非エルミートランダム行列の固有値密度分布の導出

高須 正太郎*

2024年9月11日

0. はじめに

このノートでは、非エルミートランダム行列の大自由度極限(つまり行 and 列数 $N \to \infty$)における固有値密度分布(漸近固有値密度分布)を統計物理的計算方法で導出した Sommers ら [1] の論文を解説する。

エルミートランダム行列の漸近固有値密度分布に関しては和書・洋書問わず多くの文献で扱われており、統計物理 的な手法に関しては、例えば渡辺ら「ランダム行列の数理と科学」3.2 節にレプリカ法を用いた導出法が詳しく解説 されている。その一方で、非エルミートランダム行列の漸近固有値密度分布については結果(circular law またはそ の拡張である elliptic law)のみ述べられている文献が多く、その導出方法まで詳しく解説したもの(物理の文脈で) は、筆者の知る限り少ない。

統計物理的な手法による非エルミートランダム行列の導出方法は複数あるが、本ノートでは、Sommers ら [1] に よって提案された Green 関数の「ポテンシャル」を経由する方法を解説する。この方法は、その汎用性の高さから、 その後の幾多の論文に引用され、拡張が試みられている [2, 3]。しかし、Sommers の元論文は letter 論文であり、ま た Appendix がない(!)ことから、非自明な式変形を含め、途中の計算が大幅に省略されており、統計物理的な計 算に習熟した人でない限り式を追うのは困難である。例に漏れず筆者もその一人であり、行間を埋めるのに多大な労 力を要した。そこで本ノートでは Sommers の論文をなるべく詳細に解説する。

1 記法と基本公式の確認

漸近固有値密度分布の導出では、複素解析の公式を数多く活用する。本章では複素変数の記法および基本公式を確認する。

(1) 記法の確認

複素変数 $\omega \in \mathbb{C}$ の共役を ω^* で表す。複素ベクトルに * がかかる場合には、エルミート転置を表す。ベクトルは太字 で表す。 $\omega \in \mathbb{C}$ の実部を $\Re\omega$, 虚部を $\Im\omega$ とする。複素関数 $f(\omega, \omega^*)$ の偏微分をそれぞれ、 $\partial_{\omega} f \equiv \frac{1}{2} (\partial_{\Re\omega} - i\partial_{\Im\omega}) f$, $\partial_{\omega^*} f \equiv \frac{1}{2} (\partial_{\Re\omega} + i\partial_{\Im\omega}) f$ と定義する。このとき、 $\partial_{\omega} \omega = \partial_{\omega^*} \omega^* = 1$, $\partial_{\omega} \omega^* = \partial_{\omega^*} \omega = 0$ が成り立つことは簡単に確 認できる。 複素関数 $f(\omega, \omega^*)$ の複素平面上の領域 $R \perp o$ (面) 積分を、 $\int_R d^2 \omega f \equiv \int_R d\Re\omega d\Im\omega f$ と表す。一方、複素平面上の閉曲線 $C \perp o$ (線) 積分を、 $\oint d\omega f$ で表す。

(2) 基本公式の確認

本ノートで用いる基本公式の結果をまとめる。

① Cauchy Riemann の関係式:複素関数 $f(\omega, \omega^*)$ が正則 $\iff \partial_{\omega^*} f = 0$

^{*} 京都大学大学院 情報学研究科 先端数理科学専攻 博士課程

website: https://shtakasu.github.io/

② Green の公式: 2 変数 $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ の C^1 級実関数 U(x, y), V(x, y) について、

$$\oint_{\partial D} (U dx + V dy) = \int_D \left(-\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) dx dy$$

Green の公式を用いると、以下の関係式を導くことができる

$$\partial_{\omega^*} \frac{1}{\omega} = \pi \delta^2(\omega) \tag{1}$$

なお、複素デルタ関数を $\delta^2(\omega) \equiv \delta(\Re \omega) \delta(\Im \omega)$ と定義した。

Proof. $\omega = x + iy \ (x, y \in \mathbb{R})$ とする。複素平面の原点を囲む任意の半径 r > 0の円内の領域 Cにおいて $\partial_{\omega^*} \frac{1}{\omega}$ を面積分すると、

$$\int_{C} d^{2}\omega \ \partial_{\omega^{*}} \frac{1}{\omega} = \frac{1}{2} \iint_{C} dx dy \left(\partial_{x} \frac{x}{x^{2} + y^{2}} + \partial_{y} \frac{y}{x^{2} + y^{2}} \right) + \frac{i}{2} \iint_{C} dx dy \left(\partial_{x} \frac{y}{x^{2} + y^{2}} - \partial_{y} \frac{x}{x^{2} + y^{2}} \right)$$
$$= \frac{1}{2} \oint_{C} \left(-\frac{y}{x^{2} + y^{2}} dx + \frac{x}{x^{2} + y^{2}} dy \right) + \frac{i}{2} \oint_{C} \left(\frac{x}{x^{2} + y^{2}} dx + \frac{y}{x^{2} + y^{2}} dy \right)$$
$$= \pi + 0 = \pi$$
(2)

ここで、1 行目から 2 行目の等式において Green の公式を用いた。任意の半径 r > 0 で上式が成り立つことから、 $\partial_{\omega^*} \frac{1}{\alpha} = \pi \delta^2(\omega)$ とわかる。

なお同様にして $\partial_{\omega} \frac{1}{\omega^*} = \pi \delta^2(\omega)$ が成り立つことも確認できる。

2 問題設定

サイズ $N \times N$ のランダム行列 J を考える。簡単のために実行列とするが、複素行列としても同様の議論が可能で ある。各成分は、ガウス分布 $\mathcal{N}(0, 1/N)$ からサンプルされる。各成分間には、 $[J_{ij}J_{ji}]_J = \tau/N$ ($\tau \in [-1, 1]$)の相 関があるとする。このとき、 $\tau = 0$ であれば全ての成分が互いに独立となり、 $\tau = 1$ であれば J は対称行列、 $\tau = -1$ であれば J は反対称行列となる。対角成分は $J_{ii} = 0$ とするが、 $O(1/\sqrt{N})$ である限りどのように定めても $N \to \infty$ では固有値密度分布に影響を与えない。

