ハイゼンベルク点過程の超一様性について

中央大学大学院理工学研究科　松井 貴都
Takato Matsui　Graduate School of Science and Engineering, Chuo University

1　はじめに

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 [11]. 結晶, 準結晶, 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 [9].

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

$$\Xi = \sum_{i:i\in\mathbb{N}} \delta_{X_i} \tag{1.1}$$

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 $\text{vol}(\Lambda)$ と書くことにすると, 上の主張は $\mathbf{E}[\Xi(\Lambda)] \propto \text{vol}(\Lambda)$ 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 $\text{var}[\Xi(\Lambda)]$ を

$$\text{var}[\Xi(\Lambda)] := \mathbf{E}[(\Xi(\Lambda) - \mathbf{E}[\Xi(\Lambda)])^2] \tag{1.2}$$

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 [9]. 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; $\text{var}[\Xi(\Lambda)] \propto \text{vol}(\lambda)$.

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. ここでは, 無限点過程 Ξ の超一様性を,

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

で定義する. 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

$$\mathrm{vol}(\mathbb{B}_R^{(d)})=\frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2+1)}R^d \tag{1.3}$$

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 [9]

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

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が該当する. 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ものである.

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. Ξ は点過程 (1.1) 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. ランダム行列理論において最も研究されている行列式点過程は, $S=\mathbb{R}$ 上の sin(sinc) 点過程 $(\Xi_{\sin},K_{\sin},dx)$ である. この点過程の相関核は $K_{\sin}(x,y)=\sin(x-y)/\{\pi(x-y)\},\ x,y\in\mathbb{R}$ と与えられる. 領域 $\Lambda=\mathbb{B}_R^{(d)}$ を大きくする大規模極限においては

$$\mathrm{var}[\Xi_{\sin}(\mathbb{B}_R^{(1)})]\sim\frac{\log R}{\pi^2},\quad R\to\infty$$

が成り立ち, Class II の超一様性を持つことが知られている [6]. Torquato はこの sin 点過程を高次元に拡張した Fermi 球点過程とよばれる次元 $d\in\mathbb{N}$ を径数とした 1 径数の行列式点過程族について研究を行い, 一般の d について Class II の超一様性を持つことを証明した [9, 10]. Class I の超一様性を持つ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 $(\Xi_{\mathrm{Ginibre}},K_{\mathrm{Ginibre}},\lambda_{N(0,1;\mathbb{C})}),\ K_{\mathrm{Ginibre}}(x,y)=e^{x\overline{y}},\ x,y\in\mathbb{C}$ である. 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 [3]. $\mathbb{C}$ 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 [8] が証明した. Torquato [9] 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; $(\Xi_{\mathsf{H}_1},K_{\mathsf{H}_1},\lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C}^1)})=(\Xi_{\mathrm{Ginibre}},K_{\mathrm{Ginibre}},\lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C})})$.

ここで, 高次元複素空間 $\mathbb{C}^D$ について説明する. $S=\mathbb{C}^D,D\in\mathbb{N}$ のとき, $x\in S$ 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, $x = x_{\mathrm{R}},\ y = y_{\mathrm{R}} \in \mathbb{R}^D$ であれば, $x \cdot \overline{y} = x_{\mathrm{R}} \cdot y_{\mathrm{R}} := \sum_{\ell=1}^{D} \mathrm{Re}x^{(\ell)}\mathrm{Re}y^{(\ell)}$ と書ける．ノルムは $|x| := \sqrt{x \cdot \overline{x}} = \sqrt{|x_{\mathrm{R}}|^2 + |x_{\mathrm{I}}|^2}$ と定義する．このように設定すると, $S = \mathbb{C}^D$ 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 $\lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C})}(dx) := e^{-|x|^2}dx/\pi$ であることから, これを拡張し, $S = \mathbb{C}^D$ 上の参照測度は

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

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 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ の 1 径数族である．各 D に対して, 相関核は

