

「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」  
平成20年度採択研究代表者

日比 孝之

大阪大学大学院情報科学研究科・教授

## 現代の産業社会とグレブナー基底の調和

### § 1. 研究実施の概要

グレブナー基底のテクニックを、理論／応用／計算の側面から多角的に進化させ、現代の産業社会における難問の解決に向けての純粋数学の貢献を探ることが本 CREST の基本構想である。平成21年度は、チーム全体の公式行事の一つとして、大学院生などを対象とする「CREST グレブナースクール」(神戸大学理学部、2009 年 9 月)を開催した。その目的は、大学院生を含む若手研究者が、グレブナー基底とその周辺の話題についての理解を深め、KNOPPIX/Math のユーザーになることである。講義と演習の配布資料と講義のビデオ映像はホームページに掲載し、公開している。

理論系グループでは、分割表に付随する two way subtable sum problem の研究と非正規配置の non-very ample 性の研究を背景に、nested 配置のトーリックイデアルの構造を詳細に探究した。他方、統計数学における conditional independence statement を代数的に解釈することから、有限グラフに付随する或る二項式イデアルの概念を提唱し、そのグレブナー基底を具象的に探究し、CIイデアルが radical イデアルであることの証明に成功した。

応用系グループでは、実社会における重要な統計的問題として、各セルの頻度が 0 または 1 であるような 0-1 のみを許す分割表のモデルの研究を遂行し、そのマルコフ基底を明示的に求めることに成功した。他方、2水準系の非正則な要因実験において、新たな最適性の基準を提案して、その基準のもとでの最適な実験計画の構成法を詳細に議論した。

計算系グループの顕著な結果は、Risa/Asir の上に、D-加群の積分アルゴリズムを実装し、世界最高速を実現することに成功し、嘗ては計算できなかった問題等も解けるようになったことである。加えて、局所b-関数を計算する新しい高速アルゴリズムを提案実装し、ソフトウェアパッケージを開発した。

その他、新たな展開の一つとして、D-加群のアルゴリズムの空間統計学への応用の研究が、応用系グループと計算系グループの共同研究として始まり、平成22年度に踏襲される。

### § 2. 研究実施体制

(1)「理論系」グループ

●理論系第1グループ

①研究分担グループ長:日比 孝之(大阪大学、教授)

②研究項目

先端科学技術に現れるグレブナー基底の代数的理論の探究

●理論系第2グループ

①研究分担グループ長:大杉 英史(立教大学、准教授)

②研究項目

先端科学技術に現れるグレブナー基底の代数的理論の探究

(2)「応用系」グループ

●応用系第1グループ

①研究分担グループ長:竹村 彰通(東京大学、教授)

②研究項目

グレブナー基底の先端科学技術への実践的応用の探究

●応用系第2グループ

①研究分担グループ長:青木 敏(鹿児島大学、准教授)

②研究項目

グレブナー基底の先端科学技術への実践的応用の探究

●応用系第3グループ

①研究分担グループ長:栗木 哲(統計数理研究所、教授)

②研究項目

グレブナー基底の先端科学技術への実践的応用の探究

●応用系第4グループ

①研究分担グループ長:大津 起夫(大学入試センター、教授)

②研究項目

グレブナー基底の先端科学技術への実践的応用の探究

●応用系第5グループ

①研究分担グループ長:只木 孝太郎(中央大学、機構准教授)

②研究項目

グレブナー基底の先端科学技術への実践的応用の探究

(3)「計算系」グループ

●計算系第1グループ

①研究分担グループ長:高山 信毅(神戸大学、教授)

研究分担グループ長:野呂 正行(神戸大学、教授)

研究分担グループ長:野海 正俊(神戸大学、教授)

②研究項目

グレブナー基底の計算の高速化とソフトウェアの開発

●計算系第2グループ

①研究分担グループ長:武田 朗子(慶応義塾大学、講師)

②研究項目

グレブナー基底の計算の高速化とソフトウェアの開発

●計算系第3グループ

①研究分担グループ長:濱田 龍義(福岡大学、助教)

