

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

**João Victor Alcantara Pimenta**

**Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb**

**São Carlos**

**2023**



**João Victor Alcantara Pimenta**

## **Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Programa de Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos, da Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Bacharel em Física Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Guilherme Silva

**Versão original**

**São Carlos  
2023**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTA TRABALHO,  
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E  
PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica revisada pelo Serviço de Biblioteca e Informação Prof. Bernhard Gross, com  
os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

João Victor Alcantara Pimenta  
Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb /  
João Victor Alcantara Pimenta ; orientador Guilherme Silva.  
– São Carlos, 2023.  
23 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física  
Computacional) – Instituto de Física de São Carlos, Universi-  
dade de São Paulo, 2023.

1. Introdução. 2. Simulações e Algoritmos. 3. Implementação  
e Resultados 4. Conclusão. I. SILVA, GUILHERME L. F.,  
orientador. II. Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de  
Coulomb.

## RESUMO

PIMENTA, J. V. A. **Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb**. 2023. 23p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

O estudo de Matrizes Aleatórias demonstra aplicabilidade em uma gama diversa de áreas, com destaque no estudo de mecânica estatística, principalmente na simulação de gases. Estudando a densidade espectral de sistemas de matrizes Gaussianas pode-se desenvolver uma analogia que possibilita a simulação de sistemas de gases diversos, como o de Coulomb. Algumas dificuldades surgem na implementação de simulações baseadas nesta teoria, principalmente em escalabilidade do sistema e no tratamento de possíveis singularidades. Para resolver estes problemas, abordou-se na simulação na literatura, dentre outros, o Algoritmo Híbrido de Monte Carlo, de ótimo comportamento numérico. Nosso objetivo é explorar este assunto, as simulações de gases e o algoritmo citado acima além de expandir os potenciais em que foi-se bem documentado o comportamento destas simulações.

**Palavras-chave:** Gases de Coulomb. Matrizes Aleatórias.



## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>7</b>
<b>1.1</b>	<b>Distribuição de autovalores . . . . .</b>	<b>7</b>
<b>1.2</b>	<b>Ensembles Gaussianos . . . . .</b>	<b>8</b>
<b>1.3</b>	<b>Gases de Coulomb . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>1.4</b>	<b>Medidas de Equilíbrio . . . . .</b>	<b>10</b>
<b>1.5</b>	<b>Potenciais notáveis . . . . .</b>	<b>12</b>
1.5.1	Potenciais Quadráticos . . . . .	12
1.5.2	Potencial Mônico . . . . .	13
1.5.3	Potencial Quártico . . . . .	13
<b>2</b>	<b>SIMULAÇÕES E ALGORITMOS . . . . .</b>	<b>15</b>
<b>2.1</b>	<b>Introdução ao algoritmo . . . . .</b>	<b>15</b>
<b>2.2</b>	<b>Algoritmo Híbrido de Monte Carlo . . . . .</b>	<b>16</b>
<b>2.3</b>	<b>Discretização . . . . .</b>	<b>16</b>
<b>3</b>	<b>IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS . . . . .</b>	<b>19</b>
<b>3.1</b>	<b>A implementação . . . . .</b>	<b>19</b>
<b>3.2</b>	<b>Validação em distribuições conhecidas . . . . .</b>	<b>19</b>
<b>3.3</b>	<b>Outros Potenciais . . . . .</b>	<b>19</b>
<b>4</b>	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>21</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>23</b>





## 1 INTRODUÇÃO

Escrever introdução. Aqui, discutir porque estamos interessados em distribuições de matrizes aleatórias, como isso é importante na física, matemática e em outras áreas. Relembrar que estaremos discutindo distribuições de autovalores e discutir os métodos para calcular suas medidas de equilíbrio numericamente.

