数の期待値関数については理論的な結果を得た. これらは統計分布の計算問題に適用可能である.

また最終年度の後半からは JST CREST “幾何学的離散力学を核とする構造保存的システムモデリング・シミュレーション基盤” (矢口隆晴代表) に参加している. 微分方程式の解の大域的挙動を安定的に調べる手法の研究という問題意識は共通であり今後本研究の成果とあいまって, 大域的解析手法の研究がさらに進展していくものと期待している.

以下に, 成果 (1)~(4) を詳しく説明する.

(1) Yoshihito Tachibana; Yoshiaki Goto; Tamio Koyama; Nobuki Takayama; Holonomic Gradient Method for Two Way Contingency Tables; to appear in Algebraic Statistics.

$k$  をパラメータとする行列  $P(k)$  に対して積  $P(n-1)P(n-2)\cdots P(1)P(0)$  を matrix factorial (行列階乗) とよぶ. 本論文では  $k$  に自然数を代入したとき  $P(k)$  が有理数となるような行列に対して, matrix factorial を有理数として厳密計算する高速計算アルゴリズムとシステムを与えた.  $n$  が大きくなるときの巨大有理数が出現し  $n$  が増大するときの計算時間はたとえば図 1 のようになる. この論文では matrix factorial の問題にたいして, binary splitting, 一定 step 毎の通分, chinese remainder theorem を利用した modular 計算など各種手法を提案, 比較している. 応用として統計で基本的である二元分割表の正規化定数の厳密計算を扱っている<sup>1</sup>. たとえば図 2 では  $7 \times 7$  分割表 (行列サイズは  $924 \times 924$ ) の正規化定数を 32 プロセッサを並列動作させて modular 計算している計算時間のグラフである. 横軸は周辺和のパラメータ. 計算時間が横軸のパラメータについて線形となっている. 線形常微分方程式の大域的数値解を安定に求めるために Matrix factorial を応用することを現在研究中である.

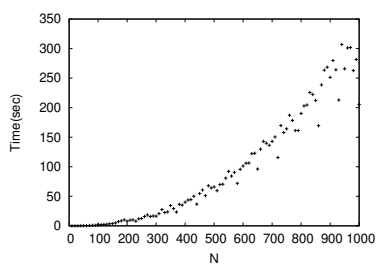


図 1: 素朴な計算法

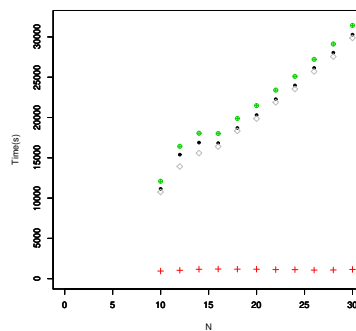


図 2: modular 計算

<sup>1</sup>システムのマニュアルは  
[http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Current/doc/asir-contrib/ja/gtt\\_ekn-html/gtt\\_ekn-ja.html](http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Current/doc/asir-contrib/ja/gtt_ekn-html/gtt_ekn-ja.html)

(2) N.Takayama; L.Jiu; S.Kuriki; Y.Zhang; Computations of the Expected Euler Characteristic for the Largest Eigenvalue of a Real Wishart Matrix; arxiv:1903.10099 (2020 年 5 月に accept, to appear in Journal of Multivariate Analysis).

$A$  を  $m \times n$  実 random 行列.  $g \in S^{m-1}$ ,  $h \in S^{n-1}$  とするとき  $M_x = \{hg^T | g^T A h \geq x\}$  の Euler 標数の期待値を与える多重積分表示を与えた. Euler 標数法の一般論によるとこれは  $AA^T$  の最大固有値の分布を  $x \rightarrow +\infty$  で近似している. われわれはさまざまな条件のもとで, この積分の満たす微分方程式を理論的方法や計算代数の方法で求めた. さらにこの微分方程式の安定な数値解析手法を提案し, これにより高速にこの近似分布を計算する方法を与えた. 図 3 の赤線は  $10 \times 200$  行列  $A$  の各列ベクトルが平均が 0, 共分散  $10 \times E_{10}$  ( $E_{10}$  は  $10 \times 10$  の単位行列) の独立な正規分布であるときの  $M_x$  の Euler 標数の期待値である. この場合は微分方程式が青本, 金子により研究された Selberg 型積分の微分方程式に帰着し, 不完全  $\Gamma$  関数の和による公式で期待値が表示される. これは高速に数値計算可能である. 青がモンテカルロ・シミュレーションによる最大固有値の分布.

