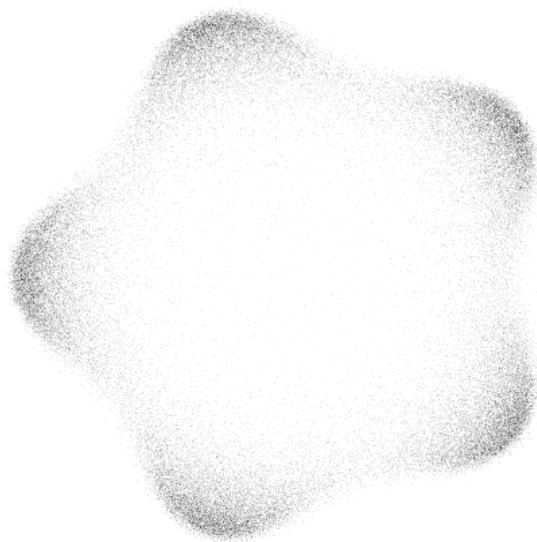


MATRIZES ALEATÓRIAS E SIMULAÇÃO DE GASES DE COULOMB

Relatório Científico Final do projeto na modalidade Iniciação Científica,
fomentado pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo.

Projeto FAPESP #2023/02674-0

Pesquisador Responsável: Guilherme L. F. Silva



São Carlos, 4 de junho de 2024

Informações Gerais do Projeto

- Título do projeto:

Matrizes aleatórias e simulação de gases de Coulomb

- Nome do pesquisador responsável:

Guilherme L. F. Silva

- Instituição sede do projeto:

**Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC) da
Universidade de São Paulo**

- Equipe de pesquisa:

Guilherme L. F. Silva

João Victor Alcantara Pimenta

- Número do projeto de pesquisa:

2023/02674-0

- Período de vigência:

01/06/2023 a 31/05/2024

- Período coberto por este relatório científico:

01/06/2023 a 31/05/2024

Resumo

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

Sumário

| | |
|---|-----------|
| Informações Gerais do Projeto | i |
| Resumo | ii |
| 1 Realizações do período | 1 |
| 1.1 Atividades Desenvolvidas | 1 |
| 1.2 Cronograma | 1 |
| 1.3 Graduação | 2 |
| 1.4 Pesquisa | 2 |
| 1.4.1 Matrizes Aleatórias | 2 |
| 1.4.2 Gases de Coulomb | 4 |
| 1.4.3 Simulações | 6 |
| 1.4.4 Resultados e Discussão | 10 |
| 1.4.5 Conclusão | 13 |
| 2 Participação em eventos científicos | 15 |
| 3 Outros trabalhos Preparados ou Submetidos | 16 |
| Referências Bibliográficas | 16 |
| A Apresentação CBM 23 e SIFSC | 18 |
| B Trabalho de Conclusão de Curso | 20 |
| C Relatório de Pesquisa - Baralhos e Caminhos Aleatórios | 42 |

1 Realizações do período

1.1 ATIVIDADES DESENVOLVIDAS

A execução do projeto foi dividida nas seguintes etapas:

1. **Revisão da Literatura em RMT, e estudo de teoria básica do GUE**, é necessário fazer vasta revisão de literatura no tema para que o aluno tenha domínio das ferramentas e métodos utilizados para o tratamento de matrizes aleatórias e suas implicações em mecânica estatística. Para isso, durante esse período será realizado o estudo da bibliografia adequada;
2. **Estudo dos métodos de Simulação**, uma das aplicações importantes da teoria de matrizes aleatórias reside em sua conexão com Gases de Coulomb. Em 2018 publicou-se o artigo [1], base para o estudo do método de simulação implementado;
3. **Implementação dos algoritmos**, implementa-se os métodos descritos no artigo e tenta-se estender seu uso em condições diferentes das utilizadas no artigo, como por exemplo em outros potenciais;
4. **Redação dos Relatórios Científicos**, quando serão escritos os relatórios exigidos pelas normas da *FAPESP*.

1.2 CRONOGRAMA

Com base nas tarefas enumeradas na Seção 1.1, é mostrado na Tabela 1.1 o cronograma atual de desenvolvimento do projeto. Foi possível realizar todo o planejamento feito inicialmente.

| Fases | Meses | | | | | | | | | | | |
|-----------------------------|-------|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| 1. Revisão Literatura RMT | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | | | | | | | |
| 2. Métodos de Simulação | | | | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | | | | |
| 3. Implementação algoritmos | | | | | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | |
| 4. Redação Relatórios | | | | ✓ | ✓ | | | | | | ✓ | ✓ |

Tabela 1.1: Cronograma das atividades.

1.3 GRADUAÇÃO

Durante o período referente à pesquisa o aluno realizou as seguintes matérias e respectivos desempenhos:

| Disciplina | Sigla | Nota | Semestre |
|---------------------------------------|---------|------|----------|
| Mecânica Estatística Avançada | 7600041 | 10.0 | 1 - 2023 |
| Introdução aos Sistemas de Computação | 7600056 | 9.2 | 1 - 2023 |
| Física Estatística Computacional | 7600073 | 9.7 | 1 - 2023 |
| Teoria Espectral de Matrizes | SME0243 | 10.0 | 1 - 2023 |
| Mecânica Quântica | 7600022 | 9.3 | 2 - 2023 |
| Física Matemática Avançada | 7600034 | 10.0 | 2 - 2023 |
| Noções Básicas de Fabricação Mecânica | 7600134 | 10.0 | 2 - 2023 |
| Espaços Métricos | SMA0343 | 9.0 | 2 - 2023 |
| Laboratório Avançado de Física 1 | 7600024 | - | 1 - 2024 |
| Álgebra 1 | SMA0305 | - | 1 - 2024 |
| Trabalho de Conclusão de Curso | 7600039 | - | 1 - 2024 |

1.4 PESQUISA

Os resultados e texto científico abaixo foram desenvolvidos conjuntamente com o trabalho de conclusão de curso realizado no mesmo período, tomando como base seu conteúdo. Apresento breve noção do tema de trabalho e alguns resultados e possibilidades para desenvolvimento e uso destes. Todos os produtos, programas e textos, podem ser acessados em <https://github.com/Joao-vap/RMT-TEX> e <https://github.com/Joao-vap/RMT-Code>.

1.4.1 Matrizes Aleatórias

Sistemas integráveis em física são descritos por equações diferenciais simples o suficiente tais que se pode determinar soluções explícitas. Seu comportamento é, em algum sentido, previsível e unicamente determinado pelas condições iniciais. Naturalmente, muitos sistemas de interesse não se enquadram nessa classe, são chamados caóticos ou não integráveis. Seja por complexidade ou instabilidade, não conseguimos expressar ou resolver significativamente os operadores associados a esses sistemas.

De acordo com a mecânica quântica, níveis de energia de um sistema são descritos pelos autovalores de seu operador hermitiano associado, o Hamiltoniano \mathcal{H} . Para um modelo simples o suficiente, caracterizar o sistema físico é equivalente a resolver o problema de autoenergias $\mathcal{H} \Psi_i = E_i \Psi_i$. Contudo, para estados excitados de alta energia de núcleos atômicos pesados, por exemplo, esta abordagem se torna impeditiva: ou não se sabe o Hamiltoniano, ou sua solução é complicada. Wigner sugere uma abordagem alternativa, estatística, para o problema de autovalores. Tal teoria descreveria as propriedades estatísticas da estrutura energética nucleica ao invés de detalhar seus níveis. Buscava-se, em algum sentido, uma universalidade, uma descrição que fosse, dada complexidade o

suficiente, sensível às simetrias, mas independente dos detalhes em \mathcal{H} . A teoria foi prontamente seguida por, dentre outros, Gaudin, Mehta, [2] e Dyson, [3] que avançaram na descrição dos principais ensembles. Esse desenvolvimento é o início do que chamamos hoje Teoria de Matrizes Aleatórias (RMT, *Random Matrix Theory*).

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 $N \times N$, de entradas 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 de \hat{M} (jpdf, *joint probability density function*) como

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

Considere a decomposição nas coordenadas espectrais $\hat{M} = \hat{P}\hat{\Lambda}\hat{P}^{-1}$ onde \hat{P} é matriz invertível e $\hat{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$. Para que valha a decomposição tomaremos \hat{M} matriz simétrica, hermitiana ou hermitiana quaterniônica. Esta escolha é feita em importantes ensembles em RMT e motivada 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 matriz hermitiana quaterniônica. [4, Capítulo 2] Devemos atentar ainda pela escolha de mapa $\hat{M} \mapsto \hat{P}\hat{\Lambda}\hat{P}^{-1}$ bijetivo¹. Se a mudança de variáveis tem Jacobiano $J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{P}\})$, reescreve-se a jpdf em função de $\hat{\Lambda}$ e \hat{P} tal que

$$\mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} = \mathcal{P}\left(M_{1,1}(\hat{\Lambda}, \hat{P}), \dots, M_{N,N}(\hat{\Lambda}, \hat{P}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{P}\})\right) d\hat{\Lambda}d\hat{P}. \quad (1.4.1)$$

Estamos especialmente interessados na distribuição de autovalores, logo, devemos integrar a Equação (1.4.1) sobre $d\hat{P}$, o que nem sempre é fácil ou possível. Por isso, tomaremos ensembles denominados invariantes (por rotação), isto é, tais que quaisquer duas matrizes \hat{M} e \hat{M}' que satisfaçam a relação de equivalência $\hat{M} = \hat{U}\hat{M}'\hat{U}^{-1}$, sendo \hat{U} uma rotação, tem mesma probabilidade. Com isso, a jpdf de suas entradas pode ser escrita exclusivamente como função dos autovalores, ou seja,

$$\mathcal{P}(\hat{\Lambda}, \hat{P})d\hat{\Lambda}d\hat{P} := \mathcal{P}\left(M_{1,1}(\hat{\Lambda}), \dots, M_{N,N}(\hat{\Lambda}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\})\right) d\hat{\Lambda}d\hat{P}.$$

Pelo Lema de Weyl, uma jpdf invariante pode ser expressa totalmente por $\mathcal{P}(\hat{M}) := \phi\left(\text{Tr}(V(\hat{M}))\right)$ com V função polinomial. Além disso, o jacobiano $J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{P}\})$ desta transformação pode ser expresso pelo determinante de matriz de Vandermonde tal que

$$\mathcal{P}(\hat{\Lambda}, \hat{P})d\hat{\Lambda}d\hat{P} = \phi\left(\text{Tr}(V(\hat{M}))\right) \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{P},$$

¹Injetividade é garantida desconsiderando fase e sinal dos autovetores e ordenando os autovalores. Restringe-se ao subconjunto de matrizes sem multiplicidade de autovalores - denso, aberto e de medida completa tal que seu complemento é irrelevante na integração conseguinte.

onde $\beta = 1, 2, 4$ quando tomado $\mathbb{S} = \mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{H}$, respectivamente. Com esta expressão, sabendo medida uniforme sobre os autovetores, podemos explicitar pela primeira vez a jpdf para os autovalores ordenados destes ensembles de matrizes aleatórias como

$$\mathcal{P}_{ord}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{Z_{N,\beta}^{(ord)}} \phi \left(\sum_i^N V(\lambda_i) \right) \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta. \quad (1.4.2)$$

Note que, graças ao jacobiano, autovalores destas matrizes apresentam repulsão mútua, expressa pelo produtório na Equação (1.4.2). Este fato naturaliza a analogia da Seção 1.4.2 e é central a muitos resultados em RMT. É possível fazer desenvolvimento análogo para matrizes normais de ensembles associados a $\beta = 2$ com autovalores $\lambda_i \in \mathbb{C}$ - extensão explorada nos resultados. Outros casos fogem ao escopo do trabalho.

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 $\hat{M} = \hat{O}\hat{\Lambda}\hat{O}^{-1}$, 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. Podemos deduzir, para $\beta = 1, 2, 4$ que

$$\mathcal{P}(\vec{\lambda}) = \frac{1}{Z_{N,\beta}} e^{-\beta_N \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})}, \quad (1.4.3)$$

onde $Z_{N,\beta}$ é função de partição canônica para autovalores desordenados², normalizante da Expressão (1.4.3). O fator $\beta_N = \beta N^2$ é pensado como a temperatura inversa. Definimos ainda o Hamiltoniano

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

com $\lambda_i \mapsto \lambda_i \sqrt{\beta N}$.

1.4.2 Gases de Coulomb

Para os ensembles que chamamos invariantes, a densidade de autovalores guarda uma importante analogia, 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

²Usa-se do fator de contagem de Boltzmann para escrever $Z_{N,\beta} = N! Z_{N,\beta}^{(ord)}$.

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 estar diretamente disponível.

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

$$d\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}} d\vec{x}, \quad (1.4.4)$$

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, g é solução da equação de Poisson e $V: \mathbb{S} \mapsto \mathbb{R}$ potencial externo. [5] A medida \mathcal{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 interagem por $g: \mathbb{S} \mapsto (-\infty, \infty]$. A temperatura inversa é βN^2 . Assumiremos, para que valha a definição (1.4.4), que V , g e β são tais que a constante de normalização (função partição) $Z_{N,\beta}$ é finita para todo N .³

Se lembramos da Expressão (1.4.3), perceberemos que, para o devido $V(x)$, podemos tomar $d = 1$ e $n = 2$ para recuperar a medida dos ensembles gaussianos

$$\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta_N \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}}, \quad \mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{N^2} \sum_{i < j} \log \frac{1}{|x_i - x_j|}. \quad (1.4.5)$$

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. Notando que tratamos do ensemble canônico, um argumento termodinâmico nos indica então que devemos minimizar a energia livre $E_{N,\beta}^V \propto -\log Z_{N,\beta}$.

Consideramos V sob condições tais que seja denominado um potencial admissível. [5] Com isso, se μ_V é medida de probabilidade no espaço das possíveis configurações de autovalores, $Z_{N,\beta}$ será finita e existirá $\mu_V^* = \arg \inf \mathcal{H}_N$ medida de equilíbrio única no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Para determinar a medida de equilíbrio da Distribuição (1.4.5), [4] queremos satisfazer o sistema de equações

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \quad \text{para } i = 1, \dots, N. \quad (1.4.6)$$

Usaremos o denominado resolvente. Considere a função complexa

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

³Note que \mathcal{P}_N é um modelo de interações estáticas e não há campos magnéticos considerados.

onde \hat{M} é matriz aleatória com autovalores $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\}$ e $S_N^{\mu\nu}(z)$ pode ser vista como função complexa aleatória com polo em todo λ_i . Não trivialmente, multiplicando ambos lados da Relação (1.4.6) por $1/(z - \lambda_i)$ e somando sobre i , podemos reescrever a igualdade como

$$V'(z)S_N^{\mu\nu}(z) - \Pi_N(z) = \frac{S_N^{\mu\nu}(z)^2}{2} + \frac{S_N'^{\mu\nu}(z)}{2N}, \quad \text{com} \quad \Pi_N(z) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{V'(z) - V'(\lambda_i)}{z - \lambda_i}$$

polinômio de grau $\deg V'(z) - 1 = k - 1$. Resolver explicitamente para N constante pode não ser simples ou mesmo possível. Em geral, tomaremos a assintótica $N \rightarrow \infty$ e, nesse limite, $S_N^{\mu\nu}(z)$ é transformada de Stieltjes⁴

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

Como consequência da fórmula de Sokhotski-Plemeji, é enunciado ainda a relação

$$\mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi i} (S_+^{\mu\nu} - S_-^{\mu\nu}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} S_+^{\mu\nu}(x + i\epsilon). \quad (1.4.7)$$

Com isso, resolve-se a equação quadrática obtida com o limite para $S^{\mu\nu}(z)$ tal que

$$S^{\mu\nu}(z) = V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi(z)}, \quad \Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda. \quad (1.4.8)$$

Assumindo V potencial polinomial arbitrário, resta explicitar $\Pi(z)$ para encontrar a medida $\mu_V^*(x)$ pela Equação (1.4.7). Para isso, a expansão de $S^{\mu\nu}(z)$ em $z \rightarrow \infty$ nos dará um sistema de equações auto consistentes para a determinação dos coeficientes de Π .

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.

1.4.3 Simulações

A medida 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 desta medida são denominados termostatos e são notoriamente difíceis de se construir ergodicamente 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*, [6, Capítulo 6] especialmente sua versão cinética. Muitas vezes

⁴Também chamada transformada de Cauchy.

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. 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-Hastings. [6, Apêndice C] As escolhas supracitadas são descritas por Chafaï e Ferré [1] e são denominadas *Langevin Monte Carlo*. 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.

Nosso objetivo com a simulação é determinar a esperança de uma função de interesse $\zeta(q, p)$, dado um ensemble. Pela teoria ergódica, sob algumas condições e no limite adequado, a média espacial $\langle \zeta \rangle_\mu$ é igual a média temporal

$$\langle \zeta \rangle_t \approx \frac{1}{\tau} \sum_{k=1}^{\tau} \zeta(q_k, p_k),$$

onde (q_k, p_k) podem ser obtidos por meio de uma dinâmica que preserve dada distribuição de Gibbs-Boltzmann. Para fazer o modelo ergódico, ou seja, garantir que a simulação - e nossas amostras - não esteja restrita a um subconjunto do espaço de fase, tomaremos uma dinâmica, um termostato, estocástica. Isso usualmente garante que o sistema possa convergir para sua medida invariante (única). Um esquema comumente utilizado é a dinâmica de Langevin⁵.

Denote q , com $q \in \mathbb{R}^{(dN)}$, posição generalizada associada as N partículas. A Equação (1.4.4) é medida invariante do processo de difusão de Markov solução da equação diferencial estocástica

$$dq_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dW_t, \quad (1.4.9)$$

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 extensão cinética. Usaremos q como variável de interesse e p , com $p \in \mathbb{R}^{(dN)}$, variável de momento generalizado, para flexibilizar a dinâmica. Considere $U_N: \mathbb{R}^{(dN)} \rightarrow \mathbb{R}$ energia cinética generalizada tal que $e^{-\beta_N U_N}$ seja Lebesgue integrável. Para uma energia da forma $E_N(q, p) = \mathcal{H}_N(q) + U_N(p)$, seja $(q_t, p_t)_{t \geq 0}$ processo de difusão em $\mathbb{R}^{dN} \times \mathbb{R}^{dN}$ solução da equação diferencial estocástica

$$\begin{cases} dq_t = \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt, \\ dp_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dB_t, \end{cases} \quad (1.4.10)$$

onde β_N é temperatura inversa e $\mathcal{H}_N: \mathbb{R}^{(dN)} \rightarrow \mathbb{R}$ é como na Distribuição (1.4.5). [9] Esse processo deixa invariante $\mathcal{P}(q, p) = \mathcal{P}_q \otimes \mathcal{P}_p = e^{-\beta_N E_N(q, p)} / Z'_N$ e admite o gerador

⁵Poderíamos ter explorado outras dinâmicas similares tais como as dinâmicas de *Dissipative Particle* [7] ou *Nose-Hoover* [8].

infinitesimal

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\mathcal{H}} + \mathcal{L}_{\mathcal{U}},$$

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

Denomina-se $\mathcal{L}_{\mathcal{H}}$ a parte hamiltoniana e $\mathcal{L}_{\mathcal{U}}$ a parte de flutuação-dissipação. Tomaremos $U_N(p) = \frac{1}{2}|p|^2$ tal que $U_N(p)$ é energia cinética usual. Um esquema análogo é possível para energias cinéticas generalizadas. [9] Além disso, $(B_t)_{t>0}$ é processo browniano. Para simular $(q_t, p_t)_{t \geq 0}$ integramos a Equação (1.4.10), contudo, isso pode não ser possível analiticamente, levando a recorrer a métodos numéricos para amostragem.