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

で与えられる．

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 [9, 8]．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．

本研究は香取眞理氏（中央大理工学部）と白井朋之氏（九大 IMI）との共同研究に基づく．紙面の関係で本稿では証明の記述は省いた．証明も含んだ詳細は本論文 [5] を参照下さい．

2　相関関数と分散

この章では, 点過程と分散等の定義及び説明を行う．計算で用いた Bessel 関数や, それを利用した公式群, また, Fourie 変換の定義についてもこの章で説明する．

2.1　相関関数と分散の一般式

点過程 $\Xi = \Xi(\cdot)$ の配置空間は

$$\mathrm{Conf}(S) = \left\{ \xi = \sum_i \delta_{x_i} :\ x_i \in S,\ \text{すべての有界な集合}\ \Lambda \subset S\ \text{に対して}\ \xi(\Lambda) < \infty \right\}$$

と与えられる．すべての点 $x \in S$ に対して $\Xi(\{x\}) \in \{0, 1\}$ であれば, その点過程は単純という．ここで, $\mathcal{B}_c(S)$ を S 上でコンパクトな台を持つ有界な可測関数全体の集合とし, $\xi \in \mathrm{Conf}(S)$ と関数 $\phi \in \mathcal{B}_c(S)$ に対して

$$\langle \xi, \phi \rangle = \int_S \phi(x)\xi(dx) = \sum_i \phi(x_i)$$

と置く．この形式によって書かれるランダムな変数を, 一般に点過程 Ξ の線形統計量とよぶ．点過程 Ξ において, 任意の $\phi \in \mathcal{B}_c(S)$ に対して

$$\mathbf{E}[\langle \Xi, \phi \rangle] = \int_S \phi(x)\rho_1(x)\lambda(dx) \tag{2.1}$$

が成り立つような非負の可測な関数 ρ_1 が存在するとき, ρ_1 は参照測度 λ に関する点過程 Ξ の 1 点相関関数とよばれる. 定義より, $\rho_1(x)$ は $x \in S$ での点の密度を与える. さらに, $n \in \mathbb{N}$ に対し, $\xi \in \mathrm{Conf}(S)$ より $\xi_n = \sum_{i_1,\ldots i_n, i_j \neq i_k, j \neq k} \delta_{x_{i_1}} \cdots \delta_{x_{i_n}}$ と定義し, λ の n 重積 $\lambda^{\otimes n}(dx_1 \cdots dx_n) := \prod_{i=1}^n \lambda(dx_i)$ を定義する. 点過程 Ξ において, 任意の $\phi \in \mathcal{B}_c(S^n)$ に対して

$$\mathbf{E}[\langle \Xi_n, \phi \rangle] = \int_{S^n} \phi(x_1, \ldots, x_n) \rho_n(x_1, \ldots, x_n) \lambda^{\otimes n}(dx_1 \cdots dx_n) \tag{2.2}$$

が成り立つような非負で対称な S^n 上の可測関数 ρ_n が存在するとき, ρ_n を $\lambda^{\otimes n}$ に対する点過程 Ξ の n 点相関関数という. 点過程 Ξ と n 点相関関数 ρ_n に対して, 次のことを仮定する.

(A1) $(S, \mathcal{B}_c(S), \lambda)$ 上の点過程 Ξ は, 1 点相関関数 ρ_1 と 2 点相関関数 ρ_2 を持つ.

上記のことを仮定すると, n 点相関関数の定義 (2.2) を用いて次の補題 2.1 が成り立つ [9, 11].

補題 2.1 **(A1)** を仮定すると, (1.2) で定義される分散 $\mathrm{var}[\langle \Xi, \phi \rangle]$ は次のように与えられる.

$$\mathrm{var}[\langle \Xi, \phi \rangle] = \int_S |\phi(x)|^2 \rho_1(x) \lambda(dx) + \int_{S \times S} \phi(x) \overline{\phi(y)} (\rho_2(x,y) - \rho_1(x)\rho_1(y)) \lambda^{\otimes 2}(dxdy) \tag{2.3}$$

いま, 基本空間が d 次元ユークリッド空間 $S = \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$ で与えられる場合を考え, 1 点相関関数 ρ_1 と, 2 点相関関数 ρ_2 に対して, 次の仮定を置く.

