クーロンガス理論で見るランダム行列

中央大学 物理学科 学部4年
香取研究室　星 奈津子

参考文献
Giacomo Livan ,Marcel Novaes ,Pierpaolo Vivo
Introduction to Random Matrices
Theory and Practice
Springer,2018

クーロンガス理論の概要

ガウス型のランダム行列でサイズNを無限大にしたとき、固有値の分布はWigner’s semicircle lawに従い半円を描くことが示された。

これについて具体的な計算を行う統計力学的手法がクーロンガス理論だ。1962年にF.J.Dysonによって発表された論文が主流となっている。

荷電流体を構成する各粒子について成り立つ性質を固有値に適用するという方法である。

ガウス型実対称ランダム行列の固有値分布は、

$$\rho(x_1,\ldots,x_N)=\frac{1}{Z_{N,\beta}}\exp(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}x_i^2)\prod_{j<k}|x_j-x_k|^\beta$$

と書ける。$Z_{N,\beta}$は規格化定数なので、

$$Z_{N,\beta}=\int_{\mathbb{R}^N}\prod_{j=1}^{N}dx_j\exp(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}x_i^2)\prod_{j<k}|x_j-x_k|^\beta$$

であるが、$x_i\to x_i\sqrt{\beta N}$とスケール変換して

$$Z_{N,\beta}=C_{N,\beta}\int_{\mathbb{R}^N}\prod_{j=1}^{N}dx_j\exp(-\frac{\beta N}{2}\sum_{i=1}^{N}x_i^2)\prod_{j<k}|x_j-x_k|^\beta\ ,$$

$$C_{N,\beta}=(\sqrt{\beta N})^{N+\frac{\beta N(N-1)}{2}}$$

と書き直す。この式の$\prod_{j<k}|x_j-x_k|^\beta$ を

変形してeの肩に乗せると、まとめて

$$\exp(-\frac{\beta N}{2}\sum_{i=1}^{N}x_i^2+\frac{\beta}{2}\sum_{j\neq k}\ln|x_i-x_j|)$$

と書ける。

左の式の簡単な説明

規格化定数とは、大きさを1にするためにかける数のこと。
ρ をすべての変数 $x_1, \ldots, x_N$ で全領域について積分した値が
1になるように決める。

スケーリングすることで、βの値が異なる場合について
グラフを見比べることができるようになる。
半円のサイズは$\sqrt{\beta N}$に比例するからだ。

すべての固有値との関係について考えたいので、$j < k$ だけ
ではなく、$j \neq k$ つまり「自分以外の固有値」と書きかえる。
ここで、$j = 1, k = 2$ のときと $j = 2, k = 1$ のときは同じだ。
掛け算なので、このダブりを取り除くには $\frac{1}{2}$乗すればよい。

さらに、指数を$-\beta N^2$でくくって

$$\exp(-\beta N^2(\frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \frac{1}{2N^2}\sum_{j\neq k} \ln|x_j - x_k|)) \ .$$

水色で塗られた部分をまとめてVと思うことにすると、

$\exp(-\beta N^2 V)$となる。これは統計力学で扱うボルツマン因子と

同じ形である！

ゆえにこのVはエネルギーを表す項だと考えられる。

具体的には、

$$\begin{cases} x_i^2 \text{の項：二次関数で表されるポテンシャル} \\ \ln|x_j - x_k| \text{の項：粒子同士の反発の様子} \end{cases}$$

と見ることができる。

このとき、最も安定な状態(平衡状態)は、ヘルムホルツの

自由エネルギー$F = -\dfrac{1}{\beta}\ln Z_{N,\beta}$が最小になる状態である。

左の簡単な説明

統計力学では、逆温度$\beta = \dfrac{1}{kT}$というパラメータを導入し、
すべての状態についてのボルツマン因子を足し合わせたものを
分配関数と呼ぶ(カノニカル分布)。$Z_{N,\beta}$がこれに対応している。

点電荷によって2次元平面に生じる静電ポテンシャルは、距離 r
の位置では $\ln r$に比例する。GOEの固有値は実数なので1次元
だが、多数の点電荷が直線上に拘束されていると考えれば、対応
させることができる。つまり固有値はすべて点電荷で、lnの項が
それらの相互作用を表している、と思うことにするのだ。
クーロンガス理論と呼ばれる所以はこの考え方にある。

二次関数なので原点付近が安定だが、反発の項があるので全てが
中心に集まることは出来ず、少しずつ距離をとった形になる。
平衡状態とは、実際に固有値がとる分布を示したものである。

自由エネルギーが最小の状態はどのように求めるのだろうか。
ここで固有値をカウントする関数$n(x)$を用意する。

$$n(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(x-x_i) . \qquad \left(\int_{\mathbb{R}} dx\ n(x) = 1 \quad , \quad n(x) \geq 0\ (x \in R) \right)$$

