

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

João Victor Alcantara Pimenta

Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb

São Carlos

2023

João Victor Alcantara Pimenta

Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb

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

Orientador: Prof. Dr. Guilherme Silva

Versão original

**São Carlos
2023**

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

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

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

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

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

RESUMO

PIMENTA, J. V. A. **Matrizes Aleatórias e Simulação de Gases de Coulomb**. 2023. 19p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

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

Palavras-chave: Gases de Coulomb. Matrizes Aleatórias.

SUMÁRIO

| | | |
|------------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 5 |
| 1.1 | Distribuição de autovalores | 6 |
| 1.2 | Ensembles Gaussianos | 7 |
| 1.3 | Gases de Coulomb | 8 |
| 1.4 | Medidas de Equilíbrio | 9 |
| 1.5 | Potenciais notáveis | 10 |
| 1.5.1 | Potenciais Quadráticos | 11 |
| 1.5.2 | Potencial Quártico | 11 |
| 1.5.3 | Potencial Mônico | 11 |
| 2 | SIMULAÇÕES E ALGORITMOS | 12 |
| 2.1 | Introdução - Dinâmica de Langevin | 12 |
| 2.2 | Discretização - Verlet Integrator | 13 |
| 2.3 | Passo de Seleção - Metropolis | 13 |
| 3 | IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS | 14 |
| 3.1 | A implementação | 14 |
| 3.2 | Potenciais de medida conhecida | 15 |
| 4 | CONCLUSÃO | 18 |
| | REFERÊNCIAS | 19 |

1 INTRODUÇÃO

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

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. In hac habitasse platea dictumst. Integer tempus convallis augue. Etiam facilisis. Nunc elementum fermentum wisi. Aenean placerat. Ut imperdiet, enim sed gravida sollicitudin, felis odio placerat quam, ac pulvinar elit purus eget enim. Nunc vitae tortor. Proin tempus nibh sit amet nisl. Vivamus quis tortor vitae risus porta vehicula.

Fusce mauris. Vestibulum luctus nibh at lectus. Sed bibendum, nulla a faucibus semper, leo velit ultricies tellus, ac venenatis arcu wisi vel nisl. Vestibulum diam. Aliquam pellentesque, augue quis sagittis posuere, turpis lacus congue quam, in hendrerit risus eros eget felis. Maecenas eget erat in sapien mattis porttitor. Vestibulum porttitor. Nulla facilisi. Sed a turpis eu lacus commodo facilisis. Morbi fringilla, wisi in dignissim interdum, justo lectus sagittis dui, et vehicula libero dui cursus dui. Mauris tempor ligula sed lacus. Duis cursus enim ut augue. Cras ac magna. Cras nulla. Nulla egestas. Curabitur a leo. Quisque egestas wisi eget nunc. Nam feugiat lacus vel est. Curabitur consectetur.

1.1 Distribuição de autovalores

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

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

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

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

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

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

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

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

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

é

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

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

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

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

1.2 Ensembles Gaussianos

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

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

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

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

* Weyl's Lemma?

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

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

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

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

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

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

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

1.3 Gases de Coulomb

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

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

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

A medida modela um gás de partículas indistinguíveis com carga nas posições $x_1, x_2, \dots, x_N \in S$ de dimensão d em \mathbb{R}^n *ambient space*. As partículas estão sujeitas a um potencial externo $V: S \mapsto \mathbb{R}$ e interagem por $W: S \mapsto (-\infty, \infty]$. A temperatura inversa é βN^2 . Assumiremos, para que valha a expressão, que V , W e β são tais a constante de normalização (função partição) $Z_{N,\beta} < \infty \forall N$. Reforço que p_N é um modelo de interações estáticas e não há campos magnéticos considerados. Tome \mathbb{R}^n com $n \geq 2$. Sabemos que, para $x \neq 0$ o núcleo de interação coulombiana (função de Green) vale

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

[†] Fator de contagem correta de Boltzmann

onde g é solução da equação de Poisson dada por

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

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

1.4 Medidas de Equilíbrio

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

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

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

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

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

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

Usaremos o denominado *resolvent*. Considere a função complexa[¶]

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

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

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

[‡] O nome 'Ensembles de Matrizes' não é coincidência.