このとき、Jが実現する確率密度関数P(J)は、

$$P(J) \propto \exp\left[-\frac{N}{2(1-\tau^2)}\sum_{ij}^{N}(J_{ij}^2 - \tau J_{ij}J_{ji})\right]$$
 (3)

と表せる。実際、この確率密度関数をもとに $[J_{ij}^2]_J = 1/N, [J_{ij}J_{ji}]_J = \tau/N$ を確認するのは容易である。

このようなランダム行列 J の固有値密度分布 $\rho(\omega; J)$ と定め、J に関する平均をとったものを $\rho(\omega) \equiv [\rho(\omega; J)]_J$ とする。自己平均性が成り立つと仮定すれば、漸近固有値密度分布は $\lim_{N\to\infty} \rho(\omega; J) = \rho(\omega)$ となるため、 $\rho(\omega) \equiv [\rho(\omega; J)]_J$ を求めることが目標となる。

3 Green 関数とポテンシャル

(1) Green 関数の導入

ランダム行列 J のレゾルベント $(\omega - J)^{-1}$ を用いて、Green 関数 $G(\omega)$ を

$$G(\omega) \equiv \frac{1}{N} [\operatorname{Tr}(\omega - J)^{-1}]_J$$

と定義する。係数 1/N は $G(\omega) \sim O(1)$ を保証するためのものである。

Green 関数は固有値密度分布を求める上で極めて重要な役割を果たす。実際、以下の関係式が成り立つ:

$$\frac{1}{\pi}\partial_{\omega^*}G(\omega) = \rho(\omega) \tag{4}$$

 $Proof. J = P\Lambda P^{-1}$ ($\Lambda_{ij} = \delta_{ij}\lambda_i$; λ_i は J の固有値) のように J を対角化すると、

$$G(\omega) \equiv \frac{1}{N} [\operatorname{Tr}(\omega - P\Lambda P^{-1})^{-1}]_J = \frac{1}{N} [\operatorname{Tr}(\omega - \Lambda)^{-1}]_J = \frac{1}{N} \left[\sum_{i}^{N} \frac{1}{\omega - \lambda_i} \right]_J$$
(5)

ここで2つ目の等式においてトレースの循環性を用いた。

複素平面上の任意の領域 Rを囲む閉曲線 ∂R において $G(\omega)$ を線積分すると、

$$\oint_{\partial R} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi i} G(\omega) \stackrel{(5)}{=} \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} \left[\oint_{\partial R} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi i} \frac{1}{\omega - \lambda_{i}} \right]_{J} = \left[\frac{1}{N} \sum_{\lambda \in R} 1 \right]_{J} = \int_{R} \mathrm{d}^{2} \omega \rho(\omega) \tag{6}$$

が分かる。ここで2つ目の等式において、Cauchy の積分公式を用いた。 一方、 $\frac{\mathrm{d}\omega}{i} = \mathrm{d}y - i\mathrm{d}x$ に着目すると、上式の最左辺は次のようにも変形できる

$$\begin{split} \oint_{\partial R} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi i} G(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial R} \left(\mathrm{d}y - i \mathrm{d}x \right) \left(\Re G + i \Im G \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial R} \left(\Re G \mathrm{d}y + \Im G \mathrm{d}x \right) + \frac{i}{2\pi} \oint_{\partial R} \left(\Im G \mathrm{d}y - \Re G \mathrm{d}x \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{R} \mathrm{d}x \mathrm{d}y \left(-\partial_y \Im G + \partial_x \Re G \right) + \frac{i}{2\pi} \int_{R} \mathrm{d}x \mathrm{d}y \left(\partial_y \Re G + \partial_x \Im G \right) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{R} \mathrm{d}x \mathrm{d}\partial_{\omega^*} G \end{split}$$
(7)

ここで3つ目の等式において、Greenの公式を用いた。

よって、式 (6) と式 (7) より $\int_R d^2 \omega \rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_R dx d\partial_{\omega^*} G$ とわかり、領域 R は任意であったから、命題は示された。

(2) 非エルミートランダム行列の Green 関数を素朴に求めることは困難

式 (4) から、Green 関数が分かれば固有値密度分布が得られる。ではどうすれば Green 関数を計算できるだろう か。素朴に考えると、レゾルベントを J に関して級数展開して直接計算する方法が思いつく。つまり、

$$G(\omega) \equiv \frac{1}{N} [\operatorname{Tr}(\omega - J)^{-1}]_J = \frac{1}{\omega} \left[1 + \frac{1}{N} \frac{1}{\omega} \operatorname{Tr} J + \frac{1}{N} \frac{1}{\omega^2} \operatorname{Tr} J^2 + \cdots \right]_J$$
(8)

この級数展開は、 $|\omega| > ||J||$ 、つまり ω がJの最大固有半径の円よりも遠方になければ正当化されない。しかし、固 有値が存在しない領域(つまり $\rho(\omega) = 0$)では、式 (4) より $\partial_{\omega^*}G(\omega) = 0$ であるから Cauchy Riemann の関係式よ り $G(\omega)$ は正則であり、よって級数展開によって得られた $G(\omega)$ をこの領域に解析接続することができる。

実際、この方法はエルミート行列の場合にはうまくいく。というのも、エルミート行列では固有値は実軸上にのみ 存在するため、級数展開によって求めた $G(\omega)$ は $\omega \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ 全体に解析接続できる。よって、式 (4) において ω を実 軸に近づける極限を考えれば実軸上の固有値密度分布を得ることが可能となる。ちなみに、非エルミート行列をその 2 倍の大きさのエルミート行列に組み込むことによって、この方法を可能とする計算手法("Hermitian reduction") も提案されている [4, 5]。

しかし、非エルミート行列の場合には、固有値分布が 2 次元平面に広がりを持つため、その領域内に解析接続する ことができない (∵ $\rho(\omega) = \partial_{\omega^*}G(\omega) \neq 0$ より固有値スペクトル内部では $G(\omega)$ は非正則)。したがって、肝心の固 有値スペクトル内部の $G(\omega)$ を得ることができない。