(A2) 系が $\mathbb{R}^d$ 上の Lebesgue 測度 dx に対して並進不変かつ, 次の 2 つのことを満たす.

(i) 参照測度が $\mathbb{R}^d$ 上の Lebesgue 測度 dx に対する密度 $\ell(x)$ を持ち ($\lambda(dx) = \ell(x)dx$, $x \in \mathbb{R}^d$),

$$\rho_1(x)\ell(x) = \mathrm{constant} =: \widetilde{\rho}, \quad \forall x \in \mathbb{R}^d$$

が成り立つ. $\widetilde{\rho}$ は無限体積極限における単位体積あたりの点の数密度を表す.

(ii) 可測な偶関数 $g_2(x) = g_2(-x)$, $x \in \mathbb{R}^d$ があり, これを用いて 2 点相関関数と密度関数の積が

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

と書ける. $g_2(x)$ は unfolded 2 相関関数とよばれる [2].

ここで, 全相関関数 (total correlation function) とよばれる関数 $C(x)$ を

$$C(x) = g_2(x) - 1, \quad x \in \mathbb{R}^d \tag{2.4}$$

と定義する [9]. この関数は 2 点間の相関を表す関数で, $x \to \infty$ で 0 に減衰し, 長距離で 2 点間の相関が消失をすることを表す. (2.4) を用いると, **(A1)**, **(A2)** の下で (2.3) は

$$\mathrm{var}[\langle \Xi, \phi \rangle] = \widetilde{\rho} \left[\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx + \widetilde{\rho} \int_{\mathbb{R}^d} C(z) dz \int_{\mathbb{R}^d} \phi(x) \overline{\phi(x-z)} dx \right]$$

と書ける.

ここで, ϕ についての交差積分 (intersection integral) とよばれる関数

$$\mathcal{I}_\phi(z) := \int_S \phi(x) \overline{\phi(x-z)} dx, \quad \phi \in \mathcal{B}_c(S), \quad z \in \mathbb{R}^d \tag{2.5}$$

を定義する. $\phi \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ であれば $\mathcal{I}_\phi \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ となる. (2.5) を用いることで, 次の命題 2.2 が成り立つ.

命題 2.2 (A1),(A2) を仮定すると, $\mathcal{B}_c(S)$ に対し (2.3) は

$$\mathrm{var}[\langle \Xi, \phi\rangle] = \widetilde{\rho}\left[\int_S |\phi(x)|^2 dx + \widetilde{\rho}\int_S \mathcal{I}_\phi(x)C(x)dx\right] \tag{2.6}$$

と書ける.

ここで, $k=(k^{(1)},\dots,k^{(d)}),\ x=(x^{(1)},\dots,x^{(d)})\in\mathbb{R}^d$, $k\cdot x=\sum_{\ell=1}^d k^{(\ell)}x^{(\ell)}$ に対し, 可積分な関数 φ に対する Fourie 変換を

$$\widehat{\varphi}(k) = \mathsf{F}[\varphi](k) := \int_{\mathbb{R}^d} e^{\sqrt{-1}k\cdot x}\varphi(x)dx \tag{2.7}$$

と定義する. 逆 Fourie 変換は

$$\varphi(x) = \mathsf{F}^{-1}[\widehat{\varphi}](x) := \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} e^{\sqrt{-1}k\cdot x}\widehat{\varphi}(k)dk \tag{2.8}$$

と与えられる. このとき, $\varphi(-x)=\varphi(x) \iff \widehat{\varphi}(-k)=\widehat{\varphi}(k)$ の関係が成り立つ, いま, $\varphi(x)$ と $\psi(x)$ を 2 乗可積分な関数とすれば Parseval の等式

$$\int_{\mathbb{R}^d}\varphi(x)\overline{\psi(x)}dx = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\widehat{\varphi}(k)\overline{\widehat{\psi}(k)}dk \tag{2.9}$$

