# 臨界点の定量的解析についての詳細な考察について

西成 活裕 (2002.10.23)

長沼氏の前レポートにて、臨界点の興味深い解析が提案された。それは、非対角成分が一つ変化したときに固有値を変えてしまう確率 $P(r)$ で、そこで得られた式は

$$P(r) = 1 - (1 - r^{m-1})^{(m-1)!} \tag{1}$$

というものである。ここで、$m$ は行列のサイズ、$r$ は非対角成分がゼロにならない確率と考えられる。この式より、$r$ の増加とともにある臨界値で急激に $P$ が上昇する事が分かるが、このような臨界現象を調べるときは、数学的に精密な考察をしないと誤った結論を導く可能性がある。

そこで、このレポートではさらなる詳細な解析に向けての一つの方向性を示し、前回のレポートで触れられていた (1) の課題について考えてゆく。(1) を導く際に前レポートでは大きく分けて２つの近似を用いていた。それは、

1. 対角成分を他の成分と同様に「平均化して」扱っている事
2. 条件付確率を独立事象のように扱っている事

である。以下、この事について簡単にふれて、改良の余地について言
及してゆく。ちなみにこれらは本質的な課題で、臨界点そのものに大きく影響する可能性があり、今後のさらなる研究が必要であることをあらかじめ述べておく。

ではまず対角成分の問題であるが、このレポートではすべて１に固定して考えよう。もちろんゼロ以外の定数値ならなんでも良く、以下の議論には本質的に影響しない。大切なのは対角成分はゼロになりうる確率変数ではない、という点である。以下、$m$ 行 $m$ 列の正方行列で対角成分が１、それ以外の非対角成分がすべて確率変数で、確率 $r$ で０でない値をとるものを考える。

そして、問題設定は、

**「非対角成分を上記の確率 $r$ で与えた後、そのうちのある一つの成分（スイッチ演**

**算子）を変化させる。このとき、この変化した成分の影響で行列の固有値が変わる確率を $r$ を用いて表せ」**

というものである。以上を式で表すと、まず初めに

$$\begin{vmatrix} 1 & x_{12} & \cdots & x_{1,m-1} & x_{1m} \\ x_{21} & 1 & \cdots & x_{2,m-1} & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & 1 & \vdots & \vdots \\ x_{m-1,1} & x_{m-1,2} & \cdots & \vdots & x_{m-1,m} \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{m,m-1} & 1 \end{vmatrix} \tag{2}$$

という行列式を考え、$x_{ij}$ を確率 $r$ で０でない値にセットする。そして、この非対角成分のうち１つがあるとき変化したとして、それが固有値に影響を与えるかどうか調べる。影響を与えないためには、その成分を含む行、列を (2) から抜き去った小行列式の値がゼロになっているかどうか調べればよい。そしてこの結果はもちろん初期に確率的に与えた $x_{ij}$ の中のゼロの分布に依存する。

　問題にする小行列式は、$m-1$ 行 $m-1$ 列の正方行列であり、適当に並べ換えれば対角成分に左上から１が斜めに $m-2$ 個並んだ

$$\begin{vmatrix} 1 & x & \cdots & x & x \\ x & 1 & \cdots & x & x \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x & x & \cdots & 1 & x \\ x & x & \cdots & x & x \end{vmatrix} \tag{3}$$

のような行列になる。なぜなら、非対角成分を含む行列を抜き去るときに、かならず対角成分の１を２つ取り去るため、残りの１の数は $m-2$ になり、それは適当な行や列の置換で小行列式の対角成分に再び移動する事が出来るからである。したがって、(3) をゼロにする確率を考えればよい。

　ここで、前回の解析を思い出そう。それは (3) がゼロになる確率を評価するのに、その行列式の項 $(m-1)!$ のすべてを対等に $r^{m-1}$ としているのである。それゆ

え、全体としてゼロになる確率は、$(1-r^{m-1})^{(m-1)!}$ で与えられると見積もっている。これは実はある意味でかなり過大評価していることになっている。なぜなら実際は $(m-1)!$ の項の中には対角成分を含むがゆえに、確率変数を $m-1$ 個含まない項がかなりの割合で含まれているからであり、これらの寄与は無視できない。ここではまずそれを真面目に計算してみよう。簡単のため、まず小さいサイズの行列で様子を見てみよう。$2\times 2$ のとき、(3) は

$$\begin{vmatrix} 1 & x \\ x & x \end{vmatrix} \tag{4}$$

であり、この行列式は、$x$ の項が一つ、$x^2$ の項が一つなので、結局この行列式がゼロになる確率は $(1-r)(1-r^2)$ であり、前回の解析だと $(1-r^2)^2$ となってしまっている。さらに $3\times 3$ の場合、同様に行列式を分析すると、$x$ の項が一つ、$x^2$ の項が２つ、$x^3$ の項が３つなので、結局 $(1-r)(1-r^2)^2(1-r^3)^3$ であり、前回のように $(1-r^3)^6$ ではない。これを一般の $k\times k$ 行列に拡張する。それは $x^i$ の個数を素直に数えれば良く、さらに、$x^1$ の個数はいつも１つ、そして、$x^1$ から $x^k$ までの個数の和は $k!$ になることを考えると、ゼロになる確率は

