



MATRIZES ALEATÓRIAS E SIMULAÇÃO DE GASES DE COULOMB

João V. A. Pimenta

Instituto de Física de São Carlos - IFSC
Universidade de São Paulo - USP

Orientador: Prof. Dr. Guilherme L. F. Silva
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC
Universidade de São Paulo - USP

Defesa de TCC para obtenção de título de Bacharel em Física Computacional,
Junho 2024



SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO À MATRIZES ALEATÓRIAS

- 1.1 *Porquê RMT*
- 1.2 *Medida Invariante*
- 1.3 *Gases de Coulomb*
- 1.4 *Medidas de Equilíbrio*

2. SIMULAÇÃO DE PARTÍCULAS

- 2.1 *Dinâmica de Langevin Monte Carlo*
- 2.2 *Algoritmo e Implementação*

3. RESULTADOS

- 3.1 *Gases na Reta*
- 3.2 *Gases no Plano*

4. CONCLUSÃO

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO À MATRIZES ALEATÓRIAS

1.1 *Porquê RMT*

1.2 *Medida Invariante*

1.3 *Gases de Coulomb*

1.4 *Medidas de Equilíbrio*

2. SIMULAÇÃO DE PARTÍCULAS

2.1 *Dinâmica de Langevin Monte Carlo*

2.2 *Algoritmo e Implementação*

3. RESULTADOS

3.1 *Gases na Reta*

3.2 *Gases no Plano*

4. CONCLUSÃO

MOTIVAÇÃO HISTÓRICA

EUGENE WIGNER - *On the Wigner Surmise* (1956)

“Perhaps I am now too courageous when I try to guess the distribution of the distances between successive levels (of energies of heavy nuclei). Theoretically, the situation is quite simple if one attacks the problem in a simpleminded fashion. The question is simply what are the distances of the characteristic values of a symmetric matrix with random coefficients.”



CONJECTURA

CONJECTURA DE WIGNER

*The assumption is that the Hamiltonian which governs the behavior of a **complicated** system is a random symmetric matrix with no particular properties except for its symmetric nature.*

- Modelos estatísticos de núcleos atômicos pesados;
- Zeros da função zeta de Riemann;
- Sistemas Financeiros;



CONJECTURA

CONJECTURA DE WIGNER

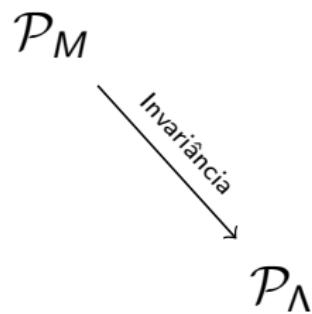
*The assumption is that the Hamiltonian which governs the behavior of a **complicated** system is a random symmetric matrix with no particular properties except for its symmetric nature.*

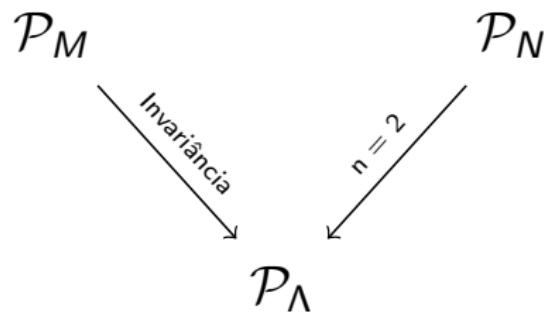
- Modelos estatísticos de núcleos atômicos pesados;
- Zeros da função zeta de Riemann;
- Sistemas Financeiros;

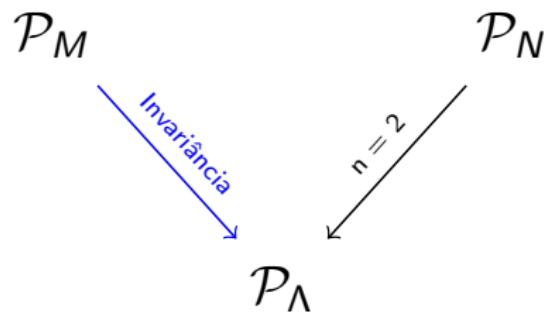


$$\mathcal{P}_\Lambda$$









$$\begin{aligned}\mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J\left(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\}\right)d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\ &= \exp\left\{-N\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\}J\left(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\}\right)d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\ &= \exp\left\{-N\sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\}\prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J\left(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\}\right)d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\ &= \exp\left\{-N\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\}J\left(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\}\right)d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\ &= \exp\left\{-N\sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\}\prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.\end{aligned}$$

 $\hat{M} \mapsto \hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1}$

Considere o mapa $\hat{M} \mapsto \hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1}$ com \hat{U} invertível e $\hat{\Lambda}$ diagonal de autovalores.



$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\}J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\}\prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.
 \end{aligned}$$

$\hat{M} \mapsto \hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1}$

Considere o mapa $\hat{M} \mapsto \hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1}$ com \hat{U} invertível e $\hat{\Lambda}$ diagonal de autovalores.



$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\}J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\}\prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.
 \end{aligned}$$

ENSEMBLES INVARIANTES

Consideraremos os ensembles denominados invariantes (por rotação)

- $\mathcal{P}(\hat{M}) = \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1}) = \mathcal{P}(\hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{\Lambda}) = \mathcal{P}(\hat{\Lambda});$
- $J(\hat{M}) = J(\hat{R}\hat{\Lambda}\hat{R}^{-1}) \implies J(\hat{M}) = J(\hat{\Lambda});$
- Lema de Weyl: Medida pode ser expressa totalmente por $\phi\left(\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right).$



$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\}J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\}\prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.
 \end{aligned}$$

ENSEMBLES INVARIANTES

Consideraremos os ensembles denominados invariantes (por rotação)

- $\mathcal{P}(\hat{M}) = \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1}) = \mathcal{P}(\hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{\Lambda}) = \mathcal{P}(\hat{\Lambda});$
- $J(\hat{M}) = J(\hat{R}\hat{\Lambda}\hat{R}^{-1}) \implies J(\hat{M}) = J(\hat{\Lambda});$
- Lema de Weyl: Medida pode ser expressa totalmente por $\phi(\text{Tr}(V(\hat{\Lambda})))$.



$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\}J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\}\prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.
 \end{aligned}$$

JACOBIANO

O jacobiano pode ser expresso por uma determinada matriz de Vandermonde tal que

$$J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\}) = \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta$$

onde λ_i são os autovalores de \hat{M} e $\beta \in \{1, 2, 4\}$ é referente à entradas reais, complexas ou quaterniônicas.



$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N \operatorname{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\} J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\})d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N \sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\} \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.
 \end{aligned}$$

JACOBIANO

O jacobiano pode ser expresso por uma determinada matriz de Vandermonde tal que

$$J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\}) = \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta$$

onde λ_i são os autovalores de \hat{M} e $\beta \in \{1, 2, 4\}$ é referente à entradas reais, complexas ou quaterniônicas.



