

Dyson's Coulomb gas on a circle and intermediate eigenvalue statistics

Rainer Scharf, Félix M. Izrailev, 1990

rešerše: Pavla Cimrová, 28. 2. 2012

1 Náhodné matice

Náhodné matice v současnosti nacházejí své aplikace stále častěji v oblastech kvantových či chaotických systémů. Jsou to takové matice, jejichž prvky jsou náhodná čísla, vybraná z nějakého rozdělení. Z mnoha druhů náhodných matic byly pro účely článku použity čtvercové hermiteovské matice řádu N , s prvky vybranými z Gaussova normálního rozdělení. Vlastnosti takových náhodných matic, se dále liší podle druhu uspořádání matice; jednou z nejdůležitějších vlastností je pak parametr β , charakterizující spektrum vlastních čísel. Z výše zmíněných druhů matic jsou zde využity tři základní třídy náhodných matic, označované jako GOE, GUE a GSE.

- Matice třídy GOE (Gaussian orthogonal ensemble) jsou reálné a symetrické a spektrum je charakterizováno parametrem $\beta = 1$.
- Matice třídy GUE (Gaussian unitary ensemble) jsou matice s prvky vybranými z komplexních čísel, hodnota $\beta = 2$.
- Matice třídy GSE (Gaussian symplectic ensemble) jsou pak kvaternionové matice sudého řádu. Pro ně platí $\beta = 4$.

Zkoumá se společné rozdělení $Q_{N\beta}(\theta_1, \dots, \theta_N)$ vzájemných vzdáleností vlastních čísel $(\theta_1, \dots, \theta_N)$.

$$Q_{N\beta}(\theta_1, \dots, \theta_N) = Z_{N\beta}^{-1} \prod_{1 \leq j < k \leq N} |e^{i\theta_j} - e^{i\theta_k}|^\beta \quad (1)$$

s normalizační konstantou

$$Z_{N\beta} = (2\pi)^{-N} \int_0^{2\pi} \prod_{1 \leq j < k \leq N} |e^{i\theta_j} - e^{i\theta_k}|^\beta d\theta_1 \dots d\theta_N. \quad (2)$$

Přesné vyčíslení hustoty pravděpodobnosti průměrných vzdáleností S sousedních vlastních čísel, zn. $P(S)$, není známo. Jako jednoduchá aproximace se používá tzv. Wignerova domněnka

$$P_\beta(S) \simeq C_\beta S^\beta \exp(-A_\beta S^2),$$

kde A_β a C_β představují normalizační konstanty a zároveň nastavují střední hodnotu $\langle S \rangle = 1$. Odchylka této aproximace od skutečných $P(S)$ je menší než 5%.

V článku byla navržena alternativa k Wignerově domněnce, která lépe popisuje limitní chování funkce $P(S)$. V současnosti je označována jako Izrailevova formule:

$$P_\beta(S) = A \left(\frac{\pi S}{2} \right)^\beta \exp \left[-\frac{\beta \pi^2}{16} S^2 - \left(B - \frac{\beta \pi}{4} \right) S \right], \quad (3)$$

kde A a B jsou normalizační konstanty, závisující na β .

Dalšími ze spektrálních vlastností náhodných matic jsou spektrální rigidita a Δ^1 statistika. Spektrální rigidita, neboli number variance, popisuje rozptyl počtu vlastních čísel $n(L)$ na intervalu délky L . Jelikož požadujeme $\langle S \rangle = 1$, je střední hodnota $\langle n(L) \rangle = L$ a spektrální rigidita tedy může být definována předpisem

$$\Sigma_\beta^2(L) = \langle (n(L) - L)^2 \rangle.$$

Podobně Δ statistika

$$\Delta_\beta(L) = \frac{1}{L} \max_{\theta_0} \int_{\theta_0}^{\theta_0 + 2\pi L/N} [N(\theta) - A\theta - B]^2 d\theta, \quad (4)$$

což je výraz, který se minimalizuje změnou parametrů A a B . Mezi spektrální rigiditou a Δ statistikou existuje jednoznačný vzájemný vztah

$$\Delta_\beta(L) = \frac{1}{2} \Sigma_\beta^2(L) - \frac{9}{4\beta\pi^2}.$$

2 Dysonův plyn

Jeden ze způsobů, jak lze modelovat interagující částice, je využití Dysonova plynu. Konkrétně máme model N stejně nabitých částic, které se pohybují na jednotkové kružnici a vzájemně na sebe působí Coulombickou silou. Celý systém má

¹My ovšem Δ značíme právě spektrální rigiditu.

