

数分散の厳密表式に基づく 超一様行列式点過程の研究

中央大学大学院理工学部物理学専攻 香取研 M2 松井 貴都

目次

1. 超一様性とは
2. ランダム行列と行列式点過程
3. Heisenberg点過程族
4. Heisenberg点過程族の数分散
5. 数分散の厳密表式と主結果
6. まとめ

Matsui,T., Katori,M., Shirai,T.,
“Local number variances and hyperuniformity of the Heisenberg family
of determinantal point processes” (arXiv:math-ph/2012.10585)

Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical に掲載予定

1. 超一様性とは

超一様性: 点や粒子の配置に対する, 局所的な点の個数の分散を特徴づける概念

結晶, 準結晶, 無秩序点過程等を定量的に分類し, 構造的に特徴づける統一的手段を提供する

近年では材料工学, 凝縮系物理学において盛んに研究が行われている
→様々な分野で超一様性と関連が報告されている

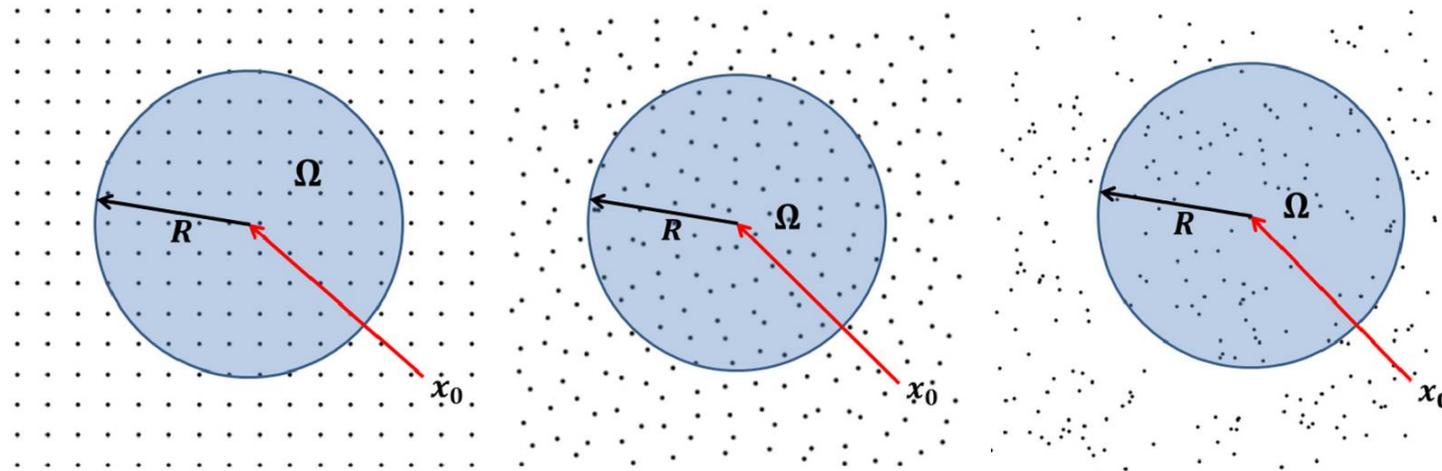


図1: 領域に含まれる点の分布図. 左から格子, 超一様性を持つ点過程, Poisson点過程 [1]

[1] Torquato, S., 2018, Hyperuniform states of matter. Phys. Rep **745**, 1–95

1. 超一様性とは

本研究では数理モデルを導入し、統計力学的、確率論的な観点から超一様性を研究した

d 次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^d , あるいは D 次元複素空間 \mathbb{C}^D を基本空間 S とし、参照測度 $\lambda(dx)$ を与える. S 上に並進移動不変な無限点過程 Ξ を考える

- ・領域 Λ に含まれる点の数の期待値は体積に比例: $\mathbf{E}[\Xi(\Lambda)] \propto \text{vol}(\Lambda)$
- ・領域 Λ に含まれる点の数の分散: $\text{var}[\Xi(\Lambda)] := \mathbf{E}[(\Xi(\Lambda) - \mathbf{E}[\Xi(\Lambda)])^2]$

