2024年5月24日 統計数理研究所 オープンハウス

多面体正規分布確率の正確な計算

三輪 哲久　大学統計教員育成センター　特任教授

1　はじめに

統計的解析において，多面体で囲まれた領域の確率を求められる場合は多い。一方，任意の d 次元多面体は多面錐を用いて表わすことができる（Varchenko 分割と呼ばれる）。多面錐への分割の手順を与えるとともに，Miwa ら (2003) による多面錐確率計算と組み合わせることにより，多面体内の正規分布確率が精確に計算できることを示す。

2　多面体と多面錐

● d 次元多面体

d 次元の正規確率変数を

$$\mathbb{x} = (x_1, \dots, x_d)' \sim N_d(\mathbb{\mu}, \Sigma)$$

とする。d 次元空間 R^d における多面体

$$\begin{aligned} P &= \{\mathbb{x} \in R^d\colon\ \mathbb{a}_i'\mathbb{x} \le b_i,\ 1 \le i \le n\} \\ &= \{\mathbb{x} \in R^d\colon\ A'\mathbb{x} \le \mathbb{b}\} \\ &= H_1 \cap \dots \cap H_n \end{aligned}$$

を考える。ただし，

$\{\mathbb{a}_1, \dots, \mathbb{a}_n\} = A_{[d\times n]}$　n 個の d 次元定数ベクトル
$(b_1, \dots, b_n)' = \mathbb{b}_{[n]}$　n 個の定数
$H_i = \{\mathbb{x}\colon\ \mathbb{a}_i'\mathbb{x} \le b_i\}$　R^d の半空間
$H_i^c = \{\mathbb{x}\colon\ \mathbb{a}_i'\mathbb{x} > b_i\}$　H_i の反対側の空間
$\partial H_i = \{\mathbb{x}\colon\ \mathbb{a}_i'\mathbb{x} = b_i\}$　境界の超平面

である。

● d 次元多面錐

$n = d$ で，$A = \{\mathbb{a}_1, \dots, \mathbb{a}_d\}$ が正則であれば，P は d 次元多面錐となる。

さらに，$\mathbb{x} \sim N_d(\mathbb{\mu}, \Sigma)$ の場合には，Miwa et al. (2003) により，$\Pr(P)$ を精度よく計算できる（$\Pr(P)$ は，多変量正規分布の分布関数に等しい）。

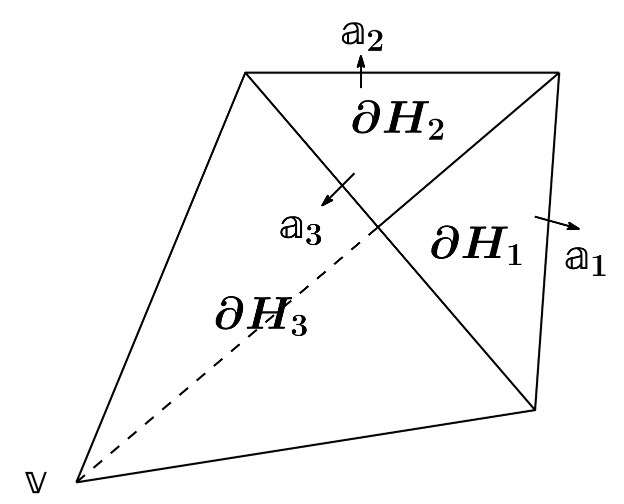

図 1: 三角錐（3 次元多面錐）

○ Miwa, T., Hayter, A. J. and Kuriki, S. (2003).
The evaluation of general non-centred orthant probabilities.
J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 65, 223–234.
○ A. Genz, F. Bretz, T. Miwa, X. Mi, F. Leisch, F. Scheipl, T. Hothorn (2023).
R package: "mvtnorm"

3　単純多面体と非巡回有向グラフ

● 単純 (simple) 多面体

P の任意の頂点は，ちょうど d 個の超平面に含まれる。一般の位置にある (in general position) ともいう。任意の多面体に対し，摂動 ($\mathbb{a}_i'\mathbb{x} = b_i + \epsilon^i$) により，単純な多面体が得られる。

