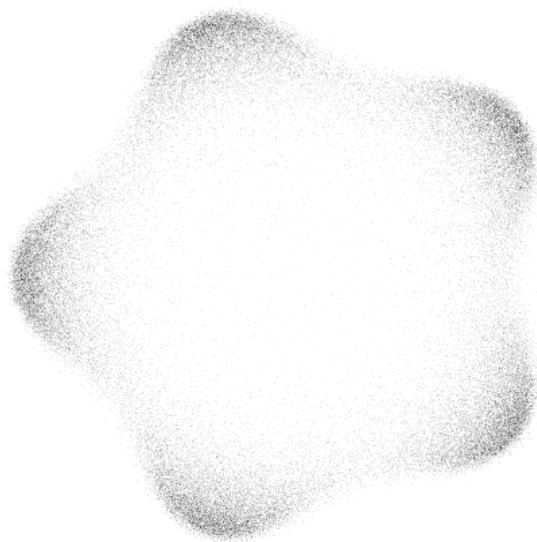


MATRIZES ALEATÓRIAS E SIMULAÇÃO DE GASES DE COULOMB

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, 3 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.

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**, como mencionado, 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*.

1.1 CRONOGRAMA

Com base nas tarefas enumeradas na Seção 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.

2 Realizações do período

2.1 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

2.2 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 disponível em anexo.

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

Dados Intransitivos

Joao V. A. Pimenta & Joao P. C. de Paula & Lael V. Lima & Luis G. C. Bueno

Guilherme L. F. Silva & Daniel Ungaretti & Tertuliano Franco

Universidade De Sao Paulo

joaovictor.pimenta@usp.br



Resumo

Intransitividade em um jogo de dados é um conceito muitas vezes pouco intuitivo. Afinal, se existem dados A, B, C tais que $A \triangleright B$ e $B \triangleright C$, é pouco natural imaginar que seja possível $C \triangleright A$. Fato é, escolhendo devidamente seus dados, esse fenômeno é possível e alguns resultados seguem desde que um bom modelo seja definido. No primeiro momento, exploraremos uma representação dos dados como *palavras* que nos possibilita definir a existência de conjuntos intransitivos para todas configurações de número de dados (m) e faces (n). Em um segundo modelo, no qual as faces dos dados são dadas por uma distribuição uniforme $[0, 1]$, note, sem repetição e por isso, ligado as palavras. Por fim, exploramos um pouco a razão de conjuntos de dados ordenados intransitivos (\mathcal{I}) sobre o conjunto total de dados possível (\mathcal{D}). Analisando a assintótica em relação a n simulamos o modelo e conjecturamos, levados por resultados computacionais e uma análise algébrica que $L = 3 \log 3$ em $|\mathcal{I}_n| = e^{nL(1+o(1))}$.

Palavras

Construiremos um modelo sem repetição baseado em palavras onde cada letra é associada a um dado. Na tabela representamos $abccbbcaabcb$.

A	12				8			4	3		
B		11				7	6			2	
C			10	9				5			1

$A \triangleright B$ se, na *palavra*, a contagem dos b 's na direita de todos a 's for menor que a recíproca. Seja S_m^n uma palavra de m tipos de letras com n repetições, notamos:

Lema 1. Se existe uma palavra $S_{m,n}$ intransitiva, então existe uma palavra $S_{m+1,n}$ que também é intransitiva.

Lema 2. Se existe $S_{m,n}$ intransitiva, então existe uma palavra $S_{m,n+2}$ que também é intransitiva.

Lema 3. Uma palavra $S_{3,2}$ não pode ser intransitiva.

Teorema 4. Para todo $n \geq 3$ e $m \geq 3$ existem palavras intransitivas de característica m e ordem n .

5	9	4	8	6	7
1		3			2
6		9			8
5	12	4	11	7	10
3			2		1

É possível mostrar para um modelo enviesado de dados que para todo $m \geq 3$ e $n \geq 4$, existem m dados enviesados de n faces que são intransitivos.

