

No estudo de Matrizes Aleatórias

PIMENTA, J. V. A.

3 de março de 2024

Resumo

Resumo dos estudos de Iniciação Científica em Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb.

Conteúdo

1	Introdução	3
1.1	Física e Mecânica Estatística	3
1.1.1	Entropia de Shannon	3
1.1.2	O ensemble Micro-Canônico	5
1.1.3	O ensemble Canônico	6
1.1.4	O ensemble Grão Canônico	8
2	Procura-se autovalores	11
2.1	Porquê exponencial?	12
2.1.1	Shannon-Quem?	12
2.2	Independência ou Morte	13
2.3	Uma medida à Hermitiana	14
3	Movimento Browniano	16
3.1	Processo Pontual	16
3.1.1	Poisson & fries	16
3.1.2	Função Correlação	17
3.1.3	Pontual Determinantal	17
3.2	Emsemble Biortogonal	18
3.3	Karlin-McGregor	18
3.3.1	O teorema	18
3.3.2	Consequências	20
3.4	Simulações Gerais	23
3.4.1	Tracy Widom	25
3.4.2	O diamante Asteca	32
4	Coulombolas! Gases Aleatórios	40
4.1	Hamiltonianozinho	41
5	Simulações e o Artigo	43
5.1	Introdução Teórica	43
5.1.1	Gases de Coulomb	43
5.1.2	Log-Gases	44
5.1.3	Medidas de Equilíbrio	44
5.2	Simulando Coulomb-Log Gases	44
5.2.1	Os típicos	44
5.2.2	O Híbrido de Monte Carlo	45
5.3	Validando a implementação	46
5.3.1	Validando nosso programa	46
5.3.2	Outras distribuições	46
5.3.3	Paralelização	46

A	Algoritmo Artigo	50
B	Transformação Legendre	59
	B.1 Tangentes	59
	B.2 Otimização	59
C	Soma Assintóticas	61
D	Det Vandermonde	62

Capítulo 1

Introdução

1.1 Física e Mecânica Estatística

Estaremos lidando o tempo todo no nosso estudo com funções partições, de alguma forma, compartilhada com a física. Entenderemos um pouco mais sobre os desenvolvimentos dos ensembles na termodinâmica.

Em termos gerais os ensembles são sistemas aos quais se impõe vínculos arbitrários. Tanto matematicamente, quanto fisicamente. Da entropia de Shannon podemos deduzir as funções partições apenas adicionando relações de vínculo com multiplicadores de Lagrange. Dos sistemas físicos, usaremos um banho que possa atuar como vínculo.

1.1.1 Entropia de Shannon

Podemos fazer algo um pouco mais matemático. Definiremos a entropia de Shannon, que dá origem às expressões entrópicas gerais para qualquer ensemble.

$$\mathcal{S} = -k_b \sum_i p_i \log p_i$$

Um vínculo

Se impormos um vínculo do tipo

$$\sum_i p_i = 1$$

Podemos usar os multiplicadores de Lagrange para realizar a maximização da nossa função. Pela definição, escrevemos:

$$S(p_i, \lambda) \equiv k_b \sum_{i=1}^N p_i \log(p_i) - \lambda \left(\sum_{i=1}^N p_i - 1 \right)$$

Com diferencial

$$\delta S = -k_b \sum_{i=1}^N \left(p_i \log p_i + \frac{p_i}{p_i} \delta p_i \right) - \lambda \sum_{i=1}^N \delta p_i$$

Resolveremos agora o sistema

$$\begin{cases} \delta S = 0 \\ \sum_i p_i = 1 \end{cases}$$

ou seja,

$$\begin{cases} -k_b(\log p_i + 1) - \lambda \\ \sum_i p_i = 1 \end{cases}$$

Note que $p_i = \text{cte } \forall i$. Teremos então $p_i = \frac{1}{N}$. A entropia neste caso será

$$S(p_i^*) = -k_b \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{N} \log \frac{1}{N} \right) = k_b \log N$$

Dois vínculos

Faremos agora a implicação de um novo vínculo

$$\sum_{\sigma} p_{\sigma} E_{\sigma} = U$$

Desenvolvendo a equação

$$S(p_i, \lambda_1, \lambda_2) \equiv k_b \sum_{i=1}^N p_i \log(p_i) - \lambda_1 \left(\sum_{i=1}^N p_i - 1 \right) - \lambda_2 \left(\sum_{\sigma} p_{\sigma} E_{\sigma} - U \right)$$

Chegaremos no sistema

$$\begin{cases} -k_b(\log p_i + 1) - \lambda_1 - \lambda_2 E_{\sigma} = 0 \\ \sum_{\sigma} p_i = 1 \\ \sum_{\sigma} p_{\sigma} E_{\sigma} = U \end{cases}$$

E finalmente, da primeira equação tiramos

$$p_{\sigma} = e^{A E_{\sigma} + B} = M e^{-\beta E_{\sigma}}$$

De forma que podemos reescrever

$$1 = \sum_{\sigma} M e^{-\beta E_{\sigma}} = M \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}}$$

Onde nomearemos $M = \frac{1}{\sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}}} = \frac{1}{Z}$ **função partição**. Faltava apenas definir β em

$$p_{\sigma} = \frac{e^{-\beta E_{\sigma}}}{Z}$$

Para β podemos aplicar o último vínculo (da temperatura térmica)

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\sigma} p_{\sigma} E_{\sigma} = \sum_{\sigma} \left(\frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\sigma}} \right) E_{\sigma} = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} E_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}} \\ &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}} \right) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial(\log Z)}{\partial \beta} \end{aligned}$$

De alguma forma esta equação transcendental nos define β .

Três vínculos

Introduziremos um terceiro novo vínculo

$$\sum_{\sigma} p_{\sigma} N_{\sigma} = N$$

Da mesma forma, teremos que desenvolver a equação

$$S(p_i, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) \equiv k_b \sum_{i=1}^N p_i \log(p_i) - \lambda_1 \left(\sum_{i=1}^N p_i - 1 \right) - \lambda_2 \left(\sum_{\sigma} p_{\sigma} E_{\sigma} - U \right) - \lambda_3 \left(\sum_{\sigma} p_{\sigma} N_{\sigma} - N \right)$$

Do sistema associado aos vínculos de Lagrange

$$\begin{cases} -k_b(\log p_i + 1) - \lambda_1 - \lambda_2 E_{\sigma} - \lambda_3 N_{\sigma} = 0 \\ \sum_{\sigma} p_i = 1 \\ \sum_{\sigma} p_{\sigma} E_{\sigma} = U \\ \sum_{\sigma} p_{\sigma} N_{\sigma} = N \end{cases}$$

Da primeira equação tiramos

$$p_{\sigma} = e^{AE_{\sigma} + BN_{\sigma} + C} = M e^{-\beta E_{\sigma} + \beta \mu N_{\sigma}}$$

De forma que podemos reescrever

$$1 = \sum_{\sigma} M e^{-\beta E_{\sigma} + \beta \mu N_{\sigma}} = M \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma} + \beta \mu N_{\sigma}}$$

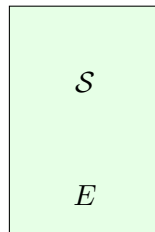
Novamente nomearemos Z em

$$M = \frac{1}{\sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma} + \beta \mu N_{\sigma}}} = \frac{1}{Z}$$

a função partição. As outras duas equações nos definem β e μ .

1.1.2 O ensemble Micro-Canônico

O ensemble Micro-Canônico devera ser o mais simples que desenvolveremos. Para este caso a energia é constante e todo microestados devem ser igualmente prováveis pela hipótese ergótica.



Sabemos então que vamos querer minimizar a entropia usual com

$$U(S, V, N) \tag{1.1}$$

Com

$$dU = TdS - PdV + \mu N$$

e, especialmente

$$\rho_E = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma} = \Omega(E) \rho_{\sigma}$$

Ou ainda, se $\Omega(E)$ é a quantidade de microestados,

$$\rho_{\sigma} = \frac{1}{\Omega(E)}$$

De forma que nossa função partição será

$$Z = \sum_{\sigma} \frac{1}{\Omega(E)} = 1$$

E em relação a energia

$$Z = \sum_E \frac{1}{\Omega(E)} \Omega(E) = \exp \left\{ \beta T k_b \log \frac{1}{\Omega(E)} \right\} \Omega(E)$$

Finalmente

$$\log(Z) = 0 = -\frac{S}{k_b} + \log(\Omega(E))$$

Ou melhor

$$S = k_b \log(\Omega(E)) \quad (1.2)$$

1.1.3 O ensemble Canônico

Quando tratamos destes sistemas no ensemble canônico a energia interna não mais será minimizada no nosso sistema termalizado. Introduzimos uma nova grandeza chamada Energia Livre de Helmholtz (F), definida como a transformada de Legendre (discutida no Apêndice B) da energia interna em relação à entropia, ou seja

$$U(S, V, N) \mapsto F(T, V, N) \quad (1.3)$$

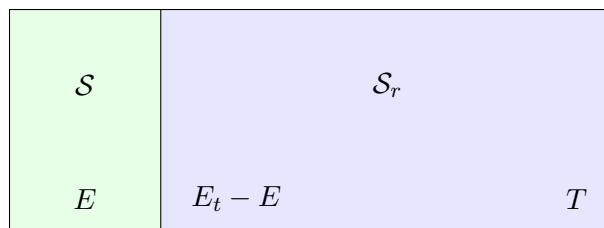
ou ainda mais especificamente

$$F(T, V, N) = U(S(T, V, N), V, N) - TS(T, V, N)$$

Note ainda as diferenciais

$$\begin{aligned} dU &= TdS - PdV + \mu dN \\ dF &= -SdT - PdV + \mu dN \end{aligned}$$

Para o desenvolvimento da função partição estamos atentos aos requisitos do ensemble canônico. Um sistema termalizado por um banho térmico. Nosso sistema completo pode ser representado



Considere que os sistemas estão em contato térmico e o sistema completo, junto com o banho é um sistema isolado de energia E_t . Sabemos que a probabilidade de uma energia no nosso sistema termalizado (ρ_E) é expressa:

$$\rho_E = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma} = \Omega(E) \rho_{\sigma}$$

Onde note, ρ_{σ} é a probabilidade de, dada uma temperatura, um microestado possível. Note por outro lado que podemos expressar:

$$\rho_E = \frac{\Omega(E) \Omega_r(E_t - E)}{\sum_i \Omega(E_i) \Omega_r(E_t - E)}$$

Note que isso é nada mais do que dizer que os microestados são equiprováveis e basta uma contagem (normalizada) para definir a probabilidade. Neste sentido podemos também escrever:

$$\rho_{\sigma} \propto \Omega_r(E_t - E)$$

Isso é, quanto mais formas o reservatório possa se organizar para determinada energia, mais provável é o microestado associado à energia de \mathcal{S} .

$$\begin{aligned} \rho_{\sigma} &\propto e^{\beta T K_b \log(\Omega_r(E_t - E))} \\ &\propto e^{\beta T (\mathcal{S}_r(E_t) - \frac{E}{T})} \\ &\propto e^{-\beta E} e^{\beta T \mathcal{S}_r(E_t)} \\ &\propto e^{-\beta E} \end{aligned}$$

Onde fizemos a expansão de $k_b \log(\Omega_r(E_t - E))$ (entropia) em Taylor (apesar de que, em realidade, apenas $\frac{E}{E_t}$ é pequeno, não necessariamente E) e obtivemos

$$\mathcal{S}_r(E_t - E) \approx \mathcal{S}_r(E_t) + \left(\frac{\partial \mathcal{S}_r}{\partial E} \right)_{E=E_t} (-E)$$

Onde

$$\left(\frac{\partial \mathcal{S}_r}{\partial E} \right)_{E=E_t} = \frac{1}{T}$$

Um sistema termalizado vai querer minimizar essa nova grandeza da energia livre de Helmholtz. Em todo caso iniciaremos com a expressão já deduzida da equação de partição

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}}$$

Que pode ser reescrito em termos de uma soma na energia

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_E e^{-\beta E} \Omega(E) \\ \mathcal{Z} &= \sum_E e^{-\beta T K_b \log(\Omega(E))} \Omega(E) \end{aligned}$$

Podemos argumentar que $K_b \log(\Omega(E)) = S(E)$ e usaremos o logaritmo de somas assintóticas (discutido no Apêndice C) para terminar o desenvolvimento. Note

$$\log(\mathcal{Z}) \approx \log\left(\max_x [e^{-\beta(E-TS(E))}]\right)$$

$$\log(\mathcal{Z}) \approx \log\left(e^{-\beta \min_E ((E-TS(E)))}\right)$$

Onde podemos reconhecer pela transformada de Legendre o termo referente à Energia livre de Helmholtz. Tendo assim

$$\log(\mathcal{Z}) \approx -\beta F$$

$$F = -K_b T \log(\mathcal{Z}) \quad (1.4)$$

1.1.4 O ensemble Grão Canônico

Supomos agora nosso sistema novamente controlado por um banho térmico. Desta vez permitiremos a troca de temperatura e partículas. Definiremos uma energia livre tal que $U(S, V, N) \mapsto \Phi(T, V, \mu)$. Chamaremos esta energia livre de Grão Potencial ou Potencial de Landau. Como sempre, definiremos o potencial como uma transformada de Legendre sob a Energia

$$\Phi = U - TS - \mu N \quad (1.5)$$

$$\Phi(T, V, \mu) = U(S(T, V, \mu), V, N(T, V, \mu)) - TS(T, V, \mu) - \mu N(T, V, \mu)$$

e é claro, na diferencial

$$d\Phi = dU - Tds - SdT - \mu dN - Nd\mu$$

Onde lembramos que $d\Phi = TdS - PdV + \mu dN$ de forma que

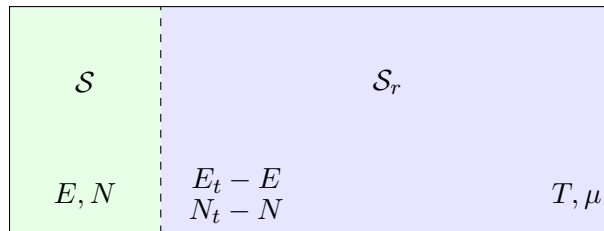
$$d\Phi = -SdT - PdV - Nd\mu$$

Ou seja,

$$S = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial T} \right|_{V, N}$$

$$N = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right|_{T, V}$$

Tratamos do seguinte sistema,



Sabemos afirmar que $p_\sigma \propto \Omega_R(E_t - E, N_t - N)$, ou seja, cada microestado do nosso sistema é proporcional às formas que o banho pode se arranjar dado (E, N) . Ou seja

$$\begin{aligned}
p_\sigma &= \exp \{ \log [\Omega_R(E_t - E, N_t - N)] \} \\
&\propto \exp \left\{ \frac{1}{k_b} \left[k_b \log (\Omega_R(E_T, N_T)) - E \frac{\partial}{\partial E'} (k_b \log \Omega_R(E', N')) \right]_{N'=N_T}^{E'=E_T} - N \frac{\partial}{\partial N'} (k_b \log \Omega_R(E', N')) \right]_{N'=N_T}^{E'=E_T} \right\} \\
&\propto \exp \left\{ \frac{1}{k_b} \left[-E \frac{\partial}{\partial E'} (k_b \log \Omega_R(E', N')) \right]_{N'=N_T}^{E'=E_T} - N \frac{\partial}{\partial N'} (k_b \log \Omega_R(E', N')) \right]_{N'=N_T}^{E'=E_T} \right\}
\end{aligned}$$

Onde retiramos o termo que não depende do nosso sistema de interesse e será constante, agregando ele na proporcionalidade. Agora faremos uso da ideia da entropia como $S = k_b \log (\Omega_R(E', N'))$ para escrever a relação acima em termos da temperatura e potencial químico. Usando das derivadas parciais da entropia em $dS = \frac{1}{T}dU + \frac{P}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN$,

$$\begin{aligned}
p_\sigma &\propto \exp \left\{ \frac{1}{k_b} \left[-E \frac{1}{T} - N \frac{\mu}{T} \right] \right\} \\
&\propto e^{-\beta E + \beta \mu N}
\end{aligned}$$

e

$$p_\sigma = \frac{1}{\Xi} e^{-\beta E + \beta \mu N} \quad (1.6)$$

Onde

$$\Xi = \sum_{\sigma} e^{-\beta E + \beta \mu N} \quad (1.7)$$

O log da nossa função partição deve resultar em uma expressão de energia livre.

$$\begin{aligned}
\log \Xi &= \log \left(\sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma} + \beta \mu N_{\sigma}} \right) \\
&= \log \left(\sum_{E, N} \Omega(E, N) e^{-\beta E + \beta \mu N} \right) \\
&= \log \left(\sum_{E, N} \exp \left\{ \frac{k_b}{k_b} \log \Omega(E, N) \right\} \exp \{ (-\beta E + \beta \mu N) \} \right) \\
&= \log \left(\sum_{E, N} \exp \left\{ \frac{T}{k_b T} S - \beta E + \beta \mu N \right\} \right) \\
&= \log \left(\sum_{E, N} e^{\beta (E - TS - N\mu)} \right)
\end{aligned}$$

Para a aproximação desta expressão vamos considerar que o logaritmo de uma somatória pode ser aproximada por seu termo máximo,

$$\approx \log e^{\beta (E^* - TS(E^*, N^*) - N^* \mu)} = \beta (E^* - TS(E^*, N^*) - N^* \mu)$$

Ou seja,

$$\log \Xi = \beta(E^* - TS(E^*, N^*) - N^* \mu) = -\beta \Phi$$

e finalmente,

$$\Phi = -k_b T \log \Xi \tag{1.8}$$

Capítulo 2

Procura-se autovalores

A distribuição dos autovalores de uma matriz aleatória Gaussiana $N \times N$ é dada por:

$$\rho(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{N,\beta}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2} \prod_{j < k} |x_j - x_k|^\beta \quad (2.1)$$

onde a constante de normalização \mathcal{Z} é dada por

$$\mathcal{Z}_{N,\beta} = (2\pi)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^N \frac{\Gamma(1 + j\frac{\beta}{2})}{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2})} \quad (2.2)$$

β é o index de Dyson e indica o ensemble que utilizamos. Mais importante é notar que existe na nossa distribuição um fator de repulsão e um fator de campo de mínimo de energia em $x = 0$. De forma que mesmo centradas em 0 as partículas mantêm uma distância entre si pela repulsão 'Coulombiana'.

