

ランダム行列理論について

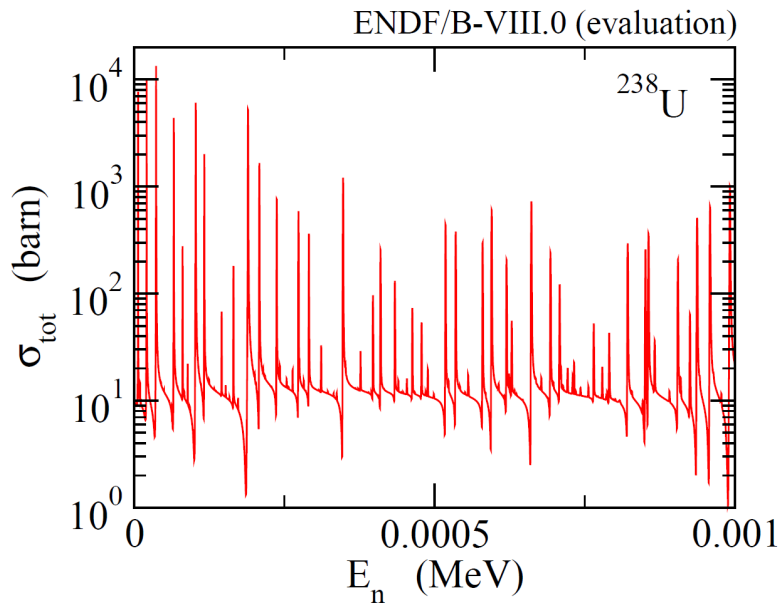
萩野浩一

京都大学大学院理学研究科



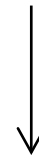
1. ランダム行列とその性質
2. 原子核の場合
3. 原子の場合
4. 多体系に対する簡単な模型計算
5. 最後に: 原子計算にどのように使えるのか?

複合核とランダム行列理論

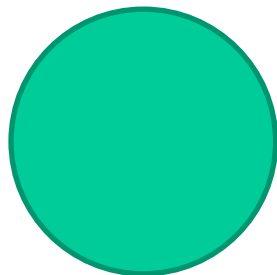
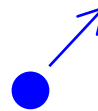


エンリコ・フェルミの実験 (1935)
原子核 + 中性子の弾性散乱

MeV スケールの原子核に
eV スケールの幅の多数の共鳴状態



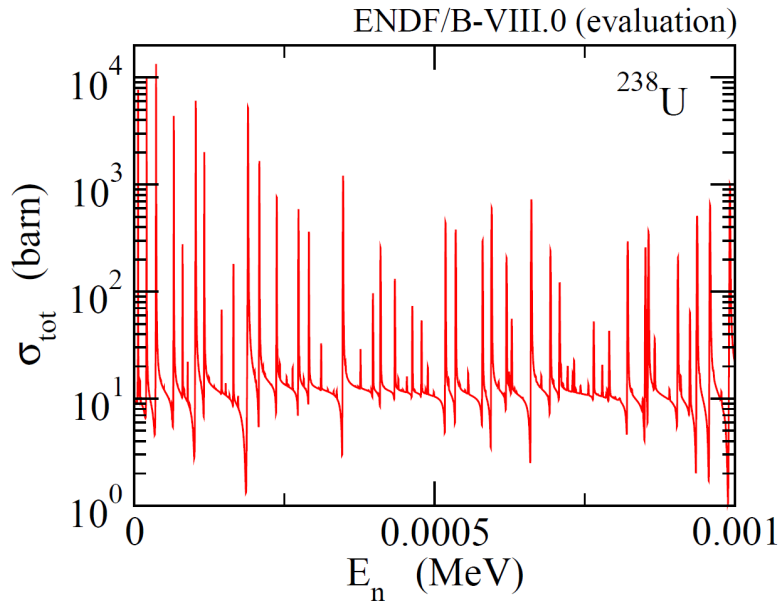
中性子



原子核

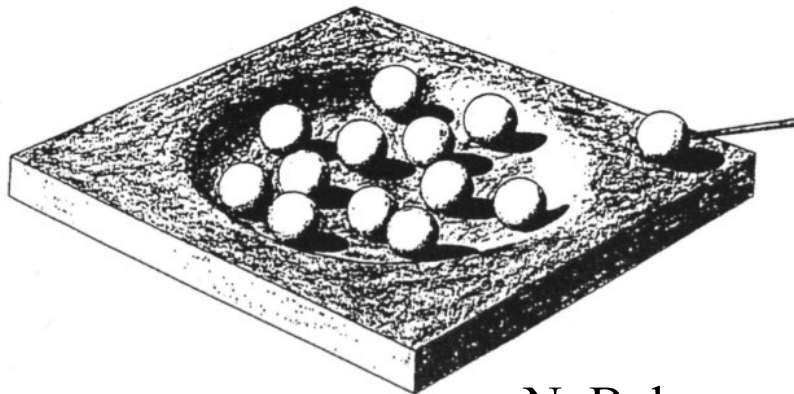
$[A + 1]$ 体系の長寿命
の中間状態

複合核とランダム行列理論



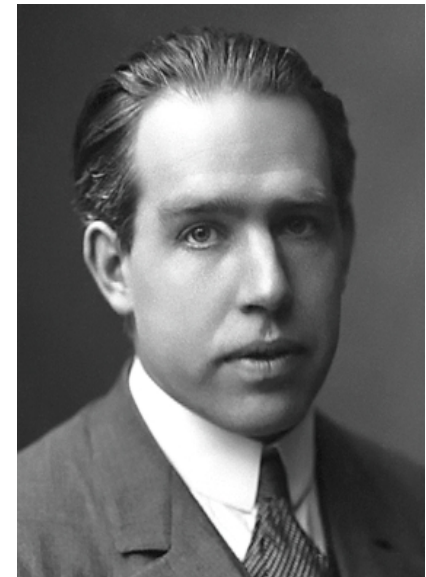
エンリコ・フェルミの実験 (1935)
原子核 + 中性子の弾性散乱

MeV スケールの原子核に
eV スケールの幅の多数の共鳴状態



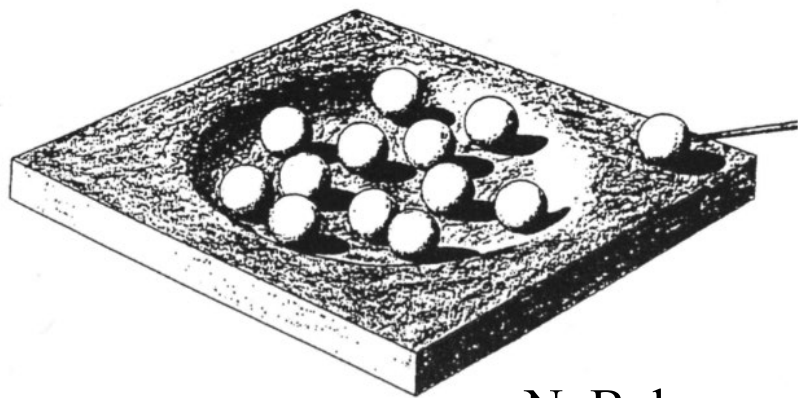
N. Bohr,
Nature 137 ('36) 351

ニールス・ボーア
「複合核」の概念
(1936)

