

# (Nie)obliczalne wyjątki

Tomasz TKOCZ, Warszawa

Chcemy mówić o macierzach losowych, przyda się mały wstęp i motywacja. O historii teorii i bogatej bibliografii można poczytać do poduszki w artykule [1].

W mechanice kwantowej układ opisuje się za pomocą hamiltonianu  $\hat{H}$ , który jest operatorem hermitowskim działającym na pewnej przestrzeni stanów, która jest przestrzenią Hilberta  $\mathcal{H}$ ,

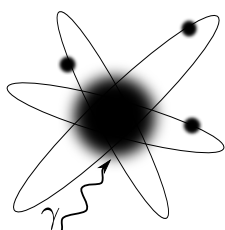
$$\hat{H}: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

O własnościach układu wnioskujemy się z równania Schrödingera

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle,$$

gdzie  $E \in \mathbb{R}$ ,  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  to niewiadome. Jest to więc po prostu równanie na wektory ( $|\psi\rangle$ ) i wartości własne ( $E$ ) hamiltonianu  $\hat{H}$ .

**Przykład.** W fizyce jądrowej rozważa się jądra ciężkich pierwiastków i konfiguracje ich elektronów. Wtedy  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$ ,  $N$  — duże, zaś  $\hat{H}$  jest bardzo skomplikowane, ale wyobrażalne, bo to jest macierz zespolona rozmiaru  $N \times N$ , hermitowska, tzn.  $H_{ij} = \overline{H_{ji}}$ . Hamiltonian  $\hat{H}$  jest tak zmontowany, że równanie Schrödingera podaje możliwe stany podstawowe  $|\psi_i\rangle$ ,  $i = 1, \dots, N$ , naszego atomu o energiach podstawowych  $E_i$ . Gdy poświecimy na jądro fotonem  $\gamma$ , atom przechodzi ze stanu  $|\psi_i\rangle$  do  $|\psi_j\rangle$  zwiększając energię o  $E_j - E_i$ .



Problem polega na tym, że równanie Schrödingera rzadko kiedy udaje się analitycznie rozwiązać. Mimo to chcielibyśmy coś na jego podstawie powiedzieć o własnościach układu. Genialny pomysł pochodzi od Eugeniusza Wignera z 1950 roku,

(W)  $N$  jest duże,  $\hat{H}$  skomplikowane, potraktujmy  $\hat{H}$  jakby było losowe!  
Co to znaczy losowe?

**Definicja.** Niech  $H_{mn}, K_{mn}$  to niezależne standardowe zmienne gaussowskie, co oznacza, że są to liczby rzeczywiste, przy czym prawdopodobieństwo wylosowania liczby z przedziału  $(x, x + dx)$  wynosi  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}dx$ . Macierz

$$(1) \quad \hat{H} = \begin{bmatrix} H_{11} & \frac{H_{12}+iK_{12}}{\sqrt{2}} & \dots & \frac{H_{1N}+iK_{1N}}{\sqrt{2}} \\ \frac{H_{12}-iK_{12}}{\sqrt{2}} & H_{22} & \dots & \frac{H_{2N}+iK_{2N}}{\sqrt{2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{H_{1N}-iK_{1N}}{\sqrt{2}} & \frac{H_{2N}-iK_{2N}}{\sqrt{2}} & \dots & H_{NN} \end{bmatrix}$$

nazywamy macierzą  $\text{GUE}_N$  (*Gaussian Unitary Ensemble*).

Żeby badać rozkład wartości własnych macierzy losowej, definiuje się tzw. *miarę spektralną*.

**Definicja.** Niech  $A$  będzie hermitowską macierzą  $N \times N$ . Przypomnijmy, że wówczas jej wartości własne to  $N$  liczb rzeczywistych. Dla przedziału  $I \subset \mathbb{R}$  określamy liczbę  $\mu(I)$  jako ułamek liczby wartości własnych z przedziału  $I$ ,

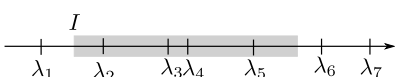
$$\mu(I) = \frac{1}{N} \cdot (\text{liczba wartości własnych macierzy } A \text{ z przedziału } I).$$

Z definicji,  $\mu(\mathbb{R}) = 1$ , więc  $\mu$  jest miarą probabilistyczną na  $\mathbb{R}$  i nazywa się ją *miarą spektralną macierzy*  $A$ .

