計算代数とモデリング

目次

1. 計算代数の基礎とモデリング, シミュレーション, 高山信毅
2. システムの代数的解析, 小松瑞果
3. 代数的統計モデルと超幾何系, 松原宰栄

1 章 “計算代数の基礎とモデリング, シミュレーション” (2,3 章へのイントロ) の内容紹介.

消去法

グレブナー基底をもちいた変数の消去.

Theorem 1

([CLO] など) イデアル $I = \langle f_1, \ldots, f_m \rangle$ の元で x_1 を含まないもの全体, つまり

$$I_1 = I \cap \mathbb{Q}[x_2, \ldots, x_n] \tag{1}$$

を考える. この時 I_1 は I の *lexicographic order* でのグレブナー基底 G の中で x_1 をふくまないもの, つまり

$$G \cap \mathbb{Q}[x_2, \ldots, x_n] \tag{2}$$

で生成される.

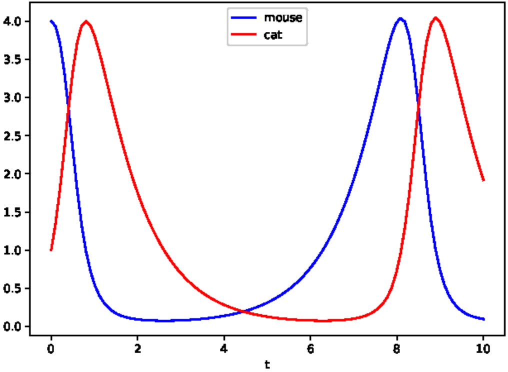
1. Lotka-Volterra system のパラメータ推定

a, b, c, d をパタメータとする ODE (ordinary differential equation):

$$x' = ax - bxy \tag{3}$$

$$y' = -cy + dxy \tag{4}$$

このモデルはたとえば x はネズミの数, y は猫の数, を表す



問題: 猫の数の変化を観測して a, b, c, d を推定せよ

- y のみ (猫情報のみ) の ODE を求めよ.

$$-x_1 + ax - bxy, \quad -y_1 - cy + dxy,$$
$$-x_2 + ax_1 - bx_1 y - bxy_1, \quad -y_2 - cy_1 + dx_1 y + dxy_1$$

この多項式達の 3 番目の元は 1 番目の元の微分, 4 番目の元は 2 番目の元の微分である. $x_1 = x', x_2 = x'', x$ を消去したい. 辞書式順序

$$x_1 > x_2 > x > y > y_1 > y_2 > a > b > c > d$$

でこの集合のグレブナー基底を求めると,

$$\begin{aligned} & I^{(2)} \cap \mathbb{Q}[a, b, c, d, y, y_1, y_2] \\ = \ & \langle yy_2 - y_1^2 + by^2 y_1 - ayy_1 + cby^3 - cay^2 \rangle \end{aligned} \tag{5}$$

最小２乗法で a, b, c を $y, y_1 = y', y_2 = y''$ の数値データから決めると

$$a = b = c = 1$$

d は決まらない.

$\{(a, b, c, d) \mid a = b = c = 1\}$ をパラメータ多様体という.

1.2 グレブナー基底による変数消去と微分方程式への応用

2 章 システムの代数的解析, 小松 に続く.

2. Bayes 統計と超幾何積分の計算代数

$p(x|w)$ をパラメータ w をもつモデル分布とする.

- 例 [1]. $p(x|w) = \exp(-(x-w)^2)/\sqrt{\pi}$.

Fisher の最尤推定法では, データを X_i, $i = 1, \ldots, N$ とするとき,
尤度 (likelihood)

$$\prod_{i=1}^{N} p(X_i|w) \tag{6}$$

を最大化する w をデータに適合する w とみなす.

Bayes 推定ではデータからパラメータ w の分布を推定.

