Birkhoffモデルへの条件付けとトーリックイデアルに関する考察

Toric Ideal of Conditional Birkhoff Model

松田　健*、大沢　泰貴**
Takeshi MATSUDA and Taiki OOSAWA

This paper defines the conditional Birkhoff model by adding latent variables, and investigates Markov basis of our proposed model.

1．はじめに

nを自然数とし，n次対称群S_nを考える．$\sigma \in S_n$とすると，σは1からnまでの自然数を並び替えたものであり，S_nには$n!$個の元が存在する．Birkhoff[1]モデルでは，S_nから重複を許してW個の元を選んでできる元の組$\left(\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2}, \cdots, \sigma_{i_W}\right)$を考え，この中に$\sigma \in S_n$が含まれる確率を

$$\log p(\sigma) = u_0 + \sum_{a=1}^{n} u_{a\sigma(a)} \cdots (1)$$

として考える．u_0は正規化定数を表す．文献[2]では，(1)式において和を初めからr個($r \le n$)までとるものに改良した(n,r)Birkhoff モデルを定義し，そのマルコフ次元が3であることを示している．本研究では，S_nから重複を許してW個の元を選んでできる元の組$\left(\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2}, \cdots, \sigma_{i_W}\right)$からなる集合

$$\Lambda = \left\{ \left(\sigma_{i_1}^{(j)}, \sigma_{i_2}^{(j)}, \cdots, \sigma_{i_W}^{(j)} \right) \middle| j = 1, 2, \cdots, J \right\}$$

について考え，対応する配置行列を定義し，そのトーリックイデアルについて考察する．また，集合Λに対してBirkhoffモデルを考えると，(1)式に潜在変数を導入したものであると考えることができることについて指摘する．本研究の成果は，定義13と定義15に基づいて得られる命題1と命題2である．

2015年1月31日受理
*　総合情報学部　コンピュータシステム学科
**　理工学研究科　システム工学専攻

2．準備

本研究で必要となる数学的概念[3]についてまとめる．

2.1 トーリックイデアルとマルコフ基底

はじめに，配置行列の定義について確認する．

定義1　[配置行列]

Aをすべての成分が整数であるような$p \times q$行列とする．Aの各列ベクトルが，原点を通らないある超平面上の点となっているとき，Aを配置行列という．■

配置行列と分割表を結びつけるには，以下のtファイバーと呼ばれる連立一次方程式の解空間を考える．

定義2　[tファイバー]

Aを配置行列，tをp次元の整数ベクトル，xをq次元非負整数ベクトルとする．このとき，連立一次方程式$Ax = t$の解空間

$$F_t = \left\{ x \in Z_{\ge 0}^{q} \middle| Ax = t \right\}$$

のことを配置行列Aのtファイバーという．■

特に，$Ax = o$ ($o \in Z^p$は零ベクトル)を満たす$x \in Z^q$が重要となる．ただし，ベクトルxの要素は負の整数を成分としてとれる，つまり成分はすべて整数であることに注意する．

定義3　[move]

配置行列Aに対して集合

$$M(A)=\left\{z\in Z^q \middle| Az=o\right\}$$

の元を A の move という．■

配置行列 A の move z_i を利用すると，$x\in F_t$ に対して

$\varepsilon_k\in\{-1,1\}$ を上手く選べば，

$$y=x+\sum_{k=1}^{K}\varepsilon_k z_k$$

を満足する $y\in F_t$ が存在する．

定義 4 ［相互到達可能］

配置行列 A の move の集合 $M(A)$ の部分集合 B を考える．F_t の元 x,y が相互到達可能であるとは，以下の条件を満足することをいう．

(1) $y=x+\sum_{l=1}^{K}\varepsilon_l z_l$， $z_k\in B$

(2) $x+\sum_{l=1}^{k}\varepsilon_l z_l\in F_t$， $k=1,2,\cdots,K$ ■

相互到達可能性は，定義の条件(1)，(2)に基づく同値類であることに注意する．この分野の研究対象は，F_t の任意のふたつの元が B により相互到達可能であるような move の部分集合 B をどのように構成すれば良いか求めることになる．

定義 5 ［マルコフ基底］

t ファイバー F_t の任意のふたつの元が $B\subset M(A)$ により相互到達可能であるとき，B を配置行列 A のマルコフ基底であるという．■

マルコフ基底を求めることで，例えば，分割表の数え上げをマルコフ連鎖モンテカルロ法で近似計算し，Fisher の正確検定における p 値の推定を実現することができる [3]．以下，マルコフ基底を計算するための準備を進める．

定義 6 ［トーリックイデアル］

配置行列 A に対するトーリックイデアルを

$$I_A=\left\langle x^{z^+}-x^{z^-} \middle| z\in M(A)\right\rangle$$

と定義する．ただし，x^{z^+},x^{z^-} は多重指数で表される単項式で，z^+ は負の成分をすべて 0 にしてできるベクトルであり，z^- は正の成分をすべて 0 にして負の部分を−1 倍してできるベクトルである．■

