# 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)

## 1　はじめに

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].

本研究では, 多面体領域の正規確率の数値計算にホロノミック勾配法を応用する際に必要となるホロノミック系と Pfaffian 系の明示的な表示を与えた.

## 2　数値計算の対象となる関数

多面体領域の正規確率の数値計算は, パラメータを適当に変換することにより, 標準正規分布の場合に帰着される. そこで, $(\tilde{a}_{ij}, \tilde{b}_j) \in \mathbf{R}^{d\times n} \times \mathbf{R}^n$ のある近傍 $U$ で定義される関数

$$\varphi(a,b) = \int_{\mathbf{R}^d} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2\right) \prod_{j=1}^n H\left(\sum_{i=1}^d a_{ij}x_i + b_j\right) dx \tag{1}$$

について考える．ここで,$H(x)$ は Heaviside 関数で,$(a_{ij}, b_j) \in U$ とする．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, 上の式の被積分関数に現れる Heaviside 関数の積は,$(\tilde{a}_{ij}, \tilde{b}_j)$ の近傍で，$x$ の関数として

$$\prod_{j=1}^n H\left(\sum_{i=1}^d a_{ij}x_i + b_j\right) = \sum_{J\in\mathcal{F}} \prod_{J\in F} \left(H\left(\sum_{i=1}^d a_{ij}x_i + b_j\right) - 1\right) \tag{2}$$

と分解されることが示せる [1]．この等式により, 式 (1) の積分は多面体領域の正規確率は、

$$\int_{\mathbf{R}^d} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2\right) \sum_{J\in\mathcal{F}} \prod_{J\in F} \left(H\left(\sum_{i=1}^d a_{ij}x_i + b_j\right) - 1\right) dx \tag{3}$$

と書き表すことが出来る．ここで,$H(x)$ は Heaviside 関数である。この式の右辺の各項が実解析関数であることを示すことが出来る．従って, この表示により, 式 (1) で定義さ

れる関数は領域

$$\left\{(a,b)\in\mathbf{C}^{d\times n}\times\mathbf{C}^n : \alpha_F(a)\neq 0 (F\in\mathcal{F})\right\}$$

に解析接続されることが分かる．ここで,$\alpha_F(a) := \left(\sum_{k=1}^d a_{ki}a_{kj}\right)_{i,j\in F}$ である．そこで,式 (3) で定義される関数について注目することにする.

# 3 主結果

式 (3) 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 (3) 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.

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

$$\partial_{b_j} g^J - g^{J\cup\{j\}} = 0 \quad (j\in J^c,\, J\in\mathcal{F}), \tag{5}$$

$$(b_j + \sum_{k=1}^n\sum_{i=1}^d a_{ij}a_{ik}\partial_{b_k}) g^J = 0 \quad (j\in J,\, J\in\mathcal{F}), \tag{6}$$

$$g^J = 0 \quad (J\notin\mathcal{F}). \tag{7}$$

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。

さらに $M$ の holonomic rank と Pfaffian 系は次で与えられる.

**Theorem 2.** *holonomic module* $M$ の *holonomic rank* は多面体領域 $P$ の空でない面の個数に等しい．すなわち, $\mathrm{rank}(M) = |\mathcal{F}|$ が成り立つ．また,$M$ に付随する *Pfaffian* 系は

$$\partial_{a_{ij}} g^J = \sum_{k=1}^n a_{ik}\partial_{b_k}\partial_{b_j} g^J \quad (1\leq i\leq d,\, 1\leq j\leq n,\, J\in\mathcal{F}), \tag{8}$$

$$\partial_{b_j} g^J = g^{J\cup\{j\}} \quad (j\in J^c,\, J\in\mathcal{F}), \tag{9}$$

$$\partial_{b_j} g^F = -\sum_{k\in F}\alpha_F^{jk}(a)\left(b_k g^J + \sum_{\ell\in F^c}\alpha_{k\ell}(a) g^{J\cup k}\right) \quad (j\in J,\, J\in\mathcal{F}). \tag{10}$$

により与えられる．ここで,$(\alpha_F^{ij}(a))_{i,j\in F}$ は $\alpha_F(a)$ の逆行列である.

