修士論文 要旨

分割表の Graver Complexity の評価

数理情報学専攻 48096213　工藤大誠
指導教員　竹村彰通 教授

1　はじめに

Diaconis and Sturmfels [4] や Sturmfels [8] で，分割表のモデルの適合度検定に対して，マルコフ基底を用いたマルコフ連鎖モンテカルロ法による手法が提案されて以来，マルコフ基底について多くの研究がなされている．マルコフ基底を計算するためのアルゴリズムが実装された 4ti2 [1] 等のソフトウェアを用いることで理論的には全てのマルコフ基底を計算することができる．

しかし実際にマルコフ基底を計算するのは，小さいサイズの分割表でも難しい．例えば 3 元分割表の無 3 因子交互作用モデルのマルコフ基底は驚くほど複雑で $3 \times 3 \times K$ の分割表については Aoki and Takemura [2] で詳細に調べられているが，$4 \times 4 \times 4$ 以上のサイズの分割表についてはほんとんどわかっていない．$s \times t$ 整数行列 A に対して，$\ker_{\mathbb{Z}}(A) = \{x \in \mathbb{Z}^t \mid Ax = 0\}$ とする．

2　マルコフ基底

定義 2.1　$s \times t$ 非負整数行列 A に対して，有限集合 $\mathcal{M} \subset \ker_{\mathbb{Z}}(A)$ が A のマルコフ基底であるとは，$Aw = Au$ を満たす任意の $w, u \in \mathbb{N}^t$ に対して，あるベクトル列 $\{v_i\}_{i=1}^{l} \subset \mathcal{M}$ が存在して，

$$w + \sum_{i=1}^{l} v_i = u,\ w + \sum_{i=1}^{p} v_i \in \mathbb{N}^t,\ 1 \leq \forall p \leq l$$

となることを言う．マルコフ基底 $\mathcal{M}$ の任意の真部分集合がマルコフ基底とならない時，$\mathcal{M}$ を極小マルコフ基底と言う．A の universal マルコフ基底 $\mathcal{M}(A)$ とは全ての極小マルコフ基底の和集合である．

分割表のモデルは行列で表すことができ，マルコフ基底を考えることはその行列の核の性質を考える事と同値である．

$i \times j \times k$ 分割表 (u_{ijk}) の無 3 因子交互作用モデルはセル (i, j, k) を取る確率を p_{ijk} とすると，

$$p_{ijk} = p_{ij+}p_{i+k}p_{+jk}$$

と書ける．無 3 因子交互作用モデルの十分統計量は

$$u_{ij+} = \sum_{k=1}^{d_3} u_{ijk},\ u_{i+k} = \sum_{j=1}^{d_2} u_{ijk},\ u_{+jk} = \sum_{i=1}^{d_1} u_{ijk}$$

となる．分割表 (u_{ijk}) から十分統計量 u_{ij+}，u_{i+k}，u_{+jk} への写像は線形写像なので行列表示できる．例えば $i = j = k = 2$ のとき，

	111	112	121	122	211	212	221	222
$(i,j) = (1,1)$	1	1	0	0	0	0	0	0
$(i,j) = (1,2)$	0	0	1	1	0	0	0	0
$(i,k) = (1,1)$	1	0	1	0	0	0	0	0
$(i,k) = (1,2)$	0	1	0	1	0	0	0	0
$(i,j) = (2,1)$	0	0	0	0	1	1	0	0
$(i,j) = (2,2)$	0	0	0	0	0	0	1	1
$(i,k) = (2,1)$	0	0	0	0	1	0	1	0
$(i,k) = (2,2)$	0	0	0	0	0	1	0	1
$(j,k) = (1,1)$	1	0	0	0	1	0	0	0
$(j,k) = (1,2)$	0	1	0	0	0	1	0	0
$(j,k) = (2,1)$	0	0	1	0	0	0	1	0
$(j,k) = (2,2)$	0	0	0	1	0	0	0	1

となる．

3　Graver 基底

$\mathbb{Z}^t$ 上の半順序 $\sqsubseteq$ を次のように定義する．任意の $u, v \in \mathbb{Z}^t$ に対して，

$$u \sqsubseteq v \Leftrightarrow |u_i| \leq |v_i| \text{ かつ } u_i v_i \geq 0\ \ \forall i = 1, \ldots, t$$

とする．$s \times t$ 行列 A の Graver 基底 $\mathcal{G}(A)$ とは $\ker_{\mathbb{Z}}(A) = \{x \in \mathbb{Z}^t | Ax = 0\}$ の元で $\sqsubseteq$ に関して極小なもの全体である．

$\mathcal{M}(A) \subset \mathcal{G}(A)$ が成り立つ [8] ので，分割表の検定をするには Graver 基底を計算出来れば良い．Graver 基底を計算するアルゴリズムは存在するものの計算時間がかかり過ぎる．本論文では Graver 基底がどの程度複雑になるのかという問題を扱う．

4　Graver complexity

Santos and Sturmfels [7] では complexity という量を導入している．Hoşten and Sullivant [6] では Santos and Sturmfels [7] の結果を一般化し，h 次 Lawrence lifting

$$[A,B]^{(h)} = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & A \\ B & B & B & \dots & B \end{pmatrix}$$

の Graver 基底を調べている．分割表の言葉で述べると，これは一つの変数を選んでその分類数 h を増加させ，他の変数の分類数が一定である時，Graver 基底がどのように変化するのかということを調べている．