### 1.1 Distribuição de autovalores

Seja  $\mathbb{S}$  um conjunto tal como  $\mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{H}$  (Reais, Complexos e Quaterniônicos). Consideremos inicialmente uma matriz  $\hat{M} \in \mathcal{M}_{\mathbb{S}}(N)$ , espaço de matrizes  $N \times N$ , ou seja, de  $N^2$  entradas, sejam elas reais, complexas ou quaterniônicas. Se tomamos o elemento de matriz  $M_{i,j} \forall i, j \in \mathbb{Z}$ , com  $1 \leq i, j \leq N$ , como uma variável aleatória de distribuição arbitrária, podemos expressar a densidade de probabilidade conjunta (jpdf) como

$$p(\hat{M})dM = p(M_{1,1}, \dots, M_{N,N}) \prod_{i,j=1}^N dM_{i,j}.$$

Não lidaremos, contudo, com uma classe tão ampla de matrizes. Considere a decomposição  $\hat{M} = \hat{O}\hat{D}\hat{O}^{-1}$ , onde  $\hat{D} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$ . Estamos especialmente interessados no caso onde  $\hat{O} \in V_N(\mathbb{S}^N)$ , espaço denominado variedade de Stiefel. Isso implica que  $\hat{O}\hat{O}^* = \mathbb{1}$ . Estamos tomando  $\hat{O}$  matriz ortogonal, unitária ou simplética, a depender de  $\mathbb{S}$ , resultando em autovalores reais. Isso pode ser motivado fisicamente, por exemplo, quando  $\mathbb{S} = \mathbb{C}$ , considerando a noção de operadores autoadjuntos e sua importância na construção do formalismo quântico.

Tomamos matrizes tais que  $\overline{M_{i,j}} = M_{j,i}$ . Este fato é refletido na dimensão do subespaço escolhido, com valor dependente de  $\mathbb{S}$ . A transformação tomada tem ainda Jacobiano  $J(\hat{M} \rightarrow \{\vec{\lambda}, \hat{O}\})$ . Com estes fatos podemos reescrever a jpdf como

$$\begin{aligned} p(\hat{M})dM &= p(M_{1,1}, \dots, M_{N,N}) \prod_{i \leq j} dM_{i,j} \\ &= p\left(M_{1,1}(\vec{\lambda}, \hat{O}), \dots, M_{N,N}(\vec{\lambda}, \hat{O}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\vec{\lambda}, \hat{O}\})\right) dO \prod_{i=1}^N \lambda_i. \end{aligned} \quad (1.1.1)$$

Aqui, resalto que estamos interessados em distribuições de autovalores. Para calcular  $p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$  devemos integrar os termos à direita da Equação 1.1.1 sobre o subespaço  $V_N(\mathbb{S}^N)$ . Isso nem sempre é fácil ou possível. Para garantir a integrabilidade, tomaremos *ensembles* de matrizes aleatórias onde o jpdf de suas entradas pode ser escrito exclusivamente como função dos autovalores, ou seja

$$p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N, \hat{O}) \equiv p\left(M_{1,1}(\vec{\lambda}), \dots, M_{N,N}(\vec{\lambda}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\vec{\lambda}\})\right).$$

Ensembles com esta propriedade são denominados invariantes por rotação. Esta escolha implica que quaisquer duas matrizes que satisfaçam a relação de equivalência  $\hat{M} = \hat{U}\hat{M}'\hat{U}^{-1}$  tem mesma probabilidade. Nesta relação,  $\hat{U}$  é simétrica, hermitiana ou simplética respectivamente quando  $\mathbb{S} = \mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{H}$ . Considere o teorema (1).

**Teorema 1.1.1** Tome  $\hat{M} \in M_{\mathbb{R}}(N), M_{\mathbb{C}}(N), M_{\mathbb{H}}(N)$  simétrica, hermitiana ou autodual, respectivamente. Se  $\hat{M}$  tem jpdf da forma  $\phi(\hat{M})$  invariante sobre transformações de similaridade ortogonal. A jpdf dos  $N$  autovalores ordenados de  $\hat{M}$ ,  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N$ , é

$$C_N^{(\beta)} \phi(\hat{D}) \prod_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^\beta$$

onde  $C_N^\beta$  é constante e  $\beta = 1, 2, 3$  corresponde respectivamente à  $\hat{M} \in M_{\mathbb{R}}(N), M_{\mathbb{C}}(N), M_{\mathbb{H}}(N)$ .

