

**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 DESTE 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.
20 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física Computacional) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade 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. 20p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

O estudo do espectro de matrizes aleatórias demonstra aplicabilidade em uma gama diversa de áreas da física, matemática à computação e engenharia. Estaremos interessados em estudar os principais ensembles da Teoria de Matrizes Aleatórias e suas medidas de equilíbrio, entender a analogia com Gases de Coulomb e, com essa ferramenta, realizar simulações que nos permitam calcular médias de funções de interesse. Discutiremos quais métodos são importantes para a simulação do problema de gases de coulomb e quais suas limitações além das impostas pela escalabilidade e singularidades do problema. Mostramos que o método de *Langevin Monte Carlo* tem boa performance, possibilitando a réplica de medidas para modelos em uma dimensão bem descritos. Estendemos ainda para um resultado sobre um modelo mais complexo bidimensional.

Palavras-chave: Gases de Coulomb. Matrizes Aleatórias.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	5
1.1	Distribuição de autovalores	6
1.2	Ensembles Gaussianos	7
1.3	Gases de Coulomb	8
1.4	Medidas de Equilíbrio	9
1.5	Potenciais notáveis	10
2	SIMULAÇÕES E ALGORITMOS	11
2.1	Dinâmica de Langevin Monte Carlo	11
2.2	Integração Numérica	12
2.3	Passo de Metropolis	13
3	IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS	14
3.1	A implementação	14
3.2	Resultados e Discussão	16
4	CONCLUSÃO	19
	REFERÊNCIAS	20

1 INTRODUÇÃO

De acordo com a mecânica quântica, níveis de energia de uma sistema são descritos pelos autovalores de seu operador hermitiano associado, o hamiltoniano \mathcal{H} . Em situações mais complexas, \mathcal{H} não é completamente descrito pela teoria ou é complicado. Por isto, somado à necessidade do cálculo explícito de grandezas, considera-se usualmente truncamentos do espaço de Hilbert onde opera \mathcal{H} , representado agora por matriz de dimensão finita. Caracterizar o sistema físico é resolver o problema de autovalores $\mathcal{H} \Psi_i = E_i \Psi_i$. Wigner, em seu estudo de núcleos atômicos, foi um dos primeiros a sugerir uma solução alternativa, uma mecânica estatística para o problema de autovalores. Tal teoria descreveria o perfil da estrutura energética nucleica ao invés de detalhar seus níveis, impondo perguntas estocásticas ao invés de determinísticas, que comumente seriam impossíveis de responder. Buscava-se, em algum sentido, uma universalidade, uma resposta que fosse, dada complexidade o suficiente, independente de \mathcal{H} . A teoria foi prontamente seguida por, dentre outros, Porter e Rosenzweig (1), que procederam a validar com dados experimentais as ideias postuladas e por Gaudin, Mehta (2), e Dyson (3), que avançaram na descrição, dentre outros, dos importantes ensembles gaussianos. Esse desenvolvimento e seus desdobramentos veio a ser o que chamamos hoje de Teoria de Matrizes Aleatórias (RMT, *Random Matrix Theory*). Hoje, suas aplicações são extensas em campos de alta complexidade ou com descrição matricial, principalmente quando há estrutura, como matrizes de correlação ou operadores físicos.

Para os ensembles que chamamos invariantes, comuns na física, ao calcular a densidade de autovalores, uma importante analogia se mostra disponível, a de Gases de Coulomb. Pensando os N autovalores das matrizes como partículas de um gás com o devido núcleo de interação e potencial externo, podemos usar de noções físicas para intuir seu comportamento. Usando das estabelecidas leis termodinâmicas é possível ainda derivar, por exemplo, as densidades de autovalores no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Generalizando o potencial aplicado podemos ainda recuperar um ensemble de matrizes que pode não diretamente disponível. Usar de simulações de gases para extrair medidas tem algumas dificuldades. Nem sempre uma solução analítica é possível para as equações diferenciais que descrevem sua dinâmica, que deve ser ergódica. Por isso, recorre-se à simulações numéricas que podem também se mostrar delicadas de tratar. A dinâmica tem alta complexidade temporal pela quantidade de interações entre partículas e as singularidades dificultam a invariância do hamiltoniano na simulação. Ainda assim, essa abordagem permite explorar ensembles exóticos em RMT e será discutida nesse trabalho.

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 variável aleatória de distribuição arbitrária, podemos expressar a densidade de probabilidade conjunta (jpdf, *joint probability density function*) 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 $\hat{O}\hat{O}^* = \mathbb{1}$. Tomamos \hat{O} matriz ortogonal, unitária ou simplética, a depender de \mathbb{S} , o que resulta em autovalores $\lambda \in \mathbb{R}$. Isto pode ser motivado fisicamente sabendo que, para sistemas quânticos invariantes reversíveis, o Hamiltoniano é matriz real simétrica; na presença de campo magnético, o Hamiltoniano é matriz complexa hermitiana; na presença de acoplamento spin-órbita, o Hamiltoniano é simplético (4, Capítulo 2).

Para o subespaço tomado vale que $\overline{M_{i,j}} = M_{j,i}$. Este vínculo reflete na dimensão do subespaço escolhido, com valor dependente de \mathbb{S} . A transformação tomada tem ainda Jacobiano $J(\hat{M} \rightarrow \{\vec{\lambda}, \hat{O}\})$ tal que reescrevemos a jpdf como

$$p(\hat{M})dM = p(M_{1,1}(\vec{\lambda}, \hat{O}), \dots, M_{N,N}(\vec{\lambda}, \hat{O}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\vec{\lambda}, \hat{O}\})) dO \prod_{i=1}^N \lambda_i. \quad (1.1.1)$$

Aqui, ressalta-se 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

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

Ensembles com esta propriedade são denominados invariantes por rotação. Esta escolha implica que quaisquer duas matrizes \hat{M}, \hat{M}' 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 (5, Capítulo 3).