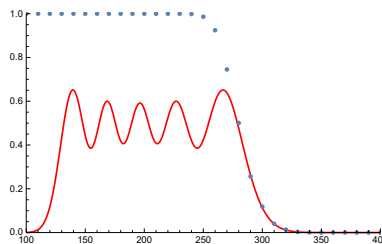


図 3: 最大固有値が  $\sqrt{x}$  ( $x$  は横軸) 以上である確率

(3)

1. S.-J. Matsubara-Heo and N. Takayama; An algorithm of computing cohomology intersection number of hypergeometric integrals; arXiv:1904.01253 (投稿中).
2. Matsubara-Heo and N. Takayama; An algorithm for Pfaffian systems and cohomology intersection numbers of hypergeometric integrals (2020 年 4 月に accept, to appear in Proceedings of ICMS 2020, Springer Lecture Note in Computer Science).

上記の 2 論文では, 微分方程式の有理解をもとめることにより twisted cohomology 群の交点数を決定するアルゴリズムを与えた. 最初の論文が主に理論的側面, 二番目の論文がより効率的な計算のための手法を提案している (<http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Math/intersection2>). 応用としてこれらの交点数は積分で定義される特殊函数達の 2 次関係式をあたえる. 積分で定義される特殊函数達は線形微分方程式系を満たすがこの 2 次関係式は, 方程式系の不変量である.

(4) H.Hashiguchi;N.Takayama;A.Takemura,Distribution of Ratio of two Wish art Matrices and Evaluation of Cumulative Probability by Holonomic Gradient Method,Journal of Multivariate Analysis,165,2018,270-278. 平均 0, 共分散行列が異なる二つの Wishart 行列の比 ( $W_1 W_2^{-1}$ ) の最大固有値の累積分布関数は行列超幾何関数  ${}_2F_1$  を用いて表現できる. この行列超幾何関数が満たす微分方程式の数値計算を行うことによりこの累積分布関数を計算する手法を与えた. この結果は二つの Wishart 行列の共分散行列が等しいかどうかの Roy の検定へ応用可能である. この結果に基づいたソフトウェアパッケージを R の hgm パッケージに関数 `hgm.p2wishart` として公開している <https://cran.r-project.org/package=hgm>.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3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 Hashiguchi Hiroki, Takayama Nobuki, Takemura Akimichi	4. 巻 165
2. 論文標題 Distribution of the ratio of two Wishart matrices and cumulative probability evaluation by the holonomic gradient method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Multivariate Analysis	6. 最初と最後の頁 270~278
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jmva.2018.01.002	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 N.Takayama;S.Kuriki;A.Takemura	4. 巻 99
2. 論文標題 ,A-Hpergeometric Distributions and Newton Polytopes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advances in Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 109-133
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） <a href="https://doi.org/10.1016/j.aam.2018.05.001">https://doi.org/10.1016/j.aam.2018.05.001</a>	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 Y.Tachibana;Y.Goto;T.Koyama;N.Takayama	4. 巻 -
2. 論文標題 Y.Tachibana;Y.Goto;T.Koyama;N.Takayama	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Algebraic Statistics	6. 最初と最後の頁 -
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 -

〔学会発表〕 計11件（うち招待講演 3件／うち国際学会 1件）

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 Jupyter への asir カーネルの実装
3. 学会等名 日本数式処理学会第28回大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 HGM の不安定性をどう回避するか?
3. 学会等名 確率・統計・行列ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N.Takayama
2. 発表標題 Hypergeometric functions and statistics
3. 学会等名 Differential Systems: from theory to computer mathematics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池田;高山
2. 発表標題 Python を用いた asir 実行環境の実装
3. 学会等名 Computer Algebra --- Theory and its Applications
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 GKZ 超幾何系(A-超幾何系)の Pfaffian system の計算法
3. 学会等名 超幾何方程式研究会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 計算代数の direct sampler への応用
3. 学会等名 Computer algebra --- theory and its applications
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 超幾何方程式 $E(k,n)$ の contiguity relation を用いた乱数生成
3. 学会等名 第 1 2 回玉原特殊多様体研究集会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 Twisted cohomology 群の交点数を求めるアルゴリズム
3. 学会等名 日本数学会2019年度年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 Random matrix と多変数特殊関数の数値計算
3. 学会等名 複素微分方程式の楽しみ (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 Non-central complex Wishart 行列の最大固有値の CDF の数値計算
3. 学会等名 確率, 統計, 行列ワークショップ 松本 2017 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高山信毅
2. 発表標題 分割表の条件付き最尤推定のための Risa/Asir パッケージ
3. 学会等名 Risa/Asir Conference, 2018
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>Open Message Exchange for Mathematics  <a href="http://www.openxm.org">http://www.openxm.org</a>  References for HGM  <a href="http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Math/hgm/ref-hgm.html">http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Math/hgm/ref-hgm.html</a></p>
--

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