(3) ポテンシャルの導入

そこで、微分すると $G(\omega)$ が得られるような関数 $\Phi(\omega)$ を考える。電磁気学とのアナロジーから、これを「ポテンシャル」と呼ぶことにする。ポテンシャル $\Phi(\omega)$ は次の式で与えられる:

$$\Phi(\omega) = -\frac{1}{N} \left[\ln \det \left((\omega^* - J^\top) (\omega - J) \right) \right]_J$$
(9)

ここで行列 $(\omega^* - J^{\top})(\omega - J)$ はエルミート行列であるため、 $\Phi(\omega) \in \mathbb{R}$ であることに注意。 実際、このポテンシャルを微分すると Green 関数が得られる:

$$\partial_{\omega}\Phi(\omega) = -G(\omega) \tag{10}$$

Proof. det $A = \det A^{\top} \natural \mathfrak{h}$

$$\frac{1}{N}\ln\det\left((\omega^* - J^{\top})(\omega - J)\right) = \frac{1}{N}\ln\det(\omega^* - J) + \frac{1}{N}\ln\det(\omega - J)$$

ここで対数行列式の微分公式 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\log\det A(x) = \mathrm{Tr}\left(A(x)^{-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}A(x)\right)$ を利用すると、

$$\frac{1}{N}\partial_{\omega}\left(\ln\det(\omega^* - J) + \ln\det(\omega - J)\right) = \frac{1}{N}\partial_{\omega}\ln\det(\omega - J) = \frac{1}{N}\operatorname{Tr}\left((\omega - J)^{-1}I\right)$$

よって両辺を J について平均すれば命題は示された。

(1) ポテンシャルの積分表示

ポテンシャル Φ(ω) を具体的に計算するために、以下の複素変数のガウス積分公式を利用する:

$$\int \left(\prod_{i} \frac{\mathrm{d}^{2} x_{i}}{\pi}\right) \, \exp\left(-\mathbf{x}^{*} A \mathbf{x}\right) = \frac{1}{\det A} \quad \left(\mathbf{x} \in \mathbb{C}^{N}\right)$$

すると、

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{N} \left[\ln \int \left(\prod_{i} \frac{\mathrm{d}^2 z_i}{\pi} \right) \exp \left(-\sum_{i,j,k}^N z_i^* (\omega^* \delta_{ij} - J_{ji}) (\omega \delta_{jk} - J_{jk}) z_k \right) \right]_J$$

しかし、この表示には一つ問題がある。 ω が J の固有値に一致した場合、 $(\omega^* - J^{\top})(\omega - J)$ が非可逆になり、ガウス積分が成り立たなくなる。そこでこの問題を回避するために、微小なパラメータ $\epsilon > 0$ を導入し、

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{N} \left[\ln \int \left(\prod_{i} \frac{\mathrm{d}^2 z_i}{\pi} \right) \exp \left(-\epsilon \sum_{i}^{N} z_i^* z_i - \sum_{i,j,k}^{N} z_i^* (\omega^* \delta_{ij} - J_{ji}) (\omega \delta_{jk} - J_{jk}) z_k \right) \right]_{\mathcal{J}}$$

として計算し、最後に $\epsilon \rightarrow 0$ の極限を取ると考えれば良い。この ϵ は最後に重要な役割を果たす。

もう一つ問題がある。対数関数のクエンチ平均 $[\ln F(J)]_J$ を計算することは一般に難しい。しかしこれは簡単に解決できる。 ln 内の積分値 F(J) は確率変数 J の実現値によって揺らぐが、実は $N \to \infty$ ではこの揺らぎを無視することができる(導出は付録 A 参照)ので、 log と平均を交換することができ、

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{N} \ln \int \left(\prod_{i} \frac{\mathrm{d}^2 z_i}{\pi}\right) \left[\exp \left(-\epsilon \sum_{i}^{N} z_i^* z_i - \sum_{i,j,k}^{N} z_i^* (\omega^* \delta_{ij} - J_{ji}) (\omega \delta_{jk} - J_{jk}) z_k \right) \right]_J$$
(11)

が得られる。この形であれば J に関するクエンチ平均が可能となる。

Green 関数 *G*(ω) を直接計算することはできないが、ポテンシャルには det が出現するため、上述のようにガウス 積分の公式を用いて積分計算に帰着することが可能となる。これがわざわざポテンシャルを導入した理由である。

(2) クエンチ平均の実行

exp(…)のクエンチ平均 [exp(…)]_J を計算し、その後 z に関する積分を計算すれば、Φ(ω) が得られる。ここから 先の計算は、Sommers らの論文では導出が省略されており、結果のみ示されている。しかし、そこに至るまでには、 様々な非自明な式変形や近似が行われている。以下では、[3] を参考に、その導出仮定をなるべく詳細に見ていく。 式 (11) の $[\exp(\dots)]_J$ 、つまり $\exp(\dots)$ の式 (3) に関する統計平均を計算する上で、 \exp 内が J の 2 次式になって いると都合が悪いため、これを J の 1 次式にしたい。このようなときには、いわゆる Hubbard Stratonovich 変換と 呼ばれる計算テクニックが便利である。つまり、補助変数 y_i を導入して、

$$\exp\left(-\mathbf{z}^*(\omega^* - J^{\top})(\omega - J)\mathbf{z}\right) = \iint \mathrm{d}^2 \mathbf{y} \exp\left(-\mathbf{y}^* \mathbf{y} - i\mathbf{y}^*(\omega - J)\mathbf{z} - i\mathbf{z}^*(\omega^* - J^{\top})\mathbf{y}\right)$$
(12)

と表す。なお、最終的な結果に影響を及ぼさないため、比例定数は無視しており、以降も同様とする。この式は、

$$\exp(-a^*a) = \int \mathrm{d}^2 y \exp(-y^* y - iy^* a - iya^*) \quad (a \in \mathbb{C})$$