Para integrar o Processo (1.4.10) discretizaremos, para amostragem numérica, separadamente as dinâmicas associadas à $\mathcal{L}_{\mathcal{H}}$ e $\mathcal{L}_{\mathcal{U}}$. Naturalmente, $\mathcal{L}_{\mathcal{H}}$ descreve um processo hamiltoniano e deve preservar o volume do espaço de fase, de forma que não precisaremos calcular o jacobiano da transformação que dá esta dinâmica. Utilizando de um integrador simplético, tal como o de Verlet, podemos manter essa propriedade na discretização. A dinâmica é também reversível a menos de inversão do momento, importante no algoritmo para garantir que mantém-se a medida invariante. Contudo, é conhecido que a discretização não pode preservar a energia exatamente e, para lidar com esse fato, discute-se a implementação de um passo de Metropolis-Hastings posteriormente. Para $\Delta t > 0$, a partir do estado (q_k, p_k) , o esquema de Verlet lê-se

$$\begin{cases} p_{k+\frac{1}{2}} = p_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + p_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = p_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(\tilde{q}_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \end{cases} \quad (1.4.11)$$

onde $(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1})$ é estado seguinte da dinâmica. Outros métodos tais quais *Euler-Maruyama* (EM) podem ser utilizados para o mesmo fim. [6, Capítulo 7] Nos métodos que temos interesse, o erro associado à discretização deve ir a zero quando Δt vai a zero. Para EM, o erro local é da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ e o erro global $\mathcal{O}(\Delta t)$. Já para o esquema escolhido, devido à reversibilidade, o erro local é $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ e o global $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. [10, Capítulo 5]

Nos resta tratar o processo de $\mathcal{L}_{\mathcal{U}}$, o qual, para a energia cinética usual, consiste em um processo de Ornstein-Uhlenbeck de variância explícita, ou ainda, da forma

$$dp_t = -\alpha_N p_t dt + \sigma dB_t,$$

onde $\alpha_N, \sigma > 0$ são parâmetros e B_t é processo browniano. Este processo também mantém a medida invariante e é reversível. Note que, para $\alpha_N > 0$ somente substituiremos parcialmente o momento das partículas e, se $\alpha_N, \gamma_N \rightarrow 0$ com $\alpha_N \gamma_N = 1$, retomariamos a dinâmica da Equação (1.4.9). Este processo não seria muito melhor, contudo, do que um *Random Walk Metropolis* já que o momento seria completamente substituído. [10, Capítulo 5] De qualquer forma, sabemos existir solução analítica para o processo de Ornstein-Uhlenbeck a partir da fórmula de Mehler dada por

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}, \quad (1.4.12)$$

onde G_k é variável aleatória gaussiana usual. [1] Muitos algoritmos utilizam de um passo de seleção para estabilizar sua dinâmica e otimizar a convergência e amostragem, usaremos dessa ideia para otimizar o algoritmo. Para o método de Metropolis-Hastings, é importante manter a razão de rejeições baixa para não atrapalhar a eficiência, o que influencia no tamanho do passo temporal decidido. Pode ser mostrado que Δt é ideal quando é da ordem de $N^{-\frac{1}{4}}$, [1] tornando o esquema interessante pela escalabilidade.

Partindo dos esquemas anteriores, consideraremos $(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1})$ proposta de novo estado gerada pela dinâmica de \mathcal{L} , a partir do estado anterior (q_k, p_k) . Define-se

$$P_k = 1 \wedge \frac{e^{-\beta_N E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1})}}{e^{-\beta_N E_N(q_k, \tilde{p}_k)}}, \quad (1.4.13)$$

onde \tilde{p}_k é dado por (1.4.15), probabilidade de aceite tal que se atribua agora às novas coordenadas generalizadas (q_{k+1}, p_{k+1}) valor da seguinte forma

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) & \text{com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) & \text{com probabilidade } 1 - P_k. \end{cases} \quad (1.4.14)$$

Assim, a proposta será aceita com probabilidade um se $E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) < E_N(q_k, \tilde{p}_k)$ e com probabilidade dada pela razão das medidas, caso contrário. Dessa forma garante-se a conservação da energia - preocupação na discretização da dinâmica - e otimiza-se a exploração do espaço de fase.

Recapitulemos o algoritmo. 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 anteriores sob essas condições, temos o algoritmo, com base em Chafaï e Ferré [1], completo. Dada uma condição inicial (q_k, p_k) , vetores de posição e momento generalizados, para cada $k \geq 0$, realizamos os seguintes passos

1. Baseado na Equação de Mehler para o processo de Ornstein-Uhlenbeck, atualize \tilde{p}_k com

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}; \quad (1.4.15)$$

2. Utilizando do esquema de Verlet para o processo hamiltoniano, calcule os termos

$$\begin{cases} \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} = \tilde{p}_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(\tilde{q}_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}; \end{cases} \quad (1.4.16)$$

3. Introduzido o passo de Metropolis-Hastings, tome

$$P_k = 1 \wedge \exp(-\beta_N (E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) - E_N(q_k, \tilde{p}_k))); \quad (1.4.17)$$

4. Defina, a partir da razão anterior,

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) & \text{com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) & \text{com probabilidade } 1 - P_k; \end{cases} \quad (1.4.18)$$

O ajuste de variáveis é notoriamente um dos aspectos complicados do algoritmo implementado. Precisamos de uma holística par ajustar $\Delta t, \alpha_N$ e γ_N . No escopo do nosso programa, Δt e α_N desempenham o mesmo papel e, por isso, tomaremos $\alpha_N = 1$ e decidiremos sobre o valor de Δt . Seguindo a recomendação de Brooks [10, 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, pequeno o suficiente para manter a razão de aceite do passo de Metropolis-Hastings alta mas grande o suficiente para não desacelerar a convergência do algoritmo. Já γ_N definirá o quanto 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 $\gamma_N \alpha_N \Delta \tilde{t} \approx 0.5$.

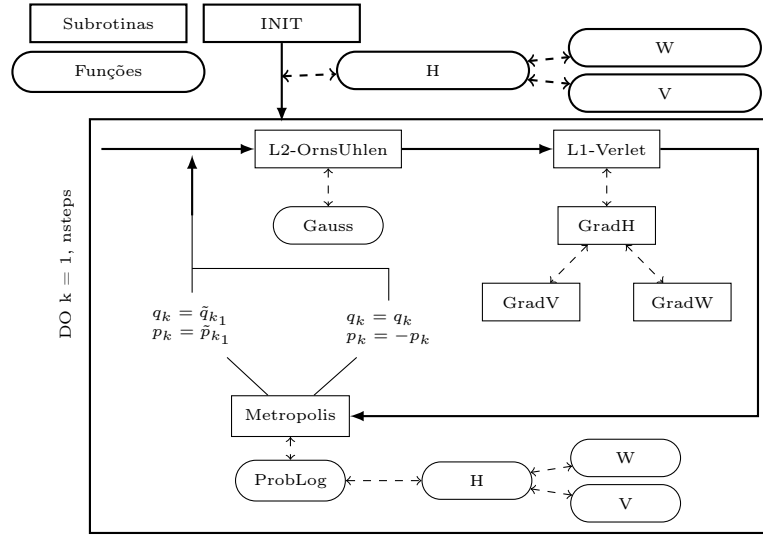


Figura 1.1: Implementação do algoritmo *Langevin Monte Carlo* (LMC). Setas sólidas indicam o fluxo do programa. Setas tracejadas indicam chamadas de funções dentro do bloco. A descrição das funções se encontra na Tabela 1.2.

1.4.4 Resultados e Discussão

A família de ensembles gaussianos são modelos que mostramos ser bem representados como matrizes na Seção 1.4.1. Tomar a medida dos ensembles gaussianos é o equivalente, na simulação de gases descrita, a tomar

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 1, 2, 4. \quad (1.4.19)$$

| 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. |
| L2-OrnsUhlen | Modifica \tilde{p}_k , vetor $[N \times m]$, global, por \mathcal{L}_U segundo (1.4.15). |
| L1-Verlet | Modifica $\tilde{p}_{k+1}, \tilde{q}_{k+1}$ vetores $[N \times m]$, globais, por \mathcal{L}_H segundo (1.4.16). |
| 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 (1.4.17). |
| 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 (1.4.18). |
| Gauss | Retorna variáveis gaussianas, vetor $[1 \times m]$, local por Box-Muller. |

Tabela 1.2: Descrição das funções e subrotinas utilizadas na implementação do programa.

O resultado da simulação para a Configuração (1.4.19) é apresentado na Figura 1.2 para os três modelos ($\beta = 1, 2, 4$). Na coluna da esquerda, contrasta-se os resultados para $N = 10$ da densidade gerada por ambas a simulação de gases e a amostragem direta de matrizes do ensemble. Na coluna central, representa-se a comparação da medida 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 apresentarem mesmo suporte. Finalmente, na coluna da direita apresentamos a distribuição do maior autovalor λ_{max} . Um resultado importante 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. [11]

Observa-se que os dois modelos à esquerda, amostragem direta e simulação de gases, 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, ainda que com N finito, podemos ver boa correspondência com o resultado esperado pela Tracy-Widow, piorando com a diminuição da temperatura.

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

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = t|x|^{2m}; \quad W(x) = g(x) = \log|x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (1.4.20)$$

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^4}{4} + t \frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log|x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (1.4.21)$$

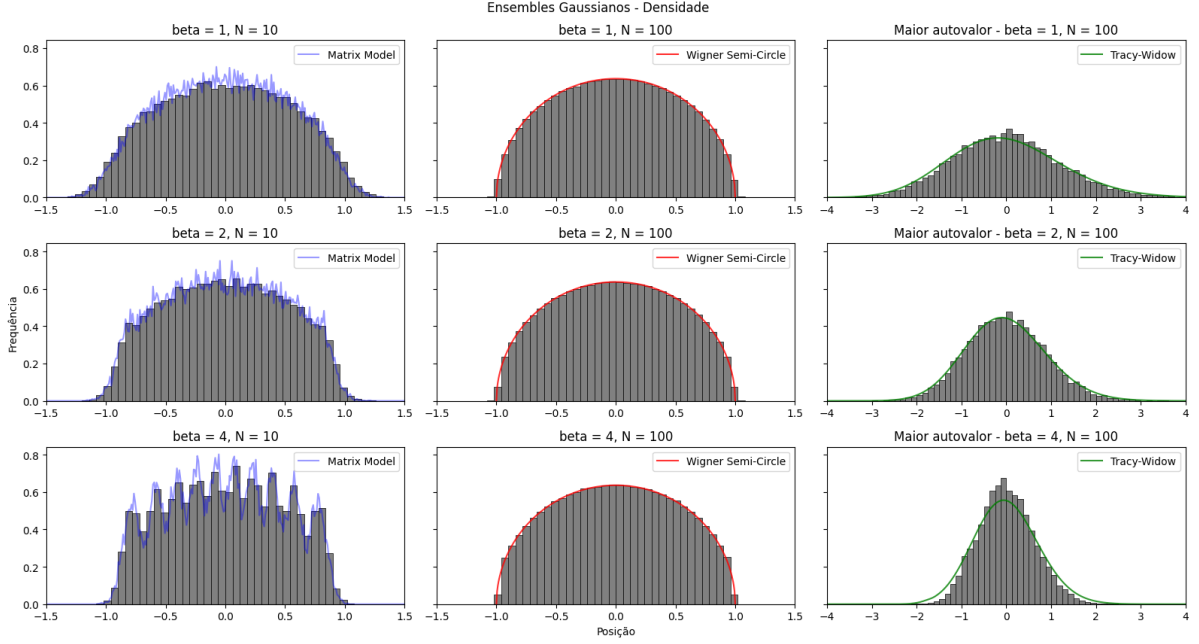


Figura 1.2: Densidade para ensembles gaussianos, (1.4.19). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$ e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 100 iterações a partir de $nsteps/5$. À esquerda da figura, em azul, a densidade da amostragem de $4 \cdot 10^3$ matrizes do ensemble. No centro, o Semi-Círculo de Wigner, medida de equilíbrio. Na direita, apresenta-se a densidade de λ_{max} normalizado e sua medida esperada.

O caso mônico se reduz ao gaussiano se $m = 1$. Os resultados para ambos os potenciais estão explicitados na Figura 1.3 para alguns parâmetros interessantes de t e m .

Novamente as medidas experimentais parecem convergir para a medida teórica enunciada em todas as configurações testadas. Contudo, isso é discutido, com exceção do Mônico, por Chafaï e Ferré [1]. Em luz da situação recentemente explorada por Balogh *et al.* [12] consideremos a Configuração (1.4.22) complexa. Para esta, representamos as medidas simuladas para alguns valores de interesse de t, a na Figura 1.4,

$$d = 2; n = 2; V(z) = |z|^{2a} - \text{Re} tz^a; W(x) = g(x) = \log |x|; \beta_N = \beta N^2; \beta = 2. \quad (1.4.22)$$

É previsto para esse modelo uma transição de regime - uma separação da medida de equilíbrio - para $t_c \approx \sqrt{a^{-1}}$, o que pode ser observado na Figura 1.4 com algum detalhe. Outros fatores que corroboram o bom comportamento do modelo são que a medida é uniforme no disco quando $(a, t) = (1, 0)$ e se concentra no bordo quando incrementa-se a , fatos também previstos. [12] Esse exemplo demonstra que é possível, sem muito esforço, replicar a medida, e principalmente o suporte, para potenciais mais complexos estudados em publicações recentes no tema e pode ser estendido para outros estudos, como para o potencial discutido por Bleher e Silva [13], dado pela Configuração (1.4.23), representado em um diagrama de fase na Figura 1.5

$$d = 2; n = 2; V(z) = t_0(|z|^2 - 2 \text{Re}\{z^3/3 + t_1 z\}); W(x) = g(x) = \log |x|; \beta = 2. \quad (1.4.23)$$

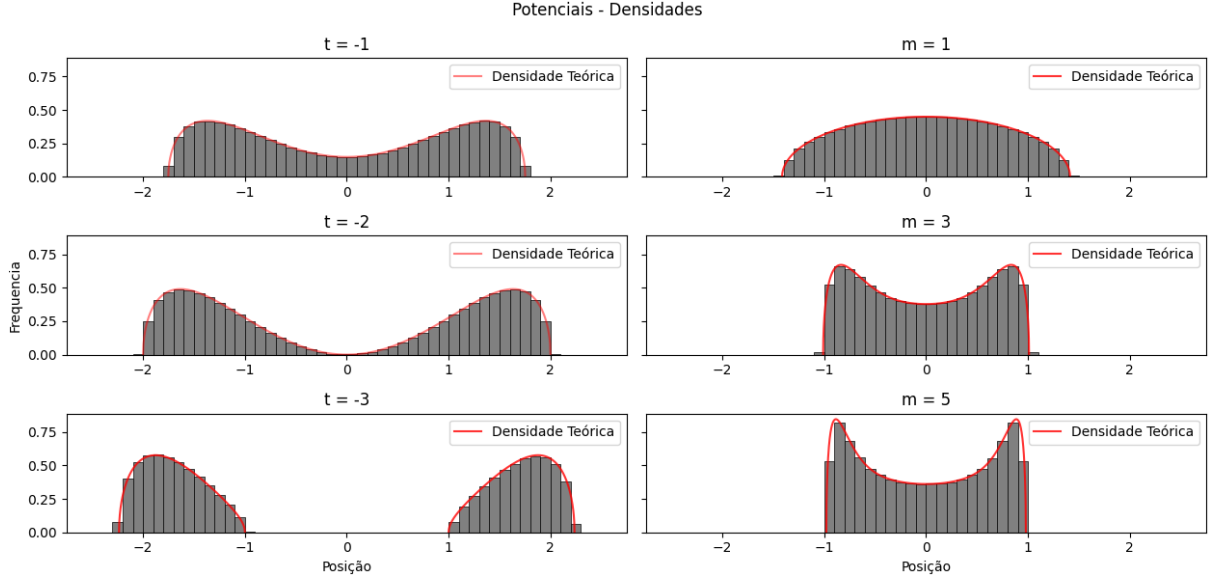


Figura 1.3: Potencial Quártico (1.4.21) e Mônico (1.4.20), respectivamente à esquerda e direita. Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$, $N = 100$, e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos. Registra-se a cada 1000 iterações a partir de $nsteps/5$. No Quártico, simula-se $t = -1, -2, -3$. No Mônico fixa-se $t = 1$ e simula-se $m = 1, 3, 5$.

1.4.5 Conclusão

A Teoria de Matrizes Aleatórias é uma ferramenta matemática extremamente versátil. Suas aplicações são extensas e diversas, cobrindo ambos sistemas físicos e matemáticos de grande relevância. Partindo da hipótese que autoenergias de sistemas complexos se comportam localmente como autovalores de matrizes aleatórias adequadas, permite-se a caracterização estatística do núcleo atômico ou ainda a determinação de propriedades físicas de metais. Em matemática, além das clássicas aplicações estatísticas dos modelos, mostra-se que matrizes aleatórias tem importante papel na determinação dos zeros da função de Riemann. Consolidada assim sua importância, a teoria se desenvolve rapidamente e tem chamado atenção da comunidade científica-matemática. Introduzimos neste trabalho as ideias de medida de matrizes aleatórias e ensembles, essenciais à RMT, e descrevemos os clássicos ensembles gaussianos, que julgamos exemplares para o entendimento dos resultados sobre medida nos autovalores e equilíbrio.

A analogia de Gases de Coulomb surge naturalmente ao se explicitar a medida de matrizes de ensembles invariantes. Sua interpretação permite pensar na dinâmica dos autovalores como uma de partículas interagentes, da qual intuímos as ideias de minimização da energia livre para identificar o equilíbrio. Percebemos que muitas vezes métodos numéricos são necessários para a solução das equações de movimento estocásticas que descrevem a dinâmica das partículas modeladas. Apresentamos então os métodos de simulação numérica e discutimos as principais características do algoritmo implementado, denominado *Langevin Monte Carlo*.

Além disso, apresentamos os resultados, que dividimos, em propósito, em duas partes. Os primeiros resultados são de medidas de autovalores na reta, bem explorados na teoria

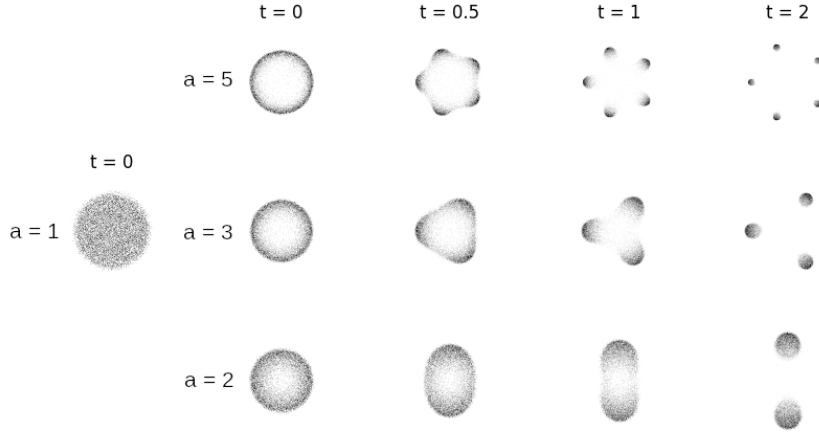


Figura 1.4: Medidas referentes à configuração (1.4.22). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 500 iterações a partir de $nsteps/5$.

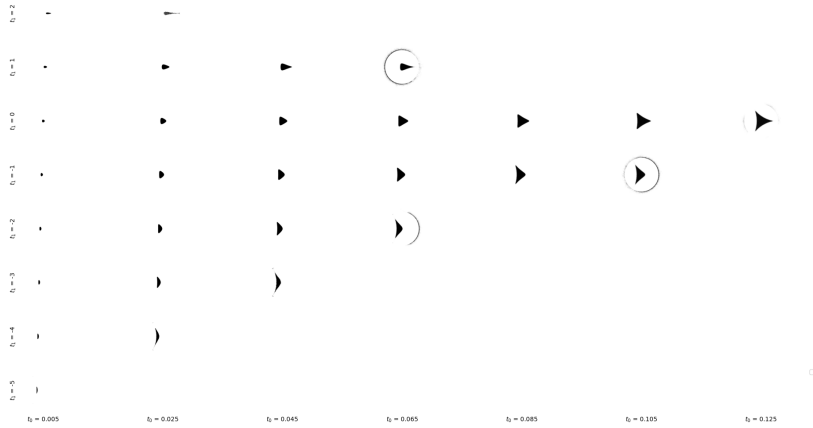


Figura 1.5: Medidas referentes à configuração (1.4.22). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 500 iterações a partir de $nsteps/5$.

e relativamente simples. Para estes, incluímos explicitamente no trabalho as soluções. Qualitativamente observa-se que os resultados tem boa concordância com a teoria, mesmo em distribuições mais delicadas, como a Tracy-Widow. Isso nos dá boa indicação do bom comportamento dos métodos e implementação utilizados. Com isso, apresentamos um dos resultados obtidos em um Gás de Coulomb em duas dimensões. Isso de refere a um potencial complexo, explorado com mais afincio apenas em teoria recente. Mesmo aqui, mostra-se que é possível replicar características de resultados apontados em trabalhos recentes e indica uma possível direção para exploração numérica da teoria.

Entendemos este estudo como uma descrição e validação de métodos conhecidos de simulação e matrizes aleatórias, ainda que atuais. Contudo, veem-se extensões da utilização do método para estudo numérico de importantes resultados com menos descrição teórica, o que, até onde sabemos, é menos explorado.

2 Participação em eventos científicos

Durante o período de 13 de Janeiro à 24 de Fevereiro o bolsista participou do evento “Jornadas de Pesquisa em Matemática” realizado pelo Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC - USP). Durante este evento foi realizada pesquisa original em simulações de caminhos aleatórios, que rendeu o relatório de nome “Baralhos e passeios aleatórios”, submetido para a FAPESP e em processo de desenvolvimento para publicação. O relatório fica disponível no Apêndice C.

