数分散の厳密表式に基づく超一様行列式点過程の研究

Exact Expressions of Number Variances and Hyperuniformity of Determinantal Point Processes

物理学専攻　松井　貴都

Department of Physics. Takato Matsui

1　超一様性と Heisenberg 点過程族

超一様性 (hyperuniformity) とは, 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である．Torquato により 2003 年に提唱された [7]．結晶, 準結晶, 特殊な無秩序点過程等を定量的に分類し, その構造を特徴づけるための統一的な手段を提供することができる．材料工学あるいは凝縮系物理学において盛んに研究が行われ, 現在では様々な分野で超一様性との関連が議論されている．

本研究では, 数理モデルを導入し, 統計力学的, 確率論的観点から超一様性を研究した結果を報告する．

d 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N} := \{1, 2, \dots\}$ あるいは D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D$, $D \in \mathbb{N}$ を基本空間 S とし, $\lambda(dx)$, $x \in S$ を参照測度 (reference mesure) として与える．この S 上に無限点過程 (infinite point process) Ξ を考える．この点過程は, 無限個のランダムな点 X_i, $i \in \mathbb{N}$ 上のデルタ測度の和

$$\Xi = \sum_{i:i \in \mathbb{N}} \delta_{X_i}$$

として表される．ここで, デルタ測度 $\delta_X(\{x\})$ は, $x = X$ ならば 1 を, それ以外では 0 を与える．したがって, 領域 $\Lambda \subset S$ に入る点の数は

$$\Xi(\Lambda) := \int_\Lambda \Xi(dx) = \sum_{i:X_i \in \Lambda} 1$$

で与えられる．ここで, すべての有界な領域 $\Lambda \subset S$ に対して $\Xi(\Lambda) < \infty$ を仮定する．この仮定は, 点が局所的に集積することがなく, 参照測度 $\lambda(dx)$ に対して, 点過程は有限の密度 $\rho_1(x) < \infty$, $x \in S$ を持つことを表す．本研究では $\rho_1(x)\lambda(dx) = \text{const.} \times dx,\ x \in S$ となるような, 密度が一定かつ一様な点過程を考えるものとする．dx は S 上の Lebesgue 測度である．上記の仮定は, 有界な領域 Λ に含まれる点の数 $\Xi(\Lambda)$ の期待値は Λ の体積に比例することを表している．領域 Λ の体積を $\mathrm{vol}(\Lambda)$ と書くことにすると, この主張は $\mathbf{E}[\Xi(\Lambda)] \propto \mathrm{vol}(\Lambda)$ と表されることになる．ここで, 領域 Λ に含まれる点の数の分散 $\mathrm{var}[\Xi(\Lambda)]$ を

$$\mathrm{var}[\Xi(\Lambda)] := \mathbf{E}[(\Xi(\Lambda) - \mathbf{E}[\Xi(\Lambda)])^2]$$

と定義する．これは無限点過程 Ξ の局所的な領域 Λ に含まれる点の数のゆらぎを表し, これを “数分散” とよぶ．数分散は密度ゆらぎを定量的に表現する統計量であり, 領域 Λ の大きさの変化に応じて数分散がどのように振る舞うのかを調べることで, その系が持つ構造的な特徴を明らかにすることができる [5]．各点が無相関であり, 例えば Poisson 点過程で与えられる点過程であれば, その点過程の数分散は体積に比例する; $\mathrm{var}[\Xi(\Lambda)] \propto \mathrm{vol}(\lambda)$.

最近の凝縮系物理学やそれに関連した材料工学では, 大規模極限において相関粒子系での密度が異常に抑制されるとき, その系は “超一様” 状態になると言われている．無限点過程 Ξ が超一様性を持つとき, 次のことが成り立つ．

$$\lim_{\Lambda \to S} \frac{\mathrm{var}[\Xi(\Lambda)]}{\mathbf{E}[\Xi(\Lambda)]} = 0 \tag{1.1}$$

これは, 領域 Λ が系全体を覆うような大規模極限 $\Lambda \to S$ において, 数分散の増大が期待値の増大, すなわち領域の体積よりも遅いことを意味する.