が成り立つ. ここで, (2.7) から $\mathsf{F}[\phi(\cdot - z)](k)=\widehat{\phi}(k)e^{\sqrt{-1}k\cdot z}$ が得られる. したがって, $\phi\in\mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ に対して (2.9) を用いることにより, (2.5) は

$$\mathcal{I}_\phi(z) = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\widehat{\phi}(k)\overline{\widehat{\phi}(k)e^{\sqrt{-1}k\cdot z}}dk = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}e^{\sqrt{-1}k\cdot z}|\widehat{\phi}(k)|^2dk, \quad z\in\mathbb{R}^d$$

と書き換えられる. この式と (2.8) を比較することにより, 交差積分の Fourie 変換 $\widehat{\mathcal{I}_\phi}(k)$ は

$$\widehat{\mathcal{I}_\phi}(k) = |\widehat{\phi}(k)|^2, \quad \phi\in\mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d), \quad k\in\mathbb{R}^d \tag{2.10}$$

となる. ここで, 次の仮定を置く.

- **(A3)** $S=\mathbb{R}^d,\ d\in\mathbb{N}$ であり, 全相関関数 $C(x)$, $x\in\mathbb{R}^d$ は 2 乗可積分である. したがって, その Fourie 変換 $\widehat{C}(k)$, $k\in\mathbb{R}^d$ も同様に 2 乗可積分である.

ここで, 構造因子とよばれる関数 $\widehat{S}(k)$ を

$$\widehat{S}(k) = 1+\widetilde{\rho}\widehat{C}(k), \quad k\in\mathbb{R}^d \tag{2.11}$$

と定義する. 全相関関数 $C(x)$ の定義より, $\widehat{S}(-k)=\widehat{S}(k)$, $k\in\mathbb{R}^d$ が成り立つため, $S(k)$ も同様に偶関数である. (2.6), (2.9), (2.11) を組み合わせることにより, 次の命題 2.3 が成り立つ.

命題 2.3 (A1)–(A3) を仮定すると, $\phi\in\mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ に対し, (2.3) は次のように与えられる.

$$\mathrm{var}[\langle \Xi, \phi\rangle] = \frac{\widetilde{\rho}}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\widehat{\mathcal{I}_\phi}(k)\widehat{S}(k)dk \tag{2.12}$$

2.2 Bessel 関数

この節では Bessel 関数に関係する諸式について説明する.

第 1 種 Bessel 関数 $J_\nu(x)$ は

$$J_\nu(x) = \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{n!\Gamma(n+\nu+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2n+\nu}, \quad x\in\mathbb{C}\backslash(-\infty,0) \tag{2.13}$$

と定義され, 第 1 種変形 Bessel 関数 $I_\nu(x)$ は

$$I_\nu(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!\Gamma(\nu+n+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2n+\nu},\quad x\in\mathbb{C}\backslash(-\infty,0] \tag{2.14}$$

と定義される [1, 7]. ここで, 関数 $\varphi(x), x=(x^{(1)},\ldots,x^{(d)})\in\mathbb{R}^d$ が動径 $r=|x|=\sqrt{\sum_{\ell=1}^{d}(x^{(\ell)})^2}$ のみに依存して, $\varphi(x)=f(r)$ と書けるとき, その関数は動径関数という. 動径関数に対する Fourie 変換について, 次の補題 2.4 が成り立つことが知られている [9].