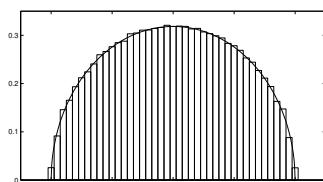
**Twierdzenie.** (E. Wigner, 1958) Niech  $\hat{H}_N$  to macierz  $\text{GUE}_N$ . Niech  $\mu_N$  to miara spektralna macierzy  $\frac{1}{\sqrt{N}}\hat{H}_N$ . Wówczas dla każdego przedziału  $I \subset \mathbb{R}$ ,

$$\mu_N(I) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \int_{I \cap [-2,2]} \frac{1}{2\pi} \sqrt{4-x^2} dx, \quad \text{p.n..}$$

Oznacza to, że wartości własne przeskalowanej przez faktor  $1/\sqrt{N}$  dużej macierzy  $\text{GUE}_N$  są prawie na pewno z przedziału  $[-2, 2]$ , a prawdopodobieństwo znalezienia wartości własnej wokół  $x \in [-2, 2]$  wynosi  $\frac{1}{2\pi} \sqrt{4-x^2} dx$ . Faktor  $1/\sqrt{N}$  bierze się stąd, że euklidesowa długość pojedynczej kolumny macierzy  $\text{GUE}_N$  jest rzędu  $\sqrt{N}$ .



Rys. 1. Miara spektralna  $\mu(I)$  mówi jaki procent wartości własnych znajduje się w przedziale  $I$ . Na rysunku  $\mu(I) = 4/7$ .



Rys. 2. *Wigner semi-circle law*. Słupki prezentują wartości własne  $10^5$  macierzy losowych  $\text{GUE}_{32}$  otrzymanych numerycznie w programie **MATLAB**<sup>®</sup>. Linia to wykres funkcji  $\frac{1}{2\pi} \sqrt{4-x^2}$ . Zatem macierz  $32 \times 32$  jest już *dużego* rozmiaru.

Okazuje się, że poziomy energetyczne ciężkich pierwiastków, które można przecież mierzyć doświadczalnie, są idealnie opisywane przez *semi-circle law*, czyli pomysł Wignera wypalił.

Czy rozkład Gaussa obecny w definicji macierzy GUE jest *wyjatkowy*? Nie ma miejsca na *wyjatek*, bo dla wszystkich macierzy losowych, byle o elementach niezależnych, ich spektra zachowują się asymptotycznie tak samo. Zatem to co jest odpowiedzialne za cud, to nie konkretny rozkład elementów macierzowych, lecz brak korelacji między nimi.

**Twierdzenie.** (L. Pastur, 1973) Niech  $K_{mn}, H_{mn}$  to **niezależne** zmienne losowe o **średniej** 0 i **wariancji** 1. Niech  $\hat{H}_N$  to macierz losowa zadana wzorem (1). Niech  $\mu_N$  to miara spektralna macierzy  $\hat{H}_N$ . Wówczas dla każdego przedziału  $I \subset \mathbb{R}$ ,

$$\mu_N(I) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \int_{I \cap [-2,2]} \frac{1}{2\pi} \sqrt{4-x^2} dx, \quad \text{p.n..}$$

To zjawisko nazywa się *uniwersalnością spektrum macierzy losowych*.

Przejdziemy teraz do zagadnienia, gdzie pojawi się mały *wyjatek*. Zaczniemy znowu od odrobiny motywacji fizycznej. Jak już mamy jakiś stan kwantowy  $|\psi\rangle$ , to jego ewolucja w czasie jest zadana przez równanie Schrödingera

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle,$$

którego rozwiązaniem jest

$$|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{H}/\hbar} |\psi(0)\rangle,$$

czyli ewolucję w czasie układu kwantowego opisuje operator

$$\hat{U}_t = e^{-it\hat{H}/\hbar}.$$

Jest on unitarny,

$$\hat{U}_t^* \hat{U}_t = e^{it\hat{H}^*/\hbar} e^{-it\hat{H}/\hbar} = \text{Id}.$$

Znowu możemy pomyśleć, że paradygmat Wignera (W) będzie skuteczny, tzn. dynamika w czasie dużego układu kwantowego będzie z dobrym przybliżeniem opisana za pomocą *losowej* macierzy unitarnej.