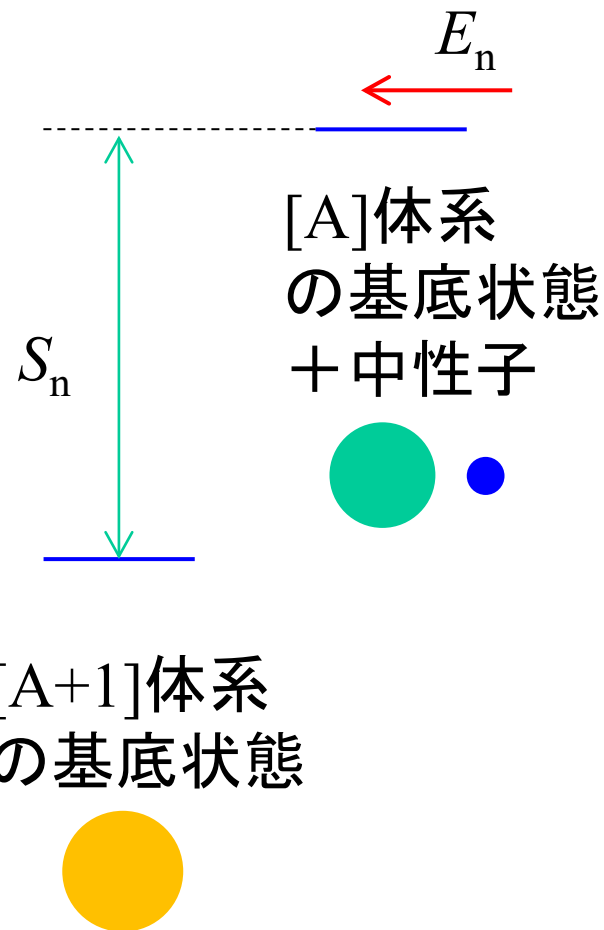


Wikipedia

複合核とランダム行列理論



N. Bohr,
Nature 137 ('36) 351

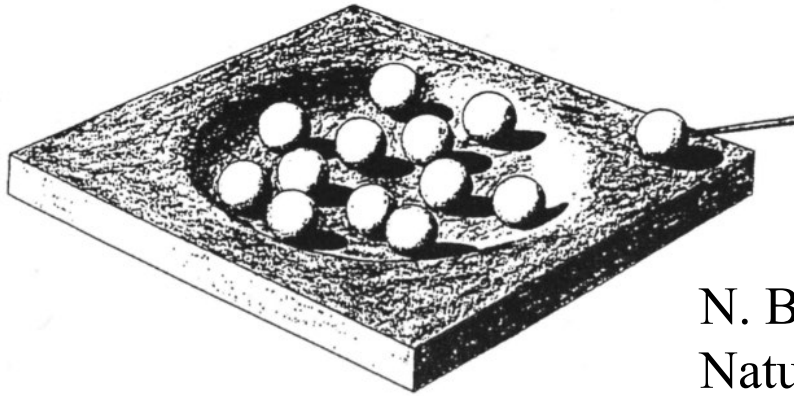


$E = S_n + E_n$ のエネルギー
を持つ励起状態が生成



S_n : 1中性子分離エネルギー
(イオン化エネルギーに相当)
~ 7-8 MeV

複合核とランダム行列理論



N. Bohr,
Nature 137 ('36) 351



Wikipedia

複合核: 原子核の(比較的)高励起状態(複雑な状態)



スペクトルの詳細はともかく、平均をとればあまり個々の原子核によらない議論ができるのでは (Wigner, 1960年代)

→ 複数の原子核に対して平均をとり (“nuclear data ensemble”)
統計的に取り扱う。

複合核とランダム行列理論

複数の原子核に対して平均をとり(“nuclear data ensemble”)
統計的に取り扱う。



ランダム行列理論

- ✓ 行列要素を乱数に取り、対角化する。
- ✓ 異なる乱数に対して複数の行列を作り、結果を平均する
(アンサンブル平均をとる)。

ランダム行列にも色々な種類があるが、ここでは最も基本となる
GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble) を考える。

- 実対称行列(実エルミート行列)
- 時間反転対称性

行列要素が
実数

ランダム行列理論 (GOE)

参考文献: H.A. Weidenmuller and G.E. Mitchell,
Rev. Mod. Phys. 81 (2009) 539.

$N \times N$ の実対称行列を考える

→それぞれの行列要素はガウス分布に従ってランダム
に発生させる

$$\begin{aligned} P(H_{kk'}) &= \sqrt{\frac{N}{4\pi\lambda^2}} \exp\left[-\frac{N}{4\lambda^2} H_{kk'}^2\right] & (k = k') \\ &= \sqrt{\frac{N}{2\pi\lambda^2}} \exp\left[-\frac{N}{2\lambda^2} H_{kk'}^2\right] & (k \neq k') \end{aligned}$$

(λ はパラメータ)

(note 1)

$$P(H) = \prod_k P(H_{kk}) \prod_{k < k'} P(H_{kk'})^2 \propto \exp\left[-\frac{N}{4\lambda} \text{Tr}(H^2)\right]$$

は基底の直交変換に対して不変

(note 2) 行列要素ではなく固有値の分布に書き直すこともできる。

ランダム行列理論 (GOE)

GOEの性質

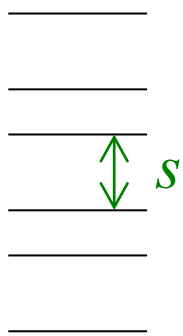
1. 平均準位密度

$$\rho(E) = Av. \left[\sum_{\mu} \delta(E - E_{\mu}) \right]$$

$$\rho(E) = \frac{N}{\pi\lambda} \sqrt{1 - \left(\frac{E}{2\lambda}\right)^2}$$

(Wigner の半円分布)

2. 最近接準位間隔分布



$$P(x) = \frac{\pi}{2} x \exp(-\pi x^2 / 4); \quad x = s / \langle s \rangle$$

Wigner 分布

$$P(H_{kk'}) = \sqrt{\frac{N}{4\pi\lambda^2}} \exp\left[-\frac{N}{4\lambda^2} H_{kk'}^2\right] \quad (k = k')$$
$$= \sqrt{\frac{N}{2\pi\lambda^2}} \exp\left[-\frac{N}{2\lambda^2} H_{kk'}^2\right] \quad (k \neq k')$$

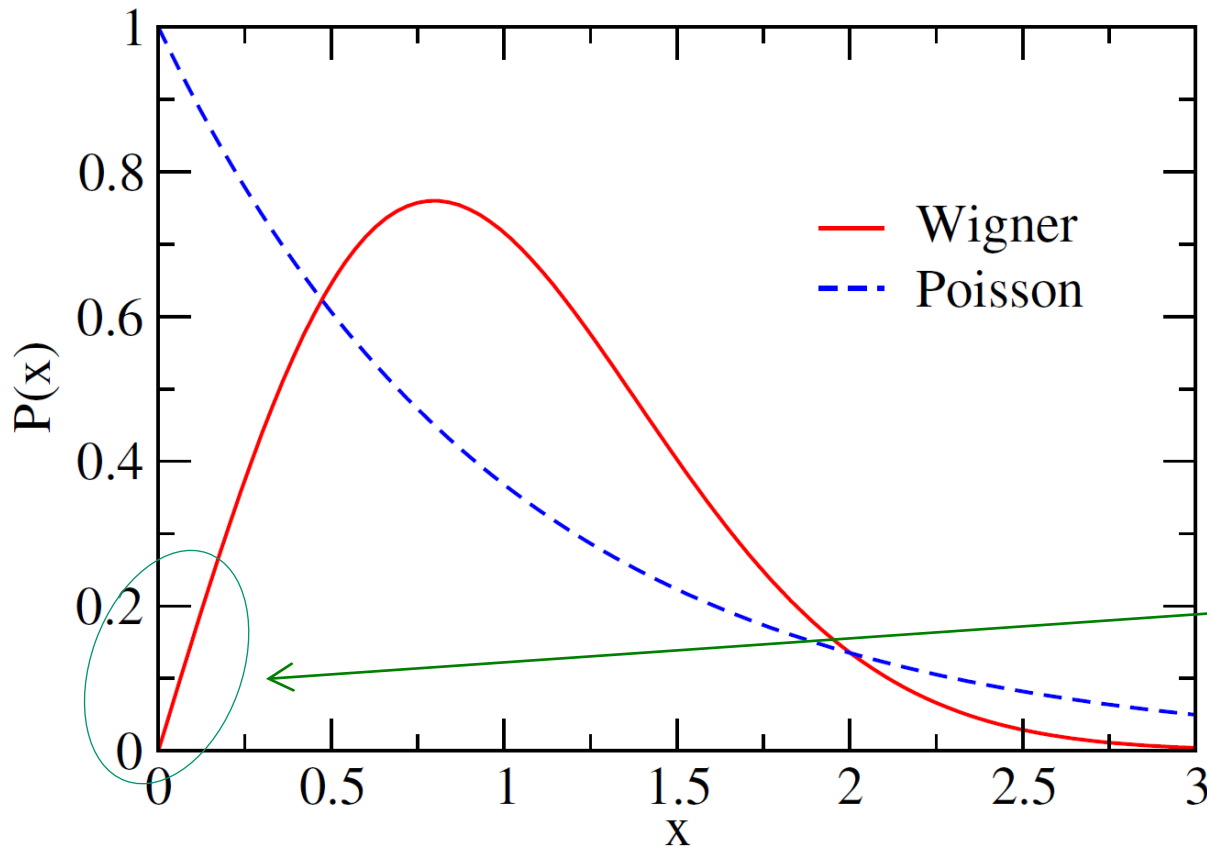
ランダム行列理論 (GOE)

GOEの性質

2. 最近接準位間隔分布

$$P(x) = \frac{\pi}{2} x \exp(-\pi x^2 / 4); \quad x = s / \langle s \rangle$$

$$P(H_{kk'}) = \sqrt{\frac{N}{4\pi\lambda^2}} \exp\left[-\frac{N}{4\lambda^2} H_{kk'}^2\right] \quad (k = k')$$
$$= \sqrt{\frac{N}{2\pi\lambda^2}} \exp\left[-\frac{N}{2\lambda^2} H_{kk'}^2\right] \quad (k \neq k')$$



