

Holonomic Gradient Method (HGM) とは

参考文献等 [hgm OpenXM search](#).

(ある点 $x = a$ の近傍でなめらかな) 多変数関数
 $f(x) = f(x_1, \dots, x_n)$. 全方向で多項式係数の常微分方程式

$$\sum_{k=0}^{r_i} a_{ik}(x) \partial_i^k \bullet f = 0, \quad (i = 1, \dots, n) \quad (1)$$

を満す. $a_{ik} : x = (x_1, \dots, x_n)$ の多項式. $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$, $\partial_i^k \bullet f = \frac{\partial^k f}{\partial x_i^k}$.
このような性質を満す多変数関数 (の解析接続) を, **holonomic 解析関数** と呼ぶ.

例: $f = \exp(-x_2 x_1^2)$ は 2 変数の holonomic 解析関数. 実際,
 $\partial_1 \bullet f = -2x_1 x_2 f$, $\partial_2 \bullet f = -x_1^2 f$.

(超関数を含む一般の) Holonomic 関数 f は, 全方向で常微分方程式 (1) をみたしさらにもう少し沢山の多項式係数偏微分方程式系 (holonomic left ideal (system)) を満たす関数.

例: $Y(x) = 1 (x \geq 0), Y(x) = 0 (x < 0)$ を Heaviside 関数とする.
 $x\partial_x \bullet Y = 0$.

$(x\partial_x - 1) \bullet xY(x) = 0$. 注. x はさらに $\partial_x^2 \bullet x = 0$ も満たす.

holonomic 系を特殊関数の代わりにしよう (佐藤幹夫の哲学, 1970 年代). 精密に定義するには, イデアル, Hilbert 関数, 等の概念.



微分作用素環

$$D_n = \mathbb{C}\langle x_1, \dots, x_n, \partial_1, \dots, \partial_n \rangle$$

Weyl 代数, 多項式係数微分作用素環.

$i \neq j$ なら ∂_i と x_j は可環. ∂_i 同士や x_i 同士も可環. 唯一の非可換性は

$$\partial_i x_i = x_i \partial_i + 1. \quad \text{次数の低い項を無視すると可環}$$

結合法則, 分配法則 OK. \Rightarrow Buchberger algorithm OK.

線形偏微分方程式系を D_n の左イデアル I とみなす. f : 関数.

$$l \in D_n, \quad l \bullet f = 0 \Rightarrow \forall c \in D_n, (cl) \bullet f = 0.$$

注意: 左イデアルと右イデアルの区別あり.

$$(I + \partial_n D_n) \cap D_{n-1} \quad \text{積分イデアル.}$$

$I \bullet f = 0$ なら $\int_{\mathbb{C}} f(x) dx_n$ は積分イデアルの解 (大体).

$$(I + x_n D_n) \cap D_{n-1} \quad \text{制限イデアル.}$$

$I \bullet f = 0$ なら $f(x_1, \dots, x_{n-1}, 0)$ は制限イデアルの解.

Rational Weyl algebra(有理式係数微分作用素環) $R_n = \mathbb{C}(x)\langle \partial_1, \dots, \partial_n \rangle$

$$\partial_i a(x) = a(x)\partial_i + \frac{\partial a}{\partial x_i}.$$

定理: I が holonomic ideal なら $R_n I$ は R_n の 0 次元 ideal.

$R_n/(R_n I)$ の $\mathbb{C}(x) := \mathbb{C}(x_1, \dots, x_n)$ ベクトル空間としての次元 r を I の **holonomic rank** という. グレブナー基底で reduce できない (∂_i の) monomial を **standard monomial**.

Holonomic 関数の性質

1. f, g が holonomic 関数なら, $f \pm g, fg$ (定義できれば) も holonomic 関数.
2. $f(\theta, t)$ を $n + m$ 個の変数 $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_n), t = (t_1, \dots, t_m)$ についての holonomic 関数. パラメータ付き積分 (例: f が (非正規化) 分布密度関数なら Z は正規化定数)

$$Z(\theta) = \int_{\mathbb{R}^m} f(\theta, t) dt_1 \cdots dt_m$$

は (積分についてのある technical な条件のもと) n 変数の holonomic 関数.