行列 A，B の Graver complexity $g(A,B)$ を

$$g(A,B) = \sup\left(\{0\} \cup \left\{ \mathrm{type}(x) \,\middle|\, x \in \bigcup_{h\geq 1} \mathcal{G}\left([A,B]^{(h)}\right) \right\}\right)$$

と定義する．h が Graver complexity $g = g(A,B)$ を超えるとその Graver 基底は, より小さい h の Graver 基底を並べ替えただけのものとなる．Hoşten and Sullivant [6] では Graver complexity g を実際に計算するアルゴリズムを与え，$g < \infty$ を示した．$t \times t$ 単位行列を I_t と書き，$A^{(h)} = [A, I_t]^{(h)}$，$g(A) = g(A, I_t)$ とする．

例えば，行列 $(1,1,1)$ の r 次 Lawrence lifting に対して，さらにその行列の q 次 Lawrence lifting を取った行列 $((1,1,1)^{(r)})^{(q)}$ は $q \times r \times 3$ 分割表の無 3 因子交互作用モデルに対応する行列である．g を $(1,1,1)^{(r)}$ の Graver complexity とすると，$q > g$ の時，$q \times r \times 3$ 分割表の無 3 因子交互作用モデルの Graver 基底はより小さい $m \times r \times 3$ 分割表 $(m \leq g)$ の Graver 基底を使って書ける．

5　$g((\mathbf{1}_t)^{(r)})$ の評価

ここまで述べたように，Graver complexity は重要な量で，Graver complexity を計算するアルゴリズムも与えられているが，実際に計算することは小さいサイズの行列に対しても難しい場合がほとんどである．Hemmecke and Nairn [5] では Graver complexity $g((1,1,1)^{(r)})$ を下から評価し，

$$g((1,1,1)^{(r)}) = \Omega(2^r) \ (r \to \infty)$$

を得ている．

本論文では式 (1) を一般化し，任意に $t \geq 4$ を固定し $1 \times t$ 行列 $\mathbf{1}_t = (1,1,\dots,1)$ に対して，

$$g((\mathbf{1}_t)^{(r)}) = \Omega((t-1)^r) \ (r \to \infty)$$

を得た．式 (1) について詳細に書き下し，以下のように定理としてまとめる．

定理 5.1　$r \geq t \geq 4$ とする．

$$g(\mathbf{1}_t^{(r)}) \geq (t-1)^{r-t}(b_t + \frac{1}{t-2}) - \frac{1}{t-2} \qquad (1)$$

が成立する．ここで，

$$b_t = (t-2)!\left(15 + \sum_{i=1}^{t-4} \frac{i+4}{(i+2)!}\right)$$

であり，任意の数列 $\{S_i\}_{i=1}^{\infty}$ に対して $\sum_{i=1}^{0} S_i = 0$ とする．

評価式の証明の概略を以下に述べる．ある $h \geq 1$ と $x \in \mathcal{G}(A^{(h)})$ が存在して，$\mathrm{type}(x) = h$ を満たせば，$g(A) \geq h$ が成り立つ．Hemmecke and Nairn [5] では $\mathrm{type}(x_3^4) = 27$ を満たす $x_3^4 \in \mathcal{G}((\mathbf{1}_3^{(4)})^{(27)})$ を計算機を使って計算した．本論文では Berstein and Onn [3] の手法を拡張して，x_3^4 から帰納的に type が増大する $x_t^r \in \mathcal{G}((\mathbf{1}_t^{(r)})^{(type(x_t^r))})$ を構成する手法を提案した．したがって，$g((\mathbf{1}_t^{(r)})) \geq \mathrm{type}(x_t^r)$ が成り立つ．

$g(\mathbf{1}_t^{(r)})$ の下界は式 (1) よりも厳しい値を取ることができ，例えば $g(\mathbf{1}_t^{(r)}) \geq 68$ となることがわかっている．また，$g(\mathbf{1}_t^{(r)})$ の上界も知られているが，式 (1) とのギャップが大きい．$g(\mathbf{1}_t^{(r)})$ の値が実際にどの程度になるのかという問題は今後の課題である．

参考文献

[1] 4ti2 team. 4ti2—a software package for algebraic, geometric and combinatorial problems on linear spaces. Available at http://www.4ti2.de/.

[2] Satoshi Aoki and Akimichi Takemura. Minimal basis for a connected Markov chain over $3 \times 3 \times K$ contingency tables with fixed two-dimensional marginals. *Australian & New Zealand Journal of Statistics*, Vol. 45, No. 2, pp. 229–249, 2003.

[3] Yael Berstein and Shmuel Onn. The Graver complexity of integer programming. *Annals of Combinatorics*, Vol. 13, No. 3, pp. 289–296, 2009.

[4] Persi Diaconis and Bernd Sturmfels. Algebraic algorithms for sampling from conditional distributions. *The Annals of Statistics*, Vol. 26, No. 1, pp. 363–397, 1998.

[5] Raymond Hemmecke and Kristen A. Nairn. On the Gröbner complexity of matrices. *Journal of Pure and Applied Algebra*, Vol. 213, No. 8, pp. 1558–1563, 2009.

[6] Serkan Hoşten and Seth Sullivant. A finiteness theorem for Markov bases of hierarchical models. *Journal of Combinatorial Theory. Series A*, Vol. 114, No. 2, pp. 311–321, 2007.

[7] Francisco Santos and Bernd Sturmfels. Higher Lawrence configurations. *Journal of Combinatorial Theory. Series A*, Vol. 103, No. 1, pp. 151–164, 2003.

[8] Bernd Sturmfels. *Gröbner Bases and Convex Polytopes.* American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1996.