Se quisermos computar o histograma dos autovalores podemos tomar a marginal

$$\rho(x) = \int \cdots \int dx_1 \cdot dx_2 \cdots dx_N \rho(x, x_2, \dots, x_N) \quad (2.3)$$

Ou seja, o perfil da função partição de uma nova partícula dada o posicionamento das outras. Para a Equação 2.1, a densidade espectral $\mathbb{E}[n(x)] = \rho(x)$ é dada pelo limite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\beta N} \rho(\sqrt{\beta N} x) = \rho_{sc}(x) \quad (2.4)$$

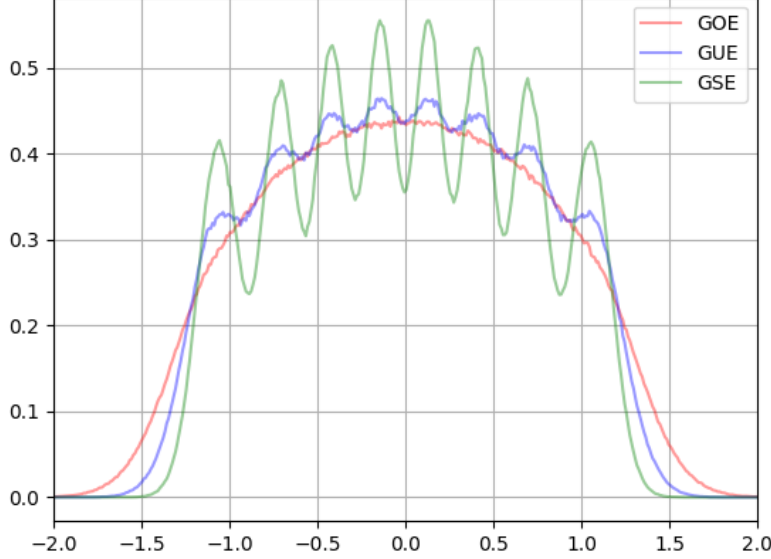
Onde $\rho_{sc}(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}$ compõe a famosa lei do semi-círculo de Wigner representada na Figura 2. Os pontos $\pm \sqrt{2\beta N}$ são as bordas espectrais. Um esquema útil para organização dos multiplos ensembles é a classificação de Layman. Denomina-se

1. **Entradas Independentes:** Adicionada a necessidade de simetria, matrizes deste tipo são chamadas matrizes de Wigner.
2. **Invariantes por rotação:** Quaisquer duas matrizes que são relacionadas por uma transformação $\hat{H}' = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1}$ ocorrerão com a mesma probabilidade.

Só existe um tipo especial de matriz que se encontra na intersecção e são as classes Gaussianas.

Em geral no mundo das matrizes aleatórias três classes são muito importantes e serão atores centrais no nosso estudo. São as três classes associadas às matrizes que tem entradas gaussianas. Estas são: O Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE), O Ensemble Gaussiano Unitário (GUE) e o Ensemble Gaussiano Simplético (GSE). Em suma, eles tratam, em ordem, de matrizes com entradas gaussianas reais, complexas e quaterniônicas. Seus

nomes estão relacionados com a matriz necessária para a transformação de diagonalização das matrizes. Unitária para o caso complexo, por exemplo. Seus autovalores possuem distribuições distintas (ao menos para a escala usada) e é ilustrada abaixo na Figura (2).



Mais desenvolvimento sobre a forma desta distribuição e as diferenças será feito posteriormente. Usaremos a referência [4] para a maior parte dos desenvolvimentos. Algum material interessante pode ser consultado em um livro de física em [5].

2.1 Porquê exponencial?

2.1.1 Shannon-Quem?

O uso da p.d.f gaussiana pode ser justificado de algumas formas. Uma primeira abordagem a ser explorada é a de maximização entrópica ou minimização de informação similar aos trabalhos de Shannon-Kinchin. Definiremos uma grandeza $\mathcal{I}[\mathcal{P}(\hat{H})]$ associada à uma p.d.f tal que:

$$\mathcal{I}[\mathcal{P}(\hat{H})] = - \int d\mu(\hat{H}) \mathcal{P}(\hat{H}) \ln \mathcal{P}(\hat{H})$$

Que é uma extensão natural da definição discreta de informação $-\sum_{l=1}^m p_m \ln p_m$. Agora argumentaremos algo parecido com os argumentos usados em termodinâmica de maximização de entropia. Diremos que a incerteza sobre as matrizes será máxima, ou seja, teremos a maior aleatoriedade das matrizes quando a entropia for maximizada e a informação, minimizada. Assim como na entropia física impomos um vínculo de energia constante, aqui faremos algo do tipo $E(\text{Tr } \hat{H}) = b$ e $E((\text{Tr } \hat{H})^2) = a > 0$. Vamos introduzir esses vínculos como multiplicadores de lagrange com multiplicadores v_1 e v_2 .

$$\mathcal{I}[\mathcal{P}(\hat{H})] = - \int d\mu(\hat{H}) \mathcal{P}(\hat{H}) \left(\ln \mathcal{P}(\hat{H}) - v_1 \text{Tr } \hat{H} - v_2 \text{Tr } \hat{H}^2 \right)$$

que tem diferencial

$$\delta \mathcal{I}[\mathcal{P}(\hat{H})] = - \int d\mu(\hat{H}) \delta \mathcal{P}(\hat{H}) \left(1 + \ln \mathcal{P}(\hat{H}) - v_1 \text{Tr } \hat{H} - v_2 \text{Tr } \hat{H}^2 \right) = 0$$

Que só vai ser mínimo se

$$\mathcal{P}(\hat{H}) \propto e^{-v_1 \text{Tr } \hat{H} - v_2 \text{Tr } \hat{H}^2}$$

Onde os multiplicadores são unicamente definidos pelas constantes do vínculo. Esse fato motiva de alguma forma o estudo da p.d.f gaussiana para as matrizes.

2.2 Independência ou Morte

Consideremos matrizes com entradas independentes. Qual a função densidade de probabilidade (F.P.D.) da matriz simétrica \hat{H}_s ? Devemos fazer separadamente a diagonal da seção triangular que formos usar e teremos

$$\rho((\hat{H}_s)_{11}, \dots, (\hat{H}_s)_{NN}) = \prod_{i=1}^N \left[\frac{e^{-\frac{(H_s)_{ii}^2}{2}}}{2\pi} \right] \prod_{i < j} \left[\frac{e^{-(H_s)_{ij}^2}}{\sqrt{\pi}} \right]$$

Que é a função distribuição da matriz. A desimetria da diagonal e da não diagonal nos permite escrever a distribuição como

$$\mathcal{P}(\mathcal{H}) = C_2 e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \text{Tr } \mathcal{H}^2} \quad (2.5)$$

Mais geralmente

$$\mathcal{P}(\mathcal{H}) = C_\beta e^{-\frac{\beta}{4\sigma^2} \text{Tr } \mathcal{H}^2} \quad (2.6)$$

Suponha que queremos derivar a equação da distribuição dos autovalores para tais matrizes. Começamos com $\mathcal{H}_{N \times N}$

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_{n+1} & \cdots & x_{2n} \\ x_{n+1} & x_2 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ x_{2n} & \cdots & \cdots & x_n \end{bmatrix}$$

Notemos que teremos $x_1, x_2, \dots, x_n \sim \mathcal{N}(0, 1)$ e $x_{n+1}, \dots, x_{n^2} \sim \mathcal{N}(0, \frac{1}{2})$. Qual a distribuição $p(s)$ de $s = \lambda_2 - \lambda_1$? Sabemos os autovalores soluções do polinômio característico

$$\lambda^2 - \text{Tr } \mathcal{H}_s \lambda + \det \mathcal{H}_s$$

O resultado será uma função $s(x_1, x_2, \dots, x_{n^2})$. Para a qual escrevemos

$$p(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_{n^2} \prod_{i=1}^n \frac{e^{-\frac{x_i^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \prod_{i=n+1}^{n^2} \frac{e^{-x_i^2}}{\sqrt{\pi}} \delta(s - s(x_1, x_2, \dots, x_{n^2}))$$

Que, desenvolvido, chega à

$$p(s) = -\frac{s}{2} e^{-f(s^2)}$$

Ou seja, teremos um resultado em que as partículas parecem se repelir!

2.3 Uma medida à Hermitiana

Consideraremos no nosso estudo para referencia matrizes quadradas de entradas complexas com dimensão N . Nosso objetivo é afinal ter uma forma de mensurar a distribuição de autovalores e para isso, faremos os seguintes desenvolvimentos.

Consideremos inicialmente um espaço de matrizes com entradas complexas $2N^2$ dimensional. Contido neste espaço temos um espaço de maior interesse correspondente ao espaço das matrizes *hermitianas* de dimensão N^2 . A escolha do subespaço está relacionada com o fato que matrizes hermitianas são diagonalizáveis e a distribuição de seus autovalores estará diretamente relacionada (com uma mudança de base) à distribuição do traço da matriz diagonalizada. Note que para a matriz diagonal ter a mesma medida que nossa matriz inicial, nossa medida deve ser invariável por rotação.

Mais detalhadamente podemos escrever nossa matriz hermitiana \hat{H} como

$$\hat{H} = \hat{U} \hat{\Lambda} \hat{U}^{-1}, \quad \hat{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N), \quad \hat{U} \cdot \hat{U}^* = I$$

onde, claro, $\hat{\Lambda}$ é diagonal de autovalores e \hat{U} é unitária e com colunas equivalentes aos autovetores de \hat{H} . Em geral, o conjunto de matrizes degeneradas tem medida nula e não é uma preocupação. Um cuidado deve ser tomado. A correspondência $\hat{H} \implies (\hat{U}, \hat{\Lambda})$ não é injetora, podemos tomar $\hat{U}_1 \hat{\Lambda} \hat{U}_1^{-1} = \hat{U}_2 \hat{\Lambda} \hat{U}_2^{-1}$ se $\hat{U}_1^{-1} \hat{U}_2 = \text{diag}(e^{i\phi_1}, \dots, e^{i\phi_N})$ para qualquer escolha de fases (ϕ_1, \dots, ϕ_N) . Para restringir nosso problema e tornar a função injetiva será necessário considerar as matrizes unitárias ao espaço de coset $U(N)/U(1) \times \dots \times U(1)$ ¹. Uma outra restrição necessária é ordenar os autovalores, ou seja, $\lambda_1 < \dots < \lambda_N$. Temos que reescrever agora a medida $d\mu(\hat{H})$ em função de autovalores e da \hat{U} de autovetores.

Para resumir o desenvolvimento, alguns resultados serão diretamente enunciados. Essa seção pode ser encontrada no relatório [2]. Em especial recuperaremos o elemento de distância e volume no subespaço que vamos tratar

$$(ds)^2 = \text{Tr} d\hat{H} d\hat{H}^* = \sum_i (dx_{ii})^2 + 2 \sum_{i < j} [(dx_{ij})^2 + (dy_{ij})^2] \quad (2.7)$$

$$d\mu(\hat{H}) = 2^{\frac{N(N-1)}{2}} \prod_i dx_{ii} \prod_{i < j} dx_{ij} dy_{ij} \quad (2.8)$$

Ambos vem de um desenvolvimento da métrica do espaço discutido. Note que nossa medida de comprimento é invariante em respeito à automorfismos (Calcule $\text{Tr} H^2$). Especificamente, se tomarmos os elementos (2.7) e (2.8) na decomposição espectral, obteremos

$$(ds)^2 = \sum_i (d\lambda)^2 + \sum_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^2 \overline{\delta U_{ij}} \delta U_{ij} \quad (2.9)$$

e

$$d\mu(\hat{H}) = \prod_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^2 \prod_i d\lambda_i \times d\mu(\hat{U}) \quad (2.10)$$

Tendo a medida de integração pronta, podemos definir uma F.D.P $\mathcal{P}(\hat{H})$ neste espaço de matrizes hermitianas tal que $\mathcal{P}(\hat{H}) d\mu(\hat{H})$ é a probabilidade da matriz \hat{H} estar no volume $d\mu(\hat{H})$. Queremos que nossa função seja invariante à rotação, ou seja, $\mathcal{P}(\hat{H}) = \mathcal{P}(\hat{U}^* \hat{H} \hat{U})$.

Conhecer os N primeiros traços ($\text{Tr} \hat{H}^n$) de \hat{H} define unicamente o polinômio característico e junto com ele, os autovalores. Especificamente tomaremos

¹Não tenho muita ideia de espaços de Coset. Pelo que entendo, existe um espaço onde toda \hat{U} pode ser representada por $\hat{U}_c \hat{U}_d$, onde \hat{U}_c compõe o espaço de coset e \hat{U}_d é uma matriz diagonal unitária. Dessa forma matrizes equivalentes são aquelas que multiplicadas por \hat{U}_d tem um mesmo resultado.

$$\mathcal{P}(\hat{H}) = C e^{-\text{Tr } Q(\hat{H})} \quad (2.11)$$

Onde Q deve ser um polinômio de até ordem $2j \leq N$ suficiente para garantir a convergência de

$$\mathcal{Z}_n = \int_{\mathcal{H}_n} e^{-\text{Tr } Q(\hat{M})} d\hat{M}$$

Comumente uma condição suficiente é

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{Q(x)}{\ln(1+x^2)} = \infty$$

Mas em especial, se tomarmos

$$Q(x) = ax^2 + bx + c$$

Nossa medida tomará a forma

$$\mathcal{P}(\hat{H}) = e^{-a[\sum_i x_{ii}^2 + 2\sum_{i<j} [x_{ij}^2 + y_{ij}^2]]} e^{-b\sum_i x_{ii}} e^{-cN} \quad (2.12)$$

$$= e^{-cN} \prod_{i=1}^N \left(e^{-ax_{ii}^2 - bx_{ii}} \right) \prod_{i<j} e^{-2ax_{ij}^2} \prod_{i<j} e^{-2ay_{ij}^2} \quad (2.13)$$

Onde podemos notar que a distribuição de probabilidade da matriz \hat{H} pode ser representados por fatores independentes, cada um de forma gaussiana. Para este potencial, temos uma conexão entre as matrizes de entrada independentes e as matrizes invariáveis por rotação. Lembre-se que para as variáveis serem independentes \mathcal{P} deve ter a forma $\mathcal{P} = C e^{-(a \text{Tr } \hat{H}^2 + b \text{Tr } \hat{H} + cN)}$ para constantes $a > 0, b, c$. Em nota, sabemos então

$$e^{\text{Tr } V(\hat{H})} d\mu(\hat{H}) = e^{-\sum_j V(\lambda_j)} \prod_{i<j} (\lambda_i - \lambda_j)^2 d\mu(\lambda) d\mu(\hat{U})$$

ou mais geralmente para o ensemble com

$$\frac{1}{\tilde{\mathcal{Z}}_n} e^{\text{Tr } (V(\hat{M}))} d\hat{M}$$

Dado λ_j os autovalores

$$\text{Tr } (V(\hat{M})) = -\sum_{j=1}^n V(\lambda_j)$$

e finalmente podemos escrever

$$E[f] = \int_{\mathcal{H}_n} f(\hat{M}) e^{-\text{Tr } (Q(\hat{M}))} d\hat{M} \quad (2.14)$$

$$= \frac{1}{\tilde{\mathcal{Z}}} \int \cdots \int f(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \prod_{i<j} (\lambda_i - \lambda_j)^2 \prod_{j=1}^n e^{-Q(\lambda_j)} d\lambda_1 \dots d\lambda_n \quad (2.15)$$

Assim, a probabilidade conjunta nas matrizes induz uma densidade de probabilidade de autovalores

$$\frac{1}{\tilde{\mathcal{Z}}_n} \prod_{i<j} (\lambda_i - \lambda_j)^2 \prod_{j=1}^n e^{Q(\lambda_j)} \quad (2.16)$$

Alguns resultados foram resgatadas da nota do autor em [3].

Capítulo 3

Movimento Browniano

3.1 Processo Pontual

Um processo pontual pode ser interpretado como um conjunto aleatório de pontos ou como a medida de probabilidade associada a esse conjunto. Um processo pontual possui n pontos se

$$\mathcal{P}(\#X = n) = 1$$

Onde X é um conjunto enumerável de \mathcal{X} (\mathbb{R} , \mathbb{Z} ou um subconjunto destes). O conjunto de todas configurações possíveis é denominado $Conf(\mathcal{X})$. Se $P(x_1, \dots, x_n)$ é uma função de densidade de probabilidade em \mathbb{R}^n invariante por permutações

$$\mathbb{R}^n \rightarrow Conf(\mathbb{R})$$

$$(x_1, \dots, x_n) \mapsto X = x_1, \dots, x_n$$

define naturalmente um processo pontual com n pontos.

3.1.1 Poisson & fries

Tome $\{N(t)\}$ o número de eventos no intervalo de tempo $]0, t]$. $\{N(t)\}$ é um processo estocástico (de contagem). Se o processo de Poisson possui $\lambda > 0$, para um elemento fixo do espaço amostral a variável aleatória N assume valor k no tempo t com probabilidade

$$\mathcal{P}[N(t) = k] = \frac{(\lambda t)^k e^{-\lambda t}}{k!} \quad (3.1)$$

Onde λ é o número esperado de chegadas por unidade de tempo. Agora, como um processo pontual, a probabilidade de n eventos no intervalo $]a, b]$ é

$$\mathcal{P}(N]a, b] = n) = \frac{(\lambda(b-a))^n e^{-\lambda(b-a)}}{n!}$$

Podemos usar a independência de cada evento de Poisson em intervalos disjuntos para escrever

$$\mathcal{P}(N]a_1, b_1] = n_1, \dots, N]a_k, b_k] = n_k) = \prod_{i=1}^k \frac{(\lambda(b_i - a_i))^{n_i} e^{-\lambda(b_i - a_i)}}{n_i!}$$

Podemos escrever para uma função f mensurável em \mathbb{R}

$$\sum_{x_i \in \mathcal{X}} f(x_i) = \int f(x) dN(x)$$

Onde a medida dN é

$$dN(x) = \sum_{x_i \in \mathcal{X}} \delta_{x_i}(x)$$

Onde notamos que podemos interpretar tanto quanto uma soma de um processo pontual quanto uma medida de probabilidade.

