

分散不均一なガウス確率場に対するチューブ法

栗木 哲 数理・推論研究系 教授

本発表は、竹村彰通 (客員教授, 滋賀大教授), Jonathan E. Taylor (Professor of Stanford Univ.) 両氏との共同研究 [1] に基づきます。

1 半径が不均一なチューブ

M を \mathbb{R}^n の単位球面 S^{n-1} の d 次元 C^2 閉部分多様体とし, $\xi \sim \mathcal{N}_n(0, I_n)$ をもちいて M を添字集合とする2つの確率場を定義する。

$$X(u) = \sigma(u)\langle u, \xi \rangle, \quad Y(u) = \sigma(u)\langle u, \xi/\|\xi\| \rangle, \quad u \in M.$$

$X(\cdot)$ は平均0, 分散 $\text{Var}(X(u)) = \sigma(u)^2$, 相関構造 $\text{Corr}(X(u), X(v)) = \langle u, v \rangle$ のガウス確率場である。目的は確率場 $X(\cdot)$ の最大値分布

$$\mathbb{P}\left(\max_{u \in M} X(u) > c\right) \quad (c \text{ が大きいとき})$$

の近似を与えることである。

まず ξ と $\xi/\|\xi\|$ が独立に分布することから

$$\mathbb{P}\left(\max_{u \in M} X(u) > c\right) = \mathbb{E}\left[\mathbb{P}\left(\max_{u \in M} Y(u) > \frac{c}{\|\xi\|} \mid \|\xi\|\right)\right].$$

さらに $\xi/\|\xi\| \sim \text{Unif}(S^{n-1})$ であるから

$$\mathbb{P}\left(\max_{u \in M} Y(u) > b\right) = \mathbb{P}\left(\exists u \in M, \langle u, w \rangle > b\right) = \frac{1}{\Omega_n} \text{Vol}_n((M)_b/\sigma),$$

ここで $\Omega_n = \text{Vol}_{n-1}(S^{n-1}) = 2\pi^{n/2}/\Gamma(n/2)$, また

$$(M)_f = \{w \in M \mid \exists u \in M, \langle u, w \rangle > f(u)\}$$

は M のまわりのチューブ状領域。 $\max_{u \in M} X(u)$ の分布はこのチューブの体積を通して導出することができる (チューブ法)。

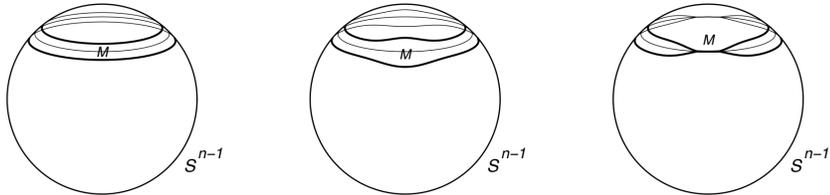


図1. チューブ $(M)_b/\sigma$ (左: 均一分散, 中央, 右: 不均一分散)

2 チューブの体積公式と最大値の分布

M を \mathbb{R}^n から誘導される計量 g_{ij} を持ったリーマン多様体と考える。共変微分を ∇ で表す。 $\ell(u) = \log \sigma(u)$, $c_{ij} = -\nabla_i \nabla_j \ell + \nabla_i \ell \nabla_j \ell$, $G = (g_{ij})$, $C = (c_{ij})$, $\tilde{G} = (\tilde{g}_{ij}) = G + C$, $G^{-1} = (g^{ij})$, $\tilde{G}^{-1} = (\tilde{g}^{ij})$ などとおく。曲率テンソルを $R_{ij,kl}$ とする。有限集合 I ($n = |I|$ は偶数) に対して $\Pi(I) = \{(\pi_1, \dots, \pi_n) \mid \{\pi_1, \dots, \pi_n\} = I, \pi_1 < \pi_2, \dots, \pi_{n-1} < \pi_n\}$, $\Pi_n = \Pi(\{1, \dots, n\})$ とおく。

定理 2.1 (チューブの体積). du を M の $u \in M$ における体積要素とする。定数 $b_c < \max_{u \in M} \sigma(u)$ が存在し, $b \geq b_c$ について

$$\mathbb{P}\left(\max_{u \in M} Y(u) > b\right) = \sum_{e=0}^d \frac{1}{(2\pi)^{e/2} \Omega_{d-e+1}} \int_M \frac{\det(I + CG^{-1})}{(1 + \|\nabla \ell\|^2)^{\frac{1}{2}(d-e+1)}} \times \bar{B}_{\frac{1}{2}(d-e+1), \frac{1}{2}(n-d+e-1)}\left(\frac{1 + \|\nabla \ell\|^2}{\sigma^2} b^2\right) \zeta_e(u) du.$$

