トーリックモデルと多変数超幾何函数

間野 修平　**数理・推論研究系 教授**

1　トーリックモデルの抽出

定義 1. **状態空間** $[m] := \{1, 2, \dots, m\}$, $m \in \mathbb{N}$**，行空間に** $(1, \dots, 1)$ **を含む行列** $B = (b_{ij}) \in \mathbb{Z}^{d \times m}$ **と** $h \in \mathbb{R}^m_{>0}$ **を考える．** B **に付随するトーリックモデルとは確率分布の集合**

$$\mathcal{M}_{A,h} := \{p \in int(\Delta_{m-1}) : \log p \in \log h + rowspan(B)\}.$$

をいう．特に $h = 1$ **のトーリックモデルを対数線形モデルという．**

母数 $\psi \in \mathbb{R}^{d'}_{>0}$ **と** $\phi \in \mathbb{R}^d_{>0}$ **があり，** ϕ **を局外母数とする．**

$$B = \begin{pmatrix} A \\ \tilde{A} \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^{(d+d') \times m}, \quad A = (a_{ij}) \in \mathbb{Z}^{d \times m}, \quad \tilde{A} = (\tilde{a}_{ij}) \in \mathbb{Z}^{d' \times m},$$

$(1, \dots, 1) \in \mathrm{rowspan}(A)$ **に対し，トーリックモデル** $\mathcal{M}_{A,h}$ **を**

$$p_j = \frac{h_j}{Z(\phi, \psi)} \prod_{i \in [d]} \phi_i^{a_{ij}} \prod_{k \in [d']} \psi_k^{\tilde{a}_{kj}}, \quad j \in [m]$$

とパラメトライズする．多項抽出，もしくはポアソン抽出された標本における状態 j **のカウントを** u_j, $j \in [m]$ **で表すとき，** A, b **が定める集合**

$$\mathcal{F}_b(A) := \{u : Au = b, u \in \mathbb{N}_0^m\}, \quad \mathbb{N}_0 := \{0\} \cup \mathbb{N}$$

を ϕ **に対する最小十分統計量** $b \in \mathbb{N}_0 A := \sum_{j \in [m]} \mathbb{N}_0 a_j$ **に付随するファイバーと呼ぶ．ここで** a_j **は** A **の** j **列ベクトルである．条件付き確率分布は**

$$\mathbb{P}(U = u | AU = b) = \frac{1}{Z_A(b; y)} \frac{y^u}{u!}, \quad u \in \mathcal{F}_b(A),$$

$$y^u := \prod_{j \in [m]} y_j^{u_j}, \quad u! := \prod_{j \in [m]} u_j!, \quad y_j := h_j \prod_{k \in [d']} \psi_k^{\tilde{a}_{kj}} \in \mathbb{R}_{>0} \tag{1}$$

である．正規化定数 $Z_A(b; y) := \sum_{u \in \mathcal{F}_b(A)} \frac{y^u}{u!}$ **を** GKZ **超幾何多項式，または** A **超幾何多項式と呼ぶ．** $b \notin \mathbb{N}_0 A$ **のとき** $Z_A(b; y) = 0$ **と規約する．** Diaconis–Sturmfels (1998) **は** (1) **の分布のメトロポリス連鎖による近似抽出に多項式環のトーリックイデアルを用いることを提案し，代数統計と呼ばれる分野の起源の一つになった．一方，微分作用素環を用いて** (1) **の分布に厳密に従う独立標本を抽出できることが示されている** (M 2017)**．**

2　マルコフ束と計算複雑性

微分作用素の環 $R = \mathbb{C}(y_1, \dots, y_m)\langle \partial_1, \dots, \partial_m \rangle$ **と交換関係**

$$\partial_j \bullet h(y) = h(y) \bullet \partial_j + \partial_j h(y), \qquad h(y) \in \mathbb{C}(y_1, \dots, y_m),$$

