超幾何関数の周辺－その１
Notes on the Hypergeometric Functios No.1

(株) 竹内ハガネ商行　　竹内寿一郎

１．はじめに

今回も少し浮気をして先々月報告のあった西川氏の「超幾何級数とＪのコード解析およびその利用」[1] に刺激され、超幾何関数の周辺について調べたので報告する。

世に言う超幾何分布の確率関数は、組み合わせ数 (2 項係数) の比で定義され、どうしてそれが超幾何関数に関係しているのか、統計・確率を習いたての当時学生だった頃の私が、その疑問を感じたのを思い出してしまった。2 項分布の非復元抽出モデルを何故超幾何分布と名付けられたかを知ったのは、「統計数値表-JIS-1972」[4] の発刊に協力することになった大学を卒業して大学院に入ってからであった。凝り性だった私は兎にも角にもいろいろな確率分布のモーメントや特性関数を計算することにしたのである。そのとき目に触れたのがあの大辞典、$Abramowitz\&Stegun$ [2] で、この冊子がこれから紹介するガンマ関数などの近似式や、いろいろな確率分布について紹介した本であった。この大辞典は確率分布はほんのおまけであり、内容は数学に出てくるいろいろな関数、三角関数、指数関数、楕円関数、対数関数、直交多項式、ガンマ関数、ベータ関数、ベッセル関数、ゼータ関数、ベルヌーイ数などなど、いろいろな特殊関数も含めた、関数の性質、漸化式、関数の相互間の関係や近似式がキラ星のごとく掲載されていたのであった。それによりこの世界の大きさを知り、改めて仕事の困難さを思い知ったのであった。

そして結局、超幾何分布の特性関数が何と e^{it} を変数としたガウスの超幾何級数になることを知り、はじめて超幾何の名前の由来に辿りついたのであった。そこでここではまず丁寧に超幾何分布の確率母関数 ($s = e^{it}$ に置き換えれば特性関数になる) を誘導してみることにする。なお、実際に超幾何分布の確率を計算するためには組み合わせ数、2 項係数、を計算する必要があり、またそれらは階乗の計算、すなわちガンマ関数の計算が基礎となるので、超幾何関数については次回に譲ることにして、ここではガンマ関数を中心に述べてみたい。

２．ガンマ関数と階乗

超幾何関数の基礎となる階乗およびガンマ関数について基礎知識を復習しておく。ガンマ関数 $\Gamma(\alpha)$ とは、

(1)　$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty x^{\alpha-1}e^{-x}dx$$

で定義される。これを部分積分して次の漸化式を得る。

(2)　$$\begin{aligned}\Gamma(\alpha) &= \int_0^\infty x^{\alpha-1}e^{-x}dx \\ &= \left[-x^{\alpha-1}e^{-x}\right]_0^\infty + (\alpha-1)\int_0^\infty x^{\alpha-1-1}e^{-x}dx = (\alpha-1)\Gamma(\alpha-1) \\ &= (\alpha-1)(\alpha-2)\Gamma(\alpha-2) = (\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)\Gamma(\alpha-3) = \cdots\end{aligned}$$

このとき、(2) 式 2 行目の部分積分の第 1 項が有限であるためには、$\alpha > 0$ でなければならない。$\alpha = 0$ または負の場合は指数積分といわれ、この式は $x = 0$ で真性特異点を持つので難しい問題が生ずる。これらについては他の文献を参照されたい。

ガンマ関数を計算するための式として最も有名なスターリングの公式 ($Stirling's\ Formula$)

がある。この式は α が大きいところでは早く収束する。$x=\alpha$ として、

(3) $$\Gamma(x)=e^{-x}x^{x-\frac{1}{2}}\sqrt{2\pi}\left[1+\frac{1}{12x}+\frac{1}{288x^2}-\frac{139}{51840x^3}-\frac{571}{2488320x^4}+\cdots\right]\left(\begin{array}{l}x\to\infty,\\ |arg\ x|<\ \pi\end{array}\right)$$

また、ガンマ関数は α が大きくなるにつれてその値は天文学的に大きな数値になるので、対数をとった $\ln\Gamma(\alpha)$ 関数の計算式も求められている。

(4) $$\begin{aligned}\ln\Gamma(x)&=\left(x-\frac{1}{2}\right)\ln x-x+\frac{1}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{12x}-\frac{1}{360x^3}+\frac{1}{1260x^5}-\frac{1}{1680x^7}+\cdots\\ &=\left(x-\frac{1}{2}\right)\ln x-x+\frac{1}{2}\ln(2\pi)+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{B_{2k}}{2k(2k-1)x^{2k-1}}\quad(x\to\infty,\ |arg\ x<\pi|)\end{aligned}$$

