Holonomic gradient method for the probability content of a simplex region with a multivariate normal distribution

小山 民雄[1]（Tamio Koyama・東京大学・日本学術振興会特別研究員 PD）

Abstract

ホロノミック勾配法 (HGM) とは、微分方程式系を利用した数値計算の手法である。本公演では、多変量正規分布による単体内の確率の数値計算に HGM を応用する。そのために、多変量正規分布による凸多面体の確率が定める函数の理論的性質を調べ、この函数の特殊値や、函数が満たす微分方程式系の明示的表示を与える。その際に、凸多面体の組み合わせ論や佐藤超函数、D 加群の理論など、様々な数学の道具が役に立つことを述べる。

2010 Mathematics Subject Classification: 33E20, 16S32, 62H10.
キーワード: holonomic gradient method, the probability content of a polyheron

1 ホロノミック勾配法とは？

常微分方程式の初期値問題とは、与えられた函数 $f(y)$ によって定義される常微分方程式 $dy/dt = f(y(t))$ と、$t = t_0$ の初期条件 $y(t_0) = y_0$ を満たす函数 $y(t)$ を求める問題である。この問題の数値的解法は、物理学などへの応用上の重要性から広く研究されている。最も基本的なオイラー法では、近似式

$$y(t + \Delta t) \approx y(t) + \frac{dy}{dt}\Delta t$$

を繰り返し適用することで近似解を数値的に計算する。常微分方程式の初期値問題に関して様々な数値計算の手法が開発・実装されており、GNU scientific library [3] などのパッケージで利用することが出来る。

ホロノミック勾配法 (Holonomic Gradient Method, HGM) とは、このような常微分方程式の数値計算法を利用して、多次元領域上の積分を数値計算する手法である。HGM は、[6] に置いて提唱され、現在では統計学に現れる様々な積分への応用が研究されている [1]。

簡単な例を用いて HGM のアイデアを説明する。定積分

$$\varphi(b_1, b_2) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{b_1}^{b_2} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) dx \quad (b_1 < b_2) \tag{1}$$

の数値計算について考える。新たに

$$\begin{aligned}
g_0(b_1, b_2) &:= \varphi(b_1, b_2), \\
g_1(b_1, b_2) &:= \frac{\partial \varphi}{\partial b_1} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}b_1^2\right), \\
g_2(b_1, b_2) &:= \frac{\partial \varphi}{\partial b_2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}b_2^2\right)
\end{aligned}$$

---

[1] 本研究は JSPS 科研費 263125 の助成を受けたものです。
〒 113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1　東京大学 大学院情報理工学系研究科
e-mail: `tkoyama@stat.t.u-tokyo.ac.jp`
web: `https://sites.google.com/site/tkoyama0510/`

と置く。ここで、函数 g_0 は区間 $[b_1, b_2]$ に対応し、g_1, g_2 はそれぞれ点 $\{b_1\}$, $\{b_2\}$ に対応していることに注意する。すると、ベクトル $g := (g_0, g_1, g_2)^\top$ は微分方程式系

$$\frac{\partial g}{\partial b_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & b_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} g, \qquad \frac{\partial g}{\partial b_2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_2 \end{pmatrix} g \tag{2}$$

を満たすことが直ちに分かる。したがって、$\gamma(t) = (b_1 t, b_2 t)^\top$ $(t \in \mathbf{R})$ と置くと、函数 $g(\gamma(t))$ は常微分方程式

$$\frac{d}{dt} g(\gamma(t)) = \left(b_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & tb_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + b_2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & tb_2 \end{pmatrix} \right) g(\gamma(t)) \tag{3}$$

を満たす。更に、$t = 0$ で

$$g(\gamma(0)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる。よって、この初期条件の下で、常微分方程式 (3) を解けば、積分 $\varphi(b_1, b_2)$ の値が得られる。以上が基本的な HGM の道筋である。

同様のアプローチは、広くホロノミック函数と呼ばれるクラスに対して適用が可能である。HGM の適用するためには、常微分方程式の明示的表示の導出や初期値の数値計算が必要となる。そのため、それぞれの問題に対する個別の理論的考察が必要となり、HGM は新たな研究の方向性を切り開いている。より詳しい HGM の解説については、[7] を参照されたい。