[§] Condições de Fisher

[¶] Stieltjes transform

onde $\Pi_N(z) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{V'(z) - V'(\lambda_i)}{z - \lambda_i}$ é um polinômio de grau $k - 1 = \deg V'(z) - 1$. Poderíamos tentar resolver explicitamente essa formula para qualquer N , isso é possível em alguns casos. Contudo, em geral, estaremos interessados em tirar o limite $N \rightarrow \infty$, de $\langle G_N(z) \rangle$, média sobre a distribuição de \hat{M} . Esta média, denomina-se *resolvent*. Nesse limite,

$$G_\infty^{(med)}(z) = \int \frac{p(x)}{z - x} dx = V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi_\infty(z)}. \quad (1.4.2)$$

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

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

Podemos ir um passo além, desde que o potencial $V(x)$ seja convexo. Neste caso, teremos uma medida de equilíbrio $p(x)$ não nula apenas no intervalo (λ_-, λ_+) . Sabemos que o comportamento não analítico deve surgir da raiz quadrada, tal que se definirmos $D(z) := V'(z)^2 - 2\Pi_\infty(z)$ polinômio de grau $2k$, $\{\lambda_-, \lambda_+\}$ são suas raízes e o polinômio tem valor negativo em algum intervalo. Equivalentemente

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

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

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

e, principalmente, por 1.4.3,

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

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

$$\frac{1}{\pi i} \int_{\lambda_-}^{\lambda_+} \frac{\sqrt{x^2 - a^2} Q(x)}{z - x} dx = V'(z) \pm \sqrt{z^2 - a^2} Q(z)$$

1.5 Potenciais notáveis

Consideraremos a mudança de variável $V(x) \mapsto \beta N^2 V(x)$ tal que possamos escrever $p(\{\lambda_i\}) \propto e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\{\lambda_i\})}$ com

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

O desenvolvimento feito na seção 1.4 é suficiente para resolver os casos exemplificados aqui, salvo detalhes. Explicitar a conta não elucidaria a teoria e por isso omitido. Consideremos os seguintes potenciais.

1.5.1 Potenciais Quadráticos

Considere o potencial

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

Neste caso, resolvemos o sistema para descobrir que

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

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

1.5.2 Potencial Quártico

Considere o potencial

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

Aqui observaremos, a depender de t , pela primeira vez a separação do suporte da função. Isso muda um pouco o procedimento dado que temos que considerar um suporte composto da união de dois fechados disjuntos (ainda com simetria em relação ao zero) mas não introduz nenhum empecilho. Teremos um ponto crítico em $t = -2$ onde o suporte se separa nos intervalos $[-b_t, -a_t]$ e $[a_t, b_t]$ para $t < -2$. Para $t \geq -2$ o suporte é um único intervalo $[-b_t, b_t]$. Definiremos a medida nos dois casos,