を用いれば直ちに得られる。

Jの一次式に変換できたので、クエンチ平均を計算する。

$$\left[\exp\left(-\sum_{i,j,k}^{N} z_{i}^{*}(\omega^{*}\delta_{ij} - J_{ji})(\omega\delta_{jk} - J_{jk})z_{k}\right) \right]_{J}$$

$$eqs.(3) (12) \int d^{2}\mathbf{y} \int dJ \exp\left(-\sum_{i} y_{i}^{*}y_{i} - i\omega\sum_{i} y_{i}^{*}z_{i} - i\omega^{*}\sum_{i} y_{i}z_{i}^{*} + i\sum_{i,j} J_{ij}(y_{i}^{*}z_{j} + y_{i}z_{j}^{*}) - \frac{N}{2(1 - \tau^{2})}\sum_{ij}^{N} (J_{ij}^{2} - \tau J_{ij}J_{ji}) \right]$$

$$= \int d^{2}\mathbf{y} \exp\left(-\sum_{i} y_{i}^{*}y_{i} - i\omega\sum_{i} y_{i}^{*}z_{i} - i\omega^{*}\sum_{i} y_{i}z_{i}^{*}\right)$$

$$\times \prod_{i>j} \int dJ_{ij}dJ_{ji} \exp\left(-\frac{N}{2(1 - \tau^{2})}(J_{ij}^{2} + J_{ji}^{2}) + \frac{\tau N}{1 - \tau^{2}}J_{ij}J_{ji} + iJ_{ij}(y_{i}^{*}z_{j} + y_{i}z_{j}^{*}) + iJ_{ji}(y_{j}^{*}z_{i} + y_{j}z_{i}^{*})\right)$$

$$= \int d^{2}\mathbf{y} \exp\left(-\sum_{i} y_{i}^{*}y_{i} - i\omega\sum_{i} y_{i}^{*}z_{i} - i\omega^{*}\sum_{i} y_{i}z_{i}^{*} - \frac{1}{2N}\sum_{i,j} (y_{i}^{*}z_{j} + y_{i}z_{j}^{*})^{2} - \frac{\tau}{2N}\sum_{i,j} (y_{i}^{*}z_{j} + y_{i}z_{j}^{*})(y_{j}^{*}z_{i} + y_{j}z_{i}^{*})\right)$$

$$(13)$$

ここで最後の等式では、2 変数(*J_{ij}*, *J_{ji}*)に関するガウス積分を実行した。

よって、式 (11), (13) を合わせて整理すると、

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{N} \ln \int d^2 \mathbf{y} d^2 \mathbf{z} \exp \left(-\epsilon \sum_i z_i^* z_i - \sum_i y_i^* y_i - i\omega \sum_i y_i^* z_i - i\omega^* \sum_i y_i z_i^* - \frac{1}{N} \sum_i y_i^* y_i \sum_j z_j^* z_j - \frac{\tau}{2N} \left(\sum_i y_i^* z_i \right)^2 - \frac{\tau}{2N} \left(\sum_i y_i z_i^* \right)^2 - \frac{1}{2N} \sum_i (y_i^*)^2 \sum_j z_j^2 - \frac{1}{2N} \sum_i y_i^2 \sum_j (z_j^*)^2 - \frac{\tau}{N} \sum_i y_i^* z_i^* \sum_j y_j z_j \right)$$
(14)

非常に複雑な被積分関数となったが、実は式 (14) の第 3 行目の項は全て、 $N \to \infty$ で無視できる。その理由をしっかり示している論文は筆者の知る限りなく、筆者も十分理解していない。したがって、ここは非常に雑な議論になってしまうが容赦してほしい。各積分変数 y_i, z_i を角度 θ_i だけ回転させるような変数変換をしたものを新たな積分変数 とすると、式 (14) は、

$$\begin{split} \Phi(\omega) &= \frac{1}{N} \ln \int d^2 \mathbf{y} d^2 \mathbf{z} \; \exp\left(-\epsilon \sum_i z_i^* z_i - \sum_i y_i^* y_i - i\omega \sum_i y_i^* z_i - i\omega^* \sum_i y_i z_i^* \\ &- \frac{1}{N} \sum_i y_i^* y_i \sum_j z_j^* z_j - \frac{\tau}{2N} (\sum_i y_i^* z_i)^2 - \frac{\tau}{2N} (\sum_i y_i z_i^*)^2 \\ &- \frac{1}{2N} \sum_i e^{2i\theta_i} (y_i^*)^2 \sum_j e^{-2i\theta_j} z_j^2 - \frac{1}{2N} \sum_i e^{-2i\theta_i} y_i^2 \sum_j e^{2i\theta_j} (z_j^*)^2 - \frac{\tau}{N} \sum_i e^{2i\theta_i} y_i^* z_i^* \sum_j e^{-2i\theta_j} y_j z_j \right) \end{split}$$

となる。ここで 1,2 行目および積分測度は変化がないのに対し、3 行目には座標回転の効果が残っていることに注意 してほしい。各 θ_i が $[-\pi,\pi]$ で一様に分布しているとき、3 行目の各項はバラバラなベクトルの平均と見なすことが できるため、1,2 行目の量 O(N) に比べて、3 行目は o(N) となる。つまり、 $N \to \infty$ では 3 行目の項は無視して よい。 以上より、

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{N} \ln \int d^2 \mathbf{y} d^2 \mathbf{z} \exp \left(-\epsilon \sum_i z_i^* z_i - \sum_i y_i^* y_i - i\omega \sum_i y_i^* z_i - i\omega^* \sum_i y_i z_i^* - \frac{1}{N} \sum_i y_i^* y_i \sum_j z_j^* z_j - \frac{\tau}{2N} \left(\sum_i y_i^* z_i \right)^2 - \frac{\tau}{2N} \left(\sum_i y_i z_i^* \right)^2 \right)$$
(15)