2　多面体の組み合わせ論

式 (1) では、区間 $[b_1, b_2]$ 上の積分を考えたが、その一般化として、領域

$$P := \left\{ x \in \mathbf{R}^d : \sum_{i=1}^{d} \tilde{a}_{ij} x_i + \tilde{b}_j \geq 0,\ 1 \leq j \leq n \right\} \tag{4}$$

上の積分

$$\int_P \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d} x_i^2 \right) dx \tag{5}$$

を数値計算することを考える。ここで、$\tilde{a}_{ij}, \tilde{b}_j$ $(1 \leq i \leq d,\ 1 \leq j \leq n)$ は実数とする。また、$\tilde{a}$ で $\tilde{a}_{ij}$ を (i, j) 成分とする $d \times n$ 行列、$\tilde{b}$ で長さ n のベクトル $(\tilde{b}_1, \ldots, \tilde{b}_n)^\top$ を表すことにする。

積分 (5) の数値計算に HGM を応用するため、函数

$$\varphi(a, b) := \int_{\mathbf{R}^d} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d} x_i^2 \right) \prod_{j=1}^{n} H\left(\sum_{i=1}^{d} a_{ij} x_i + b_j \right) dx \tag{6}$$

について考える。ここで、a_{ij}, b_j $(1 \leq i \leq d,\ 1 \leq j \leq n)$ は変数で、a は a_{ij} を (i, j) 成分とする $d \times n$ 行列、b は長さ n のベクトル $(b_1, \ldots, b_n)^\top$ を表す。積分 (1) の例では変数 b_1, b_2 による微分を計算していたが、函数 $\varphi(a, b)$ の変数 b_j $(j = 1, \ldots, n)$ による微分は

どのようになるだろうか？これを計算するためには、多面体の組み合わせ論に関する結果が必要になる。

簡単のため、多面体 P は一般の位置[2]にあり、多面体 P を定義する不等式には冗長なものが存在しないとする。多面体 P を定義する各不等式が表す半空間を

$$H_j := \left\{ x \in \mathbf{R}^d : \sum_{i=1}^{d} \tilde{a}_{ij} x_i + \tilde{b}_j \geq 0 \right\} \quad (1 \leq j \leq n).$$

と置く。多面体 P に付随する抽象単体複体 (abstract simplicial complex) とは、

$$\mathcal{F} := \left\{ J \subset \{1, 2, \ldots, n\} \mid \bigcap_{j \in J} H_j \neq \emptyset \right\}$$

で定義される有限集合のことを言う。

多面体 P に付随する抽象単体複体は、Edelsbrunner [2] によって与えられた包除等式 (inclusion-exclusion identity)

$$\prod_{j=1}^{n} H\left(\sum_{i=1}^{d} \tilde{a}_{ij} x_i + \tilde{b}_j \right) = \sum_{J \in \mathcal{F}} \prod_{j \in J} \left(H\left(\sum_{i=1}^{d} \tilde{a}_{ij} x_i + \tilde{b}_j \right) - 1 \right) \quad (x \in \mathbf{R}^d). \tag{7}$$

の中に現れる。ここで、$H(x)$ は Heaviside 函数を表している、すなわち、

$$H(x) = \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

である。包除等式 (7) の左辺は多面体 P の定義函数であり、右辺の各項は凸多面錐の定義函数を表していることに注意する。

包除等式 (7) では、パラメータ $\tilde{a}, \tilde{b}$ は固定されているが、多面体 P が一般の位置にある場合は、パラメータ $\tilde{a}, \tilde{b}$ に摂動を加えても等式が成り立つ。すなわち、次の定理が成立する [4]:

定理 1 (K)**.** 多面体 P が一般の位置にあるとする。このとき、パラメータ $(\tilde{a}, \tilde{b}) \in \mathbf{R}^{d \times n} \times \mathbf{R}^n$ の近傍 U が存在して、任意の $(a, b, x) \in U \times \mathbf{R}^d$ に対して、等式

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

が成り立つ。

さらに、多面体 P が一般の位置にある場合は、各面の定義函数に対しても同様の公式が得られる。その場合、多面体 P に付随する抽象単体複体 $\mathcal{F}$ に相当する役割を果たすのは

$$\mathcal{F}_J := \{ F \in \mathcal{F} \mid J \subset F \} \quad (J \in \mathcal{F})$$