Dados Aleatórios

A e B possuem n faces (A_1, A_2, \dots, A_n), variáveis aleatórias i.i.d assumindo valores em $[0, 1]$ com distribuição uniforme. O número de vitórias de A sobre B é dado por

$$N_{A>B} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \chi_{A_i > B_j}$$

e podemos explorar a probabilidade como a razão relacionado com as triplas de dados com n faces (A_n, B_n, C_n)

$$\mathbb{P}((A_n, B_n, C_n) \in \mathcal{I}_n) = \frac{|\mathcal{I}_n|}{|\mathcal{D}_n|},$$

\mathcal{I}_n é o conjunto de trios ordenados de dados intransitivos e \mathcal{D}_n todos trios ordenados possíveis. Pela expansão de Stirling

$$|\mathcal{D}_n| = \frac{(3n)!}{(n!)^3} \sim \frac{\sqrt{3}}{2\pi n} 3^{3n}.$$

Proposição 5. Se $r \in \mathcal{I}_n$ e $s \in \mathcal{I}_m$, então a concatenação $rs \in \mathcal{I}_{n+m}$

Corolário 6. Sejam m e n inteiros positivos, então $|\mathcal{I}_{m+n}| \geq |\mathcal{I}_m| |\mathcal{I}_n|$

Teorema 7. $|\mathcal{I}_n| = e^{nL(1+o(1))}$, para alguma constante $L \in (2.5, 3 \log 3]$

Prova. Por ser subaditivo, pelo lema de Fekete, existe L tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log |\mathcal{I}_n|}{n} = \sup_n \frac{\log |\mathcal{I}_n|}{n} = L.$$

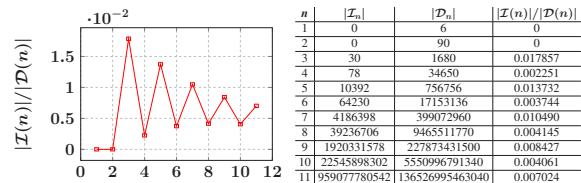
$$\implies |\mathcal{I}_n| = e^{nL(1+o(1))}$$

Podemos afirmar pelos resultados computacionais

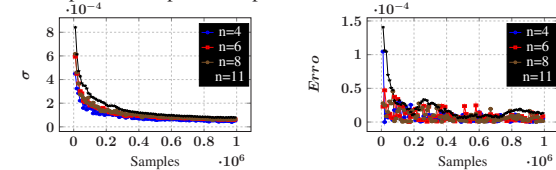
$$L \geq \frac{\log |\mathcal{I}_{11}|}{11} \approx 2.5.$$

E, como $|\mathcal{I}_n| \leq |\mathcal{D}_n|$,

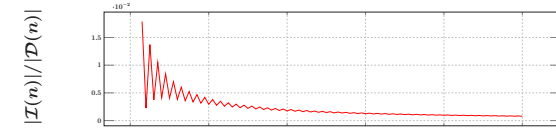
$$L = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log |\mathcal{I}_n|}{n} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log |\mathcal{D}_n|}{n} = 3 \log 3.$$



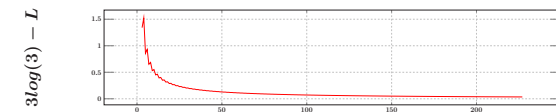
Validando para o espaço já conhecido de palavras podemos escolher os parâmetros de uma busca aleatória. Tomamos a média de 100 experimentos para cada ponto.



Estenderemos nossa busca realizando 10^2 experimentos para $5 \cdot 10^5$ amostras. Sabemos que nosso erro é da ordem de $\pm 5 \cdot 10^{-5}$.



Para L ,



Até o momento, com $n = 1000$, $3 \log 3 - 0.01 \leq L \leq 3 \log 3$.

Conjectura 8. $L = 3 \log 3$.

