

令和元年5月22日現在

機関番号：14201

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2013～2017

課題番号：25220001

研究課題名(和文) 計算代数統計による統計と関連数学領域の革新

研究課題名(英文) Innovation in statistics and related mathematics through computational algebraic statistics

研究代表者

竹村 彰通 (TAKEMURA, AKIMICHI)

滋賀大学・データサイエンス学部・教授

研究者番号：10171670

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 108,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、計算代数統計の方法を様々な統計学の問題に応用することにより、既存の方法では計算が困難であった問題に対して実際の計算が可能となることを示した。特に研究代表者が8年ほど前に提案したホロノミック勾配法については、数学的にも応用面でも重要な成果が得られ、日本数学会2015年度解析学賞の対象となった。数理統計学の困難な問題にチャレンジする中から代数学の観点からも意味のある結果が得られ、その意味で、「計算」「代数」「統計」をつなぐ研究となった。研究の成果は研究論文として刊行されたが、そのみならず統計解析分野で標準となっているRのパッケージとしてユーザーに提供したことも本研究の成果である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は課題名にあるように「計算」「代数」「統計」の3つの領域にかかわる研究分野である。より具体的には、1)数値計算、2)グレブナー基底の理論に基づく代数学と代数計算、3)数理統計学の分布論への応用、の3領域であり、本研究での成果はこれらの分野に複合的な効果をもたらした。特にホロノミック勾配法については、その実装において代数計算と数値計算をうまく組み合わせることにより高い性能を出すことがわかり、代数計算の有用性と限界が明らかになった。また応用面では、統計学のみならず無線通信分野における成果が得られたことにも、本研究の有用性があらわれている。

研究成果の概要(英文)：In this project we showed that practical computations for many problems, for which existing methods were not feasible, can be performed using the methodology of computational algebraic statistics. In particular we obtained some important results from the theoretical as well as applied viewpoint on the Holonomic Gradient Method, which was proposed by the principal investigator about 8 years ago. Importance of these results were acknowledged by the Analysis Prize of the Mathematical Society of Japan in 2015. By challenging classical difficult problems in mathematical statistics from the viewpoint of algebra, some useful results in algebra have also been obtained. In this sense, the project bridged computation, algebra and statistics. Our results were published in many papers. In addition, the results were implemented in a package for R and provided to the users of statistics.

研究分野：情報学

キーワード：統計的推測 計算代数統計

1. 研究開始当初の背景

計算代数統計は1990年代の終わりに Bernd Sturmfels らによって開拓された分野であるが、研究代表者のグループも2004年頃にこの分野に参入した。そして、研究代表者の竹村を中心とする数理統計学の研究者グループと、本研究の分担者となった日比孝之、高山信毅らの数学者が共同して研究進めた。特に計算代数統計の一つの中心的な課題であるマルコフ基底とトーリックイデアルの研究では多くの成果を得ていた。また、それぞれのグループに参加する若手の研究者の層も厚くなってきていた。このように、統計学者と数学者が密に協働する共同研究グループは国際的にも数少ないものであり、本研究ではこのような共同研究を加速することにより、統計学全般および関連する数学領域の革新を国際的に先導することを目指すこととした。

特に、以上の共同研究の中で2011年に研究代表者が提案した「ホロノミック勾配法」は統計学にとって非常に有望な方法と思われた。ホロノミック勾配法の理論や考え方は統計学ではそれまで全く知られていなかったために、この考え方に基づいて統計学における標本分布論を見直すと、非常に多くの確率分布族がこの方法で扱えることがわかってきていた。本研究開始前のいくつかの研究での検証によれば、すでに既存の方法が知られている統計的問題についても、ホロノミック勾配法は数値的に既存の方法と同等以上の性能を示していた。この意味で、ホロノミック勾配法により、統計学の標本分布論の古典的な体系は、根本的な書き換えが迫られている状況にあった。さらにマルコフ基底とトーリックイデアルの分野の研究にもまだ数多くの課題が残されている状況であった。

2. 研究の目的

以上のような背景のもと、本研究の目的は、計算代数統計分野の発展を加速することにより、数理統計学全般を代数的手法によって変革するとともに、統計学から提示される具体的な諸問題の研究により、可換環論やD加群理論などの関連する数学領域の研究においても変革をもたらすこととした。可換環論の研究とは、統計学の問題としては正確検定のためのマルコフ基底の研究であり、数学としては統計学に現れるトーリックイデアルの性質やその生成系を求める問題である。またD加群理論はホロノミック勾配法の基礎をなす数学的理論であり、特にD加群のグレブナー基底の計算の効率がホロノミック勾配法の性能に重要であった。このように統計学から提示される具体的な問題に現れる代数的な構造やその効率的な計算に関する研究により、分野融合的な新たな進展をもたらすことを目指した。

3. 研究の方法

研究代表者および研究分担者がそれぞれの専門性を生かしつつ、統計学の提供する諸問題について共同で研究を進めることとした。研究代表者の竹村は数理統計学の立場から課題設定をおこない、代数的な手法を数理統計学の問題に応用する。分担者の高山はD加群の計算理論の研究および計算機実装をおこない、日比はマルコフ基底とトーリックイデアルの理論の研究を推