- $t \geq -2$

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

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

- $t < -2$

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

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

1.5.3 Potencial Mônico

Por último, tome

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

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

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

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

2 SIMULAÇÕES E ALGORITMOS

A densidade no espaço de fase denominada Boltzmann-Gibbs descreve o denominado ensemble canônico. Médias sobre configurações de microestados, distribuídos de acordo com uma medida μ , são usadas para inferir informações macroscópicas de sistemas em física estatística. Essa medida é determinada pelo estado termodinâmico do sistema. Sistemas dinâmicos que amostram da medida μ_β são denominados termostatos e são notoriamente difíceis de se construir ergoticamente com processos dinâmicos determinísticos. Para realizar tal tarefa, uma teoria de equações diferenciais estocásticas foi desenvolvida (4). Usualmente, para um sistema em temperatura constante, uma escolha natural é a da Langevin Kinetic Dynamics (5). Muitas vezes, essas equações não são diretamente integráveis e então se recorre a métodos numéricos. Uma boa escolha para o processo Hamiltoniano é o método de Verlet, método numérico associado à equações diferenciais ordinárias com propriedades de conservação, um integrador geométrico. Ainda mais, para a parte de flutuação-dissipação, pode-se resolve-la analiticamente por ser processo de Ornstein-Uhlenbeck de variância explícita. Apesar das qualidades dos métodos utilizados, devemos ainda nos atentar à estabilidade na discretização da Langevin Kinetic Dynamics e para isso, introduziremos um passo de Metropolis para estabilizar a dinâmica.

2.1 Introdução - Dinâmica de Langevin

O algoritmo apresentado é introduzido no artigo (6). Denote a configuração do sistema por (q, p) , onde $q \in \mathbb{R}^d$ são as posições das partículas e $p \in \mathbb{R}^d$ são os momentos associados. Seja $U_N: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ energia cinética generalizada tal que $e^{-\beta_N U_N}$ seja Lebesgue integrável. Para uma energia da forma $E(q, p) = \mathcal{H}(q) + U(p)$, a dinâmica de Langevin para o processo de difusão em $\mathbb{R}^{dN} \times \mathbb{R}^{dN}$ se descreve como a solução para a equação estocástica (5)

$$\begin{cases} dq_t = \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt, \\ dp_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dB_t. \end{cases} \quad (2.1.1)$$

onde $(B_t)_{t>0}$ é movimento browniano em \mathbb{R}^{dN} e $\gamma_N > 0$ constante de atrito. Já β_N , temperatura inversa e \mathcal{H} são como em 1.3.1. Essa dinâmica admite o gerador infinitesimal

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

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

Aqui, denomina-se $\mathcal{L}_\mathcal{H}$ a parte Hamiltoniana e \mathcal{L}_U a parte de flutuação-dissipação. Toma-se $U_N(p) = \frac{1}{2}|p|^2$ tal que $U_N(p)$ é energia cinética. Para simular o processo (p_t, q_t) temos agora que discretizar 2.1.1 e amostrar da trajetória obtida.

2.2 Discretização - Verlet Integrator

Para integrar \mathcal{L} , faremos separadamente a operação sobre \mathcal{L}_H e \mathcal{L}_U . Sobre a primeira, a qual denomina-se dinâmica Hamiltoniana, o integrador de Verlet (6)(4), para $\Delta t > 0$, a partir do estado (q_k, p_k) ,

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

Que consiste em dois tipos de operações, uma de atualização do momento, uma de atualização da posição e novamente uma atualização do momento. Feito isso, nos resta integrar \mathcal{L}_U , o qual, para a energia cinética usual supracitada, consiste em um processo de Ornstein-Uhlenbeck de variância explícita e pode ser resolvido a partir da fórmula de Mehler

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

Onde G_k é variável aleatória Gaussiana usual. Nota-se ainda que esse processo pode não ter medida invariante graças às singularidades das interações. Para evitar esse tipo de problema, introduz-se o passo de seleção de Metropolis.

2.3 Passo de Seleção - Metropolis

Mais de uma ideia poderia ser empregada para diminuir os efeitos das singularidades das interações, como por exemplo, amenizar a dinâmica (?), teria efeito sobre a estabilidade do sistema*. Contudo, usaremos um esquema de Metropolis onde procuraremos, definindo uma probabilidade de aceite de cada atualização, evitar passos redundantes ou irrelevantes. Propõe-se então (6) que, a partir da atualização para a posição \tilde{q}_{k+1} , se calcule a probabilidade

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

onde o núcleo $K(x, y)$ é simétrico (6) para o caso do *Hybrid Monte Carlo* e, por se cancelar, não será discutido adiante. Atribua agora às coordenadas generalizadas (q_{k+1}, p_{k+1}) valor da seguinte forma

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

De forma a garantir a conservação da energia para o sistema e otimizar a exploração do espaço de fase.