を計算すればよい。

exp 内の各項が O(N) であることから、鞍点近似法を用いてこの積分を近似計算する。鞍点近似に備え、以下の order parameter を導入する:

$$P \equiv \frac{1}{N} \sum_{i} y_i^* y_i, \quad Q \equiv \frac{1}{N} \sum_{i} z_i^* z_i, \quad R \equiv \frac{1}{N} \sum_{i} y_i^* z_i, \quad R^* \equiv \frac{1}{N} \sum_{i} y_i z_i^*$$

これらの order parameter の定義を式 (15) に課すために、補助変数 $\hat{P}, \hat{Q}, \hat{R}, \hat{R^*}$ を導入し、以下の恒等式

$$1 \propto \int dP \,\delta\left(NP - \sum_{i} y_{i}^{*} y_{i}\right) \propto \iint dP d\hat{P} \exp\left(NiP^{*}P - iP^{*} \sum_{i} y_{i}^{*} y_{i}\right)$$

$$1 \propto \int dQ \,\delta\left(NQ - \sum_{i} z_{i}^{*} z_{i}\right) \propto \iint dQ d\hat{Q} \exp\left(Ni\hat{Q}Q - i\hat{Q} \sum_{i} z_{i}^{*} z_{i}\right)$$

$$1 \propto \int d^{2}R \,\delta\left(NR - \sum_{i} y_{i}^{*} z_{i}\right) \propto \iint d^{2}R d^{2}\hat{R} \exp\left(N(i\hat{R}^{*}R + i\hat{R}R^{*}) - i\hat{R}^{*} \sum_{i} y_{i}^{*} z_{i} - i\hat{R} \sum_{i} y_{i} z_{i}^{*}\right)$$
(16)

を用いる。ここで、1,2 式目は実デルタ関数のフーリエ変換表示を用いた一方で、3 式目のデルタ関数内は複素数であ るため、複素デルタ関数のフーリエ変換表示を用いた。

式 (16) を式 (15) の積分に挟み込むことで、

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{N} \ln \int d\Xi \exp \left\{ -N \left[P + \epsilon Q + i\omega R + i\omega^* R^* + PQ + \frac{\tau}{2} R^2 + \frac{\tau}{2} (R^*)^2 - i\hat{P}P - i\hat{Q}Q - i\hat{R}^* R - i\hat{R}R^* - \ln \int d^2y d^2z \exp\left(-i\hat{P}y^*y - i\hat{Q}z^*z - i\hat{R}^*y^*z - i\hat{R}yz^*\right) \right] \right\}$$
$$\equiv \frac{1}{N} \ln \int d\Xi \exp(-N\Psi(\Xi))$$
(17)

となる。ここで、 $\Xi \equiv \{P, Q, R, R^*, \hat{P}, \hat{Q}, \hat{R}, \hat{R}^*\}$ と表した。

 $\int d^2y d^2z \exp\left(-i\hat{P}y^*y - i\hat{Q}z^*z - i\hat{R}^*y^*z - i\hat{R}yz^*\right) \ddagger 2$ 次係数が虚数であるためフレネル積分となりそうだが、 鞍点条件 (19) を先取りすると、鞍点では $i\hat{P}, i\hat{Q}$ は実数となるため、この積分を形式的に 2 複素変数 (y,z) のガウス 積分とみなし、

$$\int \mathrm{d}^2 y \mathrm{d}^2 z \exp\left(-i\hat{P}y^*y - i\hat{Q}z^*z - i\hat{R}^*y^*z - i\hat{R}yz^*\right) \propto \frac{1}{i\hat{P}i\hat{Q} - i\hat{R}i\hat{R}^*}$$

となる [3]。よって、

 $\Psi(\Xi) = P + \epsilon Q + i\omega R + i\omega^* R^* + PQ + \frac{\tau}{2}R^2 + \frac{\tau}{2}(R^*)^2 - i\hat{P}P - i\hat{Q}Q - i\hat{R}^*R - i\hat{R}R^* + \ln(i\hat{P}i\hat{Q} - i\hat{R}i\hat{R}^*)$

となり、これを三の各変数で偏微分することにより、鞍点条件は、

$$i\hat{P}_{0} = 1 + Q, \ i\hat{Q}_{0} = \epsilon + P_{0}, \ i\hat{R}_{0} = i\omega^{*} + \tau R_{0}^{*}, \ i\hat{R}_{0}^{*} = i\omega + \tau R_{0}$$

$$P_{0} = \frac{i\hat{Q}_{0}}{i\hat{P}_{0}i\hat{Q}_{0} - i\hat{R}_{0}i\hat{R}_{0}^{*}}, \ Q_{0} = \frac{i\hat{P}_{0}}{i\hat{P}_{0}i\hat{Q}_{0} - i\hat{R}_{0}i\hat{R}_{0}^{*}}, \ R_{0} = -\frac{i\hat{R}_{0}}{i\hat{P}_{0}i\hat{Q}_{0} - i\hat{R}_{0}i\hat{R}_{0}^{*}}, \ R_{0}^{*} = -\frac{i\hat{R}_{0}}{i\hat{P}_{0}i\hat{Q}_{0} - i\hat{R}_{0}i\hat{R}_{0}^{*}}$$
(18)

となる。各 order parameter の下付き添え字 $_0$ によって鞍点であることを明記している。

 $Q_0/P_0 = (i\hat{P}_0)/(i\hat{Q}_0) = (1+Q_0)/(\epsilon+P_0)$ より $P_0 = \epsilon Q_0$ が直ちにわかる。 $i\hat{P}_0 = 1+Q_0$ を $Q_0 = i\hat{P}_0/(i\hat{P}_0i\hat{Q}_0 - i\hat{R}_0i\hat{R}_0^*)$ の分子にのみ代入することで、 $i\hat{P}_0i\hat{Q}_0 - i\hat{R}_0i\hat{R}_0^* = 1 + 1/Q_0$ 。これを R_0, R_0^* の式に代入することで、

