RIMS Kôkyûroku Bessatsu
B47 (2014), 141–162

ランダム行列と周期箱玉系に於けるPoisson-Wigner 遷移

By

Yuji Kaneko*

Abstract

We investigate some of the Elementary Cellular Automaton (ECA) and the periodic Box Ball System (pBBS). The first part concerns the ECA. We review Wolfram's classification of ECA [2] and quantization method of that classification introduced in our previous paper [3] and give new method based on singular value decomposition. We first characterize class 3 which has chaotic behaviour by comparing ones outputted patterns with random patterns (random matrix). We then must decide criteria to compare them. So we chose spacing distribution of singular values. In random matrix theory it is known that this distribution is approximated by the Wigner distribution and it has universality which does not depend on details of random matrix. We can use this property, distinguish between class 3 and class 4 which has complex behaviour with localized structures like a soliton. This complexity is interested in computation theory. In the second part we apply the method in the first part to the pBBS which is a soliton cellular automaton. We expect that the pBBS's spacing distribution has characters of class 4. On numerical simulation this expectation was confirmed and we found the Poisson-Wigner transition.

§1. はじめに

セルオートマトン（CA）とは，独立変数（時間変数・空間変数）と従属変数（状態変数）の全てが離散値でかつ従属変数の値域が有限集合となっている系であり，フォン・ノイマンが生物の自己複製を数学的に定式化する際に用いたことで有名である．現代では交通流のモデリング [1] などにも利用されている．

CA の特徴は局所的に定義された単純なルールから，極めて多様な時間発展パターンが得られる点にある．そういった場合に，多様な時間発展の様相の分類を試みたくなる事は自然である．CA の分類に於いて最も有名なものは，ウルフラムによる ECA の分類であろう．まず，ECA の定義を述べ，次にウルフラムの分類を示す．

Received January 9, 2014. Revised March 31, 2014.
2010 Mathematics Subject Classification(s): 37K10, 34M55, 37P25
Key Words: *celluler autmaton, sigular value decomposition, random martix, Poisson-Wigner transition*
*Graduate School of Mathematical Sciences, University of Tokyo, 3-8-1 Komaba, Tokyo 153-8914, Japan
e-mail: ykaneko@ms.u-tokyo.ac.jp

エレメンタリーセルオートマトン（ECA）[2] とは，1 次元 2 値 3 近傍決定系であり，次の時刻のセルの値が前の時刻の自分自身とその両隣の値で決まる系である．

具体的には，時刻 $t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ における $n \in \mathbb{N}$ 番目のセルの値を $u_n^t \in \{0, 1\}$ とすると，時間発展規則は適当な関数（ルール）$F : \{0, 1\}^3 \to \{0, 1\}$ を用いて次のように書ける．

$$u_n^{t+1} = F(u_{n-1}^t, u_n^t, u_{n+1}^t)$$

よって，時刻 t の 3 つのセルの取り得る状態 8 通りに対して時刻 $t+1$ のセルの値はそれぞれ 2 通り考えられるので，ECA におけるルール F は $2^8 = 256$ 種類存在する．下の表に示すのはルール 90 の時間発展則である．90 というルールの番号は，表の時刻 $t+1$ の値 01011010 を 2 進数とみなして，それを 10 進数表示したものである（ルールの番号はルール 0~ ルール 255 だが，256 種類のうち左右および 0 と 1 の反転によって一致するルールを同一視し，88 種類まで減らすことができる [2]）．境界条件として本稿は周期的境界条件 $u_n^t = u_{N+n}^t$ を用いる事とする．以下，ECA のシステムサイズとは，空間周期 N をさすものとする．また，$\mathbf{u}^t = (u_1^t, \cdots, u_N^t)$ を状態と呼ぶ.

ルール 90

$u_{n-1}^t\, u_n^t\, u_{n+1}^t$	111	110	101	100	011	010	001	000
u_n^{t+1}	0	1	0	1	1	0	1	0

ウルフラムはこれらのルールを以下の 4 つのクラスに分類した [2].

Class1　Evolves to homogeneous state.

Class2　Evolves to simple separated periodic structure.

Class3　Yields chaotic aperiodic patterns.

Class4　Yields complex pattern of localized structure.

本分類が後の研究に与えた影響は非常に大きいが問題点も存在する．根本的な問題の 1 つはその恣意性であり，クラス 2 の simlpe，クラス 3 の chaotic 及びクラス 4 の localized structure は厳密に定義されたものではない．本研究では，まず，chaotic と形容されたパターンの複雑さをランダムパターンとの比較によって定量化する．

その際に注意すべきは時間発展をどこで打ち切るかという問題である．例えば上述のルール 90 はクラス 3 に属すが，その時間発展は $u_n^{t+1} = u_{n-1}^t + u_{n+1}^t \pmod 2$ と書き表すことができ，$N = 2^m (m \geq 2)$ のとき $t = N/2$ で全てのセルの値が 0 になる．これはクラス 1 に他ならない．勿論，この様なシステムサイズ依存性が解析的に証明できる場合は特殊なシステムサイズを予め例外として扱うことも可能であろう．しかし，数値計算を行う背景には，そもそも解析的な扱いが非常に難しいから取敢えず出力パターンを観察し，それが解析的に扱うに足るルールであるか判断したい，という動機もある．そのような状況で打ち切り時刻を予め指定すると興味深い挙動を見逃す恐れがある．

我々が行うべきことは,（数値計算で扱える）十分な時間を明確に定義し，その上で，ルールの挙動を（ウルフラムの基準に沿って）分類できる定量的な指標を与える事である．

尚，本研究は ECA の出力パターンを多変量時系列データとみなし，経済物理の手法を用いて解析した研究 [3] をもとにしている．[3] では可逆な ECA を解析対象にしていたが今回は手法の一部を変更して，より多くの ECA を分類を試みた．これに関しては本稿の前半に述べる．

後半は前半の分類手法を ECA 以外の CA である周期箱玉系（periodic Box Ball System pBBS）に適用する．その結果，ランダム行列理論や量子カオス論のトピックである Poisson-Wigner 遷移に類似した現象が観察されたことを報告する．

§2. 分類手法

§2.1. 特異値分解

u_n^t を行列要素とする行列 U を出力パターンと呼ぶ．我々はウルフラムと同じく，ECA の分類とは U の分類であるという立場に立つ．本研究では特異値分解を用いてパターンを解析する．尚，特異値分解は任意の実行列 X に対して使用可能である．以下に特異値分解の定義を記す．

$$
\begin{gathered}
{}^tXX\mathbf{v}_j = \lambda_j\mathbf{v}_j \quad , \quad X{}^tX\mathbf{u}_j = \lambda_j\mathbf{u}_j \quad , \quad \mu_j = \sqrt{\lambda_j} \\
X = \mu_1\mathbf{u}_1{}^t\mathbf{v}_1 + \mu_2\mathbf{u}_2{}^t\mathbf{v}_2 + \cdots + \mu_r\mathbf{u}_r{}^t\mathbf{v}_r
\end{gathered} \tag{2.1}
$$

上式右辺を X の特異値分解，$\mu_j(1 \leq j \leq r$，r は X の階数) を特異値という．特異値分解は基底となる長方行列の線形結合（特異値が重み）で X を表現する方法と考えることもできる．ここで，特異値は降順にソートされている（$\mu_j \geq \mu_{j+1}$）とし，固有ベクトル $\mathbf{v}_j, \mathbf{u}_j$ は規格化されているとする．

§2.2. 特異値分解と周期パターン

1 章で述べた時間発展の打ち切り時刻を τ とする．まず，τ について考察する．予め定めた有限の時刻で時間発展を打ち切る事に対する恣意性を問題にするのであれば，時間発展を打ち切らないことはその解決法の 1 つである．しかし，計算機上で無限の時間発展を行うことは不可能であるし，パターンを格納するメモリも有限である．

ここで，数値計算で使用するセル数が有限であることに注意すると時間発展は必ず有限の長さの周期状態（周期パターン U_c）に落ち込む．この周期の長さを T とする．

$$
X = U/\sqrt{\tau} \tag{2.2}
$$

とすれば，$\tau \to \infty$ の極限で，その特異値は $U_c/\sqrt{T}$ の特異値に一致する．これが我々が周期パターンに着目する理由である．この性質により，ウルフラムが言及したクラス 4 の特徴 Class 4 celluler automata effectively have very long transients [2] は本研究の解析の対象とならない．もし，本研究によって緩和状態を無視しても尚クラス 3 とクラス 4 の特異値の性質に明確な差異が見出されれば，それは，クラスの特徴をより厳密に特定したと言えるだろう．

§ 2.3. ランダム行列

先述した通り，我々は，クラス 3 の出力パターンの複雑さがランダムパターンに似た性質を持つことを期待する．ランダムパターンを行列とみなせばランダム行列である．ランダム行列には複数の種類があるが，本解析の比較対象としては各行列要素が独立に同一のガウス分布に従う $L \times N$ 長方行列を $A(L \leq N)$ としたとき，下式で定義される行列 M の集合（カイラルガウス型直交アンサンブル；カイラル GOE という) が適切である．

$$M = \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & {}^tA \\ \hline A & \mathbf{0} \end{array}\right) \tag{2.3}$$

${}^tAA$（Wishart 行列と呼ばれる）の固有値 λ' と M の非零固有値 λ には次の関係がある．

$$\lambda = \pm\sqrt{\lambda'} \tag{2.4}$$

前節の内容を振り返ると，以降で，カイラル GOE の正の固有値と ECA の周期パターンから求めた特異値の性質を比較する事は明らかであろう．では，性質としては，何に着目すべきだろうか.