②研究項目

グレブナー基底の計算の高速化とソフトウェアの開発

### § 3. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(4-1)に対応する)

平成20年度は、全体研究計画書に沿い、戦略a、b、d、e、gの研究を展開した。戦略a、e、gについては、平成20年度からの継続する戦略として平成20年度の研究成果を踏襲し、戦略b、dについては、平成21年度が研究開始年度であった。研究全般の進展状況は、全体計画に掲げる目標に到達している。加えて、全体計画の作成段階では、その萌芽すら感知できなかったような新展開も始まっており、平成22年度以降にその研究を踏襲する。理論系グループ、応用系グループ、計算系グループは、個々のグループでの研究を推進しつつも、グループ相互の情報交換などを目的とするチームミーティングを、5月(大阪)、7月(東京)、9月(神戸)、10月(大阪)、11月(東京)、1月(大阪)、2月(神戸)、3月(東京)と開催し、その結果、複数のグループの共同研究なども芽生え、若手研究者の研究交流も促進されるなど、チーム全体としての研究が円滑に進んでいる。

平成21年度のチーム全体の公式行事の一つとして、神戸大学理学部数学教室に於て「CREST グレブナースクール」を、平成21年9月14日(月曜日)～18日(金曜日)に開催した。大学院生を含む若手研究者を主たる対象とし、グレブナー基底とその周辺の話題についての理解を深めるとともに、KNOPPIX/Math のユーザーになることを目標に掲げた。講義と演習の配布資料と講義のビデオ映像はチームのホームページに掲載し、公開している。その配布資料を基礎に、チームのメンバーが共同執筆する単行本(著名は「グレブナー道場(仮題)」)を平成23年9月に共立出版から出版する計画である。そのような単行本の出版は、中間評価までの具体的な目標の一つとして、全体研究計画書に記載されている。グレブナースクールの準備段階では、演習問題の選別を巡り、理論、応用、計算グループが綿密な研究打ち合わせをしたが、そのことが、お互いのグループの研究の現状の相互理解にきわめて有益となり、実施段階でも、グループを横断する活発な議論が深夜まで続いた。スクールを開催した際の望外の成果であると言える。

KNOPPIX/Math は一般の商用の数式処理ソフトと比べると、次のような顕著な特徴を持つ。第1に、特定の問題については、最も強力な性能を持つソフトウェアを組み合わせる環境を提供している。第2に、ソースコードをチェックできるので、ユーザーは誤摩化した解き方をしていないことが確認できる。第3に、TeX とプレゼンテーションのソフトウェアを含む等、ユーザーのための環境全体を提供している。

その他、研究代表者は、日本応用数学会年会(平成21年9月、大阪大学)に於て、「グレブナー基底の50年」と題する総合講演(日本数学会推薦枠)をし、本 CREST 研究の概要も込め、グレブナー基底の研究の現状を紹介した。

以下、それぞれの研究グループの具体的な研究成果を列挙する。

#### <理論系グループ>

分割表に付随する two way subtable sum problem の研究[20]と非正規配置の non-very ample 性の研究[27]を背景に、応用系グループの研究の推進を踏まえ、nested 配置のトーリック環の正規性とトーリックイデアルのグレブナー基底を詳細に探究[31]し、二次二項式から成るグレブナー基底の豊富な類を生産することが可能となった。他方、ドイツとの国際共同研究[30]は、理論系グループの特筆すべき成果であり、統計数学における conditional independence statement を代数的に解釈することから、有限グラフに付随する或る二項式イデアルを提唱し、そのグレブナー基底を具象的に探究し、計算代数統計における重要な概念である CIイデアルが radical イデアルであることを証明することに成功した。以上の研究成果は、戦略aの代数的側面の展開とともに、戦略gの推進に十分な貢献を齎す。

戦略dの理論面からの展開に関連し、凸多面体におけるグレブナー基底の理論を推進し、単模超グラフの頂点被覆代数の組合せ論的な研究[21]を遂行するとともに、有限グラフの cut polytope の正規性が minor closed な性質であることを証明[28]することに成功した。加えて、代数幾何における Fano polytope の計算代数的側面の探究[T. Hibi and A. Higashitani, Smooth Fano polytopes arising from finite partially ordered sets, arXiv:0908.3404][T. Hibi, A. Higashitani and H. Ohsugi, Roots of Ehrhart polynomials of Gorenstein Fano polytopes, arXiv:1001.4165]とともに、弦グラフのベッチ数列と単体的複体の  $f$  列の研究[1]を実施した。

