

超幾何多項式の数値計算と隣接関係式

後藤 良彰 (GOTO Yoshiaki)*

1. はじめに—周辺和固定の分割表の正規化定数と超幾何多項式

$u = (u_{ij}) \in M(r_1, r_2; \mathbb{Z}_{\geq 0})$ を分割表と呼ぶことにする¹. このとき, 行和 $\beta_i^{(1)} (= u_{i\cdot}) = \sum_{j=1}^{r_2} u_{ij}$, 列和 $\beta_j^{(2)} (= u_{\cdot j}) = \sum_{i=1}^{r_1} u_{ij}$, 総和 $\beta_+ (= u_{\cdot\cdot}) = \sum_{i,j} u_{ij}$ が定まる².

$$u = \begin{array}{cccc|c} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1r_2} & \beta_1^{(1)} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2r_2} & \beta_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ u_{r_1 1} & u_{r_1 2} & \cdots & u_{r_1 r_2} & \beta_{r_1}^{(1)} \\ \hline \beta_1^{(2)} & \beta_2^{(2)} & \cdots & \beta_{r_2}^{(2)} & \beta_+ \end{array}$$

総和を N で固定し, $p = (p_{ij})$ を各セルに入る確率 (表の形になっていることを忘れる. $\sum_{i,j} p_{ij} = 1$) として, 多項分布を考える. このとき, 分割表 u が得られる確率は

$$P(U = u) = \frac{N!}{u!} p^u, \quad u! := \prod_{i,j} u_{ij}!, \quad p^u := \prod_{i,j} p_{ij}^{u_{ij}}$$

となる. 次に, 行和と列和 (合わせて周辺和と呼ぶ) $\beta = (\beta^{(1)}; \beta^{(2)}) = (\beta_1^{(1)}, \dots, \beta_{r_1}^{(1)}; \beta_1^{(2)}, \dots, \beta_{r_2}^{(2)})$ を固定したときの条件付き確率を考えると, 分割表 u が得られる確率は

$$P(U = u | \beta) = \frac{1}{\tilde{Z}(\beta; p)} \frac{N!}{u!} p^u, \quad \tilde{Z}(\beta; p) = N! \cdot \sum_{u: \text{周辺和は}\beta} \frac{p^u}{u!}$$

となる. ここで, $\tilde{Z}(\beta; p)$ は全確率を 1 にするために必要な数で, 正規化定数と呼ばれる. $N!$ はキャンセルされるので, 以下

$$Z(\beta; p) = \sum_{u: \text{周辺和は}\beta} \frac{p^u}{u!}$$

も正規化定数と呼び, 主にこちらについて議論する. また, (i, j) -セルの期待値が

$$E[U_{ij}] = \frac{1}{Z(\beta; p)} \sum_u u_{ij} \frac{p^u}{u!} = \frac{1}{Z(\beta; p)} \cdot p_{ij} \frac{\partial Z(\beta; p)}{\partial p_{ij}} = p_{ij} \frac{\partial}{\partial p_{ij}} \log Z(\beta; p)$$

と表されるので, $Z(\beta; p)$ の偏微分も重要な値となる. 計算代数統計からの要請は

$Z(\beta; p)$ とその偏微分を (高速に) 数値計算すること

である. 多項式の数値計算なので一見難しくなさそうだが, 定義通りの計算では, 周辺和や分割表のサイズが大きくなると項数が膨大となり, (コンピュータを用いても) 計

* 神戸大学大学院理学研究科数学専攻

e-mail: y-goto@math.kobe-u.ac.jp

¹ 分割表に関しては, 例えば [4, 第 4 章] を参照.

² 括弧内の表記は統計の文脈で使われる記法.

算が困難となる. この困難さを克服するために, 超幾何関数の重要な性質の1つである「隣接関係式」を利用する, というのが本講演の目標である.

簡単のため, 2×2 分割表を例に超幾何関数との関係を記述する. 正規化定数は,

$$Z(\beta; p) = \sum_u \frac{p_{11}^{u_{11}} p_{12}^{u_{12}} p_{21}^{u_{21}} p_{22}^{u_{22}}}{u_{11}! u_{12}! u_{21}! u_{22}!} = \sum_u \frac{p_{11}^{u_{11}} p_{12}^{u_{12}} p_{21}^{u_{21}} p_{22}^{u_{22}}}{\Gamma(u_{11} + 1) \Gamma(u_{12} + 1) \Gamma(u_{21} + 1) \Gamma(u_{22} + 1)}$$

と表すことができる. $1/\Gamma(n) = 0$ ($n \in \mathbb{Z}_{\leq 0}$) の約束のもと, 分母の Γ 関数の中に 0 以下の整数を代入しても良いことにする. ここで, 和を取る分割表 u は, 周辺和の条件より

$$u = \begin{array}{|c|c|} \hline u_{11} & u_{12} \\ \hline u_{21} & u_{22} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline \beta_1^{(1)} & 0 \\ \hline \beta_1^{(2)} - \beta_1^{(1)} & \beta_2^{(2)} \\ \hline \end{array} + u_{12} \cdot \begin{array}{|c|c|} \hline -1 & 1 \\ \hline 1 & -1 \\ \hline \end{array}$$