O bolsista também apresentou em dois eventos no período da pesquisa. O Colóquio Brasileiro de Matemática (CBM) e a Semana Integrada da Física de São Carlos (SIFSC). Apenas para o primeiro, realizado no Rio de Janeiro, foi necessário o uso da reserva técnica. Por isso, segue o pôster apresentado na próxima página. O trabalho é complementar aos estudos assintóticos e de probabilidade realizados nos meses cobertos por este relatório.

| Evento | Sede | Data | Modalidade | Apresentação | Reserva Técnica |
|----------|----------|----------------|------------|---------------|-----------------|
| CBM | IMPA | 24-28/07/23 | Presencial | Pôster - Oral | Sim |
| SIFSC | IFSC-USP | 21-25/08/23 | Presencial | Pôster - Oral | Não |
| Jornadas | ICMC-USP | 13/01-24/02/23 | Presencial | Oral | Não |

3 Outros trabalhos Preparados ou Submetidos

Durante o período da bolsa foi também finalizado o trabalho intitulado “A Central Limit Theorem for intransitive dice” co-autorado pelo aluno beneficiário da bolsa. O arquivo se encontra disponível na plataforma Arxiv em <https://arxiv.org/abs/2310.17083> e está em processo de publicação. Por fim, realizou-se também o desenvolvimento do Trabalho de Conclusão de Curso referente à graduação em andamento (a ser defendido) anexado no Apêndice B. O trabalho referente ao relatório no Apêndice C está ainda em desenvolvimento para publicação.

Referências Bibliográficas

- [1] CHAFAÏ, D.; FERRÉ, G. Simulating Coulomb and log-gases with Hybrid Monte Carlo algorithms. *Journal of Statistical Physics*, v. 174, n. 3, p. 692–714, 2018.
- [2] MEHTA, M.; GAUDIN, M. On the density of eigenvalues of a random matrix. *Nuclear Physics*, v. 18, p. 420–427, 1960.
- [3] DYSON, F. J. Statistical theory of the energy levels of complex systems. *Journal of Mathematical Physics*, v. 3, n. 1, p. 140–156, 1962.
- [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] 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, 2018.
- [6] LEIMKUHLER, B.; MATTHEWS, C. *Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods*. Cham, Suíça: Springer International Publishing, 2015. ISBN 9783319163758.
- [7] ESPAÑOL, P.; WARREN, P. Statistical mechanics of dissipative particle dynamics. *Europhysics Letters*, v. 30, n. 4, p. 191, 1995.
- [8] HOOVER, W. G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physics Review A*, v. 31, p. 1695–1697, 1985.
- [9] STOLTZ, G.; TRSTANOVA, Z. Langevin dynamics with general kinetic energies. *Multiscale Modeling & Simulation*, v. 16, n. 2, p. 777–806, 2018.
- [10] BROOKS, S. et al. *Handbook of Markov Chain Monte Carlo*. Florida, USA: CRC Press, 2011. ISBN 9781420079425.
- [11] 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.
- [12] BALOGH, F.; GRAVA, T.; MERZI, D. Orthogonal polynomials for a class of measures with discrete rotational symmetries in the complex plane. *Constructive Approximation*, v. 46, p. 109–169, 2017.
- [13] BLEHER, P.; SILVA, G. The mother body phase transition in the normal matrix model. *Memoirs of the American Mathematical Society*, v. 265, 01 2016.

A Apresentação CBM 23 e SIFSC

Poster referente à apresentação no Colóquio Nacional de Matemática e na Semana do Instituto de Física de São Carlos.

B Trabalho de Conclusão de Curso

Trabalho de conclusão de curso referente à obtenção de bacharel em física computacional pelo Instituto de Física de São Carlos.

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

João Victor Alcantara Pimenta

Matrizes aleatórias e simulação de Gases de Coulomb

São Carlos

2024

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 L. F. Silva, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC-USP)

Versão original

**São Carlos
2024**

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, 2024.
20 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física Computacional) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2024.

1. Introdução. 2. Matrizes Aleatórias. 3. Simulações e Algoritmos. 4. Implementação e Resultados 5. 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**. 2024. 20p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2024.

O estudo do espectro de matrizes é peça fundamental na descrição de sistemas físicos, dentre outras razões, isso se deve ao fato que a representação matricial das equações diferenciais que regem a mecânica do sistema codificam também suas características intrínsecas. Contudo, para sistemas com suficiente complexidade, estudar a dinâmica deterministicamente é contraproducente; quando se sabe montar os operadores, suas soluções são, em geral, instáveis. Uma abordagem alternativa nos indica à Teoria de Matrizes Aleatórias (RMT, *Random Matrix Theory*), que, sob as devidas hipóteses, permite caracterizar estatisticamente as propriedades físicas do sistema considerado. A relevância dos métodos de matrizes aleatórias não se restringe, contudo, à física, fazendo aparições na descrição dos zeros da função zeta de Riemann, em modelos de correlação no mercado financeiro e em inúmeras outras aplicações. Descrevemos alguns dos principais conceitos em RMT, como ensembles e as medidas de matrizes aleatórias, dos quais tratamos com algum detalhe os chamados ensembles invariantes. Com a natural analogia de Gases de Coulomb, descrevemos o comportamento dos autovalores destas matrizes como gases de partículas interagentes e intuimos a noção de medidas de equilíbrio no limite termodinâmico, que explicitamos para alguns ensembles. Com essa ferramenta, a teoria de simulação de moléculas previamente desenvolvida para condições similares nos permite calcular médias de funções de interesse. Discutimos um pouco sobre a metodologia utilizada e algumas de suas alternativas e limitações. Dando atenção para as duas mais salientes, a escalabilidade do problema e suas singularidades. Mostramos que o método de *Langevin Monte Carlo* tem bom desempenho e possibilita a réplica de medidas na reta para ensembles conhecidos. Além disso, em extensões dimensionais do potencial e do espaço da simulação podemos afirmar, com boa segurança, a possibilidade de replicar resultados apenas recentemente explorados na literatura. Com isso, indica-se uma alternativa numérica para a descrição qualitativa de uma ampla gama de modelos de interesse.

Palavras-chave: Matrizes Aleatórias. Gases de Coulomb. Dinâmica de Langevin.

SUMÁRIO

| | | |
|-----|---|----|
| 1 | INTRODUÇÃO | 5 |
| 2 | MATRIZES ALEATÓRIAS | 6 |
| 2.1 | Distribuição de Autovalores | 6 |
| 2.2 | Ensembles Gaussianos | 7 |
| 2.3 | Gases de Coulomb | 8 |
| 2.4 | Medidas de Equilíbrio | 8 |
| 2.5 | Potenciais Notáveis | 10 |
| 3 | SIMULAÇÕES E ALGORITMOS | 11 |
| 3.1 | Dinâmica de <i>Langevin Monte Carlo</i> | 11 |
| 3.2 | Integração Numérica | 12 |
| 3.3 | Passo de Metropolis-Hastings | 13 |
| 4 | IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS | 14 |
| 4.1 | Implementação | 14 |
| 4.2 | Resultados e Discussão | 16 |
| 5 | CONCLUSÃO | 19 |
| | REFERÊNCIAS | 20 |

1 INTRODUÇÃO

Sistemas integráveis em física são descritos por equações diferenciais simples o suficiente tais que se pode determinar soluções explícitas. Seu comportamento é, em algum sentido, previsível e unicamente determinado pelas condições iniciais. Naturalmente, muitos sistemas de interesse não se enquadram nessa classe, são chamados caóticos ou não integráveis. Seja por complexidade ou instabilidade, não conseguimos expressar ou resolver significativamente os operadores associados a esses sistemas.

De acordo com a mecânica quântica, níveis de energia de um sistema são descritos pelos autovalores de seu operador hermitiano associado, o Hamiltoniano \mathcal{H} . Para um modelo simples o suficiente, caracterizar o sistema físico é equivalente a resolver o problema de autoenergias $\mathcal{H} \Psi_i = E_i \Psi_i$. Contudo, para estados excitados de alta energia de núcleos atômicos pesados, por exemplo, esta abordagem se torna impeditiva: ou não se sabe o Hamiltoniano, ou sua solução é complicada. Wigner sugere uma abordagem alternativa, estatística, para o problema de autovalores. Tal teoria descreveria as propriedades estatísticas da estrutura energética nucleica ao invés de detalhar seus níveis. Buscava-se, em algum sentido, uma universalidade, uma descrição que fosse, dada complexidade o suficiente, sensível às simetrias, mas independente dos detalhes em \mathcal{H} . A teoria foi prontamente seguida por, dentre outros, Gaudin, Mehta, (1) e Dyson, (2) que avançaram na descrição dos principais ensembles. Esse desenvolvimento é o início do que chamamos hoje Teoria de Matrizes Aleatórias (RMT, *Random Matrix Theory*).

Para alguns ensembles, chamados invariantes, uma importante analogia se apresenta: a de Gases de Coulomb. Pensando os autovalores como partículas de um gás interagente sob potencial externo, podemos usar de noções físicas para derivar, por exemplo, as densidades de autovalores no limite termodinâmico. A analogia permite, mudando a caracterização do gás, explorar ensembles de matrizes com entradas correlacionadas, de difícil construção direta. Contudo, nem sempre soluções analíticas são possíveis para as equações diferenciais estocásticas que descrevem a dinâmica destes gases. Por isso, recorre-se a simulações numéricas. Mesmo estas podem ser difíceis de tratar; a dinâmica tem alta complexidade temporal e as singularidades dificultam manter a energia invariante. Ainda assim, exploraremos abordagens que tornam a simulação da dinâmica suficientemente acurada e permitem, de forma direta, descrição numérica de casos analiticamente complicados e visualização de fenômenos, medidas e funções, outrossim inacessíveis, ainda que em alguns casos qualitativamente.

2 MATRIZES ALEATÓRIAS

2.1 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 $N \times N$, de entradas 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 de \hat{M} (jpdf, *joint probability density function*) como

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

Considere a decomposição nas coordenadas espectrais $\hat{M} = \hat{P}\hat{\Lambda}\hat{P}^{-1}$ onde \hat{P} é matriz invertível e $\hat{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$. Para que valha a decomposição tomaremos \hat{M} matriz simétrica, hermitiana ou hermitiana quaterniônica. Esta escolha é feita em importantes ensembles em RMT e motivada 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 matriz hermitiana quaterniônica. (3, Capítulo 2) Devemos atentar ainda pela escolha de mapa $\hat{M} \mapsto \hat{P}\hat{\Lambda}\hat{P}^{-1}$ bijetivo*. Se a mudança de variáveis tem Jacobiano $J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{P}\})$, reescreve-se a jpdf em função de $\hat{\Lambda}$ e \hat{P} tal que

$$\mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} = \mathcal{P}(M_{1,1}(\hat{\Lambda}, \hat{P}), \dots, M_{N,N}(\hat{\Lambda}, \hat{P}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{P}\})) d\hat{\Lambda}d\hat{P}. \quad (2.1.1)$$

Estamos especialmente interessados na distribuição de autovalores, logo, devemos integrar a Equação (2.1.1) sobre $d\hat{P}$, o que nem sempre é fácil ou possível. Por isso, tomaremos ensembles denominados invariantes (por rotação), isto é, tais que quaisquer duas matrizes \hat{M} e \hat{M}' que satisfaçam a relação de equivalência $\hat{M} = \hat{U}\hat{M}'\hat{U}^{-1}$, sendo \hat{U} uma rotação, tem mesma probabilidade. Com isso, a jpdf de suas entradas pode ser escrita exclusivamente como função dos autovalores, ou seja,

$$\mathcal{P}(\hat{\Lambda}, \hat{P})d\hat{\Lambda}d\hat{P} := \mathcal{P}(M_{1,1}(\hat{\Lambda}), \dots, M_{N,N}(\hat{\Lambda}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}\})) d\hat{\Lambda}d\hat{P}.$$

Pelo Lema de Weyl, uma jpdf invariante pode ser expressa totalmente por $\mathcal{P}(\hat{M}) := \phi(\text{Tr}(V(\hat{M})))$ com V função polinomial. Além disso, o jacobiano $J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{P}\})$ desta transformação pode ser expresso pelo determinante de matriz de Vandermonde tal que

$$\mathcal{P}(\hat{\Lambda}, \hat{P})d\hat{\Lambda}d\hat{P} = \phi(\text{Tr}(V(\hat{M}))) \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta d\hat{\Lambda}d\hat{P},$$

* Injetividade é garantida desconsiderando fase e sinal dos autovetores e ordenando os autovalores. Restringe-se ao subconjunto de matrizes sem multiplicidade de autovalores - denso, aberto e de medida completa tal que seu complemento é irrelevante na integração conseguinte.

onde $\beta = 1, 2, 4$ quando tomado $\mathbb{S} = \mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{H}$, respectivamente. Com esta expressão, sabendo medida uniforme sobre os autovetores, podemos explicitar pela primeira vez a jpdf para os autovalores ordenados destes ensembles de matrizes aleatórias como

$$\mathcal{P}_{ord}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{Z_{N,\beta}^{(ord)}} \phi\left(\sum_i^N V(\lambda_i)\right) \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta. \quad (2.1.2)$$

Note que, graças ao jacobiano, autovalores destas matrizes apresentam repulsão mútua, expressa pelo produtório na Equação (2.1.2). Este fato naturaliza a analogia da Seção 2.3 e é central a muitos resultados em RMT. É possível fazer desenvolvimento análogo para matrizes normais de ensembles associados a $\beta = 2$ com autovalores $\lambda_i \in \mathbb{C}$ - extensão explorada nos resultados. Outros casos fogem ao escopo do trabalho.

2.2 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 a escolha de \mathbb{S} . Mais explicitamente, o nome é dado em relação à se \hat{P} , tal que $\hat{M} = \hat{P}\hat{\Lambda}\hat{P}^{-1}$, é ortogonal, unitário ou simplético. Pensamos então, a menos de escala, nos ensembles *GOE*, *GUE* e *GSE* como matrizes simétricas $\hat{M} \in \mathcal{M}_{\mathbb{S}}(N)$ onde

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

Os três ensembles gaussianos compartilham de uma propriedade exclusiva - são os únicos ensembles com entradas independentes e, simultaneamente, jpdf rotacionalmente invariante. Tomemos, por simplicidade, $\hat{G} \in \mathcal{M}_{\mathbb{R}}(N)$, matriz real simétrica do GOE. Para esta, sabendo as entradas independentes, podemos escrever

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

Note que essa jpdf é função do traço de um polinômio em \hat{G} da forma que exige o Lema de Weyl, logo, pela Equação (2.1.2),

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

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

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) &= \frac{1}{N! Z_{N,\beta}^{(ord)}} \exp\left\{-\left(\sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i^2}{2} - \sum_{i < j}^N \log |\lambda_i - \lambda_j|^\beta\right)\right\}, \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta}} e^{-\beta_N \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})}, \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

onde $Z_{N,\beta}$ é função de partição canônica para autovalores desordenados[†], normalizante da Expressão (2.2.1). O fator $\beta_N = \beta N^2$ é pensado como a temperatura inversa. Definimos ainda o Hamiltoniano

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

onde é aplicado a devida escala na magnitude dos autovalores.

2.3 Gases de Coulomb

Sob as devidas condições, o Gás de Coulomb \mathcal{P}_N é medida de probabilidade de Boltzmann-Gibbs dada em $(\mathbb{R}^d)^N$. (4) A medida \mathcal{P}_N modela um gás interagente de partículas indistinguíveis sob potencial externo nas posições $x_1, x_2, \dots, x_N \in \mathbb{S}$ de dimensão d no espaço ambiente \mathbb{R}^n . A medida é dada por

$$d\mathcal{P}_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}} dx_1 dx_2 \dots dx_N, \quad (2.3.1)$$

onde

$$\mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{2N^2} \sum_{i \neq j}^N g(x_i - x_j)$$

é usualmente chamado Hamiltoniano[‡] ou energia do sistema. $V: \mathbb{S} \mapsto \mathbb{R}$ é potencial externo e $g: \mathbb{S} \mapsto (-\infty, \infty]$ núcleo de interação coulombiana solução da equação de Poisson dada por $-\nabla g(\vec{x}) = c_n \delta_0$. Além disso, βN^2 é chamado temperatura inversa. Tomaremos V , para que valha a Definição (2.3.1), tal que a constante de normalização (função partição) $Z_{N,\beta}$ seja finita para todo N e o suporte da medida seja compacto.

Se lembrarmos da Expressão (2.2.1), perceberemos que, para o devido $V: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, podemos tomar $d = 1$ e $n = 2$ para recuperar a medida dos ensembles gaussianos

$$\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta_N \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}}, \quad \mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{N^2} \sum_{i<j}^N \log \frac{1}{|x_i - x_j|}. \quad (2.3.2)$$

Estamos tratando de partículas no plano confinadas à reta, neste caso. Contudo, a medida dos gases aceita uma extensão natural para potenciais admissíveis arbitrários. Junto à escolha adequada de n e d estaremos lidando, ao explorar estas extensões, com a medida de outros diversos ensembles de matrizes aleatórias.

2.4 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 pode determinar

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

[‡] Note que \mathcal{P}_N é um modelo de interações estáticas e não há campos magnéticos considerados.

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 2.3. Notando que tratamos do ensemble canônico, um argumento termodinâmico nos indica então que devemos minimizar a energia livre $E_{N,\beta}^V \propto -\log Z_{N,\beta}$.

Consideramos V sob condições tais que seja denominado um potencial admissível. (4) Com isso, se μ_V é medida de probabilidade no espaço das possíveis configurações de autovalores, $Z_{N,\beta}$ será finita e existirá $\mu_V^* = \arg \inf \mathcal{H}_N$ medida de equilíbrio única no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Para determinar a medida de equilíbrio da Distribuição (2.3.2), (3) queremos satisfazer o sistema de equações

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \quad \text{para } i = 1, \dots, N. \quad (2.4.1)$$

Usaremos o denominado resolvente. Considere a função complexa

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

onde \hat{M} é matriz aleatória com autovalores $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\}$ e $S_N^{\mu_V}(z)$ pode ser vista como função complexa aleatória com polo em todo λ_i . Não trivialmente, multiplicando ambos lados da Relação (2.4.1) por $1/(z - \lambda_i)$ e somando sobre i , podemos reescrever a igualdade como

$$V'(z) S_N^{\mu_V}(z) - \Pi_N(z) = \frac{S_N^{\mu_V}(z)^2}{2} + \frac{S_N^{\prime \mu_V}(z)}{2N}, \quad \text{com } \Pi_N(z) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{V'(z) - V'(\lambda_i)}{z - \lambda_i}$$

polinômio de grau $\deg V'(z) - 1 = k - 1$. Resolver explicitamente para N constante pode não ser simples ou mesmo possível. Em geral, tomaremos a assintótica $N \rightarrow \infty$ e, nesse limite, $S_N^{\mu_V}(z)$ é transformada de Stieltjes[§]

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

Como consequência da fórmula de Sokhotski-Plemeji, é enunciado ainda a relação

$$\mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi i} (S_+^{\mu_V} - S_-^{\mu_V}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im } S_+^{\mu_V}(x + i\epsilon). \quad (2.4.2)$$

Com isso, resolve-se a equação quadrática obtida com o limite para $S^{\mu_V}(z)$ tal que

$$S^{\mu_V}(z) = V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi(z)} \quad (2.4.3)$$

com

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

Assumindo V potencial polinomial arbitrário, resta explicitar $\Pi(z)$ para encontrar a medida $\mu_V^*(x)$ pela Equação (2.4.2). Para isso, a expansão de $S^{\mu_V}(z)$ em $z \rightarrow \infty$ nos dará um sistema de equações auto consistentes para a determinação dos coeficientes de Π .

[§] Também chamada transformada de Cauchy.

2.5 Potenciais Notáveis

Sabemos que para um potencial arbitrário podemos usar o desenvolvimento da Seção 2.4 para determinar Π e, conseqüentemente, $S^{\mu\nu}$ e μ_V^* . Enunciemos então alguns potenciais notáveis. Retome a Medida (2.3.2) e considere primeiramente o potencial quadrático

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

Neste caso, teremos que

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-\sqrt{2}, \sqrt{2}], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2 - x^2}. \quad (2.5.1)$$

Esse resultado é bem conhecido e a medida encontrada é denominada Semi-Círculo de Wigner. Especialmente é medida de equilíbrio para os ensembles gaussianos e vale para qualquer β . A diferença é notada somente para N suficientemente pequeno.

Agora, considere o potencial quártico

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

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

- $t \geq -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} (x^2 + c_t^2) \sqrt{b_t^2 - x^2}, \quad (2.5.2)$$

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

- $t < -2$

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-b_t, -a_t] \cup [a_t, b_t], \quad \mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi} |x| \sqrt{(x^2 - a_t^2)(b_t^2 - x^2)}, \quad (2.5.3)$$

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

Por último, tome o potencial mônico

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

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

$$\text{supp } \mu_V^*(x) = [-a, a], \quad \mu_V^*(x) = \frac{mt}{\pi} \sqrt{a^2 - x^2} h_1(x), \quad (2.5.4)$$

com

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

Essas medidas de equilíbrio nos servirão no Capítulo 4 quando quisermos assegurar o bom comportamento das simulações implementadas.