**Definicja.** Niech

$$G = \left[ \frac{K_{mn} + iH_{mn}}{\sqrt{2}} \right]_{m,n \leq N}$$

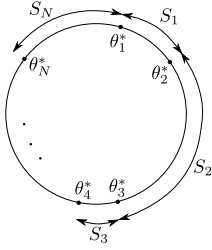
będzie losową macierzą, gdzie  $K_{mn}, H_{mn}$  to niezależne standardowe zmienne gaussowskie. Niech  $U$  będzie macierzą powstałą z  $G$  za pomocą ortogonalizacji Grama-Schmidta. Nazywamy ją losową macierzą  $\text{CUE}_N$  (*Circular Unitary Ensemble*).

Dlaczego ta definicja jest dobra? Otóż, jeśli  $U$  jest macierzą  $\text{CUE}_N$ , zaś  $V$  to deterministyczna macierz unitarna  $N \times N$ , to rozkład  $VU$  jest taki sam jak macierzy  $U$ , tzn. dla każdego mierzalnego podzbioru  $A \subset \mathbb{C}^{N^2}$  macierzy  $N \times N$

$$(2) \quad \mathbb{P}(VU \in A) = \mathbb{P}(U \in A).$$

Innymi słowy, losowe własności macierzy  $\text{CUE}_N$  są niezmiennicze ze względu na operacje unitarne, bez czego nasz model, w którym operator unitarny zadający dynamikę układu kwantowego zastępujemy macierzą CUE, nie miałby sensu. Agitacja za (2) nie jest skomplikowana. Niech  $T$  oznacza procedurę ortogonalizacji, tzn.  $U = T(G)$ , gdzie  $G$  jest macierzą o elementach gaussowskich, jak w definicji. Metodą inspekcji wzrokowej stwierdzamy, że oczywiście  $VT(G) = T(VG)$ , a ponieważ  $VG$  ma taki sam rozkład jak  $G$  (rozkład Gaussa ze swej natury jest rotacyjnie niezmienniczy), to

$$\mathbb{P}(VU \in A) = \mathbb{P}(T(VG) \in A) = \mathbb{P}(T(G) \in A) = \mathbb{P}(U \in A).$$



Rys. 3. Definicja *spacingów*.

Znowu interesuje nas spektrum macierzy  $U$ . Tym razem są to losowe liczby z okręgu jednostkowego  $\{z \in \mathbb{C}; |z| = 1\}$ , powiedzmy  $\{e^{i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_N}\}$ , które opisujemy za pomocą *faz własnych*  $\theta_i \in [0, 2\pi)$  macierzy  $U$ . Ich statystyczne własności bada się zwykle za pomocą trochę subtelniejszych narzędzi jak miara spektralna, którymi są tzw. *spacingi*, czyli zmienne losowe

$$S_j = \theta_{j+1}^* - \theta_j^*, \quad \text{dla } j = 1, \dots, N-1,$$

$$S_N = \theta_1^* + 2\pi - \theta_N^*,$$

gdzie fazy  $\theta_j$  zostały uporządkowane i oznaczone  $\theta_j^*$ ,  $0 \leq \theta_1^* \leq \dots \leq \theta_N^* < 2\pi$ . Dalej, definiuje się typowy spacing  $S$  jako

$$S = S_{\text{rand}},$$

gdzie  $\text{rand}$  to liczba wylosowana ze zbioru  $\{1, \dots, N\}$ , przy czym wybranie każdej z tych liczb jest jednakowo prawdopodobne. Określamy też spacingi ekstremalne,

$$S_{\min} = \min_{1 \leq j \leq N} S_j,$$

$$S_{\max} = \max_{1 \leq j \leq N} S_j.$$

Mówią one nam jak dużą tendencję mają fazy własne do akumulowania się.

