

ランダムネットワーク上のダイナミクスと経路積分

北海道大学電子科学研究所 一宮 尚志

2007 年 6 月 6 日

振動子の同期現象や感染症の拡大現象など、複雑ネットワーク上での多彩なダイナミクスが最近注目を集めている [1]。例えば、スケールフリーネットワーク上では、振動子間の相互作用がどれほど弱くても同期現象が起きるといったことが最近判明した [2, 3]。これらの現象は、理論的のみならず応用上も非常に興味深いものである。

こういった現象の研究において、シミュレーションを行うのは比較的簡単であるが、理論的に解析するのは容易ではない。本講演では、ランダムネットワークとよばれるネットワークモデルに対して、経路積分法を用いてネットワーク上のダイナミクスを研究しようという試みを紹介する。[4]

1 経路積分とは何か

経路積分の考え方自体は、非常に単純である [5]。まず、時刻 $t = 0$ に状態 $x = x_i$ にある系を考えよう。この系が時刻 $t = T$ に状態 $x = x_f$ を取る確率 $P(x = x_f; t = T)$ を知りたい。これを求めるのに、経路積分では以下のような手続きを踏む。

1. 時間 T を $T = M\Delta t$ と細かい時間幅 Δt に分割する。
2. 各時間 $t = \Delta t, 2\Delta t, \dots, (M-1)\Delta t, M\Delta t = T$ での系の状態が $x(\Delta t) = x_1$ かつ $x(2\Delta t) = x_2$ かつ...かつ $x((M-1)\Delta t) = x_{M-1}$ かつ $x(M\Delta t) = x_f$ である確率分布を求める。
3. 上で求めた確率を全ての経路 $x_1, x_2, \dots, x_{M-1}$ に対して足しあわせたものが $P(x = x_f; t = T)$ である

このようにして $P(x, t)$ を求めるのが経路積分である。

経路積分は、その名の通り、経路を完全に指定して、その経路を通る確率を計算する。それゆえに、この手法は、非マルコフ的確率過程にもそのまま使えるというメリットがある。確率分布 $P(x, t)$ を記述するもっともスタンダードな方法は、偏微分方程式である Fock-Planck 方程式を用いることであるが、通常の Fock-Planck 方程式はマルコフ過程でしか使うことができない。一方、経路積分での被積分関数は過去の全情報を持っているので、非マルコフ過程に対しても問題なく適用可能である。

特に経路積分の応用上重要と思われるのは、ランダムネスのある系に対するアンサンブル平均を知りたい場合である。例えば、欠陥が散在する格子や、スピングラスなどがその代表例として

挙げられるだろう。こういった系は、見方を変えると、ノイズにとっても強い時間相関があり、ノイズが『クエンチ』されている系と見ることもできる。こういったランダムネスを含んだ系のアンサンブル平均に対する議論には Focker-Planck 方程式を用いることはできない。一方、経路積分では（少なくとも形式的には）アンサンブル平均に対して確率分布 $P(x, t)$ を書き下すことができる。ランダムネスのある系の上での非線形ダイナミクスの研究は少ないが、例えば Stiller と Radons は、oscillator glass の研究に経路積分を用いた計算を行っている [6]。

2 ランダムネットワーク上のダイナミクスの経路積分表現

まずはランダムネットワークということを一先忘れて、以下のようなネットワーク上のダイナミクスを考える。

$$\frac{dx_i}{dt} = f(x_i) + \sum_{j=1}^N a_{i,j} g(x_i, x_j) + \xi(t) \quad (1)$$

ここで $\xi(t)$ は分散 σ の白色 Gauss ノイズ、 i はノードの番号を表し、ネットワーク構造は adjacent matrix $a_{i,j}$ によって記述され、ノード i と j が直接つながっていれば $a_{i,j} = 1$ 、つながっていないければ $a_{i,j} = 0$ である。また N は全ノード数である。