3.1.2 Função Correlação

Definimos uma variável aleatória N anteriormente. Naturalmente, poderíamos estar interessados em sua esperança. Mais especificamente, podemos procurar a esperança do número de pontos de uma configuração dentro de um intervalo $A \subset \mathbb{R}$.

$$A \mapsto \mathbb{E}[N(A)] = \mathbb{E}[\#(A \cap X)]$$

Que pode ser interpretada como uma medida com densidade p_1

$$\mathbb{E}[\#(A \cap X)] = \int_A p_1(x) dx \quad (3.2)$$

A equação 3.2 é conhecida como *função de correlação de 1 ponto*. Em grosso modo, $p_1(x)$ é a probabilidade de haver um ponto da configuração entre x e $x + dx$. Seja um configuração simples $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ e intervalos disjuntos na reta A_1, A_2, \dots, A_n ,

$$\int_A \cdots \int_A \rho_n(x_1, \dots, x_n) dx_1, \dots, dx_n = \mathbb{E} \left(\prod_{j=1}^k \#(X \cap A_j) \right)$$

é o número esperado de n -uplas $(x_1, x_2, \dots, x_n) \in A_1 \times \cdots \times A_n$ tais que $x_i \in A_i, i = 1, \dots, n$. Seja $\mathbb{P}(x_1, \dots, x_n)$ uma densidade de probabilidade em \mathbb{R}^n , então o processo pontual de n pontos gerado possui funções de correlação dadas por

$$p_k(x_1, \dots, x_k) = \frac{n!}{(n-k)!} \int \cdots \int \mathbb{P}(x_1, \dots, x_n) dx_{k+1} \cdots dx_n$$

3.1.3 Pontual Determinantal

Um processo pontual vai ser chamado determinantal se dada uma função de correlação ρ_n , existe um núcleo $K(x, y)$ conhecido como núcleo de correlação tal que

$$\rho_n(x_1, \dots, x_n) = \det[K(x_i, x_j)]_{i,j=1}^n \quad (3.3)$$

onde

$$[K(x_i, x_j)]_{i,j=1}^n = \begin{bmatrix} K(x_1, x_1) & K(x_1, x_2) & \cdots & K(x_1, x_n) \\ K(x_2, x_1) & K(x_2, x_2) & \cdots & K(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K(x_n, x_1) & K(x_n, x_2) & \cdots & K(x_n, x_n) \end{bmatrix}$$

Nos casos de baixa dimensão

$$p_1(x_1) = K(x_1, x_1), \quad p_2(x_1, x_2) = \begin{vmatrix} K(x_1, x_1) & K(x_1, x_2) \\ K(x_2, x_1) & K(x_2, x_2) \end{vmatrix}$$

Para que o núcleo satisfaça a equação 3.3 enunciaremos um resultado de interesse.

Teorema 1 *Seja K um núcleo tal que*

- (a) $\int K(x, x) = n \in \mathbb{N}$,
- (b) Para todo $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, o determinante é não negativo
- (c) K possui a propriedade de **núcleo reprodutor**, isto é;

$$K(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, s)K(s, y)ds$$

Então

$$P(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n!} \det[K(x_i, x_j)]_{i,j=1}^n$$

será uma densidade de probabilidade em \mathbb{R} cujo processo de n pontos associado é determinantal.

3.2 Emsemble Biortogonal

Um n -ponto processo é um ensemble biortogonal se existem duas sequências f_1, \dots, f_n e g_1, \dots, g_n em $L^2(R)$ e uma constante $Z_n \neq 0$ tais que:

$$\mathcal{P}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z_n} \det[f_i(x_j)]_{i,j=1}^n \cdot \det[g_i(x_j)]_{i,j=1}^n$$

Onde todo f_i e g_i é independente nos i 's. Pode-se mostrar que se

$$\phi_j \in \text{span}(f_1, \dots, f_n) \quad \psi_j \in \text{span}(g_1, \dots, g_n)$$

tais que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_k(c) \psi_j(x) dx = \delta_{jk}$$

então

$$K_n(x, y) = \sum_{j=1}^n \phi_j(c) \psi_j(x)$$

onde $K_n(x, y)$ é um *Kernel* tal que

$$\mathcal{P}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n!} \det[K_n(x_i, x_j)]_{i,j=1}^n$$

O processo é determinado e K_n é o kernel de correlação.

3.3 Karlin-McGregor

3.3.1 O teorema

Exploraremos os caminhos não cruzantes providos por processos de Markov. Considere uma partícula se movendo com uma regra qualquer, vamos descrever esse movimento de forma que denotaremos $p_t(a; x)$ a densidade de probabilidade de transição; isto é, a chance uma partícula em a ir para x em um próximo momento. Um teorema clássico enuncia a probabilidade de um certo número de caminhos não se intersectarem passado um tempo t .

O teorema diz: Considere $X_1(t), \dots, X_n(t)$ cópias independentes de um processo forte de Markov com caminhos condicionados tais que

$$X_j(0) = a_j$$

onde $a_1 < a_2 < \dots < a_n$ são valores dados. Notamos novamente $p_t(x, y)$ ser a densidade do processo de transição. Vamos definir regiões E_1, E_2, \dots, E_n onde E 's vizinhos não se intersectam. Temos

$$\int_{E_1} \dots \int_{E_n} \det [p_t(a_i, x_j)]_{i,j=1}^n dx_1 \dots dx_n$$

vai ser a probabilidade de que os caminhos não tenham se intersectados no intervalo de tempo $[0, t]$ e $X_j(t)$ nos intervalos correspondentes. A demonstração está em [3]. Note que temos

$$\int_{E_1} \dots \int_{E_n} \det [p_t(a_i, x_j)]_{i,j=1}^n dx_1 \dots dx_n$$

$$= \int_{E_1} \dots \int_{E_n} \begin{vmatrix} p_t(a_1, x_1) & p_t(a_2, x_1) & \dots & p_t(a_{n-1}, x_1) & p_t(a_n, x_1) \\ p_t(a_1, x_2) & p_t(a_2, x_2) & \dots & p_t(a_{n-1}, x_2) & p_t(a_n, x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ p_t(a_1, x_{n-1}) & p_t(a_2, x_{n-1}) & \dots & p_t(a_{n-1}, x_{n-1}) & p_t(a_n, x_{n-1}) \\ p_t(a_1, x_n) & p_t(a_2, x_n) & \dots & p_t(a_{n-1}, x_n) & p_t(a_n, x_n) \end{vmatrix} dx_1 \dots dx_n \quad (3.4)$$

$$= \sum_{\sigma} \text{sgn}(\sigma) \prod_{j=1}^n p_t(a_j, E_{\sigma(j)}) \quad (3.5)$$

$$= \sum_{\sigma} \text{sgn}(\sigma) \mathcal{P}(A_{\sigma}) \quad (3.6)$$

Onde denotamos

$$p_t(a_j, E_{\sigma(j)}) = \int_{E_j} p_t(a_i, x_j) dx_j$$

σ é uma permutação de $1, \dots, n$ e A_{σ} é o evento que $X_j(t) \in E_{\sigma(j)}$ para todo j . Os caminhos devem ser independentes para (3.6).

De alguma forma o determinante permuta os caminhos em todas ordens possíveis e calcula a probabilidade de todos se manterem nos intervalos adequados. Um exemplo de baixas dimensões pode mostrar que

$$\begin{vmatrix} p_t(a_1, x_1) & p_t(a_2, x_1) & p_t(a_3, x_1) \\ p_t(a_1, x_2) & p_t(a_2, x_2) & p_t(a_3, x_2) \\ p_t(a_1, x_3) & p_t(a_2, x_3) & p_t(a_3, x_3) \end{vmatrix} = \quad (3.7)$$

$$+ p_t(a_1, x_1) p_t(a_2, x_2) p_t(a_3, x_3) \quad (3.8)$$

$$+ p_t(a_2, x_1) p_t(a_3, x_2) p_t(a_1, x_3) \quad (3.9)$$

$$+ p_t(a_3, x_1) p_t(a_1, x_2) p_t(a_2, x_3) \quad (3.10)$$

$$- p_t(a_3, x_1) p_t(a_2, x_2) p_t(a_1, x_3) \quad (3.11)$$

$$- p_t(a_2, x_1) p_t(a_1, x_2) p_t(a_3, x_3) \quad (3.12)$$

$$- p_t(a_1, x_1) p_t(a_3, x_2) p_t(a_2, x_3) \quad (3.13)$$

Logo

$$\int_{E_1} \cdots \int_{E_n} \det [p_t(a_i, x_j)]_{i,j=1}^n dx_1 \dots dx_n = + p_t(a_1, E_1) p_t(a_2, E_2) p_t(a_3, E_3) \quad (3.14)$$

$$+ p_t(a_2, E_1) p_t(a_3, E_2) p_t(a_1, E_3) \quad (3.15)$$

$$+ p_t(a_3, E_1) p_t(a_1, E_2) p_t(a_2, E_3) \quad (3.16)$$

$$- p_t(a_3, E_1) p_t(a_2, E_2) p_t(a_1, E_3) \quad (3.17)$$

$$- p_t(a_2, E_1) p_t(a_1, E_2) p_t(a_3, E_3) \quad (3.18)$$

$$- p_t(a_1, E_1) p_t(a_3, E_2) p_t(a_2, E_3) \quad (3.19)$$

Onde somamos os casos onde as partículas se matém ordenadas e subtraímos os casos onde elas se cruzam.

3.3.2 Consequências

Considere n cópias do processo de Markov condicionado para começar em $t = 0$ nas determinadas posições $a_1 < a_2 < \cdots < a_n$. Se condicionarmos estes processos para não intersectar no intervalo $[0, t]$, o teorema vai nos dizer que os caminhos em um tempo t vão ter uma densidade de probabilidade conjunta

$$\frac{1}{\mathcal{Z}'_n} \det [p_t(a_i, x_j)]_{i,j=1}^n$$

Mas este não pode ser considerado um processo pontual determinado. Não é expresso por um produto de determinantes. Isso pode ser ajustado se considerarmos um tempo $T > t$ no nosso processo. Tomaremos b_1, b_2, \dots, b_n posições finais e condicionaremos os caminhos a não intersectar no intervalo $[0, T]$ com $X_j(0) = a_j$ e $X_j(T) = b_j$ para todos. É possível mostrar que a distribuição conjunta deles será

$$\frac{1}{\mathcal{Z}'_n} \det [p_t(a_i, x_j)]_{i,j=1}^n \det [p_{T-t}(x_i, b_j)]_{i,j=1}^n$$

Que será biortogonal com as funções

$$f_j = p_t(a_j, x) ; g_j = p_{T-t}(x, b_j)$$

E nosso caso de interesse é quando $a_j \rightarrow a$ e $b_j \rightarrow b$. Note que usando as duas funções podemos forçar que o movimento browniano se inicie em um ponto e encerre em outro determinado. Em uma, reverteremos o tempo e, nos limites 0 e T , forçaremos que apenas uma das funções seja predominante de forma que a posição inicial de cada uma prevaleça. Podemos impor a posição inicial e final do movimento. No caso browniano teremos

$$p_t(a, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2t}}$$

No caso dos limites de $a_i \rightarrow a$ e $b_j \rightarrow b$ ficamos, por consequência que quando mais de um a_i ou b_j convergem ao mesmo ponto teremos $\mathcal{Z} \rightarrow 0$ pela sua dependência destes termos (eles não serão mais 'ortogonais', pontos distintos). Por exemplo, para o limite

$$\lim_{a_n \rightarrow a_{n-1}} \frac{\det [p_t(a_i, x_j)]_{i,j=1}^n \det [p_{T-t}(x_i, b_j)]_{i,j=1}^n}{\mathcal{Z}'_n}$$

Queremos aplicar L'Hôpital para resolver a indeterminação. Para o determinante podemos notar que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_n} \begin{vmatrix} p_t(a_1, x_1) & \dots & p_t(a_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_t(a_n, x_1) & \dots & p_t(a_n, x_n) \end{vmatrix} &= \frac{\partial}{\partial a_n} [p_t(a_n, x_1) |\dots| + \dots + p_t(a_n, x_n) |\dots|] \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial a_n} p_t(a_n, x_1) |\dots| + \dots + \frac{\partial}{\partial a_n} p_t(a_n, x_n) |\dots| \right] \\
&= \begin{vmatrix} p_t(a_1, x_1) & \dots & p_t(a_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial a_n} p_t(a_n, x_1) & \dots & \frac{\partial}{\partial a_n} p_t(a_n, x_n) \end{vmatrix}
\end{aligned}$$

No limite que estamos tratando:

$$\begin{vmatrix} p_t(a_1, x_1) & \dots & p_t(a_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial a_{n-1}} p_t(a_{n-1}, x_1) & \dots & \frac{\partial}{\partial a_{n-1}} p_t(a_{n-1}, x_n) \end{vmatrix}$$

Para que todos $a_i \rightarrow a$ precisamos ainda fazer $a_{n-1} \rightarrow a_{n-2}$, $a_{n-2} \rightarrow a_{n-3}$ e assim por diante. Se fizermos assim, terminaremos com

$$\det \left[\frac{\partial^{i-1}}{\partial a^{i-1}} p_t(a_i, x_j) \right]_{i,j=1}^n$$

Onde

$$\frac{\partial^{i-1}}{\partial a^{i-1}} p_t(a_i, x_j) = \left[\left(\frac{x_j - a_i}{t} \right)^{i-1} + O \left(\frac{x_j - a_i}{t} \right)^{i-2} \right] p_t(a_i, x_j)$$

Que nos permite afirmar que o determinante é proporcional à

$$\det [x_j^{i-1}]_{i,j=1}^n \prod_{j=1}^n e^{-\frac{x_j^2 - 2ax_j}{2t}}$$

quando $a_i \rightarrow 0$. Analogamente para o outro determinante

$$\det [x_j^{i-1}]_{i,j=1}^n \prod_{j=1}^n e^{-\frac{x_j^2 - 2bx_j}{2(T-t)}}$$

Ou seja;

$$f_j = F_{j-1}(x) e^{-\frac{(x-a)^2}{2t}} ; g_j = G_{j-1}(x) e^{-\frac{(x-b)^2}{2(T-t)}}$$

onde F e G são polinômios em x de grau $j-1$. Tomaremos agora o limite em que $a, b \rightarrow 0$. Reescrevemos a distribuição conjunta destes pontos

$$P(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}_n} \det [p_t(a_i, x_j)]_{i,j=1}^n \det [p_{T-t}(x_i, b_j)]_{i,j=1}^n \quad (3.20)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}_n} \det [x_j^{i-1}]_{i,j=1}^n \prod_{j=1}^n e^{-\frac{x_j^2}{2t}} \det [x_j^{i-1}]_{i,j=1}^n \prod_{j=1}^n e^{-\frac{x_j^2}{2(T-t)}} \quad (3.21)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}_n} \det [x_j^{i-1}]_{i,j=1}^n \det [x_j^{i-1}]_{i,j=1}^n \prod_{j=1}^n e^{-\frac{Tx_j^2}{2t(T-t)}} \quad (3.22)$$

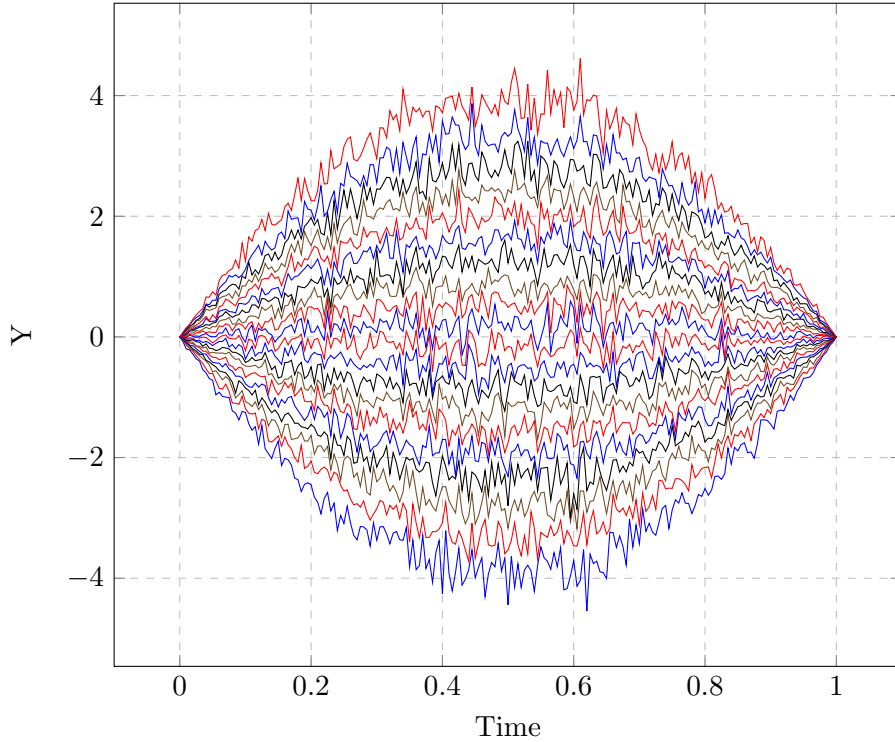
Onde o último passo é dado pelo valor do determinante de Vandermonde discutido no apêndice D tal que

$$P(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}_n} \prod_{1 \leq i < j \leq n} (x_j - x_i)^2 \prod_{j=1}^n e^{-\frac{Tx_j^2}{2t(T-t)}}$$

Relembrando a equação (2.16), podemos interpretar esta distribuição como uma distribuição de autovalores em um espaço de matrizes hermitianas do GUE com entradas de variância $\sigma^2 = \frac{2t(T-t)}{T}$ e média $\mu = 0$.

De forma que poderemos simular a evolução destes movimentos brownianos com o sistema de matrizes descrito.

Dyson Bridge



```

1  import numpy as np
2
3  n_particles = 20
4  steps = 1000
5
6  def GUE(N, sigma = 1, mu = 0, escale = False):
7      beta = 2
8      A = np.random.randn(N,N) * sigma + 1j*np.random.randn(N,N)*sigma
9      A = (A + A.T.conj())/2
10     eig = np.linalg.eigvalsh(A)
11     if escale:
12         return (eig + mu)/(np.sqrt(N*beta))
13     return eig + mu
14
15 eig_GUE = np.zeros(n_particles)
16

```

```

17 final_time = 1
18 dt = final_time/steps
19 Memory = np.zeros((steps+1,n_particles))
20
21 for step in range(steps+1):
22     partial_time = step * dt
23     sigma = 2*partial_time*(final_time-partial_time)/final_time
24     mu = 0
25     eig_GUE = GUE(n_particles, sigma = sigma, mu = mu, escale = False)
26     eig_order = np.argsort(eig_GUE)
27     Memory[step,:] = eig_GUE[eig_order]
28
29 np.savetxt('Memory.txt', Memory)

```

3.4 Simulações Gerais

Uma outra pergunta seria: Como simular sistemas com dois pontos finais? Nesse caso podemos retirar matrizes com entradas independentes porquê a distribuição era relacionada à $e^{\alpha H^2}$, mas agora teremos algo do tipo $e^{\alpha H^2 + H_0}$. Como fazer isso? Podemos tomar uma abordagem aproximada e checar por sua precisão posteriormente.

