研 究 報 告 書

「正定値対称行列の数理に関する革新的新技術」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 伊師 英之

1． 研究のねらい

本研究の開始前に，我々はある種の良い構造をもつ正定値対称行列のなす凸錐を見通しよく扱う代数的枠組みを発明した．この道具を用いた，様々な問題に現れる巨大サイズの行列計算のアルゴリズムの評価，改良，および新開発が本研究の目標である．対称錐および等質錐についての先行研究を当面の研究の指針とし，それらの深化および現実問題への応用を通じて成果を上げる．さらに多くの問題解決に挑戦し，その結果として既存の理論を大きく包含するような体系の創造を目指す．一方で，本研究において得られた数学的成果を微分幾何学や表現論のコミュニティで発表し，多くの数学者が行列に関する数理工学の問題に取り組むきっかけを与えることも目標の一つである．

サイズが非常に大きいが殆どの成分が0であるような疎な行列の数理は，ビッグデータや人工知能など多様な分野で必要とされ，近年ますます盛んに研究されている．我々の考察のターゲットの一つは，このような行列である．この種の行列を扱うアプローチの一つにグラフィカルモデルの理論がある．これは大雑把にいえばデータの依存関係をグラフによって表すものであり，数理統計において発展し，現在では機械学習などにも応用されている．このグラフがコーダル（chordal）という条件をみたすときに，対応する対称行列に関して種々の計算が著しく簡単になる．とくに，この場合については，ある種の積分の値や尤度関数の最小値などの重要な量を（近似値ではなく）陽に表す公式が存在することが知られている．

私は純粋数学者として長年の間，豊富な対称性をもつ凸錐である等質錐の幾何と解析を研究してきたが，コーダルなグラフィカルモデルに関する上記の美しい公式たちが，等質錐の理論において研究してきた公式と類似していることを不思議に思っていた．一方で，等質錐および対称錐自体も凸計画法や数理統計への応用が研究されており，私も統計学者や応用数学者と共同研究を行ってきた．そのような中で，ついに等質錐とコーダルグラフィカルモデルに現れる凸錐の双方を含む広範なクラスの錐を，対称行列の集合として実現して研究する手法を確立した．グラフィカルモデルは，理論と応用において現在も活発に展開している分野であり，蓄積も膨大である．この分野に対し，我々の枠組みを通じて等質錐のアイディアや手法を導入することで，豊富な成果が得られることが期待できる．

2． 研究成果

（1）概要

正定値実対称行列を下三角行列とその転置行列の積として表すコレスキ分解は，応用数学において基本的な概念で，連立方程式の解法をはじめとする様々な場面において重要な役割を果たす．コーダルなグラフィカルモデルに現れる正定値対称行列はコレスキ分解においてゼロ成分の位置が保存される（fill-in free）という都合の良い振る舞いをすることが知られ

ている．我々はこの「良い振る舞い」を一般的なかたちで定式化し，等質錐の視点から徹底的に研究することで，コーダルなグラフィカルモデルのように綺麗な計算を許容する行列の単純な代数構造を発見し，準コレスキ構造と名付けた．これが何より重要な成果である．なお，本研究の出発点であった等質錐を含む枠組みも，この準コレスキ構造に自然に含まれる．

指数型分布族は，正規分布や二項分布，カイ2乗分布といった統計において重要なものを多数含む確率分布のクラスである．平均0・分散1の標準正規分布をアファイン変換することによって全ての正規分布が得られることは良く知られているが，このように一つの分布の変数変換によって全ての分布が得られるような性質をもつ指数型分布族を完全に分類することに成功した．このような指数型分布族は全て，上述の準コレスキ構造をもつランダム行列として具体的に構成される．

与えられた多変量データのサンプルから，どのような成分の入れ替えに関して不変なモデルを設定すればよいかをベイズ統計によって定量的に判定する方法を開発した．これは有限群の表現論と対称錐の理論を応用して得られたものであり，「色付きグラフィカルモデル」という比較的新しい研究テーマにおいて世界で初めて得られた一般的な結果といえる．

線形計画問題および半正定値計画問題の効率よい解法である主双対内点法においては，実行可能解の集合が双対錐においてどれだけ曲がっているかが最適解の計算コストに比例することが知られている．我々は，実行可能解の集合が双対錐においても平坦で，最適解が陽に計算できるような問題は，ジョルダン代数の部分代数に対応することを発見した．

以上の成果をまとめると，本来計算コストの大きい積分や最適解の計算に対し，反復計算による近似値ではなく正確な値が陽に計算できるような状況を我々は多数発見したといえる．ちょうど一般の力学系における可積分系のように，本研究で発見されたものは特殊ではあるが，少なくとも理論的には重要な存在になるであろう．