と (一意に) 表すことができるので, ($u_{12} = n$ と置き直して)

$$Z(\beta; p) = p_{11}^{\beta_1^{(1)}} p_{21}^{\beta_1^{(2)} - \beta_1^{(1)}} p_{22}^{\beta_2^{(2)}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{p_{12}p_{21}}{p_{11}p_{22}}\right)^n}{\Gamma(\beta_1^{(1)} - n + 1) \Gamma(\beta_2^{(2)} - n + 1) \Gamma(\beta_1^{(2)} - \beta_1^{(1)} + n + 1) \Gamma(n + 1)}$$

と変形することができる. 級数の形で書いているが, 十分大きな n に対しては Γ 関数の逆数が 0 となるため, 多項式であることに注意する. Pochhammer 記号

$$(a)_n = a(a+1) \cdots (a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} = (-1)^n \frac{\Gamma(-a+1)}{\Gamma(-a+1-n)}$$

を用いると, 上の和 (\sum 以降) は

$$\frac{1}{\Gamma(\beta_1^{(1)} + 1) \Gamma(\beta_2^{(2)} + 1) \Gamma(\beta_1^{(2)} - \beta_1^{(1)} + 1)} \cdot {}_2F_1 \left(-\beta_1^{(1)}, -\beta_2^{(2)}, \beta_1^{(2)} - \beta_1^{(1)} + 1; \frac{p_{12}p_{21}}{p_{11}p_{22}} \right)$$

と表されることがわかる. ここで, ${}_2F_1$ は Gauss の超幾何級数で

$${}_2F_1(a, b, c; x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n (1)_n} x^n \quad (1)$$

で定義される. a, b, c はパラメータで, x が変数である. $c \in \mathbb{Z}_{\leq 0}$ の時は分母が 0 となる項があり ${}_2F_1$ が定義できないので, 最後の書き換えは $\beta_1^{(2)} - \beta_1^{(1)} + 1 > 0$ の時のみ有効である. このような場合分けを排除するため, 今後は Γ 関数を分母にした和をそのまま扱うことにする (これも便宜上「超幾何関数 (級数)」と呼ぶ).

同様の議論を一般の $r_1 \times r_2$ 行列に対して行くと, 正規化定数 $Z(\beta; p)$ は超幾何級数

$$S(\alpha; x) = \sum_{m=(m_{ij}) \in M(r_1-1, r_2-1; \mathbb{Z}_{\geq 0})} \frac{1}{\Gamma_m(\alpha)} \cdot \prod_{i,j} x_{ij}^{m_{ij}},$$

$$\Gamma_m(\alpha) := \prod_{i=1}^{r_1-1} \Gamma(-\alpha_i - \sum_{j=1}^{r_2-1} m_{ij} + 1) \cdot \prod_{j=1}^{r_2-1} \Gamma(\alpha_{r_1+j-1} - \sum_{i=1}^{r_1-1} m_{ij} + 1)$$

$$\cdot \Gamma\left(\sum_{i=1}^{r_1-1} \alpha_i + \alpha_{r_1+r_2-1} + \sum_{i=1}^{r_1-1} \sum_{j=1}^{r_2-1} m_{ij} + 1\right) \cdot \prod_{i=1}^{r_1-1} \prod_{j=1}^{r_2-1} \Gamma(m_{ij} + 1)$$

を用いて記述することができる. ただし, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_{r_1+r_2-1})$ はパラメータで, $x = (x_{ij})$ は $(r_1-1) \times (r_2-1)$ 個の変数である. 上述のように Pochhammer 記号を用いた表記に直すと, (r_1, r_1+r_2) 型の超幾何級数 (の定数倍) に一致する (定義は [2, 第3章 §1.3]).

以上から, 正規化定数とその偏微分の計算は, 超幾何級数 (多項式) $S(\alpha; x)$ とその偏微分の数値計算に帰着されたことになる.

2. Gauss の超幾何関数の隣接関係式

§1 で, Γ 関数を係数にする級数の方を扱う, と述べたが, この節ではよく知られている結果を使うため, ${}_2F_1$ について議論する.

$\partial_x = \frac{d}{dx}$, $\theta_x = x\partial_x$ とおく. このとき,

$${}_2F_1(a+1, b, c; x) = \frac{1}{a}(\theta_x + a){}_2F_1(a, b, c; x), \quad (2)$$

$${}_2F_1(a-1, b, c; x) = \frac{1}{c-a}((1-x)\theta_x - bx + c - a){}_2F_1(a, b, c; x) \quad (3)$$

という関係式が成り立つ. このように, パラメータを ± 1 ずらした ${}_2F_1$ をもとの ${}_2F_1$ とその微分を用いて表す関係式を隣接関係式と呼ぶ³.