他方、ジェネリックイニシャルイデアルについての懸案の予想の解決[23]は、algebraic shifting の今後の研究活動に多大なる影響を及ぼすとともに、戦略gの遂行に一石を投じるものである。

その他、計算可換代数の具象的研究を継続し、論文[6][9][15][19]が出版され、[34]が出版予定になるとともに、[T. Shibuta, Toric ideals for high Veronese subrings of toric algebras, arXiv:0906.5129][K. Kimura, N. Terai and K. Yoshida, Schmitt–Vogel type lemma for reductions, arXiv:0912.1399][K. Kimura, Arithmetical rank of Cohen–Macaulay squarefree monomial ideals of height two, arXiv:0912.1963][T. Shibuta, Some examples of rings of finite  $F$ -representation type, arXiv:0912.2434]を執筆した。

阪大特任助教の鍋島克輔は、日本数式処理学会第18回大会(龍谷大学、2009年6月)における研究発表「零次元代数的局所コホモロジーを用いた標準基底計算・グレブナー基底計算・メンバーシップ問題の実装」によって、最優秀奨励賞を受賞した。鍋島克輔の結果は可換代数のテクニックが現実の計算にきわめて有効であることを示すものであり、理論系の研究と計算系の研究の両者を繋ぐ優れた仕事である。なお、鍋島克輔は、平成22年4月1日付けで、徳島大学准教授に採用された。他方、追加予算によって、阪大特任研究員として松井鉄史を雇用したが、彼は、緊急を要するソフトの開発に多大なる貢献をし、彼を主な著者とする凸多面体の格子点の数え上げに関する長編論文 [T. Matsui, A. Higashitani, Y. Nagazawa, H. Ohsugi and T. Hibi, Roots of Ehrhart polynomials arising from graphs and posets, arXiv:1003.5444] を執筆した。

#### <応用系グループ>

応用系グループの現在の主要な研究課題は、

(1) 正確検定のためのマルコフ連鎖モンテカルロ法の基礎となるマルコフ基底の研究

(2) 統計的実験計画法の設計と解析のための代数的方法の開発

である。これらの研究課題は、戦略aの展開に沿っている。加えて、グラフィカルモデルの代数的側面の探究への応用においても研究が進展している。応用系グループの研究については、一般の統計研究者からの関心もきわめて高く、[4][22]ではマルコフ基底の研究および実験計画法へのグレブナー基底の応用について、和文のサーベイを与えている。

マルコフ基底の研究においては、具体的にマルコフ基底が必要とされる幾つかの問題について、新たにマルコフ基底が明示的に求めることに成功した。具体的な成果の一つとしては、各セルの頻度が 0 または 1 であるような 0-1 のみを許す分割表のモデルについて、マルコフ基底を明示的に与えた([33])。このようにセルの頻度に上限がある場合でも、グレーバー基底を用いれば連結なマルコフ連鎖を構成できるが、グレーバー基底はしばしば計算することが困難であり、今後、理論系、計算系との共同研究によって突破しなければならない厚い壁が残っている。しかし、応用上重要な幾つかの統計モデルに関しては、グレーバー基底の明示的な部分集合を構成することにより、連結なマルコフ連鎖が構成できることを示し、今後の研究に継承する。加えて、分割表の階層モデルについて、セパレータで分離された高次の交互作用項ごとに部分モデルを構成する「階層的な部分空間モデル」(hierarchical subspace model) とよばれるモデルを提案した([H. Hara, T. Sei and A. Takemura, Hierarchical subspace models for contingency tables, arXiv:0909.4821])。マルコフ基底の観点からは、これまで知られていた階層モデルのマルコフ基底のセパレータによる単純化の結果がほぼそのまま階層的な部分空間モデルにも拡張できることを示した。