（２）詳細

研究テーマ A「準コレスキ構造の発見」

一般に多数のゼロ成分をもつ疎な対称行列であっても，コレスキ分解した結果として得られる三角行列は疎になるとは限らない．対称行列におけるゼロ成分が，コレスキ分解した三角行列においてゼロでなくなる現象は fill-in と呼ばれる．この fill-in が全く起こらない状況は fill-in free と呼ばれており，グラフィカルモデルにおいては，グラフがコーダルである（すなわち，長さ4以上のサイクルは必ずショートカットをもつ）ことと同値である．この fill-in free の状況では種々の計算が時として極めて容易になることは応用数学において良く知られていた．

我々は対称行列からなる一般的なベクトル空間 Z に対して，fill-in free を拡張する概念を次のように定義した：ベクトル空間 Z が『コレスキ構造をもつ』とは，Z に属する各正定値対称行列 x のコレスキ分解によって得られる下三角行列全体が生成するベクトル空間の次元と，もとの Z の次元が等しいことをいう．ゼロ成分を固定した疎な対称行列からなるベクトル空間については，2つのベクトル空間の次元の差が fill-in の生じた成分の個数とみられ，この意味でコレスキ構造は fill-in free の一般化になっている．我々は Z がコレスキ構造であるかどうかは，或る二項演算について Z が閉じていることと同値であることを発見した．さらに，このときベクトル空間 Z には等質錐を実現する空間と類似した構造があることが判明し，尤度関

数の積分や最適化問題の解，そして或る種の欠損データ問題の最尤解が，コーダルなグラフィカルモデルの場合と同様に明示的に求積できることを証明した．ある正則行列によるベクトル空間Ｚの共役がコーダル構造をもつとき，Ｚは準コレスキ構造をもつという．準コレスキ構造についても，上記問題に対する明示解が存在する．しかも，以下に述べる「等質指数型分布族」「色付きグラフィカルモデル」「正定値対称行列全体のなす凸錐の二重自己平行部分多様体」は全て準コレスキ構造の枠組みのなかで実現されることがわかった．すなわち，「準コレスキ構造」は本研究全体を包括する単純かつ普遍的な構造なのである．

研究テーマＢ「等質指数型分布族」

いくつかのデータの期待値が与えられた中で，データの分布を出来るだけ妥当な形で推定するというのは基本的な問題である．妥当性の基準として，シャノンのエントロピーが最小であることを要請すると，問題の解として指数型分布族が現れる．確率分布族において，一つの分布の変数変換によって分布族全体が得られるものを等質と呼ぶ．１次元のパラメータ空間をもつ等質指数型分布族は，半直線上のガンマ分布と，分散を固定した1次元正規分布であり，これらは初等幾何における円と直線の役割を，情報幾何において担うと考えられる．

我々は，等質な指数型分布族のパラメータ空間には，微分幾何の概念である等質ヘッセ領域の構造が入ることを証明した．一方で，私がこれまで研究してきた等質錐の行列実現の方法を拡張して，全ての等質ヘッセ領域を対称行列の集合として実現することに成功した．これらから，結果として全ての等質指数型分布族を，研究テーマＡで述べたコレスキ構造をもつ対称行列に値をとるランダム行列として構成することが出来た．そこでは，上述のガンマ分布と正規分布が構成要素になっている．

研究テーマＣ「色つきグラフィカルモデル」

単純グラフの頂点 a と頂点 b が結ばれていないとき，多変量データの第 a 成分と第 b 成分が条件付き独立であるとするのが，グラフィカルモデルのアイディアで，このとき対応する対称行列の(a, b)成分は 0 となる．このグラフィカルモデルの要請に加えて，もとの単純グラフの頂点や辺を着色し，同じ色ならば対応する対称行列の成分同士が等しいとするモデルを「色付きグラフィカルモデル」という．とくにグラフを自分自身に重ね合わせる操作によって，重なり合う頂点や辺の色を同じにすることは，多変量データの成分の入れ替えについての対称性を統計モデルに加味することになり，応用上重要である．実際，そのようなモデルがうまく見つかると，データは大幅に圧縮される．

我々は，全ての頂点が辺で結ばれている完全グラフの色付きグラフィカルモデルの研究を対称錐とジョルダン代数の理論をもとにして展開した．重要なことは，これが準コレスキ構造であり，共役をとる行列は有限群の表現論を通じて見つけられるということである．与えられたデータに最も良く適合する色付きグラフィカルモデルを探索するためには，可能性のある膨大な数の着色に対して計算を実行する必要があるが，そのための工夫を積み重ねることにより現状では16×16の行列に対して解を与える目処がたった．