ここで, 基本空間を d 次元ユークリッド空間 $S = \mathbb{R}^d$ とし, その空間中に $\Lambda = \mathbb{B}_R^{(d)}$, $d \in \mathbb{N}$ となるような領域を仮定する. $\mathbb{B}_R^{(d)}$ は $\mathbb{R}^d$ 上の半径 $R > 0$ の d 次元球 $\mathbb{B}_R^{(d)} := \{x \in \mathbb{R}^d : |x| \le R\}$ を表す. 上記の仮定により, この球に含まれる点の数 $\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})$ の期待値 $\mathbf{E}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})]$ は球の体積 $\mathrm{vol}(\mathbb{B}_R^{(d)})$ に比例し, その体積は

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

と与えられる. $\Gamma(z)$ は gamma 関数を表す. いま, d 次元球 $\mathbb{B}_R^{(d)}$ の半径 R を増大するような場合を考える. この場合, 大規模極限 $R \to \infty$ に伴う数分散の振る舞いに従って, 超一様性は次の 3 つの Class に分類される [5]

$$\begin{aligned} &\text{Class I}: && \mathrm{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] \asymp R^{d-1}, \\ &\text{Class II}: && \mathrm{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] \asymp R^{d-1} \log R, \\ &\text{Class III}: && \mathrm{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] \asymp R^{d-\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad R \to \infty. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Class I には, 完全結晶, 多くの準結晶, 1 成分プラズマ模型等が該当する. Class II には, いくつかの準結晶, Riemann のゼータ関数の零点が該当する. Class III にはランダム集団モデル等該当する. このように, 超一様性による多粒子系の分類は, 既存の分類とは異なる新たな分類を行うことが可能である. 特に, (1.1) と (1.2) より, 点過程が Class I の超一様性を持つときは

$$\lim_{R \to \infty} R \frac{\mathrm{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})]}{\mathbf{E}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})]} = \mathrm{const.}$$

が成り立つ.

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である. 一般に, 行列式点過程は 3 つの量の組み合わせ $(\Xi, K, \lambda(dx))$ で指定される. ここで, Ξ は点過程を表し, $\lambda(dx)$ は S 上で定義される参照測度で, K は相関核 (correlation kernel) とよばれる $S \times S \to \mathbb{C}$ の連続な関数である.

ランダム行列理論由来の無限点過程の典型例は, $S = \mathbb{C}$ 上の Ginibre 点過程 $(\Xi_{\mathrm{Ginibre}}, K_{\mathrm{Ginibre}}, \lambda_{N(0,1;\mathbb{C})})$ である. 相関核は $K_{\mathrm{Ginibre}}(x, y) = e^{x\overline{y}}$, $x, y \in \mathbb{C}$ で, 参照測度 λ は複素標準正規分布 $\lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C})}(dx) := e^{-|x|^2} dx/\pi$ である [2]. $\mathbb{C}$ 上の Ginibere 点過程については, 球領域 $\Lambda = \mathbb{B}_R^{(d)}$ の半径を大きくする大規模極限 $R \to \infty$ において

$$\mathrm{var}[\Xi_{\mathrm{Ginibre}}(\mathbb{B}_R^{(2)})] \sim \frac{R}{\sqrt{\pi}}, \quad R \to \infty$$

が成り立ち, Class I の超一様性を持つことを白井 [4] が証明した. Torquato [5] も同様の結果を証明したが, さらに, Ginibre 点過程の数分散の厳密な表式も導出している.