これを用いて$Z_{N,\beta}$を書き直したい。まずはVを$n(x)$の関数に直して

$$V[n(x)] = \underbrace{\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}} dx\ x^2 n(x) - \frac{1}{2}\iint_{\mathbb{R}^2} dx dx'\ n(x)n(x')\ln|x-x'|}_{=\mathscr{F}_0[n(x)]\text{とする}} + \frac{1}{2N}\int_{\mathbb{R}} dx\ n(x)\ln\frac{c}{Nn(x)} .$$

また、汎関数積分をして

$$\int D[n(x)]\ \delta[n(x) - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(x-x_i)] = 1$$

であるから、これらより

$$\begin{aligned} Z_{N,\beta} &= C_{N,\beta}\int D[n(x)] e^{-\beta N^2 V[n(x)]} \iint_{\mathbb{R}^N} \prod_{j=1}^{N} dx_j\ \delta[n(x) - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(x-x_i)] \\ &\approx C_{N,\beta}\int D[n(x)]\ e^{-\beta N^2 \mathscr{F}_0[n(x)] + \frac{\beta}{2}N\ln N + (\frac{\beta}{2}-1)N\mathscr{F}_1[n(x)] - \frac{\beta}{2}N\ln c} , \end{aligned}$$

$$\mathscr{F}_1[n(x)] = \int_{\mathbb{R}} dx\ n(x)\ln n(x) .$$

左の式の簡単な説明

$n(x)$をある領域で積分すると、その領域内にいくつ固有値が存在するかがわかる。実数全体にはN個含まれるので、1になる。

δ関数の性質を使って書き直した。相互作用の項は添字を変えてi, jそれぞれについて1からNまで足し、$i=j$の部分は$\dfrac{c}{Nn(x)}$という重みをつけて取り除いている。

$n(x) = \dfrac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(x - x_i)$を満たす関数$n(x)$全体について積分すると1。

$Z_{N,\beta}$についての式変形はかなり割愛しているが、ラプラス近似や汎関数微分を用いて$\displaystyle\int\int_{\mathbb{R}}\prod_{j=1}^{N}dx_j\ \delta[n(x) - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(x - x_i)]$ の部分を変形していけばよい。これで$n(x)$の式にできた。

$\delta[\int_{\mathbb{R}} dx\ n(x) - 1] = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(\int_{\mathbb{R}} dx\ n(x) - 1)}$ を用いて$Z_{N,\beta}$を書き直し、

さらに $ik \to \beta N^2 \kappa$ とする。また、$\mathcal{F}_0$を最小にする$n(x)$を$n^\star(x)$、

κを$\kappa^\star$と書くことにすると、$\mathcal{S}[n(x), \kappa] \equiv \mathcal{F}_0[n(x)] - \kappa(\int dx\ n(x) - 1)$,

$Z_{N,\beta} \approx e^{-\beta N^2 \mathcal{S}[n^\star(x), \kappa^\star]}$ と書くことができる。

このとき自由エネルギーf は $f = \mathcal{F}_0[n^\star(x)]$となる。

よって、$n^\star(x)$の具体的な形を求めれば固有値の分布がわかる。

汎関数微分より

$$\frac{\delta}{\delta n(x)} \mathcal{S}[n(x), \kappa] \,|_{n=n^\star, \kappa=\kappa^\star} = \frac{x^2}{2} - \int_{\mathbb{R}} dx'\ n^\star(x') \ln|x - x'| - \kappa^\star = 0. \quad ...(*)$$

これを解いていく。

まずこの式で $x \to \infty$とすると、(積分の項)$\to \ln x$となり、矛盾する。

そのため x はある範囲(a, b)で定義されるとする。

この式を解くかわりに両辺をxで微分した式を解きたいが、右辺は

$x = x'$ で微分不可能なので、工夫して

$\mathrm{Pr}\int dx' \dfrac{n^\star(x')}{x-x'} = x$ という結果を得る。

ただし $\mathrm{Pr}\int dx'$ はCauchyの主値積分 $\lim_{\varepsilon\to 0}[\int^{x-\varepsilon} F(x')dx' + \int_{x+\varepsilon} F(x')dx']$.

この式より$n^\star(x) = \dfrac{1}{\pi\sqrt{(x-a)(b-x)}}[1 - x^2 + \dfrac{a+b}{2}x + \dfrac{(b-a)^2}{8}]$.

また、もとの式(∗)の両辺に$n^\star(x)$をかけてx について積分し、

Lagrangeの未定乗数を $\kappa = \dfrac{a^2}{2} - \int_a^b dx\ n^\star(x)\ln(x-a)$ と固定すると

$f = \mathscr{F}_0[n^\star(x)] = \dfrac{1}{4}\int_a^b dx\ n^\star(x)x^2 + \dfrac{a^2}{4} - \dfrac{1}{2}\int_a^b dx\ n^\star(x)\ln(x-a)$ と書ける。

$n^\star(x)$を代入し $f(a,b)$を最小にするa,bを求めると、$a = -\sqrt{2}, b = \sqrt{2}$

となる。よって $n^\star(x) = \dfrac{1}{\pi}\sqrt{2-x^2}$.

これでWignerの半円則が導出できた。上で書いたように、原点付近に多く存在し 離れるにつれ減っていく という半円の分布になる。