A **超幾何系** $H_A(b)$ **(** A **超幾何級数を解とするある多変数線形偏微分方程式系が生成する左イデアル) による剰余類** $R/H_A(b)$ **を考える．イニシャルイデアル** $\mathrm{in}_\prec(H_A(b))$ **に関する標準単項式** $u \notin \mathrm{in}_\prec(H_A(b))$ **の集合** $\{\partial^{u(0)} = 1, \partial^{u(1)}, \dots, \partial^{u(r-1)}\}$ **は** $R/H_A(b)$ **のベクトル空間としての基底をなし，** r **は** $\{0, a_1, \dots, a_m\}$ **の凸包を単位単体** $\{0, e_1, \dots, e_d\}$ **で測った体積である．** $H_A(b)$ **の** Pfaffian **系 (一階偏微分方程式系による表現)**

$$y_j \partial_j \bullet q(b; y) = P_j(b; y) q(b; y), \quad j \in [m]$$

において $q(b; y) := (\theta^{u(k)} Z_A(b; y) : k \in 0 \cup [r-1])^\top$ **を** Gauss–Manin **ベクトルとよぶ．** Pfaffian **系は** $H_A(b)$ **の** Gröebner **基底に対する標準形の計算により得られる** (Saito et al. 2000)**．**

定義 2 (M–Takayama). $A = (a_{ij}) \in \mathbb{Z}^{d \times m}$ **と** $b \in \mathbb{N}_0 A = \sum_{j \in [m]} \mathbb{N}_0 a_j \subset \mathbb{N}_0^d$ **について，** $\mathbb{N}_0 A$ **に埋め込まれた有界な整数格子で半順序**

$$v \in \mathbb{N}_0 A \ \ and \ \ v - a_j \in \mathbb{N}_0 A \quad \Rightarrow \quad v - a_j \prec v$$

を備え，最大元 b **と最小元** 0 **を持つものをマルコフ束** $\mathcal{L}_A(b)$ **と呼ぶ．**

アルゴリズム 1 (M 2017). **入力**: **行列** $A \in \mathbb{Z}^{d \times m}$, **十分統計量** $b \in \mathbb{N}_0 A$, **パラメタ** $y \in \mathbb{R}^m_{>0}$, A **超幾何多項式．**

出力: A, b **が定める** *(1)* **の分布に従うランダムベクトル** u.

Step 1: $t = 1, n = \deg(b)$ **とする．**

Step 2: $\tilde{e}(b, b - a_j; y) = Z_A(b - a_j; y) y_j$, $\forall j \in [m]$ **を計算．**

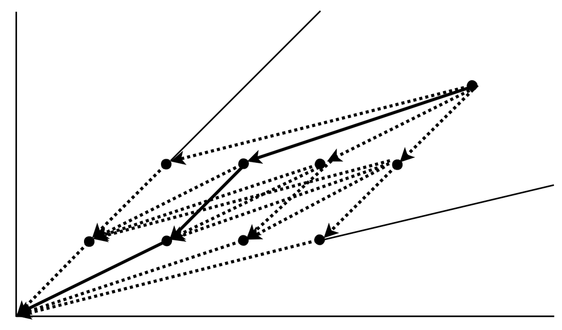
Step 3: $[0, 1]$ **を比** $\tilde{e}(b, b - a_1; y) : \tilde{e}(b, b - a_2; y) : \cdots : \tilde{e}(b, b - a_m; y)$ **に分割．** $b - a_j \notin \mathcal{L}_A(b)$ **のとき** j **番目は** 0.

Step 4: $[0, 1]$ **の一様乱数をとり，区間** $\tilde{e}(b, b - a_j; y)$ **に入れば** $j_t = j$.