によって定義される抽象単体複体である。$J \in \mathcal{F}$ に対応する面のアフィン包をパラメータ $(a, b) \in \mathbf{R}^{d \times n} \times \mathbf{R}^n$ と $J \in \mathcal{F}$ に対して、超平面を

$$V(J, a, b) = \left\{ x \in \mathbf{R}^d \mid \sum_{i=1}^{d} a_{ij} x_i + b_j = 0 \, (j \in J) \right\}.$$

として定める。次が成り立つ [5]:

[2] 大まかに言うと、多面体 P が一般の位置にあるとは、無限遠で交わるようなファセットが存在せず、k 個のファセットの交わりが空集合か $d - k$ 次元の面になることを言う。正確な定義は [4] を参照。

命題 1 (K)**.** 多面体 P は一般の位置にあるものとする。多面体 P に付随する抽象単体複体の元 $J \in \mathcal{F}$ に対して、等式

$$\prod_{j\in[n]\setminus J} H\left(\sum_{i=1}^{d} \tilde{a}_{ij}x_i + \tilde{b}_j\right) = \sum_{F\in\mathcal{F}_J}\prod_{j\in F\setminus J}\left(H\left(\sum_{i=1}^{d} \tilde{a}_{ij}x_i + \tilde{b}_j\right) - 1\right) \tag{8}$$

が任意の $x \in V(J, \tilde{a}, \tilde{b})$ について成り立つ。

多面体 P が一般の位置にあるとき、抽象単体複体 $\mathcal{F}$ の元と P の面には一対一対応がある。等式 (8) の左辺は、（超平面 $V(J,a,b)$ 上に制限すれば）抽象単体複体の元 J に対応する面の定義函数である。

パラメータ $(\tilde{a}, \tilde{b})$ に摂動を加えた場合も同様の等式が成り立つ [5]：

定理 2 (K)**.** 多面体 P は一般の位置にあるものとし、$J \in \mathcal{F}$ とする。パラメータ $(\tilde{a}, \tilde{b}) \in \mathbf{R}^{d\times n} \times \mathbf{R}^n$ のある近傍 U 上の任意の点 $(a,b) \in U$ と $x \in V(J,a,b)$ に対して、等式

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

が成立する。

3 正規確率の微分

前節で述べた包除等式を用いて、函数 $\varphi(a,b)$ の変数 b_j $(j = 1,\dots,n)$ による微分を求める。但し、式 (6) ではパラメータ (a,b) は任意の値を取ることができるが、ここでは式 (4) のパラメータ $(\tilde{a}, \tilde{b})$ の近傍にしか注目しない。定理 1 により、パラメータ $(\tilde{a}, \tilde{b})$ のある近傍 U 上で

$$\varphi(a,b) = \int_{\mathbf{R}^d} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d} x_i^2\right) \sum_{F\in\mathcal{F}}\prod_{j\in F}\left(H(f_j(a,b,x)) - 1\right) dx \tag{9}$$

が成り立つ。但し、$f_j(a,b,x) = \sum_{i=1}^{d} a_{ij}x_i + b_j$ と置いた。

抽象単体複体の元 $J \in \mathcal{F}$ に対して、

$$g^J(a,b) := \partial_b^J \bullet \varphi(a,b) \qquad \left(\partial_b^J := \left(\prod_{j\in J}\partial_{b_j}\right),\ \partial_{b_j} := \frac{\partial}{\partial b_j}\right) \tag{10}$$

と置く。近傍 U 上での $g^J(a,b)$ の値について議論する。式 (9) の右辺の各項の微分を計算すると次を得る:

補題 1. $F \in \mathcal{F}$ とし、行列 $\left(\sum_{k=1}^{d} a_{ki}a_{kj}\right)_{i,j\in F}$ は正則とする。この時、

$$\begin{aligned}
&\partial_b^J \bullet \int_{\mathbf{R}^d} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d} x_i^2\right)\prod_{j\in F} H(-f_j(a,b,x))dx \\
&= \begin{cases} \frac{(-1)^{|J|}}{\sqrt{|\alpha_J(a)|}} \int_{V(J,a,b)} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d} x_i^2} \prod_{j\in F\setminus J} H(-f_j(a,b,x))\mu(dx) & (J \subset F), \\ 0 & (J \not\subset F) \end{cases}
\end{aligned}$$