上の式で B_k はベルヌーイ数 ($Bernoulli\ Number$[2]) といわれる数である。

なお、α が 1 以上の正の整数のとき、Γ 関数は階乗になる。

(5) $$\Gamma(\alpha)=(\alpha-1)(\alpha-2)\cdots(\alpha-k)\Gamma(\alpha-k)=(\alpha-1)!$$

とくに $\alpha=\frac{1}{2}=0.5$ の場合、多くの解析関数の積分値等に使われ、

(6) $$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\Gamma(0.5)=\sqrt{\pi}$$

がよく知られている。これは、

(7) $$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\int_0^{\infty}x^{\frac{1}{2}-1}e^{-x}dx=\int_0^{\infty}\frac{1}{\sqrt{x}}e^{-x}dx=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

であることによる。この積分計算は簡単ではない。(7) 式の 2 乗関数を考え、重積分を極座標変換して求め、その平方根として (7) の結果を得る。

(2) 式を形式的に拡張すれば任意の $\alpha+1>0$ なる実数に対して階乗が定義でき、例えば

(8) $$\left\{\begin{array}{l}\left(-\frac{1}{2}\right)!=\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}\\ \left(\frac{1}{2}\right)!=\Gamma\left(1+\frac{1}{2}\right)=\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\\ \text{一般に、負の小数の階乗を考えると、}0<\beta<1\text{ に対して}\\ (-\beta)!=\Gamma(1-\beta)\end{array}\right.$$

形式的にこのような階乗も定義できる。

$\alpha>1$ がかなり大きい数場合、(2) の関係によっていつでも $0<\alpha\le 1$ の範囲に収めることが出来るので古来 Γ 関数に関しては $0\le\alpha\le 1$ の範囲、すなわち $\Gamma(x+1)$ において $0\le x\le 1$ について詳しく計算され、数表や近似式が研究されてきた。ヘスティング等 ($Hasting,\ et.\ al.$) による最良近似式[3]、[2]、[4] が求められていて、x の 5 乗の最良多項式は、

(9) $$\Gamma(x+1)=1+\sum_{k=1}^{5}a_kx^k+\epsilon(x)\qquad|\epsilon(x)|\le 5\times10^{-5}$$

$$\begin{array}{lclclcl}a_1&=&-0.548646&&a_4&=&0.4245549\\ a_2&=&0.9512363&&a_5&=&-0.1010678\\ a_3&=&-0.6998588&&&&\end{array}$$

x の 8 乗の最良多項式については以下の通りである。

(10) $$\Gamma(x+1)=1+\sum_{k=1}^{8}b_kx^k+\epsilon(x)\qquad|\epsilon(x)|\le 3\times10^{-7}$$

$$\begin{array}{lclclcl}b_1&=&-0.577191652&&b_5&=&-0.756704078\\ b_2&=&0.988205891&&b_6&=&0.482199394\\ b_3&=&-0.897056937&&b_7&=&-0.193527818\\ b_4&=&0.918206857&&b_8&=&0.035868343\end{array}$$

ここでいう階乗というのは、ある数に対して順次 1 を引いた数字を掛けて求めてきたが、ある数に対し、順次 1 を加えた数を掛けてゆく階乗も考えられる。通常の階乗は順次引いていって 1 で終わり、0!を 1 と定義しているので終わりが存在するが、1 を加えたものを掛けてゆく場合は終わりが存在しないので幾つの積をとるかを指定しなければならない。そこで、

(11) $x^{(k)} = x(x+1)(x+2)\cdots(x+k-1)$

(12) $x_{(k)} = x(x-1)(x-2)\cdots(x-k+1)$

なる 2 つの階乗を定義し、(11) を上昇階乗 ($Up\ Factorial$)、(12) を下降階乗 ($Down\ Factotial$) もしくは通常の階乗 ($Factorial$) と名づけることにする。なお、(11) 式について $(x)_k$ という書き方があり、この表現はポッホハマー (Pochhammer) の記法と呼ばれているが、上昇と下降の階乗が同時に出てくるので、分かり易くするために上付き添え字と下付き添え字を使うことにした。というわけで、これ以降、上付き括弧 k で上昇階乗、下付き括弧 k で下降階乗を表わすことにする。

x が負の場合、(－ 1) を乗じることによって (11) は (12) に、(12) は (11) に変えることができることに注意しよう。

３．2 項係数と超幾何分布

次の式は組み合わせ数、と 2 項係数を式で表わしたものであるが、この両式は同じものであるかどうか検討してみて欲しい。

(13) $${}_nC_k = \frac{n!}{k!(n-k)!} \qquad : \quad \text{組み合わせ数}$$

(14) $$\begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix} = \frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!} = \frac{n_{(k)}}{k!} \qquad : \quad 2\ \text{項係数}$$