Heisenberg 点過程族とは, Ginibre 点過程を高次元複素数空間 $S = \mathbb{C}^D$, $D = 2, 3 \ldots$ 上に拡張したものであり, $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ で指定される. $D = 1$ とすれば, Ginibre 点過程と一致する. $\mathbb{C}^D, D \in \mathbb{N}$ は D 次元複素空間とよばれ $x \in \mathbb{C}^D$ の D 個の成分 $x = (x^{(1)}, \ldots, x^{(D)})$ はそれぞれ, $x^{(\ell)} = \mathrm{Re}x^{(\ell)} + \sqrt{-1}\mathrm{Im}x^{(\ell)}, \ell = 1, \ldots, D$ と表される. ここでは, この複素構造を明示するため $x_{\mathrm{R}} = (\mathrm{Re}x^{(1)}, \ldots, \mathrm{Re}x^{(D)})$, $x_{\mathrm{I}} = (\mathrm{Im}x^{(1)}, \ldots, \mathrm{Im}x^{(D)}) \in \mathbb{R}^D$ として, $x = x_{\mathrm{R}} + \sqrt{-1}x_{\mathrm{I}}$ と書くことにする. Lebesgue 測度は $dx = dx_{\mathrm{R}} dx_{\mathrm{I}} := \prod_{\ell=1}^D d\mathrm{Re}x^{(\ell)} d\mathrm{Im}x^{(\ell)}$ で与えられる. $x = x_{\mathrm{R}} + \sqrt{-1}x_{\mathrm{I}}, y = y_{\mathrm{R}} + \sqrt{-1}y_{\mathrm{I}} \in \mathbb{C}^D$ に対して, 標準 Hermite 内積を

$$x \cdot \overline{y} = (x_{\mathrm{R}} + \sqrt{-1}x_{\mathrm{I}}) \cdot (y_{\mathrm{R}} - \sqrt{-1}y_{\mathrm{I}}) = (x_{\mathrm{R}} \cdot y_{\mathrm{R}} + x_{\mathrm{I}} \cdot y_{\mathrm{I}}) - \sqrt{-1}(x_{\mathrm{R}} \cdot y_{\mathrm{I}} - x_{\mathrm{I}} \cdot y_{\mathrm{R}})$$

と定義する．もしも, $x = x_{\rm R},\ y = y_{\rm R} \in \mathbb{R}^D$ であれば, $x \cdot \overline{y} = x_{\rm R} \cdot y_{\rm R} := \sum_{\ell=1}^{D} {\rm Re} x^{(\ell)} {\rm Re} y^{(\ell)}$ と書ける．ノルムは $|x| := \sqrt{x \cdot \overline{x}} = \sqrt{|x_{\rm R}|^2 + |x_{\rm I}|^2}$ と定義する．このことから, $S = \mathbb{C}^D$ 内の半径 R の D 次元円板 $\{x \in \mathbb{C}^D : |x| < R\}$ と $\mathbb{R}^d$ 内の半径 R の球 $\mathbb{B}_R^{(d)}$ は, $d = 2D$ の下で同一視できる．

$\mathbb{C}$ 上の Ginibre 点過程における参照測度は $\lambda_{{\rm N}(0,1;\mathbb{C})}(dx) := e^{-|x|^2} dx/\pi$ であることから，これを拡張し, $S = \mathbb{C}^D$ 上の参照測度は

$$\lambda_{{\rm N}(0,1;\mathbb{C}^D)}(dx) := \prod_{i=1}^{D} \lambda_{{\rm N}(0,1;\mathbb{C})}(dx_i) = \frac{1}{\pi^D} e^{-|x|^2} = \frac{1}{\pi^D} e^{-(|x_{\rm R}|^2 + |x_{\rm I}|^2)} dx_{\rm R} dx_{\rm I}$$