この系に対して、時刻 t における $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ の確率分布 $P(\mathbf{x}; t)$ を考える。ここで $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ である。時刻 $t = m\Delta t$ に点 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_m$ にあったとすると、時刻 $t = (m+1)\Delta t$ の分布は点 $x_i = x_{i,m} + \Delta t(f(x_{i,m}) + \sum_j a_{i,j} g(x_{i,m}, x_{j,m}))$ を中心に分散 $\sigma\sqrt{\Delta t}$ のガウス分布になるから、 $P(\mathbf{x}; t)$ は以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}; t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod dx_{i,k} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2\Delta t}^{NM}} \\ &\quad \times \exp \left[- \sum_{i,k} \frac{\{x_{i,k} - x_{i,k-1} - \Delta t(f(x_{i,k-1}) + \sum_j a_{i,j} g(x_{i,k-1}, x_{j,k-1}))\}^2}{2\sigma^2\Delta t} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod dx_{i,k} d\bar{x}_{i,k} \left(\frac{1}{\pi} \right)^{NM} \exp(-S_0 - S_1) \end{aligned} \quad (2)$$

$$S_0 = \sum_{i,k} \frac{\bar{x}_{i,k}^2 \sigma^2 \Delta t}{2} - i \bar{x}_{i,k} (x_{i,k} - x_{i,k-1} - \Delta t f(x_{i,k-1})) \quad (3)$$

$$S_1 = -i \sum_{i,j,k} a_{i,j} \Delta t \bar{x}_{i,k} g(x_{i,k-1}, x_{j,k-1}) \quad (4)$$

ここで $t = M\Delta t$ であり、 Δt は微小量である。また、式変形にあたっては関係式 $\exp(-\frac{x^2}{2a}) = \frac{\sqrt{2a}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp(-\frac{a}{2}\bar{x}^2 - i\bar{x}x)$ を用いた。

さて、ここでランダムネットワークのアンサンブルを考えることにする。ランダムネットワークとして一番簡単なモデルとして以下のようなものを考えよう。

『各 (i, j) に対して $a_{i,j}$ は確率 $p_{i,j}$ で 1、確率 $1 - p_{i,j}$ で 0』

計算を簡単にするために、ネットワークは有向グラフ（つまり $a_{i,j}$ と $a_{j,i}$ は異なっても良い）とする。無向グラフに拡張しようとする多少計算は繁雑になるが、基本的なやりかたは同一である。

すると、 $P(\mathbf{x}; t)$ のさまざまなグラフに対する平均は、 $a_{i,j}$ についての平均は S_1 にしか入っていないので、アンサンブル平均は S_1 の平均について考えれば良い。 $a_{i,j}$ は確率 $p_{i,j}$ で 1、 $1 - p_{i,j}$ で 0 なのだから、容易に

$$\langle P(\mathbf{x}; t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \prod dx_{i,k} d\bar{x}_{i,k} \exp(-S_0) \langle \exp(-S_1) \rangle \quad (5)$$

$$\langle \exp(-S_1) \rangle = \prod_{i,j} [1 - p_{i,j} + p_{i,j} \exp(i \sum_k \Delta t \bar{x}_{i,k} g(x_{i,k}, x_{j,k}))] \quad (6)$$

を得る。これが $P(\mathbf{x}; t)$ のアンサンブル平均の式であり、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限でこの積分を実行すれば $\langle P(\mathbf{x}; t) \rangle$ が求められる。

ここで、 k についての和が指数関数の中に入っていることに注意が必要である。例えば仮に、ネットワークの構造が時刻毎に変化していて、しかも時間相関が全くない、といった状況を（非現実的だが）仮定してみると、ここの平均は

$$\langle \exp(-S_1) \rangle = \prod_{i,j,k} [1 - p_{i,j} + p_{i,j} \exp(i \Delta t \bar{x}_{i,k} g(x_{i,k}, x_{j,k}))] \quad (7)$$