2 項展開における使い方を見てみよう。

(15) $$(a+b)^n = \sum_{k=0}^{n} {}_nC_k a^k b^{n-k}$$

(16) $$(a+b)^n = \sum_{k=0}^{n} \begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix} a^k b^{n-k}$$

上の 2 つの式は全く同じに見えるが、実は n が正の整数のときは同じであるが、(14)、(16) 式の n は正の整数である必要はなく、負でも小数でも成り立つのである。分かり易くかくと、

(17) $$(x+1)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} -1 \\ k \end{pmatrix} x^k = 1 - x + x^2 - x^3 + x^4 + \cdots$$

はよく知られた式である。(16) 式の和は n までの和になっているが、k は 0 から無限大までの和でもよく、このとき 2 項係数は k が n 以上のときは全てゼロになってしまうことに注意しよう。つまり、(14) 式の $n_{(k)}$ は n が正の整数であれば $n \geq k$ のとき値を持ち、$n < k$ では全てゼロになる係数なのである。(13) 式では n、k ともに正の整数で、勿論 $n \geq k$ でなければならないが、(14) は k だけが負でない整数で、n が実数の場合どんな k に対しても存在するので、(17) のような級数展開 (無限級数展開) が可能なのである。

さて、ここで超幾何分布の確率を組み合わせ数を使って表現してみる。いま、壷の中に m 個の赤いボールと白いボール $(n-m)$ 個が混ざって、合計 n 個のボールが入っている。この壷の中からランダムに r 個のボールを取り出し、その中に k 個の赤いボールが含まれる確率を計算してみる。ボールには全て番号が振られているものとして確率を考える。まず、r 個

取り出したボールのうち、赤いボールが k 個含まれる場合の数は、m 個の赤いボールの中から k 個のボールを選ぶ場合の数、つまり ${}_mC_k$ 通りある。このとき白いボールの数は $(r-k)$ 個となるので、白いボールが $(r-k)$ 個選ばれる場合の数は $(n-m)$ 個の中から $(r-k)$ 個のボールを取り出す組み合わせの数、${}_{n-m}C_{r-k}$ 通りあるので、r 個取り出したボールのうち、赤いボールが k 個、かつ白いボールが $(r-k)$ 個含まれる場合の数は ${}_mC_k \times {}_{n-m}C_{r-k}$ 通りとなる。ところで n 個のボールから r 個のボールを取り出す全ての場合の数は ${}_nC_r$ 通りであるから、求める確率 $f(k)$ は、

$$(18)\qquad f(k) = \frac{{}_mC_k \times {}_{n-m}C_{r-k}}{{}_nC_r}$$

で表わされる。これが超幾何分布といわれる確率の式で、

$$(19)\qquad \sum_{k=0}^{r} {}_mC_k \times {}_{n-m}C_{r-k} = {}_nC_r$$

であるから、$\sum_{k=0}^{r} f(k) = 1$ が成立する。

ここでは n、m、k、r は正の整数として組み合わせ数を使ったが、2 項係数は組み合わせ数を拡張したものであるから、(19)、(20) 式に 2 項係数を用いると、一般に n、m は実数でもよく、(16) 式の和も有限個である必要はなく、無限大までの和をとっても同じである。

次に、超幾何分布の確率母関数を求めてみる。勿論、特性関数は $s = e^{it}$ として計算すればよい。

$$\begin{aligned}
(20)\qquad E(s^k) &= E\left\{\sum_{k=0}^{\infty} f(k)s^k\right\} = \sum_{k=0}^{r} \frac{{}_mC_k \times {}_{n-m}C_{r-k}}{{}_nC_r} s^k \\
&= \sum_{k=0}^{r} s^k \frac{m!}{k!(m-k)!} \cdot \frac{(n-m)!}{(r-k)!(n-m-r+k)!} \Big/ \frac{n!}{r!(n-r)!} \\
&= \sum_{k=0}^{r} s^k \frac{m(m-1)\cdots(m-k+1)!}{k!} \\
&\times \frac{(n-m)(n-m-1)\cdots(n-m-r+k+1)(n-m-r+k)\cdots(n-m-r)\cdots 3\cdot 2\cdot 1}{(n-m-r+k)!(r-k)!} \\
&\Big/ \frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{r!} \\
&= \sum_{k=0}^{r} s^k \frac{m_{(k)}}{k!} \times \frac{(n-m)_{(r)}}{(n-m-r+1)^{(k)}(r-k)!} \Big/ \frac{n_{(r)}}{r!} \\
&= (n-m)_{(r)} \sum_{k=0}^{r} s^k \frac{m_{(k)}}{k!} \cdot \frac{r_{(k)}}{(n-m-r+1)^{(k)}} \Big/ n_{(r)} \\
&= \frac{(n-m)_{(r)}}{n_{(r)}} \sum_{k=0}^{r} \frac{s^k}{k!} \frac{m_{(k)} r_{(k)}}{(n-m-r+1)^{(k)}}
\end{aligned}$$