3 SIMULAÇÕES E ALGORITMOS

A medida 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 desta medida são denominados termostatos e são notoriamente difíceis de se construir ergodicamente 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*, (5, 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. 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-Hastings. (5, Apêndice C) As escolhas supracitadas são descritas por Chafaï e Ferré (6) e são denominadas *Langevin Monte Carlo*.

3.1 Dinâmica de *Langevin Monte Carlo*

Nosso objetivo com a simulação é determinar a esperança de uma função de interesse $\zeta(q, p)$, dado um ensemble. Pela teoria ergódica, sob algumas condições e no limite adequado, a média espacial $\langle \zeta \rangle_\mu$ é igual a média temporal

$$\langle \zeta \rangle_t \approx \frac{1}{\tau} \sum_{k=1}^{\tau} \zeta(q_k, p_k),$$

onde (q_k, p_k) podem ser obtidos por meio de uma dinâmica que preserve dada distribuição de Gibbs-Boltzmann. Para fazer o modelo ergódico, ou seja, garantir que a simulação - e nossas amostras - não esteja restrita a um subconjunto do espaço de fase, tomaremos uma dinâmica, um termostato, estocástica. Isso usualmente garante que o sistema possa convergir para sua medida invariante (única). Um esquema comumente utilizado é a dinâmica de Langevin*.

Denote q , com $q \in \mathbb{R}^{(dN)}$, posição generalizada associada as N partículas. A Equação (2.3.1) é medida invariante do processo de difusão de Markov solução da equação diferencial estocástica

$$dq_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dW_t, \quad (3.1.1)$$

* Poderíamos ter explorado outras dinâmicas similares tais como as dinâmicas de *Dissipative Particle* (7) ou *Nose-Hoover* (8).

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 extensão cinética. Usaremos q como variável de interesse e p , com $p \in \mathbb{R}^{(dN)}$, variável de momento generalizado, para flexibilizar a dinâmica. Considere $U_N: \mathbb{R}^{(dN)} \rightarrow \mathbb{R}$ energia cinética generalizada tal que $e^{-\beta_N U_N}$ seja Lebesgue integrável. Para uma energia da forma $E_N(q, p) = \mathcal{H}_N(q) + U_N(p)$, seja $(q_t, p_t)_{t \geq 0}$ processo de difusão em $\mathbb{R}^{dN} \times \mathbb{R}^{dN}$ solução da equação diferencial estocástica

$$\begin{cases} dq_t = \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt, \\ dp_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dB_t, \end{cases} \quad (3.1.2)$$

onde β_N é temperatura inversa e $\mathcal{H}_N: \mathbb{R}^{(dN)} \rightarrow \mathbb{R}$ é como na Distribuição (2.3.2). (9) Esse processo deixa invariante $\mathcal{P}(q, p) = \mathcal{P}_q \otimes \mathcal{P}_p = e^{-\beta_N E_N(q, p)} / Z'_N$ e admite o gerador infinitesimal

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_\mathcal{H} + \mathcal{L}_\mathcal{U},$$

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

Denomina-se $\mathcal{L}_\mathcal{H}$ a parte hamiltoniana e $\mathcal{L}_\mathcal{U}$ a parte de flutuação-dissipação. Tomaremos $U_N(p) = \frac{1}{2}|p|^2$ tal que $U_N(p)$ é energia cinética usual. Um esquema análogo é possível para energias cinéticas generalizadas. (9) Além disso, $(B_t)_{t>0}$ é processo browniano. Para simular $(q_t, p_t)_{t \geq 0}$ integramos a Equação (3.1.2), contudo, isso pode não ser possível analiticamente, levando a recorrer a métodos numéricos para amostragem.

3.2 Integração Numérica

Para integrar o Processo (3.1.2) discretizaremos, para amostragem numérica, separadamente as dinâmicas associadas à $\mathcal{L}_\mathcal{H}$ e $\mathcal{L}_\mathcal{U}$. Naturalmente, $\mathcal{L}_\mathcal{H}$ descreve um processo hamiltoniano e deve preservar o volume do espaço de fase, de forma que não precisaremos calcular o jacobiano da transformação que dá esta dinâmica. Utilizando de um integrador simplético, tal como o de Verlet, podemos manter essa propriedade na discretização. A dinâmica é também reversível a menos de inversão do momento, importante no algoritmo para garantir que mantém-se a medida invariante. Contudo, é conhecido que a discretização não pode preservar a energia exatamente e, para lidar com esse fato, discute-se a implementação de um passo de Metropolis-Hastings na Seção 3.3. Para $\Delta t > 0$, a partir do estado (q_k, p_k) , o esquema de Verlet lê-se

$$\begin{cases} p_{k+\frac{1}{2}} = p_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + p_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = p_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(\tilde{q}_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \end{cases} \quad (3.2.1)$$

onde $(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1})$ é estado seguinte da dinâmica. Outros métodos tais quais *Euler-Maruyama* (EM) podem ser utilizados para o mesmo fim. (5, Capítulo 7) Nos métodos que temos

interesse, o erro associado à discretização deve ir a zero quando Δt vai a zero. Para EM, o erro local é da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ e o erro global $\mathcal{O}(\Delta t)$. Já para o esquema escolhido, devido à reversibilidade, o erro local é $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ e o global $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. (10, Capítulo 5)

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

$$dp_t = -\alpha_N p_t dt + \sigma dB_t,$$

onde $\alpha_N, \sigma > 0$ são parâmetros e B_t é processo browniano. Este processo também mantém a medida invariante e é reversível. Note que, para $\alpha_N > 0$ somente substituiremos parcialmente o momento das partículas e, se $\alpha_N, \gamma_N \rightarrow 0$ com $\alpha_N \gamma_N = 1$, retomariamos a dinâmica da Equação (3.1.1). Este processo não seria muito melhor, contudo, do que um *Random Walk Metropolis* já que o momento seria completamente substituído. (10, Capítulo 5) De qualquer forma, sabemos existir solução analítica para o processo de Ornstein-Uhlenbeck a partir da fórmula de Mehler dada por

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}, \quad (3.2.2)$$

onde G_k é variável aleatória gaussiana usual. (6)

3.3 Passo de Metropolis-Hastings

Muitos algoritmos utilizam de um passo de seleção para estabilizar sua dinâmica e otimizar a convergência e amostragem, usaremos dessa ideia para otimizar o algoritmo. Para o método de Metropolis-Hastings, é importante manter a razão de rejeições baixa para não atrapalhar a eficiência, o que influencia no tamanho do passo temporal decidido. Pode ser mostrado que Δt é ideal quando é da ordem de $N^{-\frac{1}{4}}$, (6) tornando o esquema interessante pela escalabilidade de N .

Partindo dos esquemas da Seção 3.2, consideraremos $(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1})$ proposta de novo estado gerada pela dinâmica de \mathcal{L} , a partir do estado anterior (q_k, p_k) . Define-se

$$P_k = 1 \wedge \frac{e^{-\beta_N E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1})}}{e^{-\beta_N E_N(q_k, \tilde{p}_k)}}, \quad (3.3.1)$$

onde \tilde{p}_k é dado por (4.0.1), probabilidade de aceite tal que se atribua agora às novas coordenadas generalizadas (q_{k+1}, p_{k+1}) valor da seguinte forma

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) & \text{com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) & \text{com probabilidade } 1 - P_k. \end{cases} \quad (3.3.2)$$

Assim, a proposta será aceita com probabilidade um se $E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) < E_N(q_k, \tilde{p}_k)$ e com probabilidade dada pela razão das medidas, caso contrário. Dessa forma garante-se a conservação da energia - preocupação na discretização da dinâmica - e otimiza-se a exploração do espaço de fase.

4 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 3 sob essas condições, temos o algoritmo, com base em Chafaï e Ferré (6), completo. Dada uma condição inicial (q_k, p_k) , vetores de posição e momento generalizados, para cada $k \geq 0$, realizamos os seguintes passos

1. Baseado na Equação (3.2.2), atualize \tilde{p}_k com

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}; \quad (4.0.1)$$

2. Utilizando do esquema de Verlet (3.2.1), calcule os termos

$$\begin{cases} \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} = \tilde{p}_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(\tilde{q}_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}; \end{cases} \quad (4.0.2)$$

3. Pela Definição (3.3.1), tome

$$P_k = 1 \wedge \exp\{-\beta_N (E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) - E_N(q_k, \tilde{p}_k))\}; \quad (4.0.3)$$

4. Defina, a partir da Razão (3.3.2),

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) \text{ com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) \text{ com probabilidade } 1 - P_k; \end{cases} \quad (4.0.4)$$

4.1 Implementação

Tomaremos o subespaço $\mathbb{S} = \mathbb{R}^d$ com $d = 1, 2$. Consideraremos um núcleo de interação $W = g$ coulombiano em $n = 2$. Por isso, retomamos a Medida (2.3.1) 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 na Equação (4.0.1), foi implementado utilizando do algoritmo de *Box-Muller*. Além disso, o ajuste de variáveis é notoriamente um dos aspectos complicados do algoritmo implementado. Precisamos de uma holística para ajustar Δt , α_N e γ_N . No escopo deste programa, Δt e α_N desempenham o mesmo papel; por isso, toma-se $\alpha_N = 1$ e varia-se Δt .

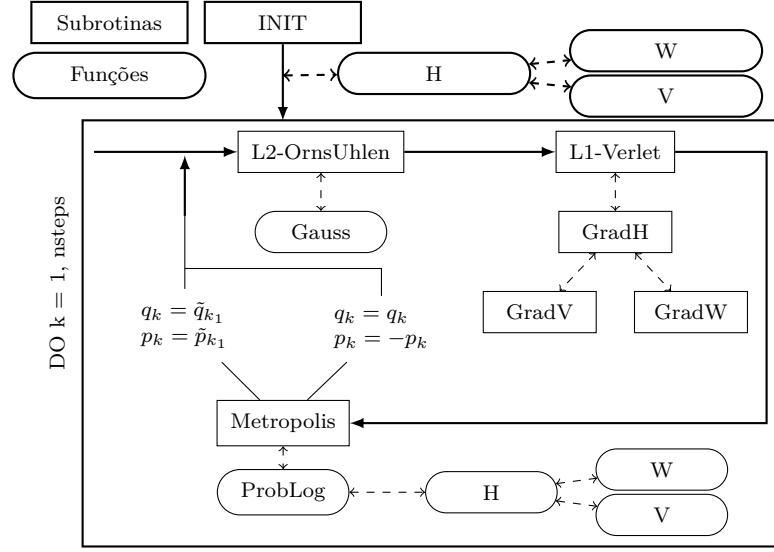


Figura 1 – Implementação do algoritmo *Langevin Monte Carlo* (LMC). Setas sólidas indicam o fluxo do programa. Setas tracejadas indicam chamadas de funções dentro do bloco. A descrição das funções se encontra na Tabela 1.

| 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. |
| L2-OrnsUhlen | Modifica \tilde{p}_k , vetor $[N \times m]$, global, por \mathcal{L}_U segundo (4.0.1). |
| L1-Verlet | Modifica $\tilde{p}_{k+1}, \tilde{q}_{k+1}$ vetores $[N \times m]$, globais, por \mathcal{L}_H segundo (4.0.2). |
| 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 (4.0.3). |
| 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 (4.0.4). |
| Gauss | Retorna variáveis gaussianas, vetor $[1 \times m]$, local por Box-Muller. |

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

Seguindo a recomendação de Brooks (10, 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, pequeno o suficiente para manter a razão de aceite do passo de Metropolis-Hastings alta mas grande o suficiente para não desacelerar a convergência do algoritmo. Já γ_N definirá o quanto 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 $\gamma_N \alpha_N \Delta \tilde{t} \approx 0.5$.

4.2 Resultados e Discussão

Simular Gases de Coulomb é especialmente interessante quando não há modelos de matrizes conhecidos, disponíveis ou simples para o \mathcal{H} tomado. Podemos, com a simulação de tais gases, calcular a média da função densidade das partículas, ou autovalores, sem ter que diretamente lidar com as matrizes correspondentes. Alternativamente, quando há modelos disponíveis na teoria de RMT, as matrizes poderiam ser diretamente amostradas e a função dos autovalores calculada da diagonalização das mesmas. Tratem-se de um caso onde ambas as abordagens são possíveis.

A família de ensembles gaussianos são modelos que mostramos ser bem representados como matrizes na Seção 2.2. Retorne os resultados da Seção 2.5. Tomar a medida dos ensembles gaussianos é o equivalente, na simulação de gases descrita, a tomar

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 1, 2, 4. \quad (4.2.1)$$

O resultado da simulação para a Configuração (4.2.1) é apresentado na Figura 2 para os três modelos ($\beta = 1, 2, 4$). Na coluna da esquerda, contrasta-se os resultados para $N = 10$ da densidade gerada por ambas a simulação de gases e a amostragem direta de matrizes do ensemble. Na coluna central, representa-se a comparação da medida 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 apresentarem mesmo suporte. Finalmente, na coluna da direita apresentamos a distribuição do maior autovalor λ_{max} . Um resultado importante 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. (11)

Observa-se que os dois modelos à esquerda, amostragem direta e simulação de gases, 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, ainda que com N finito, podemos ver boa correspondência com o resultado esperado pela Tracy-Widow, piorando com a diminuição da temperatura.

Podemos retomar também as descrições dos potenciais mônico, na Equação (2.5.4), e os dois regimes do potencial quártico, Caso (2.5.2) e Caso (2.5.3). Respectivamente, estes modelos equivalem a tomar na simulação os parâmetros

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = t|x|^{2m}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (4.2.2)$$

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^4}{4} + t \frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (4.2.3)$$

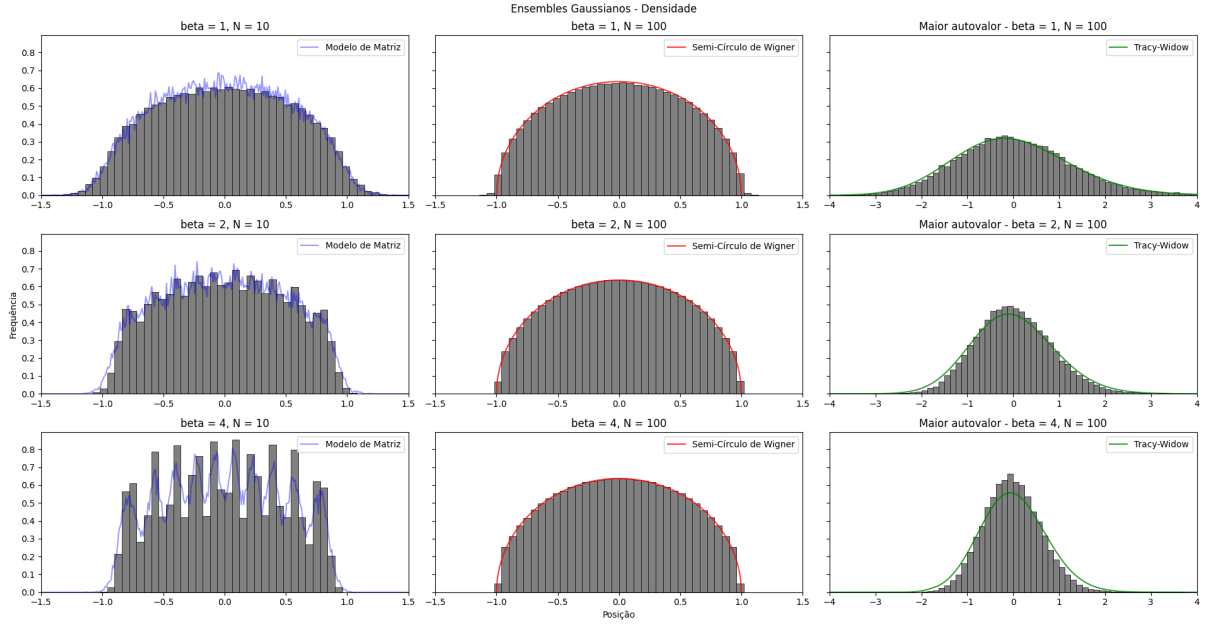


Figura 2 – Densidade para ensembles gaussianos, (4.2.1). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$ e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 100 iterações a partir de $nsteps/5$. À esquerda da figura, em azul, a densidade da amostragem de $4 \cdot 10^3$ matrizes do ensemble. No centro, o Semi-Círculo de Wigner, medida de equilíbrio. Na direita, apresenta-se a densidade de λ_{max} normalizado e sua medida esperada.

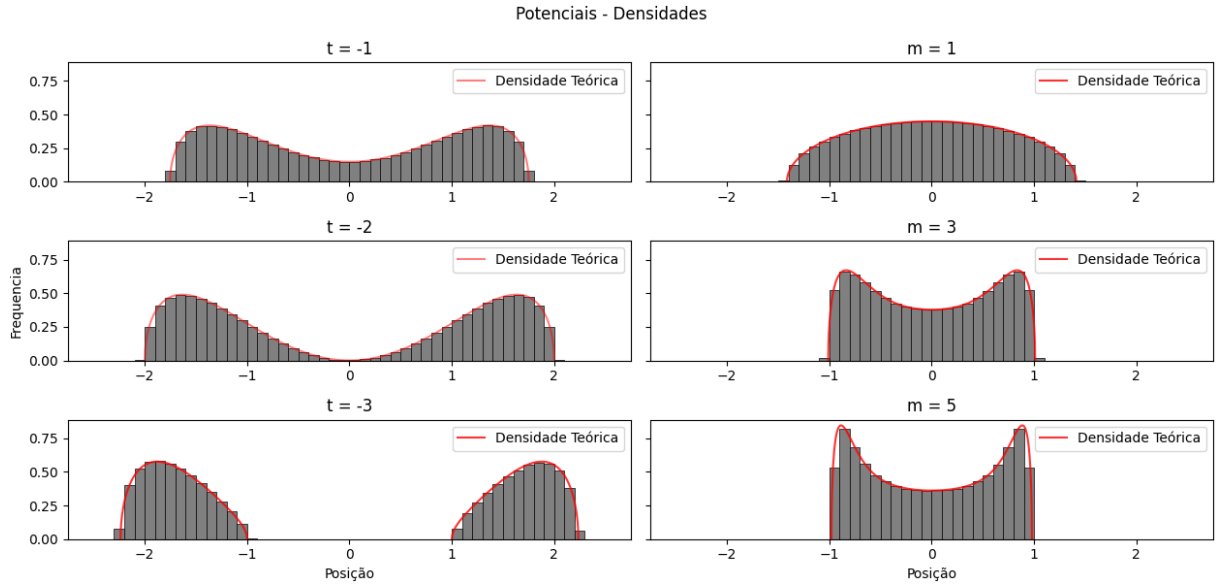


Figura 3 – Potencial Quártico (4.2.3) e Mônico (4.2.2), respectivamente à esquerda e direita. Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$, $N = 100$, e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos. Registra-se a cada 1000 iterações a partir de $nsteps/5$. No Quártico, simula-se $t = -1, -2, -3$. No Mônico fixa-se $t = 1$ e simula-se $m = 1, 3, 5$.

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 .

Novamente as medidas experimentais parecem convergir para a medida teórica enunciada em todas as configurações testadas. Contudo, isso é discutido, com exceção do

Mônico, por Chafaï e Ferré (6). Em luz da situação recentemente explorada por Balogh *et al.* (12) consideremos a Configuração (4.2.4) complexa. Para esta, representamos as medidas simuladas para alguns valores de interesse de t, a na Figura 4,

$$d = 2; n = 2; V(z) = |z|^{2a} - \operatorname{Re}\{tz^a\}; W(x) = g(x) = \log|x|; \beta_N = \beta N^2; \beta = 2. \quad (4.2.4)$$

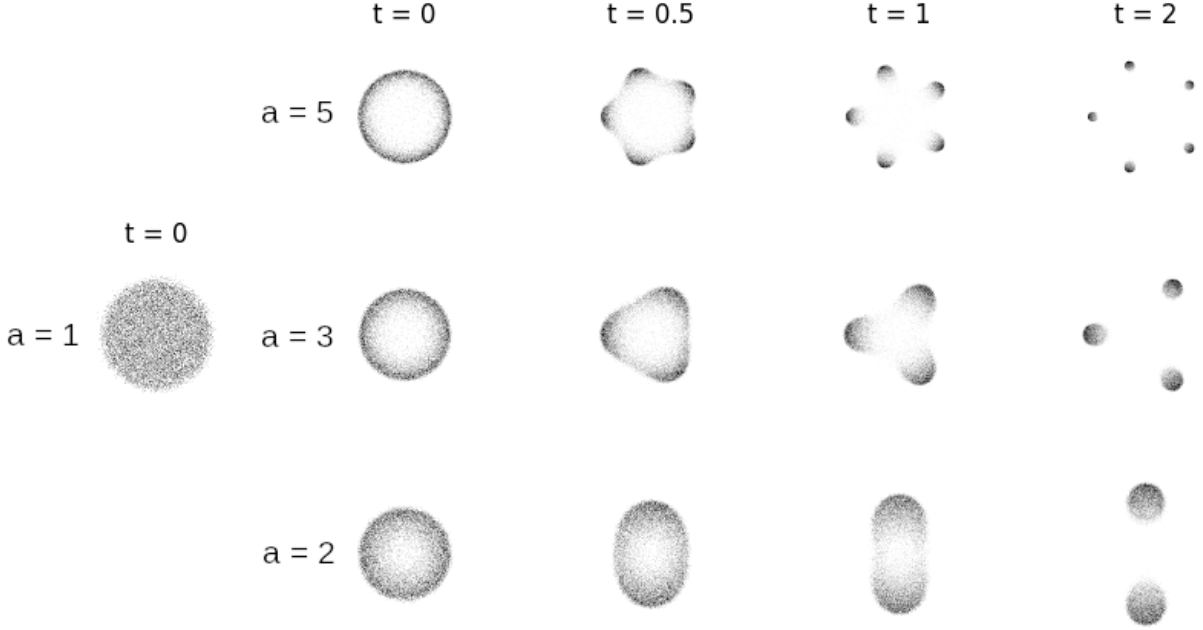


Figura 4 – Medidas referentes à configuração (4.2.4). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 500 iterações a partir de $nsteps/5$.

