多面体領域の正規確率の満たすホロノミック系

小山 民雄 (神戸大学)

ホロノミック勾配法は [3] において提案された, 数式処理を利用した数値計算の手法である．この手法では, 評価したい関数の満たす微分方程式を利用して数値計算を行う．統計学に現れる様々な正規化定数や領域確率はパラメータの関数と見なすことができるので, その数値計算へのホロノミック勾配法の応用が期待される．

d 次元ユークリッド空間の有限個の半空間の共通部分として表される領域を多面体領域と呼ぶ. すなわち, 集合 $P \subset \mathbf{R}^d$ が多面体領域であるとは, 適当な実数 a_{ij}, b_j により $P := \{x \in \mathbf{R}^d : \sum_{i=1}^d a_{ij}x_i + b_j \geq 0\,(1 \leq j \leq n)\}$ と書けることことを言う．多変量正規分布に従う確率ベクトル X が領域 P に値をとる確率を多面体領域の正規確率と呼ぶ. この確率を数値的に評価することは, 統計学の応用において重要とされている [2].

多面体領域 P の facet を $F_1, \ldots, F_n$ で表すことにし, $\mathcal{F} := \left\{ J \subset [n] : \bigcap_{j\in J} F_j \neq \emptyset \right\}$ を P に付随する abstract simplicial complex と呼ぶことにする．多面体領域 P が一般の位置にあるという仮定の下で, 多面体領域の正規確率は、

$$\int_{\mathbf{R}^d} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2\right) \sum_{J\in\mathcal{F}} \prod_{J\in F} \left(H\left(\sum_{i=1}^d a_{ij}x_i + b_j\right) - 1\right) dx \tag{1}$$

と書き表すことが出来る．ここで,$H(x)$ は Heaviside 関数である。この積分は変数 a_{ij}, b_j について実解析関数を定めることが証明できる。

さらに、式 (1) の被積分関数の満たす holonomic module の積分加群を計算することにより, 次の定理を得る.

Theorem 1. 式 (1) で定義される関数を $g(a, b)$ とおく．集合 $J \subset [n]$ に対し,$g^J := \left(\prod_{j\in J} \partial_{b_j}\right) g$ とおくと,$(g^J)_{J\in\mathcal{F}}$ は次の微分方程式を満たす.

$$\left(\partial_{a_{ij}} - \sum_{k=1}^n a_{ik}\partial_{b_k}\partial_{b_j}\right) g^J = 0 \quad (1 \leq i \leq d,\, 1 \leq j \leq n,\, J \in \mathcal{F}), \tag{2}$$

$$\partial_{b_j} g^J - g^{J\cup\{j\}} = 0 \quad (j \in J^c,\, J \in \mathcal{F}), \tag{3}$$

$$(b_j + \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^d a_{ij}a_{ik}\partial_{b_k}) g^J = 0 \quad (j \in J,\, J \in \mathcal{F}), \tag{4}$$

$$g^J = 0 \quad (J \notin \mathcal{F}). \tag{5}$$

さらに, この微分方程式系が定める左 D 加群 M は *holonomic module* で、その *holonomic rank* は P の空でない面の個数に等しい。

References

[1] T. Koyama, Holonomic modules associated with multivariate normal probabilities of polyhedra `http://arxiv.org/abs/1311.6905`, 2013.

[2] D. Q. Naiman and H. P. Wynn. Abstract tubes, improved inclusion-exclusion identities and inequalities and importance sampling. *The Annals of Statistics*, 25(5):1954–1983, 1997.

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