補題 2.4 可積分関数 $\varphi(x)$, $x\in\mathbb{R}^d$ が動径関数であるとき, すなわち, $r:=|x|$ のみに依存していて $\varphi(x)=f(r)$ として表せるとき, その Fourie 変換 (2.7) は $\kappa:=|k|$ を用いて

$$\widehat{\varphi}(k)=\widehat{f}(\kappa)=(2\pi)^{d/2}\int_0^\infty r^{d-1}\frac{J_{(d-2)/2}(\kappa r)}{(\kappa r)^{(d-2)/2}}f(r)dr=\frac{(2\pi)^{d/2}}{\kappa^{(d-2)/2}}\int_0^\infty r^{d/2}J_{(d-2)/2}(\kappa r)f(r)dr \tag{2.15}$$

と与えられる. 動径関数の逆 Fourie 変換 (2.8) は

$$\varphi(x)=f(r)=\frac{1}{(2\pi)^{d/2}}\int_0^\infty \kappa^{d-1}\frac{J_{(d-2)/2}(\kappa r)}{(\kappa r)^{(d-2)/2}}\widehat{f}(\kappa)d\kappa=\frac{1}{(2\pi)^{d/2}r^{(d-2)/2}}\int_0^\infty \kappa^{d/2}J_{(d-2)/2}(\kappa r)\widehat{f}(\kappa)d\kappa \tag{2.16}$$

と与えられる.

次に, 計算で用いる Bessel 関数を用いた公式群について紹介する. 第 1 種 Bessel 関数を用いた不定積分について, 次の式が成り立つ [1, 7].

$$\int\frac{J_\nu(ax)^2}{x^{2\nu-1}}dx=-\frac{1}{2(2\nu-1)}\frac{J_\nu(ax)^2+J_{\nu-1}(ax)^2}{x^{2(\nu-1)}},\quad \nu\neq 1/2$$

定積分について, $\mathrm{Re}\nu>-1,\ \mathrm{Re}p^2>0$ を用いて次の式が成り立つ [1, 7].

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty x^{\nu+1}e^{-p^2x^2}J_\nu(ax)dx=\frac{a^\nu}{(2p^2)^{\nu+1}}e^{-a^2/(4p^2)},\\
&\int_0^\infty \frac{J_\nu(ax)^2}{x}dx=\frac{1}{2\nu},\\
&\int_0^\infty xe^{-p^2x^2}J_\nu(ax)^2dx=\frac{1}{2p^2}e^{-a^2/(2p^2)}I_\nu\left(\frac{a^2}{2p^2}\right),
\end{aligned}$$

$x\to\infty$ としたとき, (2.13), (2.14) について, 以下の漸近展開が成り立つ [1, 7].

$$\begin{aligned}
J_\nu(x)&\sim\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left\{\cos\omega_\nu(x)\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\alpha_{2k}(\nu)}{(2k)!2^{6k}x^{2k}}-\sin\omega_\nu(x)\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\alpha_{2k+1}(\nu)}{(2k+1)!2^{3(2k+1)}x^{2k+1}}\right\}\\
&\sim\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos\omega_\nu(x),\quad x\to\infty,\\
I_\nu(x)&\sim\frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\alpha_k(\nu)}{k!2^{3k}}x^{-k},\quad x\to\infty
\end{aligned}$$

ここで, $\omega_\nu(x)$ は $\omega_\nu(x)=x-(2\nu+1)\pi/4$ と定義され, $\alpha_k(\nu)$ は $k=0$ では $\alpha_0(\nu)=0$ とし, それ以外は

$$\alpha_k(\nu)=\prod_{\ell=1}^{k}(4\nu^2-(2l-1))^2=\prod_{\ell=-k+1}^{k}(2\nu+2\ell-1),\quad k\in\mathbb{N}. \tag{2.17}$$

3　数分散

この章では, Heisenberg 点過程族の数分散を求めるために必要な諸式の導出を行う.