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^β é constante e $\beta = 1, 2, 4$ corresponde respectivamente à $\hat{M} \in M_{\mathbb{R}}(N), M_{\mathbb{C}}(N), M_{\mathbb{H}}(N)$.

Logo, desde que tomemos um ensemble de matrizes aleatórias com a jpdf das entradas apropriado, podemos reescrever a distribuição em função dos autovalores com 1.1.1. Vale ainda observar que, pelo Lema de Weyl, uma jpdf invariante pode ser expressa totalmente por $p(\hat{M}) = \phi(\text{Tr}(F(M)))$ com F função polinomial, ou ainda

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

1.2 Ensembles Gaussianos

Dentre os muitos ensembles em RMT, os Gaussianos são notórios. São eles o *Gaussian Orthogonal Ensemble (GOE)* ($\beta = 1$), *Gaussian Unitary Ensemble (GUE)* ($\beta = 2$) e *Gaussian Symplectic Ensemble (GSE)* ($\beta = 4$). 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

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

Os três ensembles gaussianos compartilham de uma propriedade exclusiva - são os únicos ensembles com entradas independentes e, simultaneamente, jpdf rotacionalmente invariante. 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,

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

De forma análoga, podemos deduzir mais geralmente para $\beta = 1, 2, 4$ que

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

onde $Z_{N,\beta}$ é função de partição canônica para autovalores desordenados*, normalizante da expressão 1.2.1. O fator $\beta_N = \beta N^2$ é pensado como a temperatura inversa. Definimos ainda o Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_N(\vec{\lambda}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i^2}{2} + \frac{1}{N^2} \sum_{i < j} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|}, \quad \lambda_i \mapsto \lambda_i \sqrt{\beta N}.$$

1.3 Gases de Coulomb

Sob as devidas condições, o gás de coulomb p_N (6) é a medida de probabilidade de Boltzmann-Gibbs dada em $(\mathbb{R}^d)^N$ por

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

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

A medida p_N modela um gás de partículas indistinguíveis com carga nas posições $x_1, x_2, \dots, x_N \in \mathbb{S}$ de dimensão d em \mathbb{R}^n *ambient space*. As partículas estão sujeitas a um potencial externo $V: \mathbb{S} \mapsto \mathbb{R}$ e interação por $g: \mathbb{S} \mapsto (-\infty, \infty]$. A temperatura inversa é βN^2 . Assumiremos, para que valha a definição 1.3.1, que V , g e β são tais que a constante de normalização (função partição) $Z_{N,\beta} < \infty \forall N^\dagger$. 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

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

Se lembramos da expressão 1.2.1, perceberemos que, para o devido $V(x)$, podemos tomar $d = 1$ e $n = 2$ para recuperar a medida dos ensembles gaussianos

$$p_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta_N \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}}, \quad \mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{N^2} \sum_{i < j} \log \frac{1}{|x_i - x_j|}. \quad (1.3.2)$$

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.

* Usa-se do fator de contagem de Boltzmann para escrever $Z_{N,\beta} = N! Z_{N,\beta}^{(ord)}$.

† Note que p_N é um modelo de interações estáticas e não há campos magnéticos considerados.

1.4 Medidas de Equilíbrio

O conjunto de pontos no espaço de fase ou ainda, os microestados, determinam um *ensemble estatístico*. De mesma forma, um conjunto de matrizes determina um ensemble em RMT. Podemos relacionar o conjunto de microestados dos autovalores $\{\vec{\lambda}\}$ com as configurações do sistema de N partículas descrito na Seção 1.3. Notando que tratamos do ensemble canônico, um argumento termodinâmico nos indica então que devemos minimizar a energia livre $E_{N,\beta}^V = \log Z_{N,\beta}$.

Consideraremos V sob condições tais que seja denominado um potencial admissível (6). Com isso, se $\mu_V(\vec{\lambda})$ é medida de probabilidade no espaço das possíveis configurações de autovalores, $Z_{N,\beta}$ será finita e existirá $\mu_V^* = \arg \inf \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})$ medida de equilíbrio única no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Para determinar a medida de equilíbrio de 1.3.2 (4), queremos satisfazer o sistema de equações

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

Usaremos o denominado *resolvent*. Considere a função complexa

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

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 λ_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 $\deg V'(z) - 1 = k - 1$. Poderíamos tentar resolver explicitamente essa formula para qualquer N , isso é possível em alguns casos. Contudo, em geral, estaremos interessados na assintótica $N \rightarrow \infty$ de $G_N(z)$, nesse limite temos a transformada de Stieltjes

$$S^{\mu_V}(z) = \int \frac{\mu_V^*(\lambda)}{z - \lambda} d\lambda = V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi_\infty(z)}. \quad (1.4.2)$$

com $\Pi_\infty(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda$. Como consequência da fórmula de Sokhotski-Plemeji, é enunciado o resultado

$$\mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi i} (S_+^{\mu_V} - S_-^{\mu_V}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im } S_+^{\mu_V}(x + i\epsilon). \quad (1.4.3)$$

Restaria, para cada potencial, balancear o sistema de $k + 2$ equações dada por

$$(S^{\mu_V} - V')^2 = (V')^2 - 2\Pi_\infty$$

1.5 Potenciais notáveis

O desenvolvimento feito na seção 1.4 é suficiente para resolver os casos exemplificados aqui, salvo detalhes. Retome a medida 1.3.2. Considere primeiramente o potencial

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

Neste caso, teremos que

$$\text{supp } \mu_V(x) = [-\sqrt{2}, \sqrt{2}], \quad \text{e} \quad \mu_V(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}. \quad (1.5.1)$$

Esse resultado é bem conhecido e a medida encontrada é denominada Semi-Círculo de Wigner. Isso vale para qualquer β , a diferença é notada para N suficientemente pequeno.

