拡張 Fisher-Bingham 分布に対する Pfaffian 方程式の代数的導出法

48196216　高橋 俊太
指導教員　駒木文保 教授

統計学上の問題の 1 つに，期待値や正規化定数，あるいは確率の計算を行う場合に出現する陽に書けないパラメータ付きの積分をどう求めるかという問題がある．これらの問題については，一般に数値積分や級数展開による近似式を用いて計算を行う場合が多い．具体的には，モンテカルロ法や鞍点法を用いるといったことが対処法として提案されている．しかし，例えば最尤法を勾配法を用いて数値的に解く際，その目的関数に陽に書けない積分が含まれている場合，最適化のステップ毎に積分の値を数値評価する必要が生じ，計算効率が悪くなってしまうことが問題視されてきた．

[8] によって提案されたホロノミック勾配法は，この問題に対処するために提案された．これは，計算対象の関数をそれが満たす微分方程式系に変換して数値計算を行うという手法である．上で述べた最適化問題を解く際も，積分計算を 1 回で済ませることができるという点が利点として挙げられ，近年様々な計算困難な積分の計算及び積分を含む問題に適用され 研究が進められてきた．具体的には積分の計算では行列変数をとる超幾何関数の 1 つである ${}_1F_1$ の計算 [2], Bingham 積分の計算 [10]，正規分布の象限確率 [5]，球体確率 [6], Fisher-Bingham 分布 [7][8]，多項式指数型分布の最尤推定等 [1] 等で研究成果が報告されている．

ホロノミック勾配法の設定を見る．$c(\theta)$ がホロノミック関数 であるとき, ある定数 p が存在し, $i = 1, \ldots, p$ について, $c(\theta)$ の高階導関数からなる有限次元ベクトル $\mathbf{s}(\theta)$ が存在し,

$$\frac{\partial}{\partial \theta_i}\mathbf{s}(\theta) = \mathbf{P}_i(\theta)\mathbf{s}(\theta), \quad i = 1, \ldots, p \tag{1}$$

が成立することが知られている.[3] この方程式を Pfaffian 方程式とよぶ.
ここに勾配降下法を適用して数値解析を行う手法が ホロノミック勾配法 である.

本研究では, 球面 $S^{d-1}(r) = \left\{x \in \mathbb{R}^d | x^{\mathrm{T}}x = r^2\right\}$, $d \geq 2$ 上の分布の一種であり, 以下のような確率密度関数を持つ Fisher-Bingham 分布

$$\exp\left(\sum_{j=1}^{d}\lambda_j t_j^2 + \sum_{j=1}^{d}\tau_j t_j\right)/f(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\tau}, r) \tag{2}$$

の exp の引数を一般次数に拡張した, 拡張 Fisher-Bingham 分布

$$\exp\left(\sum_{|\alpha|=1}^{n} p_\alpha t^\alpha\right)/f(\boldsymbol{p}, r) \quad (\exp \text{ 中の } \alpha \text{ は } d \text{ 次元多重指数}) \tag{3}$$

の正規化定数 f の推定に関してホロノミック勾配法を適用することを目指し, f に関する Pfaffian 方程式を導出する.

正規化定数 f に関する Pfaffian 方程式の導出には積分アルゴリズムが知られているが, 一般の次元で導出するにはヒューリスティックな手続きが必要であった. すなわち, f が満たす固有の微分方程式系を見出し, 微分方程式系を f を annihilate する微分作用素系 (f に作用させたものが 0 となる微分作用素系) に直し, それらがなすイデアルのホロノミック 性を判定することが必要であるが, 特にホロノミック性の確保を個々の関数に対して行うのは大変である.

[4] では, 分布を与えるデルタ関数を考え, それを annihilate する微分作用素系であってホロノミックイデアルをなすものを求めることから出発する手続きによって Fisher-Bingham 分布の正規化定数を annihilate するホロノミックイデアルの生成系を代数的に導出している. 本研究では, この手法を援用することで, 拡張 Fisher-Bingham 分布に

関しても Fisher-Bingham 分布の場合と同様に, 正規化定数を annihilate するホロノミックイデアルを任意の d, n の場合に関して代数的に導出した.

さらに本研究では, 先行研究のなく最も単純な場合であろう, 拡張 Fisher-Bingham 分布における球面の次元 d を 2, exp 中の多項式の次数 n を 3 に限定した場合について具体的に正規化定数に関する Pfaffian 方程式を導出した. 具体的には, 導出したホロノミックイデアルのホロノミックランクが 6 であること, すなわち 6 個の微分作用素の組を基底 $s(\theta)$ として選べば Pfaffian 方程式がその基底に関して一意に定まることを計算機上で確認したのち, その基底をうまく選び, その基底に関する Pfaffian 方程式を導出した. これは, 従来は手計算で関係式を得たのちその関係式がなすイデアルのホロノミック性を検証するという過程を経て導出されてきた Pfaffian 方程式を, 手続き的に導出することができるというデルタ関数によるアプローチの有効性を示すものであろう.

今後の課題としては, 今回得た Pfaffian 方程式を実際に最尤推定に応用することや, 導出したホロノミックイデアルのホロノミックランクを一般の d, n に関して保証することなどが考えられる. また, 拡張 Fisher-Bingham 分布に含まれないホロノミック関数, 例えばトーラス上の von-Mises 分布 [11], に関して超関数によるアプローチを適用することも考えられるであろう.

参考文献

[1] Hayakawa, J. and Takemura, A. (2016). Estimation of exponential-polynomial distribution by holonomic gradient descent, *Communications in Statistics - Theory and Methods*, Vol. 45, pp. 6860-6882.

[2] Hashiguchi, H., Numata, Y., Takayama, N., and Takemura, A. (2013). The holonomic gradient method for the distribution function of the largest root of a Wishart matrix, *Journal of Multivariate Analysis*, Vol. 117, pp. 296-312.

[3] JST CREST 日比チーム (編) (2011). グレブナー道場: 共立出版.

[4] Koyama, T. (2013). A holonomic ideal which annihilates the Fisher-Bingham integral, *Funkcialaj Ekvacioj*, Vol. 56, no. 1.

[5] Koyama, T. and Takemura, A. (2015). Calculation of orthant probabilities by the holonomic gradient method, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 32, pp. 187-204.

[6] Koyama, T. and Takemura, A. (2016). Holonomic gradient method for distribution function of a weighted sum of noncentral chi-square random variables, *Computational Statistics*, Vol. 31, pp. 1645-1659.

[7] Koyama, T., Nakayama, H., Nishiyama, K., and Takayama, N. (2014). Holonomic gradient descent for the Fisher-Bingham distribution on the d-dimensional sphere, *Computational Statistics*, Vol. 29, pp. 661-683.

[8] Nakayama, H., Nishiyama, K., Noro, M., Ohara, K., Sei, T., Takayama, N., and Takemura, A. (2011). Holonomic gradient descent and its application to the Fisher-Bingham integral, *Advances in Applied Mathematics*, Vol. 47, pp. 639-658.

[9] Oaku, T. (1994). Computation of the characteristic variety and the singular locus of a system of differential equations with polynomial coefficients, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, volume 11, Article number: 485.

[10] Sei, T. and Kume, A. (2015). Calculating the normalising constant of the Bingham distribution on the sphere using the holonomic gradient method, *Statistics and Computing*, Vol. 25, pp. 321-332.

[11] Suzuki, K. and Sei, T. (2021). Series expansion and Pfaffian systems of the von Mises distribution on the torus, submitted.