証明は D -加群の理論 (I.N.Bernstein 1973, ...). 微分方程式系を導出するアルゴリズムもあり (Zeilberger 1990, 大阿久 1997, ...).

例: $Z(\theta) = \int_{\mathbb{R}} \exp(-\theta t^2) Y(t) dt$ は holonomic 関数.

$$Y'(t) = \delta(t), t\delta(t) = 0.$$

```
import("nk_restriction.rr"); II=[dth+t^2,t*dt+2*t^2*th];;  
nk_restriction.integration_ideal(II,[t,th],[dt,dth],[1,0]);
```

答. $(2\theta\partial_\theta + 1) \bullet Z = 0.$

練習 以下の中で holonomic 関数はどれ?

1. $\exp(f(x))$ where f is a rational function,
2. $\frac{1}{\sin x}$ [Hint] Use Th: Any solution of the ordinary differential equation $(a_m(x)\partial^m + \cdots + a_0(x)) \bullet f = 0$, $a_i \in \mathbb{C}[x]$, is holomorphic out of the singular locus $\{x \mid a_m(x) = 0\}$.
3. $\Gamma(x)$, [Hint] $\Gamma(x)$ has poles at $x = -n$, $n \in \mathbb{N}_0$.
4. 2^x ,
5. $Y(x)$ (Heaviside function),
6. x^a where a is a constant,
7. $|x|$,
8. $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-xt^6 - t) dt$, $x > 0$.

Holonomic 分布: ホロノミック関数で (非正規化) 分布密度関数を書ける分布. $f(\theta, t)/Z(\theta)$ が t 空間での分布密度関数.

Pfaffian 方程式とは?

$$\left[a_2(x) \frac{d^2}{dx^2} + a_1(x) \frac{d}{dx} + a_0(x) \right] \bullet f = 0$$

$F = \left(\begin{array}{c} f \\ \frac{df}{dx} \end{array} \right)$ とおくと, $\frac{d}{dx} \bullet F = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -a_0/a_2 & -a_1/a_2 \end{pmatrix} F$ を満たす. これの多変数化.

$\alpha^1 = 0 \in \mathbf{N}_0^n$, $\alpha^i \in \mathbf{N}_0^n$, $i = 2, \dots, r$ (r は holonomic rank) をうまく与えると, 解基底ベクトル (standard monomials に対応)

$$F = \begin{pmatrix} \partial^{\alpha^1} \bullet Z \\ \partial^{\alpha^2} \bullet Z \\ \vdots \\ \partial^{\alpha^r} \bullet Z \end{pmatrix}$$

に対して,

$$\partial_i \bullet F = P_i F, \quad i = 1, \dots, n \quad \text{Pfaffian 系}$$

となる $r \times r$ 行列 $P_i(x)$ が存在. この方程式を **Pfaffian (方程式) 系** とよぶ. 行列 P_i を **Pfaffian 行列** とよぶ.

注: holonomic ideal から Pfaffian 系への変換はグレブナー基底で原理的には可能. yang.rr など.

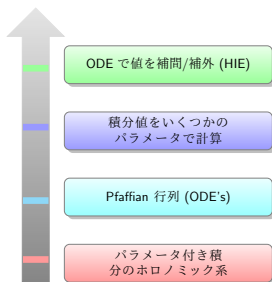


Figure: HGM

- 1. HGM の Neural tangent kernel 計算への応用
- 2. Macaulay 行列の方法
- 3. HGM と数値解析 (問題と文献のみ)

1. HGM の Neural tangent kernel 計算への応用

2024-11-14-hgm-ntk.pdf 参照.

アルゴリズムでなく理論的にできる部分をなるべく増やす ⇒ 実用的

2. Macaulay 型行列の方法

動機: Pfaffian 方程式への変換を効率化できないか?

