ランダム行列とジニブル点過程

物理学科４年　松井　貴都

このポスターでは最近話題となっているランダム行列理論ついて、ポアソン点過程とジニブル点過程の比較を行いランダム行列理論の紹介としたい。

ポアソン点過程

まず理想気体における統計力学を考える。n [mol] の気体粒子が存在するときその粒子数は $N = nN_A$ とかける (N_A はアボガドロ定数 $N_A = 6.02 \times 10^{23}$ である)。 単位体積あたりの分子数を粒子数密度 $N/V = \rho$ で表すと、理想気体の状態方程式 $pV = nRT$ を用いて $p = k_B T\rho$ となる。ここである領域 Δ に注目しよう。Δ の体積を ν としてこの領域内にいる粒子の数を $N(\Delta)$ とする。理想気体の粒子は飛び回っていて領域内の粒子数は常に変化しているが、これが熱平衡状態にある場合はある関数に従って分布し、その平均、分散といった統計的性質を調べることが出来る。$n = 0, 1, 2...$ に対し $N(\Delta) = n$ となる確率は

$$P(n) = \frac{\lambda^n Z_n(T)}{\Xi(T,\lambda)} \tag{1}$$

で与えられる。λ はフガシティというパラメーターであり、Z_n と Ξ は分配関数と大分配関数である。(1) は確率分布であるから全確率の和は 1 であるから

$$\Xi(T,\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n Z_n(T) \tag{2}$$

統計力学では $p = \frac{k_B T}{\nu}\ln \Xi(T,\lambda)$ が一般に成り立つ。これと理想気体の状態方程式から導いた $p = K_B T\rho$ と比較することで

$$\Xi(T,\lambda) = e^{\rho\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\rho\nu)^n}{n!} \tag{3}$$

が成り立つ。2 番目から 3 番目については指数関数のマクローリン展開を用いた。(2) 式と比較すると

$$Z_n(T) = \frac{\rho\nu^n}{\lambda^n n!} e^{-\rho\nu} \tag{4}$$

を得る。よってこの式と (3) の第一等式を用いることで (1) 式は

$$P(n) = \frac{(\rho\nu)^n}{n!} e^{-\rho\nu} \tag{5}$$

とかけることがわかる。(5) 式のような確率分布関数で与えられる分布をパラメータ $\rho\nu$ のポアソン分布という。 他の有界領域についても考えてみる。互いに共通部分持たない有界領域 m 個を $\Delta_1, \Delta_2, ..., \Delta_m$ としその体積を $\nu_1, \nu_2, ..., \nu_m$ であるとすると、ある領域 Δ_i のなかに存在する粒子の個数を $N(\Delta_i), i = [1, m]$ と表そう。理想気体は粒子間相互作用はないため、各領域での相関はなくそれぞれ独立な分布を取る。このことから $N(\Delta_i) = n_i$ は