Wigner 分布

相関がなければ

$$P(x) = e^{-x}$$

(Poisson 分布)

準位反発

ランダム行列理論 (GOE)

GOEの性質

3. 遷移強度 (固有波動関数)

$$\psi_k = \sum_{\mu} C_{\mu}^{(k)} |\mu\rangle$$



$$P(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi y}} e^{-y/2}; \quad y = (C_{\mu}^{(k)})^2 / \langle (C_{\mu}^{(k)})^2 \rangle$$

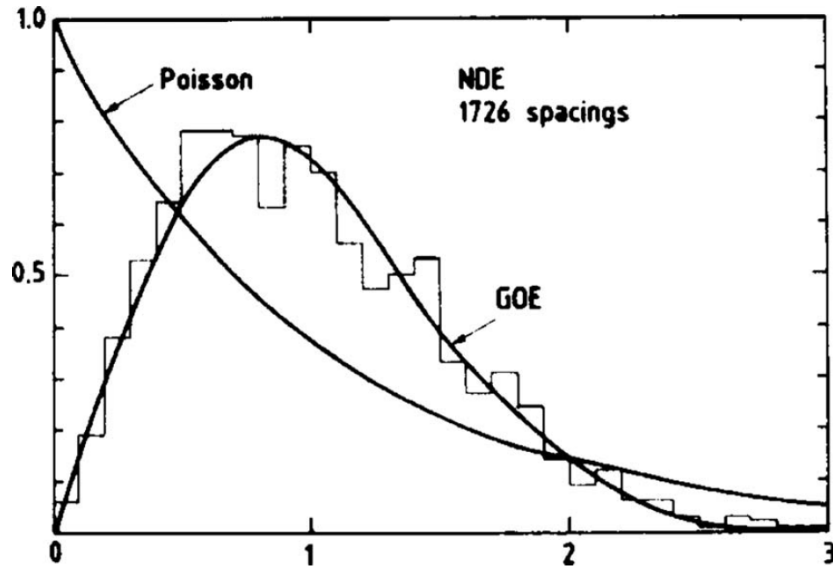
Porter-Thomas 分布

あるいは、

$$P(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-t^2/2}; \quad t = |C_{\mu}^{(k)}| / \langle |C_{\mu}^{(k)}| \rangle$$