Conclusão

Dados Intransitivos instigam a intuição e fornecem uma plataforma interessante de desenvolvimento matemático. Neste trabalho, demonstrou-se para os modelos considerados a existência de conjuntos de dados intransitivos para todas configurações para os modelos. A discussão da razão para o limite de número de faces culminou em uma exploração numérica e algébrica que culmina na Conjectura 8. Também mostramos posteriormente que $|\mathcal{I}_n|/|\mathcal{D}_n| \rightarrow 0$, e provamos Teorema do Limite Central para $N_{a>b}$

Referências

- [1] D. H. J. Polymath. The probability that a random triple of dice is transitive, 2022. arXiv:2211.16156.
- [2] Calyampudi Radhakrishna Rao. *Linear Statistical Inference and its Applications*. John Wiley & Sons, Inc, 2 edition, 1973.

Agradecimentos

Pesquisa desenvolvida com utilização dos recursos computacionais do Centro de Ciências Matemáticas Aplicadas à Indústria (CE-MEAI) financiados pela FAPESP.

2.3 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, disponível em anexo.

2.4 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>.

2.4.1 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

$$\mathcal{P}(\hat{M})d\hat{M} = \mathcal{P}\left(M_{1,1}(\hat{\Lambda}, \hat{P}), \dots, M_{N,N}(\hat{\Lambda}, \hat{P}) | J(\hat{M} \rightarrow \{\hat{\Lambda}, \hat{P}\})\right) d\hat{\Lambda}d\hat{P}. \quad (2.4.1)$$

Estamos especialmente interessados na distribuição de autovalores, logo, devemos integrar a Equação (2.4.1) 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

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

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

$$\mathcal{P}_{ord}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{Z_{N,\beta}^{(ord)}} \phi\left(\sum_i^N V(\lambda_i)\right) \prod_{i < j}^N |\lambda_i - \lambda_j|^\beta. \quad (2.4.2)$$

Note que, graças ao jacobiano, autovalores destas matrizes apresentam repulsão mútua, expressa pelo produtório na Equação (2.4.2). Este fato naturaliza a analogia da

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.

Seção 2.4.2 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

$$\mathcal{P}(\vec{\lambda}) = \frac{1}{Z_{N,\beta}} e^{-\beta_N \mathcal{H}_N(\vec{\lambda})}, \quad (2.4.3)$$

onde $Z_{N,\beta}$ é função de partição canônica para autovalores desordenados², normalizante da Expressão (2.4.3). 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 $\lambda_i \mapsto \lambda_i \sqrt{\beta N}$.

2.4.2 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 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

$$d\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta N^2 \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}} d\vec{x}, \quad (2.4.4)$$

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

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 interação por $g: \mathbb{S} \mapsto (-\infty, \infty]$. A temperatura inversa é βN^2 . Assumiremos, para que valha a definição (2.4.4), que V , g e β são tais que a constante de normalização (função partição) $Z_{N,\beta}$ seja finita para todo N .³

Se lembramos da Expressão (2.4.3), perceberemos que, para o devido $V(x)$, podemos tomar $d = 1$ e $n = 2$ para recuperar a medida dos ensembles gaussianos

$$\mathcal{P}_N(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta_N \mathcal{H}_N(\vec{x})}}{Z_{N,\beta}}, \quad \mathcal{H}_N(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i) + \frac{1}{N^2} \sum_{i < j} \log \frac{1}{|x_i - x_j|}. \quad (2.4.5)$$

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 (2.4.5), [4] queremos satisfazer o sistema de equações

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda_i} = 0 \implies V'(\lambda_i) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \quad \text{para } i = 1, \dots, N. \quad (2.4.6)$$

Usaremos o denominado resolvente. Considere a função complexa

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

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 (2.4.6) por $1/(z - \lambda_i)$ e somando sobre i , podemos reescrever a igualdade como

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

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

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

$$\mu_V^*(x) = \frac{1}{2\pi i} (S_+^{\mu\nu} - S_-^{\mu\nu}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im } S_+^{\mu\nu}(x + i\epsilon). \quad (2.4.7)$$

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

$$S^{\mu\nu}(z) = V'(z) \pm \sqrt{V'(z)^2 - 2\Pi(z)}, \quad \Pi(z) = \int \frac{V'(z) - V'(\lambda)}{z - \lambda} \mu_V^*(\lambda) d\lambda. \quad (2.4.8)$$

Assumindo V potencial polinomial arbitrário, resta explicitar $\Pi(z)$ para encontrar a medida $\mu_V^*(x)$ pela Equação (2.4.7). 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.