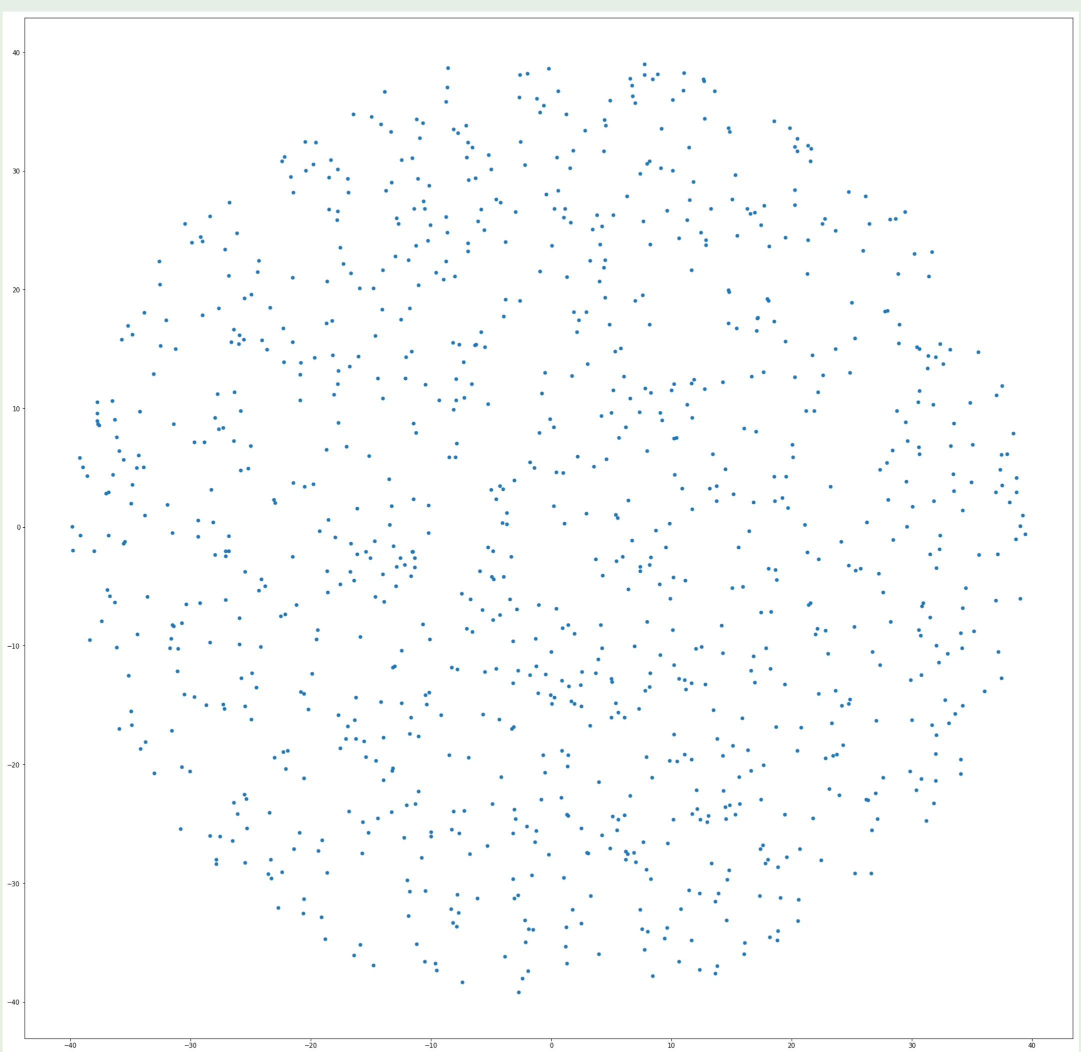
$$\prod_{i=1}^{m} P(n_i) = \prod_{i=1}^{m} \left\{ \frac{(\rho\nu)^n}{n_i!} e^{-\rho\nu} \right\} \tag{6}$$

となる。任意の m と $\Delta_1, \Delta_2, ..., \Delta_m$ について (6) 式で分布が与えられるとき、この点の集団を密度 ρ のポアソン点過程という。あくまで統計集団に対しての名称であって、時間発展についてのものではないことに注意する。

ではこの確率法則に従う点の分布はどうなっているだろうか。

ポアソン点過程

図はポアソン点過程に従う乱数を円状に 1000 点分布させたものである。



密と疎な部分が目立ち不均等である。これは各領域 Δ_i の中にある点の個数の平均値はそれぞれの領域の点の個数とその確率分布の積の和が

$$\langle N(\Delta_i)\rangle = \sum_{n_i=0}^{\infty} n_i P(n_i) \tag{7}$$

になるため、これを (5) 式を代入しマクローリン展開を行うと、$\langle N(\Delta_i)\rangle = \rho\nu_i$ と平均値が求まる。粒子数密度の平均は $\langle \frac{N(\Delta_i)}{\nu_i}\rangle = \frac{\rho\nu_i}{\nu_i} = \rho$ となり、i に依存しない。すなわち各領域には一様に点が分布することを表し、このことポアソン点過程が空間的に一様な分布 (一様分布) であると言える。したがって上図に表れる不均一性は "ゆらぎ" の効果、または "偶然" によるものであると考えなければならない。

正規分布とジニブル点過程

正規分布は離散的な分布を示すポアソン分布に対し、連続的な値の分布を示す。

$$p(\mu,\sigma^2)(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} \tag{8}$$