さて, 目標は $a, b \in \mathbb{Z}_{\leq 0}$ となるときの ${}_2F_1$ の計算であった. 簡単のために $f(-N) = {}_2F_1(-N, b, c; x)$ と書くことにすると, $f(-1) = 1 - \frac{b}{c}x$ は簡単に計算できる. そこで, 隣接関係式(3)を用いて, $f(-1)$ から $f(-2), f(-3), \dots, f(-N)$ と目標のところまで計算できないかを考える. $\theta_x f(-1) = -\frac{b}{c}x$ なので $f(-2)$ の値は計算できるが, $f(-3)$ の計算で $\theta_x f(-2)$ の値が必要となる. つまり, (3)だけでは不十分で, $\theta_x({}_2F_1)$ に関する隣接関係式も必要となる. それは次のようにして計算できる: ${}_2F_1(a, b, c; x)$ は超幾何微分方程式

$$[\theta_x(\theta_x + c - 1) - x(\theta_x + a)(\theta_x + b)]g(x) = 0 \quad (4)$$

の解なので, (3)の両辺に θ_x を作用させて, 2階の微分を(4)で消去することにより

$$\begin{pmatrix} f(a-1) \\ \theta_x f(a-1) \end{pmatrix} = M(a) \cdot \begin{pmatrix} f(a) \\ \theta_x f(a) \end{pmatrix}, \quad M(a) = \frac{1}{c-a} \begin{pmatrix} -bx + c - a & (1-x) \\ (a-1)bx & (a-1)(x-1) \end{pmatrix}$$

を得る(第1成分は(3)そのもの). これも隣接関係式と呼ぶことにする. これを用いると, 目標であった $f(-N)$ は

$$\begin{pmatrix} f(-N) \\ \theta_x f(-N) \end{pmatrix} = M(-N+1) \cdots M(-2) \cdot M(-1) \begin{pmatrix} 1 - \frac{b}{c}x \\ -\frac{b}{c}x \end{pmatrix}$$

(1番右の縦ベクトルは ${}^t(f(-1), \theta_x f(-1))$ である) のように行列の積で計算できる. ちなみに, §1 で述べたように ${}_2F_1$ の微分の値も興味ある値であるが, それも第2成分として得られていることに注意する.

1変数の場合は特に計算が易くなるわけではないが, この方法は多変数の超幾何級数 $S(\alpha; x)$ に対しても有効で, §1 で述べた多項式の計算をかなり高速化できる. そこで, 以下では多変数超幾何級数 $S(\alpha; x)$ に対する隣接関係式を(コンピュータのプログラムに載せられるくらい)明示的に記述することを目標とする⁴.

多変数の場合の議論をする前に, もう少し1変数の場合の注意を述べておく. 隣接関係式(2)は級数(1)の形からすぐに分かるが, (3)を得るのは少々面倒である. (3)を得る方法を4個紹介する.

³ b や c をずらす公式も知られているが, ここでは省略する.

⁴このような計算法はホロノミック勾配法[6]の考え方に基いている. ホロノミック勾配法は微分方程式を1階の連立系に書き直して数値計算するという考え方で, ここで考えているのはその差分方程式版とみなすことができる. 微分方程式の数値計算と違い, 差分方程式版では, x が有理数であれば答えの有理数を正確値で求められる, という利点もある.

- (I) 級数を力技で変形する. (答えを知っていればできる)
- (II) 簡単な方 (2) の微分作用素 S_+ と (4) の微分作用素 E に対して, 有理関数係数の微分作用素環 $\mathbb{C}(x)\langle\partial_x\rangle$ における互除法を行うことで

$$S_- \cdot S_+ + P \cdot E = 1$$

を満たす $S_-, P \in \mathbb{C}(x)\langle\partial_x\rangle$ が計算できる. この両辺を ${}_2F_1(a, b, c; x)$ に作用させると,

$$S_-({}_2F_1(a+1, b, c; x)) = {}_2F_1(a, b, c; x)$$

となるので, (a を調整すれば) S_- が求める微分作用素になる.

- (III) 微分方程式 (4) を 1 階の連立系 (Pfaffian 系)

$$\theta_x \begin{pmatrix} f(a) \\ \theta_x f(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{abx}{1-x} & \frac{(a+b)x+1-c}{1-x} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f(a) \\ \theta_x f(a) \end{pmatrix}$$

に直し, 簡単な方 (2) の微分作用素を行列表示すると, その逆行列が $M(a+1)$ となる.

- (IV) ${}_2F_1$ の Euler 型積分表示

$${}_2F_1(a, b, c; x) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 t^a (1-t)^{c-a} (1-xt)^{-b} \frac{dt}{t(1-t)}$$

に着目する. 収束条件についてはここでは割愛する. 適当な条件下で微分と積分の交換ができて,

$$\theta_x({}_2F_1(a, b, c; x)) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 t^a (1-t)^{c-a} (1-xt)^{-b} \cdot \frac{bx \cdot dt}{(1-t)(1-xt)}$$

と表すことができる⁵. この積分で $a \rightarrow a-1$ とした後, 部分積分 (境界 $0, 1$ での値が 0 となるようパラメータに条件をつける) と部分分数展開を計算すれば, ${}_2F_1(a+1, b, c; x)$ を ${}_2F_1(a, b, c; x)$ と $\theta_x({}_2F_1(a, b, c; x))$ を用いて書き直すことができ, (3) を得る.