Agora, considere o potencial

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

Aqui observaremos, a depender de t , pela primeira vez, a separação do suporte da função. Teremos um ponto crítico em $t = -2$, onde, com $t < -2$, este se separa do intervalo $[-b_t, b_t]$ para $[-b_t, -a_t] \cup [a_t, b_t]$. Definiremos a medida nos dois casos

- $t \geq -2$

$$\text{supp } \mu_V(x) = [-b_t, b_t], \quad \mu_V(x) = \frac{1}{2\pi} (x^2 + c_t^2) \sqrt{b_t^2 - x^2}, \quad (1.5.2)$$

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

- $t < -2$

$$\text{supp } \mu_V(x) = [-b_t, -a_t] \cup [a_t, b_t], \quad \mu_V(x) = \frac{1}{2\pi} |x| \sqrt{(x^2 - a_t^2)(b_t^2 - x^2)}, \quad (1.5.3)$$

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

Por último, tome

$$V(x) = tx^{2m}.$$

Com o mesmo processo, apesar de mais geral, determinamos sua medida

$$\text{supp } \mu_V(x) = [-a, a], \quad \mu_V(x) = \frac{mt}{\pi} \sqrt{a^2 - x^2} h_1(x), \quad (1.5.4)$$

com

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

Essas medidas nos servirão no Capítulo 3.

2 SIMULAÇÕES E ALGORITMOS

A medida μ de Boltzmann-Gibbs descreve o denominado ensemble canônico. Médias sobre suas configurações, microestados, são usadas para inferir informações macroscópicas do sistema. Sistemas dinâmicos que amostram da medida μ são denominados termostatos e são notoriamente difíceis de se construir ergoticamente com processos dinâmicos determinísticos, portanto, uma teoria de equações diferenciais estocásticas foi desenvolvida. Usualmente, para o ensemble canônico, uma escolha natural de processo é a denominada *Langevin Dynamics* (7, Capítulo 6), especialmente sua versão cinética. Muitas vezes as equações usadas não são diretamente integráveis e, por isso, se recorre a métodos numéricos. O caso cinético pode ser separado em duas dinâmicas. Para a integração da primeira, chamada Hamiltoniana, utilizamos o esquema de Verlet. Para a segunda parte, denominada flutuação-dissipação, resolve-se analiticamente por se tratar de processo de Ornstein-Uhlenbeck de variância explícita. Apesar das qualidades dos métodos citados, a discretização pode introduzir instabilidade numérica e, para amenizar seus efeitos, introduz-se um passo de Metropolis (7, Apêndice C). As escolhas supracitadas são descritas em (8) e é denominada *Langevin Monte Carlo*.

2.1 Dinâmica de Langevin Monte Carlo

Nosso objetivo com a simulação é determinar a esperança de uma função de interesse $f(\vec{q})$

$$\langle f \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(\vec{q}_i),$$

onde \vec{q}_i são obtidos por meio da simulação com dada distribuição de Gibbs-Boltzmann. Para fazer nosso modelo ergótico, ou seja, garantir que não restringiremos a dinâmica (e nossas amostras) à um subconjunto do espaço de fase, tomaremos uma dinâmica, um termostato, estocástica. Isso usualmente garante que o sistema convirja para sua medida invariante (única). Um esquema comumente utilizado é o da dinâmica de Langevin*.

Denote a configuração do sistema por (q, p) , onde $q, p \in \mathbb{R}^d$ são respectivamente as posições e momentos generalizados associados às N partículas. Poderíamos enunciar a seguinte equação diferencial para a dinâmica

$$dq_t = -\alpha_N \nabla H_N(q_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dW_t \quad (2.1.1)$$

onde $(W_t)_{t>0}$ é processo de Wiener, $\gamma_N > 0$ é constante de atrito e α_N é escala temporal. Isso seria suficiente e é chamado *Overdamped Langevin*, contudo, tomaremos sua versão

* Poderíamos ter explorado quaisquer outras dinâmicas similares tais como as dinâmicas de *Dissipative Particle* (9) ou *Nose-Hoover* (10).

cinética. Usaremos q como variável de interesse e p para flexibilizar a dinâmica. Considere $U_N: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ energia cinética generalizada tal que $e^{-\beta_N U_N}$ seja lebesgue integrável. Para uma energia da forma $E(q, p) = \mathcal{H}(q) + U(p)$, escreve-se (11) a dinâmica de Langevin para o processo de difusão em $\mathbb{R}^{dN} \times \mathbb{R}^{dN}$ como a solução para a equação estocástica

$$\begin{cases} dq_t = \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt, \\ dp_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dW_t. \end{cases} \quad (2.1.2)$$

onde β_N , temperatura inversa e \mathcal{H} são como em 1.3.2. Essa dinâmica admite o gerador infinitesimal

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\mathcal{H}} + \mathcal{L}_U, \quad \mathcal{L}_{\mathcal{H}} = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q) \cdot \nabla_p + \alpha_N \nabla U_N(p) \cdot \nabla_q, \quad \mathcal{L}_U = \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N} \Delta_p - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(p) \cdot \nabla_p.$$

Denomina-se $\mathcal{L}_{\mathcal{H}}$ a parte Hamiltoniana e \mathcal{L}_U a parte de flutuação-dissipação. Tomaremos $U_N(p) = \frac{1}{2}|p|^2$ tal que $U_N(p)$ é energia cinética usual e $(W_t)_{t>0}$ é processo browniano. Para simular o processo (p_t, q_t) integramos 2.1.2, contudo, sabemos que isso pode não ser possível, o que nos leva a recorrer a métodos numéricos para amostragem.