 $i\hat{R}_0 = -R_0(1+1/Q_0), i\hat{R}_0^* = -R_0^*(1+1/Q_0)$ 。これらと $i\hat{R}_0 = i\omega^* + \tau R_0^*, i\hat{R}_0^* = i\omega + \tau R_0$ を用いれば、 $R_0, R_0^*, i\hat{R}_0, i\hat{R}_0^*$ を Q_0 で表すことができる。以上の結果をまとめる。ここで $1/Q_0$ が頻出するため、 $\sigma \equiv 1/Q_0$ と表す (Sommers 論文と同じ表記)。

$$i\hat{P}_{0} = 1 + \frac{1}{\sigma}, \ i\hat{Q}_{0} = \epsilon(1 + \frac{1}{\sigma}), \ i\hat{R}_{0} = i\frac{(1 + \sigma)\{(1 + \sigma)\omega^{*} - \tau\omega\}}{(1 + \sigma)^{2} - \tau^{2}}, \ i\hat{R}^{*} = i\frac{(1 + \sigma)\{(1 + \sigma)\omega - \tau\omega^{*}\}}{(1 + \sigma)^{2} - \tau^{2}}$$

$$P_{0} = \frac{\epsilon}{\sigma}, \ Q_{0} = \frac{1}{\sigma}, \ R_{0} = i\frac{\tau\omega - (1 + \sigma)\omega^{*}}{(1 + \sigma)^{2} - \tau^{2}}, \ R_{0}^{*} = i\frac{\tau\omega^{*} - (1 + \sigma)\omega}{(1 + \sigma)^{2} - \tau^{2}}$$
(19)

これらを $i\hat{P}_0i\hat{Q}_0 - i\hat{R}_0i\hat{R}_0^* = 1 + 1/Q_0 = 1 + \sigma$ に代入することで、 σ の値を定める鞍点方程式

$$\frac{\epsilon}{\sigma^2} = \frac{1}{1+\sigma} - \frac{x^2}{(\sigma+1+\tau)^2} - \frac{y^2}{(\sigma+1-\tau)^2}$$
(20)

が得られる。ここで $\omega = x + iy$ と表した。

一方、Green 関数 $G(\omega)$ は、

$$G(\omega) \stackrel{\text{eq.(10)}}{=} -\partial_{\omega} \Phi(\omega) \stackrel{\text{eq.(17)}}{=} -\partial_{\omega} \frac{1}{N} \ln \int d\Xi \exp(-N\Psi(\Xi))$$

$$\stackrel{\text{eq.(17)}}{=} -\frac{1}{N} \frac{\int d\Xi(-NiR) \exp(-N\Psi(\Xi))}{\int d\Xi \exp(-N\Psi(\Xi))} \approx iR_0$$

$$= \frac{(1+\sigma)\omega^* - \tau\omega}{(1+\sigma)^2 - \tau^2}$$
(21)

ここで、4 つ目の等式において積分の鞍点近似を用いた。なお素朴に考えると、先に鞍点近似によって $\Phi = -\Psi(\Xi_0)$ とし、それを ω で微分することで Green 関数 $G(\omega)$ を求めることになるが、この方法では、鞍点では $R_0, R_0^*, \hat{R}_0, \hat{R}_0^*$ 全てが ω に依存するため、 ω 微分の計算が大変面倒になってしまう。一方、上の方法では ω 微分するときには、 Ξ は 鞍点ではないため、order parameter は ω とは独立となり、微分計算が簡単になるというメリットがある。

以上より、鞍点方程式 (20) の解 σ を式 (21) に代入すれば、Green 関数 $G(\omega)$ を得られ、関係式 (4) により漸近固 有値密度分布 $\rho(\omega)$ が求められる。

5 漸近固有値密度分布

(1) 鞍点方程式 (20) の 2 通りの解

鞍点方程式 (20) の解を視覚的に理解するために、左辺と右辺をそれぞれ $f(\sigma)$, $g(\sigma)$ とおいてグラフを描画したものが、次の図である。



図1 左図: $g(\sigma)$ のy切片>0のとき(ω が楕円内)、左図: $g(\sigma)$ のy切片<0のとき(ω が楕円外) $\epsilon \rightarrow 0+$ では $f(\sigma)$ の曲線がx軸に張り付いていくため、2つの曲線の交点は、左図では $\sigma \rightarrow 0$ となる一方で、右 図では非ゼロの σ になる。

 $g(\sigma)$ のグラフは、y 切片 = 1 - $\frac{x^2}{(1+\tau)^2} - \frac{y^2}{(1+\tau)^2}$ の正負に応じて定性的に異なる形をとる。したがって、 $\epsilon \to 0+$ としたとき、

つまり複素平面上の楕円 (長径 $1 + \tau$, 短径 $1 - \tau$)の内部と外部で σ が異なるのである。前者の解は楕円内の $\omega = x + iy$ の位置によらず同じ解 $\sigma = 0$ を持つのに対し、後者の非ゼロ解は楕円外の $\omega = x + iy$ の位置に依存する ことに注意。

ここで以前予告したように *ϵ* が重要な役割を果たしていることを確認しておく。もし *ϵ* を導入していなければ、鞍 点方程式 (20)の左辺は 0 となる。しかし、ω が楕円内にあるとき、上のグラフの左図から分かるように、この方程式 は解を持たない。したがって、鞍点方程式が解を持つために *ϵ* が必須であったのだ。

(2) 漸近固有値密度分布の計算

まず ω が楕円内にあるときを考える。このときは ω によらず $\sigma \to 0+$ が解であったから、これを式 (21) に代入す れば、 $G(\omega) = \frac{\omega^* - \tau \omega}{1 - \tau^2}$ となるので、関係式 (4) により、 $\rho(\omega) = \frac{1}{\pi(1 - \tau^2)}$ が得られる。分母は楕円の面積に一致す るため、固有値は楕円内部に一様に分布していることが分かる。

次に ω が楕円外にあるときを考える。このとき、 σ が ω に依存することに注意して、 $\partial_{\omega^*}\frac{(1+\sigma)\omega^* - \tau\omega}{(1+\sigma)^2 - \tau^2}$ を計算 すると、計算過程は省くが、結果は0になる。つまり、楕円外には固有値は存在しないことが分かる。

以上の結果をまとめると、いわゆる elliptic law が得られる:

6 Recurrent neural network (RNN)のダイナミクスとの関連

以上が Sommers らの論文の解説である。最後に RNN との関連について簡単に触れておく。

今回扱ったランダム行列 J をリカレント結合重みとして持ち、各素子 $x_i(t)$ が以下の時間発展をする以下の RNN を考える:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x_i(t) = -x_i(t) + \sum_j^N J_{ij}\phi(x_j(t))$$

xの下付き添え字i, jは素子のインデックスを、tは時刻、Nは RNN の素子数をそれぞれ表している。また活性化 関数 ϕ はシグモイド関数とする。

自明な固定点 $\mathbf{x}(t) = 0$ の安定性は、Jacobian J - Iの固有値分布を調べれば良い。elliptic law より、 $\tau > 0$ で不 安定、 $\tau < 0$ で安定と分かる。実は、自明固定点が不安定化すると RNN のダイナミクスはカオスになることが Marti らによって示されている [6]。つまり、リカレント結合の対称性が強くなるほどカオスが強くなるのである。

また elliptic law より、*τ* が大きいほど、固有値分布は横に長い楕円となり、固有値の虚部の値が全体的に小さくなる。線形 RNN であれば、この結果より直ちに、低周波数成分が dominant である slow なダイナミクスになることが 分かるが、実は非線形 RNN でも同様の結果となることが Marti らによって示されている [6]。

付録 A レプリカ計算による log とクエンチ平均の交換可能性の証明

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{N} \left[\ln \int \left(\prod_{i} \frac{\mathrm{d}^2 z_i}{\pi} \right) \exp \left(-\epsilon \sum_{i}^{N} z_i^* z_i - \sum_{i,j,k}^{N} z_i^* (\omega^* \delta_{ij} - J_{ji}) (\omega \delta_{jk} - J_{jk}) z_k \right) \right]_J$$
$$\equiv \frac{1}{N} \left[\ln F(J) \right]_J \tag{22}$$

における log とクエンチ平均 [·]_J が交換可能であることを示すためには、 $N \to \infty$ では F(J) の揺らぎを無視できる こと、つまり、 $[F(J)^2]_J = [F(J)]_J^2$ を示せば十分である。

$$[F(J)^{2}]_{J} = \left[\int \left(\prod_{i} \frac{\mathrm{d}^{2} z_{i}^{(1)} \mathrm{d}^{2} z_{i}^{(2)}}{\pi^{2}} \right) \exp \left\{ -\epsilon \sum_{i}^{N} \left(z_{i}^{*(1)} z_{i}^{(1)} + z_{i}^{*(2)} z_{i}^{(2)} \right) - \sum_{i,j,k}^{N} z_{i}^{*(1)} (\omega^{*} \delta_{ij} - J_{ji}) (\omega \delta_{jk} - J_{jk}) z_{k}^{(1)} - \sum_{i,j,k}^{N} z_{i}^{*(2)} (\omega^{*} \delta_{ij} - J_{ji}) (\omega \delta_{jk} - J_{jk}) z_{k}^{(2)} \right]_{J}$$

であり、式 (13) と同様にしてクエンチ平均をとると、

$$\begin{split} [F(J)^{2}]_{J} &= \int \mathrm{d}\mathbf{y}^{(1)} \mathrm{d}\mathbf{y}^{(2)} \left(\prod_{i} \frac{\mathrm{d}^{2} z_{i}^{(1)} \mathrm{d}^{2} z_{i}^{(2)}}{\pi^{2}} \right) \exp \left\{ -\sum_{i}^{N} \left(y_{i}^{*(1)} y_{i}^{(1)} + y_{i}^{*(2)} y_{i}^{(2)} \right) - \epsilon \sum_{i}^{N} \left(z_{i}^{*(1)} z_{i}^{(1)} + z_{i}^{*(2)} z_{i}^{(2)} \right) \right. \\ &\left. -i\omega \sum_{i} \left(y_{i}^{*(1)} z_{i}^{(1)} + y_{i}^{*(2)} z_{i}^{(2)} \right) - i\omega^{*} \sum_{i} \left(y_{i}^{(1)} z_{i}^{*(1)} + y_{i} z_{i}^{*(2)} \right) \right. \\ &\left. -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} \left(y_{i}^{*(1)} z_{j}^{(1)} + y_{i}^{(1)} z_{j}^{*(1)} + y_{i}^{*(2)} z_{j}^{(2)} + y_{i}^{(2)} z_{j}^{*(2)} \right) \left(y_{j}^{*(1)} z_{i}^{(1)} + y_{j}^{(1)} z_{i}^{*(1)} + y_{j}^{*(2)} z_{i}^{(2)} + y_{j}^{(2)} z_{i}^{*(2)} \right) \right\} \end{split}$$

となる。ここで y, z の上付き括弧添え字 (1), (2) をレプリカ番号と呼ぶことにする。

上式の3行目と4行目では、異なるレプリカ番号同士のcross term が出現することが分かる。しかし、 $N \to \infty$ ではこの term は他の term に比べて無視することができる。このことは、式 (14) での議論と同様に、 $y_i^{(1)}, z_i^{(1)}$ を角度 $\theta_i^{(2)}, z_i^{(2)}$ を角度 $\theta_i^{(2)}$ だけ、それぞれ回転させるような変数変換を考えることで示すことができる。cross term には $e^{i(\theta_i^{(1)}-\theta_i^{(2)})}$ のような係数が残るため、 $\theta_i^{(1)} と \theta_i^{(2)}$ がそれぞれ一様に分布する場合には、和が相殺されるのである。したがって、上式の exp の肩には同じレプリカ番号同士の変数の項のみが残るため、結局、 $[F(J)^2]_J = [F(J)]_J^2$ となり、log とクエンチ平均の交換可能性が示される。

なお Sommers の論文には log とクエンチ平均の交換可能性を、「レプリカ法を用いて示すことができる」とだけ書いてある。これは、 $n \in \mathbb{N}$ について、 $[F(J)^n]$ を求めた後、 $n \in \mathbb{R}$ とみなして(解析接続)、公式

$$[\ln F(J)]_J = \lim_{n \to +0} \frac{1}{n} \ln [F(J)^n]_J$$
(23)