$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} &= \mathcal{P}(\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1})J\left(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{U}\}\right)d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\text{Tr}\left(V(\hat{\Lambda})\right)\right\}J\left(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\}\right)d\hat{\Lambda}d\hat{U}, \\
 &= \exp\left\{-N\sum_{i=1}^N V(\lambda_i)\right\}\prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{U}.
 \end{aligned}$$

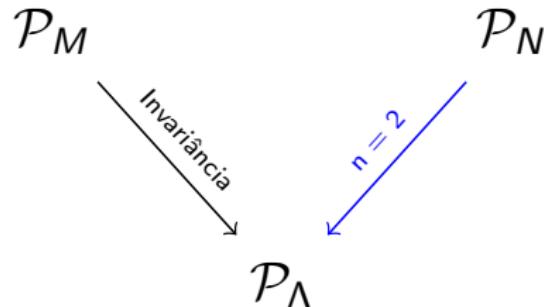
MEDIDA INVARIANTE

Para matrizes dos ensembles invariantes - vale a distribuição de probabilidade

$$\mathcal{P}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{Z_{N,\beta}} e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)},$$

$$\mathcal{H}_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{\beta N} \sum_{i=1}^N V(\lambda_i) + \frac{1}{2N^2} \sum_{i \neq j}^N \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|}$$





O Gás de Coulomb (\mathcal{P}_N) é a medida de probabilidade de Boltzmann-Gibbs dada em $(\mathbb{R}^d)^N$ por

$$\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}}, \quad \mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{2N^2} \sum_{i \neq j} g(x_i - x_j).$$



O Gás de Coulomb (\mathcal{P}_N) é a medida de probabilidade de Boltzmann-Gibbs dada em $(\mathbb{R}^d)^N$ por

$$\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}}, \quad \mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{2N^2} \sum_{i \neq j} g(x_i - x_j).$$

- N partículas de posições $x_i \in \mathbb{R}^n$ restritas à \mathbb{S} de dimensão d ;
- Sujeitas ao potencial externo $V: \mathbb{S} \mapsto \mathbb{R}$;
- Interagindo por $g: \mathbb{S} \mapsto (-\infty, \infty]$ núcleo de interação coulombiana;
- V, g tal que $Z_{N,\beta}$ é finito para todo N .



O Gás de Coulomb (\mathcal{P}_N) é a medida de probabilidade de Boltzmann-Gibbs dada em $(\mathbb{R}^d)^N$ por

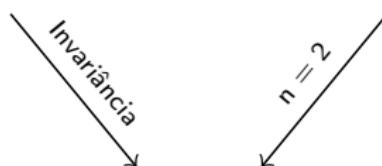
$$\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}}, \quad \mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{2N^2} \sum_{i \neq j} g(x_i - x_j).$$

Onde temos que

$$g(x_i - x_j) = \begin{cases} \log \frac{1}{|x_i - x_j|} & \text{se } n = 2 \\ \frac{1}{(n-2)|x_i - x_j|^{n-2}} & \text{se } n \neq 2 \end{cases}$$



$$\mathcal{P}_M \quad \mathcal{P}_N$$



$$\mathcal{P}_\Lambda = \frac{e^{-\beta N^2} \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})}{Z_{N,\beta}}$$



$$\begin{array}{ccc} \mathcal{P}_M & & \mathcal{P}_N \\ \searrow^{\text{Invariância}} & & \swarrow^{\approx n} \\ \mathcal{P}_{\Lambda} = \frac{e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})}}{Z_{N,\beta}} \end{array}$$

Qual a distribuição dessas partículas no equilíbrio?



EQUILÍBRIO

Um argumento termodinâmico nos leva à minimizar a energia livre

$$E_{N,\beta}^V \propto -\log Z_{N,\beta}.$$

Deve satisfazer

$$\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{1=j \neq i}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \text{ para } i = 1, \dots, N.$$



EQUILÍBRIO

Um argumento termodinâmico nos leva à minimizar a energia livre

$$E_{N,\beta}^V \propto -\log Z_{N,\beta}.$$

Deve satisfazer

$$\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{1=j \neq i}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \text{ para } i = 1, \dots, N.$$



EQUILÍBRIO

Um argumento termodinâmico nos leva à minimizar a energia livre

$$E_{N,\beta}^V \propto -\log Z_{N,\beta}.$$

Deve satisfazer

$$\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{1=j \neq i}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \text{ para } i = 1, \dots, N.$$

Ou ainda, definindo $S_N^{\mu\nu}(z) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{z - \lambda_i}$ transformada de Cauchy/Stieltjes

$$V'(z) S_N^{\mu\nu}(z) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{V'(z) - V'(\lambda_i)}{z - \lambda_i} = S_N^{\mu\nu}(z)^2 + \frac{S_N'^{\mu\nu}(z)}{N}.$$



EQUILÍBRIO

Um argumento termodinâmico nos leva à minimizar a energia livre

$$E_{N,\beta}^V \propto -\log Z_{N,\beta}.$$

Deve satisfazer

$$\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{1=j \neq i}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \text{ para } i = 1, \dots, N.$$

Assintoticamente em N , tal que $S^{\mu\nu}(z) = \int \frac{\mu_V^*(\lambda)}{z - \lambda} d\lambda$,

$$V'(z)S^{\mu\nu}(z) - \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda = S^{\mu\nu}(z)^2.$$



EQUILÍBRIO

Um argumento termodinâmico nos leva à minimizar a energia livre

$$E_{N,\beta}^V \propto -\log Z_{N,\beta}.$$

Deve satisfazer

$$\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{1=j \neq i}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \text{ para } i = 1, \dots, N.$$

Que, por ser equação de segundo grau, definido $\Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda$, resolve-se

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm \sqrt{V'^2 - 2\Pi}.$$



EQUILÍBRIO

Sabemos por Sokhotski-Plemelj que

$$\mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi i} (S_+^{\mu\nu} - S_-^{\mu\nu}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \operatorname{Im} S_+^{\mu\nu}(x + i\epsilon).$$

onde sabemos

$$S^{\mu\nu}(z) = \int \frac{\mu_V^*(\lambda)}{z - \lambda} d\lambda = V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi(z)},$$

com

$$\Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda.$$



EQUILÍBRIO

Sabemos por Sokhotski-Plemelj que

$$\mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi i} (S_+^{\mu\nu} - S_-^{\mu\nu}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \operatorname{Im} S_+^{\mu\nu}(x + i\epsilon).$$

onde sabemos

$$S^{\mu\nu}(z) = \int \frac{\mu_V^*(\lambda)}{z - \lambda} d\lambda = V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi(z)},$$

com

$$\Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda.$$



POTENCIAL QUADRÁTICO

SEMI-CÍRCULO DE WIGNER

Se $V(x) = \frac{x^2}{2}$,

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-\sqrt{2}, \sqrt{2}], \quad \text{e} \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}$$

é medida de equilíbrio.



POTENCIAL QUADRÁTICO - EQUILÍBRIO

Temos a relação

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm \sqrt{V'^2 - 2\Pi} = z \pm \sqrt{z^2 - 2\Pi},$$

com

$$\Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda = \int \frac{z - \lambda}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda = 1.$$

Logo,

$$\mu_V^* = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} S^{\mu_V^*}(x + i\epsilon) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}.$$



POTENCIAL QUADRÁTICO - EQUILÍBRIO

Temos a relação

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm \sqrt{V'^2 - 2\Pi} = z \pm \sqrt{z^2 - 2\Pi},$$

com

$$\Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda = \int \frac{z - \lambda}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda = 1.$$

Logo,

$$\mu_V^* = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} S^{\mu_V^*}(x + i\epsilon) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}.$$



POTENCIAL QUADRÁTICO - EQUILÍBRIO

Temos a relação

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm \sqrt{V'^2 - 2\Pi} = z \pm \sqrt{z^2 - 2\Pi},$$

com

$$\Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda = \int \frac{z - \lambda}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda = 1.$$

Logo,

$$\mu_V^* = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} S^{\mu_V^*}(x + i\epsilon) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}.$$



POTENCIAL QUÁRTICO

POTENCIAL QUÁRTICO

Se $V(x) = \frac{x^4}{4} + t\frac{x^2}{2}$:

- $t \geq -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} (x^2 + c_t^2) \sqrt{b_t^2 - x^2},$$

$$\text{com } c_t^2 := \frac{1}{2}b_t^2 + t := \frac{1}{3}(2t + \sqrt{t^2 + 12}).$$