2.2 Integração Numérica

Para integrar \mathcal{L} , operaremos separadamente sobre $\mathcal{L}_{\mathcal{H}}$ e \mathcal{L}_U . A dinâmica hamiltoniana é reversível, o que é importante no algoritmo para garantir que mantém-se a medida invariante. Um esquema ter invariância de \mathcal{H} significa que, idealmente, a trajetória será em uma hiper-superfície de constante densidade de probabilidade. Ainda mais, a dinâmica preserva o volume do espaço de fase, de forma que não precisamos calcular o jacobiano da matriz que define a transformação da dinâmica. Essas duas propriedades podem ser mantidas na discretização quando utilizamos do método de Verlet (8)(7, Capítulo 2). A dinâmica deveria também manter o Hamiltoniano constante, contudo, discretizada, podemos garantir somente que ele se mantenha quase constante. Para lidar com esse fato, discute-se a implementação de um passo de Metropolis na seção 2.3. Para $\Delta t > 0$, a partir do estado (q_k, p_k) , o esquema lê-se

$$\begin{cases} \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} = \tilde{p}_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(q_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}. \end{cases} \quad (2.2.1)$$

Um esquema análogo é possível para energias cinéticas generalizadas (11). Outros métodos tais quais *Euler-Maruyama* (EM) (7, Capítulo 7) poderiam ser utilizados para o mesmo fim. Nos métodos que temos interesse, o erro associado à discretização deve ir à zero quando Δt vai à zero. Para EM, o erro por passo, local, é da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ e o erro

final, global, $\mathcal{O}(\Delta t)$, Já para o esquema escolhido, temos erro local de $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ e global de $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Essa diferença vem do fato da discretização usada ser reversível (12, Capítulo 5).

Nos resta integrar \mathcal{L}_U , o qual, para a energia cinética usual, consiste em um processo de Ornstein-Uhlenbeck de variância explícita, ou ainda,

$$dx_t = -\alpha_N x_t dt + \sigma dB_t,$$

onde $\alpha_N, \sigma > 0$ são parâmetros e B_t é processo browniano. Este processo também mantém a medida invariante. Note que, para $\alpha_N > 0$ somente substituiremos parcialmente o momento das variáveis e, se $\alpha_N, \gamma_N \rightarrow 0$ com $\alpha_N \gamma_N = 1$, retomariamos a dinâmica de 2.1.1. Este processo não seria muito melhor, contudo, do que um *Random Walk Metropolis* (12, Capítulo 5) já que o momento seria completamente substituído. De qualquer forma, \mathcal{L}_U pode ser integrado a partir da fórmula de Mehler para obter

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}. \quad (2.2.2)$$

Onde G_k é variável aleatória Gaussiana usual.

2.3 Passo de Metropolis

Muitos algoritmos utilizam de um passo de seleção para estabilizar sua dinâmica e otimizar a convergência e a amostragem da variável de interesse[†]. Partindo dos esquemas da Seção 2.2, consideraremos que temos uma proposta \tilde{q}_{k+1} de estado. Para o método de Metropolis, um importante aspecto é manter a razão de rejeições baixa para não atrapalhar a eficiência do programa, o que influencia no tamanho do passo temporal decidido. Pode ser mostrado que Δt é ideal quando é da ordem de $N^{-\frac{1}{4}}$ (8), tornando o esquema interessante pela escalabilidade de N .

Propõe-se então que, a partir da proposição de estado \tilde{q}_{k+1} gerada pelo esquema anterior, se calcule a probabilidade

$$P_k = 1 \wedge \frac{K(\tilde{q}_{k+1}, q_k) e^{-\beta_N E_N(\tilde{q}_{k+1})}}{K(q_k, \tilde{q}_{k+1}) e^{-\beta_N E_N(q_k)}}, \quad (2.3.1)$$

onde o núcleo $K(x, y)$ é simétrico (8) para o caso do *Langevin Monte Carlo* e, por se cancelar, não será discutido adiante. Atribua agora às novas coordenadas generalizadas (q_{k+1}, p_{k+1}) valor da seguinte forma

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) & \text{com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) & \text{com probabilidade } 1 - P_k; \end{cases} \quad (2.3.2)$$

De forma a garantir a conservação da energia, que é uma preocupação na discretização da dinâmica, e otimizar a exploração do espaço de fase.

[†] Como o *Metropolis-Adjusted Langevin Algorithm* (MALA) (7, Anexo C)

3 IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS

Consideraremos N partículas em um subespaço S de dimensão d em \mathbb{R}^n de forma que nosso espaço de fase Ω será de dimensão Nd . O campo externo é $V : S \mapsto \mathbb{R}$ e o núcleo de interação entre as partículas é função $W : S \mapsto (-\infty, \infty]$. Reunindo os resultados do Capítulo 2 sob essas condições, temos o algoritmo, descrito em (8), completo. Dada uma condição inicial (q_k, p_k) , vetores de posição e velocidade generalizadas, para cada $k \geq 0$, realizamos os seguintes passos

1. Baseado em 2.2.2, atualize a \tilde{p}_k com

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}; \quad (3.0.1)$$

2. Utilizando do esquema de 2.2.1, calcule os termos

$$\begin{cases} \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} = \tilde{p}_k - \nabla H_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} - \nabla H_N(q_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}; \end{cases} \quad (3.0.2)$$