パラメータ w の確率分布は

$$\frac{(\text{データとモデルによる})\ \text{尤度} \times \text{事前分布}\ (\text{主観})}{\text{正規化定数}} \tag{7}$$

[1] $\exp(-(x-w)^2)$ の正規化定数はこれを $(-\infty, \infty)$ で積分した値で $\sqrt{\pi}$. $\int_{-\infty}^{\infty} p(x|w)dx = 1$ となるので, $x \in (-\infty, \infty)$ 上のパラメータ w をもつ確率分布である.

コインなげ (Fisher の最尤推定)

$p(表\,|w) = w$, $p(裏\,|w) = 1 - w$. $0 \le w \le 1$.
表が出た回数を n_0, 裏がでた回数を n_1 としよう．まず Fisher の最尤推定をおこなってみよう．式 (6) によれば尤度 $w^{n_0}(1-w)^{n_1}$ を最大化する w を求めればよい．尤度の log をとって w で微分すると $\frac{n_0}{w} - \frac{n_1}{1-w}$ を得る．これが 0 となる条件は $w = \frac{n_0}{n_0+n_1}$ であり [2], 増減表を書いてみればこの値で尤度が最大となることがわかる．

[2] この値は直感的な w の推定値と一致している．

コイン投げ (Bayes 推定)

事前分布 (prior distribution)　$p_2(w) = w^{\alpha}(1-w)^{\beta}/B(\alpha,\beta)$ を考える．ここで

$$B(\alpha,\beta) = \int_0^1 z^{\alpha}(1-z)^{\beta}dz \tag{8}$$

(ベータ関数の $\alpha+1, \beta+1$ での値)[3]．表が出た回数を n_0，裏がでた回数を n_1 とすれば，事後ギブス分布 (事後分布) は (7) 式によれば

$$\frac{\text{尤度} \times \text{事前分布}}{\text{正規化定数}} = \frac{w^{n_0}(1-w)^{n_1} \times w^{\alpha}(1-w)^{\beta}/B(\alpha,\beta)}{\text{正規化定数}} \tag{9}$$

であるので，

$$\rho(w|n_0,n_1) = w^{\alpha+n_0}(1-w)^{\beta+n_1}/B(\alpha+n_0,\beta+n_1) \tag{10}$$

1.5 正確ベイズ解析

[3] これは $w \in [0,1]$ 上の非正規化確率分布 $w^{\alpha}(1-w)^{\beta}$ の正規化定数である．

n_i についての差分方程式 (漸化式) は計算代数で導出できる

$$\rho(w|n_0+1,n_1) = \frac{\alpha+n_0+1+\beta+n_1+1}{\alpha+n_0+1} w\cdot\rho(w|n_0,n_1)$$
$$\rho(w|n_0,n_1+1) = \frac{\alpha+n_0+1+\beta+n_1+1}{\beta+n_1+1}(1-w)\cdot\rho(w|n_0,n_1)$$

手法: D-加群の積分アルゴリズム, creative telescoping, twisted cohomology, 尤度方程式と Macaulay 行列法

3 章 代数的統計モデルと超幾何系, 松原 に続く.

応用: n_i を大きくしたときの漸近行動の解析 (Bayes 推定法の解析)

$$\rho(w|n_0+1, n_1+1) = P(n_0, n_1)\rho(w|n_0, n_1),$$

$$P(n_0, n_1) = w(1-w)\frac{(\alpha+\beta+n_0+n_1+2)(\alpha+\beta+n_0+n_1+3)}{(\alpha+n_0+1)(\beta+n_1+1)}$$

たとえば $n = n_0 = n_1$ と仮定. $n \to \infty$ で

$$P(n,n) = \frac{\left(\frac{\alpha+\beta+2}{n}+2\right)\left(\frac{\alpha+\beta+3}{n}+2\right)}{\left(\frac{\alpha+1}{n}+1\right)\left(\frac{\beta+1}{n}+1\right)} w(1-w) \to 4w(1-w)$$

n 十分大で $\rho(w|n,n) \sim 4^n(w(1-w))^n$. $w(1-w)$ は $w = 1/2$ で最大値　$1/4$. したがって $w \neq 1/2$ なら $\rho(w|n,n)$ は $O(r^n)$, $r = 4w(1-w) < 1$ と指数関数的に減少.