Com esse teorema, desde que tomemos um ensemble de matrizes aleatórias com a jpdf das entradas apropriado, podemos reescrever a distribuição em função dos autovalores com a expressão acima. Vale ainda observar que um conhecido resultado\* nos diz que a jpdf  $p(\hat{M}) = \phi(\text{Tr}(\hat{M}), \text{Tr}(\hat{M}^2), \dots, \text{Tr}(\hat{M}^N))$  é invariante. Tomada esta densidade, podemos escrever ainda:

$$p_{ord}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = C_N^\beta \phi\left(\sum_i \lambda_i, \dots, \sum_i \lambda_i^N\right) \prod_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^\beta \quad (1.1.2)$$

## 1.2 Ensembles Gaussianos

Dentre os muitos ensembles da Teoria de Matrizes Aleatórias (RMT), os ensembles Gaussianos são notórios. São eles o *Gaussian Orthogonal Ensemble (GOE)*, *Gaussian Unitary Ensemble (GUE)* e *Gaussian Symplectic Ensemble (GSE)*. Notemos primeiramente que o nome é relacionado à escolha de  $\mathbb{S}$ . Mais explicitamente, o nome é dado em relação à se  $\hat{O}$ , tal que  $\hat{M} = \hat{O}\hat{D}\hat{O}^*$ , é ortogonal, unitário ou simplético. É natural então pensar nos ensembles *GOE*, *GUE* e *GSE* como matrizes  $\hat{M} \in \mathcal{M}_{\mathbb{S}}(N)$  onde

$$\mathcal{M}_{\mathbb{S}}(N) \ni M_{i,j} \sim \begin{cases} \mathcal{N}_{\mathbb{R}}(0, 1/2) & \text{para } i \neq j \text{ se } \mathbb{S} = \mathbb{R} (\beta = 1), \\ \mathcal{N}_{\mathbb{R}}(0, 1) & \text{para } i = j \text{ se } \mathbb{S} = \mathbb{R} (\beta = 1), \\ \mathcal{N}_{\mathbb{C}}(0, 1/2) & \text{para } i \neq j \text{ se } \mathbb{S} = \mathbb{C} (\beta = 2), \\ \mathcal{N}_{\mathbb{C}}(0, 1) & \text{para } i = j \text{ se } \mathbb{S} = \mathbb{C} (\beta = 2), \\ \mathcal{N}_{\mathbb{H}}(0, 1/2) & \text{para } i \neq j \text{ se } \mathbb{S} = \mathbb{H} (\beta = 4), \\ \mathcal{N}_{\mathbb{H}}(0, 1) & \text{para } i = j \text{ se } \mathbb{S} = \mathbb{H} (\beta = 4). \end{cases}$$

\* Weyl's Lemma?

Os três ensembles gaussianos compartilham de uma propriedade exclusiva. Estes são os únicos ensembles tais que suas entradas são independentes e sua jpdf permanecem sendo rotacionalmente invariante. Para qualquer outro caso, apenas uma das propriedades pode ser esperada. Tomemos, por simplicidade,  $\hat{U} \in \mathcal{M}_{\mathbb{R}}(N)$ , matriz real simétrica, do GOE. Para esta, sabendo as entradas independentes, podemos escrever

$$p(\hat{U}) = \prod_{i=1}^N \frac{\exp\left\{\frac{U_{i,i}^2}{2}\right\}}{\sqrt{2\pi}} \prod_{i<j} \frac{\exp\{U_{i,i}^2\}}{\sqrt{\pi}} = 2^{-N/2} \pi^{-N(N+1)/4} \exp\left\{-\frac{1}{2} \text{Tr}\{U^2\}\right\}.$$

Note que essa jpdf satisfaz as condições do Teorema 1.1.1 e, especialmente, é da forma que propomos na Equação 1.1.2. Logo, utilizando o resultado,

$$p_{ord}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{Z_{N,\beta=1}^{(ord)}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i^2\right\} \prod_{i<j} (\lambda_i - \lambda_j).$$

Concluimos notando que, se desordenarmos os autovalores, temos a relação  $Z_{N,\beta} = N! Z_{N,\beta}^{(ord)\dagger}$ . Assim,

$$p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{N! Z_{N,\beta=1}^{(ord)}} \exp\left\{-\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 + \sum_{i<j} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|}\right)\right\}.$$

De forma análoga, podemos deduzir mais geralmente para os outros casos que

$$\begin{aligned} p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) &= \frac{1}{N! Z_{N,\beta}^{(ord)}} \exp\left\{-\left(\sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i^2}{2} - \sum_{i<j} \log |\lambda_i - \lambda_j|^\beta\right)\right\} \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta}} e^{-\beta \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})} \end{aligned} \quad (1.2.1)$$

Note que, por definição,  $Z_{N,\beta}$ , na equação 1.2.1, é função de partição canônica. O fator  $\beta$  é pensado como a temperatura inversa. Definimos ainda o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_N(\vec{\lambda}) = \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i^2}{2\beta} + \sum_{i<j} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|}$ . Sabemos então, que a partir dessa função podemos retirar importantes propriedades estatísticas dos ensembles Gaussianos.