を適用することにより $[\ln F(J)]_J$ を求めるという、一般的なレプリカ法の処方箋を指しているものと思われる。上述 と同様の議論により、 $[F(J)^n]_J = [F(J)]_J^n$ となり、よって

$$[\ln F(J)]_J = \lim_{n \to +0} \frac{1}{n} \ln[F(J)]_J^n = \ln[F(J)]_J$$
(24)

が得られる。したがって、上述の議論は、レプリカ法と実質的には同じことをしている。

付録 B エルミート行列の固有値分布(Wiegner の半円則)の Cavity 法による 導出

各非対角成分が $J_{ij} = J_{ji} \sim \mathcal{N}(0, 1/N)$, 対角成分が $0(O(1/\operatorname{sqrt} N)$ なら何でもいい) であるサイズ $N \times N$ のラン ダム行列 J の固有値分布を求める。このようなエルミート行列の固有値分布を求める手法は複数あるが、ここでは Cavity 法を用いる。

エルミート行列の固有値は実数であるから、固有値分布 $\rho(\omega)$ ($\omega \in \mathbb{R}$) を求めれば良い。Green 関数 $G(\omega) = \frac{1}{N} \left[\operatorname{Tr}(\omega - J)^{-1} \right]_J \geq \rho(\omega)$ との間には、以下の関係が知られている(Stieltjes 反転公式):

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \to 0^+} \Im G(\omega - i\epsilon)$$
⁽²⁵⁾

Proof. J の固有値を λ_i とすると、

$$\begin{split} \rho(\omega) &= \left[\frac{1}{N}\sum_{i}^{N}\delta(\omega-\lambda_{i})\right]_{J} = \frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to0^{+}}\Im\left[\frac{1}{N}\sum_{i}^{N}\frac{1}{(\omega-i\epsilon)-\lambda_{i}}\right]_{J} \\ &= \frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to0^{+}}\Im G(\omega-i\epsilon) \end{split}$$

が得られる。ここで 2 つ目の等式では、デルタ関数の表現 $\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \to 0^+} \Im \frac{1}{x - i\epsilon}$ を用いた。(なお、この表現は $x \in \mathbb{R}$ でしか成り立たないため、cavity 法はエルミート行列でないと利用できないことに注意)

よって Green 関数 G(z) が分かれば良い。ランダム行列の permutation symmetry より、 $G(z) = \left[\left((z - J)^{-1} \right)_{11} \right]_J$ であることに注意し、ブロック行列の逆行列公式を用いると、

$$((z-J)^{-1})_{11} = \frac{1}{z-J_{11}-J_{1.}(z-J_{(N-1)})^{-1}J_{.1}} \equiv \frac{1}{A(z;J)}$$

ここで、Jを1行1列で4分割したときの (1,2), (2,1), (2,2) 成分をそれぞれ、 $J_{1.}, J_{.1}, J_{(N-1)}$ と表した。自己平均性より、 $\left[\frac{1}{A(z;J)}\right]_J = \frac{1}{[A(z;J)]_J}$ となる。 $[A(z;J)]_J$ を求めると、

$$[A(z;J)]_J = z - \sum_{i,j=2}^N \left[J_{1i} J_{j1} \left(z - J_{(N-1)} \right)_{ij}^{-1} \right]_J = z - \sum_{i,j=2}^N [J_{1i} J_{j1}]_J \left[\left(z - J_{(N-1)} \right)_{ij}^{-1} \right]_J$$
$$= z - \frac{1}{N} \sum_{i=2}^N \left[\left(z - J_{(N-1)} \right)_{ii}^{-1} \right]_J \overset{N \gg 1}{\approx} = z - G(z)$$

となる。ここで、2 つ目の等式では、 $J_{1\cdot}, J_{\cdot 1}$ と $J_{(N-1)}$ の独立性を、3 つ目の等式では J のエルミート性を用いている。

よって、G(z) = 1/(z - G(z))となり、これをG(z)について解くと、

$$G(z) = \frac{z \pm \sqrt{z^2 - 4}}{2}$$

となるので、この結果を Stieltjes 反転公式 (25) に代入すれば、

$$\rho(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi}\sqrt{4-\omega^2} & (|\omega|<2)\\ 0 & (|\omega|\geq 2) \end{cases}$$

が得られ、無事に Wiegner の半円則が導かれた。

上でも述べたように、Cavity 法は非エルミート行列に直接適用することはできないが、非エルミート行列を、その 2 倍の大きさのエルミート行列に組み込むことで、Cavity 法を利用することができる。特に、ランダム行列が Tree like であるような場合(各成分が heavy tail 分布に従う場合など)に便利な手法である [7]。

参考文献

- H. J. Sommers, A. Crisanti, H. Sompolinsky, and Y. Stein. Spectrum of large random asymmetric matrices. *Phys. Rev. Lett.*, 60:1895–1898, May 1988.
- [2] Kanaka Rajan and L. F. Abbott. Eigenvalue spectra of random matrices for neural networks. *Phys. Rev. Lett.*, 97:188104, Nov 2006.
- [3] Lyle Poley, Tobias Galla, and Joseph W. Baron. Eigenvalue spectra of finely structured random matrices, 2023.
- [4] Joshua Feinberg and A. Zee. Non-hermitian random matrix theory: Method of hermitian reduction. Nuclear Physics B, 504(3):579–608, 1997.
- [5] Yashar Ahmadian, Francesco Fumarola, and Kenneth D. Miller. Properties of networks with partially structured and partially random connectivity. *Phys. Rev. E*, 91:012820, Jan 2015.
- [6] Daniel Martí, Nicolas Brunel, and Srdjan Ostojic. Correlations between synapses in pairs of neurons slow down dynamics in randomly connected neural networks. *Phys. Rev. E*, 97:062314, Jun 2018.
- [7] Asem Wardak and Pulin Gong. Extended anderson criticality in heavy-tailed neural networks. *Phys. Rev. Lett.*, 129:048103, Jul 2022.