- $t < -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, -a_t] \cup [a_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} |x| \sqrt{(x^2 - a_t^2)(b_t^2 - x^2)},$$

$$\text{com } a_t := \sqrt{-2-t}, b_t := \sqrt{2-t}.$$



POTENCIAL QUÁRTICO

POTENCIAL QUÁRTICO

Se $V(x) = \frac{x^4}{4} + t\frac{x^2}{2}$:

- $t \geq -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} (x^2 + c_t^2) \sqrt{b_t^2 - x^2},$$

$$\text{com } c_t^2 := \frac{1}{2}b_t^2 + t := \frac{1}{3}(2t + \sqrt{t^2 + 12}).$$

- $t < -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, -a_t] \cup [a_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} |x| \sqrt{(x^2 - a_t^2)(b_t^2 - x^2)},$$

$$\text{com } a_t := \sqrt{-2 - t}, \quad b_t := \sqrt{2 - t}.$$



POTENCIAL QUÁRTICO - EQUILÍBRIO

Assumindo intervalo único, partimos de

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm \sqrt{V'^2 - 2\pi}.$$

com

$$\mu_V^* = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} S^{\mu_V^*}(x + i\epsilon).$$

Reescrevemos

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm Q(z) \sqrt{(z + b_t)(z - b_t)}.$$

e consequentemente

$$\mu_V^*(x) = \frac{Q(x) \sqrt{(x + b_t)(x - b_t)}}{2\pi}, \quad x \in (-b_t, b_t).$$



POTENCIAL QUÁRTICO - EQUILÍBRIO

Assumindo intervalo único, partimos de

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm \sqrt{V'^2 - 2\pi}.$$

com

$$\mu_V^* = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} S^{\mu_V^*}(x + i\epsilon).$$

Reescrevemos

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm Q(z) \sqrt{(z + b_t)(z - b_t)}.$$

e consequentemente

$$\mu_V^*(x) = \frac{Q(x) \sqrt{(x + b_t)(x - b_t)}}{2\pi}, \quad x \in (-b_t, b_t).$$



POTENCIAL QUÁRTICO - EQUILÍBRIO

Definiremos $Q(z)$ a partir do balanceamento de

$$S^{\mu\nu} = V' \pm Q(z) \sqrt{z^2 - b_t^2}.$$



POTENCIAL QUÁRTICO - EQUILÍBRIO

Definiremos $Q(z)$ a partir do balanceamento de

$$S^{\mu\nu} = V' \pm Q(z) \sqrt{z^2 - b_t^2}.$$

$$\frac{1}{z} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right) = (tz + z^3) \pm (c_t^2 + d_t z + z^2) \sqrt{z^2 - b_t^2}$$

NOTE

$$V'(z) = (tz + z^3)$$

$$Q(z) = c_t^2 + d_t z + z^2$$

$$S^{\mu\nu}(\infty) = \frac{1}{z} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right)$$

POTENCIAL QUÁRTICO - EQUILÍBRIO

Definiremos $Q(z)$ a partir do balanceamento de

$$S^{\mu\nu} = V' \pm Q(z) \sqrt{z^2 - b_t^2}.$$

$$\frac{1}{z} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right) = \frac{1}{z} \left(\frac{b_t^4}{8} + \frac{b_t^2 c_t^2}{2} \right) + z \left(t - c_t^2 + \frac{b_t^2}{2} \right) - z^2(d_t) + \frac{b_t^2 d_t}{2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right)$$



POTENCIAL QUÁRTICO - EQUILÍBRIO

Definiremos $Q(z)$ a partir do balanceamento de

$$S^{\mu_V^*} = V' \pm Q(z) \sqrt{z^2 - b_t^2}.$$

$$\frac{1}{z} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right) = \frac{1}{z} \left(\frac{b_t^4}{8} + \frac{b_t^2 c_t^2}{2} \right) + z \left(t - c_t^2 + \frac{b_t^2}{2} \right) - z^2(d_t) + \frac{b_t^2 d_t}{2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right)$$

Do sistema de equações,

$$c_t^2 = \frac{1}{2} b_t^2 + t = \frac{1}{3} \left(2t + \sqrt{t^2 + 12} \right) \quad \text{e} \quad d_t = 0$$

e

$$\mu_V^*(x) = \frac{(c_t^2 + x^2) \sqrt{b_t^2 - x^2}}{2\pi}, \quad x \in (-b_t, b_t)$$



SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO À MATRIZES ALEATÓRIAS

- 1.1 *Porquê RMT*
- 1.2 *Medida Invariante*
- 1.3 *Gases de Coulomb*
- 1.4 *Medidas de Equilíbrio*

2. SIMULAÇÃO DE PARTÍCULAS

- 2.1 *Dinâmica de Langevin Monte Carlo*
- 2.2 *Algoritmo e Implementação*

3. RESULTADOS

- 3.1 *Gases na Reta*
- 3.2 *Gases no Plano*

4. CONCLUSÃO

SIMULAÇÕES

- Construir sistema dinâmico que amostre de μ_V^* do ensemble canônico - um termostato;
- Processos ergódicos determinísticos são difíceis de serem construídos, desenvolve-se teoria de equações diferenciais estocásticas;
- Dinâmicas podem não ser diretamente/analiticamente integráveis, recorre-se a processos numéricos;



SIMULAÇÕES

- Construir sistema dinâmico que amostre de μ_V^* do ensemble canônico - um termostato;
- Processos ergódicos determinísticos são difíceis de serem construídos, desenvolve-se teoria de equações diferenciais estocásticas;
- Dinâmicas podem não ser diretamente/analiticamente integráveis, recorre-se a processos numéricos;



SIMULAÇÕES

- Construir sistema dinâmico que amostre de μ_V^* do ensemble canônico - um termostato;
- Processos ergódicos determinísticos são difíceis de serem construídos, desenvolve-se teoria de equações diferenciais estocásticas;
- Dinâmicas podem não ser diretamente/analiticamente integráveis, recorre-se a processos numéricos;



LANGEVIN MONTE CARLO

Aproveitaremos do fato que

$$\mathcal{P}(q) = e^{-\beta_N E_N(q)} / Z_N, \quad E_N(q) = \mathcal{H}_N(q)$$

é medida de probabilidade invariante do processo de difusão de Markov solução da dinâmica de Langevin **amortecida**.



LANGEVIN MONTE CARLO

Aproveitaremos do fato que, sendo $U_N: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ energia cinética generalizada tal que $e^{-\beta_N U_N}$ seja Lebesgue integrável,

$$\mathcal{P}(q, p) = e^{-\beta_N E_N(q, p)} / Z'_N, \quad E_N(q, p) = \mathcal{H}_N(q) + U_N(p)$$

é medida de probabilidade invariante do processo de difusão de Markov solução da dinâmica de Langevin **cinética**.



LANGEVIN MONTE CARLO

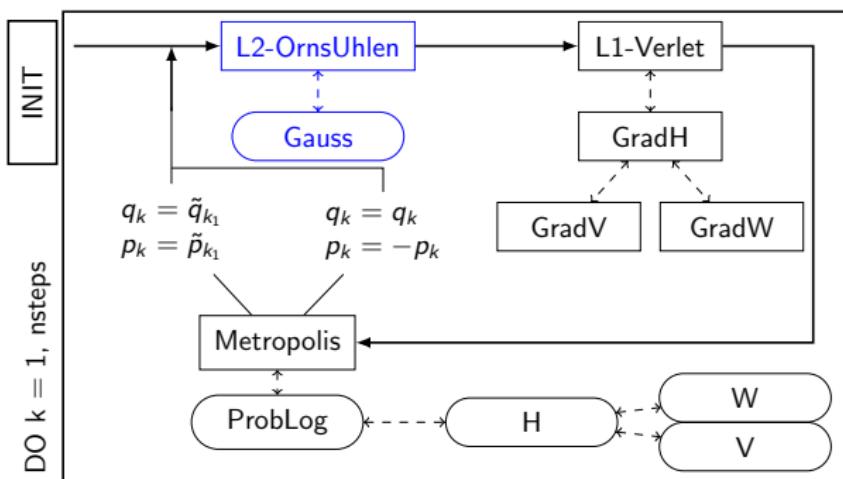
Kinetic Langevin

Sejam (q, p) , com $q, p \in \mathbb{R}^d$ posições e momentos generalizados associados as N partículas. $(q_t, p_t)_{t \geq 0}$ é processo de difusão solução da equação diferencial estocástica

$$\begin{cases} dq_t = \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt, \\ dp_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dW_t. \end{cases}$$

onde $(W_t)_{t > 0}$ é processo de Wiener, $\gamma_N > 0$ é constante de atrito e α_N é escala temporal e β_N é temperatura inversa.