実験計画法に関して、現状では、実験数を任意に設定したい場合に必要とされる非正則な実験計画の理論の整備が遅れているのが現状であるが、これについては Pistone & Wynn らのグレブナー基底を用いた解析が有効である。青木敏[35]では、従来の研究[2][7][25]を発展させて、2水準系の非正則な要因実験において、新たな最適性の基準を提案して、その基準のもとでの最適な実験計画の構成法を議論している。

他方、非心ウィシャート分布のモーメントについて、これまで明示的に求められていなかったモーメントをグラフ理論的な考察から導出した成果[32]も得られている。

なお、戦略bを推進し、グレブナー基底の社会的な統計的研究への応用の一環として、大学入試センターと協力し、大学入試センター試験の科目選択の傾向の分析を進めているが、平成21年度に論文を執筆するには至らなかったが、その研究成果を踏襲し、平成22年度の上半期には詳細な結果を含む論文を執筆し、下半期にその論文を公表する計画である。

平成21年9月に神戸大学で開催された「CREST グレブナーズクール」において、計算系のD-加群のアルゴリズムが統計モデルの推定に直接応用できることが判明し、現在、空間統計学のモデルに適用した研究が急激に進んでいる。その研究は、全体研究計画書の作成段階では、全く予知できなかった新展開であり、計算系と応用系の新たな連携として特筆すべきものである。

その他、計算代数統計については[8][13][14][24]の論文が、アルゴリズム的ランダムネスについては[3][10][11]の論文が出版された。

#### <計算系グループ>

戦略dと戦略eを推進し、Risa/Asir の上に、D-加群の積分アルゴリズムを実装し、世界最高速を実現することに成功し、嘗ては計算できなかった問題等も解けるようになった。このことは、平成21年度の計算系のもっとも顕著な成果の一つである。この研究は従来の[5][12]を発展させた方法である。開発した実装の一部分は nk\_restriction パッケージとして公開中である。今後、パッケージの完成を目指すとともに、研究論文としては、平成22年度に執筆する計画である。関連する話題の一つとして、局所b-関数を計算する新しい高速アルゴリズムを提案実装し、ソフトウェアパッケージを開発することに成功した([29])。このパッケージ nn\_ndbf は 2010 年 2 月公開の openxm package に含まれている。

D-加群の積分の問題への計算理論的なアプローチとして、A-不完全超幾何系の基礎理論と基礎アルゴリズムを構築し、特に、パラメータについての漸化式の問題を (2,4) 型については完全に解決することに成功した([K. Nishiyama and N. Takayama, Incomplete A-Hypergeometric Systems, arXiv:0907.0745])。

統計データの処理、整数計画などのグレブナー基底についての大規模な問題を解くには weight vector の最適化が必須である。平成21年度は[16][18]でも活用した最適化手法を援用し、最適化をするソフトウェアを試作したが、まだ性能が不十分であるため、その改良の研究を平成22年度に継承する計画である。

D-加群のアルゴリズムの空間統計学への応用の研究は、従来、全く予知できなかった新展開であり、応用系と計算系の共同研究の展開として、特筆すべきであろう。この研究の初期の概要については、高山信毅が「統計学に現れるパラメータ付き積分のためのD-加群理論入門」なる招待講演を、竹村彰通が主催する研究集会「計算代数統計学の展開」(統計数理研究所、2009年11月)に於て行い、一般の統計学者の強い興味を引いた。現在、応用系と計算系のグループが協力してこの研究を強力に推進している。この研究に必要なパッケージとして、西山絢太、中山洋将は積分領域がサイクルでない場合についての積分アルゴリズムを与え、試作実装を実施している。加えて、高山信毅は Pfaffian 系の数値解析のためのパッケージである tk\_pfn を開発した。

その他、「CREST グレブナースクール」の際、グレブナー基底の計算ソフトと関連する多面体の計算ソフトに重点を置いた VM/KnoppixMath CREST 版を開発し、配布した。他方、2010年3月には濱田龍義らが中心となり新しいアーキテクチャによる Knoppix/Math 2010 をリリースした。また ubuntu ベースの ubuntu/math も初版を開発中である。何れも、グレブナー基底の理解、活用に重点をおいて、ソフトウェア、文書を編集している。