サンメンション (和) の中では、各項において分子が 2 つとも下降階乗で、分母だけが上昇階乗で表わされている。そしてこれが超幾何級数で表わせることなど、次回に述べることにするが、どのように表現できるか是非試みていただきたい。

4．ガンマ関数の J による関数と例題

ガンマ関数を計算するプログラムは $FORTRAN$ でかかれたものが 1972 年発行の「統計数値表-JIS-1972」[4] に詳しく載っているし、チェックのための詳しい真値を知ることもできる。当時は東大の大型計算機で 4 倍精度の計算が可能であったので 20 桁までの正確な値を計算することが出来たからである。

```
NB.*******************************
NB.*  Gamma and LnGamma Function *
NB.*******************************
NB. Stirling's Formula for Gamma Function
Gamm_St=:3 : 0
(^-y)*(y^y-0.5)*(%:2p1)*1+(%12*y)+(%288*y^2)-(139%51840*y^3)+571%2488320*y^4
)
NB. Stirling's Formula for LogGamma Function
Lgamm_St=:3 : 0
(((y-0.5)*(^.y))-y)+(0.5*^.2p1)+(%12*y)-(%360*y^3)-(%1260*y^5)-%1680*y^7
)
NB. Gamma(1+y)     Range [ 0 <: y <: 1 ]  ===>  Gamma(y)=Gamma(1+y)/y
NB. Hastings' 5-th Polynomial Approximation Formula(0<:y<:1) |e(y)|<5e^-5
Gamm_H5=:3 : 'y%~1 _0.5748646 0.9512363 _0.6998588 0.4245549 _0.1010678 p.y'
NB. Hastings' 8-th Polynomial Approximation Formula(0<:y<:1) |e(y)|<3e^-7
Gamm_H8=:3 : 0
b_1=._0.577191652 0.988205891 _0.897056937 0.918206857
b_2=._0.756704078 0.482199394 _0.193527818 0.035868343
y%~(1,b_1,b_2)p.y
)
```

● スターリングの公式

```
   Gamm_St >:i.10
0.999499 0.999979 1.99999 6 24 120 720 5040 40320 362880

   Lgamm_St >:i.10
_0.000307499 _1.10022e_6 0.693147 1.79176 3.17805 4.78749 6.57925 8.52516
 10.6046 12.8018

   ^Lgamm_St >:i.10
0.999693 0.999999 2 6 24 120 720 5040 40320 362880
```

αが 2〜3 ぐらいから結構正しい値を得ることができ、この式の収束の早さがわかる。

実際、αが 7 以上のときなど、ベルヌーイ数？をここまで (4 項) とる必要はないかも知れない。

対数ガンマも同様に収束が早いことがわかるであろう。

● ガンマ関数の最良近似式

```
   Gamm_H5 0.1*>:i.10
9.51367 4.59062 2.9915 2.21824 1.77254 1.4892 1.298 1.16419 1.06866 1
```

```
   Gamm_H8 0.1*>:i.10
9.51351 4.59084 2.99157 2.21816 1.77245 1.48919 1.29806 1.16423 1.06863 1

   precision 9
   Gamm_H5 0.5
1.77254148

   Gamm_H8 0.5
1.77245399

   %:1p1
1.77245385
```

数表によると、
1.7724538509055160273

```
   %:1p1
1.7724538509055159
```

J では 16 ないし 17 桁正確に計算していることが分かる。

【参考文献】

【1】西川利男（2010）：　超幾何級数と J のコード解析およびその利用　JAPLA 研究会 2010.2.27 資料

【2】Abramowitz, M., and Stegun, I.A.(1964)　：　Handbook of Mathematical Functions、National Bureau of Standards Applied Mathematics Series #55, U. S. Government Printing Office

【3】Hastings,C.,Jr.(1955)　：　Approximations for Digital Computers, Princeton Univ. Press, Princeton,N.J.

【4】山内二郎編（1997)：　統計数値表 JIS 1972　日本規格協会、離散分布 (解説) および付録のサブルーチンプログラム

【5】J Help Vocabulary　：　J 言語の Vocabulary テーブルの中の H. Hypergeometric