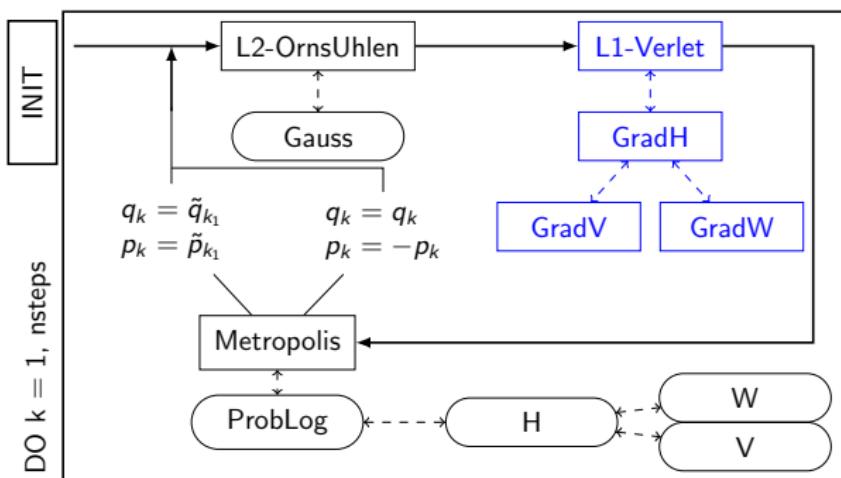




Dinâmica de Flutuação-Dissipação: Processo de Ornstein-Uhlenbeck, tem solução explícita dada em função de p_k por

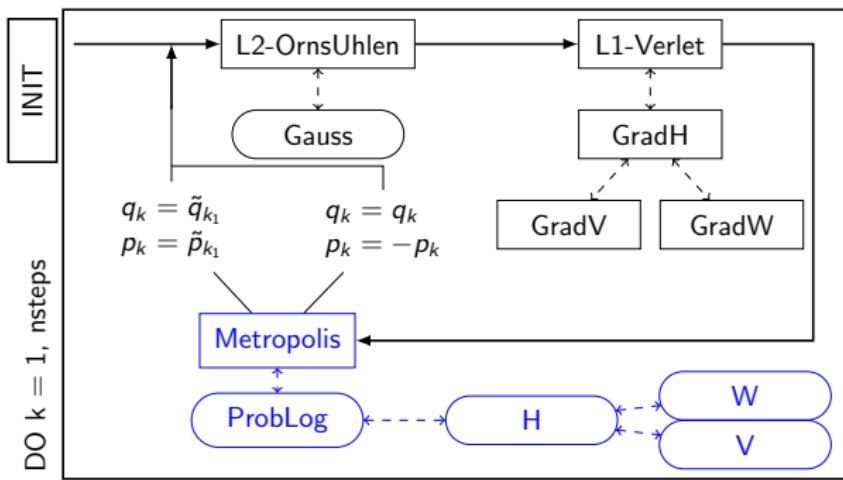
$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}.$$





Dinâmica Hamiltoniana, podemos utilizar do integrador simplético dado pelo esquema de Verlet, aplicado sobre (q_k, \tilde{p}_k) como

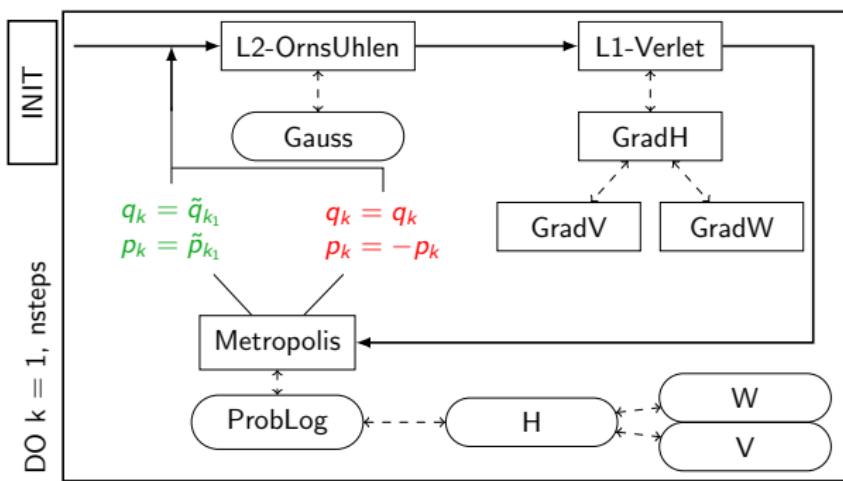
$$\begin{cases} \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} = \tilde{p}_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(q_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}; \end{cases}$$



Queremos estabilizar o processo (evitar singularidades) e otimizar a convergência. Introduzimos um passo de Metropolis-Hastings que define P_k

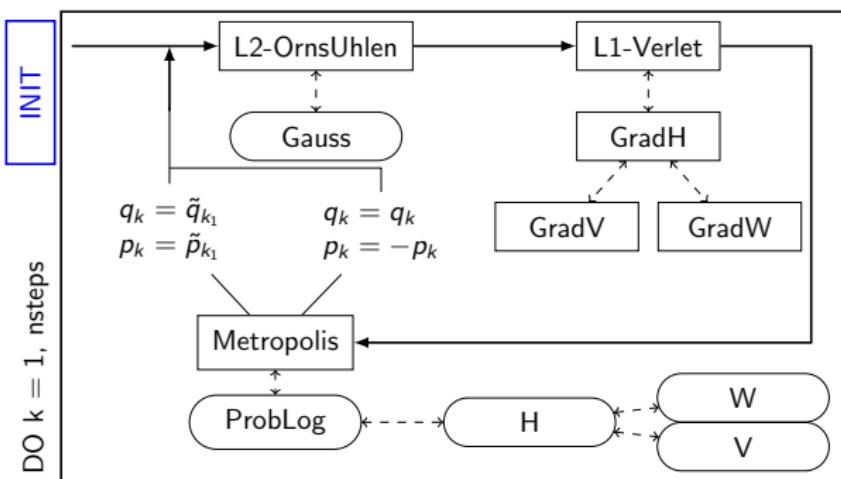
$$P_k = 1 \wedge \exp\{-\beta_N(E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) - E_N(q_k, \tilde{p}_k))\};$$





Atualizamos o estado do sistema. Defina, a partir de P_k ,

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) \text{ c/ prob. } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) \text{ c/ prob. } 1 - P_k; \end{cases}$$



- Ajuste de Variáveis: $\Delta t, \alpha_N, \gamma_N$;
- Termalização;
- Independência.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO À MATRIZES ALEATÓRIAS

- 1.1 *Porquê RMT*
- 1.2 *Medida Invariante*
- 1.3 *Gases de Coulomb*
- 1.4 *Medidas de Equilíbrio*