§ 2.4. 固有値分布

結論から述べると，特異値の性質としては特異値の間隔を用いるのであるが，まず，間隔に着目するに至った経緯を簡単にまとめる．ランダムパターンとの比較という目的を一旦忘れて ${}^tU_cU_c/T$ と ${}^tAA/T$ の固有値の比較を考えてみる．A の行列要素を出力するガウス分布の平均を 0 分散を 1 とし，$Q = L/N$ を固定したまま $N \to \infty, L \to \infty$ とするとき，その固有値分布 $\rho(\lambda)$ は下式で表される．

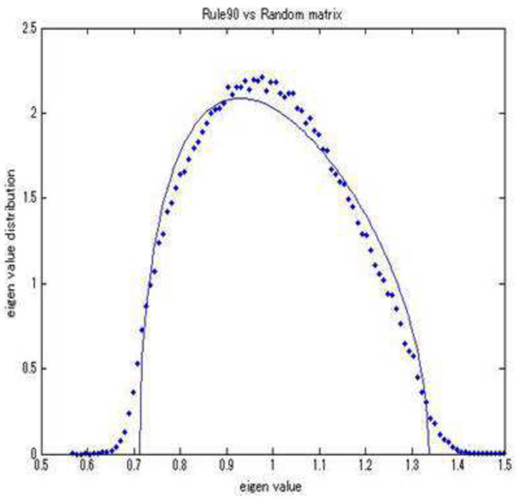
$$\rho(\lambda) = \frac{Q}{2\pi}\frac{\sqrt{(\lambda_+ - \lambda)(\lambda - \lambda_-)}}{\lambda} \tag{2.5}$$

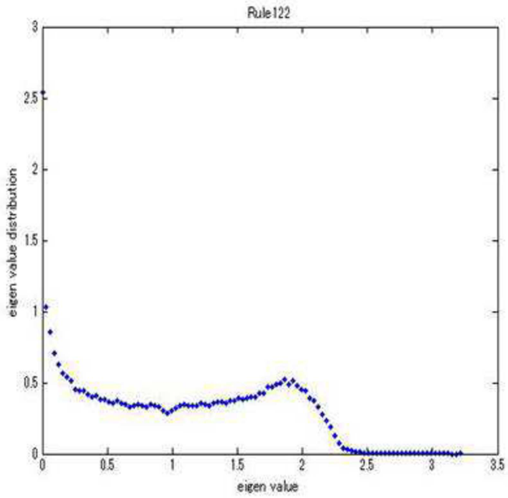
ここで，

$$\lambda_\pm = 1 + \frac{1}{Q} \pm 2\sqrt{\frac{1}{Q}} \tag{2.6}$$

である．本研究では有限サイズのパターンを用いるが，システムサイズをある程度大きく取れば，近似的には近い分布が観測されるだろう．

参考までに，次のページにクラス 3 に属すルール 90 と 122 の有値間隔分布を示す（それらのパターンに関しては 4 章を参照されたい）．ただし，A の要素が平均 0 分散 1 であるのに対し U_c はバイナリ値であるから，そのままでは平均と分散がずれる．そこで，U_c を列ごとに平均 0，分散 1 に規格化した行列 V_c から ${}^tV_cV_c/T$ を作成し，その固有値を用いた．尚，この方法は [3] で参考にした経済物理学に於ける株価の相関解析の手法 [4] と基本的に同じものである．





システムサイズはともに $N=200$，サンプル数を 500 として計 100000 個の固有値を使用した．図中の点は ECA から計算した結果である．同じクラス 3 のルール 90 と 122 で明らかに分布形が異なる．しかし，この事から直ちに固有値分布が分類指標として適切ではないと結論することはできない．なぜなら，2 つのルールで周期が異なっていて (2.5) 式のパラメタ Q の値を変えれば，どちらの分布にもフィッティングできる可能性があるからである．

因みに，ルール 90 では得られた 500 サンプルすべてに関して $T=8184$ であった．左図の実線は，(2.5) 式に於いて $Q=8184/200$ としたものである．ルール 90 に関しては点が実線に比較的よく乗っていることが分かる．

しかし，ルール 122 では複数の周期が観測された．これは大変本質的な問題である．なぜなら，比較対象である (2.5) 式の Q の値を固定する事ができないからである．ルール 122 に限らず，ECA の周期パターンの周期は一般に複数存在する．

上の例の様に複数の初期状態をランダムに生成し，それぞれを時間発展させて複数の周期軌道のサンプリングを行い，そこらから求めた特異値の統計的な性質を議論したいのであれば，比較対象となるカイラル GOE の固有値の性質のほうに，L（T に対応）や N に鋭敏な差異を示さない統計量を選ぶべきである．

§ 2.5.　固有値間隔分布

その候補の 1 つが以下に述べる固有値間隔分布である．以降，CA のパターンを議論する文脈では特異値間隔分布，カイラル GOE の固有値について述べる場合は固有値間隔分布という表現を用いるが，混乱は生じないだろう．

固有値間隔分布は，行列の固有値を小さい順にソートしたときの隣り合った固有値の間隔の分布である。これは系の対称性に依存した強い普遍性を持っていることが知られている [5]．実対称ランダム行列の場合，固有値間隔分布は以下の**ウィグナー分布** $P(s)$ で極めてよく近似される．s は固有値の間隔である．

$$P(s)=\frac{\pi}{2}se^{-\frac{\pi}{4}s^2} \tag{2.7}$$

ただし，単純に隣の固有値との差を計算するではなく，アンフォールディングという操作で変換された固有値の差を用いる．この操作について簡単に説明を行う．例えば，素数の並び方を議論する際に素数の間隔に着目したとする．間隔 2 の素数のペアは双子素数と呼ばれ，小さいものは 4 ± 1 等があり，大きいものは $3756801695685 \times 2^{666669} \pm 1$ 等が知られている [6]．前者と後者では同じ間隔であっても受ける印象は異なる．その原因は，素数の値が大きくなるほど，注目する素数近傍の間隔の平均値も大きくなるので，後者の間隔は平均値に対して非常に狭いからである．したがって，前者と後者の配置の近さを比較したいのであれば，直接差を比較するのではなく，それらの近傍の間隔の平均値で割る等して，領域に対する依存性を消去する必要がある．

固有値間隔分布に関しても，上の例と同じように固有値密度の高い部分と低い部分（ウィグナーの半円則を思い出すと良い）の平均間隔の違いを考慮して，平均間隔を 1 に規格化する．これをアンフォールディングと呼ぶ．アンフォールディングには複数の手法が提案されており [7] にそれらの簡潔な紹介がある．移動平均を用いた次の方法は直感的にも分かりやすい．固有値はソートされているとする．

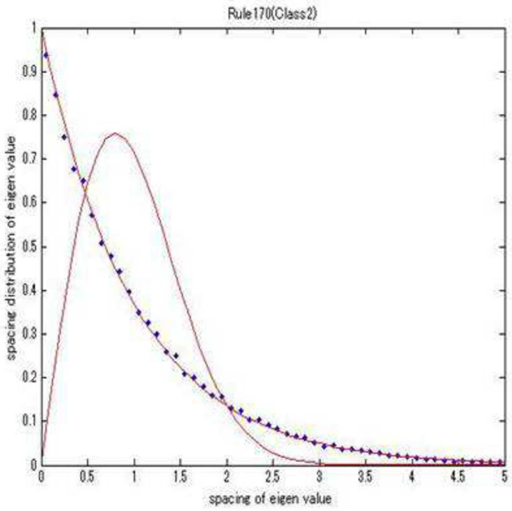
$$s_i = \tilde{\lambda}_{i+1} - \tilde{\lambda}_i = \frac{(2k-1)(\lambda_{i+1} - \lambda_i)}{\lambda_{i+k} - \lambda_{i-k+1}} \tag{2.8}$$

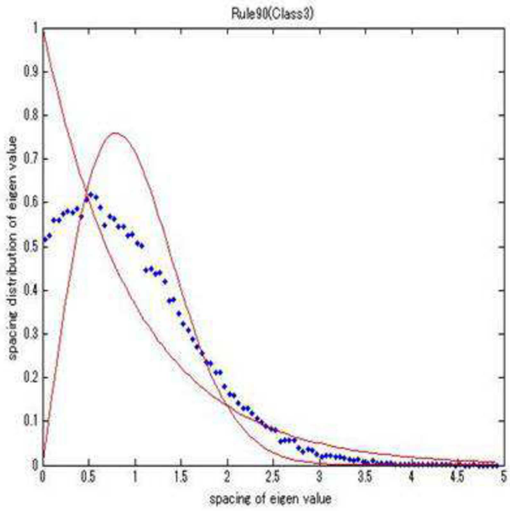
ここで，λ_i は i 番目の固有値，$\tilde{\lambda}_i$ はアンフォールドされた i 番目の固有値である．i 番目と $i+1$ 番目の固有値を中心に $2k$ 個の固有値を取り，間隔の平均値 $(\lambda_{i+k} - \lambda_{i-k+1})/(2k-1)$ で $\lambda_{i+1} - \lambda_i$ を割る．あとは i をスライドさせていけば良い．固有値列の端付近の固有値に対しては，この方法を使用できないが端付近の固有値の性質は他とは異なる事が知られており，初めからその部分は解析の対象としないので問題は生じない．

また，$U_c/\sqrt{T}$ の特異値は U_c のそれとは定数倍ずれるが，アンフォールディングによってこの違いは消えることが分かる．これによって，特異値間隔分布は U_c を直接用いて計算できる．ただし，比較対象となるバイナリランダム行列は通常のランダム行列とは異なり，平均は 0 ではない．この点に関しては，計算機でバイナリランダムパターンを作成し，その特異値間隔分布を求め，それがウィグナー分布に極めてよく一致する事を確認した．この普遍性もアンフォールディングによるものと思われる．

§ 2.6.　相対周期パターン

これまでに述べた通り，本研究では [3] で用いた手法にいくつかの変更を加えている．最後に，解析の対象を周期パターン U_c から相対周期パターン U_r に変更する点について説明する．周期 T は同じ状態が再び現れるまでの時間なのに対して，相対周期 T' は空間方向にシフトさせて一致する状態が現れるまでの時間である．このとき，何セル分シフトするかをシフト数と呼ぶことにする．U_c は U_r をシフト数分だけずらしながら貼り合わせたものになっている．初めに，周期パターンを用いた場合に生じる不都合を見ておこう．