tzv. inverzní termodynamickou teplotu $\beta = \frac{1}{kT}$ (k je Boltzmannova konstanta). V analogii s chováním plynu si lze představit plyn, který proudí z teplotní lázně, která má právě termodynamickou teplotu T . Po dosažení termodynamické rovnováhy budou vzdálenosti jednotlivých částic mezi sebou $(\theta_1, \dots, \theta_N)$. Celková potenciální energie je dána vztahem

$$W = - \sum_{1 \leq j < k \leq N} \ln |e^{i\theta_j} - e^{i\theta_k}|.$$

Dysonovým záměrem bylo právě porovnání rozložení částic Dysonova plynu na kružnici s rozložením vlastních čísel náhodných matic $Q_{N\beta}(\theta_1, \dots, \theta_N)$, viz vztah 1. Pro Coulombický plyn je partiční suma, která je zároveň normalizační konstantou $Q_{N\beta}$, rovna

$$Z_N(\beta) = (2\pi)^{-N} \int_0^{2\pi} e^{-\beta W} d\theta_1 \dots d\theta_N. \quad (5)$$

Porovnáním obou partičních funkcí (2) a (5) lze snadno nahlédnout, že rozložení vlastních čísel náhodných matic a rozložení vzdáleností částic Dysonova plynu je v podstatě stejné.

3 Metropolisův algoritmus

Jedná se vlastně o simulaci Dysonova plynu (zde pro $N = 99$ částic, náhodně rozložených na jednotkové kružnici) metodou Monte Carlo. $(\theta_1, \dots, \theta_N)$ je počáteční vektor vzdáleností mezi částicemi. Dále se postupuje v jednotlivých krocích podle následujícího algoritmu:

1. Výpočet potenciální energie plynu $W = W(\theta_1, \dots, \theta_N)$.
2. Vygenerování náhodného vektoru $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_N)$ čísel rovnoměrně rozdělených na intervalu $\langle -r, r \rangle$, kde $r = 2\pi/N(\text{noise})$. (V tomto případě bylo použito hodnot noise 0, 1 a 0, 2.)
3. Posun částic o \mathbf{r} . Pokud by posun měl vést ke změně pořadí částic, nepoužije se a je vygenerován nový vektor \mathbf{r} .
4. Výpočet nové energie W' . Pokud platí $W' < W$, přijímají se nové pozice částic. Jinak je spočítán Boltzmannův faktor $q = e^{\beta(W-W')}$ a porovnán s náhodným číslem p z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$. Pro $q > p$ se přijímají nové pozice částic, v opačném případě k posunu částic nedojde.

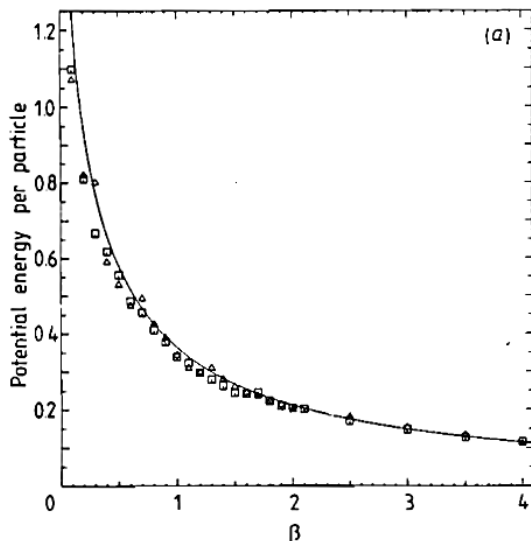
Po dostatečném počtu kroků algoritmu se systém dostane do rovnováhy.

4 Výsledky simulace

Nejprve bylo třeba obhájit použití Metropolisova algoritmu pro simulaci Dysonova plynu. Například lze použít porovnání koncové energie částic po dosažení tepelné rovnováhy. Teoretická předpověď, že

$$U(\beta) = \frac{1}{2} [L'(\beta/2) - \ln(\beta/2)] , \quad (6)$$

kde $L(z) = \ln \Gamma(1+z)$, je odvozena jako limitní případ Dysonova plynu, přičemž je použit Dysonův odhad partiční funkce náhodných matic (2). Na obrázku 1 je vidět dobrá shoda mezi předpovědí a daty získanými z Metropolisu.



Obrázek 1: Srovnání závislosti koncové potenciální energie připadající na částici na β při použití Metropolisu (čtverečky pro noise 0, 2; trojúhelníky pro 0, 1) s teoretickou předpovědí 6.