Queremos tirar autovalores de uma matriz \tilde{X} tal que sua distribuição seja equivalente à dos movimentos brownianos independentes que não se cruzam com dois pontos finais. Note que de alguma forma, podemos tomar como base a matriz aleatória hermetiana de entradas gaussianas já discutida X . Isso nos dá a situação anterior. Mas ainda mais queremos manter o começo parecido mas fazer que, no final, os autovalores estejam separados em dois núcleos. Como os autovalores de uma matriz $X_o^2 = UVU^*$ tal que

$$V = \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_1 & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \lambda_2 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \lambda_2 \end{vmatrix}$$

Dessa forma se fizermos a composição dos dois terços com uma função linear em t , teremos:

$$X + f(t)UVU^*$$

Que vai nos atender no sentido em que, quando $f(t) = 0$, em $t = 0$ o comportamento é dominado pelo primeiro termo. Enquanto isso, quando a variância volta a diminuir nas entradas de X , o segundo termo domina, e, no final, dita as posições das partículas. Podemos testar nosso método. Implementemos:

```

1 import numpy as np
2
3 n_particles = 100
4 n_groups = 2
5 steps = 100
6

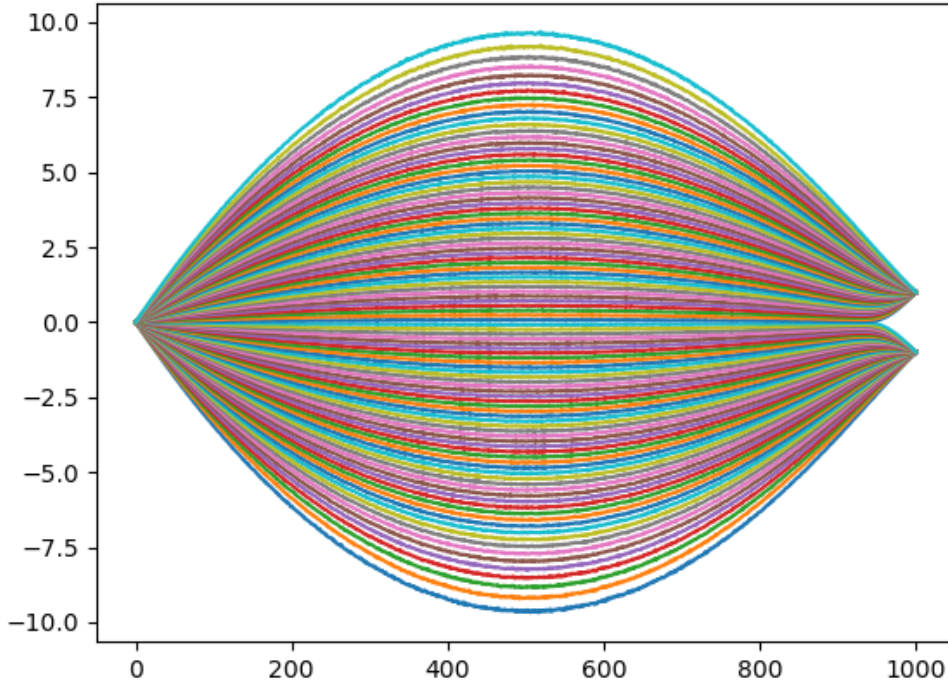
```

```

7  def Mod_GUE(U, S, shift, N, sigma = 1, mu = 0, escale = False):
8      beta = 2
9      A = sigma * np.random.randn(N,N) + sigma * 1j*np.random.randn(N,N)
10     A = (A + A.T.conj())/2
11     A = A + (U @ S @ U.T.conj())*shift
12     eig = np.linalg.eigvalsh(A)
13     if escale:
14         return (eig*sigma + mu)/(np.sqrt(N*beta))
15     return eig
16
17 def USU(nGroups, n_particles):
18     # U is the unitary matrix with the e1, e2, ..., eN vectors as columns
19     # S is the diagonal matrix with the eigenvalues
20
21     U = np.zeros((n_particles, n_particles), dtype = complex)
22     S = np.zeros((n_particles, n_particles), dtype = complex)
23
24     # fill U diagonal with 1's
25     for i in range(n_particles):
26         U[i,i] = 1
27
28     # fill S diagonal with nGroups different values centered at 0
29     divider = n_particles/nGroups
30     shift = (nGroups-1)/2
31     for i in range(n_particles):
32         S[i,i] = (int(i/divider) - shift) * 10
33
34     return U, S
35
36 def sigma_t(t):
37     return 2*t*(1-t)
38
39 U, S = USU(n_groups, n_particles)
40 eig_GUE = np.zeros(n_particles)
41 dt = 1/steps
42
43 Memory = np.zeros((steps+1,n_particles))
44
45 for step in range(steps+1):
46     print(step)
47     partial_time = step * dt
48     sigma = sigma_t(partial_time)
49     shift = partial_time
50     mu = 0
51     eig_GUE = Mod_GUE(U, S, shift, n_particles, sigma = sigma, mu = mu, escale = False)
52     eig_order = np.argsort(eig_GUE)
53     Memory[step,:] = eig_GUE[eig_order]
54
55 # write Memory in file
56 np.savetxt('Memory.txt', Memory)

```

E teremos algo do tipo:



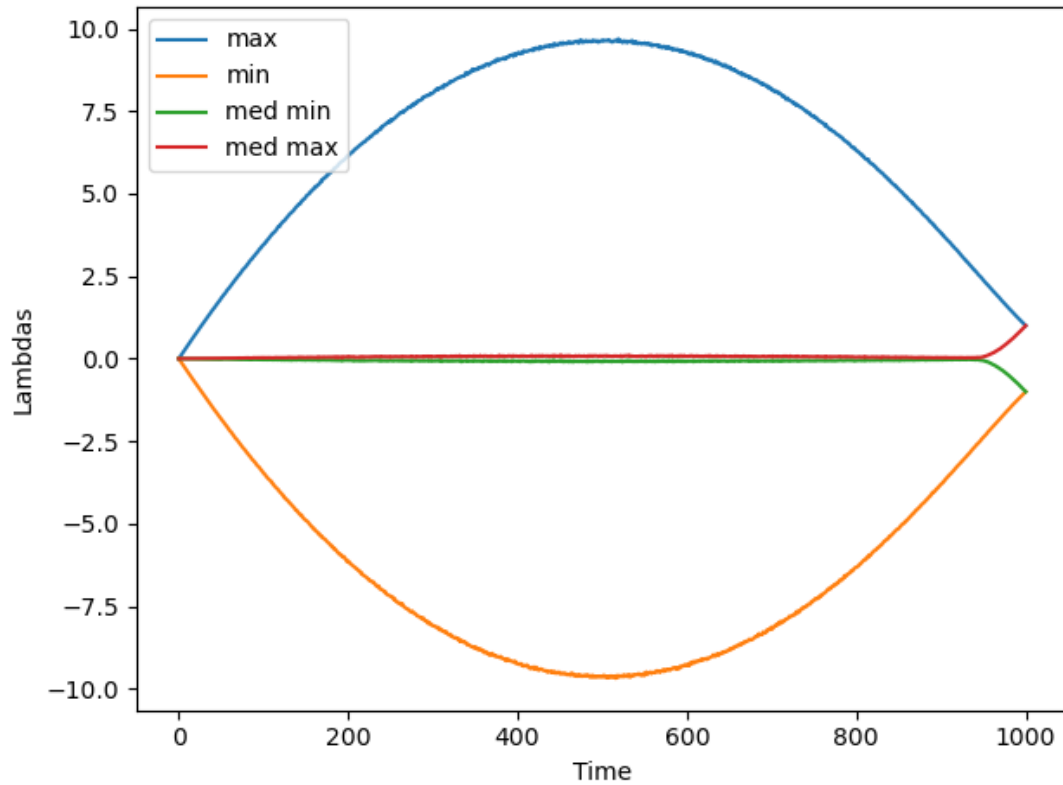
3.4.1 Tracy Widom

Uma das formas de validar nossa simulação é aproveitando de um resultado conhecido para esta distribuição. Tomamos $\gamma = \gamma(t) = \mathbb{E}[\lambda_{max}]$. Se definirmos a distribuição na borda para uma matriz de tamanho N quando $N \rightarrow \infty$, veremos que

$$\frac{\lambda_{max} - \mathbb{E}[\lambda_{max}]}{N^\alpha}$$

Deve ser a densidade da distribuição quando $\alpha = -\frac{2}{3}$ para toda a extensão externa da distribuição. Essa distribuição se nomeia Tracy Widom e tem formato bem conhecido. Note que se o expoente não for compatível com a distribuição observada, ele deve, no limite fazer com que ela se torne 'singular' em algum sentido, esmague ela no eixo em x ou y . Logo, idealmente, usaríamos matrizes extremamente grandes. O problema de autovalores, contudo, é complexo e leva tempo para tais matrizes. Faremos um compromisso e tentaremos observar a diferenciação da distribuição real.

Primeiro, a média. Faremos isso numericamente. Queremos algo do tipo,



Para simplificar o gasto temporal calculemos para um passo específico múltiplos experimentos, uma vez que sabemos calcular a matriz que dá sua distribuição.

```

1  import numpy as np
2
3  n_particles = 1000
4  n_groups = 2
5
6  def Mod_GUE(S, shift, N, sigma = 1, mu = 0, escale = False):
7      beta = 2
8      A = sigma * np.random.randn(N,N) + sigma * 1j*np.random.randn(N,N)
9      A = (A + A.T.conj())/2
10     A = A + S*shift
11     eig = np.linalg.eigvalsh(A)
12     if escale:
13         return (eig*sigma + mu)/(np.sqrt(N*beta))
14     return eig
15
16  def USU(nGroups, n_particles):
17      # U is the unitary matrix with the e1, e2, ..., eN vectors as columns
18      # S is the diagonal matrix with the eigenvalues
19
20     U = np.zeros((n_particles, n_particles), dtype = complex)
21     S = np.zeros((n_particles, n_particles), dtype = complex)
22
23     # fill U diagonal with 1's
24     for i in range(n_particles):
25         U[i,i] = 1

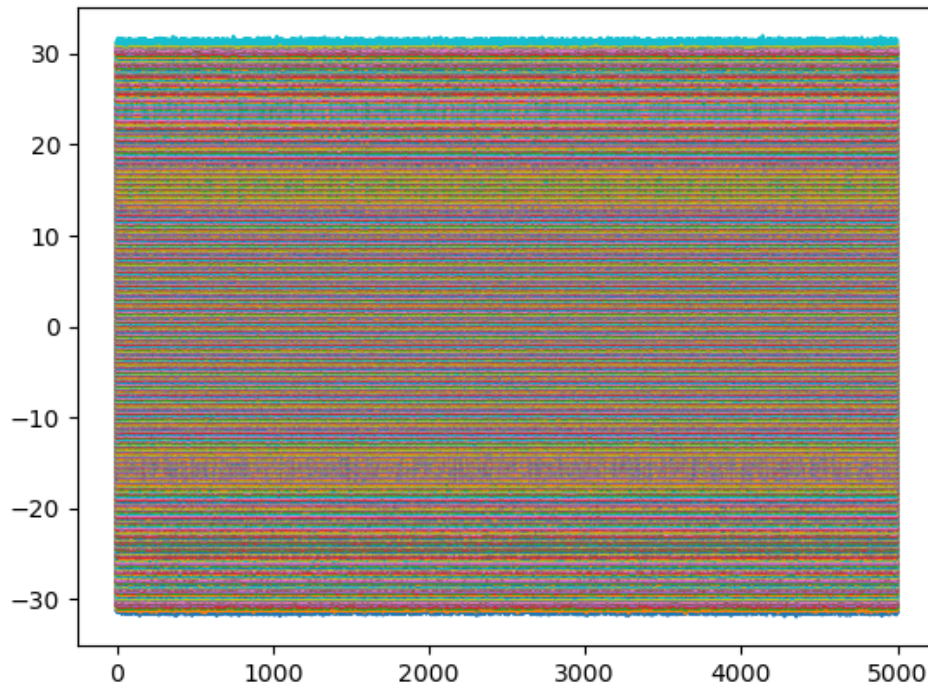
```

```

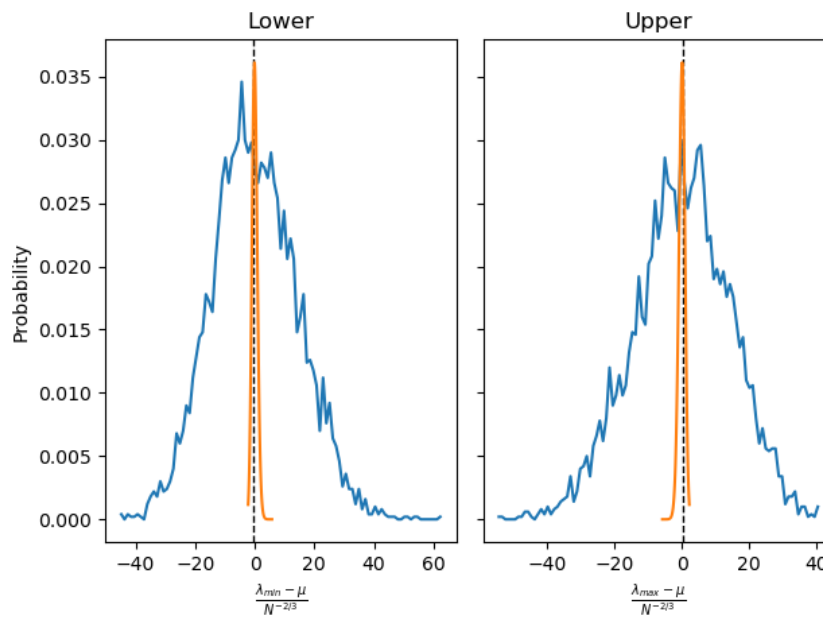
26
27     # fill S diagonal with nGroups different values centered at 0
28     divider = n_particles/nGroups
29     shift = (nGroups-1)/2
30     for i in range(n_particles):
31         S[i,i] = (int(i/divider) - shift) * 10
32
33     return U, S
34
35 def isHermitian(A):
36     return np.allclose(A, A.T.conj())
37
38 def sigma_t(t):
39     return 2*t*(1-t)
40
41 U, S = USU(n_groups, n_particles)
42 eig_GUE = np.zeros(n_particles)
43
44 exps = 1000
45
46 Memory = np.zeros((exps, n_particles))
47
48 for exp in range(exps):
49     partial_time = 0.5
50     sigma = sigma_t(partial_time)
51     shift = partial_time
52     mu = 0
53     eig_GUE = Mod_GUE(S, shift, n_particles, sigma = sigma, mu = mu, escale = False)
54     eig_order = np.argsort(eig_GUE)
55     Memory[exp,:] = eig_GUE[eig_order]
56
57     print(exp)
58
59 # write Memory in file
60 np.savetxt('Memory_test.txt', Memory)

```

Com $N = 1000$, para o momento $t = 0.5$ calculamos múltiplas iterações

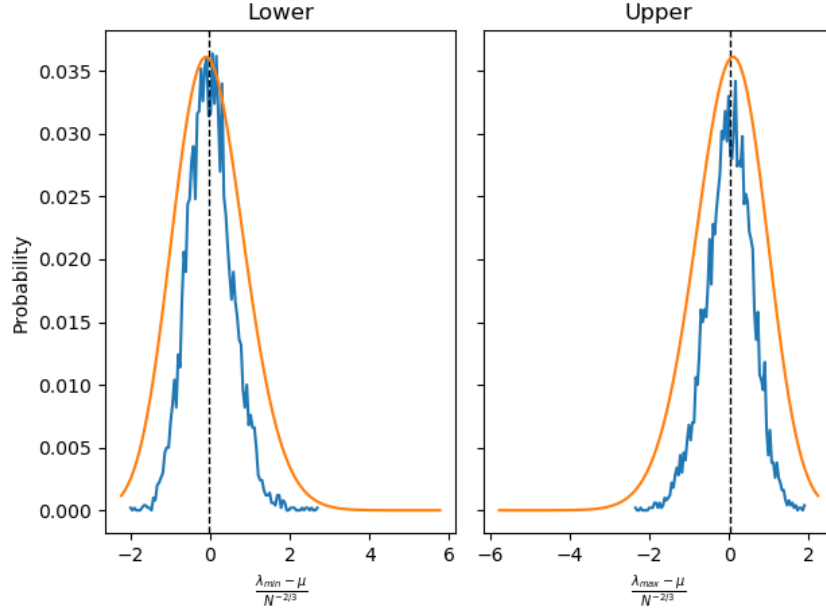


Agora podemos plotar o histograma para os extremos. Especificamente para o extremo superior:

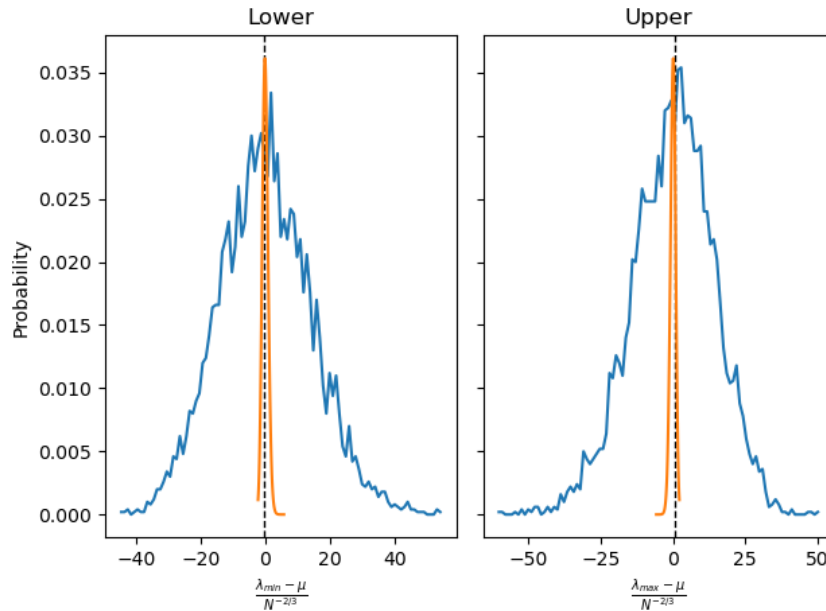


Algo está estranho. Parece que o histograma está mais espalhado do que o esperado. O que pode estar ocorrendo? Vemos nos dados que a variação está de acordo com o histograma. Os dados variam em média algo na ordem de ± 1 . Escalado por $N^{\frac{2}{3}}$, dá o resultado observado. De alguma forma os dados parecem com o 'formato' correto, até sua assimetria pode ser observada. E os dados parecem simetrizados para o autovalor máximo e mínimo. Uma suspeita é que alguma escala que dependa de σ deve ser aplicada, isso se

dá principalmente pela pergunta: Isso se repete em outros momentos da simulação? Que tem ilustrada resposta:



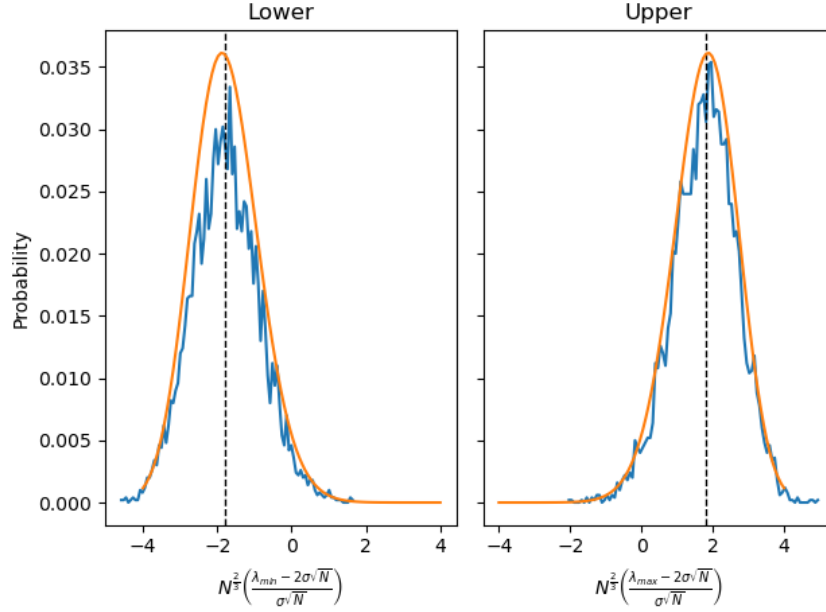
Isso se repetiria para o caso de borda de um único final? Se calcularmos como usualmente as Pontes de Dyson para um único ponto final, veremos a distribuição de Tracy-Widom? Isso indicaria um erro, não na escala, mas no nosso modelo (Principalmente porque os modelos de aproximam quando $t \rightarrow 0$). Para este, teríamos em $t = 0.5$:



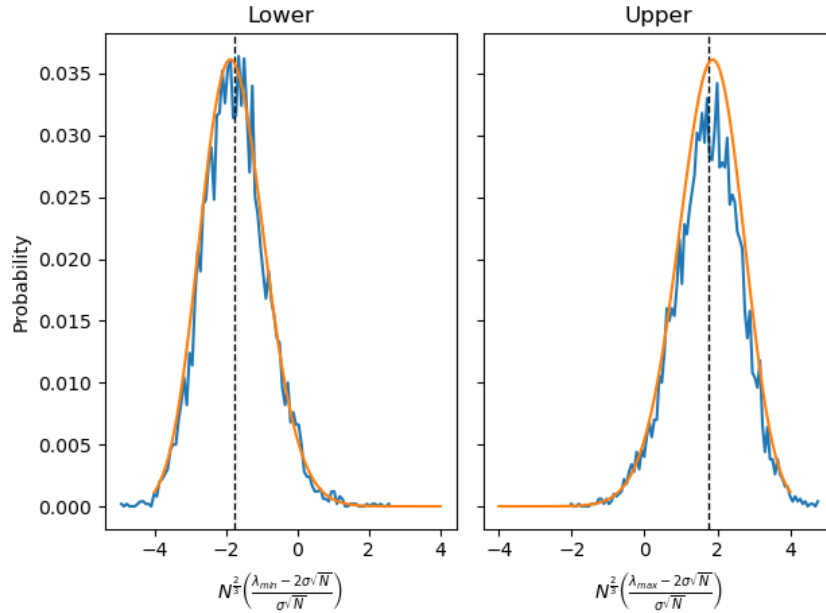
Que parece precisar da mesma escala que o caso anterior. De qual escala estamos falando? Note a expressão

$$N^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\lambda_{max} - 2\sigma\sqrt{N}}{\sigma\sqrt{N}} \right)$$

Algo assim parece mais razoável. O λ médio depende de σ e N . Enquanto $\sigma\sqrt{N}$ escala com dependência das mesmas variáveis, que parecem ser importantes. Com essa nova distribuição podemos refazer a distribuição para $t = 0.5$,



e para $t = 0.01$,

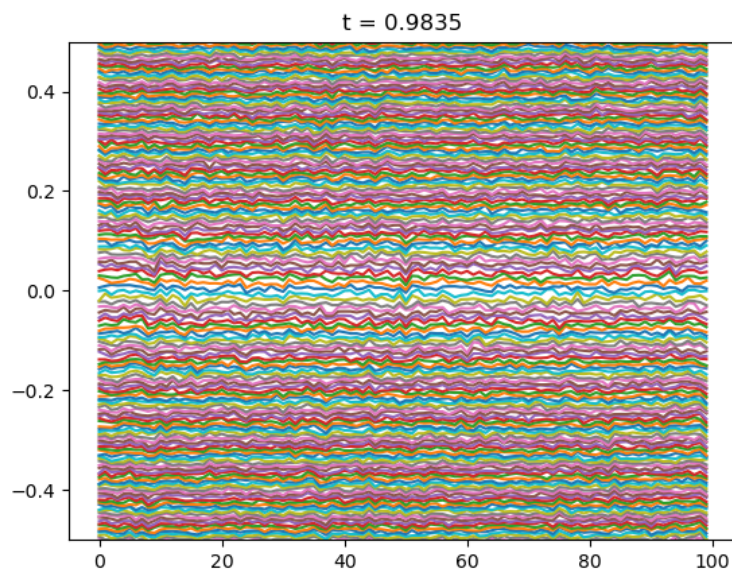
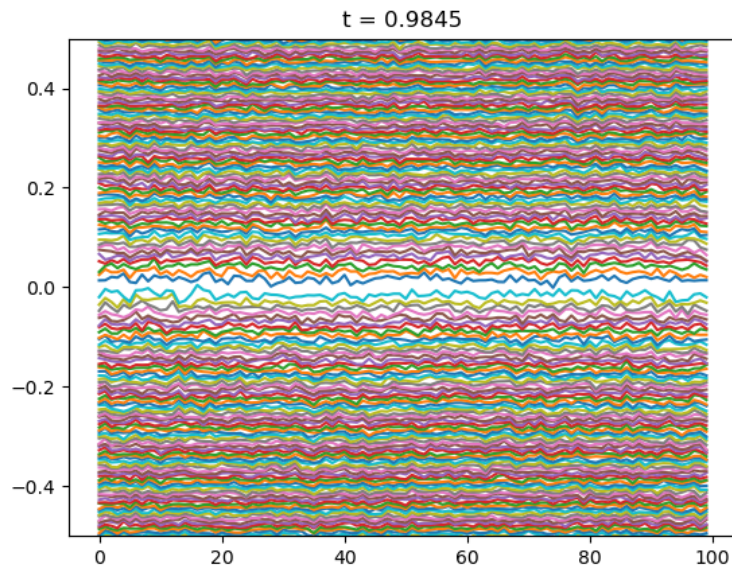


A média ainda poderia ser dada por experimento desde que se centralize a distribuição também.

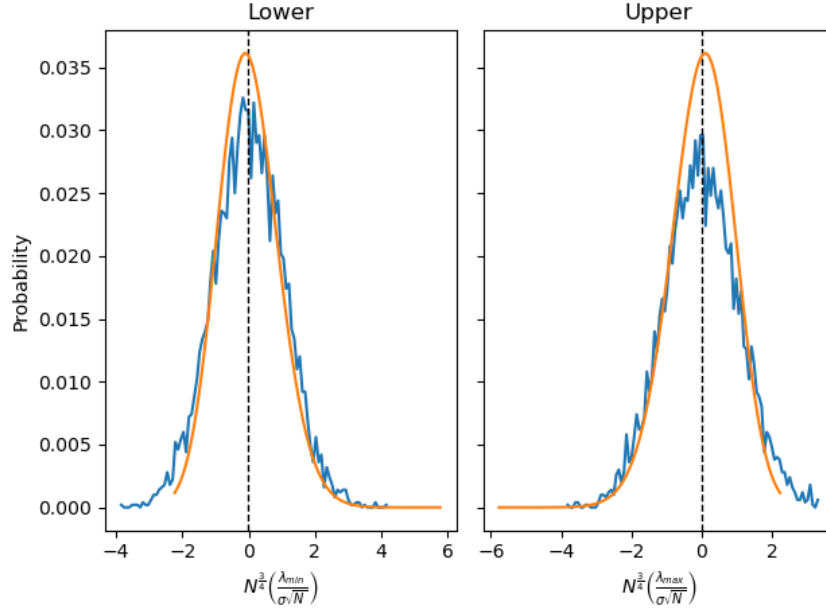
De fato isso também vale para todo o contorno com exceção do ponto de bifurcação interno, onde gostaríamos de ver $\alpha = -\frac{3}{4}$. Ou seja,

$$N^{\frac{3}{4}} \left(\frac{\lambda_{max} - 2\sigma\sqrt{N}}{\sigma\sqrt{N}} \right)$$

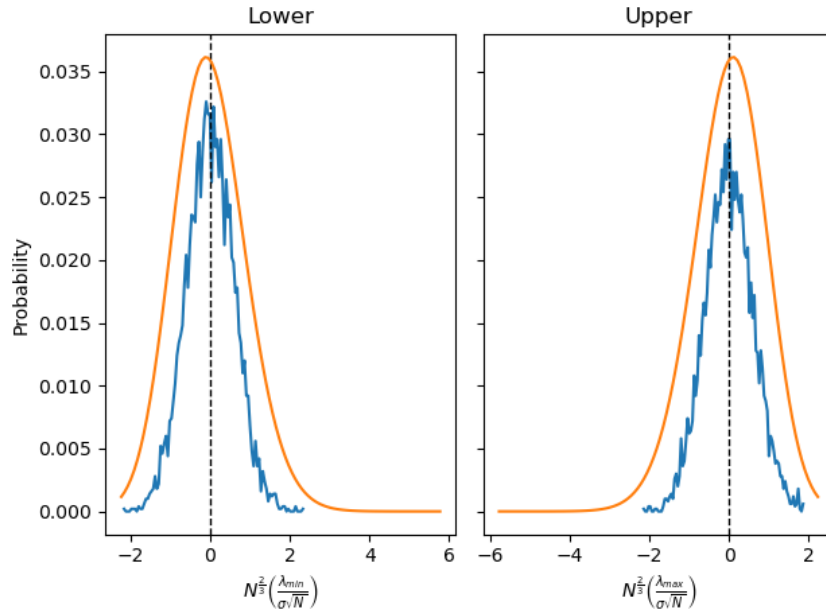
Para nosso caso de uma matriz $1000 \cdot 1000$ procuremos t apropriado para a distribuição dos autovalores médios. Note os autovalores para múltiplos experimentos:



Para $t = 0.9840$ então, faremos para os autovalores médios:



E de fato, se utilizarmos $\alpha = \frac{2}{3}$,

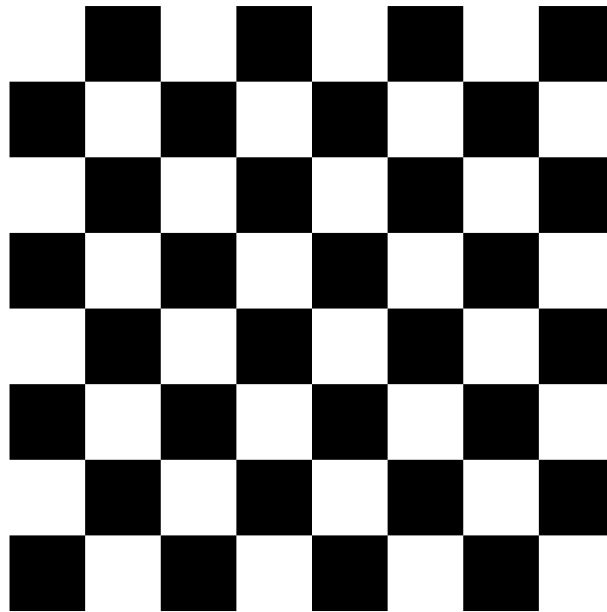


3.4.2 O diamante Asteca

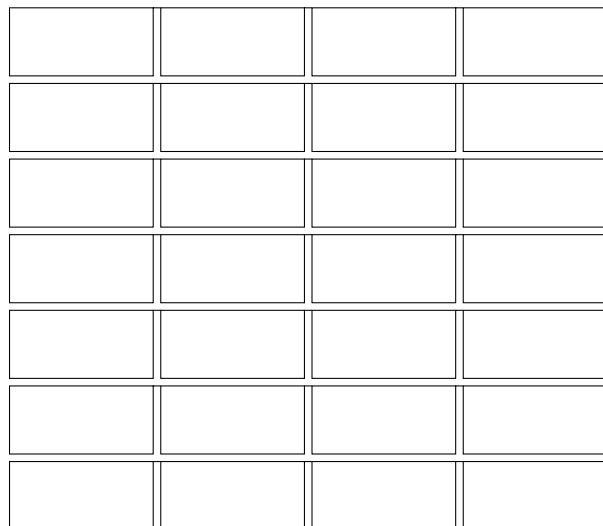
O tabuleiro de xadrez

Outros modelos estocásticos mantém de alguma forma a universalidade que aparece na distribuição de autovalores. Antes, uma introdução.

Se quisermos fazer o tiling de um tabuleiro de xadrez com dominós de 2×1 , sabemos que isso é possível, inclusive por tilings triviais.



Com tilings que podemos fazer trivialmente:

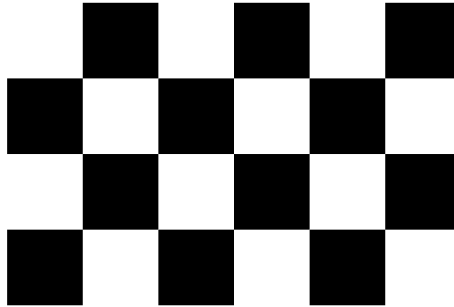


Um interessante detalhe é demonstrar se é possível fazer o mesmo retirando uma peça do tabuleiro. A demonstração é razoavelmente trivial e nos mostra que é impossível fazer tal coisa. Basta notar que todas peças do dominó devem ocupar uma peça branca e uma peça preta. De tal forma que, retirando uma peça, tal cobrimento não pode ser possível pois restará um número ímpar de alguma classe.

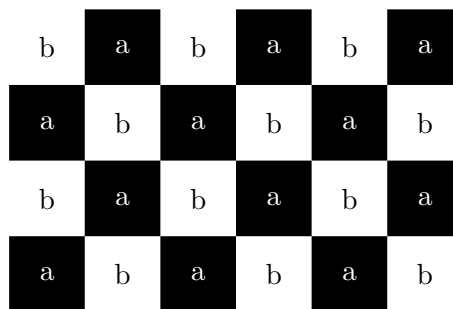
É sempre possível fazer o tiling de um tabuleiro onde se retire duas peças arbitrárias? Claro, se elas forem de mesma cor, a mesma demonstração anterior vale e não será possível fazer o cobrimento. Mas e se forem cores complementares? A demonstração nos diz que é possível retirando pares de cores. Como? É possível mostrar que é pode-se definir um contorno que sigam as células do tabuleiro. Ou seja, um caminho em loop no tabuleiro de peças alternadas que pode ser preenchido por dominós em sequência. Retiradas duas peças do caminho, temos dois casos, um degenerado quando se retira peças sequenciais e é trivial que pode-se preencher o resto (equivalente a retirar um dominó do caminho completo) ou separa-se e duas fitas independentes. Neste caso, basta notar que ambas fitas devem ter um quantidade par de casas alternadas e seguirá trivialmente que é possível as preencher.

De quantas formas preenchemos?

Imagine uma forma qualquer sem buracos.



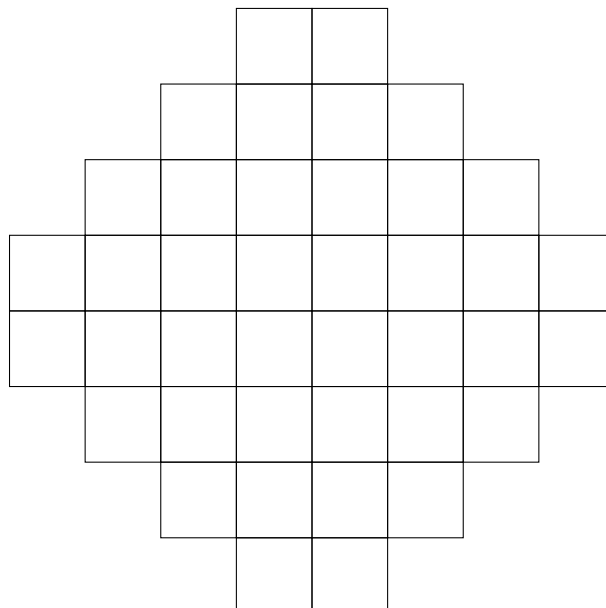
Para saber de quantas formas podemos fazer o preenchimento da forma, precisamos numerar as peças pretas e brancas em uma ordem arbitrária.