左図はクラス 2 に属すルール 170（シフト写像）から求めた特異値間隔分布である．ウィグナー分布ではない実線は**ポアソン分布** $P(s) = e^{-s}$ であり，ルール 170 に限らず，U_c に斜めずれが生じるクラス 2 のルールはポアソン分布によく一致する．U_c の特異値は ${}^tU_cU_c$ の固有値の平方根であり，周期境界条件のルール 170 の場合，並進対称性により ${}^tU_cU_c$ は対称テープリッツ行列となる．対称ランダムテープリッツ行列に関する先行研究 [8] に，その固有値間隔分布を数値計算するとポアソン分布が見られたという記述がある（ただし，[8] の対称ランダム行列は本研究のように行列の積から作ったものではない）．証明は得られていないようだが，${}^tU_cU_c$ の規則性が間隔分布に強く影響すると予想できる．

一方，その複雑さ故にウィグナー分布の出現が予想されたクラス 3 では，ルール 105 と 150 に関しては予想通りであったが，それ以外のルールでは右図（ルール 90）に示すような中間的な分布となっていた．クラス 3 に属すルールは次章にまとめておく．

この原因について調べたところ，ルール 90 では 500 サンプル全てで $T' = T/2$ となっていることが分かった．すなわち，一見複雑でも $T/2 \leq t < T$ のパターンは $0 \leq t < T/2-1$ のパターンを空間方向に半分シフトさせたものになっており，これが ${}^tU_cU_c$ に（完全な対称テープリッツ行列となるには足りない）規則性を生じさせた結果，特異値間隔分布の形が中間的なものになると考えられる（ルール 105 と 150 では $T' = T$ であった）．この推測が正しければ，間隔分布はパターンの複雑さに関係なく T' と N の関係で決まることになるが，我々が知りたいのはパターンの複雑さの方であるから，解析対象を U_r とする．

§ 3. 数値計算

§ 3.1. 特異値間隔分布の数値計算方法

2 章を踏まえ，特異値間隔分布の数値計算方法を以下に記す．アンフォールディングの操作は次の **1**~ **6** の **3**~ **5** に対応する．2.6 節のものとは一見異なるが，[7] に (2.8) 式の方法と並んで紹介されており，歴史的な背景を踏まえた詳細は [9] を参照されたい．

1 ランダムに生成した初期値から時間発展させ，相対周期パターン U_r の特異値を求める．

2 **1** で得た特異値を小さい順にソートした特異値列 $\{\mu_1, \ldots, \mu_N\}$ に対してそれぞれの端から 1/4(計半分) の特異値を捨てる．

3 **2** の特異値 μ_j の位置で 1 だけ上がる階段関数を作る．

4 **3** の各階段の中点をとり適当な次数の多項式（今回は次数を 6 とした）$f(\mu)$ で最小 2 乗フィッティングする．

5 **4** で得られた $f(\mu)$ から $y_j = f(\mu_j)$ を求めその間隔 $s_j = y_j - y_{j-1}$ を求める．

6 **1**~ **5** を色々な初期値について繰り返す．$N = 200$，サンプル数 M（ランダムサンプリングで $M = 500$），i 番目の行列の j 番目の間隔を $s_j^{(i)}$ として集合 $S = \{s_j^{(i)} | j = 1, 2, \ldots, L'(i); i = 1, 2, \ldots, M\}$ を作成し，これをビンの間隔 0.1 で度数分布にして（横軸 s が特異値の間隔の広さ，縦軸は度数）それを規格化して間隔分布 $P(s)$ を得る．

6 のサンプリングに関して，場合によっては使用できる特異値間隔が減少することがあり，使用可能な特異値の間隔を $L'(i) \leq [N/2] - 1$ としている．ここで $[\cdots]$ はガウス記号である．例えば，$T' < N$ ではランク落ちにより，自明な特異値の減少が生じる．極端に特異値が減少すると **4** の平滑化が不安定になるため，今回は予め $T' \geq N$ の U_r を M 個サンプリングする．勿論，$T' \geq N$ でも特異値が極端に減ることはあり得る．その例がルール 73 である．

§3.2. 数値計算の対象となるルール

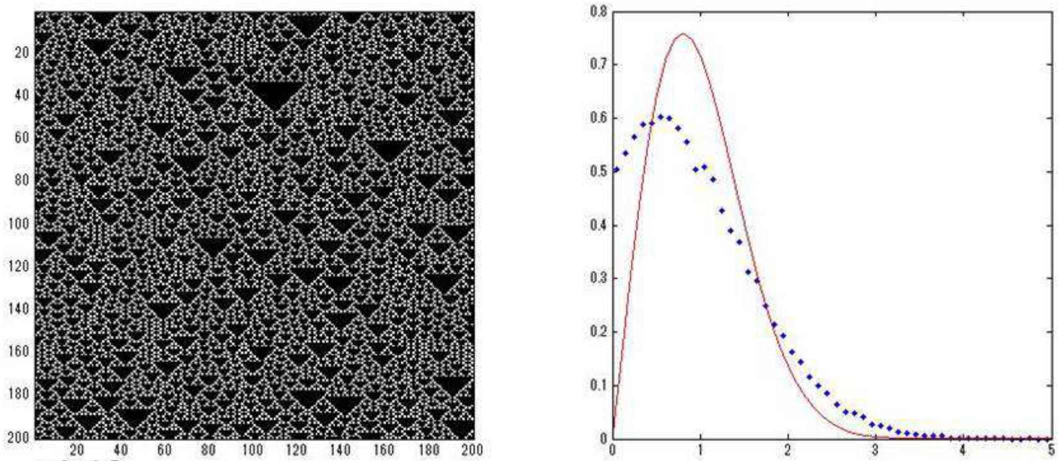
ECA のクラス 1 は分類基準が明確であるため分類から除外する．また，クラス 2 に関しては T' が短く間隔分布自体が得られない．よって，本研究の分類対象はクラス 3 とクラス 4 に属すルール（下表参照）となる．

クラス	ルール番号
クラス 3（12 個）	18,(22),(30),(45),60,90,105,(106),122,129,146,150
クラス 4（2 個）	(**54**),110

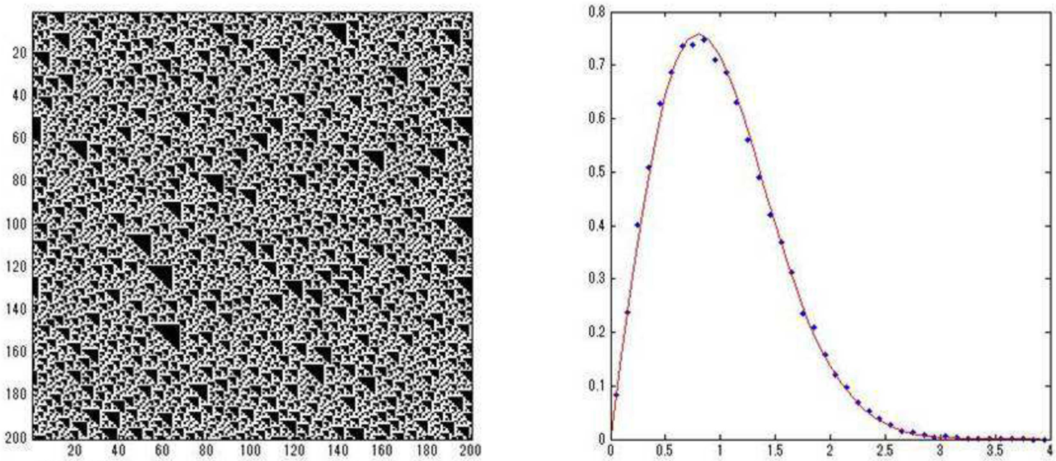
ルール 54 が太字になっているのは，クラス 4 か否かを巡り現在も議論が続いている為である [10]．又，括弧が付きの 5 つのルールは相対周期または緩和の長さが非常に長く手持ちの計算機では U_r が得られなかったルールである．これらは今回は扱わない．

§4. 結果

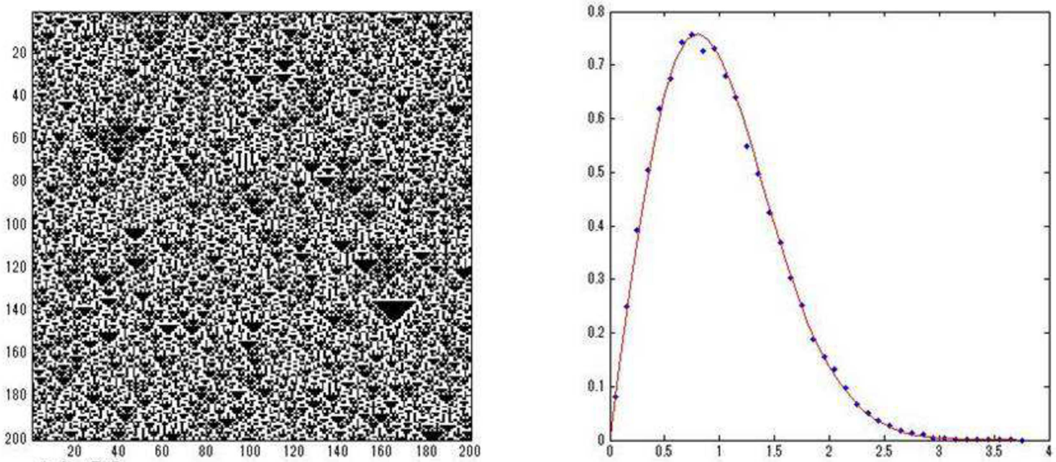
左図は各ルールのサンプルパターンの一部である．目のちらつきを防ぐために 1=□，0=■で表示した．右図の点が 3.1 節の数値計算結果，実線はウィグナー分布である．