(II), (III), (IV) の手法は多変数の場合に一般化できる. 次節以降で (IV) の手法を一般化した, ねじれコホモロジー群による隣接関係式の導出を紹介していく.

(II), (III) の一般化について少しだけ述べておく. (II) に関しては, [10], [9] で, A -超幾何系 (ここで考えている $S(\alpha; x)$ も含まれる) に対して, 簡単な方の「逆」に対応する微分作用素を微分作用素環での Buchberger algorithm を用いて計算する方法が与えられている. (III) に関しては, [8] において A -超幾何系に対する一般化が与えられ, さらにプログラムの実装もされている (パラメータや変数が数字の時はより速い手法も考案されている). これらの一般化は幅広く使えて強力だが, Gröbner 基底で割り算等を行うため, 計算コストが大きかったり, 答えがかなり複雑になったりするという難点もある.

⁵ 微分形式をこのように書く理由は §3 で説明する.

3. ねじれコホモロジー群⁶

以下, 記号の都合上, $(k+1, k+n+2)$ 型の超幾何関数を考察する ($(k, n) = (r_1-1, r_2-1)$). また, $\alpha_0 = -\sum_{i=1}^{k+n+1} \alpha_i$ とおき, パラメータを $\alpha = (\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{k+n+1})$ と書くことにする. さらに, ここでは α_i たちは整数でないと仮定する (最後に整数にする).

積分で定義される関数

$$F(\alpha; x) = \int_{\Delta} \prod_{j=1}^{n+k+1} L_j^{\alpha_j} \frac{dt_1 \wedge \dots \wedge dt_k}{t_1 \dots t_k}, \quad (5)$$

$$L_j = t_j \quad (1 \leq j \leq k), \quad L_{k+j} = 1 + t_1 x_{1j} + \dots + t_k x_{kj} \quad (1 \leq j \leq n),$$

$$L_{k+n+1} = 1 + t_1 + \dots + t_k$$

を考える. これは $(k+1, k+n+2)$ 型の超幾何積分と呼ばれる. Δ は

$$\Delta = \{(t_1, \dots, t_k) \in \mathbb{R}^k \mid t_1 < 0, \dots, t_k < 0, t_1 + \dots + t_k > -1\}$$

で定義される領域を考えればよいが, $\alpha_i \notin \mathbb{Z}$ の条件下では, 正則化 (regularization) と呼ばれる操作をすることで, 広義積分ではなくコンパクトな集合の上の積分とみなすことができる (詳しくは [2, 第3章 §2] を参照). 適当な条件下で, $F(\alpha; x)$ のべき級数展開を考えると,

$$F(\alpha; x) = e^{-\pi\sqrt{-1}(\alpha_1 + \dots + \alpha_k)} \cdot \prod_{i=1}^k \Gamma(\alpha_i) \Gamma(-\alpha_i + 1) \cdot \prod_{j=1}^{n+1} \Gamma(\alpha_{k+j} + 1) \cdot S(\alpha; x) \quad (6)$$

となることがわかる. 従って, $S(\alpha; x)$ の隣接関係式は $F(\alpha; x)$ の隣接関係式と等価となる. そこで, 以下超幾何積分 $F(\alpha; x)$ の隣接関係式を調べていく.

1変数の場合は部分積分を使って隣接関係式を導出できると述べたが, 部分積分の多変数化は Stokes の定理を使って理解できる. これを幾何学的に扱う道具として, ねじれコホモロジー群を導入する. しばらくの間 $x = (x_{ij})$ は固定しておき,

$$T = \{t = (t_1, \dots, t_k) \in \mathbb{C}^k \mid L_i(t) \neq 0\} \subset \mathbb{C}^k \subset \mathbb{P}^k$$

とおく. T は超平面配置の補集合である. T 上の多価関数と微分形式を

$$U = U(t) = \prod_{j=1}^{n+k+1} L_j^{\alpha_j}, \quad \omega = d \log U = \sum_{j=1}^{k+n+1} \alpha_j \frac{dL_j}{L_j}$$

と定める. ただし, d は t_1, \dots, t_k (積分の変数) に関する外微分. また, $\Omega^l(T)$ を $\mathbb{P}^k - T$ に極を許す有理 l -形式全体のなすベクトル空間とする. このとき,

$$\nabla^\alpha : \Omega^l(T) \rightarrow \Omega^{l+1}(T); \quad \varphi \mapsto \nabla^\alpha(\varphi) := d\varphi + \omega \wedge \varphi$$

と定めると, これは $\nabla^\alpha \circ \nabla^\alpha = 0$ を満たすことがわかるので, ねじれコホモロジー群を

$$H^l(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha) = \ker(\nabla^\alpha : \Omega^l(T) \rightarrow \Omega^{l+1}(T)) / \nabla^\alpha(\Omega^{l-1}(T))$$

で定義する⁷.