独立な変数 X_1 と Y_1 を用意する。どちらも平均 0、分散が σ^2 の正規分布 $N(0,\sigma^2)$ に従う乱数とする。虚数 $i = \sqrt{-1}$ を用いて $Z_j = X_j + iY_j$ とすると一つの複素数の乱数を表せる。この Z を N^2 個用意しそれを縦横 N 個ずつ配置した行列 $\mathbf{Z}$ を定義する。

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} Z_1 & Z_2 & \ldots & Z_N \\ Z_{N+1} & Z_{N+2} & \ldots & Z_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{(N-1)N+1} & Z_{(N-1)N+2} & \ldots & Z_{N^2} \end{pmatrix}$$

このような成分にランダムな値を取る行列をランダム行列という。この行列は上三角行列 $\mathbf{T}$ とユニタリ行列 $\mathbf{U}$ を用いて

$$\mathbf{Z} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{\dagger} \tag{9}$$

という形に書き直せる。この $\mathbf{T}$ の対角成分は $\mathbf{Z}$ 固有値 $\Lambda_j = Re\Lambda_j + iIm\Lambda_j$ である。この固有値の点の分布はどうなるのか。正規分布の確率密度の確率分布の単位として、確率密度にルベーグ測度 dx をかけた $p(0,\sigma^2)(x)dx$ を定義する。これを確率測度という。ランダム行列の各成分の実部 x_j と虚部 y_j はそれぞれ独立であるから, その確率測度は

$$\prod_{j=1}^{N^2} p(0,\sigma^2)(x_j)p(0,\sigma^2)(y_i)dx_i dy_i \tag{10}$$

で与えられる。しかし $\mathbf{Z}$ の確率測度はこの様なシンプルな形ではない。

(9) 式で与えたれたランダム行列の間のユニタリ変換に対応し $(x_j, y_j)_{j=1}^{N^2}$ の関数として与えられた確率測度から、N 個の固有値 $\lambda_{j\,j=1}^{\,N}$、$\mathbf{T}$ の対角成分以外の成分 $t_{jk(1\le j\le k\le N)}$ およびユニタリ行列 $\mathbf{U}$ の各成分を表す複素関数のとしての確率測度をうまく変化する必要がある。この変数変換を正しく行えば、(10) 式は次のような形になる。

$$\prod_{1\le j\le l\le N} |\lambda_l - \lambda_k|^2 \prod_{j=1}^{N} \{e^{|\lambda_j|^2/2\sigma^2} d\lambda_j d\overline{\lambda_j}\} \times \prod_{1\le p\le N} \{e^{-|t_{pq}|^2/2\sigma^2} dt_{pq} d\overline{t_{pq}}\} \times d\mathbf{U} \tag{11}$$

d$\mathbf{U}$ はユニタリ行列に対するルベーグ測度といわれるものである。$\lambda_{j\,j=1}^{\,N}$ 以外の変数については積分して均すことで $\mathbf{Z}$ の固有値 $(\Lambda_j)_{j=1}^{N}$ に対する確率測度が求められる。