Step 5: $\deg(b - a_{j_t}) = 0$ **であれば** *Step 6,* **そうでなければ** $t \leftarrow t + 1$, $b \leftarrow b - a_{j_t}$ **とし，** *Step 2.*

Step 6: $(u_1, \dots, u_m)$, $u_j := |\{t : j_t = j, t \in [n]\}|$ **を出力．**

Step 5 **で** Gauss–Manin **ベクトルを** Pfaffian **系に現れる行列を用いて更新することで** A **超幾何多項式を入力することなく同等の出力を標本経路に沿った計算のみで得ることができる** (M-Takayama, **アルゴリズム** 2)**．**



$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ **と最大元** $b = \begin{pmatrix} 6 \\ 3 \end{pmatrix}$ **が生成するマルコフ束．近傍を有向辺，ある標本経路を実線で示す．**

定理 1 (M–Takayama). (1) **の分布に従うランダムベクトルの抽出の計算複雑性は，有理数演算のコストを** $O(1)$ **として，アルゴリズム** 1 **によれば** $O(mdn)$, **アルゴリズム** 2 **によれば** $O(\max\{m, r\} rn)$ **である．**

注意 1. **長さ** N **のメトロポリス連鎖の複雑性は** $O(\max\{U, |\mathcal{B}|\} N)$. $|\mathcal{B}|$ **はマルコフ基底** $\mathcal{B}$ **のサイズ，** U **は連鎖の推移において更新する成分の数．**

3　統計的興味が導く多変数超幾何級数

3.1　コーダルグラフに付随するA超幾何級数

$a, b, c \in \mathbb{C}$ **に対し，** Euler–Gauss **の超幾何級数**

$${}_2F_1(a, b; c; z) := \sum_{u \geq 0} \frac{(a)_u (b)_u}{(c)_u} \frac{z^u}{u!}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad (a)_u := a(a+1) \cdots (a+u-1)$$

は $|z| < 1$ **で絶対収束し，特殊値** $z = 1$ **において** $\mathrm{Re}(c - a - b) > 0$, $-c \notin \mathbb{N}_0$ **に対し和公式がある．一方，** A **超幾何積分 (** ${}_2F_1$ **における** Euler **積分の類似) は次の和公式を与える．**

定理 2 (Sundberg 1975; M–Takayama). **コーダル無向グラフ** $\mathcal{G} = (V, E)$ **が定めるグラフィカルモデルにおいて，極大クリークの状態のカウントを与えた分布函数の規格化定数は**

$$\sum_{\{v(i_V) : \sum_{i_V \supset i_C} v(i_V) = u(i_C), \forall C \in \mathcal{C}\}} \prod_{i_V \in \mathcal{I}_V} \frac{1}{v(i_V)!} = \frac{\prod_{S \in \mathcal{S}} \{\prod_{i_S \in \mathcal{I}_S} u(i_S)!\}^{\nu(S)}}{\prod_{C \in \mathcal{C}} \prod_{i_C \in \mathcal{I}_C} u(i_C)!}.$$

$\mathcal{C}, \mathcal{S}$ **はそれぞれ** $\mathcal{G}$ **の極大クリーク，セパレータの集合，** $\nu(S)$ **は任意の完全列におけるセパレータ** S **の出現数，** $v(i_V) \in \mathbb{N}_0$, $i_V \in \mathcal{I}_V$ **は変数．**

3.2　青本–Gel'fandの超幾何級数の一般化

青本–Gel'fand **の超幾何級数は** Euler–Gauss **の超幾何級数の多変数版で，** $(r_1, r_1 + r_2)$ **型は** $r_1 \times r_2$ **分割表の規格化定数として現れる．古典一変数超幾何多項式** ${}_{2^{k-1}}F_{2^{k-1}-1}$, $k \geq 3$ **は** 2^k **分割表の無** k **因子交互作用モデルの交互作用を含む条件付き分布の規格化定数として現れ，** k **元分割表** $(r_1, r_1 + r_2, \dots, r_1 + \cdots + r_k)$ **の規格化定数を与える古典一変数超幾何級数の多変数版を定義できる．**

参考文献

Shuhei Mano, Nobuki Takayama. Algebraic algorithm for direct sampling from toric models. arXiv: 2110.14992