

- ① アルゴリズム. ...
- ② 実装: KnoppixMath 2010, Small VM 2010, Risa/Asir 2010 年版 (戦略 d, e の成果ソフトウェア公開). 例題集.
- ③ 応用: 下で述べるように統計への新展開 (戦略 d, e の基礎のもと可能に).
- ④ 研究コミュニティ支援: 3rd ICMS 2010, Kobe においてセッション Gröbner basis and its applications (大杉 $\sharp$, session cohair)

3 のグレブナ基底の新しい応用 (第 4 のブレークスルーを期待している) を紹介したい: **Holonomic Gradient Descent** and its Application to **Fisher-Bingham Integral**, Tomonari Sei, Nobuki Takayama*, Akimichi Takemura $\sharp$; Hiromasa Nakayama*, Kenta Nishiyama*, Masayuki Noro*, Katsuyoshi Ohara
<http://arxiv.org/abs/1005.5273>

関数 $f(x_1, \dots, x_d)$ がある多項式係数の常微分方程式系

$$\sum_{k=0}^{r_i} a_k^i(x_1, \dots, x_d) \partial_i^k \bullet f = 0, \quad a_k^i \in \mathbf{C}[x_1, \dots, x_d], \quad i = 1, \dots, d,$$

$\partial_i^k \bullet f = \frac{\partial^k f}{\partial x_i^k}$, を満すとき f を**ホロノミック関数**と呼ぶ.

$$R = \mathbf{C}(x_1, \dots, x_d) \langle \partial_1, \dots, \partial_d \rangle$$

とおく. ここで $K = \mathbf{C}(x_1, \dots, x_d)$ は有理式のなす体. R の掛け算の関係式は $\partial_i \partial_j = \partial_j \partial_i$, $\partial_i a(x) = a(x) \partial_i + \frac{\partial a}{\partial x_i}$.

ホロノミック関数 f のみたす常微分方程作用素を R の元と思いそれらの生成する R の左イデアル I を考える. R/I を K の上の線形空間とみなす. このとき

$$\dim_{\mathbf{C}(x_1, \dots, x_d)} R/I \leq \prod_{i=1}^d r_i$$

となり I は 0 次元イデアルである. I を**グレブナ基底**で解析.

$S = \{s_1, \dots, s_r\}$ を ∂ のモノミアルの集合で R/I の K ベクトル空間としての基底とする. この S を **標準モノミアル**の集合とよぶ.
 $s_1 = 1$ としてよい. I のグレブナ基底を利用することにより, ベクトル値関数 $G = (s_k \bullet f \mid s_k \in S)^T$ がみたす **Pfaffian 系**

$$\frac{\partial G}{\partial x_i} = P_i G, \quad i = 1, \dots, d.$$

が計算できる.

例. ($d = 1$).

I が $(\partial_1^2 - x_1)$ で生成されているとする. $\dim_{\mathbb{C}(x_1)} R/I = 2$,

$S = \{1, \partial_1\}$ である. このとき $P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ x_1 & 0 \end{pmatrix}$.

$$\begin{aligned} (\nabla f) &= ((P_1 G)_1, \dots, (P_d G)_1) \\ \text{Hessian} &= (((\partial_j \bullet P_i + P_i P_j) G)_1) \end{aligned}$$

例 ($d=1$).

$f(x) = \exp(-x + 1) \int_0^\infty \exp(xt - t^3) dt$. $f(x)$ は 3 階の同次線形微分方程式をみたしホロノミック関数である. Pfaffian のサイズを小さくするため次の非同次の微分方程式を考える. (非同次でも容易に拡張可能).
 $(3\partial_x^2 + 6\partial_x + (3 - x)) \bullet f = \exp(-x + 1)$. $S = \{1, \partial_x\}$.

$$\frac{dG}{dx} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ (-3+x)/3 & -2 \end{pmatrix} G + \begin{pmatrix} 0 \\ \exp(-x+1)/3 \end{pmatrix} = P(x)G + Q(x)$$

問題: $f(x)$ の局所最小値およびそれを与える x を近似計算せよ.

答: 1. Pfaffian 方程式の導出 (**グレブナ基底**, **積分からスタートして計算可能** (戦略 e)).

