科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２６ 年　 ６ 月 １６ 日現在

機関番号：１４５０１
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2012～2013
課題番号：２４７４００６４

研究課題名（和文）微分作用素環のグレブナー基底を用いた積分アルゴリズムの応用

研究課題名（英文）Applications of the integration algorithm for D-modules

研究代表者
中山　洋将（Nakayama, Hiromasa）

神戸大学・理学（系）研究科（研究院）・研究員

研究者番号：００５９５９５２

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　1,300,000円、（間接経費）　390,000円

研究成果の概要（和文）：高次元(7 次元まで)の Fisher-Bingham 分布の最尤推定に holonomic 勾配降下法を適用できるようにした。さらに n 次元の Fisher-Bingham 積分の満たす微分方程式系について、ある良い項順序を設定することにより、グレブナー基底を決定することができ、holonomic rank (解空間の次元)を決定することができた。
Lauricella の n 変数超幾何微分方程式系や、Kampe de Feriet の 2 変数超幾何微分方程式系について、グレブナー基底を求めることができ、holonomic rank や特異点集合などを決定することができた。

研究成果の概要（英文）：We propose an accelerated version of the holonomic gradient descent and apply it to calculating the maximum likelihood estimate (MLE) of the Fisher-Bingham distribution on a d-dimensional sphere. These enable us to solve some MLE problems up to dimension d=7 with a specified accuracy. The Fisher-Bingham system is a system of linear partial differential equations satisfied by the Fisher-Bingham integral for the n-dimensional sphere. We show that the holonomic rank of the system is equal to 2n+2.
We derive Groebner bases for Lauricella's hypergeometric differential equations with respect to a monomial order. By using these Groebner bases, we determine characteristic varieties and the singular loci of these differential equations.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学　数学一般

キーワード：グレブナー基底　計算代数　数式処理

１．研究開始当初の背景

線形偏微分方程式系を代数的に取り扱う理論としてD-加群の理論があるが、その理論をもとに、微分作用素環のグレブナー基底などを用いて計算機上で実行できるようなアルゴリズムにしたものが、D-加群の計算アルゴリズムである。その中にD-加群の積分アルゴリズムがある(Oaku 1997, Oaku, Takayama 2001)。これは、被積分関数の満たすholonomic 微分方程式系から積分の満たすholonomic 微分方程式系を計算するもので、多項式係数微分作用素環 D におけるグレブナー基底を用いている。

申請者ら(Nakayama, Nisiyama) は、この積分アルゴリズムをもとに、積分路がサイクルでないような場合でも適用できるようなアルゴリズムを開発した。さらに、多重積分の場合についても計算できるようなアルゴリズムを開発した。この時計算結果として返ってくるのは、積分の満たす非斉次な微分方程式系である。(Nakayama, Nisiyama:“An Algorithm of ComputingInhomogeneous Differential Equations for Definite Integrals”, 2010)

またこのアルゴリズムをもとにすれば、微分作用素を差分作用素に変換する Mellin 変換を使って、パラメータ付きの和の満たす非斉次差分方程式系を計算することができる。和の満たす差分方程式を計算するアルゴリズムは、知られたもの(Zeilberger, Chyzak など) が幾つかあるが、それらでは計算が困難であるが我々の方法なら計算できるような例を幾つか見つけた。(Nakayama:“An Algorithm of Computing Inhomogeneous Difference Equations for Definite Sums”, 2011)

積分アルゴリズムの１つの応用として、申請者ら(Sei, Takayama, Takemura, Nakayama et.al.) は、holonomic 関数の局所最適値を計算する方法である“holonomic 勾配降下法” を作り、方向統計学に出てくる n 次元球面上の積分である Fisher-Bingham 積分について適用した。手法としては、目的関数である積分について、それの満たす微分方程式系を積分アルゴリズムにより求め、その微分方程式系を Pfaffian 系に変換し、それを使って勾配降下法を行うというものである。この方法を使うと、初期位置での積分値さえ求められれば、あとは数値積分をしなくてもよいという利点がある。(Sei, Takayama, Takemura, Nakayama, et. al. :“Holonomic Gradient Descent and its Application to Fisher-Bingham Integral”, 2011)