3. Pela definição 2.3.1, tome

$$P_k = 1 \wedge \exp \left\{ -\beta \left(H_N(\tilde{q}_{k+1}) + \frac{\tilde{p}_{k+1}^2}{2} - H_N(q_k) - \frac{\tilde{p}_k^2}{2} \right) \right\}; \quad (3.0.3)$$

4. Defina, a partir de 2.3.2,

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) \text{ com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) \text{ com probabilidade } 1 - P_k; \end{cases} \quad (3.0.4)$$

3.1 A implementação

Tomaremos o subespaço $\mathbb{S} = \mathbb{R}^d$ com $d = 1, 2$. Usaremos autovalores na reta para validar o funcionamento do algoritmo nos potenciais já discutidos e exploraremos uma distribuição em \mathbb{R}^2 , mais complexa. Consideraremos um núcleo de interação $W = g$ coulombiano em $n = 2$. Por isso, retomamos medida da forma 1.3.1 usual de gases de coulomb. A esquemática da implementação se encontra na Figura 1. Podemos entender melhor a relação entre as sub-rotinas e funções em referência à Tabela 1.

Alguns detalhes são importantes de notar. O gerador de variáveis aleatórias gaussianas, necessário em 3.0.1 foi implementado utilizando do algoritmo de *Box-Muller*. Além disso, o ajuste de variáveis é notoriamente um dos aspectos complicados do algoritmo

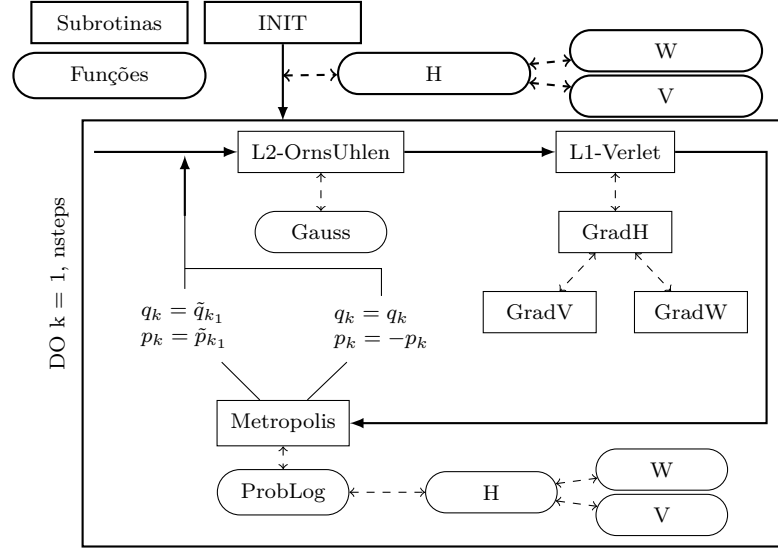


Figura 1 – Implementação do algoritmo *Langevin Monte Carlo* (LMC). Setas sólidas indicam o fluxo do programa. Setas tracejadas indicam chamadas de funções dentro do bloco. A descrição das funções se encontra na Tabela 1.

Nome	Descrição
Init	Modifica p_k vetor $[N \times m]$, global, uniforme no cubo em R^d e q_k, G_H , vetores $[N \times m]$, globais, nulos.
L1-OrnsUhlen	Modifica \tilde{p}_k , vetor $[N \times m]$, global, por \mathcal{L}_U segundo 3.0.1.
L2-Verlet	Modifica $\tilde{p}_{k_1}, \tilde{q}_{k_1}$ vetores $[N \times m]$, globais, por \mathcal{L}_H segundo 3.0.2.
GradH	Modifica G_H , vetor $[N \times m]$, global, gradiente do Hamiltoniano.
GradW	Modifica G_{W_i} , escalar, global, gradiente de W núcleo de interação.
GradV	Modifica G_{V_i} , escalar, global, gradiente de V potencial.
ProbLog	Retorna P_K , escalar, local, probabilidade de aceite de 3.0.3.
H	Retorna H , escalar, local, hamiltoniano em k .
V	Retorna V_i , escalar, local, potencial de q_i .
W	Retorna $W_{i,j}$, escalar, local, interação entre q_i, q_j
Metropolis	Modifica p_k, q_k , vetores $[N \times m]$, globais por 3.0.4.

Tabela 1 – Descrição das funções e subrotinas utilizadas na implementação do programa.

implementado. Precisamos de uma holística par ajustar $\Delta t, \alpha_N$ e γ_N . No escopo deste programa, Δt e α_N desempenham o mesmo papel e, por isso, toma-se $\alpha_N = 1$ e varia-se Δt . Seguindo a recomendação de (12, Capítulo 5), tomaremos $\Delta t = \Delta \tilde{t} + X$, onde X é variável aleatória de média 0 e variância σ^2 pequena. Essa escolha ajuda a acelerar a convergência e melhor garante ergodicidade. Lembra-se ainda que $\Delta \tilde{t}$ é ideal na ordem de $N^{-\frac{1}{4}}$, isto é, é pequeno o suficiente para manter a razão de aceite do passo de Metropolis alta e grande o suficiente para não desacelerar a convergência do algoritmo. Já γ_N definirá o quanto substituiremos o momento anterior das partículas será relevante em relação ao movimento browniano. Aqui, sabemos que tornar η próximo demais de 0, ou de 1 para todos efeitos, desacelera intensamente a convergência. Faremos, em geral, com que $\gamma_N \alpha_N \Delta t \approx 0.5$.