⁶以降の議論は松本圭司氏 (北大) との共同研究 [3] に基づく

⁷微分方程式 $dh = h\omega$ の局所解 (局所的に U の定数倍) から作られるランク 1 の局所系を係数とする (コ)ホモロジーとして定義しても, 同型となることが知られている [2, 第2章].

Fact 1. $H^l(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha) = 0$ ($l \neq k$) である. さらに, $\dim H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha) = \binom{k+n}{k}$.

特に, $H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha) = \Omega^k(T)/\nabla^\alpha(\Omega^{k-1}(T))$ となっていることに注意する. ここで, ∇^α に関するコホモロジーを考える理由を簡単に説明する. (5) のような多価関数の積分は被積分関数の枝を指定する必要がある. そこで,

$$\int_\sigma U\varphi \quad (\sigma \subset T : k\text{-単体}, \varphi \in \Omega^k(T))$$

という積分を, σ とその上での U の枝を組にしたもの ($\sigma \otimes U$ と書く) と 1 価な微分形式 φ のペアリング $\langle \varphi, \sigma \otimes U \rangle$ とみなすことにする. このとき, Stokes の定理は, $\psi \in \Omega^{k-1}(T)$ に対して,

$$\begin{aligned} \langle \psi, \partial\sigma \otimes U|_{\partial\sigma} \rangle &= \int_{\partial\sigma} U\psi = \int_\sigma d(U\psi) = \int_\sigma (dU \wedge \psi + U d\psi) \\ &= \int_\sigma U \cdot \left(d\psi + \frac{dU}{U} \wedge \psi \right) = \int_\sigma U \cdot \nabla^\alpha(\psi) = \langle \nabla^\alpha(\psi), \sigma \otimes U \rangle \end{aligned}$$

となる. 特に, (枝の情報込みで) 境界が消える $\sigma \otimes U$ (これをねじれサイクルという) とのペアリングでは, $\nabla^\alpha(\psi)$ を足しても積分の値が変わらないので, $\nabla^\alpha(\Omega^{k-1}(T))$ で modulo した微分形式 (すなわちねじれコホモロジー群の元) が積分の値を決めていることになる. 詳しい説明は省略するが, 積分 (5) における Δ 上で適当な枝を決めて $\Delta \otimes U$ としたもの (あるいはその正則化) はねじれサイクルとなっている.

$J = \{j_0, \dots, j_k\} \subset \{0, 1, \dots, k+n+1\}$ に対して,

$$\varphi\langle J \rangle = \varphi\langle j_0 \cdots j_k \rangle := d \log \frac{L_{j_1}}{L_{j_0}} \wedge d \log \frac{L_{j_2}}{L_{j_0}} \wedge \cdots \wedge d \log \frac{L_{j_k}}{L_{j_0}}$$

とおき, 対数微分形式と呼ぶ. ただし, $L_0 := 1$ とする (\mathbb{P}^k の無限遠超平面に対応). また, $p \neq q$ に対して,

$${}_q\mathcal{J}_p := \{J \subset \{0, 1, \dots, k+n+1\} \mid p \in J, q \notin J, \#J = k+1\}$$

とおく.

Fact 2 ([2], [5]). $H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha)$ の元は $\varphi\langle J \rangle$ の 1 次結合で表すことができる. さらに, $p \neq q$ を 1 組固定して, $\{\varphi\langle J \rangle \mid J \in {}_q\mathcal{J}_p\}$ を基底として取ることができる.

$\varphi\langle J \rangle$ の具体形を与えておく. $x = (x_{ij})$ は $k \times n$ 行列だが, これを使って $(k+1) \times (k+n+2)$ 行列

$$\tilde{x} = \begin{matrix} & 0 & 1 & \cdots & k & k+1 & \cdots & k+n & k+n+1 \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ k \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 0 & 1 & & 0 & x_{11} & \cdots & x_{1n} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & x_{k1} & \cdots & x_{kn} & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

を考え (“ $(k+1, k+n+2)$ 型超幾何”はこの行列のサイズに由来する), $J = \{j_0, j_1, \dots, j_k\}$ に対して, $|\tilde{x}\langle J \rangle|$ を \tilde{x} の第 j_0, j_1, \dots, j_k 列を取り出して作った小行列式とすると,

$$\varphi\langle J \rangle = \frac{|\tilde{x}\langle J \rangle|}{\prod_{p=0}^k L_{j_p}} dt, \quad dt := dt_1 \wedge \dots \wedge dt_k$$

となることがわかる.