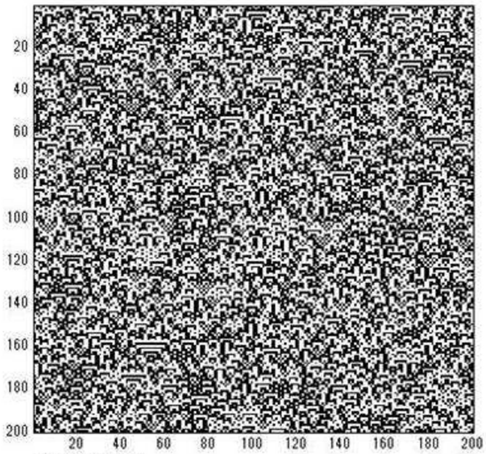
Rule 18

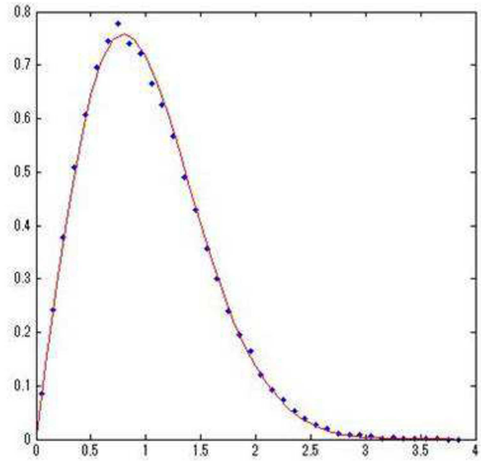


Rule 60

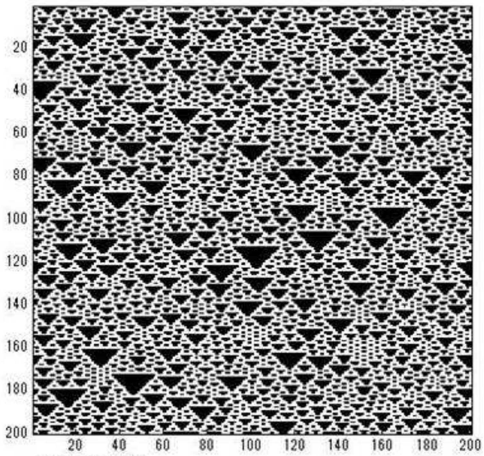


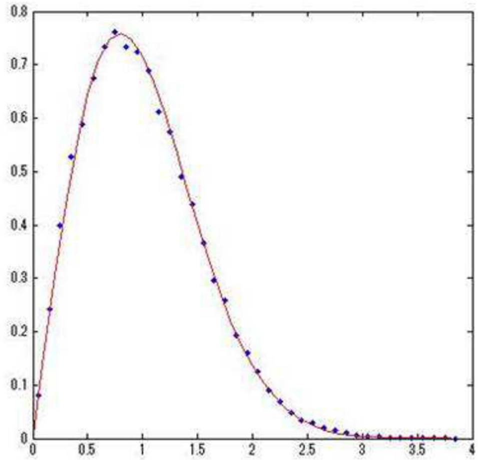
Rule 90



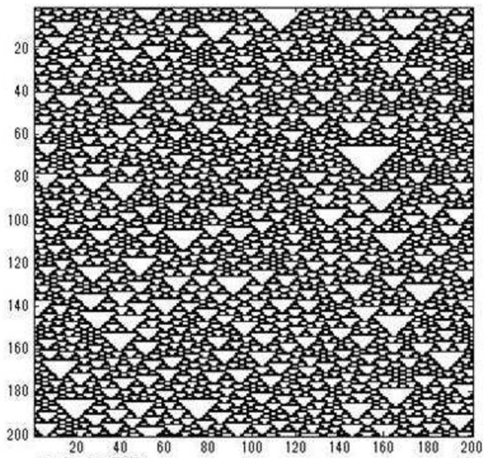


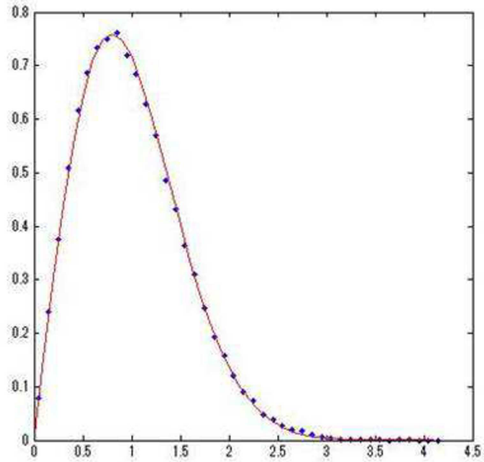
Rule 105



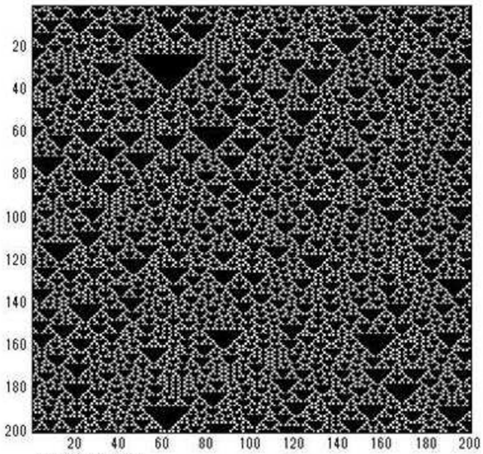


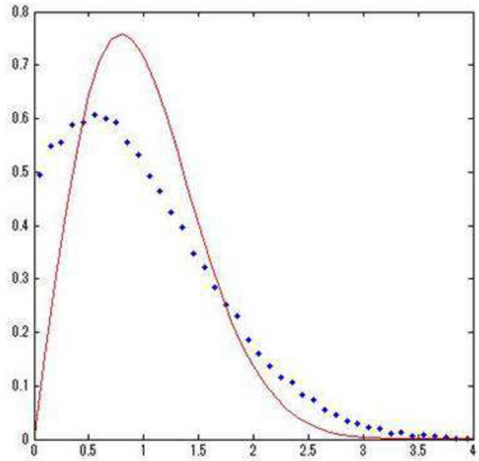
Rule 122



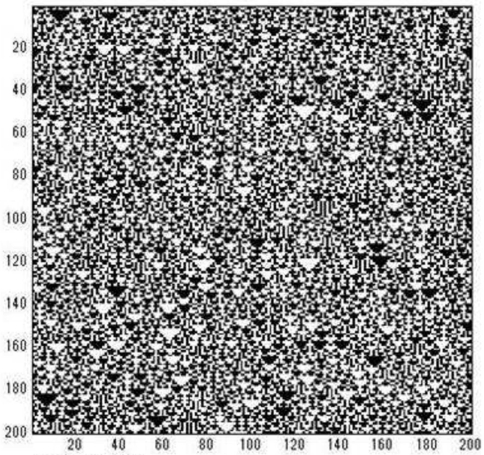


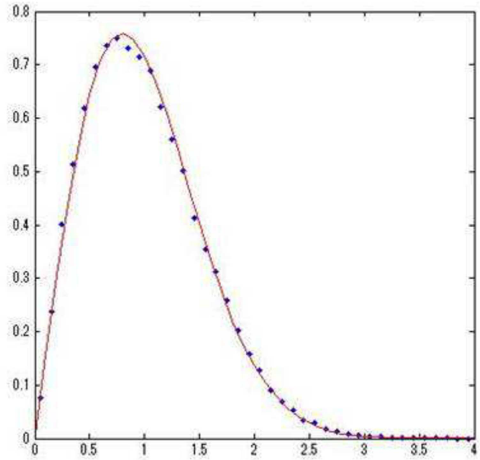
Rule 129



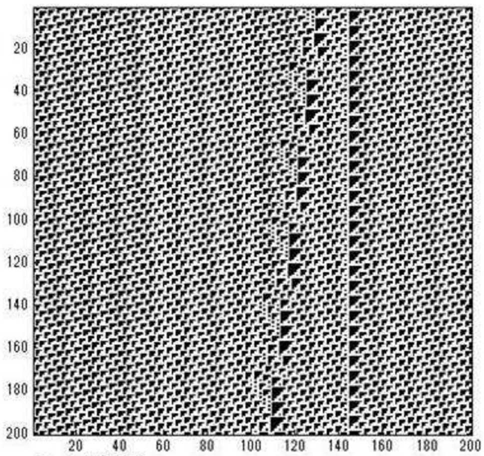


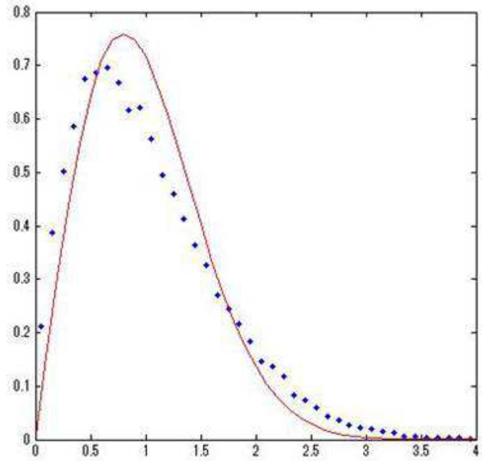
Rule 146





Rule 150





Rule 110

§5. 統計的検定

4章の数値計算結果はウィグナー分布によく一致している6つ（ルール60,90,105,122,129,150）と，そうではない3つ（ルール18,146,110）に大別できそうである．（クラス3の全ルールがウィグナー分布になっている訳ではない点に関しては後で議論するとして）現時点では目視によって一致・不一致を判断している点に於いて，恣意性を除去できていない．本章では統計的検定を行うことでこの問題点を解消する．