3.2 Resultados e Discussão

Simular gases de coulomb é especialmente interessante quando não há modelos de matrizes conhecidos, disponíveis ou simples para o \mathcal{H} definido. Podemos, com a simulação de tais gases, calcular a média da função densidade das partículas, ou autovalores. Alternativamente, quando há modelos disponíveis em matrizes aleatórias essa medida poderia ser tirada diretamente do calculo de seus autovalores.

A família de ensembles gaussianos são modelos que mostramos ser bem representados como matrizes em 1.2. Retorne os resultados da Seção 1.5. Tomar a medida dos ensembles gaussianos é o equivalente na simulação descrita a tomar

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 1, 2, 4. \quad (3.2.1)$$

O resultado da simulação para a configuração 3.2.1 é apresentado na Figura 2. Apresentamos por contraste, na coluna da esquerda, os resultados para $N = 10$, da densidade gerada pela simulação equivalente com matrizes para os três modelos ($\beta = 1, 2, 4$). Na coluna central, representa-se a comparação da simulação com o Semi-Círculo de Wigner, configuração de equilíbrio para os três modelos quando N é grande o suficiente. Note que os valores foram escalados por $\sqrt{2\beta}$ para melhor visualização. Finalmente, na coluna da direita apresentamos a distribuição do maior autovalor λ_{max} . Um resultado importante (13) enuncia que existem $z_N^{(\beta)}$ e $s_N^{(\beta)}$ tais que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\beta, N, V} \left(\frac{\lambda_{max} - z_N^{(\beta)}}{s_N^{(\beta)}} \leq x \right) = F_\beta(x),$$

onde $F_\beta(x)$ é a densidade acumulada de Tracy-Widow. Mostraremos a concordância desse resultado com a simulação na coluna da direita. Observa-se que os dois modelos à esquerda concordam bem na estimativa da medida para o N usado. No centro, é possível notar que a medida de equilíbrio esperada, o Semi-Círculo de Wigner, é aproximada rapidamente pelo aumento de partículas no sistema. A distribuição do autovalor máximo é mais delicada, contudo, discordâncias em ordem de convergência são razoavelmente influentes na largura da curva e não são aparentes nos resultados.

Podemos retomar também as descrições dos potenciais mônico em 1.5.4 e os dois regimes do potencial quártico, 1.5.2 e 1.5.3. Respectivamente, estes modelos equivalem a tomar na simulação os parâmetros

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = t|x|^{2m}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (3.2.2)$$

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^4}{4} + t \frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (3.2.3)$$

O caso mônico se reduz ao gaussiano se $m = 1$. Os resultados para ambos os potenciais estão explicitados na Figura 3 para alguns parâmetros interessantes de t e m .

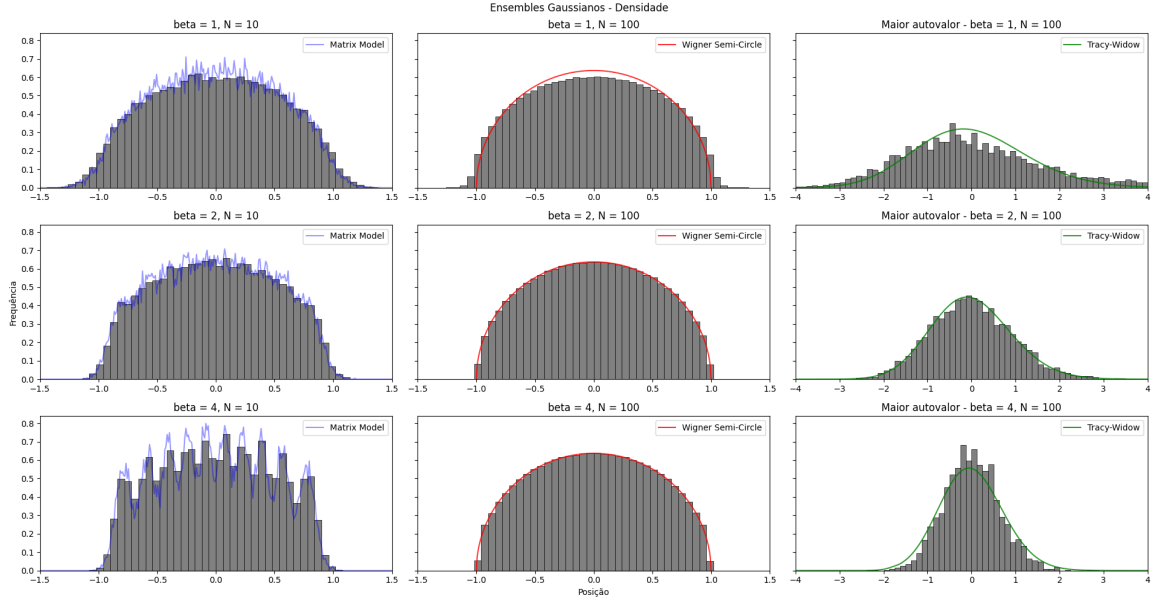


Figura 2 – Densidade para ensembles gaussianos, 3.2.1. Tomou-se $\Delta t = 0.3$ e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 1000 iterações a partir de $nsteps/5$. À esquerda da figura, em azul, a densidade da amostragem de $4 \cdot 10^3$ matrizes do ensemble. No centro, o Semi-Círculo de Wigner, medida de equilíbrio. Na direita, apresenta-se a densidade de λ_{max} normalizado e sua mediada esperada.