原子核への適用例

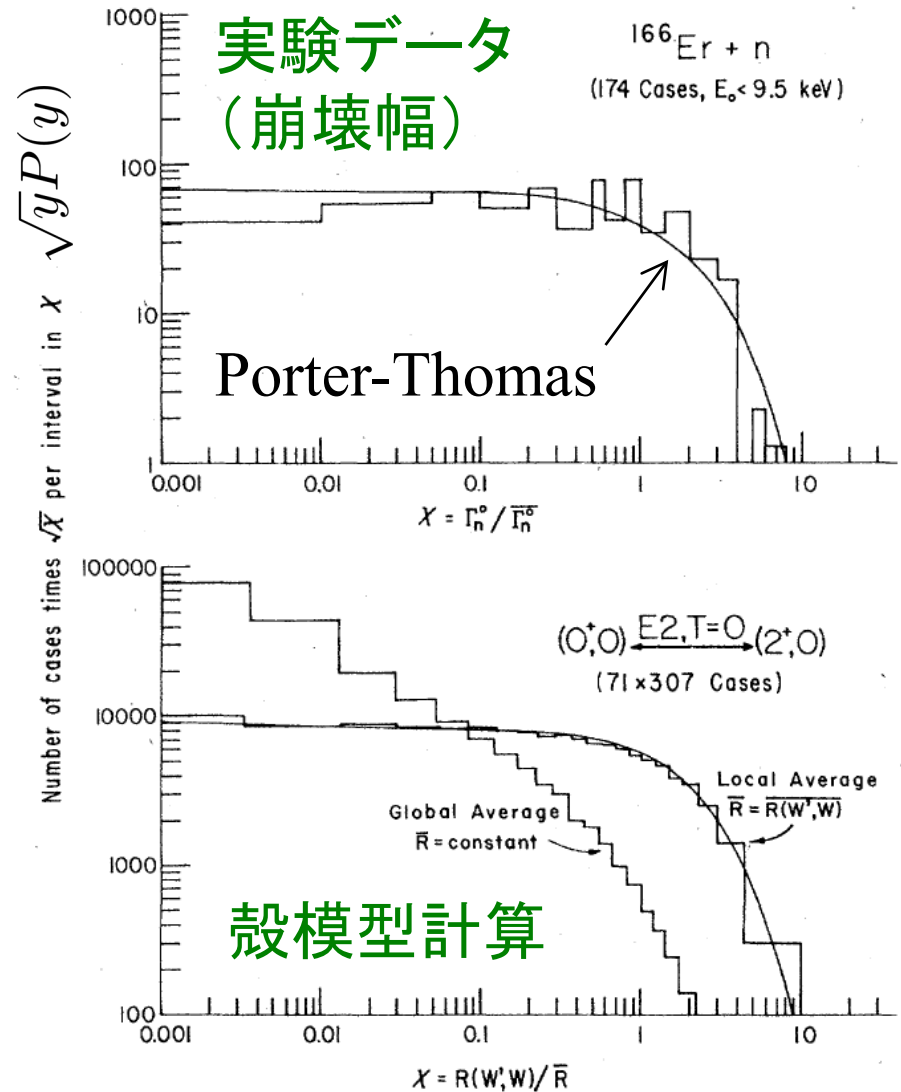
最近接準位間隔分布



多くの核の準位から集めた
1726の準位間隔の分布

O. Bohigas et al.,
“Nuclear Data for Science and
Technology”, p. 809.

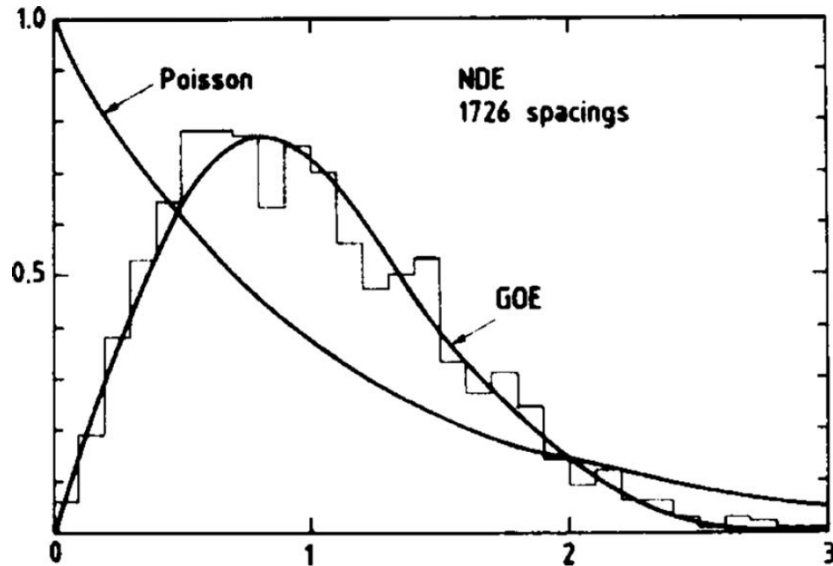
遷移確率の分布



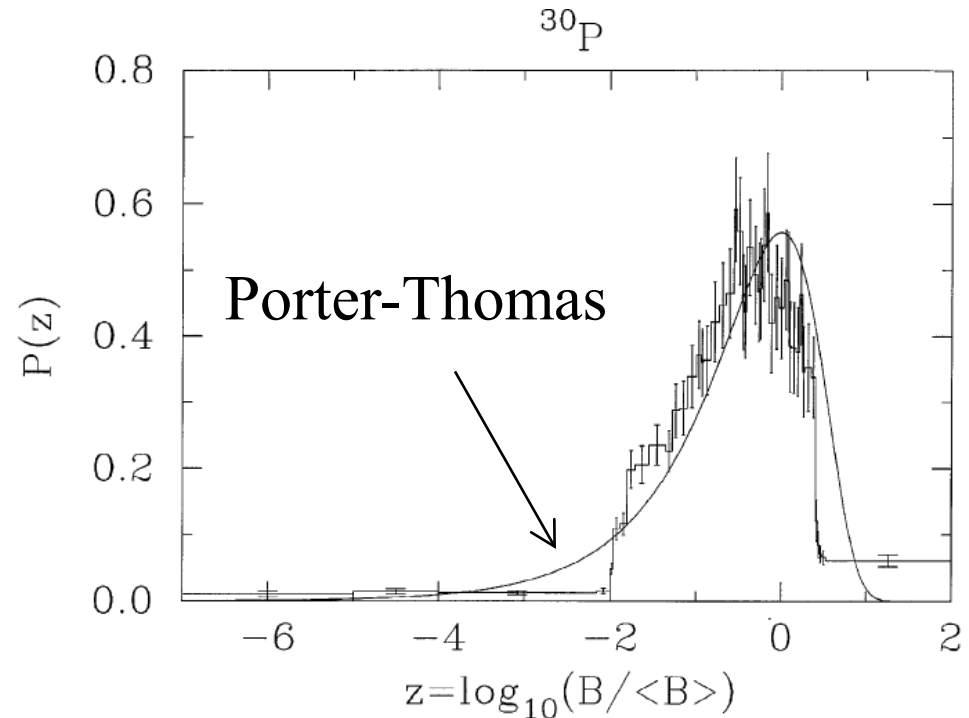
T.A. Brody et al., RMP53 ('81) 385

原子核への適用例

最近接準位間隔分布



遷移確率の分布



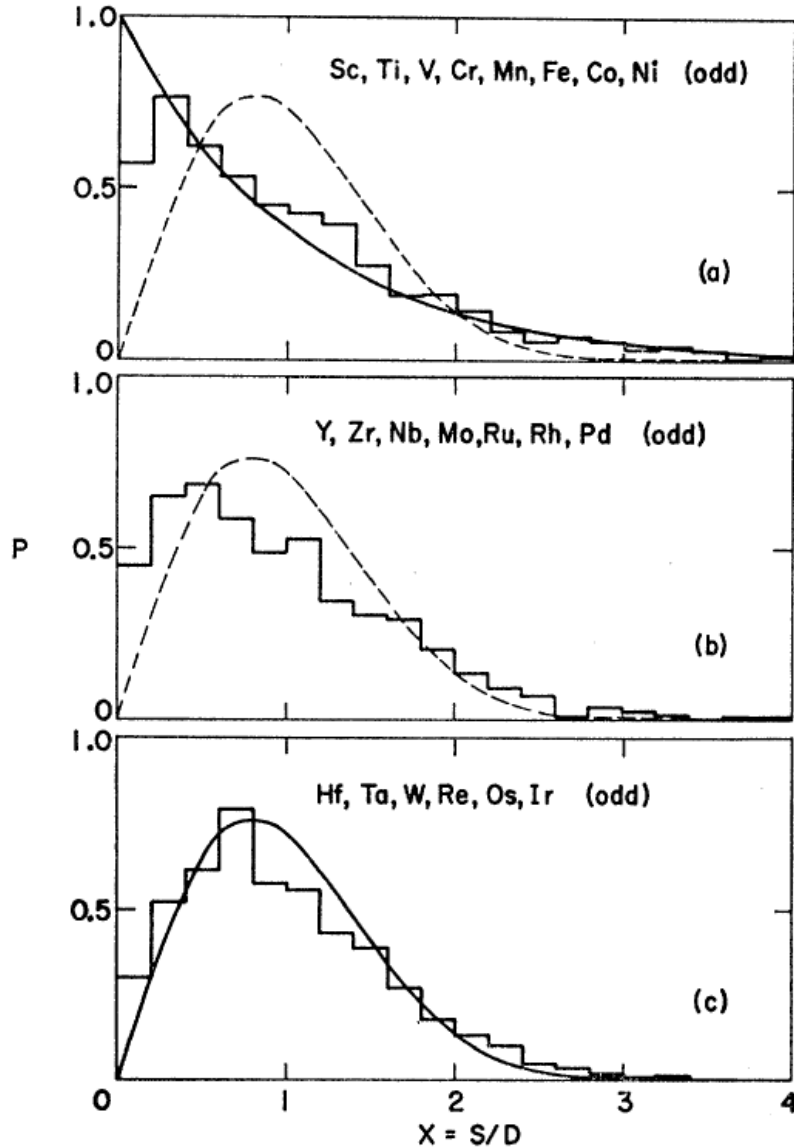
多くの核の準位から集めた
1726の準位間隔の分布

O. Bohigas et al.,
“Nuclear Data for Science and
Technology”, p. 809.

J.F. Shrinier, Jr. et al.,
Phys. Rev. C62 ('00) 054305

原子への適用例

最近接準位間隔分布

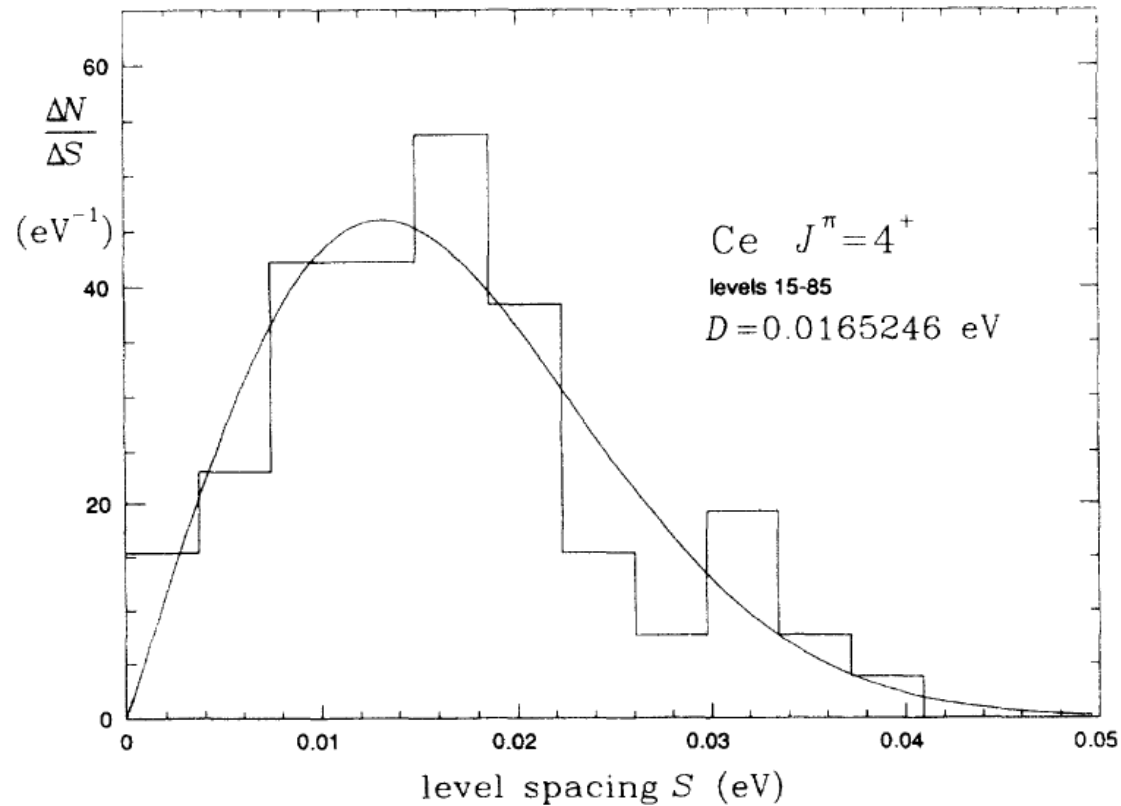


徐々にGOE的になるのは
スピン依存相互作用が強くなるため

N. Rosenzweig and C.E. Porter,
Phys. Rev. 120 ('60) 1698

原子への適用例

最近接準位間隔分布