2. SIMULAÇÃO DE PARTÍCULAS

- 2.1 *Dinâmica de Langevin Monte Carlo*
- 2.2 *Algoritmo e Implementação*

3. RESULTADOS

- 3.1 *Gases na Reta*
- 3.2 *Gases no Plano*

4. CONCLUSÃO

POTENCIAL QUADRÁTICO

Equivale a

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^2}{2}; \quad g(x) = \log|x|; \quad \beta = 1, 2, 4.$$

com medida dada por

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-\sqrt{2}, \sqrt{2}], \quad \text{e} \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}.$$



POTENCIAL QUADRÁTICO

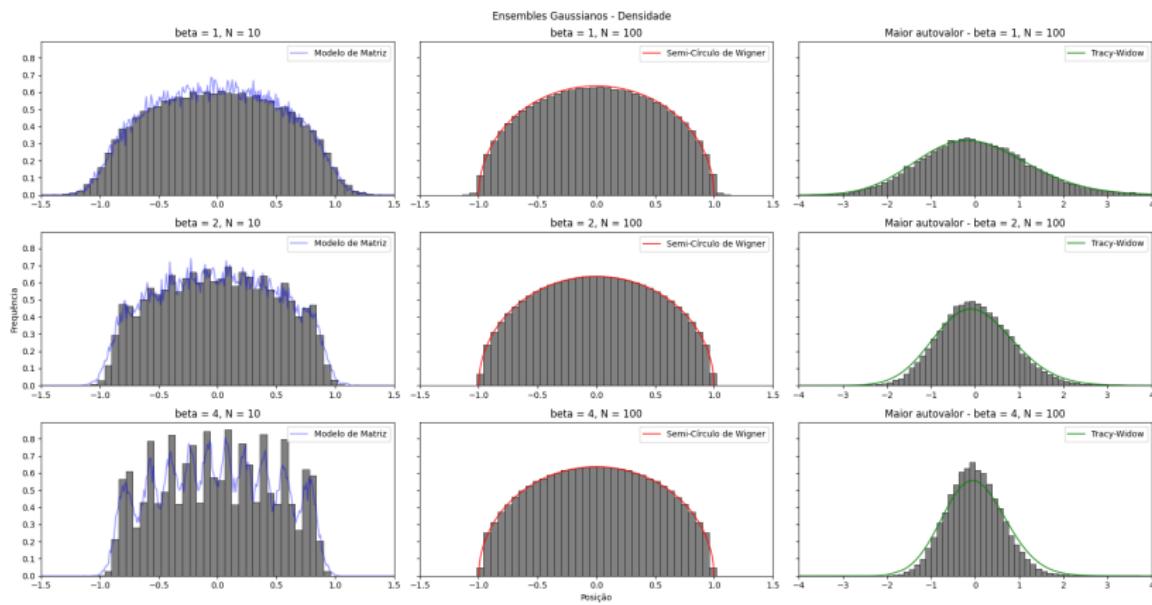


FIGURA: Medida experimentais e teóricas para ensembles Gaussianos para combinações de N, β . Comparação com modelo de matriz, Semi-Círculo de Wigner e Tracy-Widow.



POTENCIAL QUÁRTICO

Equivale a

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^4}{4} + t \frac{|x|^2}{2}; \quad g(x) = \log |x|; \quad \beta = 2.$$

com medida dada por

- $t \geq -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} (x^2 + c_t^2) \sqrt{b_t^2 - x^2},$$

$$\text{com } c_t^2 := \frac{1}{2} b_t^2 + t := \frac{1}{3}(2t + \sqrt{t^2 + 12}).$$

- $t < -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, -a_t] \cup [a_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} |x| \sqrt{(x^2 - a_t^2)(b_t^2 - x^2)},$$

$$\text{com } a_t := \sqrt{-2 - t}, \quad b_t := \sqrt{2 - t}.$$



POTENCIAL QUÁRTICO

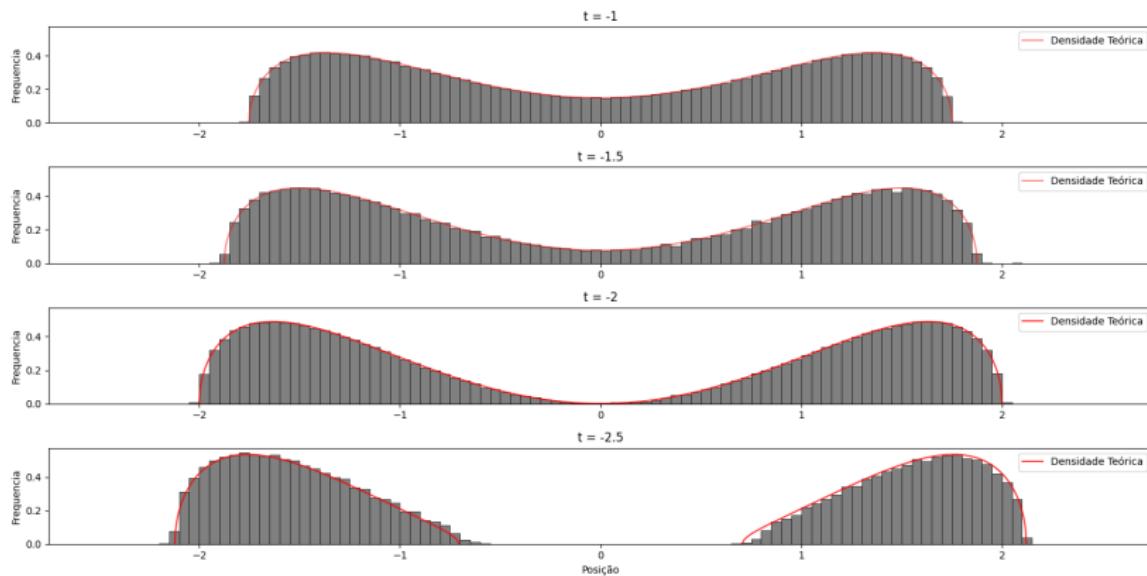


FIGURA: Medidas experimentais e teóricas para potencial Quártico para $t = -1, -1.5, -2, -2.5$. Simulação para $N = 100$ com $5 \cdot 10^6$ passos registrando a cada 1000.

$$V(z) = |z|^{2a} - \operatorname{Re}\{tz^a\}$$

Consideremos o potencial estudado por (BALOGH; GRAVA; MERZI, 2016)

$$d = 2; \ n = 2; \ V(z) = |z|^{2a} - \operatorname{Re}\{tz^a\}; \ g(x) = \log|x|; \ \beta = 2.$$



$$V(z) = |z|^{2a} - \operatorname{Re}\{tz^a\}$$

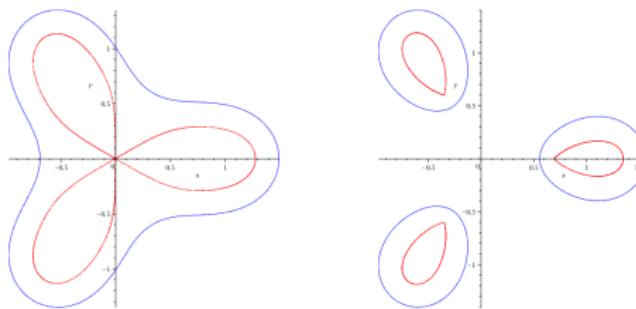


FIGURA: Curvas retiradas de Artigo de (BALOGH; GRAVA; MERZI, 2016).