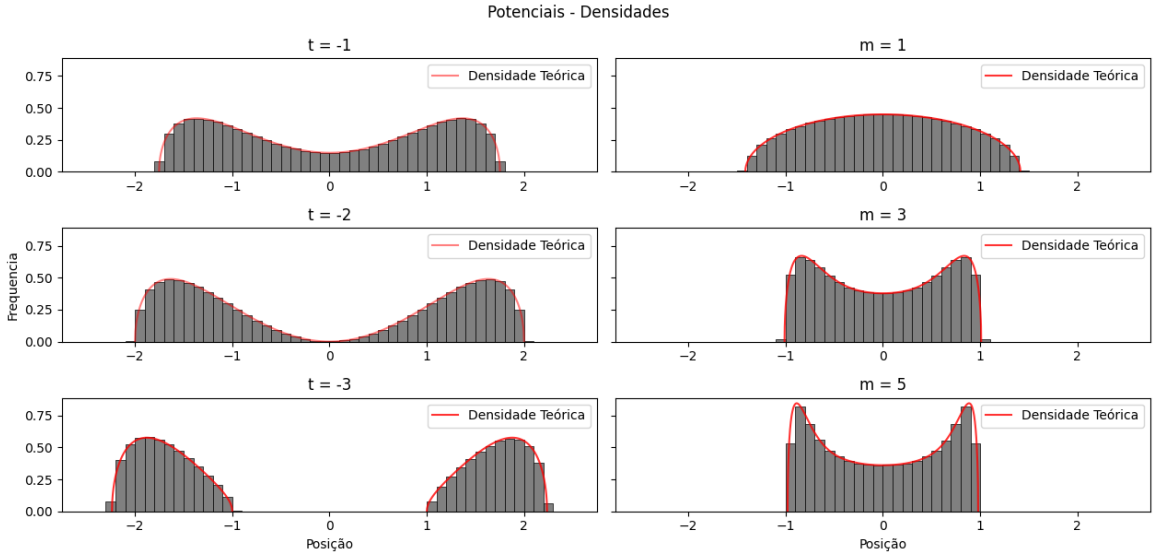


Figura 3 – Potencial Quártico 3.2.3 e Mônico 3.2.2, respectivamente à esquerda e direita. Tomou-se $\Delta t = 0.1$, $N = 100$, e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos. Registra-se a cada 1000 iterações a partir de $nsteps/5$. No Quártico, simula-se $t = -1, -2, -3$. No Mônico fixa-se $t = 1$ e simula-se $m = 1, 3, 5$.

Novamente as medidas experimentais parecem convergir para a medida teórica enunciada em todas as configurações testadas. Contudo, isso é explorado e pode ser observado igualmente, com exceção do Mônico, em (8). Em uma situação menos explorada, considere a seguinte configuração de potencial e autovalores complexos ($\mathbb{R}^d = \mathbb{R}^2$) e a

representação das medidas simuladas para alguns valores de interesse de t, a na Figura 4,

$$d = 2; n = 2; V(z) = |z|^{2a} - \text{Re}\{tz^a\}; W(x) = g(x) = \log|x|; \beta_N = \beta N^2; \beta = 2. \quad (3.2.4)$$

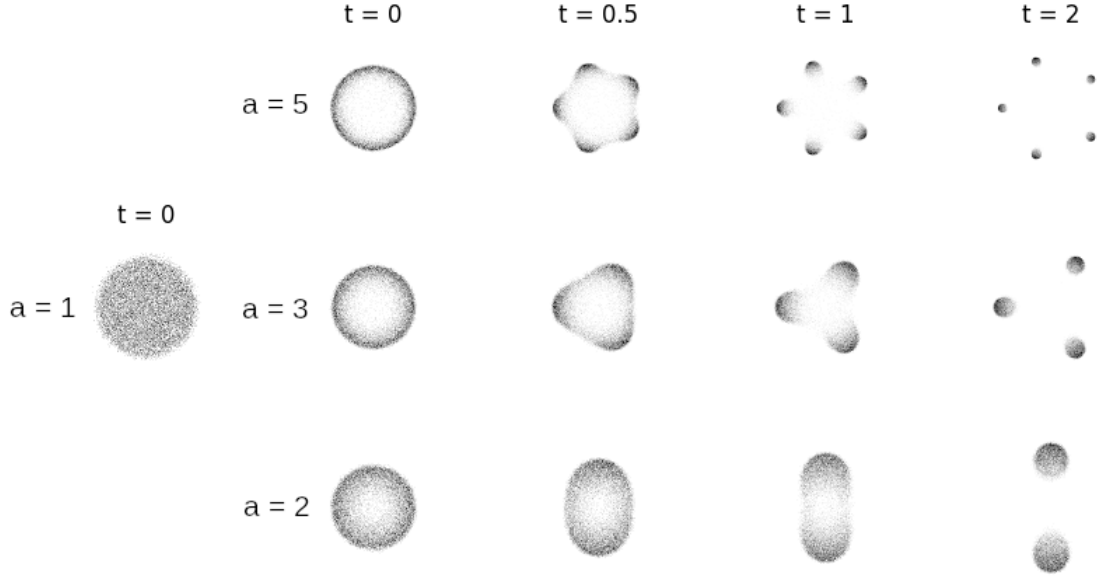


Figura 4 – Medidas referentes à configuração 3.2.4. Tomou-se $\Delta t = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 500 iterações a partir de $nsteps/5$.

É previsto para esse modelo uma transição de regime, uma separação da medida de equilíbrio, para $t = \sqrt{\frac{1}{a}}$ (?). A simulação replicar o comportamento esperado é um bom indicador de que é possível estudar a medida de tal ensemble numericamente, que pode ser explorado posteriormente. Outro fator que corrobora o bom comportamento do modelo é a medida uniforme quando $a = 1$, também prevista pela teoria.