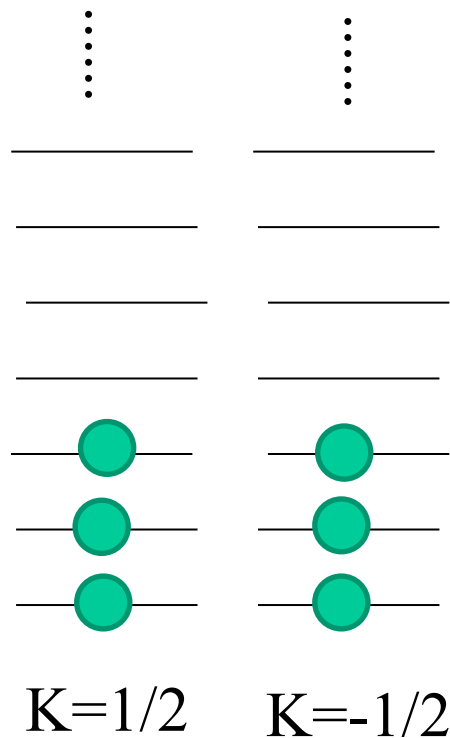


V.V. Flambaum et al.,
Phys. Rev. A50 ('94) 267

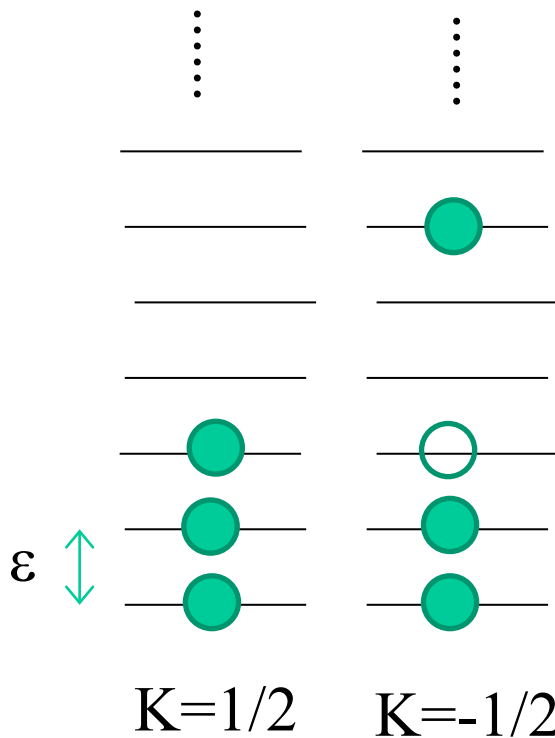
多体系に対する簡単な模型計算

G.F. Bertsch and K.H., arXiv: 2102.07084 [nucl-th]

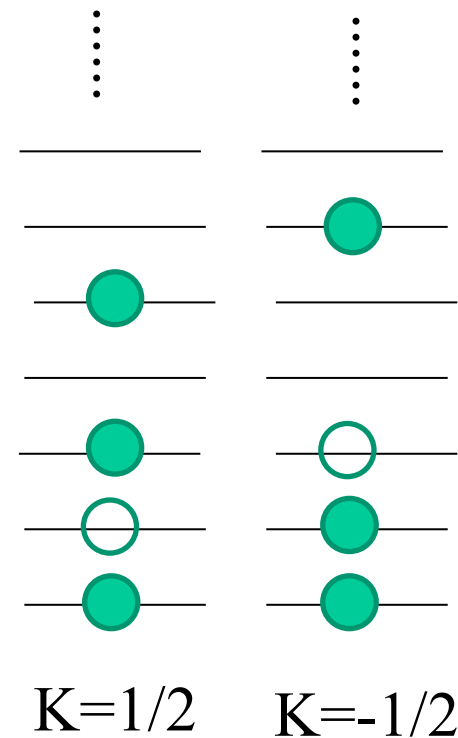
一様な一粒子軌道



$0p0h$ 状態



$1p1h$ 状態 ($E^*=3\varepsilon$)

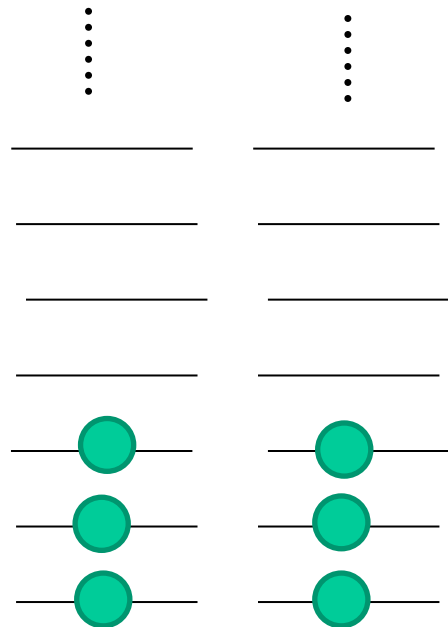


$2p2h$ 状態 ($E^*=6\varepsilon$)

多体系に対する簡単な模型計算

G.F. Bertsch and K.H., arXiv: 2102.07084 [nucl-th]

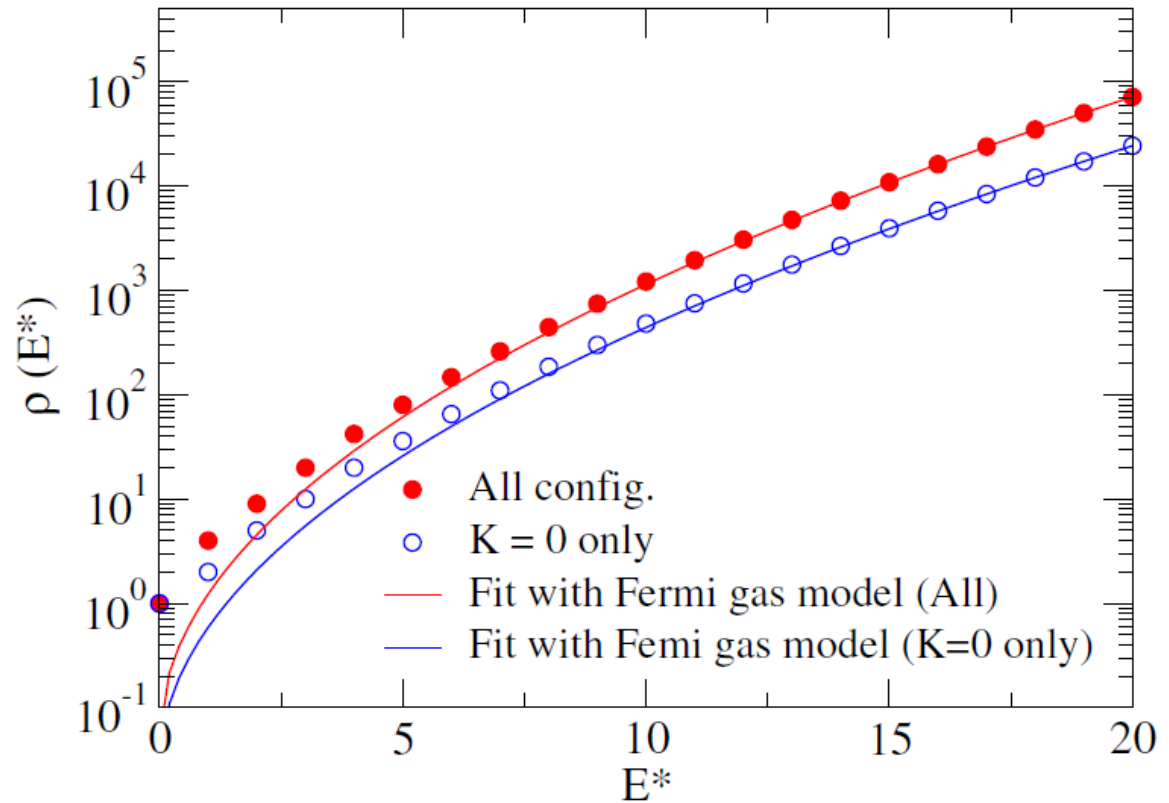
一様な一粒子軌道



$K=1/2$

$K=-1/2$

0p0h 状態



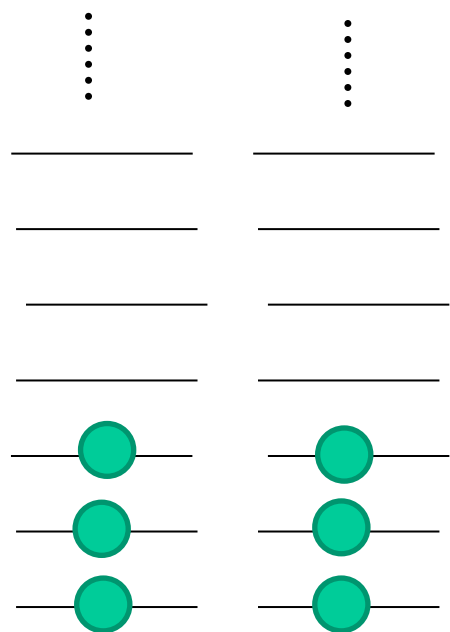
Fermi-gas model: $\rho(E^*) = Ae^{\sqrt{aE^*}}$

A, a : adjustable parameters

多体系に対する簡単な模型計算

G.F. Bertsch and K.H., arXiv: 2102.07084 [nucl-th]