* WHY, cite something

3 IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS

Simular Gases de Coulomb é especialmente interessante quando não há modelos de Matrizes conhecidos ou disponíveis para o \mathcal{H} escolhido. Escrevemos então um programa que faz uso da interpretação dos Gases de Coulomb para simular medidas de interesse em RMT. Consideraremos nossas partículas em um subespaço S de dimensão d em \mathbb{R}^N de forma que nosso espaço de fase Ω será de dimensão dN . O campo externo será denominado $V : S \mapsto \mathbb{R}$ e o núcleo de interação entre as partículas $W : S \mapsto (-\infty, \infty]$. Reunindo os resultados do capítulo passado sob essas condições, temos, por completeza, o algoritmo completo descrito em (6). Dada uma condição inicial (q_k, p_k) , para cada $k \geq 0$, realizamos os seguintes passos

1. Baseado em 2.2.2, atualize as velocidades com

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

2. Utilizando do esquema de 2.2.1, calcule os termos

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

3. Pela definição 2.3.1, tome

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

4. Defina, a partir de 2.3.2,

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

Resta agora apresentar a implementação e os resultados obtidos.

3.1 A implementação

Para todos os exemplos aqui restringiremos o subespaço \mathbb{S} à \mathbb{R} tal que $q_i \in \mathbb{R}$. Isso vem do fato de que estamos, nesse trabalho, interessados na simulação de partículas (ou autovalores) reais. Casos em mais dimensões são igualmente de alto interesse na teoria e o leitor interessado pode se referir à (?) por exemplo. Igualmente importante,

consideraremos um núcleo de interação $W = g$ coulombiano, por motivos claros. Essas funções são tais que assumiremos uma medida da forma 1.3.1 usual de Gases de Coulomb. Por sua natureza de física e gosto pessoal, a implementação do algoritmo foi feita em FORTRAN e sua esquemática se encontra na Figura 1. Podemos entender melhor a relação entre as sub-rotinas e funções em luz da descrição na Tabela 1. Alguns detalhes são

