Wishart 行列の最大固有値の分布関数のホロノミック勾配法による計算

橋口博樹, 沼田泰英, 高山信毅, 竹村彰通

2012.09.19

arxiv:1201.0427
手書きをやらない部分のスライド.

Holonomic 関数の例.

1. exp(有理式)
2. (多項式)^a.

Theorem

(D.Zeilberger, 1990) f, g が *holonomic function* ならば $f \pm g$, fg も *holonomic function*. $\int f dx_m$, $f(x_1, \ldots, x_{m-1}, a)$ も $m-1$ 変数の *holonomic function*.

証明: ワイル代数 D での, holonomic D-加群の理論 (初期 J.Bernstein, 1971).

1. $I(f)$, $I(g)$ より $I(f \pm g)$, $I(fg)$, $I(\int f dx_m)$, $I(f(x', a))$ の holonomic な subideal を計算するグレブナー基底によるアルゴリズムあり (大阿久, . . . (1990—)).

1. Schwartz distribution f に対して, $I(f)$ が holonomic ideal であるとき, f を holonomic distribution と呼ぶ.
2. D の左イデアルが holonomic ideal とは多項式環のイデアル $\sigma(I)$ の Krull 次元が m であること. ここで σ は主シンボル. 例: $\sigma(x\partial^2+1-x^2)=x\xi^2$.

Holonomic distribution の例.

1. ヘビサイド関数 H(多項式).
2. $|$ 多項式 $|$.

$$\frac{\Gamma_m(a)\Gamma_m(c-a)}{\Gamma_m(c)}{}_1F_1(a;c;Y)$$
$$= \int_{0<X<I_m} \exp(\operatorname{Tr} XY)|X|^{a-(m+1)/2}|I_m - X|^{c-a-(m+1)/2}dX,$$

where $0 < X < I_m$ means that X and $I_m - X$ are positive definite, $dX = \prod_{i \le j} dx_{ij}$ is the Lebesgue measure of the upper triangular elements of X, and

$$\Gamma_m(a) = \pi^{\frac{1}{4}m(m-1)} \prod_{i=1}^{m} \Gamma\left(a - \frac{i-1}{2}\right).$$

$$\Pr[\ell_1 < x] = C \exp\left(-\frac{x}{2}\mathrm{Tr}\,\Sigma^{-1}\right) x^{\frac{1}{2}nm} {}_1F_1\left(\frac{m+1}{2}; \frac{n+m+1}{2}; \frac{x}{2}\Sigma^{-1}\right),$$

$$C = \frac{\Gamma_m\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2^{\frac{1}{2}nm}(\det\Sigma)^{\frac{1}{2}n}\Gamma_m\left(\frac{n+m+1}{2}\right)}.$$

はじめに紹介した Holonomic 関数の一般論より ${}_1F_1$ は holonomic な微分方程式系をみたすはず．実際，

Theorem

(Muirhead, 1970) ${}_1F_1(a, c; X)$, $X = \mathrm{diag}(y_1, \ldots, y_m)$ は次の偏微分方程式系を満す．

$$L_i = y_i\partial_i^2 + (c - y_i)\partial_i + \frac{1}{2}\sum_{j=1, j\neq i}^{m} \frac{y_j}{y_i - y_j}(\partial_i - \partial_j) - a$$

Theorem

Pfaffian system に現れる行列 P_i は *sparsity* を持ち，*Runge-Kutta* 法で数値的に解くときの計算量は

$$O(m2^m) \times (\text{与えられた精度で解くときの } RK \text{ 法の } step \text{ 数})$$

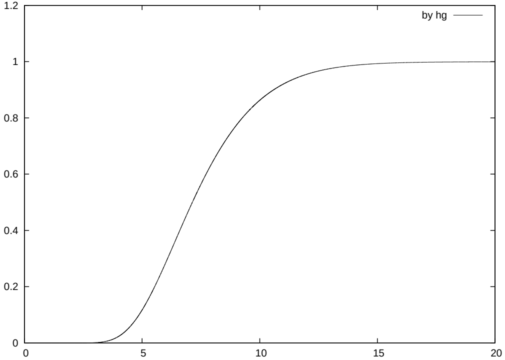

Figure: 累積分布関数 $\Pr[\ell_1 < x]$, $m = 10, n = 12$, $\Sigma^{-1} = \mathrm{diag}(1, 2, \ldots, 10)$

歴史

1. Zonal 多項式による ${}_1F_1$ の級数展開. Zonal 多項式の研究 (竹村 1984, . . . ,).
2. 高次の Zonal 多項式の計算が組み合わせ爆発により困難. Koev-Edelman (2006) により Pieri 型公式を使いある程度の効率化には成功. x が小さい時には級数展開は有効.
3. x が大きい時には tube 法などの方法がある (栗木, 竹村, 2001).

本格的な勉強のためのガイド

積分アルゴリズム, Pfaffian の導出, gradient の計算.

1. 高山信毅, D 加群の積分アルゴリズムと推定理論, 数学セミナー 2012.02, 41–46.
2. D.Cox, J.Little, D.O'Shea, Ideals, Varieties and Algorithms, Springer, 1992. 日本語訳あり. グレブナー基底の基礎 1,2 章.
3. JST CREST 日比チーム (編), グレブナー道場. 共立出版. 第 1 章. Dojo multimedia. グレブナー基底の基礎
4. 道場, 第 6 章. 微分作用素環のグレブナー基底. 6.1–6.5.
5. 大阿久俊則. *D* 加群と計算数学, 朝倉書店. 道場 6.6–6.10. 積分アルゴリズム
6. 道場, 6.5 HGD

Fisher-Bingham 分布の研究

1. Hiromasa Nakayama, Kenta Nishiyama, Masayuki Noro, Katsuyoshi Ohara, Tomonari Sei, Nobuki Takayama, Akimichi Takemura, Holonomic Gradient Descent and its Application to the Fisher-Bingham Integral, arxiv:1005.5273, Advances in Applied Mathematics 47 (2011), 639–658 HGD の方法論の提案も
2. T. Koyama, A Holonomic Ideal Annihilating the Fisher-Bingham Integral, http://arxiv.org/abs/1104.1411
3. T. Koyama, H. Nakayama, K. Nishiyama, N. Takayama, Holonomic Gradient Descent for the Fisher-Bingham Distribution on the n-dimensional Sphere, http://arxiv.org/abs/1201.3239
4. T. Koyama, H. Nakayama, K. Nishiyama, N. Takayama, The Holonomic Rank of the Fisher-Bingham System of Differential Equations, http://arxiv.org/abs/??

高次元 で HGD でないもの.

1. K. Kume, A. T. A. Wood, Saddlepoint Approximations for the Bingham and Fisher-Bingham Normalising Constants, Biometrika **92** (2005), 465–476.

Fisher 分布 (HGD), Wishart 分布 (HGM)

1. Tomonari Sei, Hiroki Shibata, Akimichi Takemura, Katsuyoshi Ohara, Nobuki Takayama, Properties and applications of Fisher distribution on the rotation group, http://arxiv.org/abs/1110.0721
2. Hiroki Hashiguchi, Yasuhide Numata, Nobuki Takayama, Akimichi Takemura, Holonomic gradient method for the distribution function of the largest root of a Wishart matrix, http://arxiv.org/abs/1201.0472

HGD でないもの.

1. R.Butler, W.Ronald, A.T.A.Wood, Laplace approximations for hypergeometric functions with matrix argument, The Annals of Statistics (2002), 1155–1177.
2. Wishart 分布については, 基本問題のため, その他多数あり. 上記論文の Reference を参照.