Dla macierzy CUE spacingi są dobrze zbadane. Skalujemy tak, aby średnia  $\langle S \rangle$  typowego spacingu  $S$  wynosiła 1. Tą średnią nie jest trudno policzyć, zauważmy bowiem, że

$$\langle S_{\text{rand}} \rangle = \frac{\sum_{j=1}^N \langle S_j \rangle}{N} = \left\langle \frac{\sum S_j}{N} \right\rangle = \frac{2\pi}{N}.$$

Zatem definiujemy przeskalowane spacingi,

$$s_j = \frac{N}{2\pi} S_j, \quad s = \frac{N}{2\pi} S, \quad \text{itd.}$$

Wówczas,

$$s \text{ dla dużych } N \text{ ma w przybliżeniu gęstość } \frac{32}{\pi^2} x^2 e^{-4x^2/\pi},$$

$$\langle s_{\min} \rangle \text{ jest rzędu } 1/N^{1/3},$$

$$(\text{pewna stała}) \cdot N^{1/3} s_{\min} \text{ dla dużych } N \text{ ma w przybliżeniu gęstość } 3x^2 e^{-x^3},$$

$$s_{\max} \text{ jest rzędu } \sqrt{\ln n}.$$

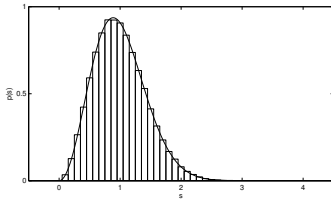
(Mówiąc, że  $a_N$  jest rzędu  $b_N$  mamy na myśli, że iloraz  $a_N/b_N$  zbiega do pewnej stałej.) Twierdzenie graniczne dla fluktuacji  $s_{\max}/\sqrt{\ln n}$  wokół stałej nie jest znane.

Znowu jest tak, że CUE nie jest *wyjątkowe*. Dla spacingów macierzy GUE zachodzą takie same twierdzenia graniczne.

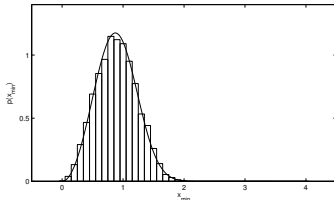
Można jednak naturalnie wprowadzić pewne korelacje pomiędzy blokami macierzy unitarnych i otrzymać *wyjątkowe* zachowanie się spacingów. *Wyjątkowe* w tym sensie, że twierdzenia graniczne będą inne. Należy się jednak odnieść do tych wyników z rezerwą, gdyż są one potwierdzone tylko numerycznie. Odpowiednich obliczeń analitycznie nie udało się jeszcze przeprowadzić, więc dlatego te *wyjątki*, które pokażemy, są *nieobliczalne*.

Naturalną operacją w mechanice kwantowej jest iloczyn tensorowy, który odpowiada za *łączenie* podukładów. Jeśli  $\hat{H}_i$ ,  $i = 1, 2$ , to hamiltonian podukładu  $i$ , to hamiltonian całego układu wynosi  $\hat{H}_1 \otimes \hat{H}_2$ . Przypomnijmy, że iloczyn tensorowy macierzy to operacja polegająca na mnożeniu *po współrzędnych każdego elementu z każdym*. Jeśli  $A = [a_{ij}]_{i,j \leq N}$  jest macierzą  $N \times N$ ,  $B = [b_{ij}]_{i,j \leq M}$  jest macierzą  $M \times M$ , to  $A \otimes B$  jest macierzą rozmiaru  $MN \times MN$ , określoną jako

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1N}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2N}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1}B & a_{N2}B & \dots & a_{NN}B \end{bmatrix} = [a_{ij}b_{kl}]_{i,j \leq N, k,l \leq M}.$$



Rys. 4. Słupki prezentują spacingi  $10^5$  macierzy losowych  $\text{CUE}_{32}$  otrzymanych numerycznie. Linia to wykres funkcji  $\frac{32}{\pi^2} x^2 e^{-4x^2/\pi}$ .