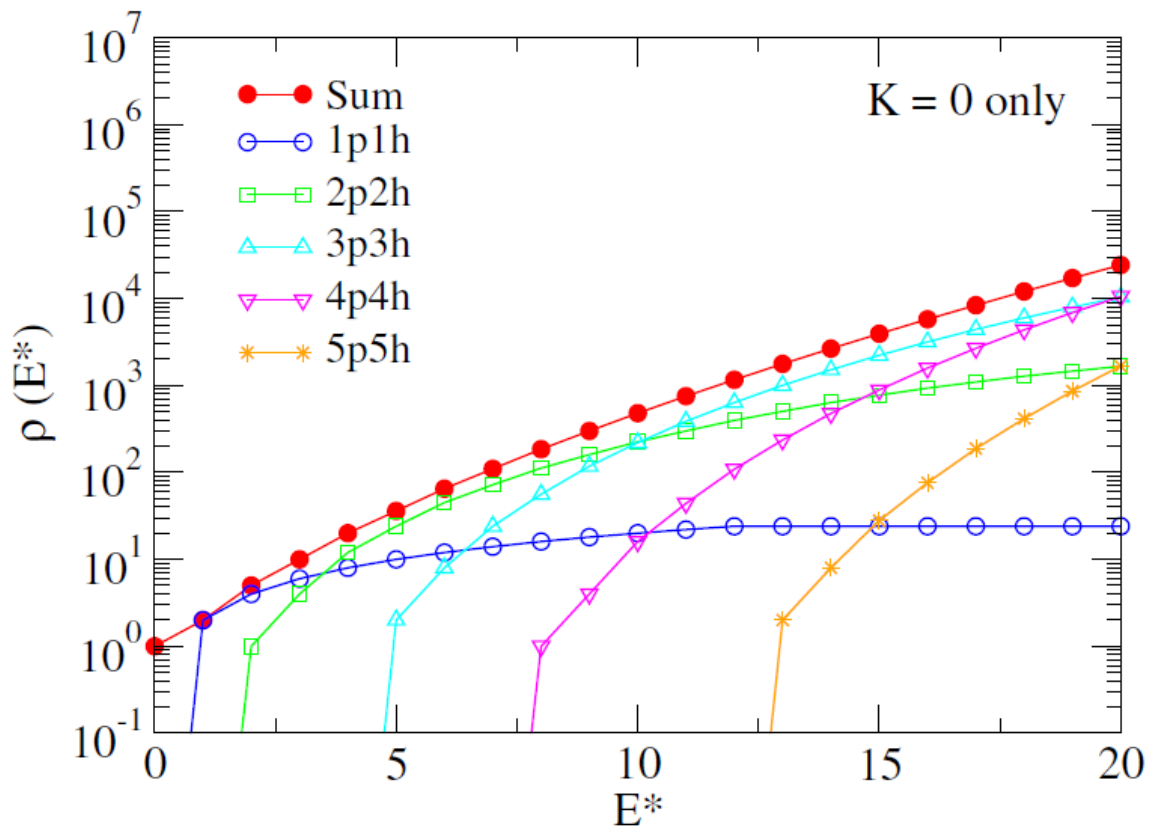
一様な一粒子軌道



$K=1/2$

$K=-1/2$

$0p0h$ 状態

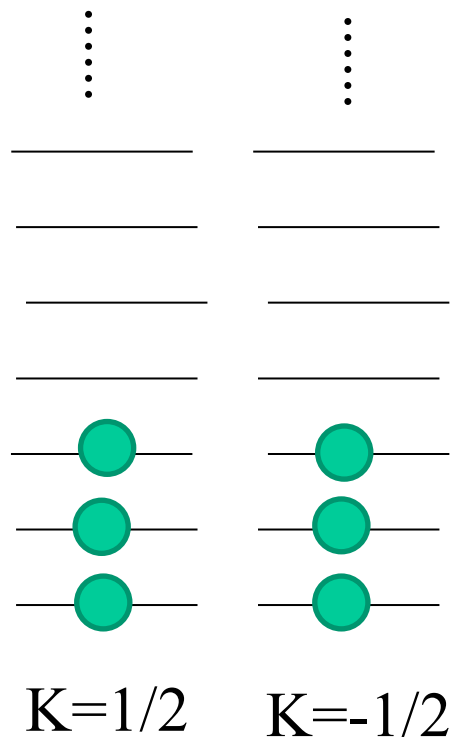


→ $K_{\text{tot}}=0$, $E^* = 10\varepsilon$ の空間で
ハミルトニアンを対角化 (481次元)

多体系に対する簡単な模型計算

G.F. Bertsch and K.H., arXiv: 2102.07084 [nucl-th]

一様な一粒子軌道



0p0h 状態

→ $K_{\text{tot}}=0, E^* = 10\varepsilon$ の空間で
ハミルトニアンを対角化 (481次元)

$$H_{kk'} = \langle \Psi_k | H | \Psi_{k'} \rangle$$

$$H = \sum_{\mu} \epsilon_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} + \sum v_{\mu\nu\mu'\nu'} a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} a_{\mu'}$$

ガウス分布 $P(v) = \frac{\bar{v}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{v^2}{2}\right]$

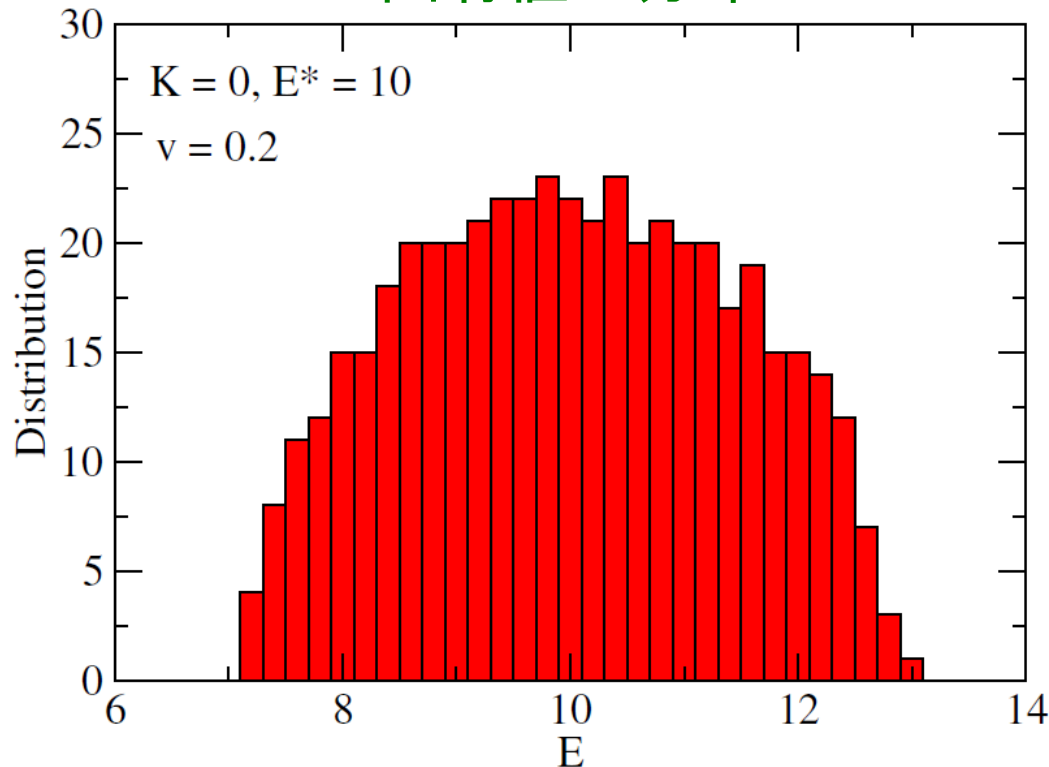
に従ってランダムに発生
(\bar{v} は平均値 (インプット))

以下では $\bar{v} = 0.2\varepsilon$ に取る。

多体系に対する簡単な模型計算

G.F. Bertsch and K.H., arXiv: 2102.07084 [nucl-th]

