



Holonomic Gradient Method for Multivariate Normal Probabilities for Polyhedral and Spherical Regions

小山, 民雄

(Degree)

博士 (理学)

(Date of Degree)

2014-03-25

(Date of Publication)

2015-03-01

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲第6118号

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1006118>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



(別紙様式 3)

論文内容の要旨

氏 名 小山民雄
専 攻 数学専攻

論文題目 Holonomic Gradient Method for Multivariate Normal Probabilities for Polyhedral and Spherical Regions
(多面体領域と球状領域の正規確率に対するホロノミック勾配法)

指導教員 高山信毅

ホロノミック勾配法 (Holonomic Gradient Method)、あるいはホロノミック勾配降下法 (Holonomic Gradient Descent) は、中山洋将らにより 2011 年に提唱された、比較的新しい数値解析の手法である。この手法の成立の背景には、 D 加群の理論とアルゴリズムの発達と、統計学における数値計算の課題の二つがある。

多項式や、Schwartz の distribution, 佐藤超関数などが定める関数空間の自己準同型の定める代数の部分代数で多項式の掛け算作用とある変数に関する偏微分の作用で生成されるものを (多項式係数の) 微分作用素環と呼ぶ。 D 加群とは、微分作用素環が作用する加群のことである。代数解析学では、多項式係数の微分作用素により定義される線形微分方程式系を、微分方程式系の定める D 加群の代数的性質を調べることを通して研究する。また、具体的に微分方程式系が与えられたときに、その特性多様体や singular locas、制限加群、積分加群を計算するアルゴリズムが高山信毅、大阿久俊則などの仕事により整備されてきた。

D 加群の理論において、特に重要な微分方程式のクラスとして、holonomic 系と呼ばれるものがある。holonomic 系は、それが定める D 加群に付随する特性多様体の次元が最小になるという条件によって特徴づけられるが、この条件から様々なよい性質が導かれる。holonomic 系を満たす多変数関数を holonomic 関数と呼び、多項式、指数関数などが、基本的なホロノミック関数として挙げられる。また、holonomic 関数がある変数について積分して得られる関数も、再び holonomic 関数になる。holonomic 系を変換すると Pfaffian 系と呼ばれる全微分方程式系が得られる。Pfaffian 系に対して Runge-Kutta 法などの常微分方程式の数値解法を適用することにより、元々の holonomic 関数の数値計算が可能になる。以上が、ホロノミック勾配法の概要である。

一方、統計学においては、実際にデータが与えられたときに、数値計算を行い意味のある情報を取り出すことが非常に重要となる。しかしながら、正規化定数などの量は、多次元の領域上での積分として表されることが多く、次元が大きくなると数値積分が困難になる。このような数値積分を行う手法として、モンテカルロ法が広く用いられているが、モンテカルロ法は高精度計算には不向きであることが知られている。高精度計算を行うためには別のアプローチが必要になるが、統計学に現れる積分の多くはパラメータに関して holonomic 関数になっている。そのため、ホロノミック勾配法が適用可能であり、実際に適用してみると他の手法と同程度かそれ以上の性能であることが、多くの例で確認されてきている。

このような現状の中で、著者はホロノミック勾配法の Fisher-Bingham 積分、象限確率、多変量正規分布の polyhedron 内の確率の数値計算への応用の研究に関わってきた。博士論文では、これらの事柄について述べる。

まず、第一章から第三章では、Fisher-Bingham 積分に関して論じる。方向統計学では、球面上に分布するデータを取り扱うが、その際に用いる統計モデルとして Fisher-Bingham 分布が基本的とされている。Fisher-Bingham 積分とは、Fisher-Bingham 分布の正規化定数のことで、多変量正規分布の密度関数を球面上の体積要素によって積分することで定義される。Fisher-Bingham 積分の数値計算に関する研究には、A. Kume と A. T. A. Wood による saddlepoint 近似を用いた計算法 (2005) や、A. Kume と S. G. Walker (2009) による原点付近のべき級数展開などがある。実際のデータが与えられたとき、Fisher-Bingham 分布を仮定した最尤法を行うためには、Fisher-Bingham 積分を含んだ尤度関数の最大点を見つけるが必要になる。しかしながら、Fisher-Bingham 積分の微分の数値計算の難しさが、尤度関数の評価を困難にしていた。ホロノミック勾配法により、Fisher-Bingham 積分の微分の効率的な数値計算が可能になり、上の尤

氏名: 小山 民雄 NO. 2

度関数の評価が可能になった。第一章と第二章では、一般の次元の球面における Fisher-Bingham 分布の最尤推定へのホロノミック勾配法の応用について論じる。Fisher-Bingham 分布による高精度の最尤推定は、ホロノミック勾配降下法により、はじめて可能になった。