$$V(z) = |z|^{2a} - \operatorname{Re}\{tz^a\}$$

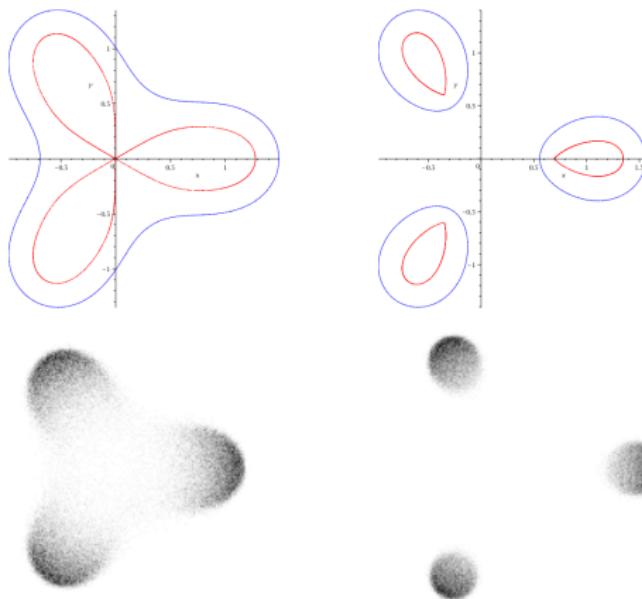


FIGURA: Curvas retiradas de Artigo de (BALOGH; GRAVA; MERZI, 2016).



$$V(z) = |z|^{2a} - \operatorname{Re}\{tz^a\}$$

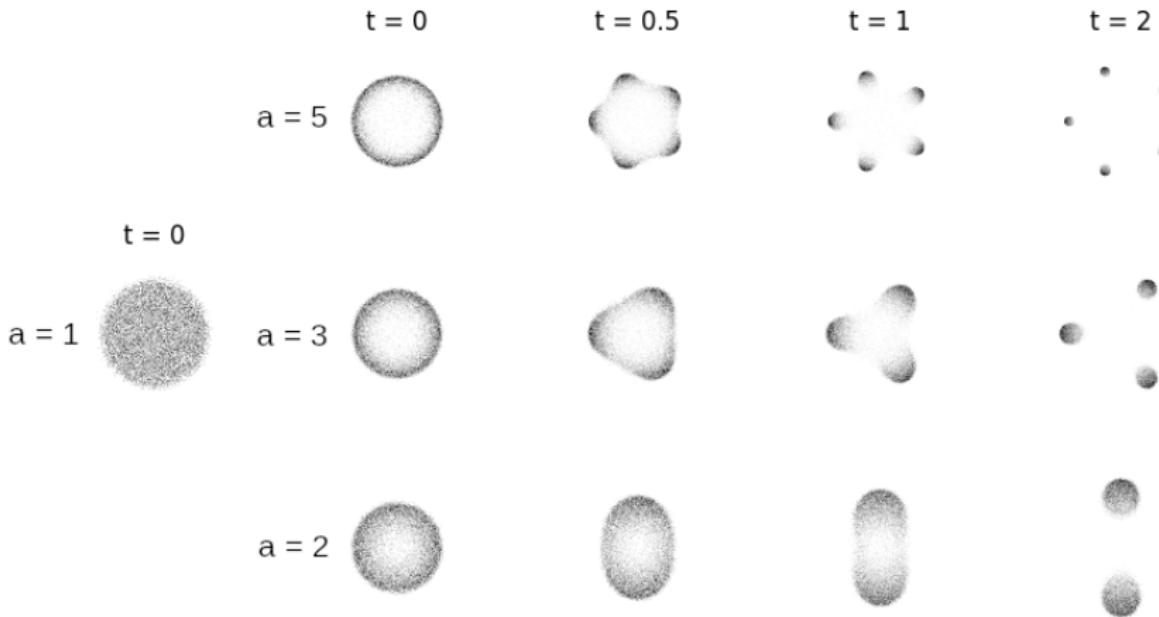


FIGURA: Medidas de equilíbrio no plano simulados para $a = 1, 2, 3, 5$ com $t = 0, 0.5, 1, 2$ utilizando do potencial de Balogh, Grava e Merzi. $N = 100$ com $5 \cdot 10^6$ a cada 1000.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO À MATRIZES ALEATÓRIAS

- 1.1 *Porquê RMT*
- 1.2 *Medida Invariante*
- 1.3 *Gases de Coulomb*
- 1.4 *Medidas de Equilíbrio*

2. SIMULAÇÃO DE PARTÍCULAS

- 2.1 *Dinâmica de Langevin Monte Carlo*
- 2.2 *Algoritmo e Implementação*

3. RESULTADOS

- 3.1 *Gases na Reta*
- 3.2 *Gases no Plano*

4. CONCLUSÃO

CONCLUSÕES

- Teoria de Matrizes Aleatórias é útil ferramenta para sistemas de alta complexidade para um descrição estatística do problema;
- É possível e razoável utilizar de simulações numéricas de partículas para amostrar de ensembles de matrizes aleatórias outrossim difíceis de construir diretamente.
- Possibilidade de caracterização holística das medidas e fenômenos críticos associados. Alternativa para construção de objetos que dependem da devida amostragem destes ensembles de difícil construção direta.



CONCLUSÕES

- Teoria de Matrizes Aleatórias é útil ferramenta para sistemas de alta complexidade para um descrição estatística do problema;
- É possível e razoável utilizar de simulações numéricas de partículas para amostrar de ensembles de matrizes aleatórias outrossim difíceis de construir diretamente.
- Possibilidade de caracterização holística das medidas e fenômenos críticos associados. Alternativa para construção de objetos que dependem da devida amostragem destes ensembles de difícil construção direta.



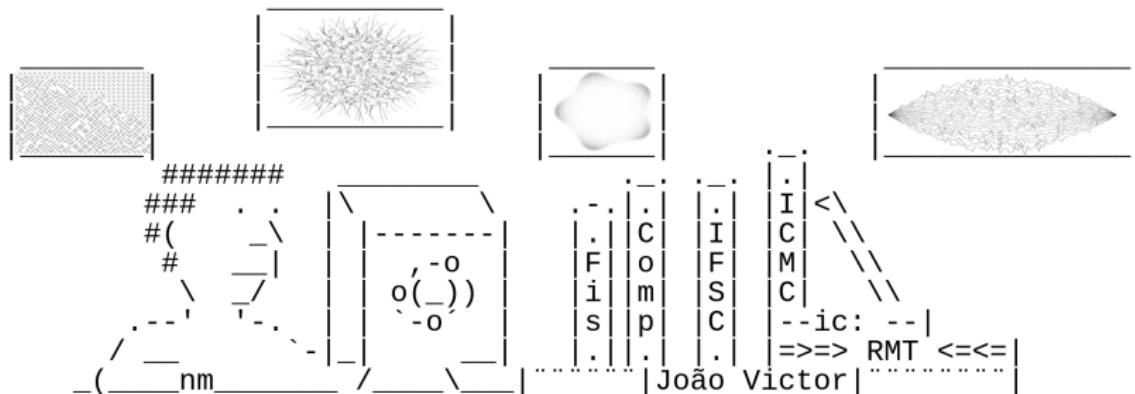
CONCLUSÕES

- Teoria de Matrizes Aleatórias é útil ferramenta para sistemas de alta complexidade para um descrição estatística do problema;
- É possível e razoável utilizar de simulações numéricas de partículas para amostrar de ensembles de matrizes aleatórias outrossim difíceis de construir diretamente.
- Possibilidade de caracterização holística das medidas e fenômenos críticos associados. Alternativa para construção de objetos que dependem da devida amostragem destes ensembles de difícil construção direta.



Obrigado!

Projeto realizado com auxílio da FAPESP sob processo # 2023/02674-0.