以下では, $\dot{\mathcal{J}} = {}_{k+n+1}\mathcal{J}_0 = \{J = \{0, j_1, \dots, j_k\} \mid 1 \leq j_1 < \dots < j_k \leq n+k\}$ とおき, $\{\varphi\langle J \rangle \mid J \in \dot{\mathcal{J}}\} \subset H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha)$ を基底に取ることが多い. この基底を縦に並べて, U を掛けて積分したベクトル値関数

$$\mathbf{F}(\alpha; x) = \begin{pmatrix} \int_{\Delta} U \varphi\langle \dot{J} \rangle \\ \vdots \\ \int_{\Delta} U \varphi\langle J \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \dot{J} &:= \{0, 1, 2, \dots, k\}, \\ \varphi\langle \dot{J} \rangle &= \varphi\langle 012 \dots k \rangle = \frac{dt}{t_1 \dots t_k} \end{aligned}$$

を考えると,

$$\mathbf{F}(\alpha; x) = \begin{pmatrix} F(\alpha; x) \\ \vdots \\ \pm \frac{|\tilde{x}\langle i_1, \dots, i_l, \dot{J}_{k+j_1, \dots, k+j_l} \rangle|}{\prod_{s=1}^l \alpha_{k+j_s}} \cdot \frac{\partial^l F(\alpha; x)}{\partial x_{i_1 j_1} \dots \partial x_{i_l j_l}} \\ \vdots \end{pmatrix},$$

$$i_1, \dots, i_l, \dot{J}_{k+j_1, \dots, k+j_l} := (\dot{J} - \{i_1, \dots, i_l\}) \cup \{k+j_1, \dots, k+j_l\}$$

$$(1 \leq i_1 < \dots < i_l \leq k, 1 \leq j_1 < \dots < j_l \leq n)$$

となることがわかる (±の決め方については省略. 小行列式の列の並べ方に由来する).

このベクトルが §2 で用いた $\begin{pmatrix} f(a) \\ \theta_x f(a) \end{pmatrix}$ に対応するものである. このベクトルに行列を掛けて α を変化させる公式が隣接関係式である.

U を $U^{-1} = 1/U$ (すなわち, α を $-\alpha$) に置き換えることで, ねじれコホモロジー群 $H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^{-\alpha}) = \Omega^k(T)/\nabla^{-\alpha}(\Omega^{k-1}(T))$ も定義される. $H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha)$ と $H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^{-\alpha})$ の間には交点形式と呼ばれる非退化で双線形なペアリング

$$\mathcal{I} : H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha) \times H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^{-\alpha}) \rightarrow \mathbb{C}$$

が定まっている. 厳密な定義は少し準備が必要となるので省略するが, 気持ちとしては

$$\mathcal{I}(\varphi, \psi) = \int_T \varphi \wedge \psi, \quad \varphi \in H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha), \psi \in H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^{-\alpha})$$

である⁸. Fact 2 があるので, 交点形式の厳密な定義を与える代わりに, 対数微分形式に関する交点数の公式を与えておく.

⁸ このままだと $2k$ -形式が 0 となるため無意味だが, 開多様体 T 上の積分なので不定形のようにになっている. 積分が意味を持つようによく変形することができる [7].

Fact 3 ([7]). $J = \{j_0, \dots, j_k\}$, $J' = \{j'_0, \dots, j'_k\}$ に対して,

$$\mathcal{I}(\varphi\langle J \rangle, \varphi\langle J' \rangle) = (2\pi\sqrt{-1})^k \times \begin{cases} \frac{\sum_{j \in J} \alpha_j}{\prod_{j \in J} \alpha_j} & (J = J'), \\ \frac{(-1)^{p+q}}{\prod_{j \in J \cap J'} \alpha_j} & \left(\begin{array}{l} \#(J \cap J') = k, \\ J - \{j_p\} = J' - \{j'_q\} \end{array} \right), \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

以上の準備により、多価関数の積分に関する計算を交点形式(内積のようなもの)を持ったねじれコホモロジー群(有限次元ベクトル空間)の議論に置き換えることができる。

4. 隣接関係式

$\alpha_i \rightarrow \alpha_i + 1$ とする隣接関係式を考察する. §3 の最初の α_0 の定義から, 考えるべきパラメータベクトルは $\alpha^{(i)} = (\alpha_0 - 1, \alpha_1, \dots, \alpha_{i-1}, \alpha_i + 1, \alpha_{i+1}, \dots, \alpha_{k+n+1})$ となる. パラメータをずらしたねじれコホモロジー群も考えるため, 記号がやや煩雑になってしまうので, 次の記法を使うことにする.

Notation.

$$\begin{aligned} V &:= H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^\alpha), & V^{(i)} &:= H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^{\alpha^{(i)}}), \\ V^\vee &:= H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^{-\alpha}), & V^{(i)\vee} &:= H^k(\Omega^\bullet(T), \nabla^{-\alpha^{(i)}}). \end{aligned}$$

また, $\psi \in \Omega^k(T)$ で代表されるねじれコホモロジー群 V (resp. $V^{(i)}$, V^\vee , $V^{(i)\vee}$) の元を区別するために $[\psi]$ (resp. $[\psi]_i$, $[\psi]^\vee$, $[\psi]_i^\vee$) と書くこともある.

さて, $\alpha_i \rightarrow \alpha_i + 1$ を考えることは, 積分表示で見ると, $U \cdot \varphi$ を $U \cdot L_i \cdot \varphi$ に取り替えることに対応する.