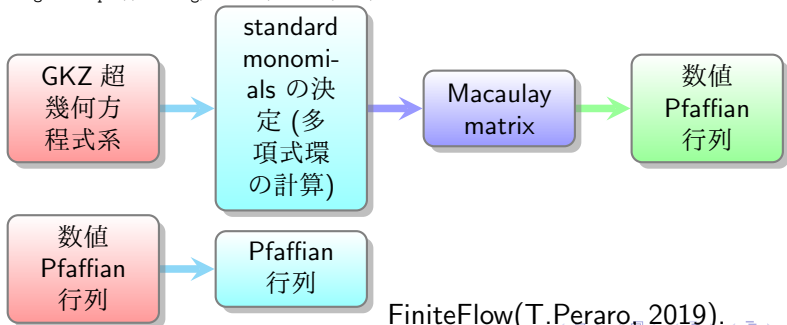
R_n/I の standard monomials がわかれば出来る

• V.Chestnov, F.Gasparotto, M.K.Mandal, P.Mastrolia, S.J.Matsubara-Heo, H.J.Munch, N.Takayama, Macaulay Matrix for Feynman Integrals: Linear Relations and Intersection Numbers

[https://doi.org/10.1007/JHEP09\(2022\)187](https://doi.org/10.1007/JHEP09(2022)187)

• V.Chestnov, S.J.Matsubara-Heo, H.J.Munch, N.Takayama, Restrictions of Pfaffian Systems for Feynman

Integrals [https://doi.org/10.1007/JHEP11\(2023\)202](https://doi.org/10.1007/JHEP11(2023)202)

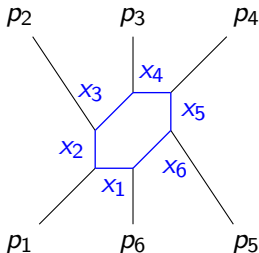


FiniteFlow(T.Peraro, 2019).

Example 1

massless hexagon model:

master integrals (std mon's) の個数が 33 個. 数値 Pfaffian 行列
の導出が $15.549s + 0.66s$.



GKZ 系 (Gel'fand-Kapranov-Zelevinsky, 1989)

$A = (a_{ij})$: $d \times n$ 行列. \mathbb{Z} 成分. rank d . β_i : パラメータ.

$$a_{i1}z_1\partial_1 + \cdots + a_{in}z_n\partial_n - \beta_i, \quad (i = 1, \dots, d) \quad (2)$$

$$\partial^u - \partial^v, \quad Au = Av, u, v \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^n \quad (3)$$

$\partial^u = \prod_{j=1}^n \partial_j^{u_j}$. (3) の生成するイデアル I_A : Affine toric ideal for A .

A の第 1 行の要素がすべて 1 なら積分

$$\int_C f(z, t)^{\beta_1} t^{-\beta'-1} dt, \quad f(z, t) = z_1 t^{a'_1} + \cdots + z_n t^{a'_n}$$

は GKZ 系の解. ここで $\beta' = (\beta_2, \dots, \beta_d)$, $a'_j = (a_{2j}, a_{3j}, \dots, a_{dj})^T$.

Standard monomials の決定

$\partial_i = \frac{\partial}{\partial z_i}$. $\text{in}_{\prec}(I_A)$ の生成元は $\prod_{i=1}^N \partial_i^{k_i}$ と書ける. これの *distraction* を

$$\prod_{i=1}^N \partial_i(\partial_i - 1) \cdots (\partial_i - k_i + 1). \quad (4)$$

と定義. $\mathbb{C}[\partial_1, \dots, \partial_N]$ で計算.

Theorem 2

[Hibi-Nishiyama-T (2017)¹] 多項式環 $\mathbb{C}[\partial_1, \dots, \partial_N]$ において上記 *distraction* と (2) できまる一次式達 $E_i|_{z=(1, \dots, 1)}$ のグレブナー基底の *standard monomials* 達が D_n の *GKZ ideal* の *std mon's* を与える.

より一般の積分: S.J.Matsubara-Heo, S.Telen (2023)².

¹<https://arxiv.org/abs/1212.6103>

²<https://arxiv.org/abs/2301.13579>

Ohara-T (2015)³, Macaulay matrix. 2022, 2023, Small Macaulay matrix を導入して効率化.

Macaulay matrix とは?