2.4.3 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 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

⁴Também chamada transformada de Cauchy.

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 (2.4.4) é medida invariante do processo de difusão de Markov solução da equação diferencial estocástica

$$dq_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dW_t, \quad (2.4.9)$$

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

$$\begin{cases} dq_t = \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt, \\ dp_t = -\alpha_N \nabla \mathcal{H}_N(q_t) dt - \gamma_N \alpha_N \nabla U_N(p_t) dt + \sqrt{2 \frac{\gamma_N \alpha_N}{\beta_N}} dB_t, \end{cases} \quad (2.4.10)$$

onde β_N é temperatura inversa e $\mathcal{H}_N: \mathbb{R}^{(dN)} \rightarrow \mathbb{R}$ é como na Distribuição (2.4.5). [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 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

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

possível para energias cinéticas generalizadas. [9] Além disso, $(B_t)_{t>0}$ é processo browniano. Para simular $(q_t, p_t)_{t>0}$ integramos a Equação (2.4.10), contudo, isso pode não ser possível analiticamente, levando a recorrer a métodos numéricos para amostragem.

Para integrar o Processo (2.4.10) discretizaremos, para amostragem numérica, separadamente as dinâmicas associadas à \mathcal{L}_H e \mathcal{L}_U . Naturalmente, \mathcal{L}_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

$$\begin{cases} p_{k+\frac{1}{2}} = p_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + p_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = p_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(\tilde{q}_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \end{cases} \quad (2.4.11)$$

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}_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 $\alpha_N \gamma_N = 1$, retomaremos a dinâmica da Equação (2.4.9). 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

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}, \quad (2.4.12)$$

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

$$P_k = 1 \wedge \frac{e^{-\beta_N E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1})}}{e^{-\beta_N E_N(q_k, \tilde{p}_k)}}, \quad (2.4.13)$$

onde \tilde{p}_k é dado por (2.4.15), probabilidade de aceite tal que se atribua agora às novas coordenadas generalizadas (q_{k+1}, p_{k+1}) valor da seguinte forma

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) & \text{com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) & \text{com probabilidade } 1 - P_k. \end{cases} \quad (2.4.14)$$

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

$$\tilde{p}_k = \eta p_k + \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\beta_N}} G_k, \quad \eta = e^{-\gamma_N \alpha_N \Delta t}; \quad (2.4.15)$$

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

$$\begin{cases} \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} = \tilde{p}_k - \nabla \mathcal{H}_N(q_k) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}, \\ \tilde{q}_{k+1} = q_k + \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} \alpha_N \Delta t, \\ \tilde{p}_{k+1} = \tilde{p}_{k+\frac{1}{2}} - \nabla \mathcal{H}_N(\tilde{q}_{k+1}) \alpha_N \frac{\Delta t}{2}; \end{cases} \quad (2.4.16)$$

3. Introduzido o passo de Metropolis-Hastings, tome

$$P_k = 1 \wedge \exp(-\beta_N (E_N(\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) - E_N(q_k, \tilde{p}_k))); \quad (2.4.17)$$

4. Defina, a partir da razão anterior,

$$(q_{k+1}, p_{k+1}) = \begin{cases} (\tilde{q}_{k+1}, \tilde{p}_{k+1}) & \text{com probabilidade } P_k, \\ (q_k, -\tilde{p}_k) & \text{com probabilidade } 1 - P_k; \end{cases} \quad (2.4.18)$$

O ajuste de variáveis é notoriamente um dos aspectos complicados do algoritmo implementado. Precisamos de uma holística par ajustar Δt , α_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 $\gamma_N \alpha_N \Delta \tilde{t} \approx 0.5$.