で与え, Heisenberg 点過程族を次のように定義する．

定義 1.1 Heisenberg 点過程族は次元 $D \in \mathbb{N}$ を径数とした $\mathbb{C}^D$ 上の行列式点過程 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{{\rm N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ 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．

$$K_{\mathsf{H}_D}(x,y) = e^{x\overline{y}},\ x, y \in \mathbb{C}^D$$

先行研究では, Ginibre 点過程が Class I の超一様性を持つことを明らかにしていて, その数分散の厳密な表式も求められている [5, 4]．しかし, Ginibre 点過程の高次元拡張にあたる Heisenberg 点過程族については, その数分散の具体的な表式と, 高次元拡張で超一様性がどのように変化するのかは明らかにされていなかった．そこで, 本研究では定義 1.1 で定義される D 次元複素数空間 $\mathbb{C}^D$ 上の Heisenberg 点過程族について, その数分散の厳密な表式と, $R \to \infty$ としたときの数分散の漸近展開形の導出を行い, 一般次元 D において Class I の超一様性を持つことを明らかにした．本論文では得られた結果とその導出過程を説明する．

本論文の内容は文献 [3] で投稿中である．

2　数分散の厳密表式と主定理

本論文の主結果として, Ginibre 点過程を高次元拡張した D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D$ 上の Heisenberg 点過程族 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{{\rm N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ に対して, 以下のことが成り立つことを示した．

定理 2.1 D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D, D \in N$ 上の Heisenberg 点過程族 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{{\rm N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ の数分散の厳密な表式は

$${\rm var}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})] = \frac{R^{2D} e^{-2R^2}}{D!} \left[I_0(2R^2) + 2\sum_{n=1}^{D-1} I_n(2R^2) + I_D(2R^2) \right], \quad R > 0 \qquad (2.1)$$

と与えられる．$I_\nu(x)$ は第 1 種変形 Bessel 関数を表し

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

と定義される．

命題 2.2 D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D, D \in N$ 上の Heisenberg 点過程族 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{{\rm N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ の数分散の厳密な表式は, (2.1) の別表現として

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

と与えられる．${}_2F_2$ は一般化超幾何関数を表し

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

と定義される．$(a)_n$ は Pochhammer 記号 $(a)_0 := 1,\ (a)_n := a(a+1)(a+2)\cdots(a+n) := \Gamma(a+n)/\Gamma(a)$ を表す．

(2.1) に対し, $R \to \infty$ としたときの漸近展開を行うことにより, 次の定理が導かれる．

定理 2.3 D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D$ 上の Heisenberg 点過程族 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ は $D \in \mathbb{N}$ において

$$ \lim_{R\to\infty} R \frac{\mathrm{var}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]}{\mathbf{E}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]} = \frac{D}{\sqrt{\pi}} $$

が成り立つ．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, 漸近展開

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

が成り立つ．ここで $\alpha_k(D)$ は次のように定義される定数である．

$$ \alpha_k(\nu) = \begin{cases} 1, & \text{if } k = 0, \\ \displaystyle\prod_{\ell=1}^{k} (4\nu^2 - (2l-1))^2 = \prod_{\ell=-k+1}^{k} (2\nu + 2\ell - 1) & \text{if } k \in \mathbb{N} \end{cases} $$

参考文献

[1] Forrester, P. J., 2010, Log-gases and Random Matrices, London Math. Soc. Monographs (Princeton, NJ: Princeton University Press)

[2] Ginibre, J., 1965, Statistical ensembles of complex, quaternion, and real matrices, J. Math. Phys. **6**, 440–449

[3] Matsui, T, Katori, M., Shirai, T.: Local number variances and hyperuniformity of the Heisenberg family of determinantal point processes. arXiv:PR/2012.10585

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

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

[6] Torquato, S., Scardicchio, A., Zachary, C. E., 2008: Point processes in arbitrary dimension from Fermionic gases, random matrix theory, and number theory, J. Stat. Mech. Theory Exp. P11019

[7] Torquato. S, Stillinger, F. H, 2003; Local density fluctuations, hyperuniformity, and order metrics Phys. Rev. E **68**, 041113