まず判断したいのは，U_r の特異値間隔がウィグナー分布に従っているか否かである．これを確かめる為に1標本コルモゴルフ-スミルノフ検定を用いる．帰無仮説は『得られた標本がウィグナー分布に従っている』であり，対立仮説は『得られた標本がウィグナー分布に従っていない』である．有意水準5％で検定を行ったところ，上記の6つのルールに関しては帰無仮説を棄却できず，ウィグナー分布に従っている可能性を否定できない事が分かった．また，残り3つに関しては帰無仮説が棄却された．

次に判断したいのは，ウィグナー分布に従っていない事が判明した3つのルールのデータが同じ確率分布に従うか否かである．1標本の場合と異なり，分布が仮定できない状況では，標本同士を比較する2標本コルモゴルフ-スミルノフ検定を用いる．帰無仮説は『得られた標本は同一の分布に従っている』であり，対立仮説は『得られた標本は同一の分布に従っていない』である．有意水準5％で検定を行うと，ルール18と146のペアでは帰無仮説が棄却できず，それ以外のペアでは帰無仮説が棄却された．以上を表にまとめておく．3種類の分布があるのでウィグナー分布以外を分布A，分布Bとした．

ルール番号	特異値間隔分布
（クラス3） 60,90,105,122,129,150	ウィグナー分布
（クラス3） 18,146	分布A（ウィグナー分布ではない）
（クラス4） 110	分布B（ウィグナー分布でも分布Aでもない）

§6. ルール18,146の隠れた規則性

前章の結果は，クラス3とクラス4の特異値間隔分布が異なるという点では我々の目的を満たすものである．しかし，クラス3に関して2種類の分布が観察された事実は，ウルフラムの分類に沿った基準の作成という観点からは不満が残る．

分布Aは U_r のどのような性質によって生じるのだろうか．また，ルール18と146の分布は今回調べた $N = 200$ 以外のシステムサイズでもウィグナー分布にはならないのだろうか．もしウィグナー分布になるシステムサイズ存在するなら，少なくともそのようなシステムサイズではウルフラムの分類が厳密に定量化されたと言えるだろう．ただし，その場合にルール110がウィグナー分布になっていないことも別途確認する必要がある．

ウィグナー分布では $P(0) = 0$ より特異値は縮退しない．これに対してルール18と146では特異値の縮退が起こっている（ルール110では起こっていない）ように見える．この現象は2.6節で見た通りパターンが何らかの規則性を持つときに生じることが経験的に分かっている．

ルール 18 について考える．ルール 18 の U_r は三角波が観察される典型的なクラス 3 のパターンであり，一見，乱雑であるが ${}^tU_rU_r$ は規則性を持つ可能性がある．

1041	0	519	0	537	0	384	0	517	0
0	1017	0	489	0	551	0	535	0	499
519	0	1014	0	543	0	373	0	539	0
0	489	0	975	0	494	0	477	0	486
537	0	543	0	1046	0	383	0	654	0
0	551	0	494	0	1059	0	659	0	530
384	0	373	0	383	0	779	0	391	0
0	535	0	477	0	659	0	1038	0	518
517	0	539	0	654	0	391	0	1041	0
0	499	0	486	0	530	0	518	0	1039

上図は $N = 200, M = 500$ で観測されたルール 18 の最大相対周期 (4092) パターンから求めた ${}^tU_rU_r$ の一部である．$i + j =$ 奇数のとき $({}^tU_rU_r)_{ij} = 0$ となっていることが分かる．これは U_r の空間座標が偶数と奇数のセルのペアに於いて同時刻に 1 が出力されていないことを意味している．

ただし，どのような相対周期でこのような規則的なパターンが出現するのかは不明で，$N = 200$ では観測された最大相対周期パターンで上述の規則性が生じていたが，$N = 102$ では最大ではない相対周期パターンでこの規則性が生じていた．しかし，いずれの場合も $N =$ 偶数では，この規則性を持つ相対周期が相対周期の最頻値であった．

本研究で用いた境界条件が周期境界条件であることに注意すると，N が奇数の場合，セル番号の偶奇性は意味を持たなくなるので，この規則性は生じない事が予想される．$M = 500, N = 99, 100, 101, 102, 103, 104, 199, 200$ で予想を確認したところ，$N =$ 偶数で分布 A と同様の分布に，**システムサイズが奇数のときウィグナー分布**となっていた．

尚，ルール 18 と 146 は次のように書くことができる．

(6.1) Rule 18 $$u_n^{t+1} = (u_{n-1}^t + u_{n+1}^t)(u_n^t + 1) \pmod 2$$

(6.2) Rule 146 $$u_n^{t+1} = (u_{n-1}^t + u_{n+1}^t)(u_n^t + 1) + u_n^{t-1}u_n^tu_{n+1}^t \pmod 2$$

上式より，ルール 18 と 146 の違いは $111 \to 0\,\mathrm{or}\,1$ のみであり，ルール 18 は任意の空間座標に於いて時間方向に 1 が連続して現れず，U_r の任意の時刻に於いて，空間方向に 1 が 3 つ以上連続して現れない事が分かる．よって，時間と空間の双方で 1 が連続して現れにくく，1 がスパースになる．勿論，スパース性のみから上の規則性は説明できないが，ルール 18 の 0 と 1 を反転したパターンを出力するルール 183 は 1 がデンスなので，ルール 18 に見られた ${}^tU_rU_r$ に規則的に 0 が並ぶ現象は生じないはずである．これにより特異値間隔分布が分布 A にならないなら，0-1 反転対称の関係にあるルールを同一視することができなくなってしまう．しかし，$N = 200$ でルール 183 の特異値間隔分布を求め 2 標本コルモゴルフ-スミルノフ検定を行うと分布 A である可能性を否定できなかった．

また，ルール 18 で $N = 199$ のときは上述した通りウィグナー分布となっていたが，クラス 4 のルール 110 では同じシステムサイズでウィグナー分布ではないことを 1 標本コルモゴルフ-スミルノフ検定で確認した．本稿では，分布 B に限らず，ウィグナー分布でなく，かつ，$P(0) \simeq 0$ なる分布をクラス 4 の特異値間隔分布とする．

§7. クラス 4 の CA の探索

§7.1. クラス 4 と 5 近傍 CA

これまでの結果から特異値間隔分布は ECA の分類指標として有効と思われる．実は，ウルフラムの分類は単にパターン（ルール）の分類だけを目的としたものではなく，興味深い CA を発見するための前段階という側面を持っている．その場合に特に重要視されるのがクラス 4 に属すルールであり，ウルフラムは，その特徴とされる localized structure（サンプルパターンに於ける局在した波と左斜め方向に移動する波がその例）から，ルール 110 がある種の計算能力を有すると予想し，この予想は [11] により肯定的に証明された．

ECA 以外の CA に対して，クラス 4 に該当するルールを探索する研究も行なわれている．u_n^t の 5 近傍のセルの総和 $u_{n-2}^t + u_{n-1}^t + u_n^t + u_{n+1}^t + u_{n+2}^t$ の取り得る値 $5 \sim 0$ に対して各々$0, 1$ を対応着け次の時刻の値とする 5 近傍総和型 CA を対象にした数値的な研究では，コード 20 と 52 がクラス 4 と推測されている [2]．尚，コード 20 の対応着けは $(5, 4, 3, 2, 1, 0) \to (0, 1, 0, 1, 0, 0)$ である．コード番号の 20 は 010100 を 2 進数とみなし，それを 10 進数表示したものである．

ただし，この推測は ECA の場合と同様に恣意的であり，ルール 110 のように特別な性質が証明されている訳でもない．コード 20，52 に対して本稿の分類手法を適用しようとしたところ，相対周期が非常に短く U_r がサンプリングできなかった．この原因の 1 つは，コード 20 や 52 で生じる localized structure 同士が衝突すると，消滅したり時間変化しない構造に変化したりして，最終的に得られる U_r が単純なものになることにある．

補足として，ルール 110 にも衝突によって他の localized structure を消滅させるものは存在し，rejector と呼ばれる [11]．しかし，消滅を伴わない衝突も存在する．サンプルパターンからは衝突後の localized structure の様子が分かる．

§7.2. クラス 4 と箱玉系

ウィグナー分布でもなく分布 A（原点付近の値が 0 ではない）でもない，クラス 4 の特異値間隔分布を観察できる CA を探す試みは，5 近傍総和型 CA の場合にはうまくいかなかった．ここで，研究者によってはウルフラムの言う localized structure を（擬）ソリトン [10] と呼ぶことがあることに注意する．ソリトンとは元々は古典可積分系に見られる粒子性を持つ孤立波のことである．

ソリトン的な挙動を示す CA は，ソリトンセルオートマトンと呼ばれ，[12] を初めとして様々なものが考案されている．ただし，それらの多くは特定の初期値でソリトン的なパターンが見られるに過ぎない．これに対して**箱玉系**と呼ばれる CA では，任意の初期値でソリトン的な時間発展パターンが観測でき [13]，かつ，時間発展は可逆である為，数値計算に適している（[3] で可逆な ECA をまず対象としたのも同じ理由である）．さらに，衝突によるソリトンの消滅は起こらない．以上が，箱玉系に着目して，クラス 4 の特徴が見られるかを調べる動機である．境界条件はこれまで同様，周期境界条件を用いる．周期境界条件を課した箱玉系を周期箱玉系（pBBS）という．時間発展則は次章に記す．

§8. pBBS に対する数値計算方法

BBS の時間発展則は次の通りである『t に於ける状態に対して，1 と 0 のペアを線で結ぶ．結ばれた 10 ペアを無視して現れる 10 ペアを線で結ぶ．この操作を全ての 1 と 0 が結ばれるまで続け，最後に，結ばれた 1 と 0 を入れ替えて，これを $t+1$ の状態とする』pBBS の場合も同様である．次に，以降でも重要になる箱玉系の保存量について述べる．時間発展則の説明で 10 対を導入した．これに関して，初めにできた 10 対の個数を p_1 とする．次に，それらを無視して作られた 10 対を p_2，そして，最後の 10 対を p_f とする．