固有値の分布



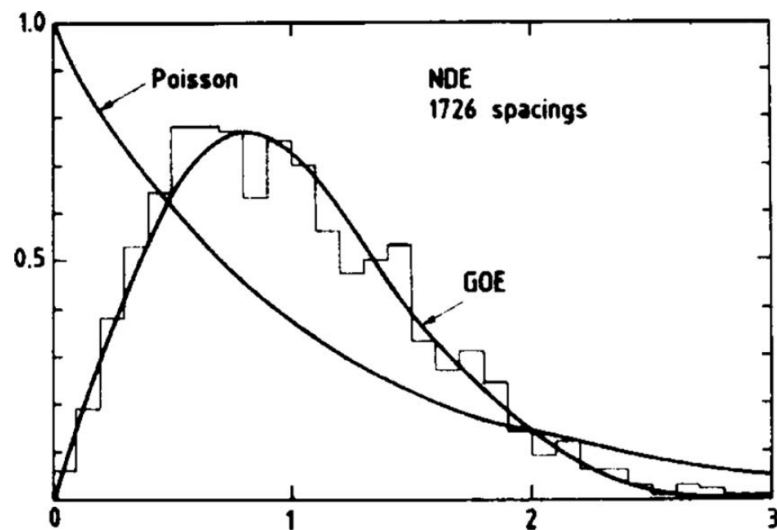
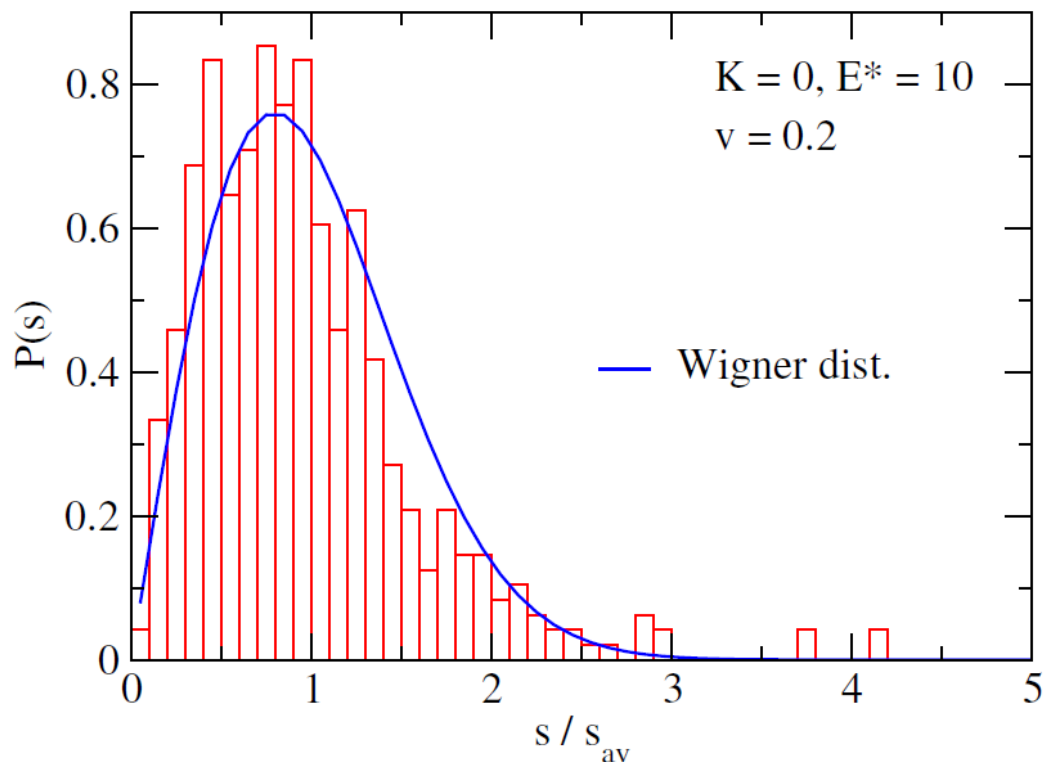
きれいな半円分布

$$\rho(E) = \frac{N}{\pi\lambda} \sqrt{1 - \left(\frac{E}{2\lambda}\right)^2}$$

多体系に対する簡単な模型計算

G.F. Bertsch and K.H., arXiv: 2102.07084 [nucl-th]

最近接準位間隔分布



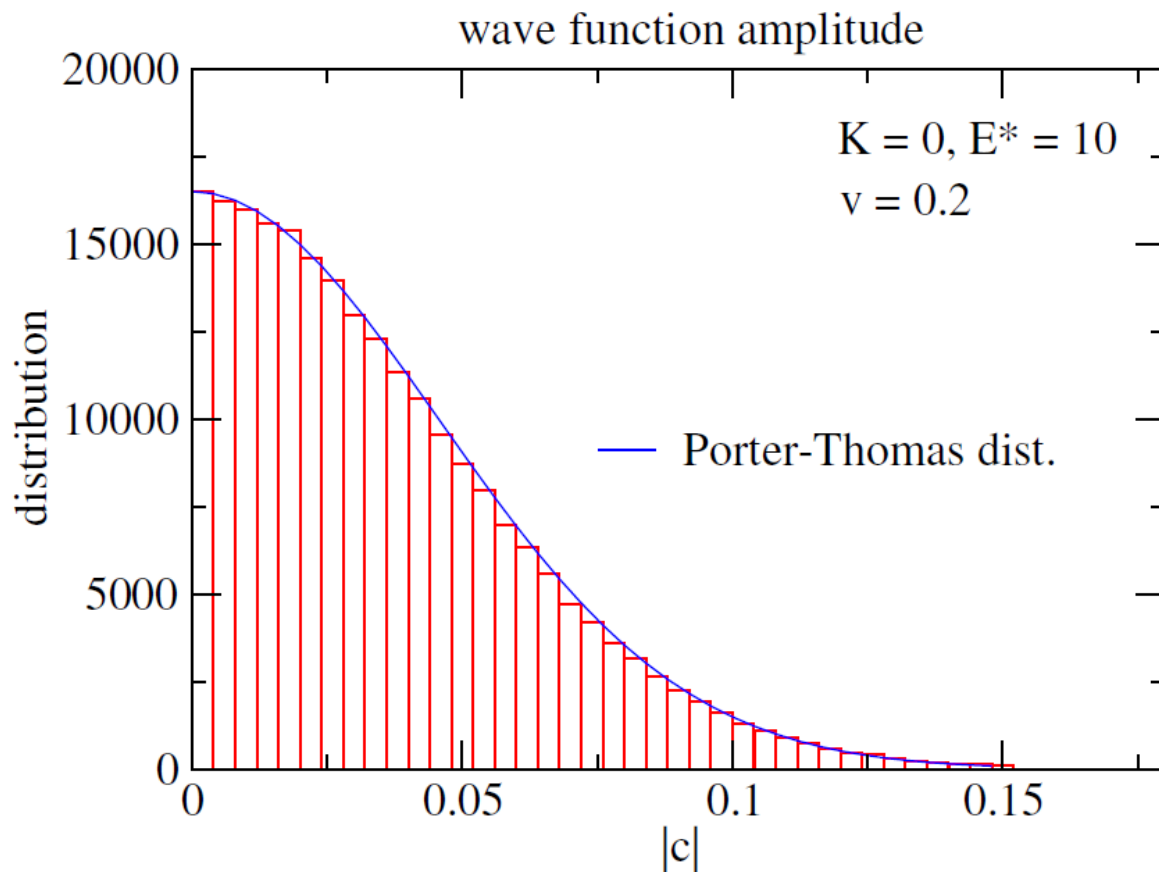
Wigner 分布

$$P(x) = \frac{\pi}{2} x \exp(-\pi x^2 / 4); \quad x = s / \langle s \rangle$$

多体系に対する簡単な模型計算

G.F. Bertsch and K.H., arXiv: 2102.07084 [nucl-th]

波動関数の振幅の分布



$$\psi_k = \sum_{\mu} C_{\mu}^{(k)} |\mu\rangle$$

$$P(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-t^2/2}$$

$$t = |C_{\mu}^{(k)}| / \langle |C_{\mu}^{(k)}| \rangle$$

最後に:原子計算にどのように使えるか?

PHYSICAL REVIEW A

VOLUME 37, NUMBER 7

APRIL 1, 1988

Random-matrix method for the simulation of large atomic $E1$ transition arrays

B. G. Wilson, F. Rogers, and C. Iglesias

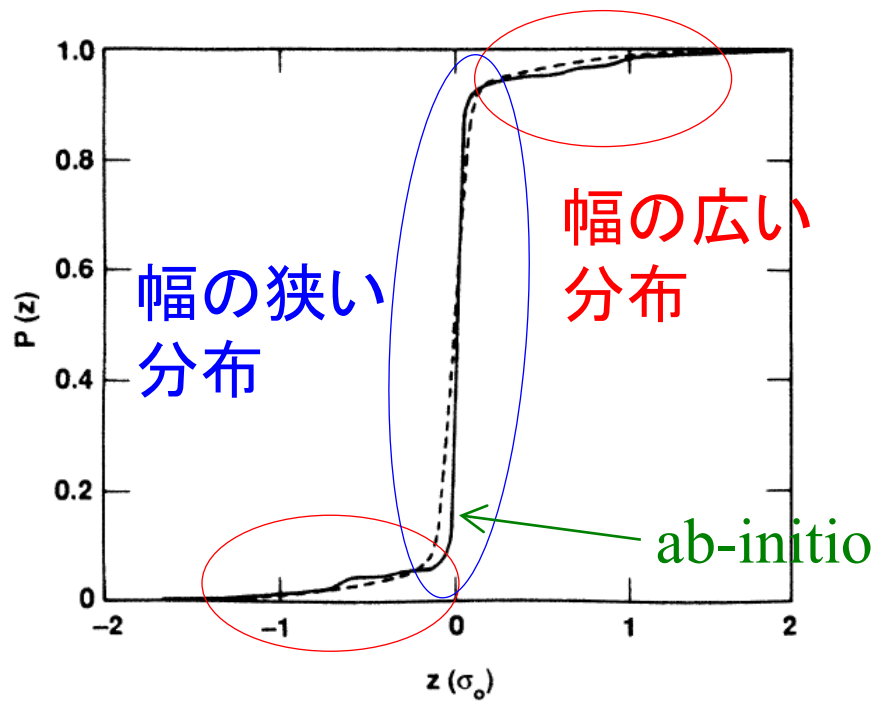
Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California 94550

(Received 2 November 1987)

A computationally fast approximate method for the calculation of large atomic-dipole transition arrays is proposed using an adaptation of Wigner's random-matrix theory. Unlike the Gaussian orthogonal ensemble, off-diagonal matrix elements are populated statistically according to a bi-Gaussian distribution function where elements are correlated according to the term value of the parent shell.