Example 3

$A = (1, 2)$.

$$z_1 \partial_1 + 2z_2 \partial_2 - \beta_1 =: E \quad (5)$$

$$\underline{\partial_1^2} - \partial_2 \quad (6)$$

∂_1	∂_2^2	$\partial_1 \partial_2$	∂_2	1	
z_1	0	0	$-2z_1$	β_1	E
0	$2z_2$	z_1	$\beta_1 - 2$	0	$\partial_2 E$
$1 - \beta_1$	0	$2z_2$	$-z_1$	0	$\partial_1 E$
M_{Ext}			M_{std}		

$$\partial_2 E = z_1 \partial_1 \partial_2 + 2z_2 \partial_2^2 + 2\partial_2 - \beta_1 \partial_2$$

³<https://arxiv.org/abs/1505.02947>

$$\text{Std} = (\partial_2, 1)^T. \quad \text{Ext} = (\partial_1, \partial_2^2, \partial_1 \partial_2)^T.$$

$$M_{\text{std}} \text{Std} + M_{\text{ext}} \text{Ext} \equiv 0.$$

- 左から任意の $m \times 3$ 行列 C を掛けても $\equiv 0$.
- M_{ext} の逆行列を求めれば $\partial_1 \text{Std} \equiv P_1 \text{Std}$, $\partial_2 \text{Std} \equiv P_2 \text{Std}$ となる行列 (Pfaffian 行列) P_i が求まる. 逆行列がなくても (7) が解ければよい.

$$\begin{aligned} \partial_1 \text{Std} &= 0 \cdot \text{Std} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{Ext} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} &= C M_{\text{Ext}} \end{aligned} \quad (7)$$

となる行列 C は $\begin{pmatrix} z_1^{-1} & 0 & 0 \\ (\beta_1 - 1)/(2z_1 z_2) & 0 & 1/(2z_2) \end{pmatrix}$.

$P_1 = C \cdot 0 - C M_{\text{std}}$ となる.

- 実装: `mt_mm.rr`⁴

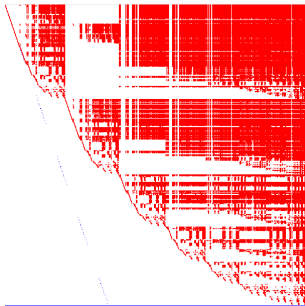
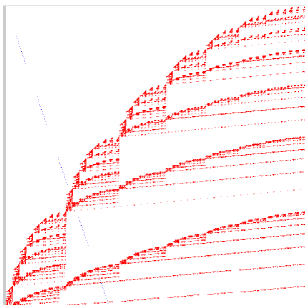
⁴http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Current/doc/asir-contrib/en/mt_mm-html/mt_mm-en.html

Example 4

One loop box model: 3 non-zero masses. 481×1395 matrix.

The rank is 481. The holonomic rank = (number of the master integrals) is 14.

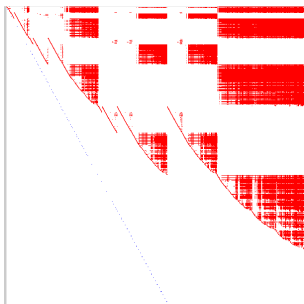
Left: input sparse linear equations. Right: row reduced echelon form (RREF).



Example 5

4 cycle model (factorizable でない graphical model) の exact sampler⁵:

degree 4 Macaulay matrix (MM) の転置は 10886×20020 行列.
Holonomic rank = 64. rank of MM = 8869.



MM' の RREF. MM の構成に約 6h. MM' の RREF (有限体で), Pfaffian を決めるのに十分かの確認に約 1d8h.

⁵S.Mano-T, <https://arxiv.org/abs/2110.14992>

3. HGM と数値解析

問題 1: 積分解が微分方程式系の増大度の大きい解で見えなくなってしまう場合あり.

例. 微分方程式 $y'' - y = 0$ を解いて, $y = \exp(-t)$ を捕まえたいが, $y = \exp(t)$ が邪魔.

問題 2: 数式処理の出力する微分方程式系は巨大. このような微分方程式系の数値解析は未開拓では?

- Nobuki Takayama, Takaharu Yaguchi, Yi Zhang, Comparison of Numerical Solvers for Differential Equations for Holonomic Gradient Method in Statistics, 2023, <https://arxiv.org/abs/2111.10947>
- 庵, 最適制御によるホロノミック勾配法の積分経路設計 2022, https://www.jstage.jst.go.jp/article/jacc/65/0/65_445/_article/-char/ja/