$p_1 \sim p_f$ をまとめて $(p_1, p_2, \cdots, p_f)$ と書く．これが保存量となる．箱玉系は可逆で，任意の初期状態は時間発展するといずれ初期状態に回帰する．即ち，システムサイズが N のとき，2^N 個の状態からなる全状態空間は周期軌道 (U_c) によって分割される．$\sum_i^f p_i$ は状態に含まれる 1 の総数で，これは周期軌道を通して保存される為，1 の個数が異なる周期軌道を選ぶと，それらの保存量は異なる．また，一般に同じ保存量を持つ周期軌道であっても，その周期が等しいとは限らない．しかし，$p_f = 1$ の場合は同じ保存量を持つ軌道の（相対）周期の長さは 1 種類となる．この性質は数値計算を効率良く行うのに非常に都合が良い為，本稿では $p_f = 1$ の保存量のみを用いる．

尚，性質の違う軌道の特異値間隔を混ぜ合わせて間隔分布を描けば，それが無意味なものになる危険性は十分予測できる．これに対し，与えられた保存量を持つ状態を作る 10-insertion という方法 [14] を用いて保存量を固定し $N = 140$ で玉の個数を 64 個に統一してサンプリングを行った．

保存量は以下の A, B, C の 3 種類とし，Y_A, Y_B, Y_C は [15] の公式を用いて，与えられた保存量を持つ状態の総数を求め，数値計算から得た周期でその総数を割ることで算出した A, B, C に属す軌道の個数の常用対数を取ったものである．

A．(40,11,3,3,3,1,1,1,1) $T' = 190, Y_A = 33.5160$

B．(35,13,3,2,2,2,2,1,1,1,1,1) $T' = 14630, Y_B = 32.0411$

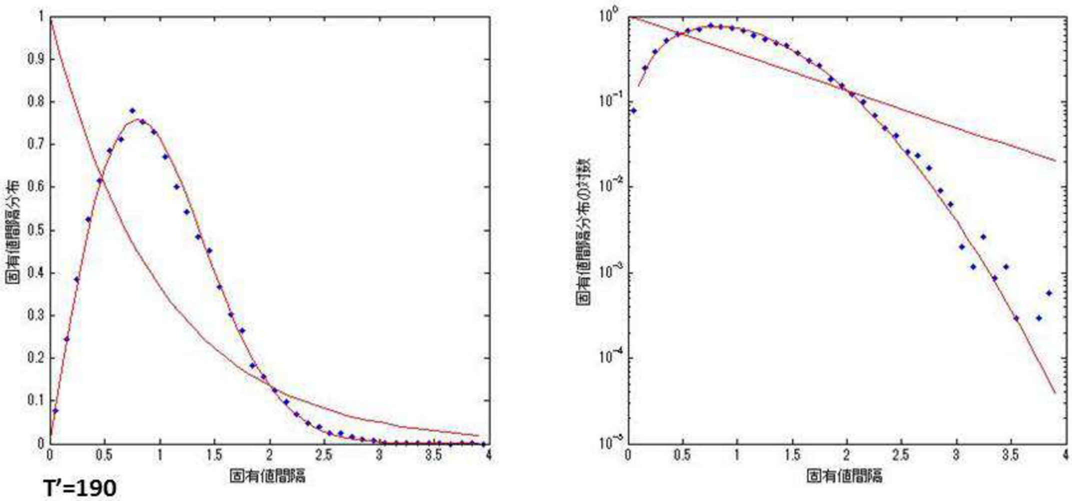
C．(34,11,6,5,4,2,1,1) $T' = 159600, Y_C = 33.2694$

A, C はこれまで同様 $M = 500$ として特異値列の端 1/4 を捨てている．B に関しては A, C と同様の数値計算を行なったところ，次頁の中央のグラフに似た中間的な分布が観測された．しかし，異なる統計的挙動をする準位間隔たちについて平均を行ったことにより，この様な分布が観測された可能性があるため，$M = 4000$ で固有値密度が最も高い領域 $52 \le \mu \le 57$ に入った特異値の 77405 個の規格化された間隔を使用して分布を描いた．その場合も次頁に示す中間的な分布となった．

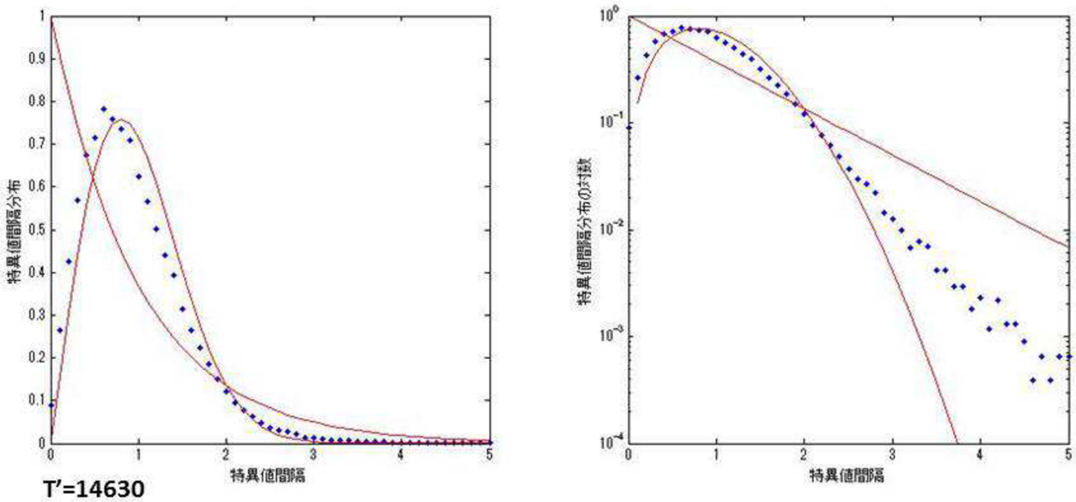
また，特異値間隔分布のシステムサイズ依存性を確認するために，$N = 53, 61, 71, 83$ の 4 つの場合に対して，各々の玉の密度を固定し相対周期を変化させて特異値間隔分布を調べた．

§9. 結果

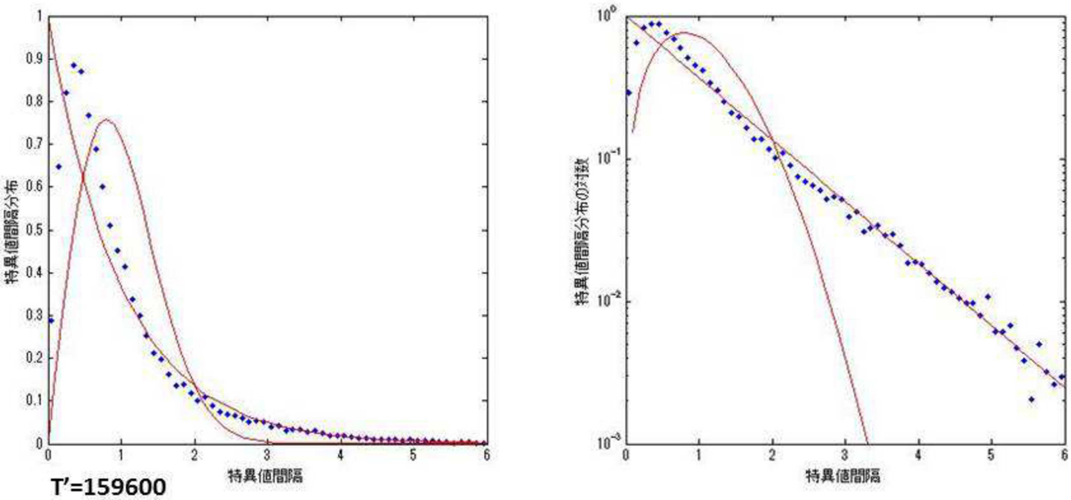
$A =$ 上段，$B =$ 中段，$C =$ 下段．右図は左図の縦軸を対数プロットしたものである．