3.1　一般式

$S = \mathbb{R}^d, d \in \mathbb{N}$ である場合を考える. 領域 $\Lambda \subset S$ について, 指示関数を $x \in \Lambda$ のときに $1_\Lambda(x) = 1$, それ以外のときは $1_\Lambda(x) = 0$ とする. 定義より, 指示関数 $1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(x)$ は動径関数である. このことを明記するために $1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(x) = \chi_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(|x|)$ と置く. いま, $\phi = 1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(x)$ とすれば (2.5) は

$$\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(x) = \int_{\mathbb{R}^d} 1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(y) 1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(y - x) dy, \quad x \in \mathbb{R}^d \tag{3.1}$$

と書ける. これは交差体積 (intersection volume) よばれ, 半径 R の 2 つの球の重なり体積を表す [9].

球 $\mathbb{B}_R^{(d)}$ 内に含まれる点の数の期待値 $\mathbf{E}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})]$ は, (3.1) と, (1.3) で与えられる d 次元球の体積を用いて

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

と書ける. 次に, 指示関数 $1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(x)$ の Fourie 変換を考える. この関数が動径関数であるから, (2.15) を用いることで次の補題 3.1 が成り立つ [4].

補題 3.1　(3.1) は動径関数であるため, その Fourie 変換も $\kappa = |k|$ の動径関数として

$$\widehat{1_{\mathbb{B}_R^d}}(k) := \int_{\mathbb{R}^d} e^{\sqrt{-1} k \cdot x} 1_{\mathbb{B}_R^d}(x) dx = \int_{\mathbb{B}_R^d} e^{\sqrt{-1} k \cdot x} dx$$

と与えられる. この Fourie 変換を $1\widehat{_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(k)} = \chi\widehat{_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(|k|)}$ と書けば, $\widehat{\chi_{\mathbb{B}_R^{(d)}}(\kappa)}$ は (2.15) を用いて

$$\widehat{\chi_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(\kappa) = \frac{(2\pi)^{d/2}}{\kappa^{(d-2)/2}} \int_0^R r^{d/2} J_{(d-2)/2}(\kappa r) dr = (2\pi)^{d/2} \left(\frac{R}{\kappa} \right)^{d/2} J_{d/2}(\kappa R)$$

と与えられる.

(2.10) を用いれば, 交差体積の Fourie 変換 $\widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(k)$ は

$$\widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(k) = (2\pi)^d R^d \frac{J_{d/2}(\kappa R)^2}{\kappa^d} =: \widehat{\mathcal{I}_{\chi_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(\kappa), \quad k \in \mathbb{R}^d, \quad \kappa = |k| \tag{3.2}$$

となる. また, 動径関数の逆 Fourie 変換 (2.16) を (3.2) に対して用いることで, (3.1) は動径 $r = |x|$ の関数

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(x) =& \mathsf{F}^{-1} \left[\widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}} \right](x) \\ =& \frac{(2\pi)^{d/2}}{r^{(d-2)/2}} R^d \int_0^R \frac{J_{d/2}(\kappa R)^2 J_{(d-2)/2}(\kappa r)}{\kappa^{d/2}} d\kappa =: \mathcal{I}_{\chi_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(r), \quad r = |x| \leq 2R \end{aligned} \tag{3.3}$$

として得られる. 定義より, $r > 2R$ ならば $\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(r) = 0$ となる. したがって, この交差体積の式を用いることで次の系 3.2 が得られる.

系 **3.2**

(i) **(A1)**, **(A2)** を仮定すると, 数分散は (2.4), (3.3) を用いて

$$\mathrm{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] = \widetilde{\rho}\left[\mathrm{vol}(\mathbb{B}_R^{(d)}) + \widetilde{\rho}\int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{I}_{\chi_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(|x|)C(x)dx\right] \tag{3.4}$$

と書ける. 全相関関数が動径関数であり, $C(x) = c(r),\ r = |x|$ と書けるとき, (3.4) は

$$\mathrm{var}[\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] = \widetilde{\rho}\left[\mathrm{vol}(\mathbb{B}_R^{(d)}) + \frac{2\pi^{d/2}\widetilde{\rho}}{\Gamma(d/2)}\int_0^{2R} \mathcal{I}_{\chi_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}(r)c(r)r^{d-1}dr\right]$$

と書き直せる.