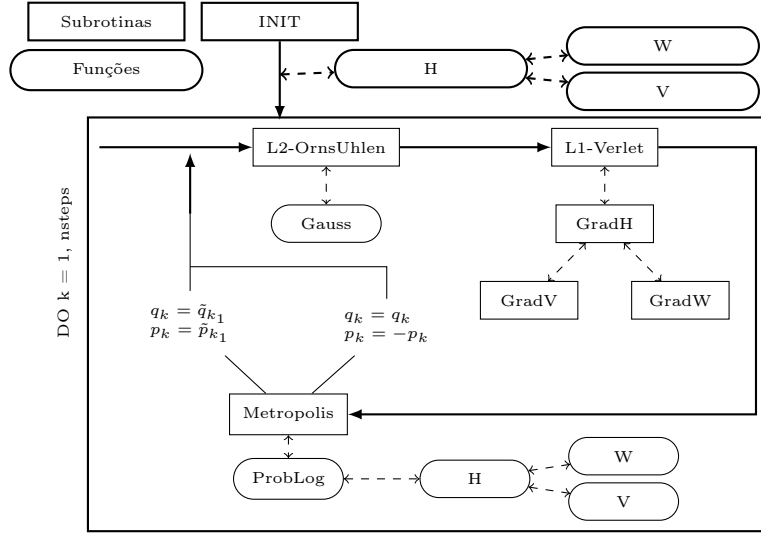


Figura 2.1: Implementação do algoritmo *Langevin Monte Carlo* (LMC). Setas sólidas indicam o fluxo do programa. Setas tracejadas indicam chamadas de funções dentro do bloco. A descrição das funções se encontra na Tabela 2.1.

2.4.4 Resultados e Discussão

A família de ensembles gaussianos são modelos que mostramos ser bem representados como matrizes na Seção 2.4.1. Tomar a medida dos ensembles gaussianos é o equivalente, na simulação de gases descrita, a tomar

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log |x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 1, 2, 4. \quad (2.4.19)$$

O resultado da simulação para a Configuração (2.4.19) é apresentado na Figura 2.2 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

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 (2.4.15).
L1-Verlet	Modifica $\tilde{p}_{k+1}, \tilde{q}_{k+1}$ vetores $[N \times m]$, globais, por \mathcal{L}_H segundo (2.4.16).
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 (2.4.17).
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 (2.4.18).
Gauss	Retorna variáveis gaussianas, vetor $[1 \times m]$, local por Box-Muller.

Tabela 2.1: Descrição das funções e subrotinas utilizadas na implementação do programa.

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

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = t|x|^{2m}; \quad W(x) = g(x) = \log|x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (2.4.20)$$

$$d = 1; \quad n = 2; \quad V(x) = \frac{|x|^4}{4} + t\frac{|x|^2}{2}; \quad W(x) = g(x) = \log|x|; \quad \beta_N = \beta N^2; \quad \beta = 2. \quad (2.4.21)$$

O caso mônico se reduz ao gaussiano se $m = 1$. Os resultados para ambos os potenciais estão explicitados na Figura 2.3 para alguns parâmetros interessantes de t e m .