数分散 (number variance): 点過程における局所的な点の数の分散

点の数の密度を定量的に表す統計量. 数分散のふるまいを調べることで系の構造を明らかにすることができる

無限ランダム点過程の**超一様性**は次のように定義される

$$\lim_{\Lambda \rightarrow S} \frac{\text{var}[\Xi(\Lambda)]}{\mathbf{E}[\Xi(\Lambda)]} = 0$$

数分散の増大が領域 Λ の体積の増大よりも遅く増大する性質

領域 $\Lambda \subset S$ に含まれる点の数を $\Xi(\Lambda)$ と書く

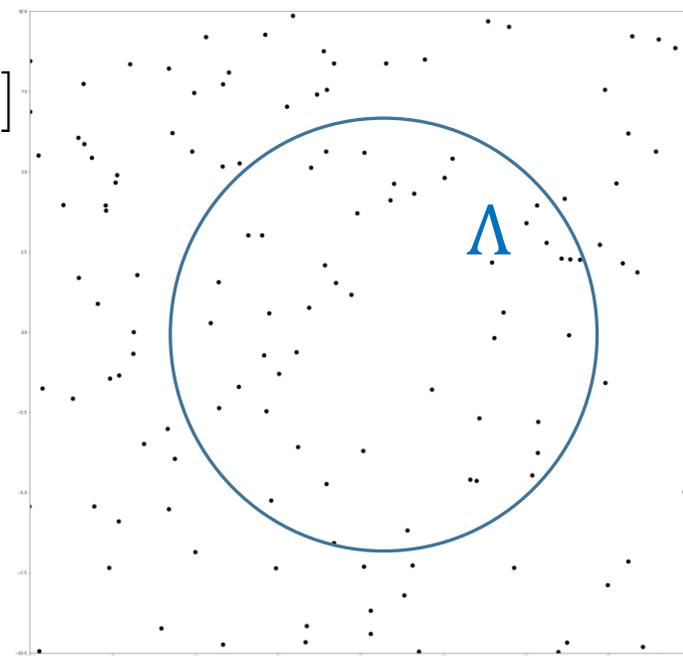


図2: 領域 Λ と点過程の模式図

1. 超一様性とは

ここで,

- ・基本空間 S を d 次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^d
- ・領域 Λ を半径 R の d 次元球 $\mathbb{B}_R^{(d)}$

とすれば, 超一様性は次のように定義できる

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\text{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})]}{\mathbf{E}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})]} = 0$$

Torquato [1] に従うと, 超一様性は3つに分類される

Class I : $\text{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] \asymp R^{d-1},$

Class II : $\text{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] \asymp R^{d-1} \log R,$

Class III : $\text{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] \asymp R^{d-\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad R \rightarrow \infty$

Class I	完全結晶, 多くの準結晶, 一成分プラズマ, Ginibre点過程, etc
Class II	いくつかの準結晶, Riemannのゼータ関数の零点, Fermi球点過程, 最大ランダム充填構造, etc
Class III	ランダム集団モデル, etc

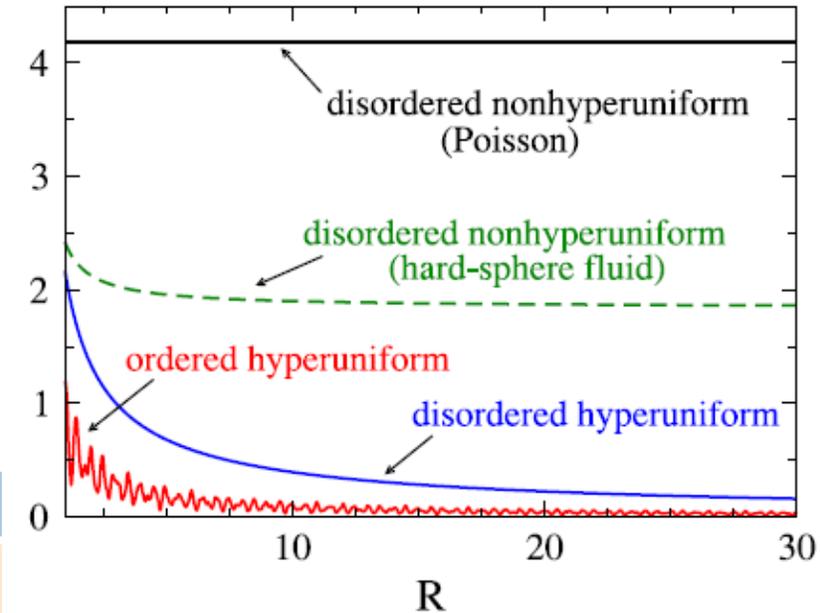


図3: R^3 にスケールされた数分散 [1]