$\bar{B}_{a,b}(\cdot)$ はベータ分布の上側確率, e が奇数のとき $\zeta_e(u) = 0$, 偶数のときは

$$\zeta_e(u) = \sum_{I \subset \{1, \dots, d\}, |I|=e} \frac{1}{(e/2)!} \sum_{\pi, \tau \in \Pi(I)} \text{sgn}\left(\frac{\pi}{\tau}\right) \tilde{R}_{\pi_1 \pi_2}^{\tau_1 \tau_2} \cdots \tilde{R}_{\pi_{e-1} \pi_e}^{\tau_{e-1} \tau_e},$$

$$\tilde{R}_{ij}^{kl} = \sum_{m,n=1}^d \left(R_{ij,mn} - (g_{im}g_{jn} - g_{in}g_{jm})\right) \tilde{g}^{mk} \tilde{g}^{nl}.$$

定理 2.2 (チューブ法). $c \rightarrow \infty$ のとき,

$$\mathbb{P}\left(\max_{u \in M} X(u) > c\right) = \sum_{e=0}^d \frac{1}{(2\pi)^{e/2} \Omega_{d-e+1}} \int_M \frac{\det(I + CG^{-1})}{(1 + \|\nabla \ell\|^2)^{\frac{1}{2}(d-e+1)}} \times \bar{G}_{d-e+1}\left(\frac{1 + \|\nabla \ell\|^2}{\sigma^2} c^2\right) \zeta_e(u) du + O(\bar{G}_n(c^2/b_c^2)).$$

ただし $\bar{G}_\nu(\cdot)$ は自由度 ν のカイ2乗分布の上側確率。

$\sigma(u)$ がその最大値 $\sigma_0 = \max_{u \in M} \sigma(u)$ を達成する点 u の集合 M_0 が d_0 次元の C^2 多様体をなすとする。チューブ法公式の主要項 ($e=0$ の項) をラプラス近似して以下を得る。

定理 2.3 (ラプラス近似). du_0 を M_0 の体積要素とする。 $c \rightarrow \infty$ のとき,

$$\mathbb{P}\left(\max_{u \in M} X(u) > c\right) \sim \frac{1}{\Omega_{d_0+1}} \int_{M_0} \frac{\det(I + CG^{-1})^{\frac{1}{2}}}{\text{tr}_{d-d_0}(CG^{-1})^{\frac{1}{2}}} du_0 \bar{G}_{d_0+1}(c^2/\sigma_0^2).$$

ただし $\text{tr}_{d_0}(\cdot)$ は固有値の d_0 次基本対称式。

3 例題: ウィンシャート行列の最大固有値

ウィンシャート行列 $\mathcal{W}_p(\nu, \Lambda)$ の最大固有値は, ガウス行列の最大特異値

$$s_1 = \max_{\|v\|=\|w\|=1} v^\top \Lambda^{\frac{1}{2}} \Xi w, \quad \Xi = (\xi_{ij})_{p \times \nu}, \quad \xi_{ij} \sim \mathcal{N}(0, 1) \text{ i.i.d.}$$

の2乗である。 s_1 はガウス確率場の最大値であるのでチューブ法が適用できる。

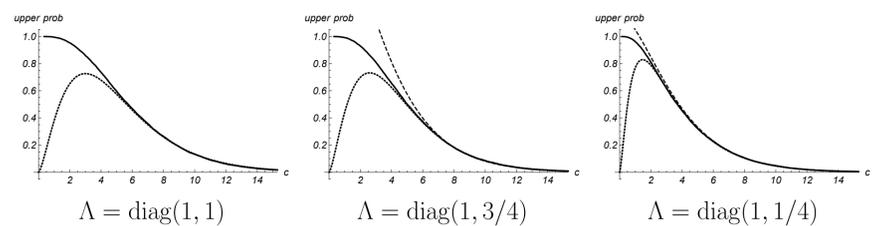


図2. ウィンシャート行列 $\mathcal{W}_2(4, \Lambda)$ の最大固有値の上側確率 (—: シミュレーション (10000 回), \cdots : チューブ法, ---: ラプラス法)

A 行列式に対する Wick 公式

以下の補題は第2基本形式と曲率テンソルの関係 (ガウス方程式) の一般形であり, 定理2.1の証明に用いられる。

補題 A.1. $H = (h_{ij})$ を $d \times d$ の平均0の正方ガウス行列とする。 $s_{ij;kl} = \mathbb{E}[h_{ik}h_{jl} - h_{il}h_{jk}]$ とおく。 d が偶数のとき,

$$\mathbb{E}[\det(H)] = \frac{1}{(d/2)!} \sum_{\pi, \tau \in \Pi_d} \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(\tau) s_{\pi_1 \pi_2; \tau_1 \tau_2} s_{\pi_3 \pi_4; \tau_3 \tau_4} \cdots s_{\pi_{d-1} \pi_d; \tau_{d-1} \tau_d}.$$

参考文献

[1] Satoshi Kuriki, Akimichi Takemura, and Jonathan E. Taylor, The volume-of-tube method for Gaussian random fields with inhomogeneous variance, in preparation.