É previsto para esse modelo uma transição de regime - uma separação da medida de equilíbrio - para $t_c \approx \sqrt{\frac{1}{a}}$, o que pode ser observado na Figura 4 com algum detalhe. Outros fatores que corroboram o bom comportamento do modelo são que a medida é uniforme no disco quando $(a, t) = (1, 0)$ e se concentra no bordo quando incrementa-se a , fatos também previstos. (12) Esse exemplo demonstra que é possível, sem muito esforço, replicar a medida, e principalmente o suporte, para potenciais mais complexos estudados em publicações recentes no tema e pode ser estendido para outros estudos, como para o potencial discutido por Bleher e Silva (13).

No Capítulo 1 apresentamos os ensembles gaussianos como os únicos ensembles invariantes de entradas independentes. Gerar matrizes de outros modelos invariantes dependeria de se saber construir matrizes de entradas não trivialmente correlacionadas. Por outro lado, se sabemos valer a decomposição espectral $\hat{M} = \hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^{-1}$, resta que saibamos simular os autovalores para reconstruir as matrizes. Os autovetores podem ser amostrados uniformemente do espaço adequado nos ensembles invariantes. Agora, com a simulação de Gases de Coulomb, apresenta-se uma alternativa para tais distribuições de autovalores. Esse fato, por permitir a reconstrução destas matrizes, possibilita a exploração de múltiplas construções matemáticas que dependem de sua adequada amostragem.

5 CONCLUSÃO

A Teoria de Matrizes Aleatórias é uma ferramenta matemática extremamente versátil. Suas aplicações são extensas e diversas, cobrindo ambos sistemas físicos e matemáticos de grande relevância. Partindo da hipótese que autoenergias de sistemas complexos se comportam localmente como autovalores de matrizes aleatórias adequadas, permite-se a caracterização estatística do núcleo atômico ou ainda a determinação de propriedades físicas de metais. Em matemática, além das clássicas aplicações estatísticas dos modelos, mostra-se que matrizes aleatórias tem importante papel na determinação dos zeros da função de Riemann. Consolidada assim sua importância, a teoria se desenvolve rapidamente e tem chamado atenção da comunidade científica-matemática. Introduzimos neste trabalho as ideias de medida de matrizes aleatórias e ensembles, essenciais à RMT, e descrevemos os clássicos ensembles gaussianos, que julgamos exemplares para o entendimento dos resultados sobre medida nos autovalores e equilíbrio.

A analogia de Gases de Coulomb surge naturalmente ao se explicitar a medida de matrizes de ensembles invariantes. Sua interpretação permite pensar na dinâmica dos autovalores como uma de partículas interagentes, da qual intuímos as ideias de minimização da energia livre para identificar o equilíbrio. Percebemos que muitas vezes métodos numéricos são necessários para a solução das equações de movimento estocásticas que descrevem a dinâmica das partículas modeladas. Apresentamos então os métodos de simulação numérica e discutimos as principais características do algoritmo implementado, denominado *Langevin Monte Carlo*.

Além disso, apresentamos os resultados, que dividimos, em propósito, em duas partes. Os primeiros resultados são de medidas de autovalores na reta, bem explorados na teoria e relativamente simples. Para estes, incluímos explicitamente no trabalho as soluções. Qualitativamente observa-se que os resultados tem boa concordância com a teoria, mesmo em distribuições mais delicadas, como a Tracy-Widow. Isso nos dá boa indicação do bom comportamento dos métodos e implementação utilizados. Com isso, apresentamos um dos resultados obtidos em um Gás de Coulomb em duas dimensões. Isso refere a um potencial complexo, explorado com mais afinco apenas em teoria recente. Mesmo aqui, mostra-se que é possível replicar características de resultados apontados em trabalhos recentes e indica uma possível direção para exploração numérica da teoria.

Entendemos este estudo como uma descrição e validação de métodos conhecidos de simulação e matrizes aleatórias, ainda que atuais. Contudo, veem-se extensões da utilização do método para estudo numérico de importantes resultados com menos descrição teórica, o que, até onde sabemos, é menos explorado.

REFERÊNCIAS

- 1 MEHTA, M.; GAUDIN, M. On the density of eigenvalues of a random matrix. **Nuclear Physics**, v. 18, p. 420–427, 1960.
- 2 DYSON, F. J. Statistical theory of the energy levels of complex systems. **Journal of Mathematical Physics**, v. 3, n. 1, p. 140–156, 1962.
- 3 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.
- 4 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, 2018.
- 5 LEIMKUHLER, B.; MATTHEWS, C. **Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods**. Cham, Suíça: Springer International Publishing, 2015. ISBN 9783319163758.
- 6 CHAFAÏ, D.; FERRÉ, G. Simulating Coulomb and log-gases with Hybrid Monte Carlo algorithms. **Journal of Statistical Physics**, v. 174, n. 3, p. 692–714, 2018.
- 7 ESPAÑOL, P.; WARREN, P. Statistical mechanics of dissipative particle dynamics. **Europhysics Letters**, v. 30, n. 4, p. 191, 1995.
- 8 HOOVER, W. G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. **Physics Review A**, v. 31, p. 1695–1697, 1985.
- 9 STOLTZ, G.; TRSTANOVA, Z. Langevin dynamics with general kinetic energies. **Multiscale Modeling & Simulation**, v. 16, n. 2, p. 777–806, 2018.
- 10 BROOKS, S. *et al.* **Handbook of Markov Chain Monte Carlo**. Florida, USA: CRC Press, 2011. ISBN 9781420079425.
- 11 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.
- 12 BALOGH, F.; GRAVA, T.; MERZI, D. Orthogonal polynomials for a class of measures with discrete rotational symmetries in the complex plane. **Constructive Approximation**, v. 46, p. 109–169, 2017.
- 13 BLEHER, P.; SILVA, G. The mother body phase transition in the normal matrix model. **Memoirs of the American Mathematical Society**, v. 265, 01 2016.

C Relatório de Pesquisa - Baralhos e Caminhos Aleatórios

Relatório de Pesquisa realizado com auxílio da FAPESP no projeto de Pesquisa de Verão no Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação.



RELATÓRIO FINAL JORNADAS DE PESQUISA EM MATEMÁTICA 2024

Baralhos e passeios aleatórios

João V. A. Pimenta, Luiz F. S. Marques, Raphael Alves, Sabrina
Estácio

Supervisores: Milton Jara, Rodrigo Marinho, Susana Frómeta

São Carlos, SP
Fevereiro de 2024

Sumário

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introdução | 3 |
| 2 | Definições, nomenclaturas e o teorema principal | 4 |
| 2.1 | O passeio aleatório simples simétrico em \mathbb{Z} | 4 |
| 2.2 | Baralhos e simulações | 5 |
| 2.3 | As distribuições binomial e hipergeométrica | 6 |
| 2.4 | Distância de variação total | 7 |
| 3 | O teorema principal | 8 |
| 3.1 | Consequências do Teorema | 8 |
| 4 | Demonstração do teorema principal | 10 |
| 4.1 | Localizando os pontos nos quais $f(\cdot, N, T) - 1$ muda de sinal | 12 |
| 4.2 | Uma extensão contínua de $f(\lambda, N, T)$ | 14 |
| 4.3 | Estimativas para $\binom{T}{\lambda}$ e $f(\lambda, cT, T)$ | 15 |
| 4.4 | A sequência $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ | 17 |
| 4.5 | Concluindo a demonstração | 20 |
| 5 | Outras simulações | 22 |
| 5.1 | Uma extensão dos grupos | 22 |
| 5.2 | Uma simulação - quase - perfeita | 24 |
| 6 | Conclusão | 26 |

1 Introdução

Neste trabalho estudaremos passeios aleatórios *simples simétricos em \mathbb{Z}* . Tais passeios descrevem um movimento aleatório de uma partícula em \mathbb{Z} . Isto é, em momentos discretos, a partícula pode se mover para o inteiro à sua direita ou para o inteiro à sua esquerda com igual probabilidade.

Um passeio aleatório simples simétrico pode ser simulado usando uma moeda honesta com o seguinte procedimento: lança-se a moeda e, se o resultado for cara, dá-se um passo à direita. Se for coroa, dá-se um passo à esquerda. Queremos estudar como simular passeios aleatórios simples simétricos em \mathbb{Z} utilizando um baralho de cartas. Atribuindo ações às cartas, podemos fazer simulações apenas virando-as uma-a-uma, sem reposição, o que é bem mais prático do que lançar a moeda repetidas vezes.

Diversas são as maneiras de se atribuir ações a cada uma das cartas. Uma possível maneira é — considerando que o baralho está dividido em cartas vermelhas e pretas — atribuir às cartas vermelhas a ação de dar um passo à esquerda, e às cartas pretas a ação de dar um passo à direita. Este procedimento será denominado no decorrer deste texto de *simulação tradicional*.

| Tipo (cor) | Movimento atribuído |
|---|---------------------|
|   | → |
|   | ← |

Tabela 1: Uma simulação que dá 1 passo por carta - *simulação tradicional*.

Numa tentativa de elaborar outra simulação, pode-se questionar o porquê de não utilizar os naipes. Enquanto as cores dividem o baralho em dois grupos distintos, os naipes o dividem em quatro, permitindo atribuir dois passos a cada carta retirada, como ilustra a Tabela 2.





| Naipe | Movimento atribuído |
|---|---------------------|
|  | →→ |
|  | →← |
|  | ←→ |
|  | ←← |

Tabela 2: Uma simulação que dá 2 passos por carta.

Estas simulações admitem uma generalização. Se o baralho estiver dividido em 2^k grupos¹, então podemos atribuir a cada carta um movimento composto por k passos.

Há, porém, um detalhe a ser observado ao utilizar as simulações descritas acima. Vamos utilizar a *simulação tradicional* como exemplo. Suponha que iniciemos o procedimento retirando uma carta preta e, portanto, dando um passo à direita. No momento que precede a retirada da segunda carta, o baralho tem uma carta vermelha a mais do que pretas, fazendo com que a probabilidade de ser retirada uma carta vermelha seja ligeiramente maior que a probabilidade de ser retirada uma carta preta, o que não deveria ocorrer em um passeio aleatório simétrico. Esta situação pode se agravar se mais

¹Aqui, o leitor deve se desprender da ideia de baralho com 52 cartas em 4 naipes que conhecemos e imaginar um conjunto genérico de cartas que, de alguma maneira, se divide em 2^k agrupamentos.

cartas pretas forem retiradas seguidamente. Um problema semelhante ocorre com a generalização com 2^k grupos considerada acima. Os passos, nessa simulação, apresentam dependência com os passos anteriores, fato que não ocorre com a moeda.

Nosso interesse principal neste trabalho é entender qual é a lei induzida pela *simulação tradicional* sobre as trajetórias possíveis, e o quão distante essa lei é (usando um parâmetro que será enunciado posteriormente — a distância de variação total) da lei representada pela simulação com uma moeda (com variáveis independentes). Nesse sentido, o nosso principal resultado representa uma resposta direta à questão e descreve qual a quantidade de passos que podemos simular de um passeio aleatório para um baralho de N cartas tal que se mantenha um controle arbitrário sobre a distância entre as distribuições.

Na Seção 2, forneceremos definições precisas para o baralho e a *simulação tradicional* e introduziremos a distância de variação total entre duas medidas de probabilidade definidas em um mesmo espaço. Esta última será o objeto utilizado para avaliar quão bem um baralho com N cartas simula trajetórias de tamanho T de um passeio aleatório simples simétrico utilizando uma dada simulação². Em seguida, na Seção 3, enunciaremos o Teorema 3.1, que exhibe o perfil assintótico da distância de variação total entre a lei das possíveis trajetórias do passeio aleatório simulado com a *simulação tradicional* e o passeio aleatório de tamanho finito fixado. Discutiremos também algumas consequências numéricas. Após isso, na Seção 4, apresentaremos a demonstração do Teorema 3.1. Na Seção 5, discutiremos outras direções para as quais este trabalho ainda pode avançar. Comentaremos ainda alguns resultados acerca de uma simulação que lida de maneira diferente com a dependência dos passos anteriores que se observou acima. Por fim, na Seção 6, sintetizaremos o que foi desenvolvido e recapitularemos sucintamente os resultados apresentados ao longo relatório.

2 Definições, nomenclaturas e o teorema principal

2.1 O passeio aleatório simples simétrico em \mathbb{Z}

Sejam $p \in (0, 1)$ e $(\xi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ uma sequência de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com

$$\mathbb{P}(\xi_j = 1) = 1 - \mathbb{P}(\xi_j = -1) = p. \quad (2.1)$$

Considere $X_0 := 0$ e, para cada $n \geq 1$,

$$X_n := \sum_{j=1}^n \xi_j.$$

A sequência $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ é dita o *passeio aleatório simples simétrico* em \mathbb{Z} . As variáveis aleatórias ξ_j , $j \in \mathbb{N}$, determinam a direção do j -ésimo passo, sendo esse para a esquerda se $\xi_j = -1$ e para a direita se $\xi_j = 1$. As variáveis X_n , $n \in \mathbb{N}_0$, por sua vez, determinam a posição da partícula após o n -ésimo passo dado. Quando $p = 1/2$, dizemos que a sequência $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ é o *passeio aleatório simples simétrico em \mathbb{Z}* . Este é o caso que pretendemos simular, e o denominaremos daqui em diante de *passeio aleatório*.

²Que, no nosso escopo, será a tradicional.

Na prática, estamos interessados em simular a trajetória de um passeio aleatório até determinado instante e, portanto, convém observar o truncamento da sequência $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ em um certo $T \in \mathbb{N}$ fixado. Assim, diremos que o passeio aleatório de tamanho T é o vetor aleatório $(X_n)_{0 \leq n \leq T}$, em que X_n , $0 \leq n \leq T$, são as variáveis aleatórias definidas acima.

Observe que $(X_n)_{0 \leq n \leq T}$ assume valores em

$$\Gamma_T := \{x = (x_0, \dots, x_T) \in \mathbb{Z}^T : x_0 = 0 \text{ e } |x_j - x_{j-1}| = 1 \text{ para todo } j = 1, \dots, T\}.$$

De (2.1) com $p = 1/2$ e da independência das variáveis $(\xi_j)_{1 \leq j \leq T}$, temos

$$\mathbb{P}((X_n)_{0 \leq n \leq T} = x) = \frac{1}{|\Gamma_T|} = \frac{1}{2^T}$$

para qualquer que seja $x \in \Gamma_T$. Ou seja, a lei de $(X_n)_{0 \leq n \leq T}$ é a uniforme em Γ_T . Será conveniente notar que existe uma bijeção entre Γ_T e

$$\Omega_T := \{-1, 1\}^T = \{(\sigma_1, \dots, \sigma_T) : \sigma_j \in \{-1, 1\} \text{ para todo } j = 1, \dots, T\},$$

o conjunto em que o vetor aleatório $(\xi_j)_{1 \leq j \leq T}$ assume valores também com lei uniforme. Em palavras, existe uma correspondência biunívoca entre as possíveis trajetórias do passeio e as possíveis sequências de T passos à direita ou à esquerda.

2.2 Baralhos e simulações

Sejam $N, K, T \in \mathbb{N}$ tais que $T < 2K = N$. Um *baralho* com N cartas é o conjunto $\Lambda_N := \{1, \dots, N\}$, em que cada $j \in \Lambda_N$ representa uma carta. Denotaremos por S_N o conjunto das permutações de Λ_N . Isto é,

$$S_N := \{(\sigma(1), \dots, \sigma(N)) : \sigma \text{ é uma bijeção de } \Lambda_N \text{ em } \Lambda_N\}.$$

Uma função $X : S_N \longrightarrow \Omega_T$ é dita uma *simulação* do passeio aleatório de tamanho T utilizando um baralho com N cartas. Observe que toda função $\varphi : \Lambda_N \longrightarrow \{-1, 1\}$ determina uma simulação. De fato, fixada φ , definimos X por

$$X(\sigma) = (\varphi(\sigma_1), \dots, \varphi(\sigma_T)), \quad (2.2)$$

em que $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N) \in S_N$. Assim, a simulação tradicional descrita na Seção 1 fica formalmente definida por este método utilizando a função $\varphi : \Lambda_N \longrightarrow \{-1, 1\}$ dada por

$$\varphi(j) = \begin{cases} -1, & \text{se } j \text{ é par;} \\ 1, & \text{se } j \text{ é ímpar.} \end{cases} \quad (2.3)$$

A função φ identifica cada elemento par de Λ_N com uma carta vermelha e associa a esta um passo à esquerda, e cada elemento ímpar de Λ_N com uma carta preta, associando a esta um passo à direita. Perceba também que, como $T < N$, a simulação X é certamente não injetora. Com efeito, trocar de lugar os últimos elementos de uma certa permutação $\sigma \in S_N$ não altera a sua imagem pela função X .

2.3 As distribuições binomial e hipergeométrica

Introduziremos a seguir duas distribuições de probabilidade que surgirão nos cálculos da Seção 4. Evitamos ir a fundo nos detalhes que envolvem tais distribuições, uma vez que o que precisaremos é apenas identificá-las quando surgirem.

Seja $p \in (0, 1)$. Dizemos que uma variável aleatória X tem distribuição de *Bernoulli* com parâmetro p se assume valores em $\{0, 1\}$ com

$$\mathbb{P}(X = 1) = 1 - \mathbb{P}(X = 0) = p.$$

Intuitivamente, X representa o sucesso ou fracasso de um dado experimento que será realizado uma única vez e possui probabilidade p de ser bem sucedido. O sucesso do experimento ocorre quando X assume 1 e, conseqüentemente, o fracasso ocorre quando X assume 0.

Agora, dado $n \in \mathbb{N}$, dizemos que X tem distribuição *binomial* com parâmetros n e p , e escrevemos $X \sim B(n, p)$, se X assume valores em $\{0, 1, \dots, n\}$ com

$$\mathbb{P}(X = \lambda) = \binom{n}{\lambda} p^\lambda (1 - p)^{n-\lambda}, \quad \lambda = 0, 1, \dots, n.$$

Como uma generalização da distribuição de Bernoulli, X representa a quantidade de sucessos em uma sequência de n realizações independentes de um mesmo experimento com probabilidade p de ser bem sucedido. Uma outra maneira de pensar X é como uma soma de n variáveis aleatórias independentes com distribuição de Bernoulli de parâmetro p .

Sejam N , T e K inteiros positivos com $T < K < N$. Dizemos que uma variável aleatória X tem distribuição *hipergeométrica* com parâmetros N , T e K e escrevemos $X \sim H(N, T, K)$ se X assume valores em $\{0, 1, \dots, T\}$ com

$$\mathbb{P}(X = \lambda) = \frac{\binom{K}{\lambda} \binom{N-K}{T-\lambda}}{\binom{N}{T}}, \quad \lambda = 0, 1, \dots, T.$$

A expressão acima fornece a probabilidade de obtermos λ sucessos ao fazermos T retiradas, sem reposição, de um recipiente com N objetos, em que, do total de N , K objetos representam um sucesso e $N - K$ representam um fracasso.

A seguinte proposição fornece uma outra expressão para a distribuição hipergeométrica que nos será útil mais adiante.