### 1.3 Gases de Coulomb

Sob as devidas condições, o Gás de Coulomb  $p_N$  é (2) a medida de probabilidade de Boltzmann-Gibbs dada em  $(\mathbb{R}^d)^N$  por

$$dp_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{e^{-\beta N^2 E_N(x_1, x_2, \dots, x_N)}}{Z_{N,\beta}} dx_1 dx_2 \dots dx_N, \quad (1.3.1)$$

<sup>†</sup> Fator de contagem correta de Boltzmann

onde  $E_N(\vec{\lambda}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{2N^2} \sum_{i \neq j} g(x_i - x_j)$  é usualmente chamado hamiltoniano ou energia do sistema.

A medida modela um gás de partículas indistinguíveis com carga nas posições  $x_1, x_2, \dots, x_N \in S$  de dimensão  $d$  em  $R^n$  *ambient space*. AS partículas estão sujeitas a um potencial externo  $V: S \mapsto \mathbb{R}$  e interação por  $W: S \mapsto (-\infty, \infty]$ . A temperatura inversa é  $\beta N^2$ . Assumiremos, para que valha a expressão, que  $V$ ,  $W$  e  $\beta$  são tais a constante de normalização (função partição)  $Z_{N,\beta} < \infty \forall N$ . Reforço que  $p_N$  é um modelo de interações estáticas e não há campos magnéticos considerados.

Tome  $\mathbb{R}^n$  com  $n \geq 2$ . Sabemos que, para  $x \neq 0$  o núcleo de interação coulombiana (função de Green) vale

$$g(\vec{x}) = \begin{cases} \log \frac{1}{|\vec{x}|} & \text{se } n = 2, \\ \frac{1}{|\vec{x}|^{n-2}} & \text{se } n \geq 3. \end{cases}$$

onde  $g$  é solução da equação de Poisson dada por

$$-\nabla g(\vec{x}) = c\delta_0 \quad \text{com } c = \begin{cases} 2\pi & \text{para } n = 2, \\ (n-2)|\mathbb{S}^{n-1}| & \text{para } n \geq 3. \end{cases}$$

Se lembramos da expressão 1.2.1, perceberemos que, para um potencial devidamente escolhido, podemos tomar  $d = 1$  e  $n = 2$  e recuperar a medida dos ensembles gaussianos. Estamos tratando de partículas no plano confinadas à uma reta. Para algum potencial arbitrário, além da devida escolha de  $n$  e  $d$ , cairemos em outros ensembles de matrizes. Exploraremos melhor esse fato no Capítulo 2.

## 1.4 Medidas de Equilíbrio

O conjunto de pontos do espaço de fase, seus microestados, determinam um *ensemble estatístico*<sup>‡</sup>. Não é difícil notar que o conjunto de microestados  $\{\vec{\lambda}\}$  do sistema de  $N$  autovalores descrito nesse trabalho caracteriza o ensemble canônico, com função partição  $Z_{N,\beta}$ , soma sobre os estados do sistema. Um argumento termodinâmico nos indica então que devemos minimizar a energia livre de Helmholtz

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z_{N,\beta}.$$

Para todos os efeitos, consideraremos  $V$ ,  $g$  e  $\beta$  tais que dada  $\mu_{V,g}(\vec{\lambda})$  medida de probabilidade em  $\Omega$ , espaço das possíveis configurações de autovalores, e maximizada a função partição  $Z_{N,\beta} = \int_{\Omega} \exp\{-\beta \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})\}$ , exista<sup>§</sup>

$$\mu_{V,g}^* = \arg \inf \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})$$

<sup>‡</sup> O nome 'Ensembles de Matrizes' não é coincidência.