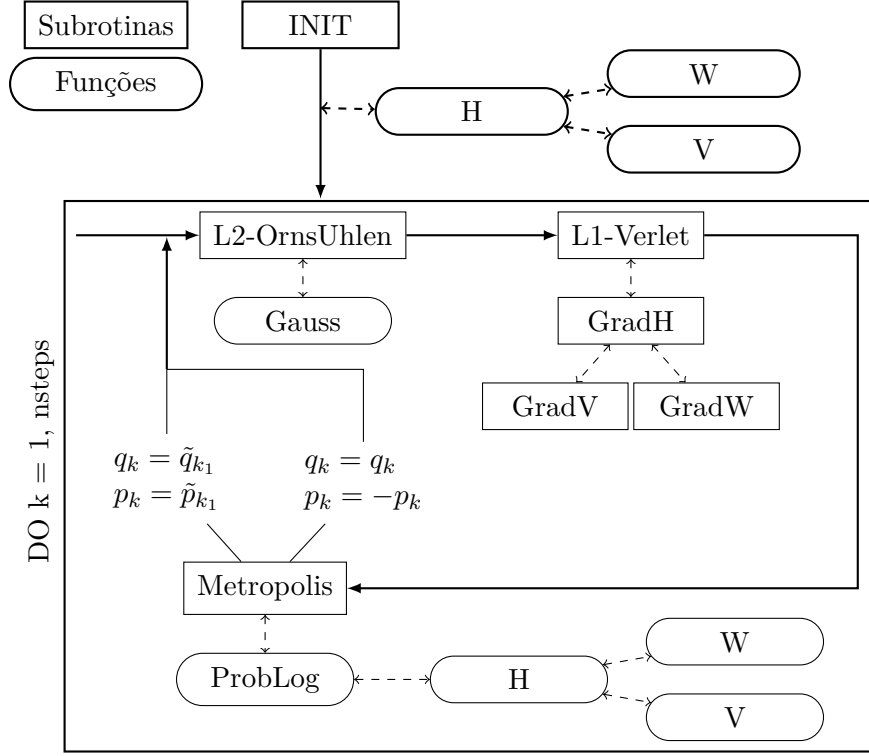


Figura 1 – Ilustração da implementação do algoritmo *Hybrid Monte Carlo* (HMC) descrito. Setas sólidas indicam o fluxo do programa. Linhas tracejadas indicam chamadas de funções dentro do bloco. A descrição das funções se encontra na Tabela 1. O programa completo pode ser encontrado em <https://github.com/Joao-vap/RMT-Code/tree/main/ArticleAlg>

importantes de notar. O gerador de variáveis aleatórias gaussianas, necessário em 3.0.1 foi implementado utilizando do algoritmo de *Box-Muller* (7). Para além disso, o ajuste de variáveis é razoavelmente empírico observado que \dots . Para cada execução do programa resta então definir o potencial referente à seu ensemble, as dimensões d, n e as constantes definidas anteriormente, como a de dissipação η e o intervalo de passo temporal Δt .

3.2 Potenciais de medida conhecida

Podemos validar a execução do programa e qualidade da medida gerada utilizando de potenciais bem descritos na literatura. Para isso, retomaremos os resultados da Seção 1.5. Foi comentado que modelos de matrizes aleatórias são úteis em simulações das medidas quando um modelo está disponível. A família de ensembles gaussianos são modelos que mostramos ser bem representados como matrizes em 1.2. Note que tomar esta família é o

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

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

equivalente, na simulação descrita a tomar os parâmetros

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

Para demonstrar esta fato e representar a semelhança entra os dois métodos de simulação apresenta-se, para $N = 10$, sem muitos detalhes da implementação, a densidade gerada para os três modelos ($\beta = 1, 2, 4$) na coluna da esquerda da Figura 2. Na mesma figura, também apresentamos a representação do Semi-Círculo de Wigner e o comportamento da configuração de equilíbrio para os três modelos quando N cresce. Fica fácil observar a convergência para a medida de equilíbrio prevista. Note que os valores foram escalados por $\sqrt{2\beta}$ para melhor visualização.

Indo além dos modelos gaussianos podemos retomar as descrições dos potenciais Mônico em 1.5.4 e as duas situações para o potencial quártico 1.5.2 e 1.5.3. Respectivamente, estes modelos equivalem a tomar na simulação os parâmetros

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

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

Note que o caso mônico se reduz ao gaussiano se tomarmos $m = 1$. Isso pode ser confirmado na figura 3 onde a medida do semi-círculo é concordante com a simulação.