Proposição 2.1. *Se $X \sim H(N, T, K)$, então*

$$\mathbb{P}(X = \lambda) = \frac{\binom{T}{\lambda} \binom{N-T}{K-\lambda}}{\binom{N}{K}} \text{ para todo } \lambda = 0, 1, \dots, T.$$

Demonstração. A igualdade segue de uma manipulação dos fatoriais:

$$\begin{aligned} \frac{\binom{K}{\lambda} \binom{N-K}{T-\lambda}}{\binom{N}{T}} &= \frac{K!}{\lambda!(K-\lambda)!} \cdot \frac{(N-K)!}{(T-\lambda)!(N-K-T+\lambda)!} \cdot \frac{T!(N-T)!}{N!} \\ &= \frac{T!}{\lambda!(T-\lambda)!} \cdot \frac{(N-T)!}{(K-\lambda)!(N-T-K+\lambda)!} \cdot \frac{K!(N-K)!}{N!} \\ &= \frac{\binom{T}{\lambda} \binom{N-T}{K-\lambda}}{\binom{N}{K}} \end{aligned}$$

□

2.4 Distância de variação total

Sejam Ω um conjunto enumerável. Denotamos por $\mathcal{P}(\Omega)$ o conjunto das partes de Ω . Considere $\mu, \nu : \mathcal{P}(\Omega) \rightarrow [0, 1]$ medidas de probabilidade. A *distância de variação total* $d_{VT}(\mu, \nu)$ entre μ e ν é dada por

$$d_{VT}(\mu, \nu) := \frac{1}{2} \sum_{\omega \in \Omega} |\mu(\omega) - \nu(\omega)|. \quad (2.4)$$

A seguinte proposição estabelece uma caracterização da distância de variação total que utilizaremos crucialmente no que segue.

Proposição 2.2. *Se μ e ν são medidas de probabilidade em Ω , então*

$$d_{VT}(\mu, \nu) = \sum_{\omega : \nu(\omega) \leq \mu(\omega)} \mu(\omega) - \nu(\omega). \quad (2.5)$$

Demonstração. Seja $E = \{\omega \in \Omega : \nu(\omega) \leq \mu(\omega)\}$. Como

$$0 = \sum_{\omega \in \Omega} \mu(\omega) - \nu(\omega) = \sum_{\omega \in E} \mu(\omega) - \nu(\omega) + \sum_{\omega \in E^c} \mu(\omega) - \nu(\omega),$$

temos

$$\sum_{\omega \in E} \mu(\omega) - \nu(\omega) = \sum_{\omega \in E^c} \nu(\omega) - \mu(\omega)$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} d_{VT}(\mu, \nu) &= \frac{1}{2} \sum_{\omega \in \Omega} \mu(\omega) - \nu(\omega) = \frac{1}{2} \left[\sum_{\omega \in E} \mu(\omega) - \nu(\omega) + \sum_{\omega \in E^c} \nu(\omega) - \mu(\omega) \right] \\ &= \sum_{\omega \in E} \mu(\omega) - \nu(\omega) \end{aligned}$$

como gostaríamos. \square

A vantagem da expressão fornecida pela Proposição 2.2 é a ausência do valor absoluto nos termos que estão sendo somados.

No contexto da Subseção 2.2, sejam \mathbb{Q}_N e \mathbb{P}_T as distribuições uniformes em $(S_N, \mathcal{P}(S_N))$ e $(\Omega_T, \mathcal{P}(\Omega_T))$ respectivamente. Cada simulação $X : S_N \rightarrow \Omega_T$ determina uma medida de probabilidade μ_X em $(\Omega_T, \mathcal{P}(\Omega_T))$ dada por

$$\mu_X(\omega) := \mathbb{Q}_N(X = \omega), \quad \omega \in \Omega_T. \quad (2.6)$$

Como observamos na Subseção 2.1, $(X_n)_{0 \leq n \leq T}$ assume cada vetor $\omega \in \Omega_T$ com distribuição uniforme em Ω_T , de maneira que, para avaliar quão bem a simulação tradicional simula o passeio, nos dedicaremos a estimar a distância de variação total entre μ_X e \mathbb{P}_T , que é dada por

$$d_T(N) := d_{VT}(\mu_X, \mathbb{P}_T) = \frac{1}{2} \sum_{\omega \in \Omega_T} |\mu_X(\omega) - 2^{-T}|, \quad (2.7)$$

em que X é a simulação tradicional definida em (2.2) com (2.3). Daqui em diante, a menos que haja menção explicitamente contrária, X denotará a *simulação tradicional*.

Cabe lembrar que, neste contexto, como o baralho está dividido em cartas pretas e vermelhas, temos $N = 2K$, um número par. Estaremos interessados no caso em que todas as trajetórias $\omega \in \Omega_T$ são obtidas com probabilidade positiva por meio de X . Para isso, devemos assumir que

$$T \leq K = N/2, \quad (2.8)$$

uma vez que, caso contrário, a trajetória de tamanho T que só dá passos à direita, por exemplo, teria probabilidade nula de ser alcançada utilizando X . Assim, de agora em diante, T , K e N sempre satisfazem (2.8).

3 O teorema principal

Usando a notação introduzida em (2.7), podemos enunciar o resultado principal deste trabalho. A sua demonstração segue de uma série de manipulações e estimativas da expressão obtida para $d_T(cT)$ que serão realizadas na Seção 4.

Teorema 3.1. *Para todo $c \geq 2$,*

$$d_T(cT) = \operatorname{erf}\left(\frac{\gamma_c}{\sqrt{2(c-1)/c}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\gamma_c}{\sqrt{2}}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{T}}\right), \quad (3.1)$$

em que erf acima é a função erro de Gauss definida por

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^x e^{-t^2} dt$$

e

$$\gamma_c = \sqrt{(c-1) \log\left(\frac{c}{c-1}\right)}. \quad (3.2)$$

O Teorema 3.1 exhibe o perfil da função $d_T(N)$ quando tomamos o tamanho N do baralho como um múltiplo fixado de T , o tamanho do passeio a ser simulado. A diferença dos dois valores da função erro de Gauss em (3.1) vem, naturalmente, da integração da diferença das densidades de duas distribuições normais, que estão relacionadas com a convergência de cada uma das distribuições em (4.5). Isto ficará claro na Seção 4, na qual demonstramos o Teorema 3.1. A seguir, discutimos algumas consequências deste resultado.

3.1 Consequências do Teorema

O resultado acima nos permite calcular a proporção de cartas que o baralho deve ter em relação à quantidade de cartas retiradas para que a distância de variação total seja menor ou igual a algum valor desejado.

Perceba que o Teorema (3.1) possui entrada $N = cT$. Mas não é garantido que c vai ser uma constante inteira, e, na verdade, isso não ocorre com grande frequência. Como a quantidade de cartas do baralho deve ser um número inteiro, tomamos $N = \lceil cT \rceil$

Podemos então calcular o tamanho do baralho e a quantidade de cartas que devemos retirar, para algum certo valor de distância de variação total, por exemplo. Mas também

podemos fazer o processo contrário: calcular a distância de variação total para um baralho com determinada quantidade de cartas.

Alguns valores notáveis para $d_T(cT)$ em função de c podem ser observados na Tabela 3 a seguir. Cabe ressaltar que há aqui um abuso de notação: a coluna da esquerda exibe o valor de $d_T(cT)$ a menos do termo de ordem $1/\sqrt{T}$ que surge em (3.1). A tabela exibe então uma interpretação mais fidedigna se considerarmos valores grandes de T .

| $d_T(cT)$ | c |
|-----------|--------|
| 0.160 | 2.00 |
| 0.100 | 2.94 |
| 0.050 | 5.35 |
| 0.010 | 24.70 |
| 0.005 | 48.89 |
| 0.001 | 242.47 |

Tabela 3: Relação de valores notáveis derivados a partir do Teorema 3.1.

A informação que essa tabela carrega é que, se impusermos que a distribuição tenha $d_{VT}(\mu_X, \mathbb{P}_T) \leq 0.05$, devemos tomar um baralho no qual $N = \lceil 5,35 \cdot T \rceil$, com T suficientemente grande. Os outros valores têm interpretação análoga e o comportamento completo da função pode ser melhor observado na Figura 2.

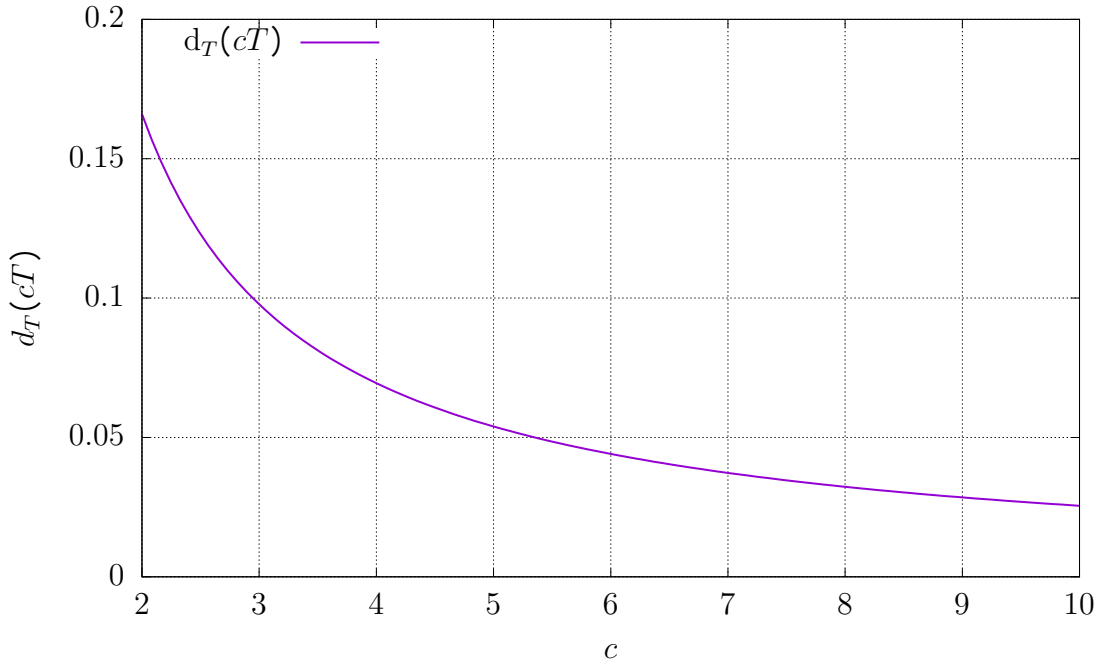


Figura 1: Plot da função $d_T(cT)$ definida pela Teorema 3.1.

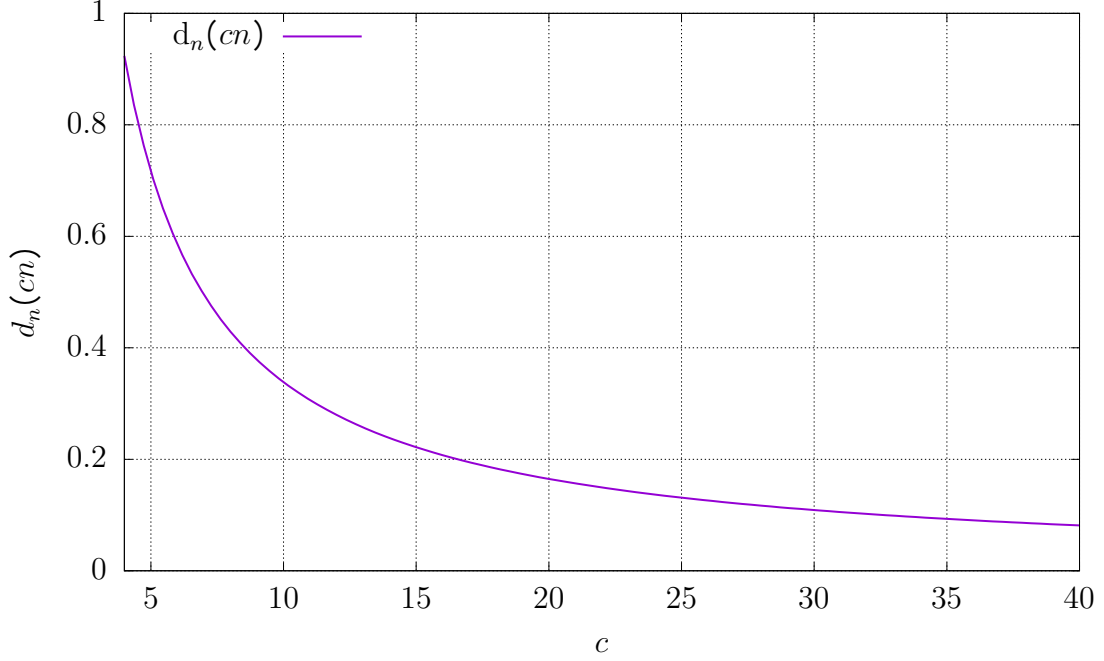


Figura 2: Plot da função $d_n(cn)$ definida pela Teorema 3.1.

4 Demonstração do teorema principal

Queremos desenvolver a expressão encontrada em (2.7). Para isso, convém primeiramente obter uma expressão explícita para $\mu_X(\omega)$. Este é o papel da seguinte proposição.

Proposição 4.1. *Para todo $\omega \in \Omega_T$,*

$$\mu_X(\omega) = \frac{\binom{N-T}{K-\lambda_\omega}}{\binom{N}{K}}, \quad (4.1)$$

em que λ_ω é a cardinalidade do conjunto $\{j \in \{1, \dots, T\} : \omega_j = 1\}$.

Observação 4.2. Em palavras, o valor λ_ω considerado acima é a quantidade de passos dados à direita na trajetória ω .

Demonstração. Temos por (2.6) que, dado $\omega \in \Omega_T$,

$$\mu_X(\omega) = \mathbb{Q}(X = \omega) = \frac{|\{X = \omega\}|}{N!}.$$

Então, para calcular $\mu_X(\omega)$, é suficiente determinar $|\{X = \omega\}|$. Como ω está fixo, a ordenação de passos para a direita e para a esquerda está fixa. Assim, $|\{X = \omega\}|$ é o produto entre o arranjo simples de λ_ω cartas ímpares (ou passos dados à direita) em um total de K passos, com o arranjo simples de $T - \lambda_\omega$ cartas pares (ou passos dados à esquerda) em um total de K passos, e com as permutações das $N - T$ cartas não usadas. Ou seja,

$$|\{X = \omega\}| = \frac{K!}{(K - \lambda_\omega)!} \frac{K!}{(K - T + \lambda_\omega)!} (N - T)!. \quad (4.2)$$

Assim,

$$\begin{aligned}\mu_X(\omega) &= \frac{\frac{K!}{(K-\lambda_\omega)!} \frac{K!}{(K-T+\lambda_\omega)!} (N-T)!}{N!} = \frac{K!K!}{N!} \frac{(N-T)!}{(K-\lambda_\omega)!(K-T+\lambda_\omega)!} \\ &= \frac{\binom{N-T}{K-\lambda_\omega}}{\binom{N}{K}},\end{aligned}\tag{4.3}$$

como queríamos. □

Note que, se $\omega, \omega' \in \Omega_T$ satisfazem $\lambda_\omega = \lambda_{\omega'}$, então, pela proposição 4.1, $\mu_X(\omega) = \mu_X(\omega')$. Assim, definindo

$$L_\lambda := \{\omega \in \Omega_T : \lambda_\omega = \lambda\},$$

a equação (2.7) se reescreve como

$$\begin{aligned}d_T(N) &= \frac{1}{2} \sum_{\omega \in \Omega_T} \left| \frac{\binom{N-T}{K-\lambda_\omega}}{\binom{N}{K}} - 2^{-T} \right| = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=0}^T \left| \frac{\binom{N-T}{K-\lambda}}{\binom{N}{K}} - 2^{-T} \right| |L_\lambda| \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\lambda=0}^T \left| \frac{\binom{N-T}{K-\lambda}}{\binom{N}{K}} - 2^{-T} \right| \binom{T}{\lambda} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\lambda=0}^T \left| \frac{\binom{T}{\lambda} \binom{N-T}{K-\lambda}}{\binom{N}{K}} - 2^{-T} \binom{T}{\lambda} \right|.\end{aligned}\tag{4.4}$$

Mostramos, então, que podemos reescrever $d_T(N)$ como a distância de variação total entre uma variável aleatória hipergeométrica $H(N, T, K)$ e uma variável aleatória binomial $B(T, 1/2)$. Ou seja, $d_T(N) = d_{\text{VT}}(\mu_H, \mu_B)$, em que

$$H \sim \mathcal{H}(N, T, K) \text{ e } B \sim \mathcal{B}(T, 1/2).\tag{4.5}$$

Escreveremos a equação (4.4) de forma mais sucinta como

$$d_T(N) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=0}^T 2^{-T} \binom{T}{\lambda} |f(\lambda, N, T) - 1|,\tag{4.6}$$

em que

$$f(\lambda, N, T) := 2^T \frac{\binom{N-T}{K-\lambda}}{\binom{N}{K}}.\tag{4.7}$$

Essa expressão exibe um passo importante. A princípio, gostaríamos de estimar a soma (2.7), que percorre todos os elementos de Ω_T , um conjunto de cardinalidade 2^T cujos elementos são vetores. Com (4.4), reduzimos esta tarefa ao problema de estimar uma soma que percorre o conjunto $\{0, 1, \dots, T\}$.

A prova do Teorema 3.1 seguirá os seguintes passos. Na Subseção 4.1, estudaremos a mudança de sinal da função $f(\cdot, N, T) - 1$. A localização dos pontos nos quais esta função muda de sinal nos permitirá aplicar a Proposição 2.2 e reescrever a expressão (4.6) de $d_T(N)$ removendo o valor absoluto. Isto facilitará as estimativas que faremos em seguida.

Na Subseção 4.2, introduziremos uma extensão contínua de f a triplas de números reais. Esta técnica é útil pois, em alguns argumentos, utilizaremos a extensão contínua para obter informações sobre a versão discreta de f . Em seguida, na Subseção 4.3, encontraremos os resultados que nos permitem estimar $f(\lambda, N, T)$ e $\binom{T}{\lambda}$. As estimativas obtidas na Subseção 4.3 dependem implicitamente da distância entre λ e $T/2$, o centro do intervalo $[0, T]$. Por esse motivo, é razoável tentar estimar esta distância quando λ varia os valores de interesse. Isto será feito na Subseção 4.4. A Subseção 4.5, por fim, reúne os resultados obtidos nas subseções anteriores para concluir a demonstração do Teorema 3.1.

4.1 Localizando os pontos nos quais $f(\cdot, N, T) - 1$ muda de sinal

Nesta subseção, localizaremos os pontos nos quais a função $f(\cdot, N, T) - 1$ muda de sinal. Nosso objetivo é aplicar a Proposição 2.2 e obter uma nova expressão para $d_T(N)$ na qual a diferença $f(\lambda, N, T) - 1$ ocorre, sem valor absoluto. Este é o papel dos seguintes lema e corolário.

Lema 4.3. *Seja $\lambda \in \{0, 1, \dots, T\}$.*

- (a) $f(\lambda, N, T) = f(T - \lambda, N, T)$
- (b) *Se $0 \leq \lambda < T/2$, $f(\lambda, N, T) \leq f(\lambda + 1, N, T)$.*
- (c) *Se $T/2 \leq \lambda < T$, então $f(\lambda, N, T) \geq f(\lambda + 1, N, T)$.*

Demonstração. Para verificar (a), basta substituir λ por $T - \lambda$ em (4.7) e utilizar que

$$\binom{N - T}{K - T + \lambda} = \binom{N - T}{N - T - (K - \lambda)} = \binom{N - T}{K - \lambda}.$$

Agora, notemos que

$$f(\lambda, N, T) = 2^T \cdot \frac{(N - T)!K!K!}{N!} \cdot \left\{ \frac{1}{(K - T + \lambda)!(K - \lambda)!} \right\}. \quad (4.8)$$

Para

$$g(\lambda) := \frac{1}{(K - T + \lambda)!(K - \lambda)!},$$

temos

$$\begin{aligned} g(\lambda) &= \frac{K - T + \lambda + 1}{K - \lambda} \cdot \frac{1}{(K - T + \lambda + 1)!(K - \lambda - 1)!} \\ &= \left(1 + \frac{2\lambda - T + 1}{K - \lambda} \right) \frac{1}{(K - T + \lambda + 1)!(K - \lambda - 1)!} \\ &= \left(1 + \frac{2\lambda - T + 1}{K - \lambda} \right) g(\lambda + 1). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Suponha que $0 \leq \lambda < T/2$. Nesse caso, temos $2\lambda - T + 1 \leq 0$ e, como $K - \lambda > 0$, a equação (4.9) nos diz que $g(\lambda) \leq g(\lambda + 1)$. Como (4.8) expressa $f(\lambda, N, T)$ como o produto de $g(\lambda)$ com um termo positivo que não depende de λ , isso mostra (b). A afirmação em (c) segue de (a) e de (b) observando que se $T/2 \leq \lambda < T$, então $0 < T - \lambda \leq T/2$ e, com isso,

$$f(\lambda, N, T) = f(T - \lambda, N, T) \geq f(T - \lambda - 1, N, T) = f(\lambda + 1, N, T).$$

Dessa forma, o resultado está demonstrado. □

Como gostaríamos, o Lema 4.3 nos permite localizar os pontos nos quais $f(\cdot, N, T) - 1$ muda de sinal, conforme estabelece o seguinte corolário.