<sup>§</sup> Condições de Fisher

medida de equilíbrio no limite termodinâmico  $N, V \rightarrow \infty$  tal que  $v = V/N$  constante. Para determinar a medida de equilíbrio (3) de 1.3.1 com interação logarítmica, queremos satisfazer o sistema de equações

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{1=j \neq i}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \text{ para } i = 1, \dots, N. \quad (1.4.1)$$

Usaremos o denominado *resolvent*. Considere a função complexa<sup>¶</sup>

$$G_N(z) = \frac{1}{N} \text{Tr} \left\{ \left( z\mathbb{1} - \hat{M} \right)^{-1} \right\} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{z - \lambda_i},$$

onde  $\hat{M}$  é matriz aleatória com autovalores  $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\}$ . Note que  $G_N(z)$  é uma função complexa aleatória com polos em  $\lambda_i$ . Não trivialmente, podemos reescrever 1.4.1 como

$$V'(z)G_N(z) - \Pi_N(z) = \frac{G_N^2(z)}{2} + \frac{G'_N(z)}{2N},$$

onde  $\Pi_N(z) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{V'(z) - V'(\lambda_i)}{z - \lambda_i}$  é um polinômio de grau  $k - 1 = \deg V'(z) - 1$ .

Poderíamos tentar resolver explicitamente essa formula para qualquer  $N$ , isso é possível em alguns casos. Contudo, em geral, estaremos interessados em tirar o limite  $N \rightarrow \infty$ , de  $\langle G_N(z) \rangle$ , média sobre a distribuição de  $\hat{M}$ . Esta média, denomina-se *resolvent*. Nesse limite,

$$G_\infty^{(med)}(z) = \frac{1}{2} \left( V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi_\infty(z)} \right). \quad (1.4.2)$$

Como consequência da fórmula de Sokhotski-Plemeji, é enunciado o resultado

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} G_\infty^{(med)}(x - i\epsilon). \quad (1.4.3)$$

Podemos ir um passo além, desde que o potencial  $V(x)$  seja convexo. Neste caso, teremos uma medida de equilíbrio  $p(x)$  não nula apenas no intervalo  $(\lambda_-, \lambda_+)$  tal que

$$G_\infty^{(med)}(z) = \int_{\lambda_-}^{\lambda_+} \frac{p(\lambda)}{z - \lambda} d\lambda.$$

Sabemos que o comportamento não analítico deve surgir da raiz quadrada, tal que se definirmos  $D(z) := V'(z)^2 - 2\Pi_\infty(z)$  polinômio de grau  $2k$ ,  $\{\lambda_-, \lambda_+\}$  são suas raízes e o polinômio tem valor negativo em algum intervalo. Equivalentemente

$$D(z) = (z - \lambda_-)(z - \lambda_+) Q^2(z),$$

---

<sup>¶</sup> Stieltjes transform

onde  $Q(z)$  é polinômio de grau  $k - 1$ . Com essas definições podemos escrever que

$$G_{\infty}^{(med)}(z) = \frac{V(z) \pm Q(z)\sqrt{(z - \lambda_-)(z - \lambda_+)}}{2}$$

e, principalmente, por 1.4.3,

$$p(x) = \frac{Q(x)}{2\pi} \sqrt{(\lambda_+ - x)(x - \lambda_-)}, \quad \text{para } \lambda_- \leq x \leq \lambda_+ \quad (1.4.4)$$

Restaria, para cada potencial, dada a condição que  $G_{\infty}^{(med)}(z) \sim 1/z$  para  $z \rightarrow \infty$ , resolver um sistema de  $k + 2$  equações balanceando os coeficientes dos polinômios  $V'$  e  $Q$  e os valores  $\{\lambda_-, \lambda_+\}$ .

## 1.5 Potenciais notáveis

Consideraremos a mudança de variável  $V(x) \mapsto \beta N V(x)$  tal que possamos escrever  $p(\{\lambda_i\}) \propto e^{-\beta N \mathcal{H}_N(\{\lambda_i\})}$  com

$$\mathcal{H}_N(\{\lambda_i\}) = \sum_{i=1}^N V(x) + \frac{1}{2N} \sum_{i \neq j} \log |\lambda_i - \lambda_j|.$$

Com essa mudança, consideremos os seguintes potenciais.