2. $G(0) = (g(0), g'(0))^T$ を数値積分の計算で評価すると

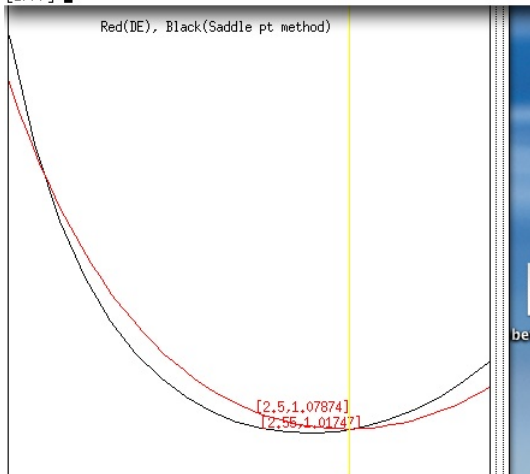
$\bar{G}(0) = (2.427, -1.20)^T$. (**数値積分**)

3. h を小さな数とし次の差分スキームで局所最小値を探索.

$$G_{k+1} = G_k \pm h(P(x_k)G_k + Q(x_k)), \quad x_{k+1} = x_k \pm h, \quad G_0 = G(0)$$

(**差分法**, **勾配法**)

```
[1776] step4();  
Plot_auto: screen size is [0.1,1.000133047358733003,4.755000000  
3381128043151]  
[[[3.4,1.016293170095401714,0.004203816813771975484],[3.3,1.016  
0.01156874961595263905]]]  
[1777] ■
```



x を $(n+1) \times (n+1)$ 対称行列, y を長さ $n+1$ のベクトル. (これらが決定すべきモデルのパラメータ.)

$$F(x, y) = \int_{S^n} \exp(t^T x t + y t) |dt| \quad (1)$$

$t = (t_1, \dots, t_{n+1})^T$, $|dt|$ は球面上の (Haar) 測度. $F(x, y)$ はホロノミック関数であることが証明できる.

方向統計学の最尤推定問題 (学習問題): 次の関数を最小化するようなパラメータ x, y を決定せよ.

$$F(x, y) \exp \left(- \sum_{1 \leq i \leq j \leq n} S_{ij} x_{ij} - \sum_i S_i y_i \right) \quad (2)$$

ここで $((S_{ij})_{i \leq j}, (S_i))$ はデータから決まる量.

例: 星のデータ

$n = 2$, Pfaffian の rank は 6.

$$F(x, y) \exp \left(- \sum_{1 \leq i \leq j \leq 3} S_{ij} x_{ij} - \sum_i S_i y_i \right)$$

パラメータの探索領域:

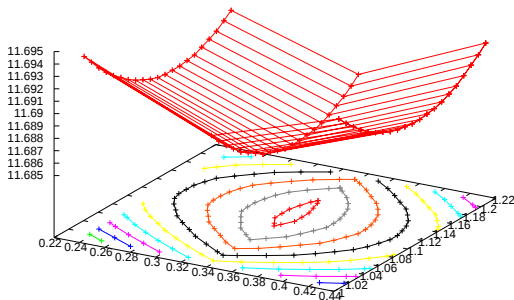
$$\begin{aligned} & (x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{22}, x_{23}, x_{33}, y_1, y_2, y_3) \\ \in & [-30, 10] \times [-30, 10] \times [-30, 10] \times [-30, 10] \times [-30, 20] \times [-30, -0.01] \\ & \times [-30, -0.01] \times [-30, -0.001] \times [-30, 10] \end{aligned}$$

データ (3 等星以上の方向): $(S_{11}, S_{12}, S_{13}, S_{22}, S_{23}, S_{33}, S_1, S_2, S_3) =$
 $(0.3119, 0.0292, 0.0707, 0.3605, 0.0462, 0.3276, -0.0063, -0.0054, -0.0762).$

$$x = \begin{pmatrix} -0.161 & 0.3377/2 & 1.1104/2 \\ 0.3377/2 & 0.2538 & 0.6424/2 \\ 1.1104/2 & 0.6424/2 & -0.0928 \end{pmatrix},$$

$y = (-0.019, -0.0162, -0.2286)$ において最小値
11.68573121328159669.

x_{12}, x_{13} についての目的関数のグラフ.



計算系の達成目標:

- ① ホロノミック勾配法の研究 (計画にはなかった新しい方向).
- ② グレブナ基底のための統合環境である Crest 版 KnoppixMath (これはオールインワンタイプ), および Small VM (これは小さな仮想マシンのネットワーク), および ビデオヘルプシステム を単行本 “グレブナ道場” の出版にあわせてリリースする (戦略 d, e).