## 4　証明の概要

式 (2) の右辺を $g$ とおく。さらに、集合 $J \subset [n]$ に対し,$g^J := \left(\prod_{j\in J}\partial_{b_j}\right) g$ とおくと,$(g^J)_{J\in\mathcal{F}}$ は佐藤超関数として次の微分方程式を満たす.

$$\partial_{x_i} g^J = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\partial_{b_j} g^J \qquad (1\le i\le d,\ J\in\mathcal{F}), \tag{11}$$

$$\partial_{a_{ij}} g^J = x_i \partial_{b_j} g^J \qquad (1\le i\le d,\ 1\le j\le n,\ J\in\mathcal{F}), \tag{12}$$

$$\partial_{b_j} g^J = g^{J\cup\{j\}} \qquad (j\in J^c,\ J\in\mathcal{F}), \tag{13}$$

$$f_j g^J = 0 \qquad (j\in J,\ J\in\mathcal{F}). \tag{14}$$

多項式係数の微分作用素環 $D_{abx} := \mathbf{C}\langle a_{ij}, b_k, x_\ell, \partial_{a_{ij}}, \partial_{b_k}, \partial_{x_\ell}\rangle$ を考える。上の微分方程式系に自然な形で対応する $D_{abx}$-加群は、$M_\chi := (\sum_{J\in\mathcal{F}} D_{abx} g^J)/N_\chi$ で与えられる。ここで $g^J$ は不定元を表し、$N_\chi$ は

$$\left(\partial_{x_i} - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\partial_{b_j}\right) g^J \quad (1\le i\le d,\ J\in\mathcal{F}), \tag{15}$$

$$\left(\partial_{a_{ij}} - x_i\partial_{b_j}\right) g^J \quad (1\le i\le d,\ 1\le j\le n,\ J\in\mathcal{F}), \tag{16}$$

$$\partial_{b_j} g^J - g^{J\cup\{j\}} \quad (j\in J^c,\ J\in\mathcal{F}), \tag{17}$$

$$f_j g^J, \quad (j\in J, J\in\mathcal{F}). \tag{18}$$

で生成される $\sum_{J\in\mathcal{F}} D_{abx} g^J$ の部分 $D_{abx}$ 加群である。特性多様体の次元を評価することにより、$M_\chi$ はホロノミックであることが示せる。

微分作用素

$$\left(x_i + \partial_{x_i} - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\partial_{b_j}\right) g^J \quad (1\le i\le d,\ J\in\mathcal{F})$$

及び、(16),(17),(18) で生成される加群を $N_q$ とおくと、$M_\chi$ がホロノミックであることから、$M_q := (\sum_{J\in\mathcal{F}} D_{abx} g^J)/N_q$ もホロノミックであることが従う。加群 $M_q$ は、関数

$$\left(\prod_{j\in J}\partial_{b_j}\right) \bullet \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d} x_i^2\right) \sum_{J\in\mathcal{F}}\prod_{J\in F}\left(H\left(\sum_{i=1}^{d} a_{ij}x_i + b_j\right) - 1\right) \quad (J\in\mathcal{F})$$

の満たす微分方程式系に対応する。

加群 $M_q$ の変数 $x_i$ に関する積分加群 $M_q/\sum_{i=1}^{d}\partial_{x_i} M_q$ を計算すると、次を得る。すなわち、微分作用素環 $D_{ab} := \mathbf{C}\langle a_{ij}, b_k, \partial_{a_{ij}}, \partial_{b_k}\rangle$ を考える。自由 $D_{ab}$-加群 $\sum_{J\in\mathcal{F}} D_{ab} g^J$ の元

$$\left(\partial_{a_{ij}} - \sum_{k=1}^{n} a_{ik}\partial_{b_k}\partial_{b_j}\right) g^J \quad (1\le i\le d,\ 1\le j\le n,\ J\in\mathcal{F}), \tag{19}$$

$$\partial_{b_j} g^J - g^{J\cup\{j\}} \quad (j\in J^c,\ J\in\mathcal{F}), \tag{20}$$

$$(b_j + \sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{d} a_{ij}a_{ik}\partial_{b_k}) g^J \quad (j\in J,\ J\in\mathcal{F}). \tag{21}$$

が生成する部分加群を $N$ とおくと、商加群 $M := \sum_{J\in\mathcal{F}} D_{ab} g^J / N$ は積分加群 $M_q / \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} M_q$ と同型である。特に、ホロノミック加群の積分加群は再びホロノミックになるから、$M$ はホロノミックである。

加群 $M$ を線形微分方程式系と見なした時、関数

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

は $|\mathcal{F}|$ 個の一次独立な解となる。このことから、$M$ のホロノミックランクは $|\mathcal{F}|$ 以上であることが従う。また、Pfaffian 系を具体的に構成することにより、$\mathbf{C}(a,b) \otimes M$ が $g^J (J \in \mathcal{F})$ で張られることが言えるので、$M$ のホロノミックランクは $|\mathcal{F}|$ で上から抑えられることも言える。

# 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.