- ・ **Poisson点過程**のような無秩序点過程の場合は体積のスケールになる : $\text{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] \asymp R^d$

[1] Torquato, S., 2018, Hyperuniform states of matter. Phys. Rep **745**, 1–95

2. ランダム行列と行列式点過程

超一様性を持つランダムな点過程の典型例は、**ランダム行列理論**に関連した**行列式点過程**

ランダム行列: 行列の各要素が何らかの確率分布に従う確率変数で与えられる行列

行列式点過程: 定義2.1で定義されるような、相関関数が行列式で定義される点過程

定義 2.1: 単純点過程 Ξ は、測度 λ に対する相関関数が一般に、可測な積分核 $K : S \times S \rightarrow \mathbb{C}$ を用いて n 点相関関数 ρ_n が次のように与えられるとき、**行列式点過程**といわれる。

$$\rho_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = \det_{1 \leq j, k \leq n} [K(x_j, x_k)], \quad \text{全ての自然数 } n \text{ に対して } x_1, \dots, x_n \in S$$

積分核 K は**相関核**(correlation kernel) とよばれる。

行列式点過程は点過程 Ξ と、相関核 K と、参照測度 λ の3つの量 (Ξ, K, λ) で指定する。

2. ランダム行列と行列式点過程

Class I の超一様性を持つ行列式点過程の典型例は、複素平面 \mathbb{C} 上の **Ginibre点過程** $(\Xi_{\text{Ginibre}}, K_{\text{Ginibre}}, \lambda_{\text{N}(0,1;\mathbb{C})})$

$$K_{\text{Ginibre}}(x, y) = e^{x\bar{y}}, \quad x, y \in \mathbb{C} \quad \lambda_{\text{N}(0,1;\mathbb{C})}(dx) := e^{-|x|^2} dx / \pi$$

Class I の超一様性を持つことは、すでに白井[2]が証明していて、Torquatoは数分散の厳密な表式も求めている[1]

$$\text{var}[\Xi_{\text{Ginibre}}(\mathbb{B}_R^{(2)})] = R^2 e^{-2R^2} [I_0(2R^2) + I_1(2R^2)], \quad R > 0$$

第1種変形Bessel関数

$$I_\nu(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! \Gamma(\nu + n + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n+\nu}, \quad x \in \mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$$

Ginibre点過程は負の相関を持つ点過程

- ・ネットワーク解析
- ・1成分プラズマ模型 で応用されている

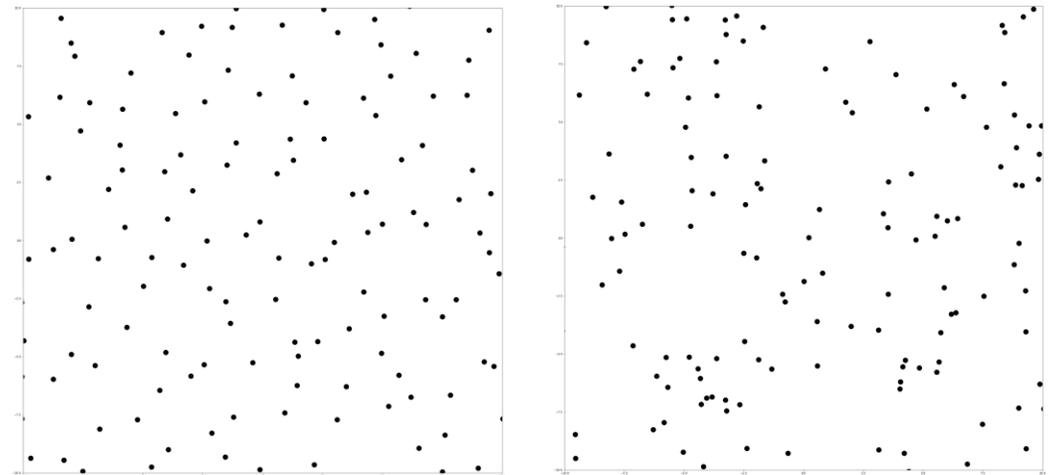


図4: \mathbb{C} 上の **Ginibre点過程**(左)と **Poisson点過程**(右)の比較

[1] Torquato, S., 2018, Hyperuniform states of matter. Phys. Rep **745**, 1–95

[2] Shirai, T., 2006, Large deviations for the fermion point process associated with the exponential kernel, J. Stat. Phys. **123**, 615–629