Na dalším obrázku 2 jsou experimentální histogramy porovnávány s Wignerovou formulí, resp. Izrailevovou doměnkou (3), nicméně pro celkových 9900 vzdáleností, použitých tvůrci článku, nebyl očekáván prokazatelný rozdíl mezi nimi. Konečně na obr. 3 lze vidět, že Δ statistika, obzvláště pro $\beta = 2$ a $\beta = 4$, výborně odpovídá teoretickým předpokladům, odvozeným ze vztahu 4.

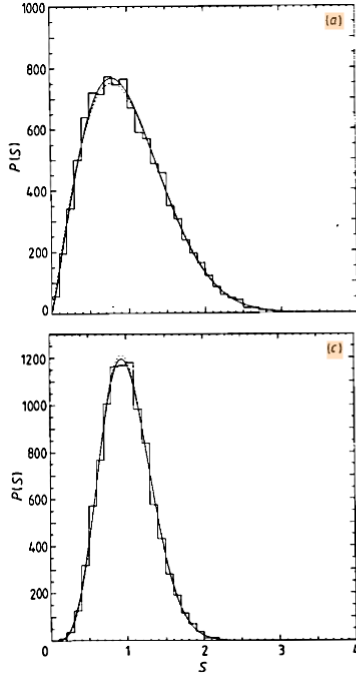


Figure 3. Comparison between experimental histograms for the spacing distribution $P(S)$ (9900 spacings, Noise = 0.2) and the Wigner surmise (2.7) (broken curve) and the conjectured $P_\beta(S)$ (4.1) (minimum χ^2 fit: full curve) for: (a) $\beta = 1$, $\chi_{29}^2 = 34.80$ (Wigner) and $\chi_{29}^2 = 22.27$ (our conjecture with $\beta_{\text{histo}} = 1.18$); (b) $\beta = 2$, $\chi_{24}^2 = 19.87$ (Wigner) and $\chi_{24}^2 = 19.25$ (our conjecture with $\beta_{\text{histo}} = 2.01$); (c) $\beta = 4$, $\chi_{21}^2 = 22.31$ (Wigner) and $\chi_{21}^2 = 20.03$ (our conjecture with $\beta_{\text{histo}} = 3.71$).

Obrázek 2: Porovnání experimentálních dat s teoretickými předpověďmi — Wignerovou, resp. Izrailevovou domněnkou pro $\beta = 1, 2, 4$.

Jako další z cílů si autoři článku vytyčili prokázat platnost celé výše probrané teorie pro libovolné β na intervalu $(0, 4)$, kde má fyzikální význam. Takové inverzní teploty už neodpovídají maticím tříd GOE, GUE a GSE. Na obr. 4 je opět porovnání histogramů se zde navrženou Izrailevovou formulí (3), tentokrát na příkladu $\beta = 0,5$ a $\beta = 3,5$. Jak je patrné z obr. 5, Izrailevovu formuli lze použít jako velmi dobrou aproximaci pro všechna fyzikálně významná β . Zde právě β_{therm} je teoreticky použitá inverzní teplota a β_{histo} je inverzní teplota získaná z fitování histogramů. Na obrázku jsou dále patrné dvě hlavní odchylky pro použití předpokladu $\beta_{\text{histo}} \approx \beta_{\text{therm}}$. Jedná se o drobné nadhodnocování skutečného parametru β při použití β_{histo} pro malá β a naopak podhodnocení pro velká β .

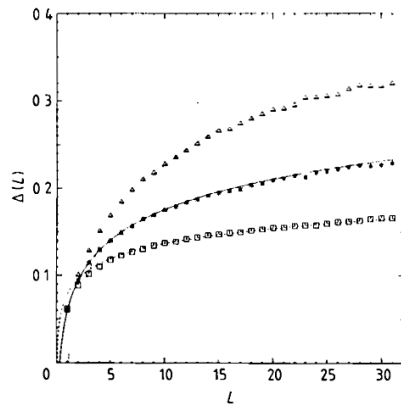


Figure 4. Comparison between experimental Δ statistics (9900 values, Noise = 0.2) and the theoretical prediction (2.12) for $\beta = 1$ (open triangles and dotted curve), $\beta = 2$ (asterisks and full curve) and $\beta = 4$ (open squares and broken curve).

Obrázek 3: Porovnání Δ statistiky experimentálních dat s teoretickou předpovědí (4) pro konkrétní $\beta = 1, 2, 4$.

