統計数理研究所 75 周年記念事業（2019）

抽出法と計算代数

Samplers and Computational Algebra

数理・推論研究系 間野 修平（Shuhei Mano）

要　　旨

Diaconis と Sturmfels は，Markov chain Monte Carlo について，Markov 連鎖の推移の基底である Markov 基底を導入し，それが十分統計量が定める多項式環のトーリックイデアルの Gröbner 基底により与えられることを示した．筆者は，微分作用素環の考察により，標本経路が目的の分布に従う Markov 連鎖を構成することで，直接抽出が可能であることを示した．

キーワード：代数統計, 抽出法, 計算代数, Gröbner 基底, 超幾何系

1. はじめに

近年の代数統計の研究は，Pistone と Wynn (1996) による実験計画法における母数の識別性に関する研究と，Diaconis と Sturmfels (1998) による Markov chain Monte Carlo (MCMC) における定常分布を目的の分布とする Markov 連鎖の推移の基底である Markov 基底の導入が源流とされる．後者の周辺の発展については Aoki et al. (2012) を参照．MCMC の長所は正規化定数の計算を要しないこと，短所は定常分布からの抽出を保証し難いことで，正規化定数を効率的に計算できるなら MCMC を使う必要はない．筆者は，微分作用素環の考察により，標本経路が目的とする分布に従う Markov 連鎖を構成し，推移確率に現れる正規化定数を計算すれば，目的の分布からの直接抽出が可能であることを示した (Mano 2017)．本稿では，その概略を紹介する．詳細と参考文献については Mano (2018) を参照されたい．

2. Markov 基底

カウントベクトル $c \in \mathbb{N}_0^m$ が従う分布からの MCMC における Markov 連鎖の状態空間は，十分統計量 $b \in \mathbb{C}^d$ について $\mathcal{F}_b(A) := \{c; Ac = b, c \in \mathbb{N}_0^m\}$ と表せる．A は階数 d の非負整数値 $d \times m$ 配置行列 (行空間に $(1, ..., 1)$ を含む) とする．集合 $\mathcal{M}(A) = \mathrm{Ker}A \cap \mathbb{Z}^m$ を A に関する移動という．Markov 基底 $\mathcal{B} \subset \mathcal{M}(A)$ は $\mathcal{F}_b(A)$ に既約な Markov 連鎖を与える移動の集合である．任意の移動 z は $z = z^+ - z^-$, $z_i^+ := \max\{z_i, 0\}$, $z_i^- := \max\{-z_i, 0\}$ と表され，多項式環の二項式と 1 対 1 に対応づけられる．特に，$I_A := \langle \{x^{z^+} - x^{z^-}; z \in \mathcal{M}(A)\} \rangle$ はトーリックイデアルである．ここで，$x^z := \prod_{i=1}^m x_i^{z_i}$ とした．

定理 1（Diaconis, Sturmfels 1998）．$\mathcal{B} = \{z_i; i \in \{1, ..., s\}\} \subset \mathcal{M}(A)$ が Markov 基底であることは，$\{x^{z_j^+} - x^{z_j^-}; j \in \{1, ..., s\}\}$ が I_A の生成系であることの必要十分条件である．

I_A の Gröbner 基底は生成系だから Markov 基底である．Gröbner 基底を求める一般的なアルゴリズム (Buchberger 1976) があるので，原理的には任意の A に対し Markov 基底が得られる．

3. A 超幾何系

定義 1（Gelfand et al. 1990）． 2 節で導入した行列 A，十分統計量 b に対し，次の消去作用素が定める線形偏微分方程式系を A 超幾何系 $H_A(b)$ とよぶ．

$$\sum_{j=1}^{m} a_{ij} x_j \frac{\partial}{\partial x_j} - b_i, \qquad i \in \{1, ..., d\}, \qquad \partial^{c^+} - \partial^{c^-}, \qquad c \in \mathrm{Ker} A \cap \mathbb{Z}^m.$$

$H_A(b)$ は微分作用素環の左イデアルで，A 超幾何イデアルとよばれる．

A 超幾何系 $H_A(b)$ の原点周りの級数解

$$Z_A(b; x) := \sum_{c \in \mathcal{F}_b(A)} \frac{x^c}{c!}, \qquad c! := \prod_{i=1}^{m} c_i!$$

を A 超幾何級数とよぶ．ただし，$b \notin A\mathbb{N}_0^m$ のときは $Z_A(b; x) = 0$ と規約する．m 個の対数アフィンモデルからの長さ n の多項抽出によるカウントベクトル $c \in \mathbb{N}_0^m$ の分布は離散指数型分布族であり，十分統計量 $b \in \mathbb{N}_0^d$ で $Ac = b$ と条件づけた分布の確率函数は $x^c/c!$ に比例する．正規化定数が A 超幾何多項式になるので，Takayama et al. (2018) は A 超幾何分布とよんだ．周辺度数が所与の分割表の分布など，カウントデータ解析における典型的な統計モデルを含む．

4. 直接抽出法

A 超幾何多項式の性質から，A の第 i 列ベクトルを a_i として，

$$p_A(b; i) := \frac{\mathbb{E}(C_i | AC = b)}{n} = \frac{Z_A(b - a_i; x)}{Z_A(b; x)} \frac{x_i}{n}, \qquad \sum_{i=1}^{m} p_A(b; i) = 1$$

が従う．$p_A(b; i)$ を，A 超幾何多項式を状態空間とし，推移ごとに次数が 1 下がる Markov 連鎖において，$Z_A(b; x)$ から $Z_A(b - a_i; x)$ への推移確率とみなすと，次のアルゴリズムが得られる．

アルゴリズム 1（Mano 2017）． A 超幾何分布からの逐次直接抽出．

1. $t_1 = j$ を確率 $p_A(b; j)$ で抽出．
2. $i = 2, ..., n$ について，$t_i = j$ を確率 $p_A(b - (a_{t_1} + \cdots + a_{t_{i-1}}); j)$ で抽出．

A 超幾何多項式は $H_A(b)$ の標準単項式のベクトル Q が従う Pfaffian 系 $\partial_i Q = P_i Q$ を用いて求める．有理函数の行列 P_i, $i \in \{1, ..., m\}$ は標準単項式の Gröbner 基底による標準形として原理的には任意の A に対して得られる (Saito et al. 2010; 日比ら 2011)．

5. おわりに

様々な統計モデルについて MCMC による抽出を直接抽出に置き換えていくことは，代数統計の新しい挑戦のひとつになると期待される．

参 考 文 献

Mano, S.: Partition structure and the A-hypergeometric distribution associated with the rational normal curve. Electron. J. Statist. **11**, 4452–4487 (2017)

Mano, S.: *Partitions, Hypergeometric Systems, and Dirichlet Processes in Statistics.* JSS Research Series in Statistics, SpringerBriefs in Statistics (2018)