Corolário 4.4. *Existe $\gamma_{N,T} > 0$ tal que*

(a) $f(\lambda, N, T) \geq 1$ se

$$\frac{T}{2} - \frac{\gamma_{N,T}\sqrt{T}}{2} \leq \lambda \leq \frac{T}{2} + \frac{\gamma_{N,T}\sqrt{T}}{2}. \quad (4.10)$$

(b) $f(\lambda, N, T) \leq 1$ se

$$0 \leq \lambda \leq \frac{T}{2} - \frac{\gamma_{N,T}\sqrt{T}}{2} \quad e \quad \frac{T}{2} + \frac{\gamma_{N,T}\sqrt{T}}{2} \leq \lambda \leq T. \quad (4.11)$$

Demonstração. Pelo Lema 4.3, existe $\alpha_{N,T} \in (0, T/2)$ tal que

$$f(\lambda, N, T) \leq 1 \quad \text{se} \quad 0 \leq \lambda \leq \alpha_{N,T}$$

e

$$f(\lambda, N, T) \geq 1 \quad \text{se} \quad \alpha_{N,T} \leq \lambda \leq T/2.$$

De fato, se não existisse tal $\alpha_{N,T}$, pela parte (b) do Lema 4.3, $f(\cdot, N, T) - 1$ não trocava de sinal em $\{0, 1, \dots, \lfloor T/2 \rfloor\}$. Mas neste caso, pela parte (a) deste mesmo lema, $f(\cdot, N, T) - 1$ também não trocava de sinal em $\{\lfloor T/2 \rfloor + 1, \dots, T - 1, T\}$ e, portanto, teríamos

$$d_T(N) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=0}^T 2^{-T} \binom{T}{\lambda} |f(\lambda, N, T) - 1| = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=0}^T 2^{-T} \binom{T}{\lambda} (f(\lambda, N, T) - 1) = 0,$$

o que não ocorre como observamos no fim da Subseção 2.4. Com isso, para concluir (a) e (b), basta tomarmos

$$\gamma_{N,T} := \frac{T - 2\alpha_{N,T}}{\sqrt{T}} \quad (4.12)$$

e utilizarmos novamente a simetria fornecida pela parte (a) do Lema 4.3. \square

Observação 4.5. No caso em que $N = cT$, $c \geq 2$, denotaremos

$$\gamma_T := \gamma_{cT,T}. \quad (4.13)$$

No que segue, utilizaremos as notações

$$\lambda_T^- := \frac{T}{2} - \frac{\gamma_T\sqrt{T}}{2} \quad e \quad \lambda_T^+ := \frac{T}{2} + \frac{\gamma_T\sqrt{T}}{2}. \quad (4.14)$$

Além disso, para $x \in \mathbb{R}$, denotaremos por $\lfloor x \rfloor$ o maior número inteiro menor que x . Ou seja,

$$\lfloor x \rfloor := \max\{n \in \mathbb{Z} : n \leq x\}.$$

Observação 4.6. Convém notar que que $\lfloor x \rfloor = x - c_x$ para algum $c_x \in [0, 1)$.

Apesar de não fornecer uma expressão explícita para γ_T , o Corolário 4.4, quando combinado com a Proposição 2.2, nos permite escrever

$$d_T(cT) = \sum_{\lambda \in \Delta_T} 2^{-T} \binom{T}{\lambda} [f(\lambda, cT, T) - 1], \quad (4.15)$$

em que

$$\Delta_T := \{\lfloor \lambda_T^- \rfloor + 1, \lfloor \lambda_T^+ \rfloor + 2, \dots, \lfloor \lambda_T^+ \rfloor\}. \quad (4.16)$$

Esta nova expressão, por não exibir mais o valor absoluto que ocorria em (4.6), facilitará a tarefa de estimar $d_T(cT)$.

4.2 Uma extensão contínua de $f(\lambda, N, T)$

Com a equação (4.15) em mãos, caminharemos na direção de obter estimativas para $f(\lambda, cT, T)$. Para isso, será extremamente útil dar um sentido à expressão $f(\lambda, N, T)$ no caso em que λ, N, T são números reais não negativos satisfazendo, como antes, $N = 2K$, $T \leq K$ e $\lambda \in [0, T]$. Em outras palavras, queremos obter uma extensão de f a triplas de números reais. Isto é feito utilizando a conhecida função gama. Esta extensão será também denotada por f .

Seja $x \in \mathbb{R}_+ := \{y \in \mathbb{R} : y > 0\}$. A função gama é definida por

$$\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt.$$

É um fato conhecido que esta função interpola os pontos $(n, m) \in \mathbb{Z}^2$ tais que $m = (n-1)!$. Ou seja, se $x \in \mathbb{R}_+$ é um número natural, então

$$\Gamma(x) = (x-1)!.$$

Assim, reescrevemos $f(\lambda, N, T)$ como

$$f(\lambda, N, T) = 2^T \frac{\binom{N-T}{K-\lambda}}{\binom{N}{K}} = \frac{2^T \Gamma(N-T) \Gamma(k) \Gamma(k)}{\Gamma(K-\lambda) \Gamma(k-T+\lambda) \Gamma(N)}. \quad (4.17)$$

Proposição 4.7. *A função $\Gamma : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua.*

Demonstração. Seja $x \in \mathbb{R}_+$. Vejamos que Γ é contínua em x . Existem $a, b \in \mathbb{R}_+$ tais que $x \in (a, b)$. Considere $h \in \mathbb{R}$ tal que $x+h \in (a, b)$. Temos

$$|\Gamma(x+h) - \Gamma(x)| = \left| \int_0^\infty t^{x+h-1} e^{-t} - t^{x-1} e^{-t} dt \right| \leq \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} |t^h - 1| dt \quad (4.18)$$

Vamos mostrar que o termo à direita em (4.18) vai a 0 quando h vai a 0. Pelo Teorema do Valor Médio, para cada $t \geq 0$, existe ξ_t entre 0 e h tal que

$$|t^h - 1| = |h| t^{\xi_t} \log t.$$

Como $x+h \in (a, b)$, temos $\xi_t \leq |h| \leq b-a$ e, portanto, $t^{\xi_t} \leq t^{b-a}$. Dessa forma,

$$\int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} |t^h - 1| dt = |h| \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} t^{\xi_t} \log t dt \leq |h| \int_0^\infty t^{x-1+b-a} e^{-t} \log t dt. \quad (4.19)$$

Uma vez que a integral à direita em (4.19) converge, concluímos que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} |t^h - 1| dt = 0$$

como queríamos. □

A Proposição 4.7, em conjunto com a equação (4.17), nos permite concluir que, fixados números reais $N = 2K$ e T com $T \leq K$, a função $f(\cdot, N, T)$ é contínua no intervalo $[0, T]$. Este fato tem a seguinte consequência.

Corolário 4.8. *Seja $c \geq 2$. Com a notação introduzida em (4.13),*

$$f\left(\frac{T}{2} \pm \frac{\gamma_T \sqrt{T}}{2}, cT, T\right) = 1.$$

Demonstração. Segue do Corolário 4.4 aliado à continuidade de $f(\cdot, N, T)$, que, por sua vez, segue da Proposição 4.7. \square

Daqui em diante, f aplicada a uma tripla de números reais positivos não necessariamente inteiros deve sempre ser interpretada no contexto desta seção. O que fizemos nos permite também considerar coeficientes binomiais $\binom{n}{k}$ com $n, k \in \mathbb{R}_+$ satisfazendo $k \leq n$. Isto será útil, uma vez que também gostaríamos de estimar o coeficiente binomial que surge em (4.15).

Na demonstração do Lema 4.12, vamos utilizar que, assim como em sua versão discreta, a função $f(\cdot, N, T)$ é crescente em $[0, T/2]$ e decrescente em $[T/2, T]$. Com o intuito de evitar um foco demasiado às technicalidades envolvendo a função gama, omitiremos a demonstração deste fato.

4.3 Estimativas para $\binom{T}{\lambda}$ e $f(\lambda, cT, T)$

Nesta subseção, vamos obter estimativas para os termos $f(\lambda, cT, T)$ e $\binom{T}{\lambda}$ que surgem em (4.15). Essas estimativas dependerão de λ , e essa dependência se apresenta em termos da distância entre λ e o centro do intervalo $[0, T]$. Na Subseção 4.4, o que faremos é estimar esta distância quando λ percorre o conjunto Δ_T introduzido em (4.16). Esta estimativa, em conjunto com os resultados desta subseção, abrirá caminho para deduzirmos o Teorema 3.1.

Primeiramente, vamos obter uma estimativa para $\binom{n}{k}$ no caso em que k está exatamente no centro do intervalo $[0, n]$, i.e., $k = n/2$. Para isso, utilizaremos a clássica aproximação de Stirling:

$$n! = \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n} (1 + \mathcal{O}(1/n)). \quad (4.20)$$

Lema 4.9. *Para todo $n \in \mathbb{N}$,*

$$\binom{n}{n/2} = 2^n \sqrt{\frac{2}{\pi n}} (1 + \mathcal{O}(1/n))$$

Demonstração. Por (4.20),

$$\binom{n}{n/2} = \frac{n!}{(n/2)!(n/2)!} = \frac{\sqrt{2\pi n} n^n e^{-n} (1 + \mathcal{O}(1/n))}{\pi n (n/2)^n e^{-n} (1 + \mathcal{O}(1/n))} = 2^n \sqrt{\frac{2}{\pi n}} (1 + \mathcal{O}(1/n)).$$

\square

Agora, fornecemos uma estimativa para $\binom{n}{k}$ com $k = (n + l(n))/2$. Esta estimativa será dada em termos de $\binom{n}{n/2}$ cuja estimativa foi obtida acima. Observe que $l(n)$, a menos de um fator constante de dilatação, nos dá a distância entre k e $n/2$.

Lema 4.10. *Seja $n \in \mathbb{N}$. Se $k = (n + l)/2$, $l = l(n)$, então*

$$\binom{n}{k} = \binom{n}{n/2} \exp\left(-\frac{l^2}{2n} + \mathcal{O}(l^3/n^2)\right). \quad (4.21)$$

Demonstração. Primeiramente, observamos que

$$\begin{aligned} \frac{\binom{n}{k}}{\binom{n}{n/2}} &= \frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot \frac{(n/2)!(n/2)!}{n!} \\ &= \frac{(n/2)!(n/2)!}{k!(n-k)!} \\ &= \frac{(n/2) \cdot (n/2 - 1) \cdots (n/2 - l/2 + 1)}{(n/2 + l/2) \cdot (n/2 + l/2 - 1) \cdots (n/2 + 1)} = \prod_{j=1}^{l/2} \frac{n/2 - j + 1}{n/2 + j}. \end{aligned}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \log \left[\frac{\binom{n}{k}}{\binom{n}{n/2}} \right] &= \sum_{j=1}^{l/2} \log \left(\frac{n/2 - j + 1}{n/2 + j} \right) = \sum_{j=1}^{l/2} \left[\log \left(1 + \frac{2-2j}{n} \right) - \log \left(1 + \frac{2j}{n} \right) \right] \\ &= \sum_{j=1}^{l/2} \left[\frac{2-2j}{n} - \frac{2j}{n} + \mathcal{O}(j^2/n^2) \right] \\ &= \sum_{j=1}^{l/2} \left[\frac{2-4j}{n} \right] + \mathcal{O}(l^3/n^2) \\ &= \frac{l}{n} - \frac{4}{n} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} + 1 \right) + \mathcal{O}(l^3/n^2) \\ &= -\frac{l^2}{2n} + \mathcal{O}(l^3/n^2). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Exponenciando ambos os lados de (4.22), obtemos (4.21) como gostaríamos. \square

Combinando os Lemas 4.9 e 4.10, obtemos o resultado que nos permitirá estimar $\binom{T}{\lambda}$ e $f(\lambda, cT, T)$ com $\lambda \in \Delta_T$.

Corolário 4.11. (a) Para $n \in \mathbb{N}$ e $l = l(n)$,

$$\binom{n}{\frac{n+l}{2}} = 2^n \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \exp\left(-\frac{l^2}{2n} + \mathcal{O}(l^3/n^2)\right) (1 + \mathcal{O}(1/n))$$

(b) Para $\beta = \beta(T) > 0$,

$$f\left(\frac{T}{2} \pm \frac{\beta\sqrt{T}}{2}, cT, T\right) = \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{2(c-1)} + \mathcal{O}(\beta^3/\sqrt{T})\right) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \quad (4.23)$$

Demonstração. A afirmação em (a) segue de uma aplicação direta do Lema 4.9 em (4.21). Agora, para $\beta = \beta(T) > 0$, temos

$$\begin{aligned} f\left(\frac{T}{2} \pm \frac{\beta\sqrt{T}}{2}, cT, T\right) &= 2^T \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2} \pm \frac{\beta\sqrt{T}}{2}}\right) \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2}}\right)^{-1} \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2}}\right) \left(\frac{cT}{\frac{cT}{2}}\right)^{-1} \\ &= 2^T \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2} \pm \frac{\beta\sqrt{T(c-1)}}{2\sqrt{c-1}}}\right) \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2}}\right)^{-1} \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2}}\right) \left(\frac{cT}{\frac{cT}{2}}\right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Pelo Lema 4.10,

$$\left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2} \pm \frac{\beta\sqrt{T}}{2}}\right) \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2}}\right)^{-1} = \exp\left(-\frac{\beta^2}{2(c-1)} + \mathcal{O}(\beta^3/\sqrt{T})\right). \quad (4.25)$$

Por outro lado, pelo Lema 4.9,

$$\begin{aligned} 2^T \left(\frac{T(c-1)}{\frac{T(c-1)}{2}}\right) \left(\frac{cT}{\frac{cT}{2}}\right)^{-1} &= 2^T \cdot \frac{2^{T(c-1)}}{2^{cT}} \cdot \frac{\sqrt{2/\pi T(c-1)}(1 + \mathcal{O}(1/T))}{\sqrt{2/\pi cT}(1 + \mathcal{O}(1/T))} \\ &= \sqrt{\frac{c}{c-1}}(1 + \mathcal{O}(1/T)). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Finalmente, as equações (4.24), (4.25) e (4.26) juntas fornecem (4.23). \square

4.4 A sequência $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$

Na expressão (4.15) que obtivemos para $d_T(cT)$, o parâmetro λ percorre o conjunto

$$\Delta_T = \{\lfloor \lambda_T^- \rfloor + 1, \lfloor \lambda_T^- \rfloor + 2, \dots, \lfloor \lambda_T^+ \rfloor\}.$$

Esta subseção tem como objetivo entender quão distante λ fica de $T/2$ quando varia em Δ_T . A importância dessa investigação reside no fato de que as estimativas que obtivemos no Corolário 4.4 dependem implicitamente dessa distância. Como

$$\lambda_T^- = \frac{T}{2} - \frac{\gamma_T \sqrt{T}}{2} \quad \text{e} \quad \lambda_T^+ = \frac{T}{2} + \frac{\gamma_T \sqrt{T}}{2},$$

a distância $|\lambda - T/2|$ fica superiormente limitada por $\gamma_T \sqrt{T}/2$ para todo $\lambda \in \Delta_T$. Essa afirmação fica bem ilustrada pela Figura 3 uma vez que $\Delta_T \subseteq [\lambda_T^-, \lambda_T^+]$. Dessa forma, se

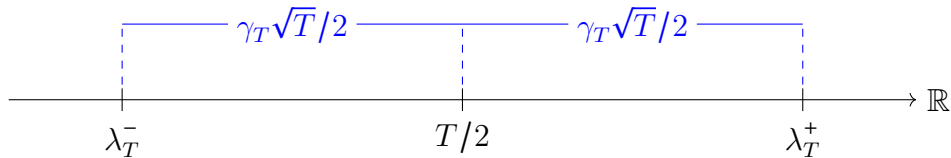


Figura 3: Posicionamento de $T/2$, λ_T^- e λ_T^+ na reta real.

torna natural buscar compreender o comportamento da sequência $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ com o objetivo de estimar $|\lambda - T/2|$ para $\lambda \in \Delta_T$. O seguinte lema mostra que $\gamma_T = \mathcal{O}(1)$.

Lema 4.12. *A sequência $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ é limitada.*

Demonstração. Suponha que $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ não seja limitada. Notemos que, nesse caso, como $\gamma_T > 0$ para todo $T \in \mathbb{N}$, existe ao menos uma subsequência de $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ que vai a infinito.

Afirmamos então que existem uma sequência $(\beta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de números reais positivos e uma subsequência $(\gamma_{T_n})_{n \in \mathbb{N}}$ de $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ tais que

$$\beta_n = o(T_n^{1/8}), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \beta_n = \infty$$

e $\beta_n \leq \gamma_{T_n}$ para todo $n \in \mathbb{N}$. De fato, se $\gamma_T = o(T^{1/8})$, então tomamos $(\beta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ e $(\gamma_{T_n})_{n \in \mathbb{N}}$ ambas iguais a uma subsequência de $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ que vai a infinito. Se não, existe $\varepsilon_0 > 0$ tal que, para todo $T_0 \in \mathbb{N}$, existe $T \geq T_0$ satisfazendo

$$\varepsilon_0 T^{1/8} < \gamma_T,$$

o que nos permite obter as sequências $(\beta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ e $(\gamma_{T_n})_{n \in \mathbb{N}}$. Como observamos no fim da Subseção 4.2, a função $f(\cdot, cT, T)$ é decrescente em $[T/2, T]$. Logo, para todo $n \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned} 1 &= f\left(\frac{T_n}{2} + \frac{\gamma_{T_n} \sqrt{T_n}}{2}, cT_n, T_n\right) \\ &\leq f\left(\frac{T_n}{2} + \frac{\beta_n \sqrt{T_n}}{2}, cT_n, T_n\right) \\ &\stackrel{*}{=} \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{\beta_n^2}{2(c-1)} + \mathcal{O}(\beta_n^2/\sqrt{T_n})\right) (1 + \mathcal{O}(1/T_n)) \\ &\stackrel{**}{=} \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{\beta_n^2}{2(c-1)} + \mathcal{O}(1/T_n^{1/4})\right) (1 + \mathcal{O}(1/T_n)). \end{aligned} \tag{4.27}$$

Mas isso é um absurdo, uma vez que o lado direito em (4.27) vai a 0 conforme n vai a infinito. Na primeira igualdade acima utilizamos o Corolário 4.4. Na igualdade \star acima utilizamos o Corolário 4.11. Além disso, na igualdade $\star\star$ utilizamos que, como $\beta_n = o(T_n^{1/8})$, temos $\beta_n = \mathcal{O}(T_n^{1/8})$ e, portanto, $\mathcal{O}(\beta_n^2/\sqrt{T_n}) = \mathcal{O}(1/T_n^{1/4})$. \square

Sabendo que a sequência $(\gamma_T)_{T \in \mathbb{N}}$ é limitada, conseguimos ir um pouco mais longe e obter o seu limite. Cabe aqui lembrar que, como vimos em (4.4), γ_T depende não só de T mas também de $N = cT$ e, portanto, da constante c que multiplica T .

Teorema 4.13. *Seja $c \geq 2$ fixado. Temos*

$$\gamma_T = \gamma_c + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}),$$

em que

$$\gamma_c := \sqrt{(c-1) \log\left(\frac{c}{c-1}\right)}.$$

Observação 4.14. Esta é a constante γ_c que surge no Teorema 3.1.

Demonstração. Pelo Lema 4.12, $\gamma_T = \mathcal{O}(1)$ e, portanto, $\mathcal{O}(\gamma_T^2/\sqrt{T}) = \mathcal{O}(1/\sqrt{T})$. Assim, utilizando o Corolário 4.11, temos

$$\begin{aligned}
1 &= f\left(\frac{T_n}{2} + \frac{\gamma_T\sqrt{T}}{2}, cT, T\right) \\
&= \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{\gamma_T^2}{2(c-1)}\right) \exp\left(\mathcal{O}(1/\sqrt{T})\right) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\
&= \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{\gamma_T^2}{2(c-1)}\right) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\
&= \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{\gamma_T^2}{2(c-1)}\right) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}))
\end{aligned}$$

Daí,

$$\exp\left(-\frac{\gamma_T^2}{2(c-1)}\right) = \sqrt{\frac{c-1}{c}} \cdot \frac{1}{1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})} = \sqrt{\frac{c-1}{c}} (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}))$$

e, portanto,

$$-\frac{\gamma_T^2}{2(c-1)} = \log \sqrt{\frac{c-1}{c}} + \log(1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})) = \log \sqrt{\frac{c-1}{c}} + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}).$$

Então, isolando γ_T , obtemos

$$\gamma_T = \sqrt{(c-1) \log\left(\frac{c}{c-1}\right)} + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) = \gamma_c + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})$$

como queríamos. □

A importância do Teorema 4.13 se apresentará diretamente na demonstração do Teorema 3.1. Já o Lema 4.12 nos fornece, finalmente, as estimativas para $\binom{T}{\lambda}$ e $f(\lambda, cT, T)$ que precisamos.