REFERÊNCIAS I

-  BALOGH, F.; GRAVA, T.; MERZI, D. Orthogonal polynomials for a class of measures with discrete rotational symmetries in the complex plane. 2016.
-  BLEHER, P.; SILVA, G. *The mother body phase transition in the normal matrix model*. 2016.
-  CHAFAÏ, D.; FERRÉ, G. Simulating coulomb and log-gases with hybrid monte carlo algorithms. *Journal of Statistical Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 174, n. 3, p. 692–714, nov 2018.
-  CHAFAÏ, D.; HARDY, A.; MAÏDA, M. Concentration for coulomb gases and coulomb transport inequalities. *Journal of Functional Analysis*, Elsevier BV, v. 275, n. 6, p. 1447–1483, sep 2018. ISSN 0022-1236.
-  EDELMAN, A. *Eigenvalues and Condition Numbers of Random Matrices*. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 1984.



REFERÊNCIAS II

-  FABOZZI, F.; FOCARDI, S.; KOLM, P. *Quantitative Equity Investing: Techniques and Strategies*. Wiley, 2010. (Frank J. Fabozzi Series). ISBN 9780470262474. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=eNWNDwAAQBAJ>>.
-  GOLDSTON, D. et al. On the pair correlation of zeros of the riemann zeta-function. *Proceedings of the London Mathematical Society*, v. 80, 01 2000.
-  LEIMKUHLER, B.; MATTHEWS, C. *Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods*. Cham, Suíça: Springer International Publishing, 2015. (Interdisciplinary Applied Mathematics). ISBN 9783319163758.
-  POTTERS, M.; BOUCHAUD, J. *A First Course in Random matriz Theory: for Physicists, Engineers and Data Scientists*. Cambridge, Inglaterra: Cambridge University Press, 2020. ISBN 9781108488082.



REFERÊNCIAS III

-  STOLTZ, G.; TRSTANOVA, Z. Langevin dynamics with general kinetic energies. *Multiscale Modeling & Simulation*, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), v. 16, n. 2, p. 777–806, jan 2018. ISSN 1540-3467.
-  WIGNER, E. P. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions. *Annals of Mathematics*, Annals of Mathematics, v. 62, n. 3, p. 548–564, 1955. ISSN 0003486X. Disponível em: <http://www.jstor.org/stable/1970079>.



Apêndice A



Potencial proposto por (BLEHER; SILVA, 2016)

$$d = 2; \ n = 2; \ V(z) = t_0(|z|^2 - 2 \operatorname{Re}\{z^3/3 + t_1 z\}); \ g(x) = \log|x|; \ \beta = 2.$$



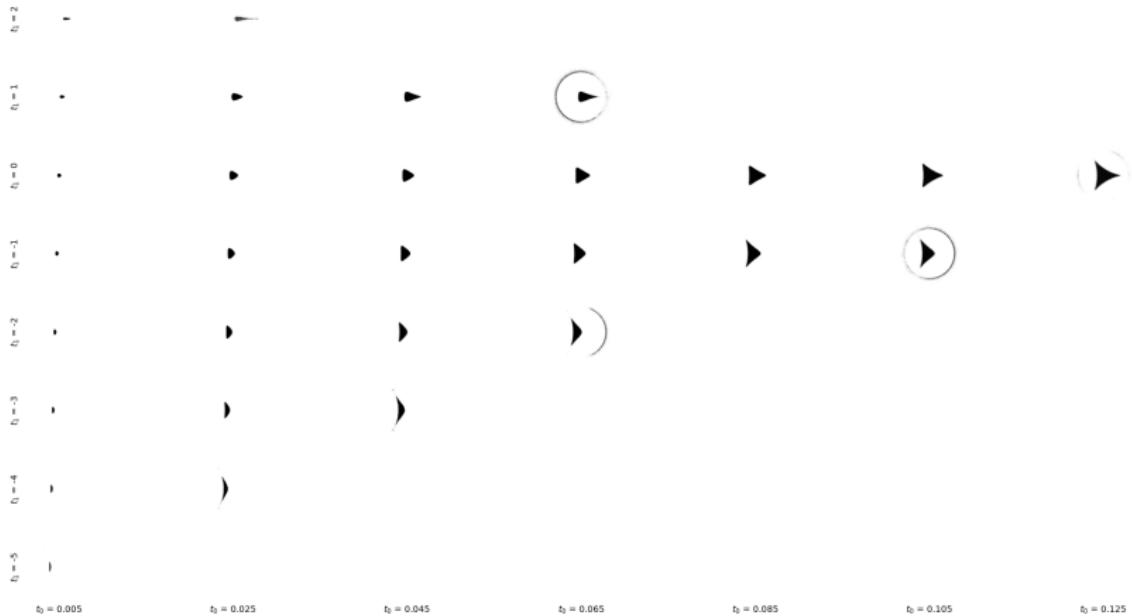


FIGURA: Diagrama com medidas de equilíbrio no plano simulados para $t_0 \in (0, 0.125)$ com $t_1 \in (-5, 2)$ utilizando do potencial de Bleher e Silva. $N = 100$ com $5 \cdot 10^6$ a cada 1000.



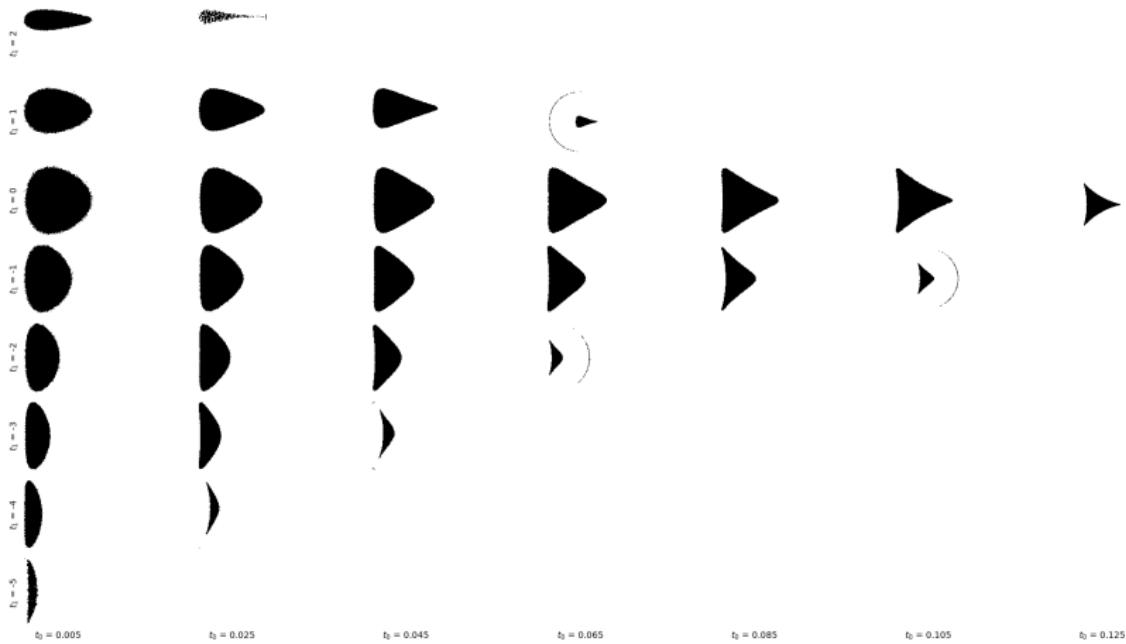


FIGURA: Diagrama com medidas de equilíbrio no plano simulados para $t_0 \in (0, 0.125)$ com $t_1 \in (-5, 2)$ utilizando do potencial de Bleher e Silva. - Sem escala