D 加群の計算アルゴリズムはおもに、多項式係数微分作用素環 D におけるグレブナー基底を用いている。一般的に、多項式環におけるグレブナー基底計算に比べ、D でのグレブナー基底計算は困難であることが知られている。積分アルゴリズムの効率化には、D でのグレブナー基底計算の効率化が必要不可欠である。申請者は、グレブナー基底を計算するアルゴリズムである Buchberger アルゴリズムを可視化するソフトウェアを作り、興味深い計算例を幾つか得た。(Nakayama :“ An Interactive User Interface for Division Algorithms and the Buchberger Algorithm”, 2006)

２．研究の目的

D 加群の積分アルゴリズムについて、統計学などへの応用、適用範囲の拡張、計算効率の改良などを行う。微分作用素環のイデアルのグレブナー基底に関して、新たな計算方法の開発を行う。具体的には以下のような点を中心に研究を行う。

(1) 積分アルゴリズムを、統計学などに出てくる積分などへの適用し、新たな公式等を導出する。組合せ論などに出てくる級数についても、同様の手法により新たな公式等を導出する。

(2) holonomic 関数の局所最適値を計算する方法である“holonomic 勾配降下法” について、応用例を探す。現時点では、計算量の問題で、2 次元球面上の Fisher-Bingham 積分までしか適用できないが、さらに高次元の Fisher-Bingham 積分について計算を行う。

(3) 微分作用素環 D におけるグレブナー基底計算を効率的に行う手法の開発。

３．研究の方法

(1) 積分アルゴリズムを、統計学などに出てくる積分などへの適用し、新たな公式等を導出する。組合せ論などに出てくる級数についても、同様の手法により、新たな公式等を導出する。現時点において、D-加群の積分アルゴリズムを実行できるプログラム nk restriction.rr を数式処理ソフト Risa/Asir 上に実装し、web 上で公開している。このプログラムを使い、統計学、組合せ論などに出てくる積分、級数の計算を行う。

(2) holonomic 関数の局所最適値を計算する方法である“holonomic 勾配降下法” について、応用例を探す。特にターゲットとする問題としては、高次元の Fisher-Bingham 積分がある。2011 年時点では、計算量の問題から、n = 2 の Fisher-Bingham 積分までしか“holonomic 勾配降下法” は適用できていなかった。n が 3 以上の場合について、計算方法を工夫し、この手法を適用できるようにする。n = 1 の Fisher-Bingham 積分についての”holonomic 勾配降下法” を実行できるプログラム fb1.rr を数式処理ソフト Risa/Asir 上に実装している。このプログラムをもとに応用例を探す。

(3) 微分作用素環 D におけるグレブナー基

底計算を効率的に行う手法の開発。積分アルゴリズムの効率化には、微分作用素環 D でのグレブナー基底計算の効率化が必要不可欠である。しかし多項式環でのグレブナー基底計算に比べ、微分作用素環での計算は非常に時間がかかることが多い。それは微分作用素環の非可換性のため、多項式環では行うことができる計算の省略(具体的には, Buchberger criterion と呼ばれるもの) が行えないことによる。申請者は、グレブナー基底を計算するアルゴリズムである Buchberger アルゴリズムを可視化するソフトウェアを作った。(Nakayama : "An Interactive User Interface for Division Algorithms and the Buchberger Algorithm", 2006)このソフトウェアを用いて、アルゴリズムの途中経過などを観察し、計算のボトルネックを探しその改良を図る。また、多項式環のイデアルのグレブナー基底について、計算機を用いなくても理論的にグレブナー基底が計算できるような場合がある。例えば、ある特殊なトーリックイデアルなどの場合、組合せ論的な情報からグレブナー基底が得られる。多項式環のように、微分作用素環のイデアルについても、理論的にグレブナー基底が得られるような例を探す。