その他、ランク1の対称空間中の球の特徴付けに関する論文[17]と、直交多項式の公式を統一的に扱うための核関数についての論文[26]が出版された。

以上、理論、応用、計算のそれぞれのグループの研究成果を記載したが、最後に、研究グループの相互関係を総括する。理論系グループと計算系グループの研究交流は、1996年に始まる。他方、理論系グループと応用系グループの研究交流は、2002年に始まる。それらの交流が本CREST研究を提案する際の土台であった。本CREST研究の提案の段階では、応用系グループと計算系グループの交流は、理論系グループを媒介とするものであった。ところが、応用系の成果と計算系の成果の両者に記載しているように、平成21年度には、「CREST グレブナースクール」での高山信毅の講義が契機となり、D-加群のアルゴリズムの空間統計学への応用という全く予知することもなかった研究が芽生えた。この研究は、応用系グループと計算系グループの共同研究として急激に展開しており、応用系グループと計算系グループの直接の研究交流が始まった。その結果、理論系グループ/応用系グループ/計算系グループの研究トライアングルが形成され、平成22年度以降のチームの研究活動に踏襲される。

## § 4. 成果発表等

### (4-1) 原著論文発表

#### ●論文詳細情報

1. T. Hibi, K. Kimura and S. Murai, Betti numbers of chordal graphs and f-vectors of simplicial complexes, J. Algebra 323 (2010), 1678--1689. (doi:10.1016/j.jalgebra.2009.12.029)
2. S. Aoki and A. Takemura, Markov chain Monte Carlo tests for designed experiments, J. Stat. Plan. Inf. 140 (2010), 817--830. (doi:10.1016/j.jspi.2009.09.010)
3. K. Tadaki, A statistical mechanical interpretation of algorithmic information theory: Total statistical mechanical interpretation based on physical argument, J. Physics 201 (2010), 012006 (10pp). (doi:10.1088/1742-6596/201/1/012006)

4. S. Aoki and A. Takemura, A short survey on design of experiments and Groebner bases (和文). Bulletin of Japan Society for Symbolic and Algebraic Computation 16 (2009), 15--22.
5. F.-J. Castro-Jimenez and N. Takayama, The computation of the logarithmic cohomology for plane curves, J. Algebra 322 (2009), 3839--3851. (doi:10.1016/j.jalgebra.2009.03.039)
6. R. Okazaki and K. Yanagawa, Dualizing complex of a toric face ring, Nagoya Math. J. 196 (2009), 87--116.
7. S. Aoki and A. Takemura, Some characterizations of affinely full-dimensional factorial designs, J. Stat. Plan. Inf. 139 (2009), 3525--3532. (doi:10.1016/j.jspi.2009.04.002)
8. T. Sei, S. Aoki and A. Takemura, Perturbation method for determining group of invariance of hierarchical models, Adv. Appl. Math. 43 (2009), 375--389. (doi:10.1016/j.aam.2009.02.005)
9. T. Shibuta and S. Takagi, Log canonical thresholds of binomial ideals, Manuscripta Math. 130 (2009), 45--61. (doi:10.1007/s00229-009-0270-7)
10. K. Tadaki, Chaitin  $\Omega$  numbers and halting problems, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 5635, 2009, pp. 447--456. (doi:10.1007/978-3-642-03073-4\_46)
11. K. Tadaki, Partial randomness and dimension of recursively enumerable reals, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 5734, 2009, pp. 687--699. (doi:10.1007/978-3-642-03816-7\_58)
12. M. Noro, Modular Algorithms for Computing a Generating Set of the Syzygy Module, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 5743, 2009, pp. 259--268. (doi: 10.1007/978-3-642-04103-7\_23)
13. S. Aoki and A. Takemura, Statistics and Groebner bases - the origin and development of computational algebraic statistics, American Mathematical Society Translations, Series 2, Volume 227, 2009, pp. 125--145.
14. S. Kuriki and A. Takemura, Volume of tubes and distribution of the maxima of Gaussian random fields, American Mathematical Society Translations, Series 2, Volume 227, (2009), pp. 25--48.
15. K. Kimura, Lyubeznik resolutions and the arithmetical rank of monomial ideals, Proc. Amer. Math. Soc. 137 (2009), 3627--3635. (doi:10.1090/S0002-9939-09-09950-X)
16. A. Takeda, Generalization Performance of nu-Support Vector Classifier Based on Conditional Value-at-Risk Minimization, Neurocomputing 72 (2009), 2351--2358. (doi:10.1016/j.neucom.2008.11.022)
17. T. Hamada and K. Shiohama, Complete real hypersurfaces in compact rank one symmetric spaces, Proc. AMS 137 (2009), 3905--3910. (doi:10.1090/S0002-9939-09-09959-6)
18. A. Takeda and M. Sugiyama, On generalization performance and non-convex optimization of