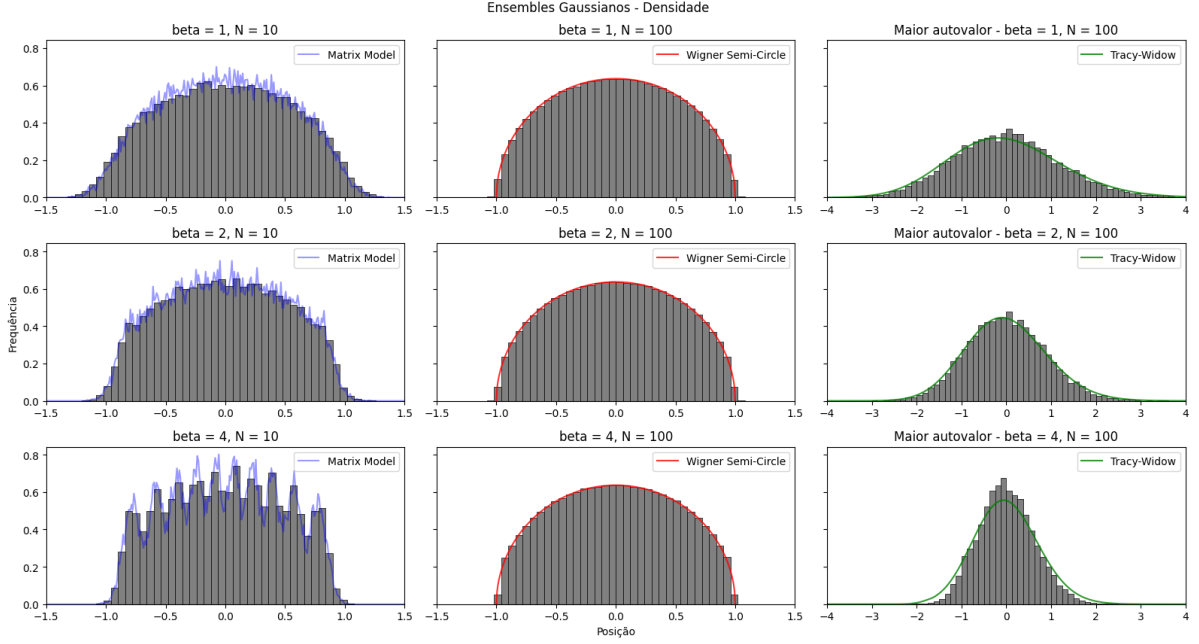


Figura 2.2: Densidade para ensembles gaussianos, (2.4.19). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$ e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 100 iterações a partir de $nsteps/5$. À esquerda da figura, em azul, a densidade da amostragem de $4 \cdot 10^3$ matrizes do ensemble. No centro, o Semi-Círculo de Wigner, medida de equilíbrio. Na direita, apresenta-se a densidade de λ_{max} normalizado e sua medida esperada.

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 (2.4.22) complexa. Para esta, representamos as medidas simuladas para alguns valores de interesse de t, a na Figura 2.4,

$$d = 2; n = 2; V(z) = |z|^{2a} - \text{Re } tz^a; W(x) = g(x) = \log |x|; \beta_N = \beta N^2; \beta = 2. \quad (2.4.22)$$

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 2.4 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 (2.4.23), representado em um diagrama de fase na Figura 2.5

$$d = 2; n = 2; V(z) = t_0(|z|^2 - 2 \text{Re}\{z^3/3 + t_1 z\}); W(x) = g(x) = \log |x|; \beta = 2. \quad (2.4.23)$$