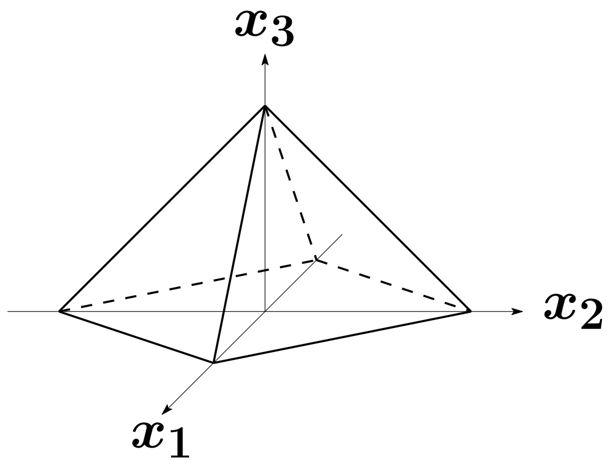

図 2: 非単純な多面体

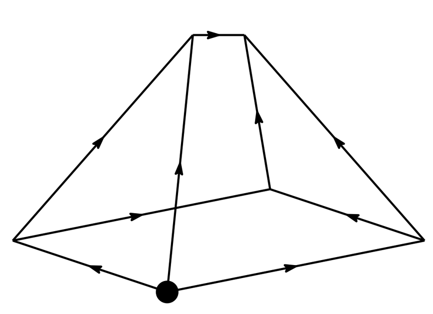

図 3: 摂動による単純化

● 非巡回有向グラフと良い方向付け

○ 非巡回有向グラフ $G(P)$
○ 各辺に非巡回的な向き (orientation) を与える。
○ indeg($\mathbb{v}$): 頂点 $\mathbb{v}$ において入ってくる辺の数
○ 入口 (source): indeg($\mathbb{v}$) $= 0$ （全ての辺が外向き）
○ 良い方向付け (good orientation)
　P の任意の面 (face) において，入口は1つ。
○ 少なくとも1つの良い方向付けは存在する:
　$\mathbb{c}'\mathbb{v}_i \ne \mathbb{c}'\mathbb{v}_j$ $(i \ne j)$ となるようなベクトル $\mathbb{c}$ を使って，$\mathbb{c}'\mathbb{v}_i < \mathbb{c}'\mathbb{v}_j \Rightarrow \mathbb{v}_i \to \mathbb{v}_j$ とすればよい。

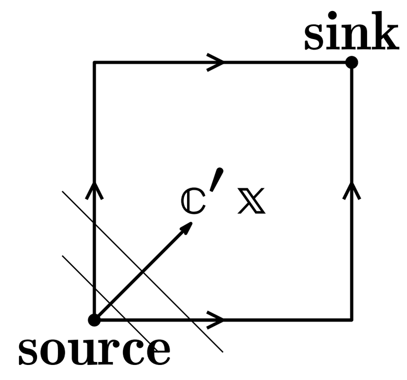

図 4: 良い方向づけ

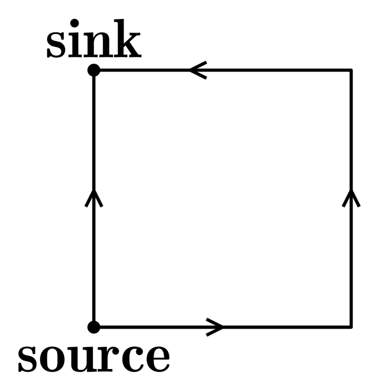

図 5: 良い方向づけ

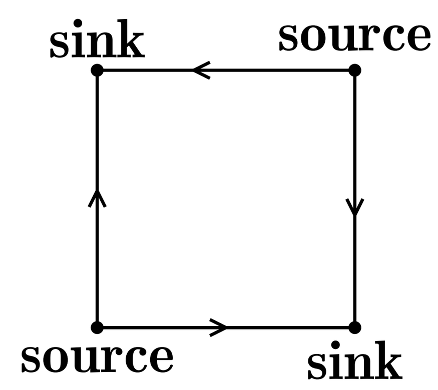

図 6: 悪い方向づけ

4　多面錐による多面体の分割

良い方向付けをもつ単純多面体 P の各辺の方向に沿って，単位ベクトル $\mathbb{e}_j$ $(1 \le j \le \#\{\text{辺}\})$ を考える。頂点全体の集合を $\mathcal{V}$ とし，各頂点 $\mathbb{v}$ $(\mathbb{v} \in \mathcal{V})$ に対して，多面錐

$$\begin{aligned} Q(\mathbb{v}) = \{\mathbb{x}\colon\ \mathbb{x} = \mathbb{v} + \lambda_1\mathbb{e}_{j_1} + \dots + \lambda_d\mathbb{e}_{j_d}, \\ \lambda_j \ge 0\ (1 \le j \le d)\} \end{aligned}$$

を定義する（$\mathbb{e}_{j_1}, \dots, \mathbb{e}_{j_d}$は，頂点 $\mathbb{v}$ に接続する辺に対応する単位ベクトル）。

　このとき次の関係が成り立つ。

$$I_P(\mathbb{x}) = \sum_{\mathbb{v}\in\mathcal{V}} (-1)^{\mathrm{indeg}(\mathbb{v})} \times I_{Q(\mathbb{v})}(\mathbb{x}) \tag{1}$$

ここで，$I_S(\mathbb{x})$ は標識関数（特性関数）：

$$I_S(\mathbb{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbb{x} \in S \\ 0 & \mathbb{x} \notin S \end{cases}$$

● 2次元の場合（多角形, polygon）

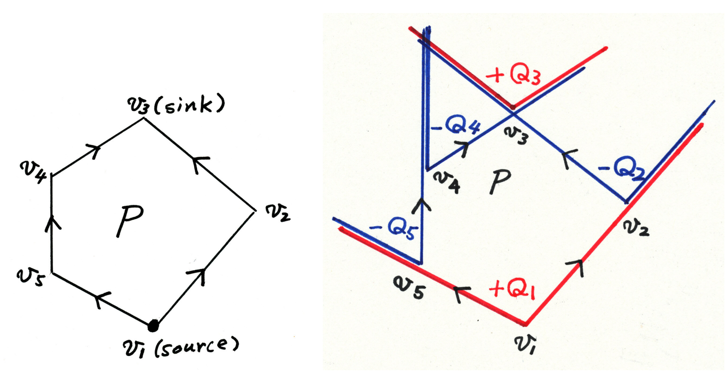

図 7: 多角形の分割

$$I_P = I_{Q_1} - I_{Q_2} + I_{Q_3} - I_{Q_4} - I_{Q_5}$$

5　おわりに

(1)式は境界（∂H_i上の点）も含めて成立する。したがって，任意の確率分布（連続，離散）に対して，

$$\Pr(P) = \sum_{\mathbb{v}\in\mathcal{V}} (-1)^{\mathrm{indeg}(\mathbb{v})} \times \Pr(Q(\mathbb{v}))$$

が成り立つ。特に，$\mathbb{x} \sim N_d(\mathbb{\mu}, \Sigma)$ の場合には，Miwa ら (2003) により，多面体正規確率を精確に計算することができる。