3. Heisenberg点過程族

本研究では, \mathbb{C} 上の Ginibre 点過程の **高次元拡張** を考える
→ D 次元複素空間 \mathbb{C}^D 上の **Heisenberg 点過程族**

Heisenberg 点過程族 の数分散と超一様性は不明だった

→ 本研究の目的は2つ

- ・ **数分散の厳密な表式を導出**
- ・ **大規模極限における数分散のふるまい(超一様性)を調べる**

3. Heisenberg点過程族

定義3.1: Heisenberg点過程族は、次元 $D \in \mathbb{N}$ を径数とした行列式点過程 $(\Xi_{H_D}, K_{H_D}, \lambda_{N(0,1;\mathbb{C}^D)})$ の1径数族である。各 D に対して、相関核は次のように与えられる。

$$K_{H_D}(x, y) = e^{x\bar{y}}, \quad x, y \in \mathbb{C}^D$$

\mathbb{C} 上 Ginibre 点過程の参照測度: $\lambda_{N(0,1;\mathbb{C})}(dx) := e^{-|x|^2} dx / \pi$

\mathbb{C}^D では次のように拡張される:

$$\lambda_{N(0,1;\mathbb{C}^D)}(dx) = \frac{1}{\pi^D} e^{-(|x_R|^2 + |x_I|^2)} dx_R dx_I$$

\mathbb{C}^D 上の半径 R の円板 $\{x \in \mathbb{C}^D : |x| < R\}$ と、 \mathbb{R}^d 上の球 \mathbb{B}_R^d は $d = 2D$ とすれば同一視できる

→ d 次元球における超一様性の評価ができる

\mathbb{C}^D 上の x は $x = (x^{(1)}, \dots, x^{(D)})$ で、

$$x^{(\ell)} = \operatorname{Re}x^{(\ell)} + \sqrt{-1}\operatorname{Im}x^{(\ell)}, \quad \ell = 1, \dots, D$$

となる。この複素構造を明示するため、

$$x_R = (\operatorname{Re}x^{(1)}, \dots, \operatorname{Re}x^{(D)}),$$

$$x_I = (\operatorname{Im}x^{(1)}, \dots, \operatorname{Im}x^{(D)}) \in \mathbb{R}^D$$

とすると、 x は次のように書ける

$$x = x_R + \sqrt{-1}x_I$$

4. Heisenberg点過程族の数分散

数分散の導出は、2点相関関数から得られる
構造因子と交差体積を用いる

- 2点相関関数 $\rho_2(x, y)$ は、動径分布関数 $g_2(x)$ と単位体積あたりの数密度 $\tilde{\rho}$ を用いて次のように書ける

$$\rho_2(x, y) = \tilde{\rho}^2 g_2(x - y), \quad x, y \in \mathbb{R}^d$$

行列式点過程の定義より

$$\rho_2(x, y) = \det[K(x, y)]$$

- 動径分布関数から全相関関数を定義する

$$C(x) = g_2(x) - 1, \quad x \in \mathbb{R}^d$$

$x \rightarrow \infty$ のときは $C(x) \rightarrow 0$ なり、
2点間の相関が消失することを表す

- 全相関関数から構造因子を定義する

$$\hat{S}(k) = 1 + \tilde{\rho} \hat{C}(k), \quad k \in \mathbb{R}^d$$

$\hat{C}(k)$ は全相関関数のFourier変換

4. Heisenberg点過程族の数分散

球 $\mathbb{B}_R^{(d)}$ の指示関数を次のように与える

$$1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(x) := \begin{cases} 1, & \text{if } x \in \mathbb{B}_R^{(d)}, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