研究テーマＤ「正定値対称行列のなす凸錐の二重自己平行部分多様体」

半正定値計画法において，実行可能解の集合が（半）正定値対称行列からなる対称錐の二重自己平行部分多様体（すなわち，行列成分から定まる自然な座標系において平坦で，さらに逆行列の成分から定まる座標系においても平坦）である状況では，最適解は反復法ではなく，明示的に計算される．我々は，そのような二重自己平行部分多様体と，実対称行列のなすジョルダン代数の部分代数との間に一対一の対応があることを発見した．なお，ジョルダン部分代数も準コレスキ構造の一種であり，先述の完全グラフの色付きグラフィカルモデルに対応する対称行列の集合は，二重自己平行部分多様体の重要な例となっている．準コレスキ構造の一般論を適用して，原理的には（組合せ論的複雑さを不問にすれば），我々は可能な全ての二重自己平行部分多様体を記述することが出来る．

3. 今後の展開

社会的な問題に実際に現れる巨大サイズの行列に，準コレスキ構造がそのまま当てはまることはあまり期待できない．与えられたデータに対して，それを近似する適切な準コレスキ構造を見つけること，そして，その準コレスキ構造に対する計算結果から，もとのデータに対する結果を引き出す手法を確立することが今後の課題である．Fill-in free な行列についての先行研究をヒントにして考えていきたい．

一方で，準コレスキ構造は純粋数学と応用数学の両方に興味ある問題を提供することが出来る対象であると確信している．本研究を遂行するにあたり，海外から幾人もの研究者を招聘したり，分野横断的な研究集会を開催したりすることによって，多様な分野の研究者のネットワークを築くことが出来た．このつながりのもとで，準コレスキ構造の理論をさらに豊かに発展させていきたいと考えている．

4. 自己評価

本研究で得られた成果の数学的価値には自信をもっている．とくに，対称行列に対して定義した新しい二項演算から，単純な見かけからは思いも寄らないような豊富な結果を引き出せたのは，長年の等質錐の研究の経験と，本研究期間に実施した多くの研究者との研究討議の賜物であると考えている．欠損データ問題の最尤法による解法や，多変量データの成分の入れ替えに関するモデル選択など，この枠組で具体的な統計の問題に関する成果も得られたが，データの容れ物としての「佳いかたち」を発見したことの潜在的重要性が開花するのは今後のことであろう．その際に課題となるのは，一般のデータを「佳いかたち」のデータに帰着させて計算量を減らす方法論である．グラフィカルモデルの先行研究にヒントがあるように見えたが，考察を進めることは出来なかった．また，今回得られた成果の多くは国内外の研究集会で発表したものであるが，論文にまとめて出版するには時間が足りなかった．

本研究の予算の大半は，国内外の出張旅費と，研究者の招聘の費用として執行した．名古屋大学において，「行列解析の展開」というタイトルで，経済や工学を含む様々な分野の研究者が行列をテーマにアイディアの交流をはかるワークショップを開催した．このワークショップのあとに参加者同士の研究討議や共同研究が開始されたことが複数あり，大変意義深い催しとなった．さらに，第１８回名古屋数学コンファレンス「Information Geometry and Affine Differential Geometry III」というタイトルで，情報幾何の国際研究集会を開催した．純粋数学者

に情報幾何を紹介するという目標を掲げたこともあり，年度末にも関わらず70名ほどの参加者があった．こちらも国内外の研究者の相互交流を促進するという点で，大きな意義があった．このようにして築かれた多様な研究者のつながり，とくに純粋数学者と統計学者や工学者とのつながりは，今後も発展し，成果を産み出していくであろう．

一方で，海外の共同研究者（延べ10名）をそれぞれ数週間（2週～6週）名古屋大学に招聘した．とくに，Piotr Grazczyk 教授と Bartosz Kolodziejek 助手は何度も招聘し，大変充実した共同研究が実現できた．

5．　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1.Hideyuki Ishi, Matrix realizations of homogeneous Hessian domains, Lecture Notes in Comput. Sci. (2017) 10589, 195--202
2. Atsumi Ohara and Hideyuki Ishi, Doubly autoparallel structure on the probability simplex, Springer Proc. Math. Stat. (2018) 252, 323--334
3. Hideyuki Ishi and Bartosz Kolodziejek, Characterization of the Riesz exponential family on homogeneous cones, Colloq. Math. (2019) 158, 45--57
4. Piotr Graczyk, Hideyuki Ishi and Bartosz Kolodziejek, Wishart laws and variance function for homogeneous cones, Probab. Math. Statist. (2019) 30, 337--360

（2）特許出願

研究期間累積件数：0件（公開前の出願件名については件数のみ記載

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

学会発表

1. Wishart laws for a wide class of regular convex cones, CIRM Conference ‘Mathematical Methods of Modern Statistics’, Luminy, フランス, 2017.7.11
2. Matrix realization of a homogeneous Hessian domain, 3rd Conference on Geometric Science of Information, Paris, フランス, 2017.11.9
3. 凸錐上の「型積分，日本数学会年会，函数解析学分科会特別講演，東京大学，2018.3.19
4. On homogeneous exponential family, 第 18 回名古屋国際数学コンファレンス「Information Geometry and Affine Differential Geometry III」，名古屋大学, 2019.3.27