４．研究成果

(1) 2011 年の論文では、2 次元の Fisher-Bingham 積分に対してまでしか、holonomic 勾配降下法は適用できなかった。それは、積分の満たす微分方程式系を Pfaff 系と呼ばれる 1 階の微分方程式系に変形する計算が非常に困難であったことによる。2014 年の論文では、Pfaff 系の計算について理論的な結果を用いることによって、さらに高次元(7 次元まで)の Fisher-Bingham 積分に対して、"holonomic 勾配降下法" を適用することが可能になった。

(2) 一般の n 次元の Fisher-Bingham 積分の満たす微分方程式系について、ある良い項順序を設定することにより、グレブナー基底を決定することができた。そのグレブナー基底を用いると、この微分方程式系の holonomic rank (解空間の次元)を決定することができた。(2014 年の論文)

(3) さらに、このグレブナー基底を決定する際に用いた方法を他の微分方程式系に適用することができ、Lauricella の n 変数超幾何微分方程式系や、Kampe de Feriet の 2 変数超幾何微分方程式系についても、良い項順序を設定する事により、グレブナー基底を求めることができた。そして、そのグレブナー基底を用いることで、holonomic rank や特異点集合などを決定することができた。(2014 年の論文)

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計　8 件）

① T. Koyama, H. Nakayama, K. Nishiyama, N. Takayama, The Holonomic Rank of the Fisher-Bingham System of Differential Equations, Journal of Pure and Applied Algebra (accepted), arXiv:1205.6144, (査読有)

② T. Koyama, H. Nakayama, K. Nishiyama, N. Takayama, Holonomic Gradient Descent for the Fisher-Bingham Distribution on the n-dimensional Sphere, Computational Statistics (accepted), (doi:10.1007/s00180-013-0456-z), (査読有)

③ H. Nakayama, Gr\"{o}bner basis and singular locus of Lauricella's hypergeometric equation, Kyushu Journal of Mathematics (accepted), arXiv:1303.1674, (査読有)

④ H. Nakayama, N. Takayama, Computing Differential Equations for Integrals Associated to Smooth Fano Polytope, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics 30 (2013), 307–319, (doi:10.1007/s13160-013-0105-5), (査読有)

⑤ 中山洋将, Gr\"{o}bner basis of Lauricella's hypergeometric equations and its applications, COE Lecture Note Vol.49 (数式処理研究と産学連携の新たな発展), 2013, 7--13 (査読無)

⑥ 中山洋将, Lauricella 超幾何微分方程式系のグレブナー基底について, 数理解析講究録 1843 (Computer Algebra - The Algorithms, Implementations and

the Next Generation -), 2013, 114--118 (査読無)

⑦ 中山洋将，西山絢太，積分の満たす非斉次微分方程式系を与えるアルゴリズム，数理解析講究録 1815 (Computer Algebra - Design of Algorithms, Implementations and Applications), 2012, 112--123 (査読無)

⑧ 中山洋将， D 加群の積分アルゴリズムと近似零化イデアル，数理解析講究録 1793 (Developments in Computer Algebra Research 数式処理研究の新たな発展)，2012，22–29 (査読無)

〔学会発表〕（計 18 件）

① 中山洋将， HGD 用ライブラリについて，代数統計学とソフトウエア --- 城崎ワークショップ (日比プロジェクトソフトウエア成果物報告会)，城崎市民センター会議室，兵庫，2014.3.19.

② 中山洋将， Kamp\'{e} de F\'{e}riet の 2 変数超幾何微分方程式系のグレブナー基底', Risa/Asir Conference 2014，神戸大学，兵庫，2014.3.4.

③ 中山洋将， Kamp\'{e} de F\'{e}riet の 2 変数超幾何微分方程式系のグレブナー基底，グレブナー若手集会，九州大学，福岡，2014.2.15.

④ 中山洋将，Gr\"{o}bner basis of Lauricella's hypergeometric equations and its applications，マスフォアインダストリ研究所 共同利用研究集会 II 数式処理研究と産学連携の新たな発展，九州大学，福岡，2013.8.21.