領域 $\mathbb{B}_R^{(d)}$ に含まれる点の数の期待値は, d 次元球の体積 $\text{vol}(\mathbb{B}_R^{(d)})$ を用いて次のように書ける

$$\mathbf{E}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] = \tilde{\rho} \int_{\mathbb{R}^d} 1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(x) dx = \text{vol}(\mathbb{B}_R^{(d)}) \tilde{\rho}$$

また, 指示関数を用いて **交差体積** を次のように与える

$$\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(x) = \int_{\mathbb{R}^d} 1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(y) 1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(y - x) dy, \quad x \in \mathbb{R}^d$$

この交差体積のFourier変換を $\widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(k)$ とすると数分散は次のように書ける

$$\text{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] = \frac{\tilde{\rho}}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(|k|) \widehat{S}(k) dk$$

d 次元球の体積は

$$\text{vol}(\mathbb{B}_R^d) = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2 + 1)} R^d$$

と計算できる

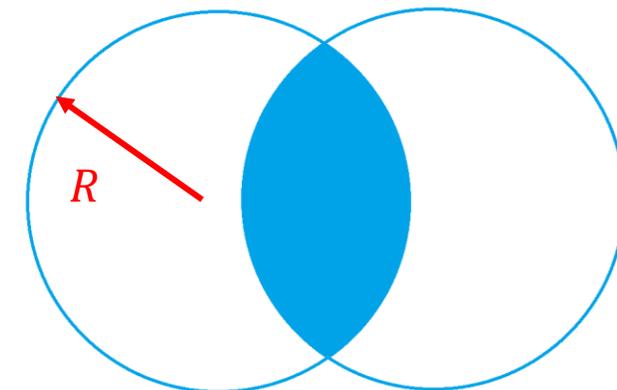


図5: 交差体積の模式図
これは球の重なり部分の体積を表す

交差体積と構造因子のFourier変換は,
動径関数のFourier変換を用いて計算できる

4. Heisenberg点過程族の数分散

補題 4.1: 可積分関数 $\varphi(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$ が動径関数, すなわち $r = |x| = \sqrt{\sum_{\ell=1}^d (x^{(\ell)})^2}$ のみに依存していて $\varphi(x) = f(r)$ と表せるとき, Fourier変換は $\kappa = |k|$ を用いることで

$$\widehat{\varphi}(k) = \widehat{f}(\kappa) = \frac{(2\pi)^{d/2}}{\kappa^{(d-2)/2}} \int_0^\infty r^{d/2} J_{(d-2)/2}(\kappa r) f(r) dr$$

逆変換は $\varphi(x) = f(r) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} r^{(d-2)/2}} \int_0^\infty \kappa^{d/2} J_{(d-2)/2}(\kappa r) \widehat{f}(\kappa) d\kappa$

このことを用いると, $\widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(k)$ は次のように計算できる

$$\widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(k) = (2\pi)^d R^d \frac{J_{d/2}(\kappa R)^2}{\kappa^d}, \quad k \in \mathbb{R}^d, \quad \kappa = |k|$$

構造因子が動径関数で, $\kappa = |k|$ を使って $\widehat{S}(k) = \widehat{s}(\kappa)$ と書けるとき, 数分散は次のように書ける

$$\text{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] = \frac{2\pi^{d/2} \tilde{\rho}}{\Gamma(d/2)} R^d \int_0^\infty \frac{J_{d/2}(\kappa R)^2}{\kappa} \widehat{s}(\kappa) d\kappa$$

第1種Bessel関数

$$J_\nu(x) = \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(n + \nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n + \nu}$$

動径関数に対しては, Lebesgue測度は

$$dx = r^{d-1} \sigma_{d-1} dr, \quad \sigma_{d-1} = 2\pi^{d/2} / \Gamma(d/2)$$

と極座標表示できるため, これを適用した.