が成り立つ。

定理 3. 多面体 P は一般の位置にあるとし、$J \in \mathcal{F}$ とする。この時、パラメータ $(\tilde{a}, \tilde{b}) \in \mathbf{R}^{d\times n} \times \mathbf{R}^n$ のある近傍 U が存在して、

$$g^J(a,b) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}\sqrt{|\alpha_J(a)|}} \int_{V(J,a,b)} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2} \prod_{j\in[n]\setminus J} H(f_j(a,b,x))\mu(dx) \tag{11}$$

が任意の $(a,b) \in U$ で成り立つ。

Proof. 式 (9) より、

$$(2\pi)^{d/2} g^J(a,b) = \sum_{F\in\mathcal{F}} \partial_b^J \bullet (-1)^{|F|} \int_{\mathbf{R}^d} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2} \prod_{j\in F} H(-f_j(a,b,x))dx$$

となるが、補題 1 よりこれは

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{|\alpha_J(a)|}} \int_{V(J,a,b)} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2} \sum_{F\in\mathcal{F}_J} (-1)^{|F\setminus J|} \prod_{j\in F\setminus J} H(-f_j(a,b,x))\mu(dx) \\
&= \frac{1}{\sqrt{|\alpha_J(a)|}} \int_{V(J,a,b)} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2} \sum_{F\in\mathcal{F}_J} \prod_{j\in F\setminus J} H(f_j(a,b,x)-1)\mu(dx)
\end{aligned}$$

に等しい。さらに、定理 2 を用いれば、これは (11) に等しいことが分かる。 □

4 佐藤超函数

この節では、佐藤超函数の理論を用いて、積分 (5) を HGM で計算するために必要な微分方程式系を導出する。その際、多面体に関する包除等式 (定理 1) が再び活躍する。

次の様な段階的なアプローチにより、函数 $\varphi(a,b)$ の満たす微分方程式系を求める。

$\sum_{F\in\mathcal{F}}\prod_{j\in F}(H(f_j(a,b,x))-1)$ の満たす微分方程式を求める
↓
$\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^d x_i^2\right)\sum_{F\in\mathcal{F}}\prod_{j\in F}(H(f_j(a,b,x))-1)$ の満たす微分方程式を求める
↓
$\varphi(a,b)$ の満たす微分方程式を求める

このとき、**連続でない函数**の満たす微分方程式系を考察していることに注意する。初等的な微分積分の理論では、不連続函数の微分は定義されていない。そのため、佐藤超函数の理論が必要となる。連続函数でない場合でも、超函数と見なす事によって導函数を考えることが可能になるためである。なお、Schwartz 超函数ではなく、佐藤超函数を利用するのは、超函数同士の積や合成函数の微分公式を用いるためである。

簡単のため、式 (1) の積分を用いて、計算の概要を説明する。式 (1) の積分は Heaviside 函数を用いると

$$\varphi(b_1,b_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbf{R}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) H(x-b_1)H(b_2-x)dx$$

と書ける。これは計算が上手くいかない表示であるため、

$$\varphi(b_1,b_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbf{R}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) (H(x-b_1)-H(x-b_2))\,dx$$

という表示を考える。函数 $\chi(x,b_1,b_2) := H(x-b_1)-H(x-b_2)$ が超函数として満たす微分方程式系を考える。新たに超函数を

$$
\begin{aligned}
\chi_0(b_1,b_2) &:= \chi(x,b_1,b_2),\\
\chi_1(b_1,b_2) &:= \frac{\partial\chi}{\partial b_1} = -\delta(x-b_1),\\
\chi_2(b_1,b_2) &:= \frac{\partial\chi}{\partial b_2} = \delta(x-b_2)
\end{aligned}
$$

と置く。ここで $\delta(x)$ はデルタ函数を表し、Heaviside 函数 $H(x)$ とデルタ函数 $\delta(x)$ に関する公式 $\frac{\partial H}{\partial x} = \delta(x)$ を用いた。公式 $x\delta(x)=0$ より、

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial\chi_0}{\partial x} = -\chi_1-\chi_2, && \frac{\partial\chi_0}{\partial b_1} = \chi_1, && \frac{\partial\chi_0}{\partial b_2} = \chi_2,\\
&\frac{\partial\chi_1}{\partial x} - \frac{\partial\chi_1}{\partial b_1} = 0, && (x-b_1)\chi_1 = 0, && \frac{\partial\chi_1}{\partial b_2} = 0,\\
&\frac{\partial\chi_2}{\partial x} - \frac{\partial\chi_2}{\partial b_2} = 0, && \frac{\partial\chi_2}{\partial b_1} = 0, && (x-b_2)\chi_2 = 0
\end{aligned}
$$