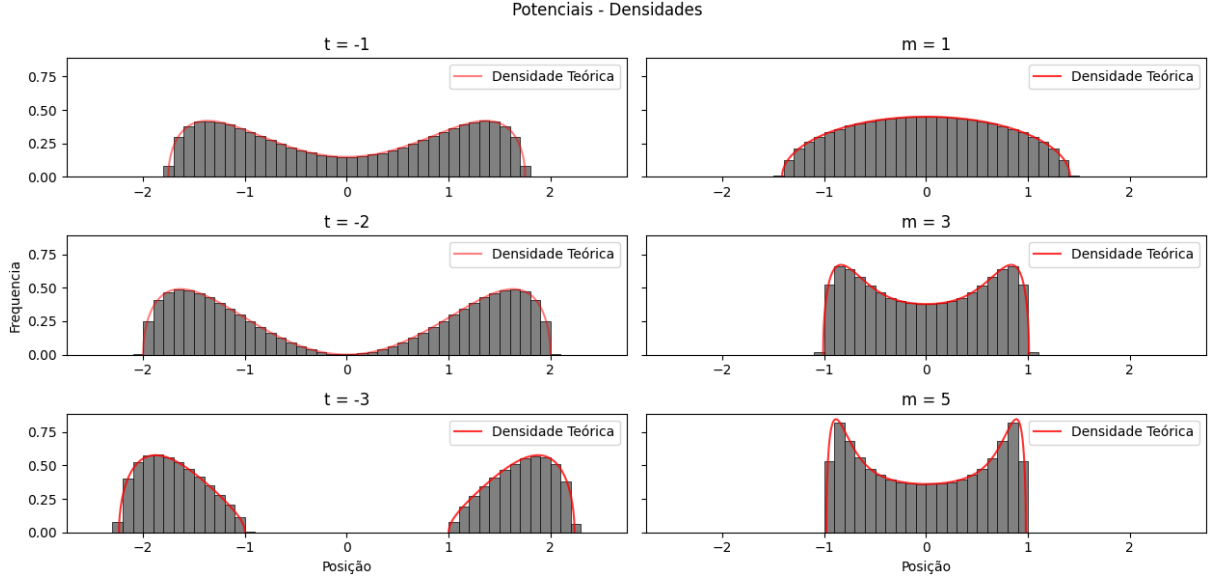


Figura 2.3: Potencial Quártico (2.4.21) e Mônico (2.4.20), respectivamente à esquerda e direita. Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$, $N = 100$, e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos. Registra-se a cada 1000 iterações a partir de $nsteps/5$. No Quártico, simula-se $t = -1, -2, -3$. No Mônico fixa-se $t = 1$ e simula-se $m = 1, 3, 5$.

2.4.5 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 intuimos 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

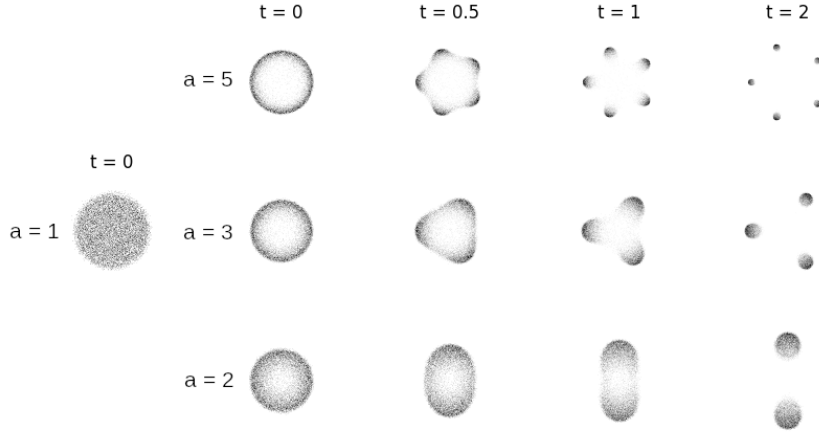


Figura 2.4: Medidas referentes à configuração (2.4.22). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 500 iterações a partir de $nsteps/5$.

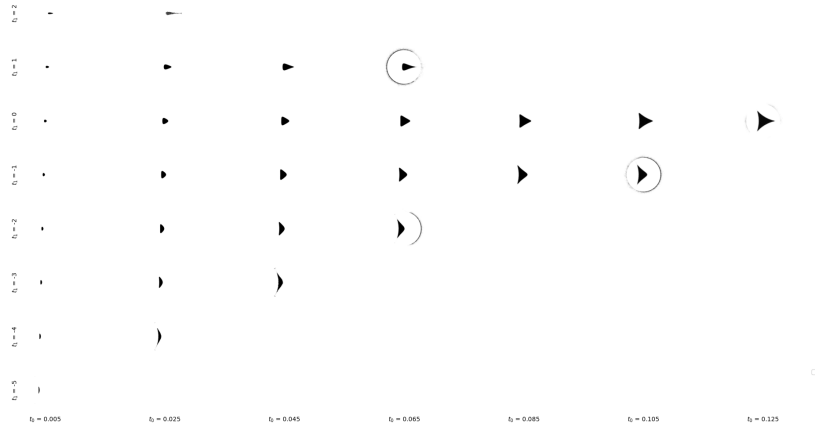


Figura 2.5: Medidas referentes à configuração (2.4.22). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 500 iterações a partir de $nsteps/5$.

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.

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.