4. Heisenberg点過程族の数分散

補題 4.2: \mathbb{C}^D 上のHeisenberg点過程族 $(\Xi_{H_D}, K_{H_D}, \lambda_{N(0,1;\mathbb{C}^D)})$, $D \in \mathbb{N}$ の行列式点過程は $S = \mathbb{C}^D \simeq \mathbb{R}^d$, $d = 2D$ に対し,次の2つの式が成り立つ

$$\tilde{\rho} = \pi^{-D}$$

$$C(x) = c(|x|) = -e^{-|x|^2}$$

得られた全相関関数を,
動径関数のFourie変換を用いて
計算することにより

$$\widehat{S}(k) = \widehat{s}(\kappa) = 1 - e^{-\kappa^2/4}$$

を得る

命題 4.3: Heisenberg点過程族 $(\Xi_{H_D}, K_{H_D}, \lambda_{N(0,1;\mathbb{C}^D)})$, $D \in \mathbb{N}$ においては,
次の2つの式が成り立つ

$$\mathbf{E}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{2D})] = \frac{R^{2D}}{D!}$$

$$\text{var}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{2D})] = \frac{2R^{2D}}{(D-1)!} \int_0^\infty \frac{J_D(\kappa R)^2}{\kappa} (1 - e^{-\kappa^2/4}) d\kappa, \quad R > 0$$

修論中間発表では
命題 5.2 の表式しか求まっていなかった

→今回新たに定理 5.1の表式を導出できた

5. 数分散の厳密表式と主結果

定理 5.1: D 次元複素数空間 \mathbb{C}^D 上のHeisenberg点過程族 $(\Xi_{H_D}, K_{H_D}, \lambda_{N(0,1;\mathbb{C}^D)})$, $D \in \mathbb{N}$ に対して次が成り立つ

$$\text{var}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})] = \frac{R^{2D} e^{-2R^2}}{D!} \left[I_0(2R^2) + 2 \sum_{n=1}^{D-1} I_n(2R^2) + I_D(2R^2) \right], \quad R > 0$$

命題 5.2: Heisenberg点過程族 $(\Xi_{H_D}, K_{H_D}, \lambda_{N(0,1;\mathbb{C}^D)})$ の数分散は次の別表現を持つ

$$\text{var}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})] = \frac{R^{2D}}{\Gamma(D+1)} \left[1 - \frac{R^{2D}}{\Gamma(D+1)} {}_2F_2(D, D+1/2; D+1, 2D+1; -4R^2) \right]$$

${}_2F_2$ は一般化超幾何関数を表し, $(a)_n$ はPochhammer 記号を表す

$${}_2F_2(a_1, a_2; b_1, b_2; x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)_n (a_2)_n x^n}{(b_1)_n (b_2)_n n!}$$

$$(a)_0 := 1, (a)_n := a(a+1)(a+2) \cdots (a+n) := \Gamma(a+n)/\Gamma(a)$$

命題5.2の形では, $R \rightarrow \infty$ としたとき
超幾何関数の定義から数分散は発散する

→ 定理5.1の形なら, 大規模極限における
数分散のふるまいを調べることができる

5. 数分散の厳密表式と主結果

定理 5.3: Heisenberg点過程族 $(\Xi_{H_D}, K_{H_D}, \lambda_{N(0,1;\mathbb{C}^D)})$, $D \in \mathbb{N}$ は, $R \rightarrow \infty$ とする大規模極限において次が成り立つ

$$\lim_{R \rightarrow \infty} R \frac{\text{var}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{2D})]}{\mathbf{E}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{2D})]} = \frac{D}{\sqrt{\pi}}$$

Class I の超一様性を持つことを示しただけでなく、
係数も厳密に決定できた

したがって, すべての $D \in \mathbb{N}$ において Class I の超一様性を持つ. さらに $R \rightarrow \infty$ において次の漸近展開が成り立つ

$$\frac{\text{var}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]}{\mathbf{E}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]} \sim \frac{D}{\sqrt{\pi}} R^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha_k(D)}{(2k+1)k!2^{4k}} R^{-2k}, \quad R \rightarrow \infty$$

$$\alpha_k(D) = \begin{cases} 1, & \text{if } k = 0, \\ \prod_{\ell=-k+1}^k (2D + 2\ell - 1) & \text{if } k \in \mathbb{N}. \end{cases}$$

5. 数分散の厳密表式と主結果

$$\frac{\text{var}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]}{\mathbf{E}[\Xi_{H_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]} \sim \frac{D}{\sqrt{\pi}} R^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha_k(D)}{(2k+1)k!2^{4k}} R^{-2k}$$