Proposition 4. L_i 倍 $\Omega^k(T) \ni \varphi \mapsto L_i \cdot \varphi \in \Omega^k(T)$ は well-defined な線形写像

$$\mathcal{U}_i : V^{(i)} \rightarrow V; \quad [\varphi]_i \mapsto [L_i \cdot \varphi]$$

を誘導する.

基底 $\{[\varphi\langle J \rangle]_i\}_{J \in \mathcal{J}} \subset V^{(i)}$, $\{[\varphi\langle J \rangle]\}_{J \in \mathcal{J}} \subset V$ に関する \mathcal{U}_i の表現行列を $U_i(\alpha; x)$ とおく.

$$\int_{\Delta} \prod_{j=1}^{k+n+1} L_j^{\alpha_j} \cdot \mathcal{U}_i([\varphi\langle J \rangle]_i) = \int_{\Delta} \prod_{j=1}^{k+n+1} L_j^{\alpha_j} \cdot L_i \cdot \varphi\langle J \rangle = F(\alpha^{(i)}; x)$$

となることなどから, $U_i(\alpha; x)$ は隣接関係式

$$\mathbf{F}(\alpha^{(i)}; x) = U_i(\alpha; x) \cdot \mathbf{F}(\alpha; x)$$

を与えることがわかる. あとは, この $U_i(\alpha; x)$ を具体的に表示すればよい. 実は, 基底を $\{[\varphi\langle J \rangle]_i\}_{J \in \mathcal{J}_i} \subset V^{(i)}$, $\{[\varphi\langle J \rangle]\}_{J \in \mathcal{J}_0} \subset V$ で取ると,

$$\mathcal{U}_i([\varphi\langle ij_1 \dots j_k \rangle]_i) = \left[L_i \cdot \frac{|\tilde{x}\langle ij_1 \dots j_k \rangle| dt}{L_i L_{j_1} \dots L_{j_k}} \right] = \left[\frac{|\tilde{x}\langle ij_1 \dots j_k \rangle| dt}{L_{j_1} \dots L_{j_k}} \right] = \frac{|\tilde{x}\langle ij_1 \dots j_k \rangle|}{|\tilde{x}\langle 0j_1 \dots j_k \rangle|} [\varphi\langle 0j_1 \dots j_k \rangle]$$

となり, 表現行列が対角行列になることがわかる. 従って, 基底 $\{[\varphi\langle J \rangle]_i\}_{J \in \mathcal{J}} \subset V^{(i)}$, $\{[\varphi\langle J \rangle]\}_{J \in \mathcal{J}} \subset V$ に変換する基底変換行列を計算すれば良いが, (内積空間での議論と同様に)それは交点数を用いて簡単に計算できる.

Theorem 5. 表現行列 $U_i(\alpha; x)$ は以下の表示を持つ:

$$U_i(\alpha; x) = C(\alpha^{(i)})P_i(\alpha^{(i)})^{-1}D_i(x)Q_i(\alpha)C(\alpha)^{-1}.$$

ただし,

$$D_i(x) = \text{diag} \left(\dots, \frac{|\tilde{x}\langle J \rangle|}{|\tilde{x}\langle J_0 \rangle|}, \dots \right)_{J \in \mathcal{J}_i}, \quad C(\alpha) = \left(\mathcal{I}(\varphi\langle I \rangle, \varphi\langle J \rangle) \right)_{I, J \in \mathcal{J}},$$

$$P_i(\alpha) = \left(\mathcal{I}(\varphi\langle I \rangle, \varphi\langle J \rangle) \right)_{I \in \mathcal{J}_i, J \in \mathcal{J}}, \quad Q_i(\alpha) = \left(\mathcal{I}(\varphi\langle I \rangle, \varphi\langle J \rangle) \right)_{I \in \mathcal{J}_0, J \in \mathcal{J}}.$$

Theorem 中の交点数は全て Fact 3 を用いて計算可能である. また, $C(\alpha^{(i)})$, $P_i(\alpha^{(i)})$ は $V^{(i)}$ と $V^{(i)\vee}$ での交点数として現れる.

Remark 6. (i) §2 の隣接関係式の導出 (IV) の「部分積分と部分分数展開を計算」という部分が「コホモロジー群 (modulo ∇^α) と交点数の計算」により機械的にできるようになっている⁹.

(ii) 公式中に交点行列の逆行列が現れるので非実用的に見えるが, 実際にはこの逆行列を (再び交点行列を用いて) 陽に書く方法がわかっている. 従って, Theorem 中の行列は全て陽な表示を持つ.

(iii) §2 で, a を増やす方は簡単で減らす方が複雑, と述べたが, この手法だと増やす方も減らす方もほとんど同じ形をしている. 実際, 具体形は書かないが α_i を減らす隣接関係式も同様に求められる.

(iv) (6) 式を用いれば, 級数 $S(\alpha; x)$ とその偏微分が並んだベクトル値関数に関する隣接関係式が得られる. α は整数ベクトルでないとして議論していたので, 正規化定数の計算に応用する際は α が整数ベクトルで $S(\alpha; x)$ が多項式になる場合でも公式が正しいことを示す必要がある. 実際, 多少の議論で証明することができる.