5 Závěr

V článku byly porovnávány spektrální vlastnosti náhodných matic tříd GOE, GUE a GSE s vlastnostmi termodynamického Dysonova plynu. Partiční funkce pro rozložení vlastních čísel těchto náhodných matic a pro rozložení vzdáleností v ustáleném stavu Dysonova plynu jsou shodné. Byl navržen nový vztah 3 pro aproximaci rozložení vzdáleností Dysonova plynu na jednotkové kružnici s inverzní termodynamickou teplotou β , který je nyní označován jako Izrailevova formule. Dále byla ukázána použitelnost Metropolisova algoritmu pro simulaci Dysonova plynu. Nakonec byla prokázána platnost teorie a Izrailevovy formule pro různé hodnoty β z fyzikálně zajímavého intervalu $(0, 4)$ a zároveň bylo potvrzeno, že hodnotu β lze odhadnout z experimentálních histogramů s lehkým podhodnocováním skutečného β pro velká β a nadhodnocováním pro malá β .

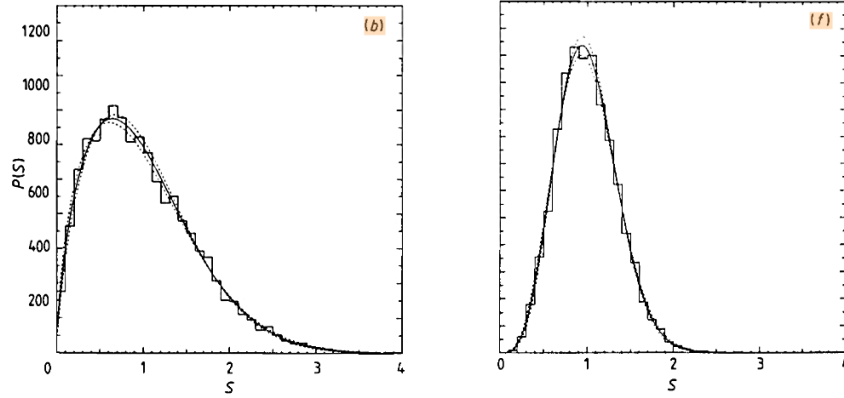


Figure 5. Comparison between experimental histograms for $P(S)$ for intermediate β (9900 spacings, Noise = 0.1) and the conjectured $P_\beta(S)$ (4.1) for minimum χ^2 fit (full curve) and 1%-confidence fits (broken curves) for: (a) $\beta = 0.2$, $\beta_{\text{histo}} = 0.35$ ($\chi_{38}^2 = 44.49$); (b) $\beta = 0.5$, $\beta_{\text{histo}} = 0.68$ ($\chi_{33}^2 = 34.35$); (c) $\beta = 0.7$, $\beta_{\text{histo}} = 0.79$ ($\chi_{32}^2 = 24.99$); (d) $\beta = 1.5$, $\beta_{\text{histo}} = 1.57$ ($\chi_{28}^2 = 31.44$); (e) $\beta = 2.5$, $\beta_{\text{histo}} = 2.39$ ($\chi_{24}^2 = 16.31$); (f) $\beta = 3.5$, $\beta_{\text{histo}} = 3.31$ ($\chi_{21}^2 = 18.51$).

Obrázek 4: Porovnání experimentálních dat s teoretickou předpovědí — Izrailevovou formulí pro jiná β .

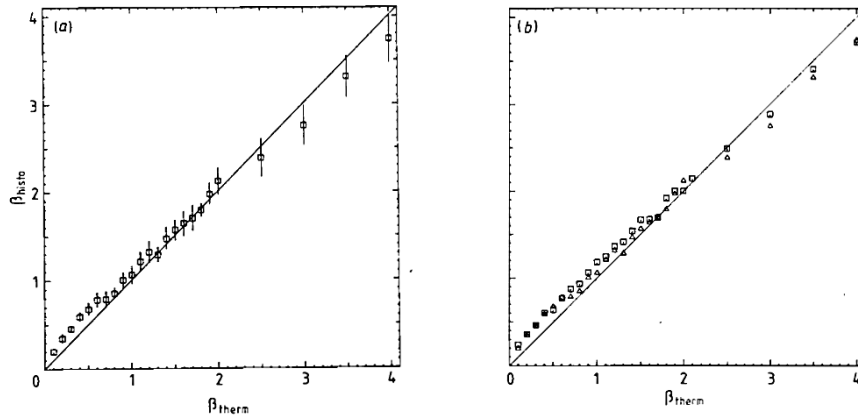


Figure 6. Dependence of β_{histo} , gained from minimum χ^2 fit of experimental histograms using conjectured spacing distribution (4.1), upon $\beta = \beta_{\text{therm}}$ for: (a) Noise=0.1 with error bars from 1%-confidence fits; (b) Noise=0.1 (open triangles) and Noise=0.2 (open squares).

Obrázek 5: Porovnání parametrů β