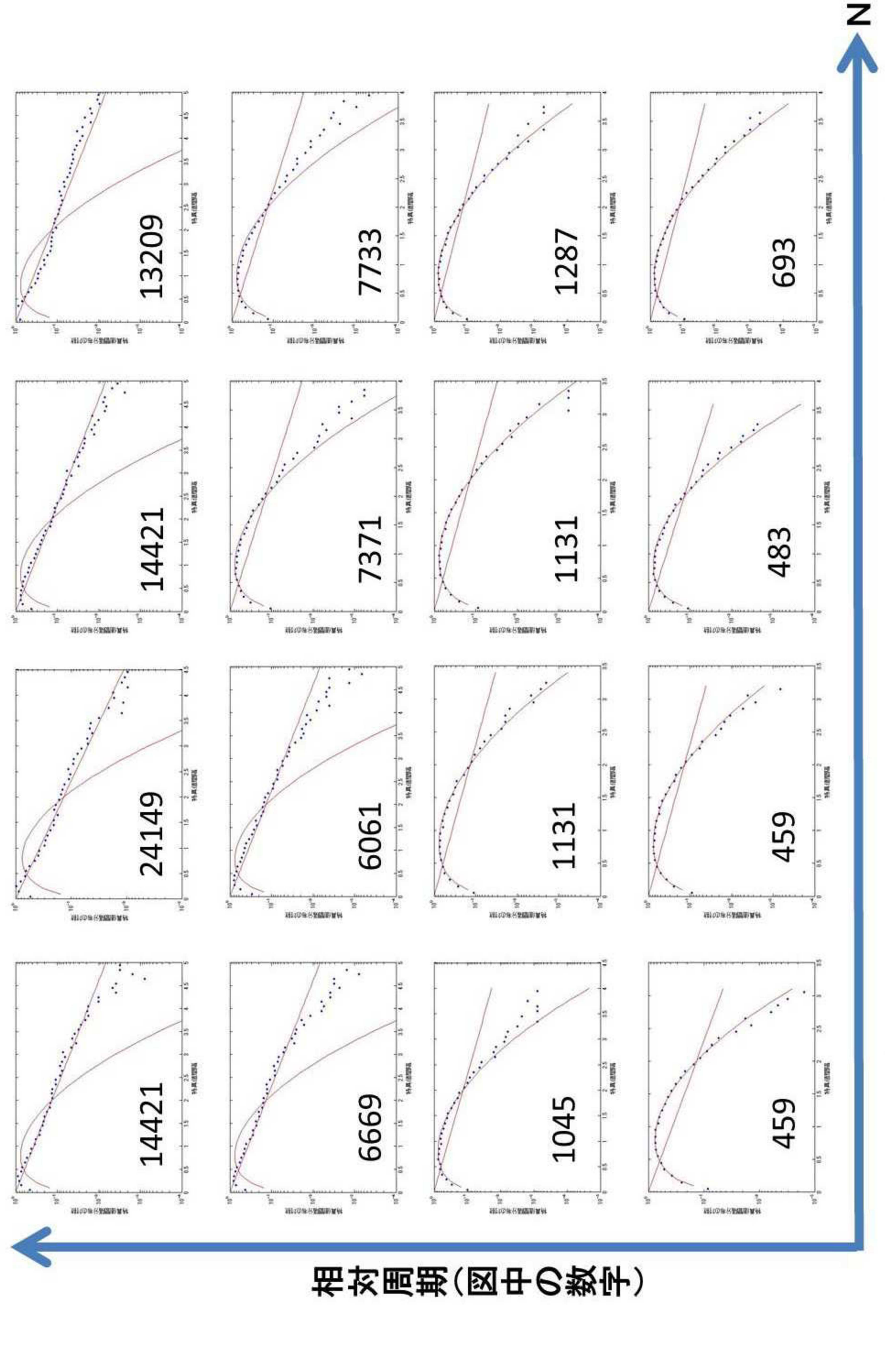
T'=190



T'=14630



T'=159600


N
53
61
71
83
相対周期(図中の数字)
14421
6669
1045
459
24149
6061
1131
459
14421
7371
1131
483
13209
7733
1287
693

数値計算した範囲で相対周期によってはウィグナー分布でもなく分布 A（原点付近の値が 0 ではない）でもない，クラス 4 の特異値間隔分布が観察された．

また，当初は想定していなかった事として，相対周期が短い場合にはウィグナー分布に，相対周期が長い場合はポアソン分布によく似た分布が観察された．これに関しては，1 標本コルモゴロフ-スミルノフ検定を行い，T' が短いときの分布はウィグナー分布である可能性が否定できないという結果を得た．一方，T' が長いときの分布はポアソン分布であるという仮説が棄却された．より長い軌道を用いた実験を行えば，ポアソン分布である事が否定できない標本を得られると予想するが，これは今後の課題である．重要な事柄として，ポアソン的な分布でも間隔 0 の頻度は急激に 0 に近づいおり，ルール 18 や 146 で観察された ${}^tU_rU_r$ が規則性を持つ場合に生じると予想される分布 A とも異なっている．尚，今回の実験では，手持ちの計算機の性能的な限界の為，相対周期が 20 万以下となる保存量を使用している．これは相対周期としては比較的短い．よって，**保存量をランダムに選ぶと，殆どの場合，その特異値間隔分布はポアソン的になると予想している**．但し，現段階では，このポアソン的な分布はポアソン分布であることが否定されているので，擬ポアソン分布と名付けることにする．

さらに，相対周期の変化にともなう特異値間隔分布の変化の様子に着目することで，**pBBS は相対周期という内部パラメタに関して，ウィグナー分布から擬ポアソン分布への遷移を起こすことが分かった**．遷移パラメタは（$p_f = 1$ の）保存量であるとも言える．

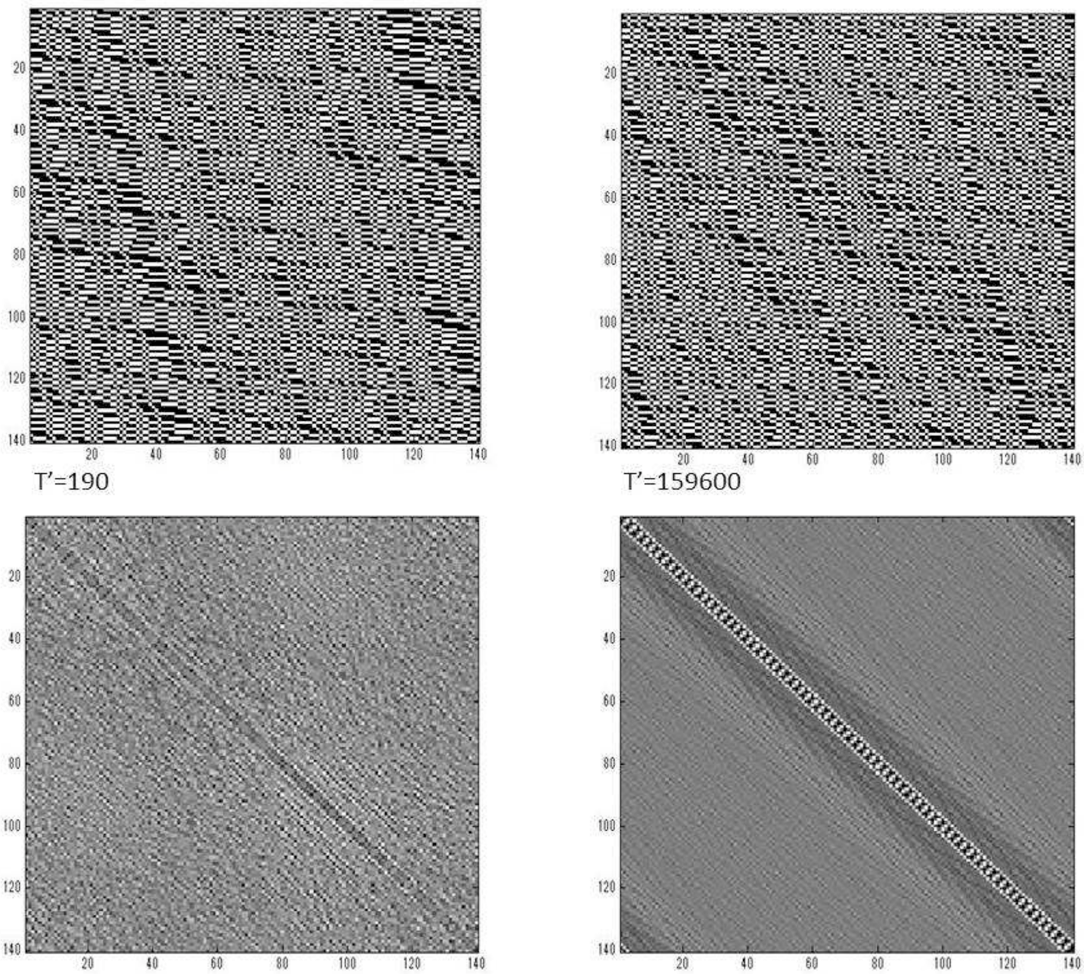
§10. 考察

§10.1. クラス 4 の別の側面

7.2 節で pBBS に着目する動機の 1 つとして，localized structure が衝突で壊れない点を挙げたが，実は別の理由も存在する．ウルフラムが分類を行った後に発表された [11] のインパクトは非常に大きく，CA の分類は，CA の計算能力という側面に傾斜して議論されていた感がある．実際，[2] のあとで出版されたウルフラムの大著 [16] は，この点にかなりのページ数を割いている．しかし，1 章に記したクラス 4 の定義は（基本的には）CA の計算能力とは独立で，計算能力に偏った議論は，クラス 4 の持つ別の側面を見逃す恐れをはらんでいる．そこで，U_r がクラス 4 の特徴を持ち，かつ，計算能力以外の点で数学的な価値が明らかな CA として，BBS に着目したのである．以下に，BBS の価値を補足しておく．BBS で連続系に見られるソリトンの衝突が再現されるのは偶然ではなく，BBS は連続なソリトン系と超離散化という変換によって結びついていることが知られている．さらに，pBBS はリーマン予想との関連が指摘される等,（物理的な背景を考慮せずとも）それ自体が数学的に興味深い CA である [17]．

これまで，研究者ごとに異なる基準のもとで，クラス 4 に属すと主張されたルールは複数あるが，その数学的な価値が明らかなものはルール 110 以外には無かったと思う．pBBS の特異値間隔分布は（保存量によるが）クラス 4 の特徴を示す．これはクラス 4 が確かに数学的に重要な CA を含むことの証左と言える．

§10.2. ランダム行列と周期箱玉系に於ける Poisson-Wigner 遷移



pBBS の特異値間隔分布は 10.1 節に述べたクラス 4 の特徴を示すのもだけではなく，ウィグナー分布や擬ポアソン分布が観察されることもある．2.6 節と 6 章で議論した通り，特異値間隔分布の概形には ${}^tU_rU_r$ の持つ規則性が大きく寄与する．そこでまず，${}^tU_rU_r$ の様子を具体的に観察してみる．

上図の上段は pBBS のサンプルパターンの一部で左側がウィグナー分布になるもの（$T'=190$），右側が擬ポアソン分布になるもの（$T'=159600$）である．下段は，各々に対応する ${}^tU_rU_r$ をグレースケール表示したものである．ここで，単純にグレースケール表示すると対角要素の値（自己相関）が他の成分より大きいので，それ以外の要素の差異が見えづらくなってしまう．上図ではこの点を考慮し，対角要素の値を行列要素の平均値で置き換えたものをグレースケール表示している．

複数のソリトンが周期境界条件のもとで衝突を繰り返す為，サンプルパターン自体はともに複雑な様相を呈している．一方，${}^tU_rU_r$ は相対周期が長い場合，斜め方向に走るテープリッツ行列に見られるような規則性が見られる．

ただし，テープリッツ行列では斜め方向の要素が全て同じ値になるのに対して，先に述べた規則性では要素の値が一致するには至っていない．ポアソン分布と擬ポアソン分布の違いである特異値の縮退の有無はこの差が原因なのではないだろうか.