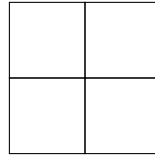
Se numerarmos eles e criarmos uma matriz "de adjacência" onde se preenche com 1 onde dois números são vizinhos horizontais no tabuleiro e i quando são vizinhos verticais. Preenchemos com 0 quando não o são. Teremos nosso resultado calculado quando fizermos o determinante de tal matriz. Isto é, o determinante desta matriz de vizinhança das casas ordenadas dentro das classes nos dá de quantas formas (em módulo e real) podemos preencher o plano com esses dominós.

O diamante

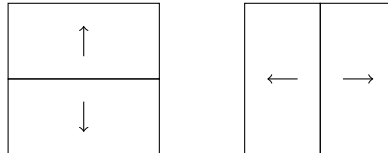
O algoritmo que seguiremos é descrito em [6]. Suponha agora o tabuleiro especial:



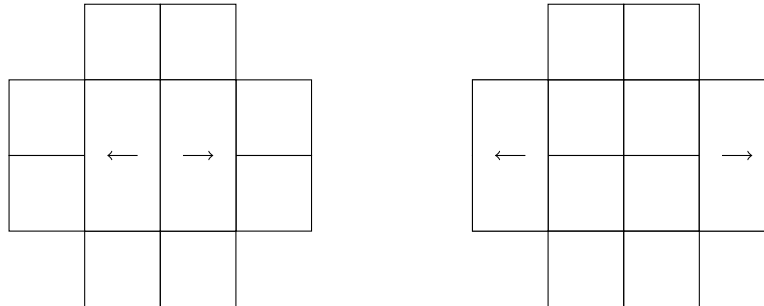
Conseguimos o preencher com os dominós? Podemos seguir o seguinte algoritmo. Suponho o caso mais básico do tabuleiro:



Este podemos fazer o tiling de duas formas triviais,



Realizaremos o tiling de uma grade expandida utilizando de uma técnica curiosa. Note as setas nos dois dominós que demonstramos. Elas vão indicar a direção de deslocamento que as peças devem tomar quando expandirmos o plano. Ou seja:



Note que ao final de cada procedimento sempre restará quadrados de 2×2 completos que podem ser preenchidos independentemente com as duas opções que demos. Às vezes células terão celular que colidem. Devemos eliminar estas e é possível mostrar que estes vem em pares e são equivalentes quando as peças que colidem são eliminadas. Podemos preencher ambos de volta os fazendo diferentes e vale algo curioso. Para cada malha de n -tamanho terão (mesmo que com o artifício descrito) n novos quadrados a se preencher de 2 maneiras. Ou seja, o tiling final pode ser preenchido de $2^{1+2+3+\dots+n}$ formas. Escrevendo o modelo em código:

```

1  PROGRAM ASTECDIAMOND
2
3      DIMENSION IAD(-200:200,-200:200), IVAD(-400:400,-400:400)
4      INTEGER dim
5      COMMON /AD/ IAD, IVAD, dim
6
7      OPEN(UNIT=1, FILE='diamond.txt', STATUS='UNKNOWN')
8      OPEN(UNIT=2, FILE='diamond2.txt', STATUS='UNKNOWN')
9
10     dim = 0
11
12     CALL InitDiamond()
13
14     DO I = 1, 150
15         CALL UpdateDiamond()
```

```

16         END DO
17
18     c        in active cells
19         DO I = -dim+1, dim, 2
20         DO J = -dim+1, dim, 2
21
22             IF (IAD(I,J) .EQ. 0) THEN
23                 CALL InitSquare(I, J)
24             END IF
25
26         END DO
27     END DO
28
29     DO I = -dim+1, dim+1
30         WRITE(1,*) IVAD(I,-dim-1:dim+1)
31     END DO
32
33 END PROGRAM ASTECDIAMOND
34
35 SUBROUTINE InitDiamond()
36     DIMENSION IAD(-200:200,-200:200), IVAD(-400:400,-400:400)
37     COMMON /Ad/ IAD, IVAD, dim
38
39     c        init all cells with 0
40     DO I = -100, 100
41         DO J = -100, 100
42             IAD(I,J) = 0
43         END DO
44     END DO
45
46     DO I = -200, 200
47         DO J = -200, 200
48             IVAD(I,J) = 0
49         END DO
50     END DO
51
52
53 END SUBROUTINE InitDiamond
54
55 SUBROUTINE UpdateDiamond()
56     DIMENSION IAD(-200:200,-200:200), IaVAD(-200:200,-200:200),
57 +     IVAD(-400:400,-400:400)
58     INTEGER dim
59     COMMON /AD/ IAD, IVAD, dim
60
61     c        in active cells
62     DO I = -dim+1, dim, 2
63     DO J = -dim+1, dim, 2
64
65         IF (IAD(I,J) .EQ. 0) THEN
66             CALL InitSquare(I, J)
67         END IF

```

```

68
69         END DO
70     END DO
71
72     c      Update grid size
73         dim = dim + 1
74
75     c      in active cells
76         DO I = -dim+1, dim, 2
77         DO J = -dim+1, dim, 2
78
79             IF (IAD(I,J) .GT. 1) THEN
80                 CALL EraseSquare(I, J)
81             END IF
82
83         END DO
84     END DO
85
86     c      equalize aux grid to zero
87         DO I = -dim-10, dim+10
88         DO J = -dim-10, dim+10
89             IaVAD(I,J) = 0
90         END DO
91     END DO
92
93     c      Move vertices
94         DO I = -dim+1, dim
95         DO J = -dim+1, dim
96
97             IF (IVAD(I,J) .EQ. 1) THEN
98
99                 IaVAD(I+1,J+1) = 1
100
101                 IAD(I+1,J+1) = IAD(I+1,J+1) + 1
102                 IAD(I-1,J-1) = IAD(I-1,J-1) - 1
103
104             ELSE IF (IVAD(I,J) .EQ. 2) THEN
105
106                 IaVAD(I-1,J+1) = 2
107
108                 IAD(I-2,J+1) = IAD(I-2,J+1) + 1
109                 IAD(I,J-1) = IAD(I,J-1) - 1
110
111             ELSE IF (IVAD(I,J) .EQ. -1) THEN
112
113                 IaVAD(I-1,J-1) = -1
114
115                 IAD(I-2,J-2) = IAD(I-2,J-2) + 1
116                 IAD(I,J) = IAD(I,J) - 1
117
118             ELSE IF (IVAD(I,J) .EQ. -2) THEN
119
120                 IaVAD(I+1,J-1) = -2

```

```

121
122             IAD(I+1,J-2) = IAD(I+1,J-2) + 1
123             IAD(I-1,J) = IAD(I-1,J) - 1
124
125             END IF
126         END DO
127     END DO
128
129 c         copy aux grid to main grid
130         DO I = -dim-10, dim+10
131             DO J = -dim-10, dim+10
132                 IVAD(I,J) = IaVAD(I,J)
133             END DO
134         END DO
135
136     END SUBROUTINE UpdateDiamond
137
138     SUBROUTINE InitSquare(i, j)
139         DIMENSION IAD(-200:200,-200:200), IVAD(-400:400,-400:400)
140         COMMON /AD/ IAD, IVAD, dim
141
142
143         toss = RAND(0)
144
145         IF (toss .LT. 0.5) THEN
146             IVAD(i,j) = -1
147             IVAD(i+1,j+1) = 1
148
149             IAD(i-1,j-1) = IAD(i-1,j-1) + 1
150             IAD(i+1,j+1) = IAD(i+1,j+1) + 1
151         ELSE
152             IVAD(i+1,j) = -2
153             IVAD(i,j+1) = 2
154
155             IAD(i-1,j+1) = IAD(i-1,j+1) + 1
156             IAD(i+1,j-1) = IAD(i+1,j-1) + 1
157         END IF
158
159         IAD(i,j) = IAD(i,j) + 2
160
161     END SUBROUTINE InitSquare
162
163     SUBROUTINE EraseSquare(i, j)
164         DIMENSION IAD(-200:200,-200:200), IVAD(-400:400,-400:400)
165         COMMON /AD/ IAD, IVAD, dim
166
167         DO k = i, i+1
168             DO l = j, j+1
169                 IF (IVAD(k,l) .NE. 0) THEN
170
171                     IF ((IVAD(k,l) .EQ. 1) .OR. (IVAD(k,l) .EQ. -1)) THEN
172                         IAD(k-1,l-1) = IAD(k-1,l-1) - 1
173                         IAD(k,l) = IAD(k,l) - 1

```

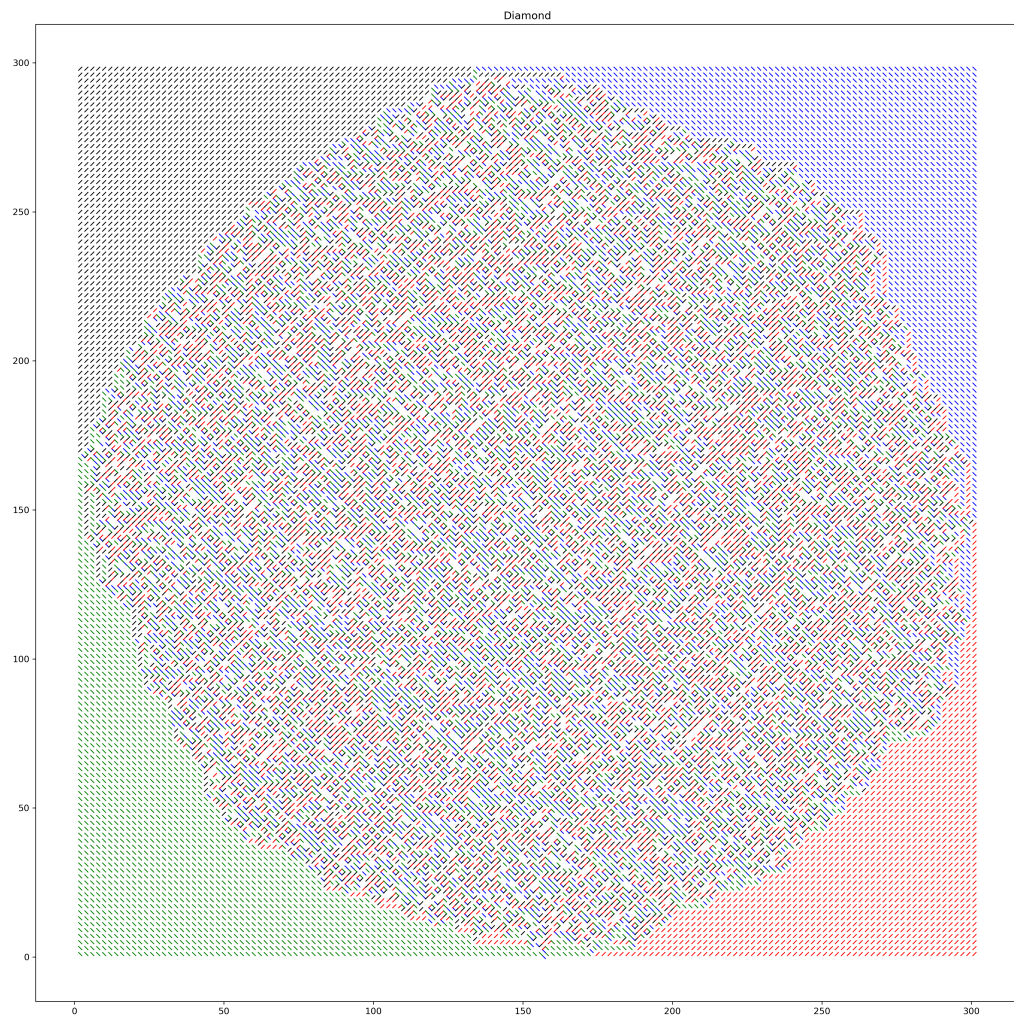


```

174         ELSE IF ((IVAD(k,1) .EQ. 2) .OR. (IVAD(k,1) .EQ. -2)) THEN
175             IAD(k-1,1) = IAD(k-1,1) - 1
176             IAD(k,1-1) = IAD(k,1-1) - 1
177         END IF
178
179         IVAD(k,1) = 0
180
181     END IF
182 END DO
183 END DO
184
185 END SUBROUTINE EraseSquare

```

E temos de saída:



Capítulo 4

Coulombolas! Gases Aleatórios

Retomamos agora os resultados sobre a distribuição dos autovalores para matrizes hermitianas para introduzir o tópico principal deste resumo: Os Gases de Coulomb.

Um dos primeiros resultados foi que para o ensemble do GUE, teríamos que

$$p(M) = \frac{1}{\tilde{Z}_N} e^{-\text{Tr } \tilde{V}(M)} dM$$

Mas estamos mais interessados na distribuição relativa aos autovalores, que podemos expressar escrevendo o jacobiano da transformação,

$$p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{\tilde{Z}_N} \prod_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^\beta \prod_{i=1}^N e^{-V(\lambda_i)} d\lambda$$

Onde

$$\tilde{Z}_N = \int_{\mathbb{R}^N} \prod_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^\beta \prod_{i=1}^N e^{-V(\lambda_i)} d\lambda$$

Lembrando que devemos ter medida uniforme nos autovetores. Por isso podemos expressar apenas nos autovalores. Assim como na física, para resolver nosso Gás de Coulomb, vamos precisar minimizar a energia livre do nosso ensemble. Lembre-se que se trata do ensemble canônico e que devemos ter a energia livre de Helmholtz

$$F = -\frac{1}{k_b} \ln(\tilde{Z}_N)$$

Teremos que os estados mais prováveis serão aqueles em que for maximizada a expressão

$$\begin{aligned} & \prod_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^2 \prod_{i=1}^N e^{V(\lambda_i)} \\ &= \exp \left[-N^2 \left(\frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|} + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N V(\lambda_i) \right) \right] \\ &= \exp(-N^2 \tilde{\mathcal{H}}_N(\lambda)) \end{aligned}$$

Que, como soma assintótica, importaremos apenas com o maior termo da soma de logs. E novamente como na física, vamos então precisar minimizar o Hamiltoniano do sistema $\tilde{\mathcal{H}}_N(\lambda)$!

4.1 Hamiltonianozinho

Vamos introduzir uma função contagem para facilitar o tratamento do conjunto de pontos em \mathbb{R} . Definiremos

$$v_\lambda = \frac{1}{N} \sum_1^N \delta_{\lambda_i} \quad (4.1)$$

Notamos a propriedade de nossa função

$$\int f(x) dv_\lambda(x) = \frac{1}{N} \sum f(x) \quad (4.2)$$

Com isso, se quisermos escrever $\mathcal{H}_N(v_\lambda)$, precisamos notar que

$$\int V(x) dv_\lambda(x) = \frac{1}{N} \sum V(x)$$

e

$$\int \int_{x \neq y} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|} dv_\lambda(x) dv_\lambda(y) = \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|}$$

Unindo esses resultados,

$$\mathcal{H}_N(v_\lambda) = \int \int_{x \neq y} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|} dv_\lambda(x) dv_\lambda(y) + \frac{1}{N} \int \tilde{V}(x) dv_\lambda(x) \quad (4.3)$$

O que acontece quando tratamos do limite termodinâmico? Ou seja, quando $N \rightarrow \infty$. Estaremos transicionando da nossa função v_λ para uma densidade $\phi(x)dx$, ou seja,

$$\int f(x) dv_\lambda(x) = \int f(x) \phi(x) dx$$

Note que, para justificar isso, escrevemos

$$\int f(x) dv_\lambda(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\lambda_i)$$

Mas é claro, nossos lambdas são desigualmente espaçados, definimos uma função (ϕ) que mapeie pontos igualmente distribuídos nos nossos autovalores de forma que

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\Phi(x_i))$$

Assim podemos retomar e escrever

$$\int f(\Phi(s)) ds = \int f(x) \frac{1}{\Phi'(\Phi^{-1}(x))} = \int f(x) (\Phi^{-1})'(x) dx = \int f(x) \phi(x) dx = \int f(x) d\psi(x)$$

Onde $\Phi(s) = x$, $ds = \frac{dx}{\Phi'(s)}$ e $\psi = \Phi^{-1}$. Em suma, podemos afirmar que nossa função converge para a densidade de forma

$$\int f(x) dv_\lambda(x) = \int f(x) \phi(x) dx$$

Finalmente podemos pensar em minimizar nossa energia livre, ou equivalentemente minimizar o hamiltoniano. Note que pela equação 4.3, nosso potencial externo é limitado

e deve ir à zero com o limite aplicado. Teremos uma situação sem equilíbrio!! Precisamos garantir um potencial $V(x) = N\tilde{V}(x)$. Nossa nova distribuição será

$$\frac{1}{\tilde{Z}_N} e^{-N \operatorname{Tr}(V(M))} dM$$

e equivalentemente,

$$\frac{1}{Z_N} \prod_{i < j} (\lambda_i - \lambda_j)^2 \prod_{i=1}^N e^{-NV(\lambda_i)} d\lambda = \frac{1}{Z_N} e^{-N^2 \mathcal{H}_N(\lambda)}$$

E finalmente poderemos expressar de forma correta

$$\mathcal{H}_N(v_\lambda) \rightarrow \int \int_{x \neq y} \log \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|} d\phi(x) d\phi(y) dx dy + \int V(x) d\phi(x) dx \equiv E^V(\phi) \quad (4.4)$$

E $\phi(x)$ será aquela que minimize $E^V(\phi)$ que limita a energia livre discutida.

Capítulo 5

Simulações e o Artigo

Nos referenciaremos aqui aos desenvolvimento do artigo citado em [1]. Vamos compilar algum desenvolvimento teórico necessário e explicitar os resultados e métodos do artigo.

5.1 Introdução Teórica

Vamos esquematizar as notações a serem usadas. O artigo toma um subespaço S de dimensão d em \mathbb{R}^n . O subespaço toma a métrica de Lebesgue, denotado dx . O campo externo é denominado $V : S \mapsto \mathbb{R}$ e a interação entre partículas $W : S \mapsto (-\infty, \infty]$. 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. Por último,

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

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 .

5.1.1 Gases de Coulomb

Eu não entendo Gases de Coulomb. O importante aqui é notar que tomando o subespaço S como um condutor em \mathbb{R}^n e $W = g$, onde g é o kernel de Coulomb ou função de Green em \mathbb{R}^n onde

$$g(x) = \begin{cases} \log \frac{1}{|x|} & \text{sen} = 2 \\ \frac{1}{|x|^{n-2}} & \text{sen} \geq 2 \end{cases}$$

Em termos de física, interpretamos $H_N(x_1, x_2, \dots, x_N)$ é energia eletrostática da configuração dos N elétrons em \mathbb{R}^n contidos em S nas posições x_1, x_2, \dots, x_N em um campo externo de potencial V . g expressa a repulsão de coulomb da interação entre dois corpos. P_N pode ser visto como a medida de Boltzmann-Gibbs, com β_N sendo o inverso da temperatura. P_N é o denominado gás de Coulomb.