注1: 漸近展開した際の各項の係数は次のとおり($k = 0, 1, 2, 3$)

$$\gamma_k^{(D)} := \frac{\alpha_k(D)}{(2k+1)k!2^{4k}}$$

$$\gamma_0^{(D)} = \frac{\alpha_0(D)}{1 \cdot 0!2^0} = 1,$$

$$\gamma_1^{(D)} = \frac{\alpha_1(D)}{1 \cdot 1!2^4} = \frac{1}{3 \cdot 2^4} (2D-1)(2D+1),$$

$$\gamma_2^{(D)} = \frac{\alpha_2(D)}{2 \cdot 2!2^8} = \frac{1}{5 \cdot 2! \cdot 2^8} (2D-3)(2D-1)(2D+1)(2D+3),$$

$$\gamma_3^{(D)} = \frac{\alpha_3(D)}{3 \cdot 3!2^{12}} = \frac{1}{7 \cdot 3! \cdot 2^{12}} (2D-5)(2D-3)(2D-1)(2D+1)(2D+3)(2D+5).$$

各項に規則性のある係数が出現

→Heisenberg点過程族の構造的な意味を表している可能性

6. まとめ

- Heisenberg点過程族の**数分散の厳密な表式**を計算した
→ 第1種変形Bessel関数を用いた表式と, 一般化超幾何関数を用いた2つの厳密な表式を導出した
- 得られた数分散の表式から, 大規模極限におけるふるまいを調べた
→ 任意の次元において**Class Iの超一様性**を持つことを示した
- 近年, 行列式点過程を**データサイエンスに応用する**研究が始まっている[4]
→ Heisenberg点過程族は高次元空間の行列式点過程であるため,
多成分データの新しい分類方法への応用が期待される

[3] Kulesza, A., Taskar, B., 2012 Determinantal Point Processes for Machine Learning. Foundations and Trends® in Machine Learning Vol. 5, Nos. 2–3 123–286© 2012 A.

ご清聴、ありがとうございました

5. 数分散の厳密表式と主結果

命題 5.4: 文献[3]の[Proposition 2.6]より, 行列式点過程の双対性(duality)の関係を利用することで, 球とは異なる領域でHeisenberg点過程族の数分散を評価できる.

\mathbb{C}^D 上の半径 R の多円盤(polydisk)を

$$\Delta_R^{(D)} := \{x = (x^{(1)}, \dots, x^{(D)}) \in \mathbb{C}^D : |x^{(i)}| < R, i = 1, \dots, D\}$$

とすると, 次の事が成り立つ

$$\frac{\text{var}[\Xi_{\text{HD}}(\Delta_R^{(D)})]}{\mathbf{E}[\Xi_{\text{HD}}(\Delta_R^{(D)})]} \sim \frac{D}{\sqrt{\pi}} R^{-1} \left[1 - \frac{D-1}{2\sqrt{\pi}} R^{-1} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{(D-1)(D-2)}{3\pi} - \frac{1}{8} \right\} R^{-2} + O(R^{-3}) \right], \quad R \rightarrow \infty$$

・上の式に R をかけた後 $R \rightarrow \infty$ の極限をとると, $D / \sqrt{\pi}$ が得られる

→球を領域とした場合と同様に, Class I の超一様性を示した

・第1項以外の係数は, 球で評価した場合とは異なる

→領域のとり方に応じて, 数分散のふるまいは変化している

[4]Katori, M., Shirai, T.: Partial isometries, duality, and determinantal point processes.

arXiv:PR/1903.04945

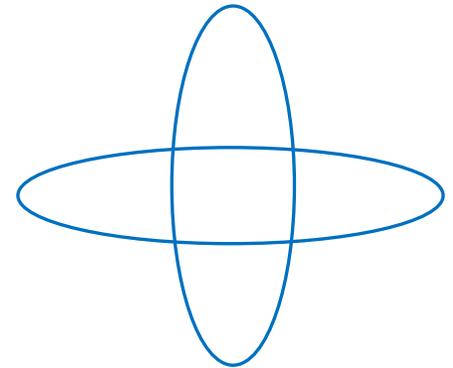


図6: 多円盤のイメージ図