(ii) **(A1)**–**(A3)** を仮定すると, 数分散は (2.11), (3.2) を用いて

$$\mathrm{var}[(\Xi(\mathbb{B}_R^{(d)})] = \frac{\widetilde{\rho}}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} \widehat{\mathcal{I}_{1_{\mathbb{B}_R^{(d)}}}}(|k|)\widehat{S}(k)dk = \widetilde{\rho}R^d\int_{\mathbb{R}^d}\frac{J_{d/2}(|k|R)^2}{|k|^d}\widehat{S}(k)dk \tag{3.5}$$

と書ける. 構造因子が動径関数であり, $\widehat{S}(k) = \widehat{s}(\kappa),\ \kappa = |k|$ と書けるとき, (3.5) は

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

と書き直せる.

系 3.2 は, 点過程を特徴づける全相関関数 $c(r)$ あるいは構造因子 $\widehat{s}(\kappa)$ が決定できれば, その点過程の数分散が求められることを表している.

3.2 行列式点過程

行列式点過程とは下記のように定義される点過程である [4].

定義 3.3 $(S, \mathcal{B}_c(S), \lambda)$ 上の単純点過程 Ξ に対して, 測度 λ に対する相関関数が一般に可測な積分核 $K : S\times S \to \mathbb{C}$ を用いて

$$\rho_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \det_{1\le j,k\le n}[K(x_j, x_k)],\ n\in\mathbb{N},\ x_1,\ldots,x_n\in S$$

と与えられるとき, その点過程を行列式点過程という. K は相関核 (correlation kernel) とよばれる. 行列式点過程は (Ξ, K, λ) で指定される.

点過程 Ξ が行列式点過程であるならば, $\phi\in\mathcal{B}_c(S)$ に対して, (2.1), (2.3) はそれぞれ

$$\begin{aligned}\mathbf{E}[\langle\Xi,\phi\rangle] &= \int_S \phi(x)K(x,x)\lambda(dx),\\ \mathrm{var}[\langle\Xi,\phi\rangle] &= \frac{1}{2}\int_{S\times S}|\phi(x)-\phi(y)|^2K(x,y)K(y,x)\lambda^{\otimes 2}(dxdy)\end{aligned}$$

と与えられる. 特に, $\phi = 1_\Lambda$ であるときは, 有界な領域 $\Lambda\subset S$ に対して

$$\begin{aligned}\mathbf{E}[\langle\Xi,\phi\rangle] &= \int_\Lambda K(x,x)\lambda(dx),\\ \mathrm{var}[\langle\Xi,\phi\rangle] &= \int_\Lambda\int_{S\setminus\Lambda} K(x,y)K(y,x)\lambda(dx)\lambda(dy)\end{aligned}$$

と書ける. ここで, $S = \mathbb{R}^d,\ d\in\mathbb{N}$, あるいは $S = \mathbb{C}^D,\ d = 2D$ である場合を考えて, 次の仮定を置く.

(DPP) 点過程は行列式点過程 (Ξ, K, λ) であり, 次のことを満たす.

(i) 相関核は Hermite である; $\overline{K(x,y)} = K(y,x),\ x,y \in S$.

(ii) 参照測度が $\lambda(dx) = \ell(x)dx, x \in S$ で与えられ, $K(x,x)\ell(x) =: \widetilde{\rho},\ \forall x \in S$ が成り立つ.

(iii) 次が成り立つような, 可測な偶関数 $C(x) = C(-x),\ x \in S$ がある.

$$\frac{|K(x,y)|^2}{K(x,x)K(y,y)} = -C(x-y), \quad x,y \in S$$

(DPP) と **(A3)** を仮定することにより, 次の系が成り立つ.

系 3.4 **(DPP)** と **(A3)** を仮定すると, 系 3.2 (ii) が成り立つ.

3.3 Heisenberg 点過程族

Heisenberg 点過程族は行列式点過程であり, **(DPP)** を満たす. このとき, 次の補題 3.5 が成り立つ.