### 1.5.1 Potenciais Quadráticos

O caso de potencial quadrático

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

descreve o caso dos ensembles gaussianos, onde é fácil determinar que

$$V'(z) = z \implies \Pi(z) = 1$$

e, por isso,

$$G_{\infty}^{(med)}(z) = z \pm \sqrt{z^2 - 2}. \quad (1.5.1)$$

Nosso problema chega ao fim pois definimos o *resolvent*. Resta agora invocar a Equação 1.4.3 utilizando de 1.5.1 para descobrir que

$$p(x) = \pm \frac{\text{sign}(-x)}{\pi\sqrt{2}} \sqrt{|x^2 - 2| - x^2 + 2}.$$

Ou ainda, no suporte  $\text{supp}(-\sqrt{2}, \sqrt{2})$ ,

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}. \quad (1.5.2)$$

Esse resultado é bem conhecido e a medida encontrada denominada Semi-Círculo de Wigner. Note que isso vale para qualquer  $\beta$ , a diferença é notada somente quando  $N$  é suficientemente pequeno..

### 1.5.2 Potencial Mônico

Considere o potencial

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

onde  $t > 0$  é escala e  $\alpha \in \mathbb{Z}$ . A medida de equilíbrio para  $\alpha = 1$  é o semi-círculo de Wigner podemos validar na figura com a distribuição em vermelho. Sabemos também que o suporte  $[-a, a]$  da densidade é dado por

$$a = \left( \frac{t}{2} \prod_{j=1}^{\alpha} \frac{2j-1}{2j} \right)^{-\frac{1}{2\alpha}}.$$

### 1.5.3 Potencial Quártico

Para Considere o potencial

$$V(x) = \frac{x^4}{4} + t \frac{x^2}{2}. \quad (1.5.3)$$

Aqui observaremos, a depender de  $t$ , pela primeira vez a separação do suporte da função. Teremos um ponto crítico em  $t = -2$  onde o suporte se separa nos intervalos  $[-b_t, -a_t]$  e  $[a_t, b_t]$  para  $t < -2$ . Para  $t > -2$  o suporte é um único intervalo  $[-b_t, b_t]$ . Definiremos a medida nos dois casos,

- $t > -2$

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

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

- $t < -2$

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

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





## 2 SIMULAÇÕES E ALGORITMOS

Nos referenciaremos aqui aos desenvolvimento do artigo (6). Compilemos o embasamento necessário e explicitaremos os resultados e métodos usados. Antes, notação. Tome um subespaço  $S$  de dimensão  $d$  em  $\mathbb{R}^n$ . O subespaço toma a métrica de Lebesgue, denotada  $dx$ . O campo externo é função  $V : S \mapsto \mathbb{R}$  e a interação entre partículas é dada pelo núcleo  $W : S \mapsto (-\infty, \infty]$ . Para qualquer  $N \geq 2$  consideramos  $P_N$  em  $S^N = S \times \cdots \times S$  definida

$$P_N(dx) = \frac{e^{-\beta_N H_N(x_1, \dots, x_N)}}{Z_N} dx_1 \cdots dx_N,$$

onde  $\beta_n > 0$  é uma constante e  $Z_N$  é contante de normalização. Note ainda

$$H_N(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{2N^2} \sum_{i \neq j} W(x_i - x_j).$$

Note que  $P_N$  é invariante por permutação e que  $H_N$  depende somente da medida empírica

$$\mu_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$$

Note que as partículas vivem em  $S^N$  de dimensão  $dN$ .

### 2.1 Introdução ao algoritmo

A ideia explorada é que  $P_N$  é medida de probabilidade invariante reversível do processo de difusão de Markov  $(X_t)_{t>0}$  solução de

$$dX_t = -\alpha_N \nabla H_N(X_t) dt + \sqrt{2 \frac{\alpha_N}{\beta_N}} dB_t.$$

Sob algumas condições em  $\beta_N$  e  $V$ , podemos afirmar que

$$X_t \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{Law} P_N.$$

Discretizado, tomamos o processo

$$x_{k+1} = x_k - \nabla H_N(x_k) \alpha_N \Delta t + \sqrt{2 \frac{\alpha_N}{\beta_N}} \Delta t G_k,$$

onde  $G_k$  é a família de variáveis gaussianas usuais. Uma forma de contornar o viés embutido é amenizar a dinâmica com a forma

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\nabla H_N(x_k) \alpha_N \Delta t}{1 + |\nabla H_N(x_k)| \alpha_N \Delta t} + \sqrt{2 \frac{\alpha_N}{\beta_N} \Delta t} G_k.$$