を得る。ここから、$q_j(b_1,b_2) := \exp\left(-x^2/2\right)\chi_j(b_1,b_2)\,(j=0,1,2)$ と置くと、

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial q_0}{\partial x} + xq_0 = -q_1-q_2, && \frac{\partial q_0}{\partial b_1} = q_1, && \frac{\partial q_0}{\partial b_2} = q_2,\\
&\frac{\partial q_1}{\partial x} + xq_1 - \frac{\partial q_1}{\partial b_1} = 0, && (x-b_1)q_1 = 0, && \frac{\partial q_1}{\partial b_2} = 0,\\
&\frac{\partial q_2}{\partial x} + xq_2 - \frac{\partial q_2}{\partial b_2} = 0, && \frac{\partial q_2}{\partial b_1} = 0, && (x-b_2)q_2 = 0
\end{aligned}
$$

が得られるが、整理すると、

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial q_0}{\partial x} + xq_0 = -q_1-q_2, && \frac{\partial q_0}{\partial b_1} = q_1, && \frac{\partial q_0}{\partial b_2} = q_2,\\
&(x-b_1)q_1 = 0, && \frac{\partial q_1}{\partial b_1} = \frac{\partial q_1}{\partial x} + b_1q_1, && \frac{\partial q_1}{\partial b_2} = 0,\\
&(x-b_2)q_2 = 0 && \frac{\partial q_2}{\partial b_1} = 0, && \frac{\partial q_2}{\partial b_2} = \frac{\partial q_2}{\partial x} + b_2q_2,
\end{aligned}
$$

となる。$g_j(b_1,b_2) = (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbf{R}} q_j(b_1,b_2)dx\,(j=0,1,2)$ なので、

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial g_0}{\partial b_1} = g_1, && \frac{\partial g_0}{\partial b_2} = g_2,\\
&\frac{\partial g_1}{\partial b_1} = b_1g_1, && \frac{\partial g_1}{\partial b_2} = 0,\\
&\frac{\partial g_2}{\partial b_1} = 0, && \frac{\partial g_2}{\partial b_2} = b_2g_2,
\end{aligned}
$$

が得られるが、これは式 (2) に他ならない。

同様の計算を式 (9) の右辺に施して、次の定理を得る [4]。

定理 4 (K)**.** 函数 $g^J(a,b)\,(J\in\mathcal{F})$ を式 (10) で定めると、これらの函数は、次の微分方程式系を満たす。

$$\partial_{a_{ij}}g^J=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}\partial_{b_k}\partial_{b_j}g^J\quad(1\le i\le d,\,1\le j\le n,\,J\in\mathcal{F}),\tag{12}$$
$$\partial_{b_j}g^J=g^{J\cup\{j\}}\quad(j\in J^c,\,J\in\mathcal{F}),\tag{13}$$
$$\partial_{b_j}g^J=-\sum_{k\in J}\alpha_J^{jk}(a)\left(b_kg^J+\sum_{\ell\in J^c}\alpha_{k\ell}(a)g^{J\cup\ell}\right)\quad(j\in J,\,J\in\mathcal{F}).\tag{14}$$

ここで、 $(\alpha_F^{ij}(a))_{i,j\in F}$ は、$\alpha_F(a)=\left(\sum_{k=1}^d a_{ki}a_{kj}\right)_{i,j\in F}$ の逆行列である。

注意 1. 式 (12) の右辺は、式 (13), (14) よって簡約されて、微分を含まない形に書けることに注意する。

函数 $\chi_j(x,b_1,b_2)$ の満たす微分方程式系から函数 $g_j(b_1,b_2)$ の満たす微分方程式系を求める計算は、D 加群の計算として捉えることが出来る。特に、$q_j(x,b_1,b_2)$ の満たす微分方程式系から函数 $g_j(b_1,b_2)$ の満たす微分方程式系を求める議論は、対応する D 加群の変数 x に関する積分加群の議論に精密化される。このような観点の議論から次の定理がされる [4]:

定理 5 (K)**.** D_{ab} で $a_{ij},b_j(i=1,\ldots,d,\,j=1,\ldots,n)$ を変数とする多項式係数の微分作用素の成す環を表す。不定元 $g^J(J\in\mathcal{F})$ によって生成される D_{ab} 加群を $(D_{ab})^{|\mathcal{F}|}$ で表す。次の元で生成される $(D_{ab})^{|\mathcal{F}|}$ の部分加群を N と置く*:*

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

このとき、商加群 $M=(D_{ab})^{|\mathcal{F}|}/N$ はホロノミックである。さらに、M のホロノミックランクは $\mathcal{F}$ の元の個数に等しい。

5 計算実験

ここまでの理論的な結果を用いて、多面体 P が単体である場合、すなわち $n=d+1$ で $\mathcal{F}=\{J\subset[d+1]\mid J\neq[d+1]\}$ となる場合に、P の正規確率の数値計算に HGM を適用してみる。

パラメータ $(\tilde{a},\tilde{b})$ に対して、$\gamma(t)=(a(t),b(t))$ を

$$a(t)=\tilde{a},\,b(t)=\tilde{t}b\quad(0\le t\le 1).$$

によって定めると、$t=0$ のとき、$g^J(a(t),b(t))$ は

$$g^J(a(0),b(0))=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{|\alpha_J(\tilde{a})|}} & (|J|=d)\\ 0 & (else)\end{cases}$$

となる。函数 $g(t)=(g^J(a(t),b(t)))_{J\in\mathcal{F}}$ の満たす常微分方程式は、定理 4 より直ちに求められるため HGM が適用可能である。

単体 P_d, Q_d を

$$P_d=\left\{x\in\mathbf{R}^d \mid \begin{array}{c} x_i+\frac{\sqrt{d}}{2}\geq 0\,(1\leq i\leq d), \\ -x_1-\cdots-x_d+\frac{\sqrt{d}}{2}\geq 0 \end{array}\right\},$$
$$Q_d=\left\{x\in\mathbf{R}^d \mid \begin{array}{c} x_i-\frac{\sqrt{d}}{2}\geq 0\,(1\leq i\leq d), \\ -x_1-\cdots-x_d+\frac{(2d+1)\sqrt{d}}{2}\geq 0 \end{array}\right\}$$

で定める。これらの単体の正規確率を HGM で計算した値と計算時間を表 1,2 に示す。参考のため、表 1,2 には、モンテカルロ法で求めた正規確率の値も示す。モンテカルロ法では、多変量標準正規分布に従う $1,000,000$ 個のサンプルが単体内に落ちた割合を求めた。

表 1 では、HGM とモンテカルロ法のどちらの方法も、正規確率を計算することに成功している。しかし、確率の値が非常に小さくなる表 2 では、HGM は正規確率の値の計算に成功しているのに対して、モンテカルロ法の方は失敗している。

d	HGM	time of HGM(s)	MC
2	0.285205	0.00	0.2849
3	0.251995	0.00	0.2493
4	0.241744	0.01	0.2429
5	0.242724	0.02	0.2428
6	0.250219	0.09	0.2394
7	0.261920	0.32	0.2572
8	0.276510	1.04	0.2787
9	0.293138	3.15	0.2859
10	0.311198	9.51	0.3072

Table 1: The probability content of P_d

d	HGM	time of HGM(s)	MC
2	5.1758e-02	0.00	5.1917e-02
3	7.0235e-03	0.00	7.0850e-03
4	6.3101e-04	0.00	6.0400e-04
5	3.9722e-05	0.02	5.5000e-05
6	1.8042e-06	0.10	3.0000e-06
7	5.9878e-08	0.30	0.0000e+00
8	1.4799e-09	0.85	0.0000e+00
9	1.1393e-11	2.25	0.0000e+00
10	1.2861e-11	5.74	0.0000e+00

Table 2: The probability content of Q_d

References

[1] References for hgm. `http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Math/hgm/ref-hgm.html`. Accessed: 2015-12-25.

[2] H. Edelsbrunner. The union of balls and its dual shape. *Discrete & Computational Geometry*, 13:415–440, 1995.

[3] GSL. GNU scientific library. `http://www.gnu.org/software/gsl/`, 2012.

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

[5] T. Koyama. Holonomic gradient method for the probability content of a simplex region with a multivariate normal distribution. `http://arxiv.org/abs/1512.06564`, 2015.

[6] 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.

[7] JST CREST 日比チーム. **グレブナー道場**. 共立出版, 2011.