以下，move に関する定義をまとめておく．

定義 7 ［move の次数］

move z の次数をベクトル z の正の成分（または負の成分）の個数として定義し，

$$\deg z=\sum z_i^+=\sum z_i^-$$

と表す．

定義 8 ［基本 move］

$M(A)$ の中で最も次数が小さい move を基本 move という．

定義 9 ［マルコフ次元］

マルコフ基底 $B\subset M(A)$ に対して，条件

$$d\ge\deg z$$

を満たすような最小の自然数 d をマルコフ基底 B のマルコフ次元という．

トーリックイデアルは，全射環準同型写像

$$\pi:F[x_1,\cdots,x_n]\to F\left[T^{z_1},\cdots,T^{z_n}\right]\subset F\left[T,T^{-1}\right]$$

の核 $\ker\pi$ である．ただし，F は体で，$\pi(x_i)=T^{z_i}$ と定義する．T^{z_i} は単項式である．トーリックイデアルとマルコフ基底は次の定理によって結ばれる．

定理 1 ［マルコフ基底とトーリックイデアルの生成系］

$B=\{z_1,\cdots,z_K\}$ が配置行列 A のマルコフ基底であるこ

とと，$\left\{x^{z_k^+}-x^{z_k^-}\middle|k=1,2,\cdots,K\right\}$がトーリックイデアル$I_A$の生成系であることは同値である．■

マルコフ基底は以下の定理により求めることができる．

定理 2

$F[X,T]$上のイデアル

$$I_A^*=\langle x_i-\pi(x_i)|i\in I\rangle$$

は$I_A=I_A^*\cap F[X]$を満たす．■

したがって，$T>X$を満たす適当な多項式順序により，I_A^*の被約グレブナー基底G^*を求めることができ，

$$G=G^*\cap F[X]$$

からマルコフ基底が求められることになる．グレブナー基底については 2.2 で簡単にまとめを行う．

2.2 グレブナー基底

ここでは，グレブナー基底の定義とその計算方法について簡単にまとめる．まず，有理数を係数とする単項式とその順序について考える．

定義 10 ［単項式順序］
u,v,wを有理数を係数とする単項式とする．単項式全体の集合における全順序<が
(1) $u\neq 1$に対して$1<u$
(2) $u<v$ならば$uw<vw$
を満足するとき，全順序<を単項式順序という．■

$Q[X]$を有理数を係数とする多項式環とし，0 でない$f\in Q[X]$に対して，fの中の単項式で順序<に関して次数が最大の単項式を$LT(f)$と表す．Iを$Q[X]$のイデアルとするとき，

$$LT(I)=\langle LT(f)|f\in I\rangle$$

をIのイニシャルイデアルと呼ぶ．グレブナー基底は以下のように定義される．

定義 11 ［グレブナー基底］
イデアルIの生成元の集合$\{g_1,g_2,\cdots,g_k\}$が単項式順序<に関するIのグレブナー基底であるとは

$$LT(I)=\langle LT(g_1),LT(g_2),\cdots,LT(g_k)\rangle$$

を満たすときにいう．■

グレブナー基底は Buchberger のアルゴリズムによって計算することができる．一般的に，イデアルIの生成元の集合$G=\{g_1,g_2,\cdots,g_k\}$がグレブナー基底になるとは限らない．しかし，$LT(g_i)$と$LT(g_j)$の最小公倍元を$LCM(g_i,g_j)$としたとき，

$$S(g_i,g_j)=\frac{LCM(g_i,g_j)}{LT(g_i)}g_i-\frac{LCM(g_i,g_j)}{LT(g_j)}g_j$$

を計算し，$S(g_i,g_j)$をGで割った余りをg_kとし，これを集合Gに加え，$i<j$に対して上記の作業を繰り返すことでグレブナー基底が得られる．

定義 12 ［被約グレブナー基底］
$LT(g_1),LT(g_2),\cdots,LT(g_k)$の係数を 1 にしたグレブナー基底を被約グレブナー基底という．■

3. Birkhoff モデルへの条件付け

本研究では，Birkhoff モデルの概念を拡張し，以下のようにある観測対象Θに付随する潜在変数Ωを考慮した条件付き Birkhoff モデルを定義する．

定義 13 ［$S_n^{\times J}$ conditional Birkhoff モデル］

潜在変数Ωが$\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_J$という値をとるとして，条件$\omega_j$のもとで$\sigma\in S_n$が集合

$$\Lambda_j=\left\{\sigma_{i_1}^{(j)},\sigma_{i_2}^{(j)},\cdots,\sigma_{i_w}^{(j)}\right\}$$