Corolário 4.15. *Dado $\lambda \in \Delta_T$, seja*

$$\theta(\lambda) := \frac{\lambda - T/2}{\sqrt{T}}. \tag{4.28}$$

Temos

(a)

$$\binom{T}{\lambda} = 2^T \sqrt{\frac{2}{\pi T}} \exp\left(-2\theta(\lambda)^2\right) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}))$$

(b)

$$f(\lambda, cT, T) = \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2\theta(\lambda)^2}{c-1}\right) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})),$$

Demonstração. Se $\lambda \in \Delta_T$, então

$$\lambda_T^- = \frac{T}{2} - \frac{\gamma_T \sqrt{T}}{2} \leq \lambda \leq \frac{T}{2} + \frac{\gamma_T \sqrt{T}}{2} = \lambda_T^+$$

e, com isso, $2|\theta(\lambda)| \leq \gamma_T$. Pelo Lema 4.12, temos $\mathcal{O}(\gamma_T) = 1$ e, portanto, $\mathcal{O}(\theta(\lambda)^3/\sqrt{T}) = \mathcal{O}(1/\sqrt{T})$. Então, pelo Corolário 4.11,

$$\begin{aligned} \binom{T}{\lambda} &= \binom{T}{\frac{T}{2} + \frac{2\theta(\lambda)\sqrt{T}}{2}} \\ &= 2^T \sqrt{\frac{1}{\pi T}} \exp\left(-\frac{4\theta(\lambda)^2 T}{2T} + \mathcal{O}\left(\frac{\theta(\lambda)^3 T^{3/2}}{T^2}\right)\right) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\ &= 2^T \sqrt{\frac{1}{\pi T}} \exp(-2\theta(\lambda)^2) \exp\left(\mathcal{O}\left(\frac{\theta(\lambda)^3}{\sqrt{T}}\right)\right) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\ &= 2^T \sqrt{\frac{1}{\pi T}} \exp(-2\theta(\lambda)^2) \exp(\mathcal{O}(1/\sqrt{T})) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\ &= 2^T \sqrt{\frac{1}{\pi T}} \exp(-2\theta(\lambda)^2) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\ &= 2^T \sqrt{\frac{1}{\pi T}} \exp(-2\theta(\lambda)^2) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} f(\lambda, cT, T) &= f\left(\frac{T}{2} + \frac{2\theta(\lambda)\sqrt{T}}{2}, cT, T\right) \\ &= \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{4\theta(\lambda)^2}{2(c-1)} + \mathcal{O}\left(\frac{\theta(\lambda)^3}{\sqrt{T}}\right)\right) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\ &= \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2\theta(\lambda)^2}{c-1}\right) \exp(\mathcal{O}(1/\sqrt{T})) (1 + \mathcal{O}(1/T)) \\ &= \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2\theta(\lambda)^2}{c-1}\right) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})) \end{aligned}$$

como queríamos. □

4.5 Concluindo a demonstração

Já temos o suficiente para finalmente demonstrar o Teorema 3.1.

Demonstração do Teorema 3.1. No que segue, $\theta(\lambda)$ denota a função de λ introduzida em (4.28). Além disso, utilizaremos a Observação 4.6 para escrever

$$[\lambda_T^-] = \lambda_T^- - c_{1,T} \quad \text{e} \quad [\lambda_T^+] = \lambda_T^+ - c_{2,T} \tag{4.29}$$

com $c_{1,T}, c_{2,T} \in [0, 1)$. Seja $c \geq 2$. Utilizando o Corolário 4.15, temos

$$\begin{aligned}
d_T(cT) &= \sum_{\lambda \in \Delta_T} 2^T \binom{T}{\lambda} [f(\lambda, cT, T) - 1] \\
&= \sum_{\lambda \in \Delta_T} 2^{-T} \binom{T}{\lambda} \left[\sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2\theta(\lambda)^2}{c-1}\right) (1 + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})) - 1 \right] \\
&= \sum_{\lambda \in \Delta_T} \left\{ 2^{-T} \binom{T}{\lambda} \left[\sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2\theta(\lambda)^2}{c-1}\right) - 1 \right] \right\} + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) \\
&= \sum_{\lambda \in \Delta_T} \sqrt{\frac{2}{\pi T}} \left\{ \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2\theta(\lambda)^2}{c-1} - 2\theta(\lambda)^2\right) - \exp(-2\theta(\lambda)^2) \right\} + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) \\
&= \sum_{\lambda \in \Delta_T} \frac{1}{\sqrt{T}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2c\theta(\lambda)^2}{c-1}\right) - \exp(-2\theta(\lambda)^2) \right\} + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}).
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Mais precisamente, o Corolário 4.15 foi utilizado na segunda e quarta igualdade em (4.30). Na terceira igualdade, utilizamos o fato de que

$$\sum_{\lambda \in \Delta_T} 2^{-T} \binom{T}{\lambda} \leq \sum_{\lambda=0}^T 2^{-T} \binom{T}{\lambda} = 1$$

e, portanto,

$$\sum_{\lambda \in \Delta_T} 2^{-T} \binom{T}{\lambda} \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) = \mathcal{O}(1/\sqrt{T}).$$

Agora, observamos que a expressão à direita em (4.30) é uma soma de Riemann da função

$$h(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2cx^2}{c-1}\right) - \exp(-2x^2) \right\}$$

sobre o intervalo

$$\left[\frac{\lfloor \lambda_T^- \rfloor + 1 - T/2}{\sqrt{T}}, \frac{\lfloor \lambda_T^+ \rfloor + 1 - T/2}{\sqrt{T}} \right]$$

particionado em subintervalos de dimensão $1/\sqrt{T}$. A ordem da aproximação desta integral pela soma de Riemann em questão é da ordem da dimensão dos intervalos da partição, ou seja, $1/\sqrt{T}$. Isto nos permite então escrever

$$\begin{aligned}
d_T(cT) &= \int_{\frac{\lfloor \lambda_T^- \rfloor + 1 - T/2}{\sqrt{T}}}^{\frac{\lfloor \lambda_T^+ \rfloor + 1 - T/2}{\sqrt{T}}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2cx^2}{c-1}\right) - \exp(-2x^2) \right\} dx + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) \\
&= \int_{-\frac{\gamma_T}{2} + \frac{1-c_{1,T}}{\sqrt{T}}}^{-\frac{\gamma_T}{2} + \frac{1-c_{2,T}}{\sqrt{T}}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2cx^2}{c-1}\right) - \exp(-2x^2) \right\} dx + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}).
\end{aligned} \tag{4.31}$$

Como o integrando acima é uniformemente limitado em c e x , temos

$$\int_{-\frac{\gamma_T}{2}}^{-\frac{\gamma_T}{2} + \frac{1-c_{1,T}}{\sqrt{T}}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2cx^2}{c-1}\right) - \exp(-2x^2) \right\} dx = \mathcal{O}(1/\sqrt{T})$$

e

$$\int_{\frac{\gamma_T}{2}}^{\frac{\gamma_T}{2} + \frac{1-c_1 T}{\sqrt{T}}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2cx^2}{c-1}\right) - \exp(-2x^2) \right\} dx = \mathcal{O}(1/\sqrt{T}).$$

Assim, segue de (4.31) que

$$d_T(cT) = \int_{-\frac{\gamma_T}{2}}^{\frac{\gamma_T}{2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2cx^2}{c-1}\right) dx - \int_{-\frac{\gamma_T}{2}}^{\frac{\gamma_T}{2}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-2x^2) dx + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})$$

Mas, pelo Teorema 4.13, $\gamma_T = \gamma_c + \mathcal{O}(1/\sqrt{T})$. Então, usando novamente que o integrando é uniformemente limitado, obtemos

$$\begin{aligned} d_T(cT) &= \int_{-\frac{\gamma_c}{2}}^{\frac{\gamma_c}{2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2c}{c-1}} \exp\left(-\frac{2cx^2}{c-1}\right) dx - \int_{-\frac{\gamma_T}{2}}^{\frac{\gamma_T}{2}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-2x^2) dx + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) \\ &= \int_{-\frac{\gamma_c}{2}}^{\frac{\gamma_c}{2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2c}{c-1}} \exp\left[-\left(\sqrt{\frac{2c}{c-1}}x\right)^2\right] dx \\ &\quad - \int_{-\frac{\gamma_c}{2}}^{\frac{\gamma_c}{2}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-(\sqrt{2}x)^2\right] dx + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Fazendo, em (4.32), as mudanças de variáveis $t = \sqrt{2c/(c-1)}x$ na primeira integral e $t = \sqrt{2}x$ na segunda integral, obtemos finalmente

$$\begin{aligned} d_T(cT) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{\gamma_c}{\sqrt{2(c-1)/c}}}^{\frac{\gamma_c}{\sqrt{2(c-1)/c}}} \exp(-t^2) dt - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{\gamma_c}{\sqrt{2}}}^{\frac{\gamma_c}{\sqrt{2}}} \exp(-t^2) dt + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}) \\ &= \operatorname{erf}\left(\frac{\gamma_c}{\sqrt{2(c-1)/c}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\gamma_c}{\sqrt{2}}\right) + \mathcal{O}(1/\sqrt{T}). \end{aligned}$$

□

5 Outras simulações

Até aqui, discutimos a simulação tradicional. Mas devemos lembrar que a escolha da simulação foi arbitrária e que poderíamos tomar outra função $X : S_N \rightarrow \Omega_T$. Explore-mos um pouco essas opções para dar luz a possíveis caminhos para o trabalho e pontuar algumas perguntas que não foram respondidas.

5.1 Uma extensão dos grupos

Foi dito no início deste texto que a divisão das cartas em dois grupos foi apenas uma arbitrariedade escolhida por ser uma categorização simples de ser feita. As cartas também aceitam outras divisões, como pelos naipes, por exemplo, e explicitado na Tabela 4.

Uma observação interessante é que temos agora quatro associações distintas. Podemos, sem muita dificuldade, imaginar uma outra simulação em que estendemos o passeio aleatório para \mathbb{Z}^2 .





| Naipes | Movimento atribuído |
|---|--------------------------|
|  | $\rightarrow\rightarrow$ |
|  | $\rightarrow\leftarrow$ |
|  | $\leftarrow\rightarrow$ |
|  | $\leftarrow\leftarrow$ |

Tabela 4: Uma simulação utilizando os naipes.





| Naipes | Movimento atribuído |
|---|---------------------|
|  | \rightarrow |
|  | \leftarrow |
|  | \uparrow |
|  | \downarrow |

Tabela 5: Uma simulação em \mathbb{Z}^2 utilizando os naipes.

Apesar dos procedimentos parecerem similares por análise holística do problema, lidaremos com normais multivariadas, o que nos trás novas dificuldades. Menos explorada ainda é a situação na qual se divide o baralho em 8 grupos, naturalmente nos levando a cogitar o passeio em \mathbb{Z}^3 .

Apesar de muito pouco se saber sobre a simulação neste cenário, algum interesse se desperta pela diferença que se obtém com passeios aleatórios em três dimensões. Sabemos, pelo Teorema de Pólya para passeios aleatórios, que em uma e duas dimensões os passeios são *recorrentes* e retornam à origem infinitas vezes com probabilidade 1. Porém, em dimensão $d \geq 3$, a probabilidade de que isso ocorra é nula. Ou seja, o passeio é *transiente*. É esperado que esse fato se reflita nos cálculos de alguma maneira.

Por outro ponto de vista, além das possíveis dimensões, podemos retornar às divisões arbitrárias do baralho e dissecá-lo ao máximo. Suponha que dividimos as N cartas na maior quantidade de grupos naturais, N . Dessa forma, à cada carta se associa uma sequência de símbolos única, de comprimento dependente da quantidade de cartas. Para $N = 2^k$ cartas, teremos k passos por cartas. Podemos pensar nas direções como representadas pelos símbolos 1 e 0 e contar em binário como indicado na Tabela 6.







| Carta | Movimento atribuído |
|---|---------------------|
|  | $\dots 0000000001$ |
|  | $\dots 0000000010$ |
|  | $\dots 0000000011$ |
|  | $\dots 0000000100$ |
|  | $\dots 0000000101$ |
|  | $\dots 0000000110$ |
| \vdots | \vdots |

Tabela 6: Tabela da separação máxima natural de grupos para as cartas

Cada carta retirada aqui indica um conjunto de k passos dados na simulação. Contudo, se quiséssemos considerar essa simulação e calcular a distância de variação total de sua distribuição μ_X , deveríamos considerar uma expressão distinta. Como não é interessante aplicar a restrição $T < K$ neste caso (já que $K = 1$), devemos ir além. Para isso, consideraremos o espaço das sequências do passeio aleatório de T passos Ω_T e o espaço de

sequências possíveis de simular com as cartas acima, $\tilde{\Omega}_T$ (sem repetição de sequências). A distância será dada por

$$d_{VT}(\mu_X, \mathbb{P}_T) = \frac{1}{2} \sum_{\omega \in \tilde{\Omega}_T} |\mu_X(\omega) - 2^{-T}| + \sum_{\omega \in (\Omega_T \cap \tilde{\Omega}_T)^c} 2^{-T}. \quad (5.1)$$

A contagem a ser feita é, por vezes, não trivial. Mas caso feita, possibilitaria a extensão do resultado da distância, mesmo para o caso tradicional, com $1 < c < 2$.

5.2 Uma simulação - quase - perfeita

Podemos construir uma simulação em que, a cada momento, a probabilidade de se dar um passo para a esquerda é igual à probabilidade de se dar um passo para a direita. Para isso, antes devemos estabelecer uma sequência das cartas e demarcar seu ponto médio, como exemplificada abaixo com um baralho reduzido:

5♥ 4♥ 3♥ 2♥ A♥ ↓ A♠ 2♠ 3♠ 4♠ 5♠

Figura 4: Exemplo de ordenação para um baralho reduzido.

Para cada carta virada, verificamos sua posição na ordenação, simulamos o movimento associado a esta carta, e então removemos a carta da ordenação. Para cada virada de carta, existem 3 possibilidades:

1. A carta virada está à esquerda da seta: nesse caso, o passo simulado por esta carta será para a esquerda.
2. A carta virada está à direita da seta: nesse caso, o passo simulado por esta carta será para a direita.
3. A carta está abaixo da seta: nesse caso, a carta é descartada e não simula passo algum.

Por exemplo, suponhamos que as primeiras 4 cartas viradas foram:

3♥ A♠ 4♠ 5♠

Nesse caso temos que a primeira carta está à esquerda da seta, logo o primeiro passo foi para a esquerda e a ordenação agora é:

5♥ 4♥ 2♥ A♥ ↓ A♠ 2♠ 3♠ 4♠ 5♠

Agora, como a próxima carta virada foi o A♠, que está abaixo da seta, nenhum passo é feito na simulação. Repetindo o processo, vemos que as cartas seguintes não são descartadas, e obtemos que a configuração da ordenação após as quatro cartas serem viradas é:

5♥ 4♥ 2♥ A♥ ↓ A♠ 2♠ 3♠

Temos então que a trajetória simulada neste exemplo é, até o momento: $\omega = (-1, 1, 1)$. Ainda, note que agora uma carta que antes estava à esquerda da seta agora está à direita, assim a direção que ela indica na trajetória mudou.

Podemos observar que:

- A ordenação feita antes de virar as cartas é determinística.
- A quantidade de cartas à esquerda e à direita da seta é sempre igual. Logo, a todo momento da simulação, a probabilidade do próximo passo ser para a esquerda é igual à probabilidade deste ser para a direita.
- Sempre que o número de cartas ainda no baralho é par, é impossível a próxima carta ser descartada.
- Este procedimento é menos prático do que simulações antes apresentadas como a *simulação tradicional*. De fato, precisamos manter em mente todas as cartas que mudaram de posição em relação a seta.
- O comprimento da trajetória simulada é uma variável aleatória. De fato, nesta simulação, é possível que cartas não indiquem um passo, e tal ocorrência depende da permutação do baralho, que é aleatória. Porém, a quantidade de cartas descartadas é pequena em média e, mais ainda, a variância desta mesma quantidade é similarmente pequena.

Proposição 5.1. *A distância simulada T , por um baralho Λ_N , é dada por*

$$T = N - \mathcal{P}_B - 1,$$

em que \mathcal{P}_B é uma variável Poisson Binomial distribuída de N parâmetros

$$\left(0, \frac{1}{2K-1}, 0, \frac{1}{2K-3}, 0, \dots, 0, \frac{1}{2K-(2K-2)}, 0, \frac{1}{2K-(2K-1)}\right).$$

Demonstração. Considere o baralho Λ_N . Pelas regras, existem dois estados possíveis para realizar o sorteio na simulação. Quando existem nas cartas restantes a mesma quantidade de cartas de cada grupo e quando existe uma carta em suspensão. Note que para qualquer dos casos, uma carta deve sair do baralho. No primeiro caso, não há a possibilidade de desperdício. No segundo caso, podemos calcular explicitamente qual a probabilidade da realização do sorteio ser a carta suspensa. Se considerarmos que estamos no t -ésimo passo da simulação, podemos escrever

$$p_t = \begin{cases} \frac{1}{2K-t+1}, & \text{se } t \text{ é ímpar} \\ 0, & \text{se } t \text{ é par} \end{cases},$$

de forma que temos nossa proposição. □

É possível mostrar que a esperança de \mathcal{P}_B é pequena com relação ao parâmetro $N = 2K$ e, utilizando a desigualdade de Chebyshev, que essa variável aleatória fica distante da sua média com probabilidade pequena.

6 Conclusão

A simulação de um passeio aleatório pode ser pensada de diversas formas. Quando se fala em passeios simétricos, idealmente, quer-se simular fazendo uso de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, que é o caso de uma simulação com uma moeda honesta. Contudo, usualmente em simulações utilizando grupos finitos sem reposição, como é o caso do uso de um baralho nos moldes discutidos, as variáveis são dependentes. Tamanha é a dependência que, em regime finito do tamanho de seu grupo (neste caso o baralho), a distribuição sobre as possíveis trajetórias simuladas difere de forma perceptível. Isso é principalmente verdade quanto maior é a razão de cartas utilizadas do conjunto inicial. Essa diferença pode ser medida pela distância de variação total.

Se o interesse é maximizar a quantidade de passos dados pela simulação com as cartas minimizando a diferença das distribuições, algumas abordagens podem ser tomadas. A escolha da função que leva o espaço de embaralhamentos no espaço de trajetórias é algo que influencia grandemente na distribuição final, naturalmente. Neste espírito, exploramos diversas formas de simular com o uso do baralho. As explorações levaram a simulações que estendem o passeio a múltiplas dimensões, que dividem o baralho em uma quantidade arbitrária de grupos e em uma simulação que quebra o paradigma estático das atribuições de valor a cada carta. Algumas formulações são menos triviais e, no fim, os resultados mais relevantes foram obtidos a partir da simulação mais natural na qual o baralho se divide em dois grupos.

Quando dividimos o baralho em dois grupos conseguimos enunciar claramente a distribuição de probabilidade sobre as trajetórias definida pela função caracterizadora da simulação. Com isso, foi possível desenvolver uma expressão explícita para a distância de variação em função da relação entre o tamanho do baralho e a quantidade de cartas usadas, quando a quantidade de cartas usadas é grande o suficiente. Nesse contexto, naturalmente, identificamos o resultado como a diferença entre duas normais, limites das distribuições iniciais. O perfil da função nos permitiu, por fim, fazer uma análise numérica razoável sobre a relação da distância, do tamanho do baralho e da quantidade de cartas utilizada.

Concluimos com algumas simulações não muito exploradas por questões de tempo. É de nosso interesse entender melhor sobre o comportamento da simulação apresentada na seção 5.2. E também, expandir os cálculos sobre o passeio aleatório em mais de 2 dimensões. Estamos curiosos para entender como se comporta o passeio aleatório *transiente*. Esperamos que este trabalho possa dar luz a diversos novos caminhos e projetos que eventualmente venhamos a nos aventurar.

Referências

- [1] Dave Bayer and Persi Diaconis. Trailing the dovetail shuffle to its lair. *The Annals of Applied Probability*, 2, 05 1992.
- [2] T. Franco. *Princípios de Combinatória e Probabilidade*. Coleção Matemática Universitária. 978-65-990528-6-6, 2020.
- [3] D.A. Levin and Y. Peres. *Markov Chains and Mixing Times*. MBK. American Mathematical Society, 2017.
- [4] J. Spencer. *Asymptopia*. Student Mathematical Library. American Mathematical Society, 2014.