第一章では、ホロノミック勾配法の適用に必要な理論的な結果について論じる。すなわち、Fisher-Bingham 積分が満たす holonomic 系を一つ明示的に与える。これは中山たちが提出した予想を肯定的に解決するものであり、その証明は Fisher-Bingham 積分の被積分関数が満たす holonomic 系の積分加群を計算することで行われる。この積分加群を計算するテクニックは、第四章と第五章でも、必要な holonomic 系を構成する際に用いられる。

第二章では、第一章で与えた holonomic 系の holonomic rank を決定する。この結果により、第三章で与える Pfaffian 系の行列のサイズが決定し、ホロノミック勾配法の計算量の評価が可能になる。

第三章では、第一章で与えた holonomic 系を Pfaffian 系に変換する。その Pfaffian 系を利用して、Fisher-Bingham 分布を用いた最尤推定を高次元の球面上で行う。

第四章では、ホロノミック勾配法の象限確率への応用について論じる。象限確率とは、多変量正規分布に従う確率ベクトルの全ての成分が非負になる確率であり、これは多変量正規分布の平均パラメータと分散パラメータの関数になる。象限確率の数値計算は仮説検定を行う際に重要であるため、関連する研究は非常に多い。その中で代表的な計算法としては、A. Genz (1992) による Quasi-Monte Carlo method を利用したものと、T. Miwa, A. J. Hayter 及び S. Kuriki (2003) による逐次数値積分に基づくものの二つがある。また、象限確率の数値計算に微分方程式を応用する研究も R. L. Plackett (1954) や H. I. Gassmann (2003) が行っている。彼らの導いた逐次微分公式は象限確率の満たす holonomic 系に付随する Pfaffian 系に相当し、この公式の背後にある数学的な仕組みがホロノミック勾配法の研究を通して見えてきた。第四章では、第一章で用いた積分加群を計算するテクニックを用いて、第一象限の指示関数が schwartz distribution として満たす holonomic 系から象限確率の満たす holonomic 系を導出する。そして、象限確率の満たす holonomic 系から Pfaffian 系に相当する逐次微分公式を導き、holonomic rank を決定する。さらに、導出した Pfaffian を用いて、象限確率の数値計算にホロノミック勾配法を適用する。計算実験では、ホロノミック勾配法は高精度計算において既存手法と同程度かそれ以上の性能であることを示す。

第五章では、多面体領域の正規確率について論じる。この確率は、象限確率と同様に統計の応用において重要とされ、D. Q. Naiman と H. P. Wynn (1997) や S. Kuriki, T. Miwa, 及び A. J. Hayter (2012) が、その数値計算法について論じている。その際に基礎となるのが、多面体領域の指示関数について成り立つ inclusion-exclusion identity である。第五章では、多面体領域が一般の位置にあるとき、inclusion-exclusion identity は、多面体領域に摂動を加えても変わらないことを示す。この事実を基礎として、多変量正規分布の一般の位置にある polyhedron 内の確率は実解析関数と見なすことができ、それが満たす holonomic 系のランクは polyhedron の face の個数に等しいことを示す。さらに、この holonomic 系に付随する Pfaffian 系も明示的に書くことができ、これは Plackett (1954) の与えた公式の拡張になっている。また、これらの理論的結果は、多変量正規分布の polyhedron 内の確率をホロノミック勾配法で計算するための基礎を与えるものである。