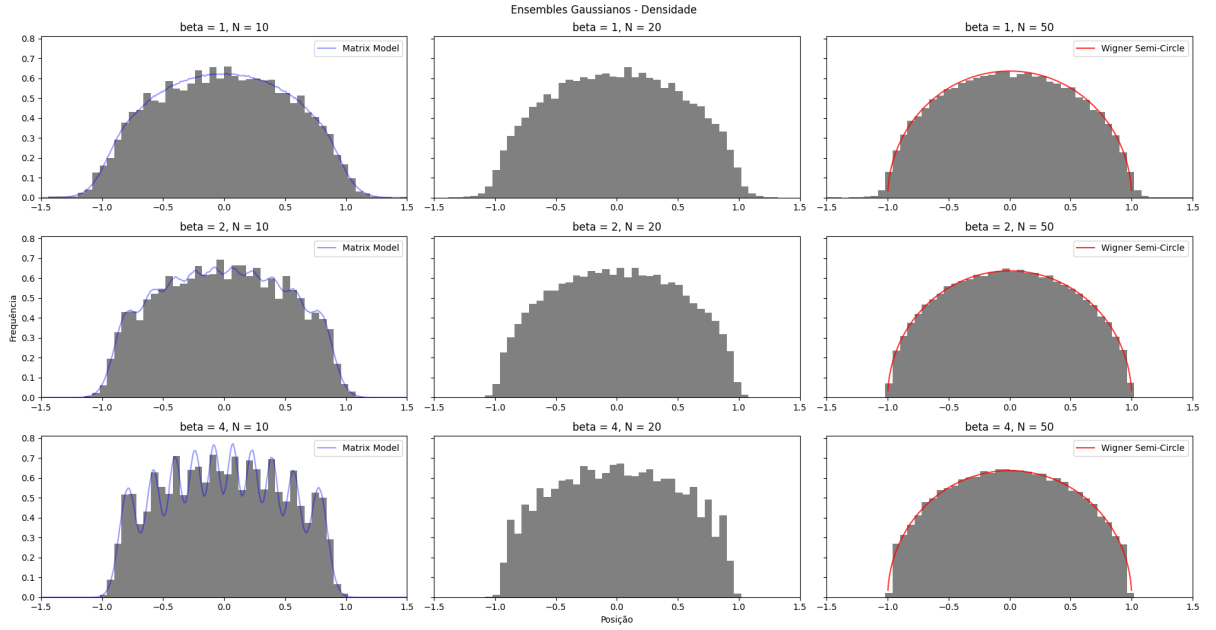


Figura 2 – Medidas de equilíbrio para os ensembles gaussianos, equivalente à tomar 3.2.1. Para todos, vale a escolha de $\Delta t = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 1000 iterações os microestados a partir da metade da simulação. Para as simulações à esquerda da figura se apresenta ainda a distribuição da amostragem de 10^6 matrizes do tipo apropriado e a densidade resultante.