進することとした。

ホロノミック勾配法の統計学への応用では、確率分布族のパラメータの関数としての基準化定数や領域の確率が満たす微分方程式を導き、それを数値積分に適する形に変形することが具体的な課題となる。ホロノミック勾配法の原理はどの確率分布族でも同様であるが、統計学において有用な分布族は、数学的な観点からもそれぞれ興味深い性質を持つことが多く、統計学の古典的な標本分布論の困難な課題の中にさまざまな数学的な構造が見られる。このため、標本分布論全般の諸結果を見直すことにより、計算代数統計の観点から新たな展開を見出すことを研究の方針とした。

研究形態としては、国際研究集会の開催により国内外の主要な研究者との交流をおこなうとともに、海外の学会において積極的に研究成果を発表することとした。また異なる分野の研究者の有効な協働と若手研究者の育成のために、チュートリアルを含めた専門にとらわれないワークショップや研究集会を重視した。

4. 研究成果

本研究から非常に多くの研究成果が得られた。本研究期間中に刊行された本研究に関する論文は、研究代表者が著者となったものだけでも 30 本近くとなった。特にホロノミック勾配法に関しては、この方法の有用性が広く認識されることとなり、竹村はこの業績により日本数学会 2015 年度解析学賞を受賞した。

ホロノミック勾配法に関する具体的な研究成果としては、まず正規分布のもとでの標本分布論への応用があげられる。ホロノミック勾配法により、球体確率及び象限確率の計算において既存の方法を上回る精度と速度が得られた。また以下で述べるように、行列変数の超幾何関数の数値的評価は数理統計学における古典的な難問であり、この問題へのホロノミック勾配法の有効性を示した。さらにホロノミック勾配法を R の CRAN パッケージとして実装して公開したことも本研究の重要な成果と言える。

また、統計学以外への応用としては、無線通信分野における多入力多出力系(MIMO, Multiple Input Multiple Output)の復号方式の性能評価へのホロノミック勾配法の応用があげられる。

さらにマルコフ基底とトーリックイデアルの理論の研究については、分担者の日比孝之、連携研究者の大杉英史、青木敏らによって精力的に進められ、いくつかの統計的仮説検定の問題に対するマルコフ基底の導出やイデアルとしての性質の解明などの研究成果が得られた。

以下、ホロノミック勾配法に関していくつかの個別の研究成果を説明する。

(1) 行列変数の超幾何関数のためのホロノミック勾配法

行列変数の超幾何関数は、多変量正規分布に基づく基本的な標本分布に現れる。分散共分散行列が一般の場合のウィシャート行列の最大固有根の分布が ${}_1F_1$ によって表されるという結果が代表的な例である。行列変数の超幾何関数は 1955 年に C.S.Herz により積分の形で定義されたが、その後 1960 年代にはゾーナル多項式を含む無限級数が A.T.James や A.G.Constantine

により導出され、その後は無限級数表現自体が定義と考えられるようになっていた。ゾーナル多項式の定義は群の表現論に基づく美しいものであったが、その計算には組合せ的に非常に複雑な漸化式を用いる必要があり、実際の数値計算は非常な困難を伴うものであった。その後1970年にR.J.Muirhead(引用文献)により ${}_1F_1$ 及び ${}_2F_1$ の満たす偏微分方程式が導出されたが、微分方程式を実際に数値的な解くことはなされていなかった。このような事情で、行列変数の超幾何関数はその背後の美しい数学的な理論にもかかわらず、数値的な計算の困難さのために、実用的な観点からは何十年も進展のない状況にあった。

この状況を打開したのが2013年の ${}_1F_1$ へのホロノミック勾配法の適用であった(引用文献)。そして、2018年にはこれを ${}_2F_1$ に拡張することに成功した(文献)。 ${}_2F_1$ は二つの多変量正規分布の分散共分散行列の同等性検定において、最大根検定の検出力の評価に現れるものである。 ${}_2F_1$ に対するホロノミック勾配法は、二つの自由度や分散共分散行列があまり極端な値をとらない場合には、速度の面でも精度の面でも、実用的に動くことが確認された。

(2) 分割表の対立仮説のもとでの条件つき分布として現れるA-超幾何分布の研究

分割表の正確検定のためのマルコフ基底の議論では帰無仮説のもとでの条件つき分布を生成するアルゴリズムが研究されている。一方で対立仮説のもとでは、周辺頻度を与えた時の条件つき分布であるA-超幾何分布の最尤推定が必要となる。また帰無仮説の検定方式に対する検出力の計算にはA-超幾何分布のもとでの統計量の期待値の評価が必要となる。文献 ではA-超幾何分布を幾何学的な観点から研究し、ホロノミック勾配法を用いてA-超幾何分布の条件つき最尤推定のアルゴリズムを与えた。また周辺頻度を順次変更していく iterative proportional scaling 法(IPS法)と条件付き最尤推定法の漸近的同等性を示し、IPSによる推定値を条件付き最尤推定のための初期値として用いることを提案した。