No Capítulo 1 é notado que os modelos gaussianos são os únicos em RMT com invariância por rotação e independência das entradas simultaneamente. Gerar matrizes de outros modelos invariantes dependeria de gerar entradas correlacionadas já que, se tratando de ensembles invariantes, ou seja, de medida igual para quaisquer M, M' tais que $\hat{M} = \hat{U} \hat{M}' \hat{U}^{-1}$, podemos simular \hat{U} autovetores uniformemente do espaço correspondente. Isso pois sabemos do teorema espectral que, para as matrizes tomadas, vale a decomposição $\hat{M} = \hat{U} \hat{D} \hat{U}^{-1}$. Para reconstruir uma elemento do ensemble de interesse nos resta replicar a medida de autovalores, \hat{D} . Isso, de forma interessante, pode ser feito pela simulação descrita de Gases de Coulomb, que replica a medida dos ensemble.

Outra possibilidade interessante da replicação numérica dessas medidas é que, minimizada a energia livre $E_{N,V}$, podemos fazer estimativas para constantes da expansão para $\log(Z_{\beta_N})$ proposta em trabalhos recentes, como em (14). Essas estimativas podem dar uma ideia geral do comportamento dessas constantes, de relevante significado físico, para sistemas de interesse.

4 CONCLUSÃO

Descrevemos os fundamentos da Teoria de Matrizes Aleatórias, principalmente as ideias de ensembles e medida, explicitando as suas categorizações em invariantes por rotação e de entradas independentes. Com essas ideias, explicitamos os modelos gaussiano para $\beta = 1, 2, 4$, importantes em RMT pela sua característica única de pertencer à ambas categorias, de invariância e independência. Usando desse exemplo podemos entender os principais resultados sobre medidas dos ensembles invariantes e sobre a medida de autovalores destas matrizes.

Introduzimos a ideia de um Gás de Coulomb e como esta noção pode ser relacionada com os ensembles de matrizes aleatórias por uma escolha adequada de potencial e núcleo de interação. Usando da ideia de partículas para pensar na dinâmica dos autovalores intuímos as ideias de minimização da energia livre para identificar o equilíbrio. Com isso, mostramos os principais resultados que possibilitam o cálculo explícito da medida de autovalores para o caso gaussiano e mais dois ensembles que usaremos como exemplo nas simulações que seguem.

Com a analogia, percebemos que muitas vezes métodos numéricos são necessários para a solução das equações de movimento de descrevem a dinâmica das partículas descritas. Discutimos os principais métodos e principalmente as características do algoritmo implementado, justificando seu uso e propondo sua forma final apresentada também neste trabalho.

Por fim, apresentamos os resultados. Simulações de medidas para os ensembles já descritos anteriormente, todos com autovalores reais, e um último ensemble com autovalores complexos, menos descrito. Para os efeitos deste trabalho, foi encontrada boa concordância das medidas simuladas com a descrição teórica atual e com os modelos de matriz testados. Principalmente para o ensemble de autovalores complexos, este resultado é de interesse visto que apresenta uma forma alternativa de simulação e, também, de análise numérica destes modelos.

Finalmente, entendemos os resultados deste estudo como uma descrição e validação de métodos conhecidos de simulação e estudo de matrizes aleatórias, ainda que atuais. Contudo, vê-se extensões da utilização do método para estudo numérico de importantes resultados com pouca descrição teórica.

REFERÊNCIAS

- 1 ROSENZWEIG, N.; PORTER, C. E. "repulsion of energy levels" in complex atomic spectra. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 120, p. 1698–1714, Dec 1960.
- 2 MEHTA, M.; GAUDIN, M. On the density of eigenvalues of a random matrix. **Nuclear Physics**, v. 18, p. 420–427, 1960. ISSN 0029-5582.
- 3 DYSON, F. J. Statistical theory of the energy levels of complex systems. i. **Journal of Mathematical Physics**, v. 3, n. 1, p. 140–156, 01 1962. ISSN 0022-2488.
- 4 POTTERS, M.; BOUCHAUD, J. **A First Course in Random matrix Theory: for Physicists, Engineers and Data Scientists**. Cambridge, Inglaterra: Cambridge University Press, 2020. ISBN 9781108488082.
- 5 EDELMAN, A. **Eigenvalues and Condition Numbers of Random Matrices**. 1984. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 1984.
- 6 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.
- 7 LEIMKUHLER, B.; MATTHEWS, C. **Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods**. Cham, Suíça: Springer International Publishing, 2015. (Interdisciplinary Applied Mathematics). ISBN 9783319163758.
- 8 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.
- 9 ESPAÑOL, P.; WARREN, P. Statistical mechanics of dissipative particle dynamics. **Europhysics Letters**, v. 30, n. 4, p. 191, may 1995.
- 10 HOOVER, W. G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 31, p. 1695–1697, Mar 1985.
- 11 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.
- 12 BROOKS, S. *et al.* **Handbook of Markov Chain Monte Carlo**. [S.l.: s.n.]: CRC Press, 2011. (ISSN). ISBN 9781420079425.
- 13 TRACY, C.; WIDOM, H. The distributions of random matrix theory and their applications. *In: New Trends in Mathematical Physics*. Dordrecht: Springer Netherlands, 1970. p. 753–765. ISBN 978-90-481-2809-9.
- 14 BYUN, S.-S.; KANG, N.-G.; SEO, S.-M. Partition functions of determinantal and pfaffian coulomb gases with radially symmetric potentials. **Communications in Mathematical Physics**, Springer Science and Business Media LLC, v. 401, n. 2, p. 1627–1663, mar. 2023. ISSN 1432-0916.