HGM ソフトウエア, HGM ソフト開発支援ツール

Nobuki Takayama

2014.03.04

HGM=Holonomic Gradient Method.

1. パラメータ付き積分 (正規化定数) の満たす微分方程式, さらに Pfaffian (全変数の ODE) を求める (計算機 or 素手).
2. パラメータ付き積分の値をうまいパラメータで求める.
3. 上を初期値として Pfaffian を数値解析してパラメータのほかの点でも値 (正規化定数) を求める.

Fisher-Bingham 分布

$$z(\Theta, \theta) = \int_{S^n} \exp(t^T \Theta t + \theta t)|dt| \quad (1)$$

$|dt|$: the Haar measure on the hypersphere S^n over which t runs. Θ: $(n+1) \times (n+1)$ real symmetric matrix. θ: real vector of the length $n+1$.

1. `tkoyama-initial` (小山), 正規化定数の計算, C
2. `pfn_gen_c_2.rr`(中山), HGD 用の C プログラムを生成する asir プログラム. HGD 初期点を探す R プログラム.
3. Bingham 分布用 R プログラム (清)

1. R パッケージ化.
2. 退化した分布にまだ未踏の地あり.
3. HGD 初期点の成功率の高い発見方法.
4. 一重積分の計算への活用, 一重積分とみての特殊関数論的考察.

Fisher-Bingham 分布, 正規化定数の計算

```
./tkoyama-initial --2 1 2 3 4 5 6 1 2 3
dim: 2
 1.000000 2.000000 3.000000: 1.000000
 2.000000 4.000000 5.000000: 2.000000
 3.000000 5.000000 6.000000: 3.000000
r*r = 677.636855
ii = 0,  s = 1.000000 -> 677.636855
return of the function fbnd:
[852838, 260983, 476313, 610410, 109743, 289621]

f[0]=852838.485940
f[1]=260982.641575
f[2]=476312.838242
f[3]=610410.487964
f[4]=109742.585359
f[5]=289621.010047
```

Fisher 分布

X, Θ: 3×3 real matrices. $\Theta^\top$: the transpose of Θ. μ: the invariant measure on $SO(3)$.

$$z(\Theta) = \int_{SO(3)} \exp(\mathrm{Tr}\,(\Theta^\top X))\, d\mu(X).$$

1. 正規化定数 `OpenXM/src/hgm/so3/src/so3_nc.c`, `OpenXM/src/R/r-packages/hgm/R/hgm.so3nc.R`

1. $SO(n)$ では?

Wishart 分布に従う行列達の第一固有値に関する累積分布関数

Matrix hypergeometric integral ${}_1F_1$

X : $m \times m$ real matrix.

$$\int_{0<X<I_m} \exp(\mathrm{Tr}\, XY)|X|^{a-(m+1)/2}|I_m - X|^{c-a-(m+1)/2} dX,$$

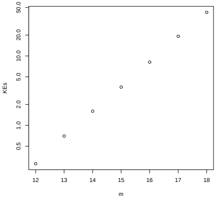
$0 < X < I_m$ means that X and $I_m - X$ are positive definite symmetric matrix. $dX = \prod_{i \leq j} dx_{ij}$.

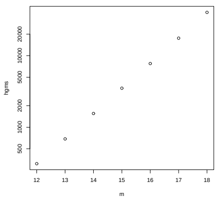
1. 正規化定数 `OpenXM/src/hgm/mh/src/`, Koev-Edelman algorithm (2006, 級数による初期値) + hgm, `hgm_jack-n` + `htm_w-n`.
2. Asir package `tk_jack.rr`

1. 初期値を正しい精度まで計算する方法.
2. 分散計算の活用 (sparse ODE, 精度を得るまでの繰り返し).
3. 退化した場合がほとんど未踏 (昨年の野呂, 近藤, 北).
4. contiguity, 他の matrix hg.

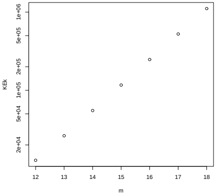
現在の実装の Timing Data

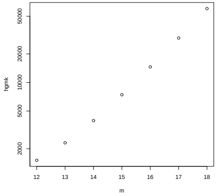
Intel(R) Xeon(R) CPU E5-4650 0 @ 2.70GHz.
$n = 3, \beta = (1.0, 1.2, 1.4, 1.6, \ldots)$, logarithmic scale.





秒. hgm は 11900 点

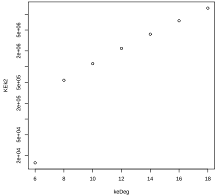




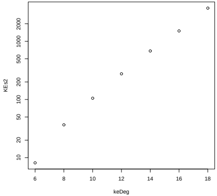
Kbytes.

精度のよい初期値が必要．どこまで近似?

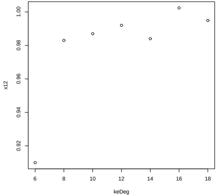
$m = 16$, $x_0 = 0.1$. 最初二つは logarithmic scale.



KB,



秒. (Koev-Edelman)



$x = 12$ での値.

象限確率

$$z(\tau,\theta) = \int_0^\infty \cdots \int_0^\infty \exp\left(\sum_{i=1}^m \theta_i x_i + \sum_{i,j=1}^m x_i x_j \tau_{ij}\right) dx$$

$dx = dx_1 \cdots dx_m$.

1. 小山実装. $\theta = 0$ の近傍で R に実装された Miwa 法 (2003, mvtnorm) より, はるかに高速.

1. R パッケージとして公開.
2. 第一象限を polyhedron に一般化. 理論編 (小山), 実装がまだ (多面体の算法との融合となる, 未踏).

A-分布

$$z(\theta) = \int_C \exp\Big(\sum_{j=1}^n \theta_j t^{a_j}\Big) \prod_{i=1}^d t_i^{-b_i-1} dt, \quad dt = dt_1 \cdots dt_d$$

$A = (a_{ij})$: $n \times d$ integer matrix. b_i: real number. a_j: the j-th column vector of the matrix A. $t^{a_j} = \prod_{i=1}^d t_i^{a_{ij}}$.

1. C_{11} についての実装実験 (A 分布の汎用 hgm を目指して, 小原, 西山, 高山).

1. A-分布汎用の hgm. hgm ソフト開発ツール.
2. 特に筋のいい (特殊な) A-分布の理論研究とアルゴリズム (分割表: 小川. 特殊な A, 日比, 西山, 高山など)