氏名	小山民雄		
論文 題目	Holonomic Gradient Method for Multivariate Normal Probabilities for Polyhedral and Spherical Regions (多面体領域と球状領域の正規確率に対するホロノミック勾配法)		
審査委員	区 分	職 名	氏 名
	主 査	教授	高山信毅
	副 査	教授	野呂正行
	副 査	教授	吉岡康太
	副 査		
	副 査		
要 旨			
統計学の基本問題の一つに、 Θ をパラメータとする非正規化確率分布関数 $f(\theta, t)$ に対してその正規化定数			
$Z(\Theta) = \int_{\Omega} f(\theta, t) dt$			
と累積分布関数			
$\frac{1}{Z(\Theta)} \int_T f(\theta, t) dt$			
(但し、 $T \subset \Omega$)、及び、その微分を計算することが挙げられる。			
2011 年に Nakayama, Nishiyama, Noro, Ohara, Sei, Takayama, Takemura はこの問題に対して微分作用素環のグレブナー基底を用いた新しい汎用的手法、ホロノミック勾配法 (holonomic gradient method, HGM) を提案した。この方法は分布関数 $f(\theta, t)$ がホロノミック関数ならば常に適用可能である (Zeilberger, 1990 の結果を適用)。さらに $f(\theta, t)$ の満たすホロノミックイデアル I に対して I の積分イデアルをグレブナー基底などで計算することにより $Z(\Theta)$ の満たす微分方程式系が導出できる。積分、制限イデアルのグレブナー基底による計算アルゴリズムは Oaku が一般論としての完成形を与えている (1990 年代後半)。積分イデアルを一階連立系である Pfaffian 系にグレブナー基底で変換することにより、数値解析が容易に適用できる形になり、級数展開や数値積分などによる正規化定数とその微分の計算値を初期値とすることにより、正規化定数や累積分布関数が幅広いパラメータについて高精度に近似計算できる。これが HGM の概要である。			
さて一般論としては HGM は完結しているが、統計の実問題に適用しようとする、上記のアルゴリズムでは興味のあるサイズの問題が解けない。ボトルネックは各種グレブナー基底の計算の困難さにある。そこで理論的洞察を駆使して統計的に重要な分布に対して必要なグレブナー基底、またはそれに付随してきまる各種の重要な量や式であるホロノミックランクや Pfaffian 系を決定してしまおうというのが現在の一つの研究方向である。			
このような現状の中で、小山氏はホロノミック勾配法による Fisher-Bingham 積分、象限確率、多変量正規分布の多面体領域内の確率の数値計算の研究に関わってきた。			

氏名	小山民雄
第一章から第三章では、Fisher-Bingham 積分に関して論じている。方向統計学では、球面上に分布するデータを取り扱うが、その際に用いる統計モデルとして Fisher-Bingham 分布が基本的とされている。Fisher-Bingham 積分とは、Fisher-Bingham 分布の正規化定数のことで、多変量正規分布の密度関数を球面上の体積要素によって積分することで定義される。 第一章では、ホロノミック勾配法の適用に必要な理論的な結果について論じている。すなわち、Fisher-Bingham 積分が満たすホロノミック系を一つ明示的に与える。これは Nakayama たちが提出した予想を肯定的に解決するものであり、その証明は Fisher-Bingham 積分の被積分関数が満たすホロノミック系の積分加群を計算することで行われる。この積分加群を計算するテクニックは、第四章と第五章でも、必要なホロノミック系を構成する際に用いられる。 第二章では、第一章で与えたホロノミック系のホロノミックランクを決定している。この結果により、第三章で与える Pfaffian 系の行列のサイズが決定し、ホロノミック勾配法の計算量の評価が可能になる。 第三章では、第一章で与えたホロノミック系を Pfaffian 系に変換している。その Pfaffian 系を利用して、Fisher-Bingham 分布と HGM を用いた最尤推定を高次元の球面上で実際に遂行した。 第四章、第五章では、m 次元正規分布に対する累積分布関数相当のものを計算する古典的に有名な問題を HGM で考察している。 第四章では、象限確率の計算問題をランク 2^m の Pfaffian 系を構成することにより解いた。さらに平均ベクトルが 0 の時は従来の方法を大きく超えるサイズの問題を解けることを示した。なお HGM のような基本的手法はその萌芽が当然過去の研究にもあつて然るべきであるがこの仕事を通じて Schlaefli (1858)、Plackett (1954)、Gassmann (2003) により象限確率に対して HGM 相当の考察が部分的になされていることを発見した。無論、その汎用性、明快さ、アルゴリズム的完成度においてこれらの萌芽的研究とは HGM は一線を画している。 第五章では、多面体領域の正規確率について論じている。この確率は、象限確率と同様に統計の応用において重要とされ、D.Q.Naiman と H.P.Wynn (1997)や S.Kuriki, T.Miwa 及び A.J.Hayter (2012)が、その数値計算法について論じている。その際に基礎となるのが、多面体領域の指示関数について成り立つ inclusion-exclusion identity である。第五章では、多面体領域が一般の位置にあるとき、inclusion-exclusion identity は、多面体領域に摂動を加えても変わらないことを示す。この事実を基礎として、多変量正規分布の一般の位置にある多面体領域内の確率は実解析関数と見なすことができ、それが満たすホロノミック系のランクは多面体領域の face の個数に等しいことを示す。さらに、このホロノミック系に付随する Pfaffian 系も明示的に書くことができ、これは Plackett (1954) の与えた公式の拡張になっている。また、これらの理論的結果は、多変量正規分布の多面体領域内の確率をホロノミック勾配法で計算するための基礎を与えるものである。 本研究は統計学における新しい手法である HGM の基礎を研究したものであり、特に多面体領域の正規確率について重要な知見を得たものとして価値ある集積であると認める。よって、学位申請者の小山民雄は、博士（理学）の学位を得る資格があると認める。	