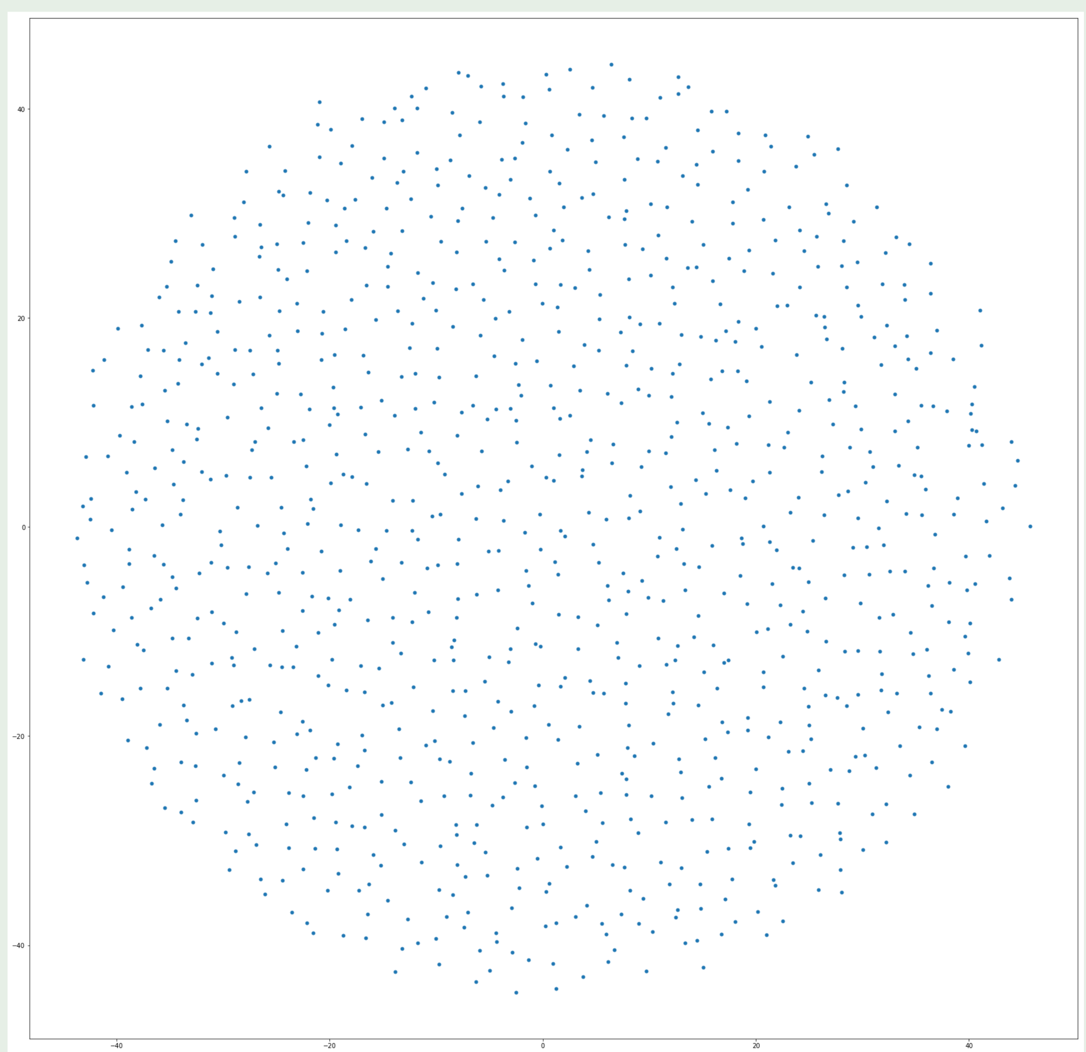
複素平面を 2 次元平面とみなし、その平面上の点の座標を固有値の実部 $X_j^G = Re\Lambda_j$ と虚部 $Y_j^G = Im\Lambda_j$ と対応させる。この N 個の点 $(X_j^G, Y_j^G)_{j=1}^{N}$ の確率密度は

$$c_N(\sigma^2) \prod_{1\le k\le l\le N} \{(x_l - x_k)^2 + (y_l - y_k)^2\} \times \prod_{j=1}^{N} p(0,\sigma^2)(x_j)p(0,\sigma^2)(y_j) \tag{12}$$

$c_N(\sigma^2)$ は規格化因子である。この確率密度で表現される 2 次元平面上の点分布はジニブル点過程とよばれる。相互作用粒子系の配置を表す。

ジニブル点過程

ジニブル点過程の点分布は下図になる。左図との対比のため $N = 1000$ とした。



行列 Z の成分の正規分布は平均 0, 分散 $\sigma^2 = 0$ とした。(12) 式を見ると、各点間の距離の 2 乗を与える因子 $\{(x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2\}$ がすべての点に対し掛けられている。この因子のために『偶然に点の配置が偏る』ことが回避される。

参考文献

- M. Katori: Bessel Process, Schramm-Loewner Evolutionm and the Dython Model, Springer (2015)
- 香取　眞理：「偶然を科学する 統計力学と確率論」『数理科学』 ２０１６年４月号 (No.634), pp.30-36, サイエンス社