$$\prod_{i=1}^{k}(1-r^i)^{{}_{k-1}C_{k-i}a(i)} \tag{5}$$

となることが分かる。ただし、$C$ は２項係数で ${}_{k-1}C_0=1$ とし、$a(i)$ は次の漸化式

$$a(i)=i!-\sum_{s=1}^{i-1}{}_{i-1}C_s a(i-s),\ \ a(1)=1 \tag{6}$$

で定義される数であり、${}_{k-1}C_{k-i}a(i)$ が $r^i$ の項の数を表している。少し説明を加えると、${}_{k-1}C_{k-i}$（ただし $i=1,\cdots,k-1$）は対角成分の $k-1$ 個ある１の中からそれぞれ $k-1$,$k-2$,$\cdots$,$1$ 個の１を選ぶ場合の数を表しており、$x^i$ の次数はこの選んだ１の数だけ下がることより (5) が得られる。そして $a(i)$ は、１を $i$ 個選んだときの行列式の項の数を表している（１を $i$ 個選ぶ選び方の数 $C$ ×項の数 $a$ が $r^i$ のべきを持つ項の数である）。

ちなみにこの漸化式は綺麗に解が求められるかも知れないので、それは将来の課題に残しておくことにする。いずれにしろ、数値的にプロットするだけならこのままでも問題ない。以上より、対角成分の寄与も考慮に入れた場合、問題の行列式 (3) がゼロにならない、つまり固有値が変化する確率は最終的に

$$1-\prod_{i=1}^{m-1}(1-r^i)^{{}_{m-2}C_{m-1-i}\,a(i)} \tag{7}$$

となる。

次の問題点に移ろう。それは、条件付確率の扱いである。それは実は (7) を導くときにも使ってしまっているのに注意深い人は気づいたろう。ここではわざと説明の都合上今まで言及を避けてきたが、要するに以下のような問題を考えれば話が分かりやすい。次の $3\times 3$ 行列

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & x_2 \\ x_3 & 1 & x_4 \\ x_5 & x_6 & x_7 \end{vmatrix} = x_7 - x_4x_6 - x_2x_5 - x_1x_3x_7 + x_2x_3x_6 + x_1x_4x_5 \tag{8}$$

を考える。いままでの解析はこの行列式がゼロになる確率を、$(1-r)(1-r^2)^2(1-r^3)^3$ とした（前回のレポートでは $(1-r^3)^6$）。いわば、(8) の各項が同時にゼロになる確率を求めるのに、各項が「独立」としてその積で評価しているのである。しかし、この各項は見て分かるとおり独立ではない。$x_7$ がゼロならば、$x_1x_3x_7$ の項も自動的にゼロになるのである。つまり、独立事象のときのみ同時確率は積で表されるが、各項は相関があり、条件付確率の計算をしなくてはならない。したがって、(8) の各項が同時にゼロになるのは、実は $(1-r)(1-r^2)^2(1-r^3)^3$ より緩い条件で成立するのである。例えば、(8) の第 3 行の $x_5, x_6, x_7$ の 3 つだけが同時にゼロになるだけでこの行列式の値はゼロになってしまう。つまり、前回のレポートのように、各ループがゼロになる確率の全部の積を考えるのでは、違うループに共通に現れる成分を 2 重以上に評価してしまっており、かなり結果が異なってくるのである。

この正しい評価は意外に難しい作業なので、これも今後の研究を待たなくてはならないが、(8) の場合の答えだけはさほど困難ではないのでここで与えておこう。

それは、独立な事象に分解して考えればよく、$x_1, \cdots, x_7$ の表を作って、各要素がゼロかゼロでないかのすべての場合（$2^7$ 通り）について、行列式がゼロになるかならないか調べる。そして、ゼロになる場合のみかき集め、その確率の「和」を計算すればよい。$3 \times 3$ の場合は大して面倒でなく、ゼロにならない確率は結局

$$1 - (1 - r)^3(1 + 2r + r^2 - 2r^3) \tag{9}$$

となることが分かる。これは単純作業で求められるので詳細は省く。(9) は近似なしの厳密な表式である。

以上、３つの式 (1)、(7)、(9) を比べてみよう。(9) にあわせるため、もとの行列の大きさを $4 \times 4$ とする。(1) の場合は、$1 - (1 - r^3)^6$ であり、(7) の場合は、$1 - (1 - r)(1 - r^2)^2(1 - r^3)^3$ である。式の上でも (9) と比べてもらいたい。結果は図１に示されているが、予想通り (7) は (1) に比べて、大きな固有値変化確率を与える。(9) はほぼ (7) と変わらないので、(7) はこの場合良い近似になっていることが分かる。そして、(9) は (7) と (1) の間に入っていることより、もしかしたら、厳密な表式は、(7) と (1) で上と下から評価できる可能性があり、今後の研究が期待される。

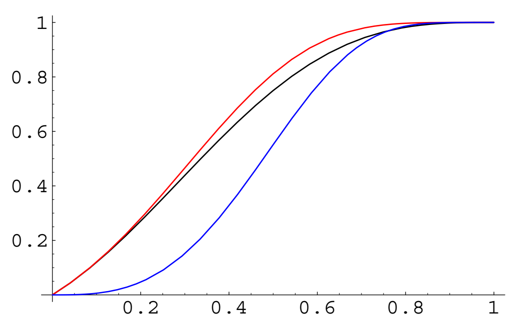


図１：青線が (1) による曲線、赤線が (7) によるもの、そして、黒が (9) によるもの