に含まれる確率を

$$\log p_j(\sigma_i) = u_{0i,j} + \sum_{a=1}^{n} u_{a\sigma(a),j} \cdots (2)$$

と定義し，$S_n^{\times J}$ conditional Birkhoff モデルと呼ぶことにする．■

以下，$\sigma_1 = (1,2,\cdots,n),\cdots,$

$$\sigma_{n-1} = (1,n,\cdots,n-1), \sigma_n = (2,1,\cdots,n),\cdots,$$

$$\sigma_{2n-1} = (2,n,\cdots,n-1), \sigma_{2n} = (3,1,\cdots,n),\cdots,$$

$\cdots,\sigma_{n!} = (n,n-1,\cdots,1)$ とおき，これら $n!$ 個の S_n の元を潜在変数 ω_j に対応する配置行列 A_j の列のラベルとして利用する．つまり，A_j の第 q 列は σ_q $(q=1,2,\cdots,n!)$ が対応するものとして定義する．また，

$$\sigma_q = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & i & \cdots & n \\ \sigma_q(1) & \cdots & \sigma_q(i) & \cdots & \sigma_q(n) \end{pmatrix}$$

とおくと，自然数の組 $(i,\sigma_q(i))$ は n^2 通りの組合せが存在し，この自然数の組の順序を $(1,1),(1,2),\cdots,(1,n),$ $(2,1),(2,2),\cdots,(2,n),\cdots$ として，これら n^2 個の自然数の組を配置行列 A_j の行のラベルとして使用する．その際，第 1 行目は $(i,\sigma_q(i)) = (1,1)$，第 2 行目は $(1,2)$，…，第 n^2 行目は (n,n) に対応させることにする．

定義 14 ［Birkhoff モデルの配置行列］
$\sigma \in S_n$ に対して $(i,\sigma_q(i)) = (i,j)$ $(1 \le i,j \le n)$ であるとき，対応する配置行列の成分を 1 とし，それ以外の成分を 0 として配置行列を定義する．■

例えば，S_2 の場合の配置行列は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となる．$S_n^{\times J}$ conditional Birkhoff モデルでは，J 個の配置行列の情報をひとつにまとめた配置行列を定義する．

定義 15 ［$S_n^{\times J}$ Conditinoal Birkhoff モデルの配置行列］
潜在変数 ω_j $(1 \le j \le J)$ に対応する J 個の配置行列 A_j を与え，$\omega_1,\cdots,\omega_J$ それぞれに対して，$\sigma_{i_1},\cdots,\sigma_{i_J}$ が共起する確率を

$$\log p(\tau_{i_1 i_2 \cdots i_J}) = u_j + \sum_{j=1}^{J} p_{\omega_j}(\sigma_{i_j}) \cdots (3)$$

で定義する．ただし，$p_{\omega_j}(\sigma_{i_j})$ は条件 ω_j のもとで σ_{i_j} が出現する確率であり，u_j は正規化定数である．このとき，式(3)の両辺から log を取り除いた式を行列で表現することで配置行列が得られる．■

以上の準備のもと，$S_n^{\times 2}$ conditional Birkhoff モデルでは以下の性質をもつことが分かる．

命題 1
$S_2^{\times 2}$ conditional Birkhoff モデルのマルコフ基底は基本 move ただひとつであり，マルコフ次元は 2 である．■

命題 1 は自明であるが，S_2 に関する Birkhoff モデルはマルコフ基底を持たないことから，$S_n^{\times J}$ conditional Birkhoff モデルのマルコフ基底は通常の Birkhoff モデルのマルコフ基底より複雑であることがわかる．また，以下の事実もすぐに確かめることができる．

命題 2

$S_3^{\times 2}$ conditional Birkhoff モデルは，2 次と 3 次のマルコフ基底で構成される．■

$S_3^{\times 2}$ conditional Birkhoff モデルでは，3 つの配置行列のうちのひとつは 6×6 分割表に対応する配置行列と同じトーリックイデアルを考える．そのため，$S_3^{\times 2}$ conditional Birkhoff モデルは 6×6 分割表にも現れる 225 個の 2 次のマルコフ基底を持つ．一方，S_3 の Birkhoff モデルでは 3 次のマルコフ基底をひとつだけ持つのに対し， conditional Birkhoff モデルでは基本 move ではないものも含めて 3 次のマルコフ基底が 111 個存在することが確かめられる．なお，$S_n^{\times J}$ conditional Birkhoff モデルはある応用研究を考える上で定義できる概念であるが，そのことについてはここでの説明は省略する．

参考文献

1） B. Sturmfels and V. Welker. Commutative algebra of statistical ranking. J. Algebra, 361:264–286 (2012).

2） T. Yamaguchi, M. Ogawa, A. Takemura. Markov Degree of the Birkhoff Model, Journal of Algebraic Combinatorics, Volume 40, Issue 1, pp 293-311 (2014).

3） P. Diaconis and B. Sturmfels. Algebraic Algorithms for Sampling from Conditional Distributions, Ann. Statist, Volume 26, Number 1, pp. 363-397 (1998).