- extended nu-support vector machine, *New Generation Computing* 27 (2009), 259--279.
19. K. Kimura, N. Terai, and K. Yoshida, Arithmetical rank of squarefree monomial ideals of small arithmetic degree, *Journal of Algebraic Combinatorics* 29 (2009), 389--404. (doi:10.1007/s10801-008-0142-3)
  20. H. Ohsugi and T. Hibi, Two way subtable sum problems and quadratic Gröbner bases, *Proc. Amer. Math. Soc.* 137 (2009), 1539--1542. (doi:10.1090/S0002-9939-08-09675-5)
  21. J. Herzog, T. Hibi and N. V. Trung, Vertex cover algebras of unimodular hypergraphs, *Proc. Amer. Math. Soc.* 137 (2009), 409--414. (doi:10.1090/S0002-9939-08-09308-8)
  22. A. Takemura, Some recent topics from computational algebraic statistics (和文), *Journal of the Japan Statistical Society, Series J*, 39 (2009), 137--159.
  23. S. Murai and T. Hibi, Algebraic shifting and graded Betti numbers, *Trans. Amer. Math. Soc.* 361 (2009), 1853--1865. (doi:10.1090/S0002-9947-08-04707-7)
  24. R. Hemmecke, A. Takemura and R. Yoshida, Computing holes in semi-groups and its applications to transportation problems, *Contribut. Disc. Math.* 4 (2009), 81--91. (doi:無)
  25. S. Aoki, and A. Takemura, Markov basis for design of experiments with three-level factors, *Algebraic and Geometric Methods in Statistics*, Cambridge Univ. Press, 2009, pp. 225--238.
  26. Y. Komori, M. Noumi and J. Shiraishi, Kernel functions for difference operators of Ruijsenaars type and their applications, *SIGMA* 5 (2009), 054, 40 pages. (doi:10.3842/SIGMA.2009.054)
  27. H. Ohsugi and T. Hibi, Non-very ample configurations arising from contingency tables, *Annals of the Institute of Statistical Math.*, in press. (doi:10.1007/s10463-010-0288-3)
  28. H. Ohsugi, Normality of cut polytopes of graphs is a minor closed property, *Discrete Mathematics*, in press. (doi:10.1016/j.disc.2009.11.012)
  29. K. Nishiyama and M. Noro, Stratification associated with local b-functions, *Journal of Symbolic Computation*, in press. (doi:10.1016/j.jsc.2010.01.003)
  30. J. Herzog, T. Hibi, F. Hreinsdottir, T. Kahle and J. Rauh, Binomial edge ideals and conditional independence statements, *Advances in Applied Mathematics*, in press. (doi:10.1016/j.aam.2010.01.00)
  31. H. Ohsugi and T. Hibi, Toric rings and ideals of nested configurations, *Journal of Commutative Algebra*, in press. (doi:10.1216/JCA-2010-2-2-1)
  32. S. Kuriki and Y. Numata, Graph presentations for moments of noncentral Wishart distributions and their applications, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, to appear.
  33. H. Hara and A. Takemura, Connecting tables with zero-one entries by a subset of a Markov basis, *Algebraic Methods in Statistics and Probability*, Amer. Math. Soc., 2009, to appear.

34. R. Okazaki, A lower bound of Stanley depth of monomial ideals, *Journal of Commutative Algebra*, to appear.
35. S. Aoki, Some optimal criteria of model-robustness for two-level non-regular fractional factorial designs, *Annals Inst. Stat. Math.*, to appear. (doi:10.1007/s10463-010-0292-7)