Ainda assim, precisamos otimizar o processo. A ideia do algoritmo de Metropolis é adicionar um processo de seleção para evitar passos irrelevantes, algo do tipo:

- defina  $\tilde{x}_{k+1}$  de acordo com o kernel  $K(x_k, \cdot)$  gaussiano;
- defina  $p_k$

$$p_k = 1 \wedge \frac{K(\tilde{x}_{k+1}, x_k) e^{\beta_N H_N(\tilde{x}_{k+1})}}{K(x_k, \tilde{x}_{k+1}) e^{\beta_N H_N(x_k)}};$$

- defina

$$x_{k+1} = \begin{cases} \tilde{x}_{k+1} & \text{com probabilidade } p_k, \\ x_k & \text{com probabilidade } 1 - p_k. \end{cases}$$

## 2.2 Algoritmo Híbrido de Monte Carlo

O algoritmo híbrido de Monte Carlo é baseado no algoritmo anterior mas adicionando uma variável de momento para melhor explorar o espaço. Defina  $E = \mathbb{R}^{dN}$  e deixe  $U_N : E \rightarrow \mathbb{R}$  ser suave para que  $e^{-\beta_N U_N}$  seja Lebesgue integrável. Seja ainda  $(X_t, Y_t)_{t \geq 0}$  o processo de difusão em  $E \times E$  solução de

$$\begin{cases} dX_t = \alpha_N \nabla U_N(Y_t) dt, \\ dY_t = \alpha_N \nabla H_N(X_t) dt - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(Y_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dB_t, \end{cases}$$

onde  $(B_t)_{t \geq 0}$  é o movimento browniano em  $E$  e  $\gamma_N > 0$  parâmetro representando atrito.

Quando  $U_N(y) = \frac{1}{2}|y|^2$  temos  $Y_t = dX_t/dt$  e teremos que  $X_t$  e  $Y_t$  poderão ser interpretados como posição e velocidade do sistema de  $N$  pontos em  $S$  no tempo  $t$ . Nesse caso,  $U_n$  é energia cinética

## 2.3 Discretização

Descrevemos agora o algoritmo discretizado. Inicie de uma configuração  $(x_0, y_0)$  e para todo  $k \geq 0$  faça

1. atualize as velocidades com

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

2. calcule os termos

$$\begin{cases} \tilde{y}_{k+\frac{1}{2}} = \tilde{y}_k - \nabla H_N(x_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{x}_{k+1} = x_k + \tilde{y}_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{y}_{k+1} = \tilde{y}_{k+\frac{1}{2}} - \nabla H_N(x_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}; \end{cases}$$

3. definir  $p_k$

$$p_k = 1 \wedge \exp \left\{ \left[ -\beta_N \left( H_N(\tilde{x}_{k+1}) + \frac{\tilde{y}_{k+1}^2}{2} - H_N(x_k) - \frac{\tilde{y}_k^2}{2} \right) \right] \right\};$$

4. defina

$$(x_{k+1}, y_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{x}_{k+1}, \tilde{y}_{k+1}) \text{ com probabilidade } p_k, \\ (x_k, -\tilde{y}_k) \text{ com probabilidade } 1 - p_k; \end{cases}$$



### **3 IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS**

#### **3.1 A implementação**

#### **3.2 Validação em distribuições conhecidas**

#### **3.3 Outros Potenciais**



## 4 CONCLUSÃO





## REFERÊNCIAS

- 1 EDELMAN, A. **Eigenvalues and Condition Numbers of Random Matrices**. 1984. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 1984.
- 2 CHAFAÏ, D. **Aspects of Coulomb gases**. 2021.
- 3 POTTERS, M.; BOUCHAUD, J. **A First Course in Random Matrix Theory: for Physicists, Engineers and Data Scientists**. Cambridge University Press, 2020. ISBN 9781108488082. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=9K-WzQEACAAJ>.
- 4 DEIFT, P. **Orthogonal Polynomials and Random Matrices: A Riemann-Hilbert Approach**. Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University. (Courant lecture notes in mathematics). ISBN 9780821883440. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=SBR8yv0LkFgC>.
- 5 LIVAN, G.; NOVAES, M.; VIVO, P. **Introduction to Random Matrices**. Springer International Publishing, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-70885-0>.
- 6 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. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10955-018-2195-6>.