⑤ 中山洋将，Lauricella 超幾何関数のグレブナー基底と Pfaff 系，グレブナー若手集会，信州大学，長野，2013.7.15.

⑥ 中山洋将，Lauricella 超幾何微分方程式系のグレブナー基底とその応用，第 22 回日本数式処理学会大会，防衛大学校，神奈川，2013.6.8.

⑦ H. Nakayama，Gr\"{o}bner basis and singular locus of Lauricella's hypergeometric differential equations, Weekend Workshop on Computational Approaches to D-modules and Hypergeometric Systems，神戸大学，神戸，2013.4.19.

⑧ 中山洋将，Lauricella 超幾何関数の満たす微分方程式系のグレブナー基底とその応用，日本数学会 2013 年度年会，京都大学，京都，2013.3.20.

⑨ 中山洋将，Lauricella 超幾何微分方程式系のグレブナー基底，Risa/Asir Conference 2013 + 第 5 回六甲博多計算代数会議，神戸大学，神戸，2013.3.18.

⑩ 中山洋将，Lauricella 超幾何関数の満たす微分方程式系のグレブナー基底とその応用，グレブナー若手集会，立教大学，東京，2013.2.22.

⑪ 中山洋将，Lauricella 超幾何関数の満たす微分方程式系のグレブナー基底とその応用，超幾何方程式研究会 2013，神戸大学，神戸，2013.1.6.

⑫ 中山洋将，Lauricella 超幾何関数の満たす微分方程式系のグレブナー基底とその応用，RIMS 研究集会(数式処理 その研究と目指すもの)，京都大学数理解析研究所，京都，2012.12.26.

⑬ 中山洋将，小山民雄，西山絢太，高山信毅，n 次元 Fisher-Bingham 分布のホロノミック勾配降下法による最尤推定，日本数学会 2012 年度秋季総合分科会，九州大学，福岡，2012.9.18.

⑭ 小山民雄，中山洋将，西山絢太，高山信毅，Fisher-Bingham 微分方程式系のホロノミックランク，日本数学会 2012 年度秋季総合分科会，九州大学，福岡，2012.9.18.

⑮ 中山洋将，多項式，微分作用素の Mora の割り算アルゴリズム，グレブナー基底，「現代の産業社会とグレブナー基底の調和」若手研究集会，慶応義塾大学，神奈川，2012.7.16.

⑯ 中山洋将，小山民雄，西山絢太，高山信毅，n 次元 Fisher--Bingham 分布に対する勾配降下法の実装，RIMS 共同研究 (数式処理研究の新たな発展)，京都大学数理解析研究所，京都，2012.7.6.

⑰ 中山洋将，小山民雄，西山絢太，高山信毅，n 次元 Fisher--Bingham 分布の最尤推定，JST CREST 日比チーム公開研究集会「統計学とグレブナー基底」，東京大学，2012.6.1.

⑱ 中山洋将，小山民雄，西山絢太，高山信毅，Fisher--Bingham 微分方程式系のホロノミックランク，JST CREST 日比チーム公開研究集会「統計学とグレブナー基底」，東京大学，2012.6.1.

〔図書〕（計　1　件）

① T. Hibi, T. Hamada, M. Noro, A. Takemura, T. Aoki, H. Ohsugi, N. Takayama, H. Nakayama, K. Nishiyama, Gr\"{o}bner bases --- Statistics and Software Systems, Springer, (Chapter 7 p.345 – p.466 担当), 2014 年

〔産業財産権〕
○出願状況（計　0　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計　0　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

http://www.math.kobe-u.ac.jp/~nakayama/

６．研究組織
(1)研究代表者
中山 洋将（Nakayama Hiromasa）
神戸大学大学院理学研究科　学術推進研究員
研究者番号：00595952

(2)研究分担者
（　　　）

研究者番号：

(3)連携研究者
（　　　）

研究者番号：