5.1.2 Log-Gases

Log-Gases são caracterizados pela escolha de $n = d$ e W tal que

$$W(x) = \log \frac{1}{|x|} = -\frac{1}{2} \log(x_1^2 + \cdots + x_d^2)$$

note que os gases coincidem quando $n = d = 2$.

5.1.3 Medidas de Equilíbrio

É sabido que a medida empírica μ_N tende, quando $N \rightarrow \infty$ para uma medida de probabilidade não aleatória

$$\mu^* = \arg \inf \epsilon$$

sendo o minimizante único da função 'energia' ϵ convexa e semi contínua definida por

$$\mu \mapsto \epsilon(\mu) = \int V d\mu + \int \int W(x - y) \mu(dx) \mu(dy)$$

Se $W = g$ for o kernel de Coulomb, $\epsilon(\mu)$ é a energia eletrostática da distribuição de cargas μ .

5.2 Simulando Coulomb-Log Gases

Para alguns modelos de Gases, sabemos que é conveniente usar modelos de matrizes aleatórias quando estas estiverem disponíveis. Processos determinantal também podem ser de ajuda quando $\beta = 2$. Fora esses casos, existem ainda métodos alternativos como o *Overdamped Langevin Diffusion Algorithm*, *Metropolis-Hastings algorithm*, *Metropolis adjusted Langevin algorithm* e versões cinéticas chamadas *Hybrid or Hamiltonian Monte Carlo* baseada em uma versão cinética (*underdamped*) da difusão de Langevin.

Em geral amostrar a medida resulta em dificuldades. A computação de forças de e energias escala com N^2 pelo Hamiltoniano tratar de interações par a par. Outra dificuldade são as singularidades em W , que resultam em instabilidades numéricas.

5.2.1 Os típicos

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

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

Sob alguma condição em β_N e V podemos afirmar que

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

discretizado, tomaríamos 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

$$x_{k+1} = \begin{cases} \tilde{x}_{k+1} & w/p_k \\ x_k & w/1 - p_k \end{cases}$$

5.2.2 O Híbrido de Monte Carlo

O algoritmo híbrido de Monte Carlo é baseado o 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 $(X_t, Y_t)_{t \geq 0}$ ser 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.

O algoritmo discreto

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

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

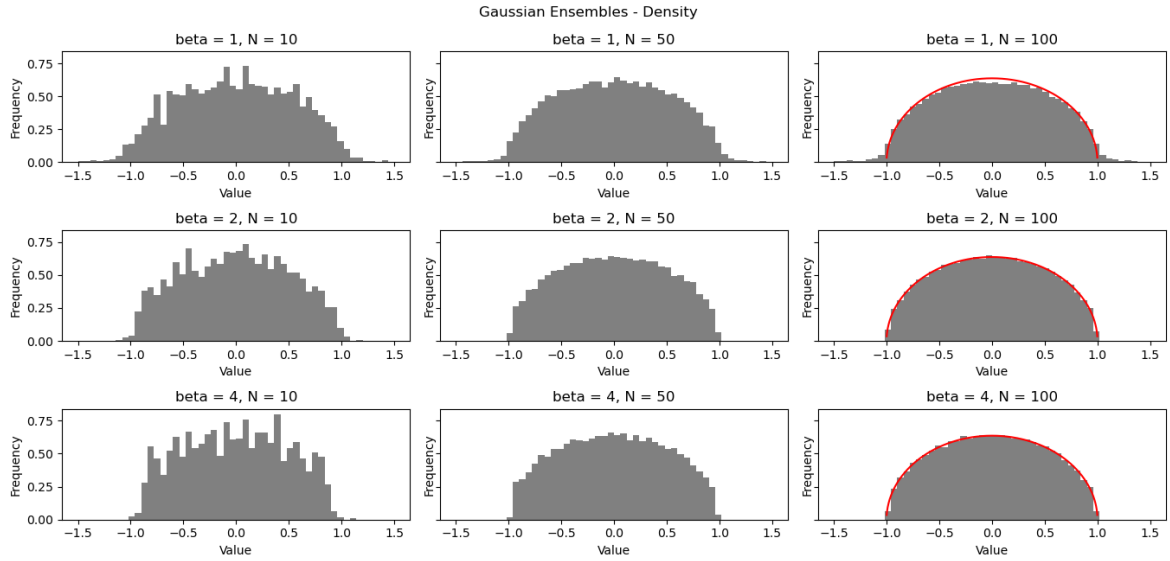


Figura 5.1: Validação para ensembles clássicos, utilizamos 200000 passos registrando a cada 500 a partir da metade dos passos. $\Delta t = 0.1$, $\gamma = 1$, $\alpha = 1.0$. Para replicar a semente foi 987991650.

4. defina

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

5.3 Validando a implementação

5.3.1 Validando nosso programa

A implementação simples do algoritmo descrito está disponível em GitHub - Algoritmo Artigo. Também fica disponível no anexo A. Podemos ainda checar os ensembles clássicos e ver se podemos observar a formação da lei do semicírculo de Wigner.

5.3.2 Outras distribuições

Potencial Quártico

Potencial Mônico

5.3.3 Paralelização

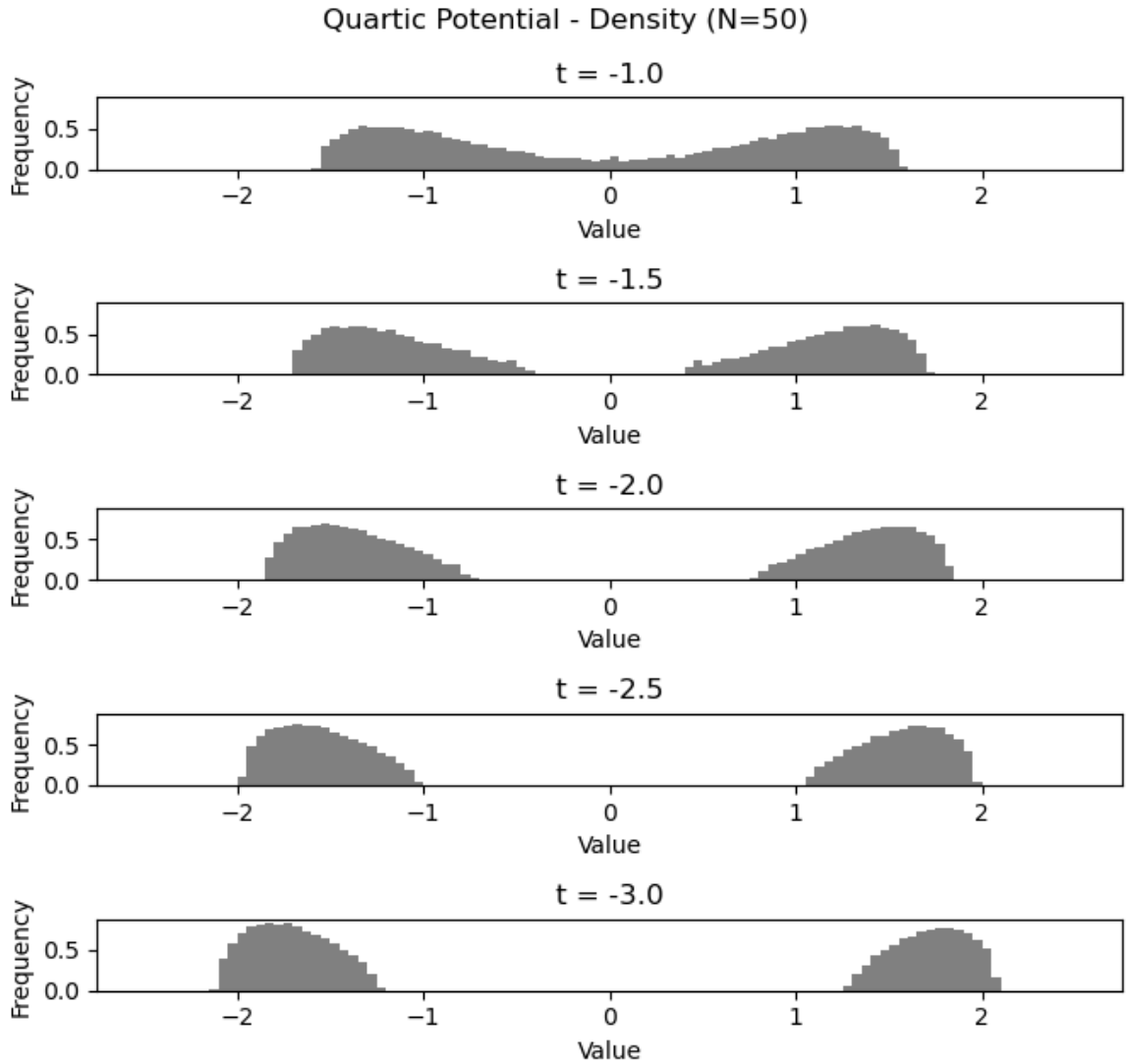


Figura 5.2: Validação para potencial quártico, $V(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{t}{2}x^2$. Utilizamos 1000000 passos registrando a cada 500 a partir da metade dos passos. $\Delta t = 0.1$, $\gamma = 10$, $\alpha = 0.1$. Para replicar a semente foi 987991650.

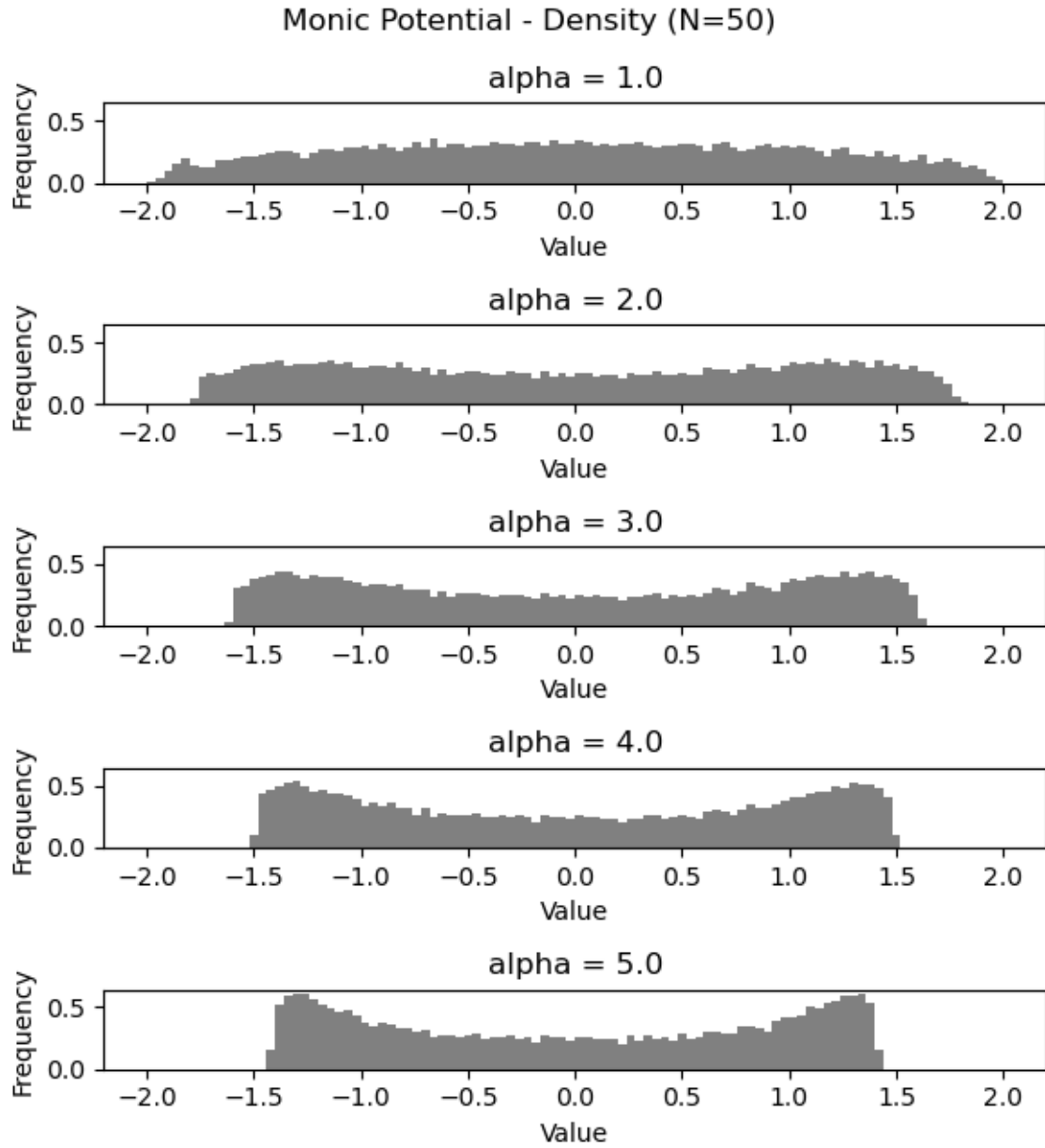


Figura 5.3: Validação para potencial mônico, $V(x) = \frac{t}{2\alpha}x^{2\alpha}$. Utilizamos 1000000 passos registrando a cada 500 a partir da metade dos passos. $t = 1$, $\Delta t = 0.1$, $\gamma = 10$, $\alpha = 0.1$. Para replicar a semente foi 987991650.

Bibliografia

- [1] Djalil Chafaï and Grégoire Ferré. Simulating coulomb and log-gases with hybrid monte carlo algorithms. *Journal of Statistical Physics*, 174(3):692–714, nov 2018.
- [2] Yan V. Fyodorov. Introduction to the random matrix theory: Gaussian unitary ensemble and beyond, 2010.
- [3] Arno Kuijlaars. Lecture notes on riemann-hilbert problems and multiple orthogonal polynomials.
- [4] Giacomo Livan, Marcel Novaes, and Pierpaolo Vivo. *Introduction to Random Matrices*. Springer International Publishing, 2018.
- [5] M.L. MEHTA. Preface. In M.L. MEHTA, editor, *Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels*. Academic Press, 1967.
- [6] James Propp. Generalized domino-shuffling, 2002.

Apêndice A

Algoritmo Artigo

```
1 C#####
2 C      Implementation of Algorithm described in the paper
3 C      "Simulating Coulomb and Log-Gases with Hybrid Monte Carlo Algorithms"
4 C      by Djalil Chafaï and Gregoire Ferré
5 C      DOI: https://doi.org/10.1007/s10955-018-2195-6
6 C
7 C      Author: Pimenta, J. V. A.
8 C#####
9 C#####
10 PROGRAM HMC
11
12 IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
13
14 C#####
15 C#####
16 C      Considerations:
17 C
18 C      We consider gases that in a subspace S of  $\mathbb{R}^n$ , with dimension m
19 C
20 C      The external potential is given by  $V : S \rightarrow \mathbb{R}$ 
21 C
22 C      The interaction potential is given by  $W : S \rightarrow (-\infty, \infty]$ 
23 C
24 C      We take N particles in S, and for any  $N \geq 2$ , we define  $P_N$  to be
25 C       $P_N = 1/Z_N \exp(-\beta H_N(x_1, \dots, x_N)) dx_1 \dots dx_N$ 
26 C       $\therefore Z_N$  is the partition function,  $\beta$  is the inverse temperature
27 C      and  $H_N$  is the Hamiltonian
28 C
29 C      The Hamiltonian is given by
30 C       $H_N(x_1, \dots, x_N) = 1/N \sum_{i=1}^N V(x_i) +$ 
31 C       $1/2N^2 \sum_{i \neq j} W(x_i - x_j)$ 
32 C
33 C      Note that the Hamiltonian is invariant by permutation and func of
34 C       $\mu_N = 1/N \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$ 
35 C
36 C      It is known that the empirical measure converges to a non random
37 C      measure, i.e.  $\mu_N \rightarrow \arg \inf \epsilon(\mu)$  where
38 C       $\epsilon(\mu) = \int V(x) d\mu(x)$ 
```

```

39 C          + 1/2 \int\int W(x-y)d\mu(x)d\mu(y)
40 C
41 C -----
42 C
43 C The Hybrid Monte Carlo algorithm is described as follows:
44 C
45 C Define a space  $E = \mathbb{R}^{mn}$  and let  $U_N : E \rightarrow \mathbb{R}$  be smooth such that
46 C  $\exp[-\beta U_N]$  is a density w.r.t. the Lebesgue measure on  $E$ 
47 C
48 C Let  $(X_t, V_t)$  be a Markov chain on  $E \times E$  with invariant measure
49 C  $\pi_N(dx dv) = \exp[-\beta U_N(x)] dx dv$  solution of
50 C
51 C  $dX_t = \alpha_N \nabla U_N(Y_t) dt$ 
52 C  $dY_t = -\alpha_N \nabla H_N(X_t) dt$ 
53 C  $- \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(X_t) dt$ 
54 C  $+ \sqrt{2 ((\gamma_N \alpha_N) / \beta_N)} dB_t$ 
55 C
56 C where  $(B_t)_{t \geq 0}$  is a Brownian motion on  $E$ 
57 C  $\gamma_N$  is a coefficient that represents the friction
58 C  $\alpha_N$  is a coefficient that represents the step size
59 C
60 C #####
61 C #####
62 C Parameters:
63 C
64 C N: number of particles, scalar
65 C m: dimension of the space, scalar
66 C beta: inverse temperature, scalar
67 C alpha: step size, scalar
68 C gamma: friction, scalar
69 C nsteps: number of steps, scalar
70 C eta: coefficient  $\exp[-\gamma_N \alpha_N \Delta t]$ , scalar
71 C sdn: coefficient  $\sqrt{(1 - \eta^2) / \beta_N}$ , scalar
72 C pi: coefficient  $\pi$ , scalar
73 C timestep: time step, scalar
74 C niter: number of iterations to register, scalar
75 C p: acceptance probability, scalar
76 C
77 C xk: position at k, vector of size (N,m)
78 C xtildek1: candidate positions for k+1, vector of size (N,m)
79 C vk: velocities at k, vector of size (N,m)
80 C vtilde: gaussian modified velocities, vector of size (N,m)
81 C vtildek1: candidate velocities for k+1, vector of size (N,m)
82 C F: force, vector of size (N,m)
83 C GVe: gradient of the external potential, vector of size (m)
84 C GW: gradient of the interaction potential, vector of size (m)
85
86 C PARAMETER (N = 100, m = 1, beta = 4.0, alpha = 1)
87
88 C DIMENSION xk(N,m), xtildek1(N,m),
89 & vk(N,m), vtilde(N,m), vtildek1(N,m),
90 & F(N,m), GVe(m), GW(m)