となって、時刻 k についての積を取る場所が変わる。この場合は実は計算は非常に簡単になる。というのはこの時には、ある関数 F があって、 $\exp(-S_0) \langle (-S_1) \rangle$ が $\prod_k F(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k-1})$ という形で書けてしまうからである。この場合は Focker-Planck 方程式を導出することができる。一方、ネットワーク構造が固定されてしまっていると、このように書き表すことができないので、Focker-Planck 方程式にもっていくことができない。ここが『クエンチ』されたランダムネスの厄介なところである。

3 $P(x, t)$ を近似してみる

前の節で $P(x, t)$ にたいする経路積分表示を得た。あとはこれを積分すれば、どんな $f(x)$ や $g(x, x')$ に対しても $P(x, t)$ が求まるはずである。しかしながら、実際には $P(x, t)$ を解析的に求めることは、殆どの場合不可能である。そこであの手この手の近似法が必要になってくる。例えば

- 相互作用項 $g(x, x')$ が小さいと仮定して摂動的に解く
- 積分した後の形を適当に仮定する

などである。

このうち、前者の摂動展開による方法については、論文を見ていただくとして [4]、ここでは後者の方法について簡単な例を示してみる。

$P(\mathbf{x}; t)$ の形として、もっとも自然な仮定の一つは、 $P(\mathbf{x}; t)$ がなんらかの値 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0(t)$ を中心とした Gauss 分布になる、というものだろう。ここで、後の計算の便宜上、最後の $\bar{x}_{iM}$ による

積分をする前の、 $P(\bar{x}_M, \bar{x}; t)$ を考えることにして、これが Gauss 型の分布を持つと仮定する。

$$P(\mathbf{X}; t) \sim C \exp[-(-\mathbf{X}_0(t))^T A(t)(\mathbf{X} - \mathbf{X}_0(t))] \quad (8)$$

ここで $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_N, \bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N)$ である。

さて、ここで $\mathbf{x}_0(t)$ がどのような方程式で記述できるかを考えてみると、 $P(\mathbf{X}; t)$ は $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0(t)$ で $\frac{dP}{d\mathbf{x}} = 0$ となるはずである。前節で得られた $P(\mathbf{x}; t)$ の式を用いると

$$\frac{dP}{dx_{i,M}} = i\bar{x}_{iM}P(\mathbf{X}; t) \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\bar{x}_{i,M}} &= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{NM} \int_{-\infty}^{\infty} \prod dx_{ik} d\bar{x}_{ik} \{-\sigma^2 \Delta t \bar{x}_{i,M} - i(x_{i,M} - x_{i,M-1} - \Delta t f(x_{i,M-1})) \\ &\quad - \sum_j p_{i,j} i \Delta t g(x_{i,M-1}, x_{j,M-1}) \exp[-i \sum_k \bar{x}_{i,k} g(x_{i,k}, x_{j,k})]\} \\ &\quad \times \exp(-S_0) \langle \exp(-S_1) \rangle \end{aligned} \quad (10)$$

という式が得られる。式 (9) から $\mathbf{X}_0(t)$ においては $\bar{\mathbf{x}} = 0$ が分かる。式 (10) の評価は一般には難しいが、 $P(\mathbf{X}; t)$ の分散が小さいと仮定すると、この式に現れる $\bar{x}_{i,k}$ は $\bar{x}_0(k\Delta t)$ での値、すなわち 0 と近似して良いだろうから、 $x_0(t)$ の満たす方程式として、

$$x_{i,M} - x_{i,M-1} - \Delta t f(x_{i,M-1}) - \sum_j p_{i,j} i \Delta t g(x_{i,M-1}, x_{j,M-1}) = 0 \quad (11)$$