次に，ウィグナー分布から擬ポアソン分布への遷移について，関連すると思われる事柄をまとめておく．本稿の 2 章で，クラス 3 との比較対象としてランダム行列が登場し，行列サイズ等に対して鋭敏な差異を示さない普遍的な統計量として固有値間隔分布に着目した．この普遍性は非常に強力で，例えば GOE[5] とカイラル GOE では固有値分布は異なるが，固有値間隔分布は一致することが知られている．また，2.5 節の最後に記した通り行列要素が非ガウス的な場合でもウィグナー分布が観察される．逆に，ランダム行列ならば，固有値間隔分布は全てウィグナー分布かというと，そうではない．各行列要素の従う確率分布をガウス分布から 1 パラメタ拡張することで，それを遷移パラメタとして，ウィグナー分布からポアソン分布への遷移が観察できる（[18] の $\beta = 1$ を参照されたい）．ここで，[18] の原点付近では pBBS と同様に $P(0) = 0$ を保って分布形が変化している．この遷移を **Poisson-Wigner 遷移**という [19].

ランダム行列と pBBS の Poisson-Wigner 遷移について，以下の 2 点は特に興味深い.

(I) ランダム行列の遷移と比較すると，pBBS では外部からパラメタを導入する事なく，pBBS に内在した性質から Poisson-Wigner 遷移が生じる.

尚，擬ポアソン分布が観察された pBBS の U_r と同じサイズのバイナリランダム長方行列を使用して数値計算を行ったところ，その特異値間隔分布はウィグナー分布になっていた．しかし，間隔分布以外の統計量の類似性については，現時点ではほぼ不明である．$T' = 190, M = 500$ で作成した pBBS の ${}^tU_rU_r$ の固有値分布を (2.5) 式で $Q = 190/140$ とした $\rho(\lambda)$ と比較したところ，一致は見られなかった．

(II) pBBS の時間発展は決定論的であり，初期状態の生成を除くと確率的な要素の入る余地が無い.

与えられた保存量 α に対し pBBS の取り得る状態の集合を Ω_α とすると，Ω_α は周期軌道によって一意に分解される．今回の数値実験では 1 つの保存量に属す軌道の周期は 1 種類なので，初期状態に対する等しい重みでのサンプリングは，周期軌道を等しい重みでサンプリングする事と等価である．同一の保存量を持つ 10^{30} 個を超える全軌道をサンプリングする事は不可能なため，ランダムサンプリングを行っているが，数値計算の制約を忘れると，原理的にはこのランダムネスを排除できる．その場合，決定論的な系の統計性を研究の対象としていることになる．

そのような研究で，ランダム行列とかかわりが深く，かつ，Poisson-Wigner 遷移が登場する分野に量子カオス論がある [20]．そこでは確率的要素を含まないハミルトニアンのエネルギー固有値の間隔分布としてウィグナー分布や Poisson-Wigner 遷移が観察されることが知られている [21]．ただし，本稿の研究対象はあくまでパターンの特異値であり，今のところ ${}^tU_rU_r$ にハミルトニアンといった物理的な意味は見出されていない．

§10.3. まとめ

本研究では，CA の相対周期パターンの特異値間隔分布を用いて，ウルフラムによる ECA の分類の定量化を試み，数値計算を行った範囲で以下の結果を得た．

クラス２ 相対周期がシステムサイズ以上の U_r がサンプリングできず，特異値間隔分布を求めることができない．ルール 73 は例外で，domain wall[22] と呼ばれる時間変化しないセルに挟まれた領域に於いて比較的複雑な時間発展が生じる．この性質により U_r はサンプリングできた．しかし，${}^tU_rU_r$ が零固有値を多く持つので特異値の個数はかなり少なく，他のクラス 2 のルールと同様に間隔分布が得られていない．

クラス３ 特異値間隔分布はウィグナー分布になる．しかし，ルール 18,146 ではシステムサイズが偶数のときウィグナー分布とは異なる分布が観察された．この分布の特徴は，ウィグナー分布が $P(0) = 0$ であるのに対して，特異値の縮退により $P(0) \simeq 0.5$ となっている点である．

クラス４ ウィグナー分布と異なり，かつ，ルール 18,146 でシステムサイズが偶数のときに見られた分布とも異なる間隔分布が観察された．原点付近の値は $P(0) \simeq 0$ である．

以上より，相対周期パターンの特異値間隔分布は分類の指標として有効と思われる．重要とされるクラス 4 の探索に於いては，まず，原点付近で $P(0) \simeq 0$ である事を確認し（特異値の縮退には ${}^tU_rU_r$ に見られる規則性が強く影響することが分かっている），次に，統計的検定でウィグナー分布ではないものを求めれば良い．尚，本研究によりウルフラムがクラス 4 の特徴として挙げた，effectively have very long transients の情報を除いても，クラス 3 とクラス 4 の違いを定量化できる事が分かった．

また，ECA 以外の CA として本手法を pBBS に適用した結果，保存量をパラメタとして Poisson-Wigner 遷移が観察される事が分かった．保存量によってはクラス 4 の特徴を満たす特異値間隔分布も現れる．

§10.4. 今後の課題

本研究では，$N = 200$ 付近の小数のシステムサイズのもとで数値実験を行っており，今後はより多くのシステムサイズで同様の実験を行う予定である．ただし，ウルフラムの分類は非常に大まかなもので，1 章のルール 90 の例外から明らかな通り，当初から全てのシステムサイズに対してクラスごとに同じ挙動が見られると主張している訳ではない．どのような例外が存在し，そのときの特異値間隔分布がどのような分布になるのかを詳細に調べることは，ウルフラムの分類自体の妥当性の検証に繋がるだろう．

また，クラス 3 のルール 22,30,45,106 に関しては相対周期が非常に長い等の理由で U_r がサンプリングできず，解析を断念した．これらのルールに於いてウィグナー分布が見られるか否かは，より高性能の計算機を用いて確認する必要がある．

最後に，pBBS がクラス 4 の特徴を示すことから，その計算能力も今後の解析対象として興味深い．pBBS のアルゴリズムとしての側面を議論した先行研究に [23] がある．

References

[1] K.Nishinari, D.Takahashi "Analytical properties of ultradiscrete Burgers equation and rule 184 cellular automaton" J.Phys.A **31**, 5439-5450 (1998)

[2] S.Wolfram "Cellular Automata and Complexity" Addison-Wesley,Reading (1994)

[3] 金子勇治　時弘哲治　間田潤 "エレメンタリーセルオートマトンの相互行列の解析" 九州大学応用力学研究所 研究集会報告 **24AO-S3**, 103-126 (2012)

[4] V.Plerou, P.Gopikrishnan, B.Rosenow, L.A.N.Amaral, T.Guhr and H.E.Stanley "Random Matrix Approach to Cross-Correlations in Financial Data" Phys.Rev.E **65**, 066126 (2002)

[5] 永尾太郎 "ランダム行列の基礎" 東京大学出版会 (2005)

[6] The List of Largest Known Primes Home Page http://primes.utm.edu/primes/home.php

[7] L. Nemes "Statistical studies of level correlations and chaotic phenomena in spectroscopy" Acta Physica Hungarica **73**, 95-117 (1993)

[8] C.Hammond, S.J.Miller "Distribution of eigenvalues for the ensemble of real symmetric Toeplitz matrices" Journal of Theoretical Probability **18**, 537-566 (2005)

[9] T.A.Brody, J.Flores, J.B.French, P.A.Mello, A.Pandey and S.S.M.Wong "Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations" Rev. Mod. Phys. **53**, 385-479 (1981)

[10] G.J.Martnez, A.Adamatzky, F.Chen, L.Chua"On Soliton Collision between Localization in Complex Elementary Cellular Automata: Rule 54 and 110 and Beyond" Complex Systems **21**, 117-142 (2012)

[11] M.Cook "Universality in Elementary Cellular Automata." Complex Systems **15**, 1-40 (2004)

[12] K.Park, K.Steiglitz and P.Thurston "Soliton like behaviour in automata" Physica D **19**, 423-432 (1986)

[13] D.Takahashi, J.Satsuma "A soliton cellular automaton" J.Phys.Soc.Jpn. **59**, 3514 (1991)

[14] J.Mada, T.Tokihiro "Correlation function for a periodic box-ball system" J.Phys.A: Math. Theor. **43**, 135205(15pp) (2010)

[15] 時弘哲治 "箱玉系の数理" 朝倉書店（2010）

[16] S.Wolfram, A New Kind of Science, Wolfram Media Inc (2002)

[17] T.Tokihiro, J.Mada "Asymptotic behaviour of fundamental cycle of periodic box-ball systems : A number theoretical aspect" Glasgow Math.J. **47A**, 199-204 (2005)

[18] S.M.Nishigaki, M.Giordano, T.G.Kovács, F.Pittler "Critical statistics at the mobility edge of QCD Dirac spectra" arXiv:1312.3286v1 (2013)

[19] S.M.Nishigaki "Accuracy and range of validity of the Wigner surmise for mixed symmetry classes in random matrix theory" Phys. Rev. E **86**, 062102 (2012)

[20] 長谷川洋 "量子系の準位統計（大槻義彦編　物理学最前線２８）" 共立出版株式会社（1991）

[21] H.Ishio, K.Nakamura "Quantum irregular spectra: An alternative interpretation from the viewpoint of nonlinear dynamics" Phys. Rev. A **46**, R2193 (1992)

[22] W.Li and N.Packard "The Structure of the Elementary Cellular Automata Rule Space" Complex Systems **4**, 281-297 (1990)

[23] 由良文孝 "ソリトンセルオートマトンと量子コンピューティング" 数理解析研究所講究録 1221 巻, 70-89 (2001)