(3) 無線通信分野の統計的性能評価

無線通信方式、特に複数のアンテナを用いるMIMO方式でのSN比の分布の数値的评价是応用上重要な課題となっていた。この問題は、数理統計学の問題としては、非心複素ウィシャート分布の分布論の評価に帰着する。特にMIMO方式での現実的なパラメータのもとでの数値計算は、非心度のかなり大きな複素ウィシャート行列の分布関数の計算が必要となり、困難な課題であった。この問題について、非心度行列のランクが小さなやや限られたケースではあるものの、ホロノミック勾配法により高速かつ高精度の計算が可能となった(文献 、)。文献 は zero-forcing とよばれる通信方式、文献 は beam-forming と呼ばれる通信方式の研究である。これらの論文により、ホロノミック勾配法が無線通信の分野でも有効であることが示された。

(4) 指数多項式分布の提案とその最尤推定

切断正規分布を拡張し、指数関数の肩に多項式が乗る形の指数型分布族である

“exponential-polynomial distribution” (「指数多項式分布」)を提案し、1次元と2次元の場合に、ホロノミック勾配法によりその最尤推定が実用的におこなえることを示した(文献)。1次元指数多項式分布の基準化定数の満たすホロノミック系は単純であるが、2次元の場合の基準化定数のホロノミック系は、二つの多項式の終結式によって表されるため、その特異点の挙動はやや複雑となることを例とともに示した。

<引用文献>

Robb J. Muirhead. Systems of partial differential equations for hypergeometric functions of matrix argument. *Annals of Mathematical Statistics*, 41, 991-1001. 1970.
Hiroki Hashiguchi, Yasuhide Numata, Nobuki Takayama and Akimichi Takemura. The holonomic gradient method for the distribution function of the largest root of a Wishart matrix. *Journal of Multivariate Analysis*, 117, 296-312. 2013.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計5件、その他計40件)

Raimundas Vidunas and Akimichi Takemura. Differential relations for the largest root distribution of complex non-central Wishart matrices. in *The 50th Anniversary of Grobner Basis*, edited by Takayuki Hibi, Advanced Studies in Pure Mathematics, 77, 411-436. 2018. (査読有)

Nobuki Takayama, Satoshi Kuriki and Akimichi Takemura. A-hypergeometric distributions and Newton polytopes. *Advances in Applied Mathematics*, 99, 109-133. doi:10.1016/j.aam.2018.05.001. 2018. (査読有)

Hiroki Hashiguchi, Nobuki Takayama and Akimichi Takemura. Distribution of the ratio of two Wishart matrices and cumulative probability evaluation by the holonomic gradient method. *Journal of Multivariate Analysis*, 165, 270-278. doi:10.1016/j.jmva.2018.01.002. 2018. (査読有)

Constantin Siriteanu, Akimichi Takemura, Christoph Koutschan, Satoshi Kuriki, Donald Richards and Hyundong Shin. Exact ZF analysis and computer-algebra-aided evaluation in rank-1 LoS Rician fading. *IEEE Transactions on Wireless Communications*, 15, 5245-5259. doi:10.1109/TWC.2016.2555796. doi:10.1109/TWC.2016.2555796. 2016. (査読有)

Jumpei Hayakawa and Akimichi Takemura. Estimation of exponential-polynomial distribution by holonomic gradient descent. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, 45, 6860-6882. doi:10.1080/03610926.2014.968735. 2016. (査読有)

〔学会発表〕(計4件、その他多数)

“Use of asymptotics for holonomic gradient method”, Akimichi Takemura. An invited talk at RIMS workshop, Algebraic Statistics and Symbolic Computation, Research Institute of Mathematical Science, Kyoto University, Kyoto, July 25, 2016.

“Multivariate distribution theory by holonomic gradient method”, Akimichi Takemura.

An invited talk at IMS-APRM 2016 (the 4th Institute of Mathematical Statistics Asia Pacific Rim Meeting), The Chinese University of Hong Kong, Hong Kong, June 28, 2016.

“Holonomic gradient method for hypergeometric functions of a matrix argument”, Akimichi Takemura. A talk at AAMS2016 (Applications of Algebraic Methods to Statistics), Research Institute of Mathematical Science, Kyoto University, Kyoto, June 20, 2016.

「ホロノミック勾配法に関する研究」竹村彰通. 日本数学会 2016 年度年会, 日本数学会解析学賞受賞特別講演, 筑波大学, 2016 年 3 月 18 日.

〔図書〕

青木敏, 竹村彰通、丸善出版「確率・統計 II」. 2018, 193.

竹村彰通, 日比孝之, 原尚幸, 東谷章弘, 清智也、共立出版「グレブナー教室 - 計算代数統計への招待」2015, 205.

6 . 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：高山 信毅

ローマ字氏名：(TAKAYAMA, nobuki)

所属研究機関名：神戸大学

部局名：理学研究科

職名：教授

研究者番号：30188099

研究分担者氏名：日比 孝之

ローマ字氏名：(HIBI, takayuki)

所属研究機関名：大阪大学

部局名：情報科学研究科

職名：教授

研究者番号：80181113