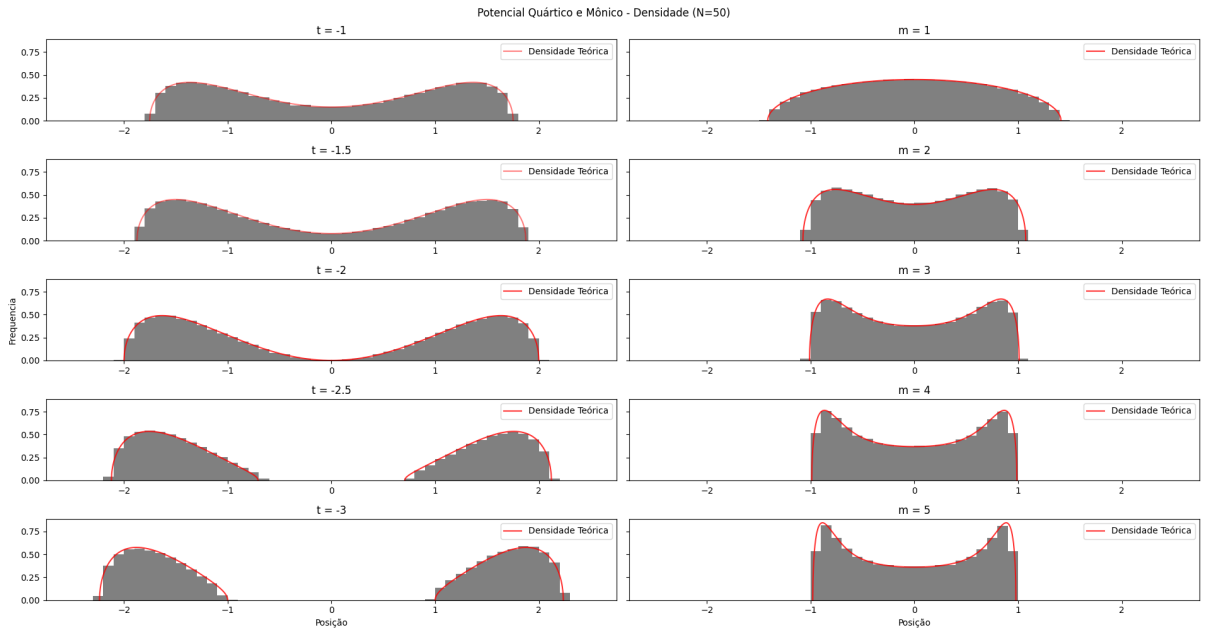


Figura 3 – Medidas de equilíbrio para os potenciais Quártico 3.2.3 e Mônico 3.2.2, respectivamente à esquerda e direita. Para ambos os casos vale $\Delta t = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos. Registra-se a cada 1000 iterações os microestados a partir da metade da simulação. Toma-se por padrão $N = 50$. No quártico, simula-se $t = -1, -1.5, -2, -2.5, -3$ e par ao mônico fixa-se $t = 1$ e simula-se $m = 1, 2, 3, 4, 5$.

4 CONCLUSÃO

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. In hac habitasse platea dictumst. Integer tempus convallis augue. Etiam facilisis. Nunc elementum fermentum wisi. Aenean placerat. Ut imperdiet, enim sed gravida sollicitudin, felis odio placerat quam, ac pulvinar elit purus eget enim. Nunc vitae tortor. Proin tempus nibh sit amet nisl. Vivamus quis tortor vitae risus porta vehicula.

Fusce mauris. Vestibulum luctus nibh at lectus. Sed bibendum, nulla a faucibus semper, leo velit ultricies tellus, ac venenatis arcu wisi vel nisl. Vestibulum diam. Aliquam pellentesque, augue quis sagittis posuere, turpis lacus congue quam, in hendrerit risus eros eget felis. Maecenas eget erat in sapien mattis porttitor. Vestibulum porttitor. Nulla facilisi. Sed a turpis eu lacus commodo facilisis. Morbi fringilla, wisi in dignissim interdum, justo lectus sagittis dui, et vehicula libero dui cursus dui. Mauris tempor ligula sed lacus. Duis cursus enim ut augue. Cras ac magna. Cras nulla. Nulla egestas. Curabitur a leo. Quisque egestas wisi eget nunc. Nam feugiat lacus vel est. Curabitur consectetur.

REFERÊNCIAS

- 1 EDELMAN, A. **Eigenvalues and Condition Numbers of Random Matrices**. 1984. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 1984.
- 2 CHAFAÏ, D. **Aspects of Coulomb gases**. 2021.
- 3 POTTERS, M.; BOUCHAUD, J. **A First Course in Random Matrix Theory: for Physicists, Engineers and Data Scientists**. Cambridge University Press, 2020. ISBN 9781108488082. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=9K-WzQEACAAJ>.
- 4 LEIMKUHLER, B.; MATTHEWS, C. **Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods**. Springer International Publishing, 2015. (Interdisciplinary Applied Mathematics). ISBN 9783319163758. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=AGF1CQAAQBAJ>.
- 5 STOLTZ, G.; TRSTANOVA, Z. Langevin dynamics with general kinetic energies. **Multiscale Modeling & Simulation**, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), v. 16, n. 2, p. 777–806, jan. 2018. ISSN 1540-3467. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1137/16M110575X>.
- 6 CHAFAÏ, D.; FERRÉ, G. Simulating coulomb and log-gases with hybrid monte carlo algorithms. **Journal of Statistical Physics**, Springer Science and Business Media LLC, v. 174, n. 3, p. 692–714, nov 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10955-018-2195-6>.
- 7 BOIROJU, N. Generation of standard normal random variables. **Indian Journal of Scientific Research**, v. 2, p. 83–85, 01 2011.