Rys. 5. Słupki prezentują odpowiednio przeskalowany minimalny spacing  $s_{\min}$  obliczony numerycznie dla  $10^5$  macierzy losowych  $\text{CUE}_{32}$ . Linia to wykres funkcji  $3x^2 e^{-x^3}$ .

Dynamika jest też wyznaczona przez iloczyn tensorowy operatorów z podukładów

$$\hat{U} = \hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2,$$

gdyż

$$e^{it\hat{H}_1/\hbar} \otimes e^{it\hat{H}_2/\hbar} = e^{it(\hat{H}_1 \otimes \hat{H}_2)/\hbar}.$$

Pytanie zatem brzmi: co można powiedzieć o statystycznych własnościach spektrum macierzy losowych

1)  $U_1 \otimes U_2$ ,  $U_i \in \text{CUE}_n$ ,  $N = n^2$ ,  $n \rightarrow \infty$ ,

2)  $U_1 \otimes \dots \otimes U_n$ ,  $U_i \in \text{CUE}_2$ ,  $N = 2^n$ ,  $n \rightarrow \infty$ ?

Pierwszy przypadek odpowiada sytuacji w której łączymy dwa duże podukłady kwantowe, każdy o  $n$  wymiarowej przestrzeni stanów otrzymując  $N = n^2$  wymiarowy układ, natomiast drugi — gdy łączymy bardzo dużo, powiedzmy  $n$  małych układów dwu-wymiarowych otrzymując układ  $N = 2^n$  wymiarowy. Druga sytuacja jest naturalna z punktu widzenia zastosowań w informatyce kwantowej.

W obu przypadkach udowodniono, że

$$s \text{ dla dużych } N \text{ ma w przybliżeniu gęstość } e^{-x}.$$

Co z  $s_{\min}$  i  $s_{\max}$ ? Można by, heurystycznie, rozumować następująco. Skoro typowy spacing ma rozkład wykładniczy, to założmy, że wszystkie spaciny  $s_1, \dots, s_N$  mają rozkład wykładniczy i są niezależne i zobaczymy jakie  $s_{\min}$  i  $s_{\max}$  wtedy wyjdzie. Łatwe rachunki prowadzą do wniosku, że

$$\langle s_{\min} \rangle \text{ jest rzędu } 1/N,$$

$$N s_{\min} \text{ dla dużych } N \text{ ma w przybliżeniu gęstość } e^{-x},$$

$$s_{\max} \text{ jest rzędu } \ln n,$$

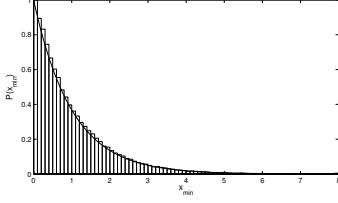
$$s_{\min} - \ln N \text{ dla dużych } N \text{ ma w przybliżeniu gęstość } e^{-(x+\gamma)} - e^{-x},$$

gdzie  $\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} (\sum_{k=1}^n 1/k - \ln n)$  jest stałą Eulera.

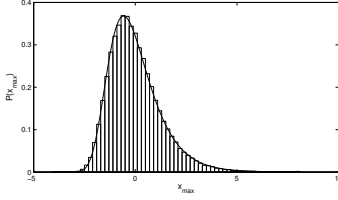
Testy numeryczne pokazują, że te twierdzenia graniczne działają (por. rys. 6, 7). Wyjątkowe?

## Literatura

- [1] Forrester, P. J., Snaith, N. C., Verbaarschoot, J. J. M., Developments in random matrix theory, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36** (2003), R1–R10.



Rys. 6. Słupki prezentują przeskalowany minimalny spacing  $s_{\min}$  obliczony numerycznie dla  $10^5$  macierzy losowych  $\text{CUE}_{128} \otimes \text{CUE}_{128}$ . Linia to wykres funkcji  $e^{-x}$ .



Rys. 7. Słupki prezentują odpowiednio przeskalowany maksymalny spacing  $s_{\max}$  obliczony numerycznie dla  $10^5$  macierzy losowych  $(\text{CUE}_2)^{\otimes 22}$ . Linia to wykres funkcji  $e^{-(x+\gamma)} - e^{-x}$ .