を得る。これは微分方程式

$$\frac{dx_i}{dt} = f(x_i) + \sum_j p_{i,j} g(x_i, x_j) \quad (12)$$

を離散化した方程式に他ならない。

ということで、 $\mathbf{x}$ の時間変化を近似する方程式として、式 (12) というランダムネスを含まない方程式が得られる。

さて次は分散にあたる $A(t)$ を…というところだが、これをやろうとすると一気に問題が難しくなる。というのは、今の議論では $P(\mathbf{X}; t)$ は分散が小さく δ -関数で近似できる仮定したので、 $\mathbf{X}(t)$ の長時間相関を考えなくてもよかったのだが、分散を考えようとすると、 $X(t)$ の長時間相関を真面目に考える必要があるからである。 $A(t)$ の計算は今後の課題とさせていただきたい。

4 結語

以上、ランダムネットワーク上のダイナミクスに対する経路積分による解析の一例を示した。残念ながら、具体的な問題に対する解析は紙数と私の能力の都合でできなかったが、経路積分をどのようにランダムネットワークに適用するかは分かっていたかと思う。要は式 (5) を計算する、ということであり、それが普通は計算できないので知恵をしばって近似を考える、ということである。

では今後、経路積分を使うことでどのような研究が可能だろうか。勿論、具体的な方程式系に対して経路積分による解析を行う、というものはある。また、経路積分ならではの問題としては、ネットワークのアンサンブルの性質を調べる、ということが考えられよう。経路積分が求めるものは、系のアンサンブルの振舞であって、実際の個々のネットワーク上のダイナミクスではない。前節で出した $\mathbf{x}_0(t)$ の方程式にしても、ランダムネットワークのアンサンブルに対しての方程式であって、個々のネットワークに対する方程式ではない。となると、例えば、個々のネットワークの解がアンサンブル平均からどの程度揺らぐのか、というのは興味深い問題である。例えばスケールフリーなネットワークでは個々のネットワークの性質がアンサンブル平均から大きくずれることが多いという話がある [7]。これは $P(\mathbf{X}; t)$ の分散が大きいことを意味していると思われるが、経路積分を用いることによりこの分散がどの程度のものか見積もることができるかもしれない。

5 謝辞

本研究に関して、西浦廉政氏、蔵本由紀氏、柳田達男氏、飯間信氏、郡宏氏、増田直紀氏らから様々な有益な御意見を頂きました。ここに感謝いたします。

参考文献

- [1] 複雑ネットワークに関しては多くのレビューや書籍が出版されている。ここでは
 - 増田直紀、今野紀雄『複雑ネットワークの科学』（産業図書、2005）。
 - S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno, M. Chavez and D.-U. Hwang, Phys. Rep. **424** 175(2006).
 - R. Albert and A. -L. Barabási, Rev. Mod. Phys. **74**, 47(2002).
 あたりを挙げておく。
- [2] T. Ichinomiya, Phys. Rev. E **70**, 026116 (2004)
- [3] J. Restrepo, E. Ott and B. R. Hunt, Phys. Rev. E **k71** 036151(2005).
- [4] T. Ichinomiya, Phys. Rev. E **72**, 016109 (2005)
- [5] 経路積分に関する文献を以下にいくつか挙げるが、大半は量子力学の知識を必要とする。
 - R. P. Feynman and A. R. Hibbs, “Quantum Mechanics and Path Integral”(McGraw-Hill, 1965)（ファインマン、ヒップス『量子力学と経路積分』（みすず書房、1995））の 1 2 章には確率過程への経路積分の応用が見られる。
 - 今田 正俊『統計物理学』（丸善、2004）の 2 章では経路積分を用いてゆらぎと確率過程を議論している。
 - H. Kleinert, “Path Integrals in Quantum Mechanics, Statisticsm Polymer Physics, and Financial Markets: 3rd Edition”(World Scientific, 2004) には経路積分の応用例が多数載っているが、内容は高度である。
- [6] J. C. Stiller and G. Radons, Phys. Rev. E **58** 1789.
- [7] 本研究会における増田直紀氏のコメントによる。