補題 3.5 D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D, D \in \mathbb{N}$ 上の Heisenberg 点過程族 $(\Xi_{\mathsf{H}}^{(D)}, K_{\mathsf{H}}^{(D)}, \lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ は仮定 **(DPP)** を満たす. このとき $|x|^2 = |x_{\mathrm{R}}|^2 + |x_{\mathrm{I}}|^2,\ x \in \mathbb{C}^D$ とすれば

$$\begin{aligned}\widetilde{\rho} =& \frac{1}{\pi^D}, \\ C(x) =& c(|x|) = -e^{-|x|^2}\end{aligned}$$

が成り立つ.

補題 3.5 を用いることで 次の命題 3.6 が成り立つ.

命題 3.6 D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D, D \in \mathbb{N}$ 上の Heisenberg 点過程族 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ に対して, その構造因子は $\widehat{S}(k) = \widehat{s}(\kappa) = 1 - e^{-\kappa^2/4}$ となる. また, 期待値と数分散はそれぞれ次のように与えられる.

$$\mathbf{E}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})] = \frac{R^{2D}}{D!}, \tag{3.6}$$

$$\mathrm{var}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})] = \frac{2R^{2D}}{(D-1)!} \int_0^\infty \frac{J_D(\kappa R)^2}{\kappa}(1 - e^{-\kappa^2/4})d\kappa, \quad R > 0 \tag{3.7}$$

(3.6) と (3.7) を用いて, 各次元における Heisenberg 点過程族の数分散とその漸近展開形を計算することができる.

4 数分散の厳密表式と主定理

この章では, 本研究により得られた主要な結果について述べる. 証明の詳細は本論文 [5] の第 4 章に記述したので. そちらを参照のこと.

命題 4.1 D 次元複素空間 $\mathbb{C}^D, D \in N$ 上の Heisenberg 点過程族 $(\Xi_{\mathsf{H}_D}, K_{\mathsf{H}_D}, \lambda_{\mathrm{N}(0,1;\mathbb{C}^D)})$ の数分散は

$$\mathrm{var}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})] = \frac{R^{2D}e^{-2R^2}}{D!}\left[I_0(2R^2) + 2\sum_{n=1}^{D-1} I_n(2R^2) + I_D(2R^2)\right], \quad R > 0 \tag{4.1}$$

と与えられる.

(4.1) 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 4.2 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

$$\lim_{R\to\infty} R \frac{\mathrm{var}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]}{\mathbf{E}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]} = \frac{D}{\sqrt{\pi}} \tag{4.2}$$

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

$$\frac{\mathrm{var}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]}{\mathbf{E}[\Xi_{\mathsf{H}_D}(\mathbb{B}_R^{(2D)})]} \sim \frac{D}{\sqrt{\pi}} R^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha_k(D)}{(2k+1)k!2^{4k}} R^{-2k}, \quad R \to \infty \tag{4.3}$$

が成り立つ. ここで, $\alpha_k(D)$ は (2.17) で定義したものである.

謝辞

本研究は京都大学数理解析研究所の共同利用・共同研究による援助を受けて行われたものである.

参考文献

[1] 森口 繁一, 一松 信, 宇田川銈久, 1987, 岩波数学公式 III 特殊関数, 岩波書店

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

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

[4] Katori, M., Shirai, T., Partial isometries, duality, and determinantal point processes, arXiv:PR/1903.04945

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

[6] Mehta, M. L., 2004, Random Matrices, 3rd edn, Pure and Applied Mathematics, Vol. 142 (Amsterdam, Elsevier/Academic Press)

[7] Olver, F. W. J., Lozier, D. W., Boisvert, R. F., Clark, C. W. (eds), 2010; NIST Handbook of Mathematical Functions. U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, Washington, DC/ Cambridge University Press, Cambridge; available at http://dlmf.nist.gov

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

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

[10] 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.

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