(v) ${}_2F_1$ の時は 1 個のパラメータ a に関する隣接関係式だけで十分だったが, 多変数の場合は 1 個のパラメータを小さくしただけでは定義からの計算が簡単になるとは限らないので, 全てのパラメータを動かす隣接関係式を用意しておく必要がある.

5. 正規化定数の数値計算—実装

§4 で求めた隣接関係式はコンピュータに実装できるくらい具体的に書くことができたので, 正規化定数やその偏微分などを計算するプログラムを Risa/Asir¹⁰ 上に実装した.

Example 7 (3×3 分割表 \dots (3, 6) 型 ($k = n = 2$), 4 変数多項式).

			60
			60
			100
120	50	50	220

⁹[1] でもねじれコホモロジー群による計算が与えられているが, 交点形式は利用されていない. それゆえ, 多少の複雑な計算が必要.

¹⁰ オープンソースの計算機代数 (数式処理) システム. <http://www.math.kobe-u.ac.jp/Asir>

という周辺和に対して、素朴に級数 $S(\alpha; x)$ の定義で計算するプログラムでは 396 秒かかり、我々の実装では約 0.5 秒で計算できた。我々の実装では、周辺和を全て 10 倍しても 110 秒で計算できた。(Intel Xeon E5-4650 (2.7GHz) with 256G memory で計算)

関係式を求めるための計算量については以下の評価が得られている。

Proposition 8. $n \times n$ 行列のかけ算に要する計算量を $O(n^3)$ とするとき、隣接関係式の行列を得るための計算量の上限は、次のようになる。

1. r_1 を固定し、 $r_2 \rightarrow \infty$ を考えるとき、 $O(r_2^{3r_1})$.
2. $r_1 = r_2$ の条件下で $r_1 \rightarrow \infty$ を考えるとき、 $O(2^{6r_1})$.

考えている行列のサイズ¹¹ は $r = \binom{r_1 + r_2 - 2}{r_1 - 1}$ であり、計算量は r^3 のオーダーになっている(つまり、交点行列の掛け算が一番重い)。分割表のサイズが大きくなるとこの計算量がネックとなるため、 10×10 などの大きな分割表に対しては、隣接関係式の行列を求めるのが困難となる¹²。

隣接関係式の行列さえ求められれば、周辺和に関しては線形のオーダーの計算量となる(定義通りだと多項式オーダー)。しかし、実際に計算すると、分母と分子が巨大な整数であるような有理数の計算を行うことになるため、計算量はもっと多くなる¹³。これを解決するために、modular method と呼ばれる手法(簡単に述べると、複数の有限体上で計算(並列化可能)を行い、中国剰余定理などを用いて有理数体に戻す方法)が有効であるということが、橘義仁氏(神戸大)の実装による改善で確かめられている。

参考文献

- [1] K. Aomoto, Les équations aux différences linéaires et les intégrales des fonctions multiformes, *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math.*, 22 (1975), no. 3, 271–297.
- [2] 青本和彦, 喜多通武, 超幾何関数論シュプリンガー・フェアラーク東京, 1994.
- [3] Y. Goto and K. Matsumoto, A Pfaffian equation and contiguity relations of the hypergeometric function of type $(k+1, k+n+2)$ and their applications, preprint.
- [4] JST CREST 日比チーム編, グレブナー道場, 共立出版, 2011.
- [5] M. Kita and K. Matsumoto, Duality for hypergeometric functions and invariant Gauss-Manin systems, *Compositio Math.*, 108 (1997), no. 1, 77–106.
- [6] H. Nakayama, K. Nishiyama, M. Noro, K. Ohara, T. Sei, N. Takayama, and A. Takemura, Holonomic Gradient Descent and its Application to Fisher-Bingham Integral, *Adv. in Appl. Math.* 47 (2011), 639–658
- [7] K. Matsumoto, Intersection numbers for logarithmic k -forms, *Osaka J. Math.* 35 (1998) 873–893.
- [8] K. Ohara and N. Takayama, Pfaffian Systems of A-Hypergeometric Systems II — Holonomic Gradient Method, preprint. arXiv:1505.02947.
- [9] M. Saito, B. Sturmfels, and N. Takayama, Hypergeometric polynomials and integer programming, *Compositio Math.*, 115 (1999), no. 2, 185–204.
- [10] N. Takayama, Gröbner basis and the problem of contiguous relations, *Japan J. Appl. Math.*, 6 (1989), no. 1, 147–160.

¹¹ ねじれコホモロジー群の次元, あるいは $F(\alpha; x)$ が満たす微分方程式系のランク。

¹² 現状は 7×7 ((7, 14) 型) あたりが限界のようである。

¹³ 例えば, Example 7 の周辺和 10 倍の場合, $S(\alpha; x)$ は $(1773 \text{ 桁}) / (6432 \text{ 桁})$ の有理数になる。