B.G. Wilson, F. Rogers, and C. Iglesias,
Phys. Rev. A37, 2695 (1988).

ハミルトニアン of off-diagonal 成分の分布 (doublet P states of Fev1)



$$P(z) = \int_{-\infty}^z dv P_v(v)$$

two-Gaussian でフィットできる
(点線)

- ✓ Gauss 分布に従って off-diag. 成分をランダムに決める。
- ✓ diag. 成分は ab-initio 計算で決める。

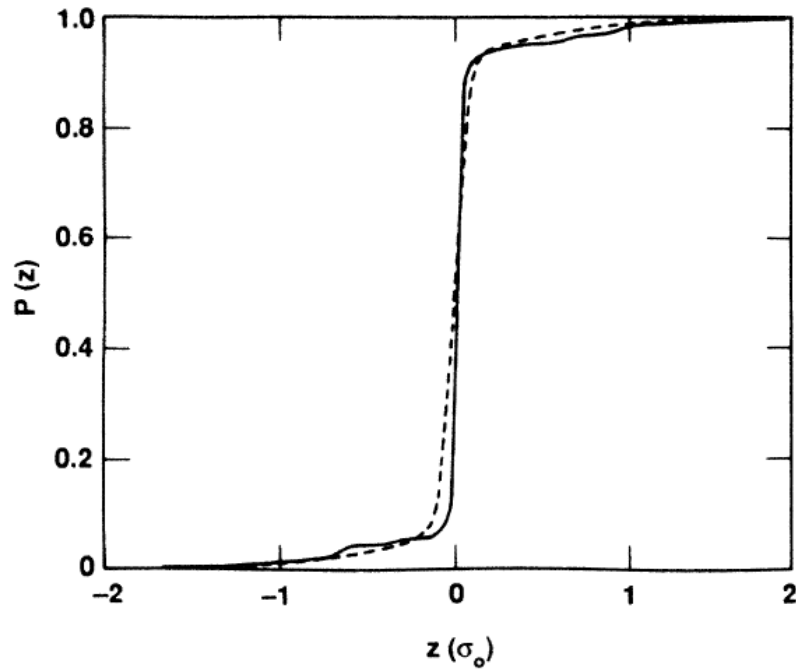


対角化

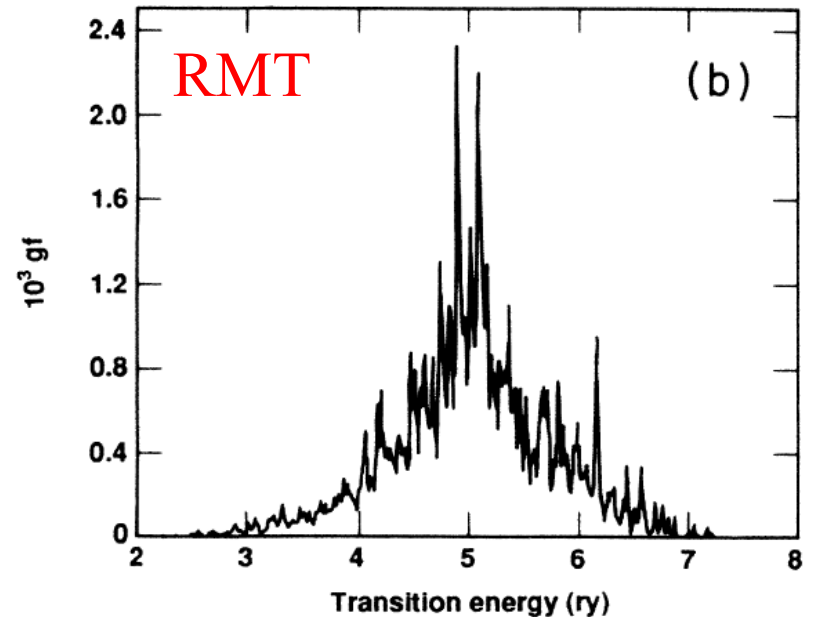
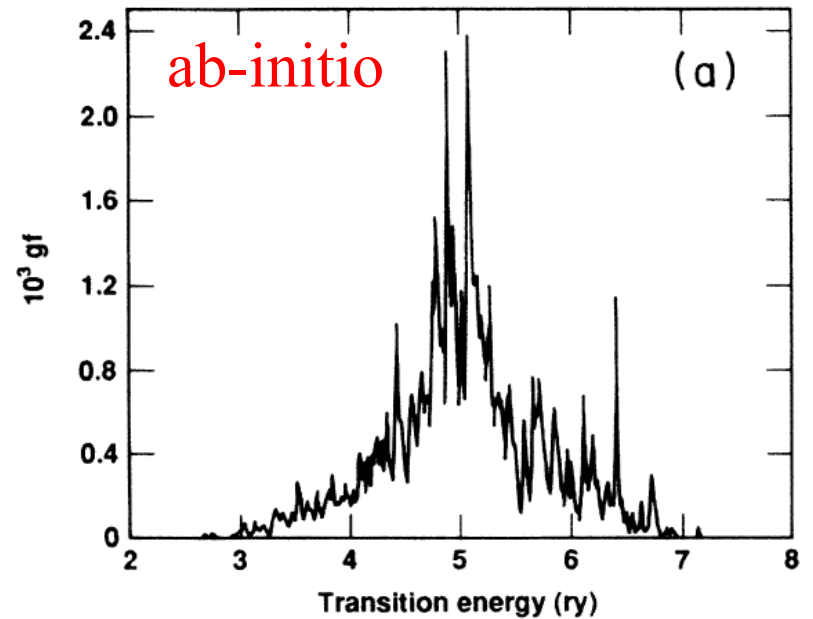


スペクトルと遷移強度

ハミルトニアンの off-diagonal 成分の分布 (doublet P states of Fev1)



- 非常によい一致。
- この計算では 2.5 倍程度計算時間が短くなった。



Simulation of atomic transition arrays for opacity calculations

J. Bauche, C. Bauche-Arnoult, and J.-F. Wyart

Laboratoire Aimé Cotton, Bâtiment 505, 91405 Orsay, France

P. Duffy

Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California 94550

M. Klapisch

Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, California 94720

(Received 25 June 1991)

A method is proposed for simulating resolved transition arrays of ionized atom spectra in full intermediate coupling. The wave number and intensity of each line in an array are picked at random from separated but correlated distributions. Even though each line is not exactly reproduced, this procedure yields the correct following characteristics of the supposedly symmetric array: total intensity; second and fourth moments of the distributions of unweighted wave numbers, of intensity-weighted wave numbers, and of transition amplitudes; numbers of lines and sums of intensities in consecutive narrow energy ranges. All the parameters of the distribution are obtained by means of compact formulas, or tabulated. Applications to the arrays $4d^4-4d^35p$ of Pd^{6+} and $4d^75s-4d^75p$ of Cd^{4+} are presented. Comparison with the explicit results of the Slater-Condon method shows good agreement. It is proposed to use this method for fast and reliable computation of Rosseland means and other opacity properties.

遷移エネルギー ε と遷移振幅 a に対してガウス分布を仮定:

$$\begin{aligned}
 D(\varepsilon, a) = & \frac{L}{2\pi\sqrt{v_u}} \exp\left[-\frac{\varepsilon^2}{2v_u}\right] \\
 & \times \exp\left[-\frac{a^2}{2} \exp(-\alpha - \beta|\varepsilon|)\right] \\
 & \times \exp\left[-\frac{\alpha + \beta|\varepsilon|}{2}\right], \quad (3)
 \end{aligned}$$

FIG. 2. Two calculated spectra of the $\text{Pd}^{6+} 4d^4-4d^35p$ array. (a) Exact results of the Slater-Condon method. (b) Simulated spectrum (Sec. IV A). Abscissas in cm^{-1} , ordinates in the same arbitrary units in both plots.