```

```

91
92     COMMON /X/ xk, xtildek1
93     COMMON /V/ vk, vtilde, vtildek1
94     COMMON /G/ F, GVe, GW
95
96     nsteps = 200000
97     niter = 500
98     timestep = 0.1
99     gamma = 1.0
100
101     eta = EXP(-gamma * alpha * timestep)
102     sdn = SQRT((1 - eta**2) / beta) / N
103     pi = ACOS(-1.d0)
104
105     call srand(987991650)
106
107 C#####
108 C#####
109 C   Step 1: Initialization of (x0, v0)
110 C   We take x0 = 0 and v0 = 0
111 C   We also initialize xk = x0 and vk = v0
112
113     CALL INIT()
114
115 C -----
116
117     OPEN(1,FILE='dataX.txt',STATUS='UNKNOWN')
118     OPEN(2,FILE='dataV.txt',STATUS='UNKNOWN')
119
120     DO 10 k = 1, nsteps
121
122 C -----
123 C   Step 2: Update the velocities with
124 C    $v_{tilde\_k} = \sqrt{\eta} v_{k\_k} + \sqrt{1 - \eta} \sqrt{\beta_N} G_k$ 
125 C   where  $G_k$  is a standard Gaussian vector
126 C   and  $\eta = \exp[-\gamma_N \alpha_N \Delta t]$ 
127
128     CALL GaussianV(eta, sdn, pi)
129
130 C -----
131 C   Step 3: Calculate
132 C    $v_{tildehalf\_k} = v_{tilde\_k} - \alpha_N \nabla H_N(x_k) \text{ timestep}/2$ 
133 C    $x_{tildek1\_k} = x_k + \alpha_N v_{tildehalf\_k} \text{ timestep}$ 
134 C    $v_{tilde} = v_{tildehalf\_k} - \alpha_N \nabla H_N(x_{tildek1\_k}) \text{ timestep}/2$ 
135 C
136 C   Note that we update a half step of the velocities then we update
137 C   the positions and then we update the velocities again
138
139     CALL UPDATE(timestep, alpha, beta)
140
141 C -----
142 C   Step 4: define the acceptance probability
143 C    $prob=1 - \exp[-\beta_N (H_N(x_{tildek1\_k})-H_N(x_k)+v_{tilde\_k}^2/2-v_k^2/2)]$ 

```

```

144
145     p = PROB(beta)
146
147 C -----
148 C     Step 5: accept or reject the candidate with probability p
149
150     IF (RAND(0) <= p) THEN
151         xk = xtildek1
152         vk = vtildek1
153     ELSE
154         vk = -vtildek1
155         CALL GRAD_H(.FALSE., beta)
156     END IF
157
158 C -----
159 c     Save some data every 1000 steps
160     IF (k > nsteps/2) THEN
161         IF (MOD(k,niter) == 0) THEN
162             WRITE(1,*) xk / SQRT(2*beta)
163             WRITE(2,*) vk
164             WRITE(*,*) k, XK(1,1), VK(1,1)
165         END IF
166     END IF
167
168 C -----
169
170 10  END DO
171
172     CLOSE(1)
173     CLOSE(2)
174
175 C#####
176
177     END PROGRAM HMC
178
179 C#####
180 C     Subroutines:
181
182 C     INIT: initialization of (x0, v0)
183 c     modifies xk, vk, F
184     SUBROUTINE INIT()
185         PARAMETER(N = 100, m = 1)
186         IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
187         DIMENSION xk(N,m), xtildek1(N,m),
188 &                 vk(N,m),vtilde(N,m),vtildek1(N,m),
189 &                 F(N,m), GVe(m), GW(m)
190         COMMON /X/ xk, xtildek1
191         COMMON /V/ vk, vtilde, vtildek1
192         COMMON /G/ F, GVe, GW
193
194         DO i = 1, N
195             DO j = 1, m
196

```

```

197         xk(i,j) = -1.0 + 2*RAND(0)
198         vk(i,j) = 0.0
199         F(i,j) = 0.0
200
201     END DO
202 END DO
203
204 END SUBROUTINE INIT
205
206 C    GaussianV: update the velocities with the gaussian variable
207 c    modifies vtilde
208 SUBROUTINE GaussianV(eta, sdn, pi)
209     PARAMETER(N = 100, m = 1)
210     IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
211     DIMENSION vk(N,m),vtilde(N,m),vtildek1(N,m)
212     COMMON /V/ vk, vtilde, vtildek1
213
214     DO i = 1, N
215     DO j = 1, m
216         vtilde(i,j) = eta * vk(i,j) + sdn * Gauss(pi)
217     END DO
218     END DO
219
220 END SUBROUTINE GaussianV
221
222 C    UPDATE: update the positions and velocities
223 c    modifies xtildek1 and vtildek1
224 SUBROUTINE UPDATE(tstep, alpha, beta)
225     PARAMETER(N = 100, m = 1)
226     IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
227     DIMENSION xk(N,m), xtildek1(N,m),
228 &             vk(N,m),vtilde(N,m),vtildek1(N,m),
229 &             F(N,m), GVe(m), GW(m)
230     COMMON /X/ xk, xtildek1
231     COMMON /V/ vk, vtilde, vtildek1
232     COMMON /G/ F, GVe, GW
233
234     DO i = 1, N
235         vtilde(i,:) = vtilde(i,:) + alpha*F(i,)*tstep/2
236         xtildek1(i,:) = xk(i,:) + alpha*vtilde(i,)*tstep
237     END DO
238
239     CALL GRAD_H(.TRUE., beta)
240
241     DO i = 1, N
242         vtildek1(i,:) = vtilde(i,:) + alpha*F(i,)*tstep/2
243     END DO
244
245 END SUBROUTINE UPDATE
246
247 C    GRAD_H: gradient of the Hamiltonian (force)
248 c    modifies F, GVe and GW

```



```

249     SUBROUTINE GRAD_H(next, beta)
250         PARAMETER(N = 100, m = 1)
251         IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
252         DIMENSION x(N,m), xk(N,m), xtildek1(N,m),
253 &             F_aux(N,N,m), F(N,m), GVe(m), GW(m)
254         LOGICAL next
255         COMMON /G/ F, GVe, GW
256         COMMON /X/ xk, xtildek1
257
258         IF (next) THEN
259             x = xtildek1
260         ELSE
261             x = xk
262         END IF
263
264         DO i = 1, N
265             DO j = 1, i-1
266                 CALL GRAD_W(x(i,:), x(j,:))
267                 F_aux(i,j,:) = - GW
268             END DO
269         END DO
270
271         DO i = 1, N
272
273             F(i,:) = 0.0
274
275             DO j = 1,i-1
276                 F(i,:) = F(i,:) + F_aux(i,j,:)
277             END DO
278
279             DO j = i+1,N
280                 F(i,:) = F(i,:) - F_aux(j,i,:)
281             END DO
282
283             F(i,:) = F(i,:) / N
284
285             CALL GRAD_Ve(x(i,:), beta)
286             F(i,:) = F(i,:) - GVe
287
288             F(i,:) = F(i,:) / N
289
290         END DO
291
292     END SUBROUTINE GRAD_H
293
294 C   GRAD_Ve: gradient of the external potential
295 c   modifies GVe
296     SUBROUTINE GRAD_Ve(x, beta)
297         PARAMETER(N = 100, m = 1)
298         IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
299         DIMENSION x(m), F(N,m), GVe(m), GW(m)
300         COMMON /G/ F, GVe, GW

```

```

301
302 c          Gradient of V(x) = ||x||^2 / (2 * beta) Beta - Hermite
303          GVe = x / beta
304
305          END SUBROUTINE GRAD_Ve
306
307 C          GRAD_W: gradient of the interaction potential
308 c          modifies GW
309          SUBROUTINE GRAD_W(x, y)
310              PARAMETER(N = 100, m = 1)
311              IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
312              DIMENSION x(m), y(m), v(m),
313 &                  F(N,m), GW(m), GVe(m)
314              COMMON /G/ F, GVe, GW
315
316 c          Gradient of W(x) = -log(||x||)
317          v = x-y
318          GW = -v / NORM2(v)**2
319
320          END SUBROUTINE GRAD_W
321 C#####
322 C#####
323 C          Functions:
324 C          1-FUNCTION ARE CALLED IN MAIN
325 C          2-FUNCTION ARE CALLED IN SUBROUTINES
326 C          3-FUNCTION ARE CALLED IN FUNCTIONS
327
328 C          (2-FUNCTION) Gauss: gaussian variable
329 c          return a standard gaussian variable, scalar
330          FUNCTION Gauss(pi)
331              IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
332              Gauss = 1000
333              DO WHILE (Gauss > 100)
334                  Gauss = sqrt(-2.*LOG(RAND()))*COS(2.*pi*RAND())
335              END DO
336              RETURN
337          END FUNCTION Gauss
338
339 C          (1-FUNCTION) PROB: calculate the acceptance probability
340 c          return the acceptance probability, scalar
341          FUNCTION PROB(beta)
342              PARAMETER(N = 100, m = 1)
343              IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
344              DIMENSION vk(N,m),vtilde(N,m),vtildek1(N,m)
345              COMMON /V/ vk, vtilde, vtildek1
346
347              Hi = H(.FALSE.,beta)
348              Hf = H(.TRUE.,beta)
349
350              PROB = EXP(-beta * (Hf-Hi))
351
352              DO i = 1, N
353                  dtilde = DOT_PRODUCT(vtildek1(i,:),vtildek1(i,:))

```

```

354         dk = DOT_PRODUCT(vk(i,:),vk(i,:))
355         PROB = PROB * EXP(-beta * (dtilde - dk) / 2)
356     END DO
357
358     RETURN
359 END FUNCTION PROB
360
361 C    (3-FUNCTION) H: Hamiltonian
362 c    return the Hamiltonian, scalar
363 FUNCTION H(next, beta)
364     PARAMETER(N = 100, m = 1)
365     IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
366     LOGICAL next
367     DIMENSION x(N,m), xk(N,m), xtildek1(N,m)
368     COMMON /X/ xk, xtildek1
369
370     if (next) then
371         x = xtildek1
372     else
373         x = xk
374     end if
375
376     H = 0.0
377
378     DO i = 1, N
379         H = H + Ve(x(i,:), beta)
380         DO j = i+1, N
381             H = H + W(x(i,:), x(j,:)) / (2*N)
382         END DO
383     END DO
384
385     H = H / N
386
387     RETURN
388 END FUNCTION H
389
390 C    (3-FUNCTION) Ve: external potential
391 c    return the external potential, scalar
392 FUNCTION Ve(x, beta)
393     PARAMETER(N = 100, m = 1)
394     IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
395     DIMENSION x(m)
396
397 c    V(x) = ||x||^2 / (2*beta) Beta - Hermite
398     Ve = DOT_PRODUCT(x,x) / (2*beta)
399
400     RETURN
401 END FUNCTION Ve
402
403 C    (3-FUNCTION) W: interaction potential
404 c    return the interaction potential, scalar
405 FUNCTION W(x, y)

```

```

406      PARAMETER(N = 100, m = 1)
407      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
408      DIMENSION x(m), y(m)
409
410      C      W(x) = -log(||x||)
411      W = -LOG(NORM2(x-y))
412
413      RETURN
414      END FUNCTION W
415
416      C#####

```

Apêndice B

Transformação Legendre

Transformações de Legendre tem ampla aplicação e interpretação. Faremos uma breve dissertação de duas possíveis visualizações do processo.

B.1 Tangentes

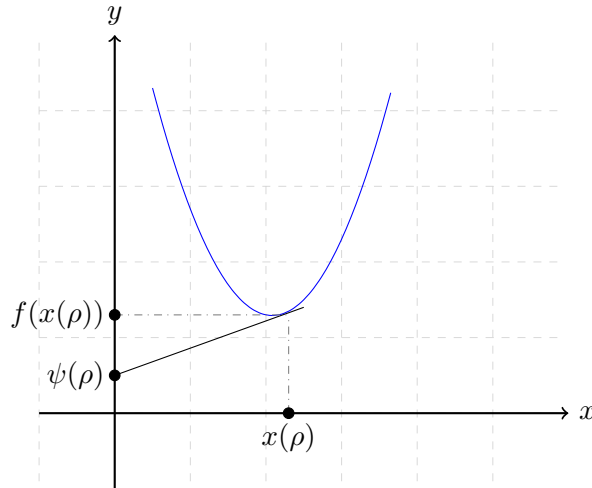
Uma primeira interpretação do processo representa uma mudança clara de variável a partir de tangentes de uma função de concavidade bem definida. Faremos

$$y = f(x) \mapsto \psi(\rho) = f(x(\rho)) - \rho x(\rho)$$

onde

$$\rho \equiv \frac{y - f(x(\rho))}{x - x(\rho)} = \frac{\psi(\rho) - f(x(\rho))}{0 - x(\rho)}$$

Que podemos visualizar



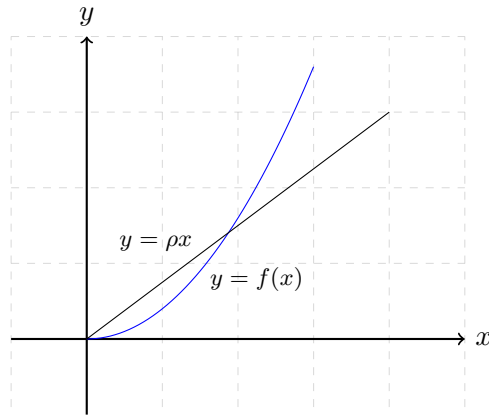
De forma que a transformada é criada pela projeção desta tangente no eixo $x=0$.

B.2 Otimização

Outra forma de visualizar a transformada é por um problema mais conveniente de otimização. Definiremos

$$\psi(\rho) = \max_x [\rho x - f(x)]$$

Onde teremos



Se definirmos

$$g(x) = \rho x - f(x)$$

Minimizaremos $g(x)$ e teremos a condição $f'(x^*) = \rho$. Ou seja

$$f'(x(\rho)) = \rho \implies \max_x [\rho x - f(x)] = \rho x(\rho) - f(x(\rho))$$

Que é equivalente à dizer

$$\psi(\rho) = \min_x [f(x) - \rho x] = f(x(\rho)) - \rho x(\rho)$$

Apêndice C

Soma Assintóticas

Existe uma aproximação a se fazer no logaritmo de somas assintóticas que pode ser de interesse. Assuma

$$S = \sum_{i=1}^M a_i$$

Se $a_i(N) \sim e^{\phi_i N}$ ou $\log(a_i) \approx \phi_i N$, podemos afirmar

$$\log(S) \sim \log(a_{max})$$

Para demonstrar isso, notamos

$$\begin{aligned} a_{max} < S < M a_{max} \\ \frac{\log(a_{max})}{N} < \frac{\log S}{N} < \frac{\log(a_{max})}{N} + \frac{\log M}{N} \end{aligned}$$

Ou seja, desde que $\frac{\log M}{N} \rightarrow 0$. Isto ocorrerá desde que M seja sub-exponencial. Contudo **NOTE** que dizer

$$\log(n!) \sim n \log n - n$$

Não implica que

$$n! \sim \left(\frac{n}{e}\right)^n$$

Em algumas situações é possível afirmar contudo

$$n! \sim \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi n}$$

Apêndice D

Det Vandermonde

A formulação nos diz

$$|V| = \prod_{1 \leq i < j \leq n} (\alpha_j - \alpha_i) \quad (D.1)$$

Note que podemos iniciar com uma matriz $n \cdot n$. Seja c_i a coluna i , multiplicamos a coluna c_i por $-\alpha_1$ e somamos com a coluna c_{i+1}

$$V = \begin{bmatrix} 1 & \alpha_1 & \alpha_1^2 & \dots & \alpha_1^{n-1} \\ 1 & \alpha_2 & \alpha_2^2 & \dots & \alpha_2^{n-1} \\ 1 & \alpha_3 & \alpha_3^2 & \dots & \alpha_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \alpha_n & \alpha_n^2 & \dots & \alpha_n^{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \alpha_2 - \alpha_1 & \alpha_2(\alpha_2 - \alpha_1) & \dots & \alpha_2^{n-2}(\alpha_2 - \alpha_1) \\ 1 & \alpha_3 - \alpha_1 & \alpha_3(\alpha_3 - \alpha_1) & \dots & \alpha_3^{n-2}(\alpha_3 - \alpha_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \alpha_n - \alpha_1 & \alpha_n(\alpha_n - \alpha_1) & \dots & \alpha_n^{n-2}(\alpha_n - \alpha_1) \end{bmatrix}$$

Utilizando do Teorema de Laplace, o determinante vai ser definido simplesmente por

$$|V| = \begin{vmatrix} \alpha_2 - \alpha_1 & \alpha_2(\alpha_2 - \alpha_1) & \dots & \alpha_2^{n-2}(\alpha_2 - \alpha_1) \\ \alpha_3 - \alpha_1 & \alpha_3(\alpha_3 - \alpha_1) & \dots & \alpha_3^{n-2}(\alpha_3 - \alpha_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_n - \alpha_1 & \alpha_n(\alpha_n - \alpha_1) & \dots & \alpha_n^{n-2}(\alpha_n - \alpha_1) \end{vmatrix}$$

De onde é claro, podemos fatorar os coeficientes e ter

$$|V| = (\alpha_2 - \alpha_1)(\alpha_3 - \alpha_1) \dots (\alpha_n - \alpha_1) \begin{vmatrix} 1 & \alpha_2 & \alpha_2^2 & \dots & \alpha_2^{n-2} \\ 1 & \alpha_3 & \alpha_3^2 & \dots & \alpha_3^{n-2} \\ 1 & \alpha_4 & \alpha_4^2 & \dots & \alpha_4^{n-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \alpha_n & \alpha_n^2 & \dots & \alpha_n^{n-2} \end{vmatrix}$$

E assim por diante.