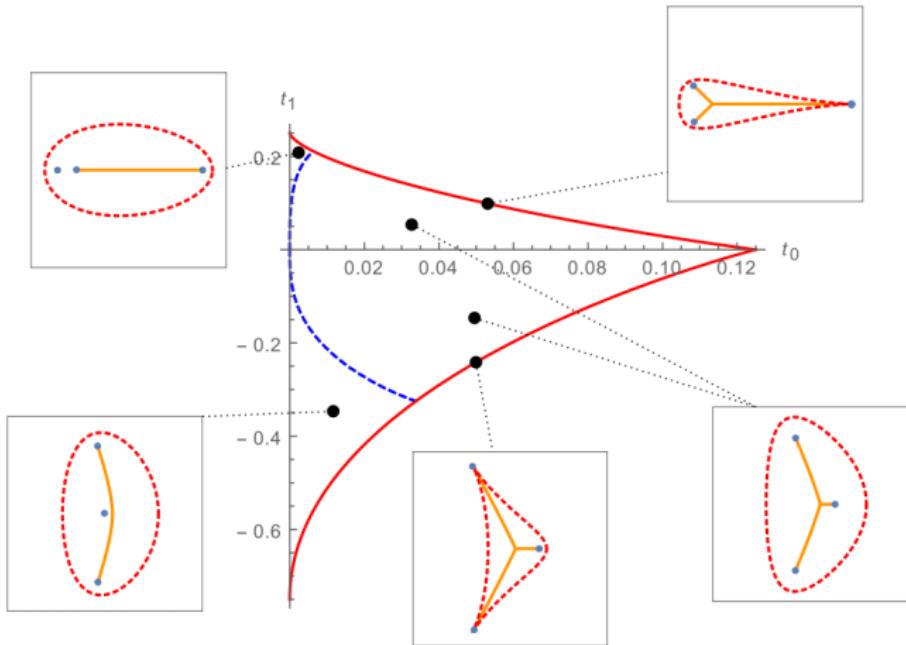


FIGURA: Diagrama de fase descrito no artigo de (BLEHER; SILVA, 2016)



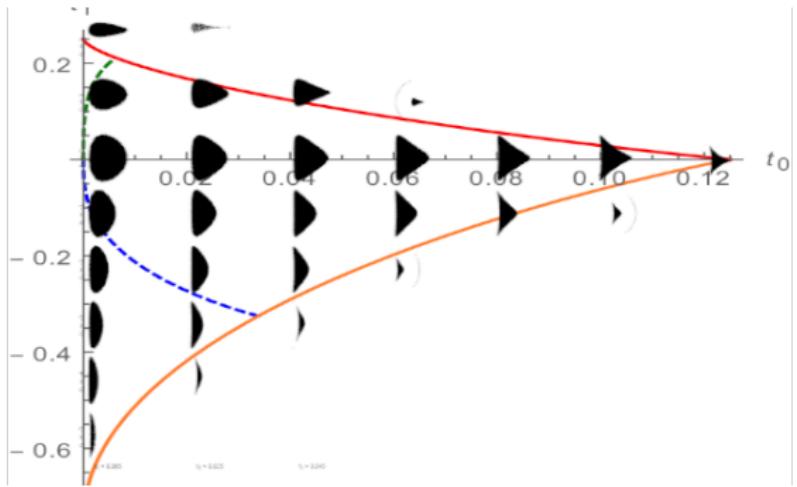


FIGURA: Validação das medidas simuladas com o diagrama de fase apresentado em (BLEHER; SILVA, 2016)

Apêndice B



PÔLINÔMIOS

Roots of the polynomials

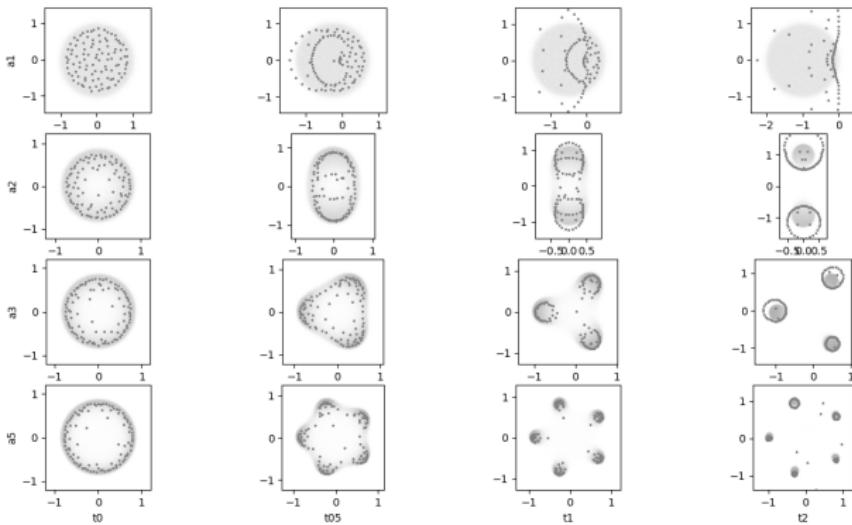


FIGURA: Raízes de Polinômios construídos a partir da amostragem dos Gases de Coulomb



Apêndice C

POTENCIAL MÔNICO

Potencial Mônico

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = t|x|^{2m}; \quad g(x) = \log|x|; \quad \beta = 2.$$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-a, a], \quad \mu_V^*(x) = \frac{mt}{\pi} \sqrt{a^2 - x^2} h_1(x),$$

com

$$a := \left(mt \prod_{l=1}^m \frac{2l-1}{2l} \right), \quad h_1(x) = x^{2m-2} + \sum_{j=1}^{m-1} x^{2m-2-2j} a^{2j} \prod_{l=1}^j \frac{2l-1}{2l}.$$



POTENCIAL MÔNICO

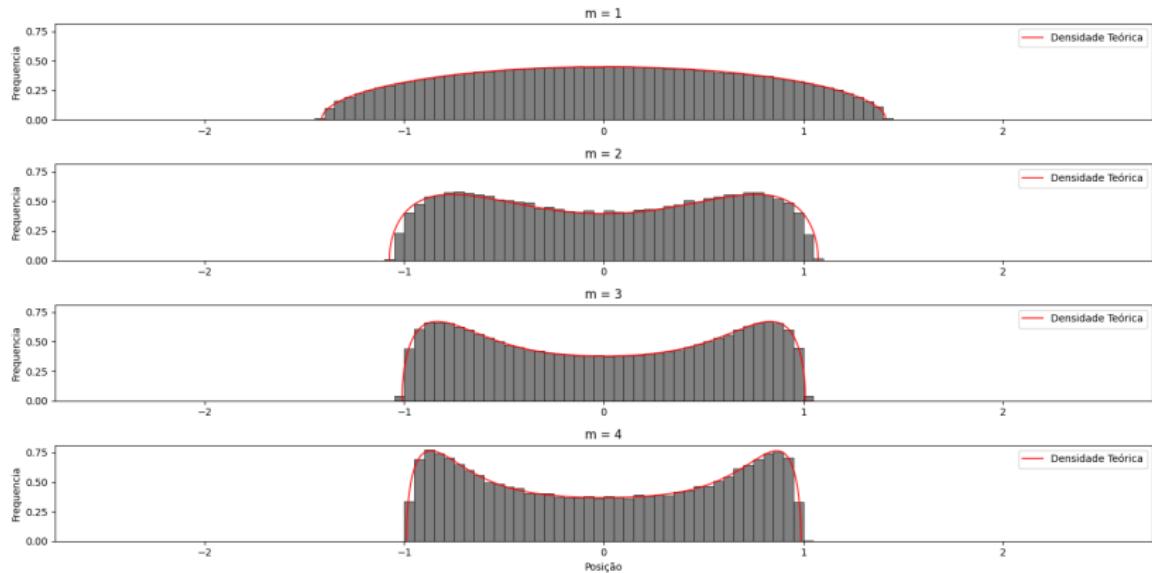


FIGURA: Medidas experimentais e teóricas para potencial Mônico para $t = 1$ e $m = 1, 2, 3, 4$. Simulação para $N = 100$ com $5 \cdot 10^6$ passos registrando a cada 1000.

