

**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.

Pimenta, João Victor Alcantara
Matrizes aleatórias e simulação de Gases de Coulomb /
João Victor Alcantara Pimenta; orientador Guilherme L. F.
Silva -- São Carlos, 2024.
20 p.

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

1. Matrizes aleatórias. 2. Gases de Coulomb. 3. Dinâmica
de Langevin. I. Silva, Guilherme L. F., orient. II. Título.

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^{μ_V} 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 .

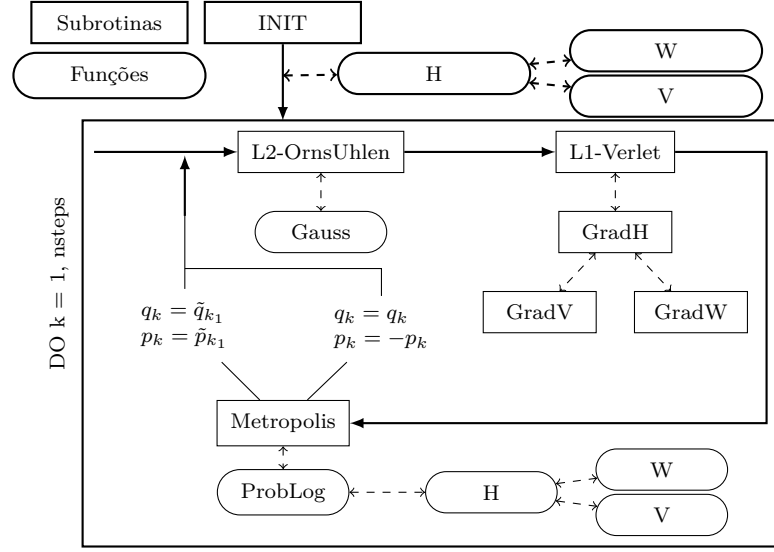


Figura 1 – Implementação do algoritmo *Langevin Monte Carlo* (LMC). Setas sólidas indicam o fluxo do programa. Setas tracejadas indicam chamadas de funções dentro do bloco. A descrição das funções se encontra na Tabela 1.

Fonte: Elaborada pelo autor.

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

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.

Fonte: Elaborada pelo autor.

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. Tratemos 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

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

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

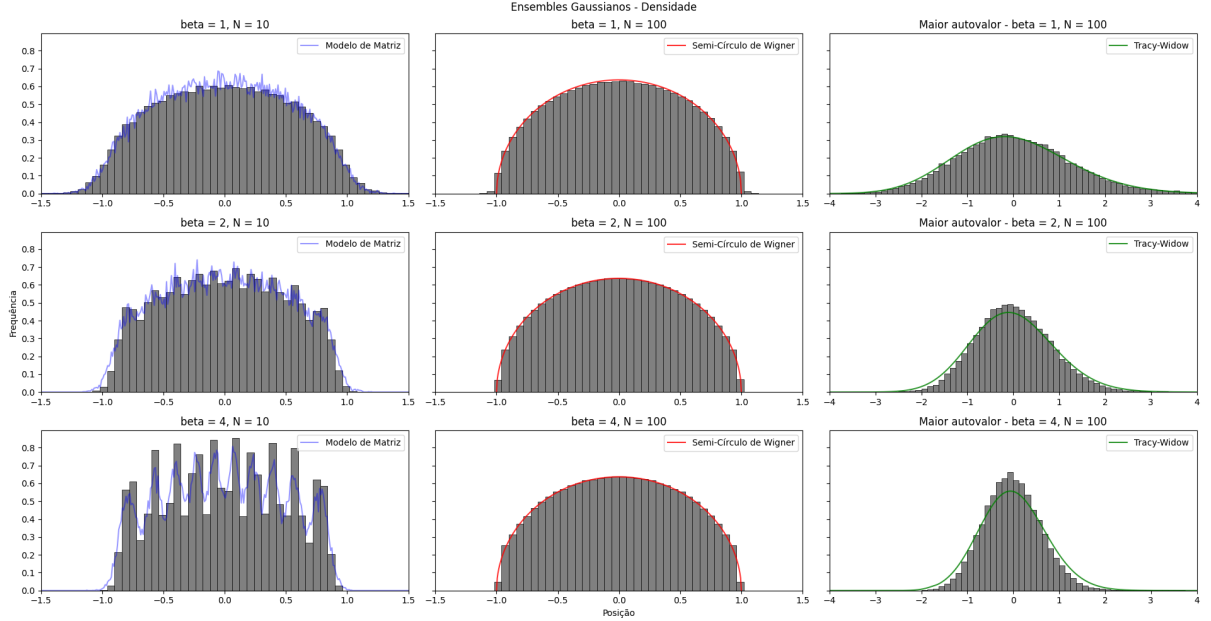


Figura 2 – Densidade para ensembles gaussianos, (4.2.1). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$ e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 100 iterações a partir de $nsteps/5$. À esquerda da figura, em azul, a densidade da amostragem de $4 \cdot 10^3$ matrizes do ensemble. No centro, o Semi-Círculo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

Fonte: Elaborada pelo autor.

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

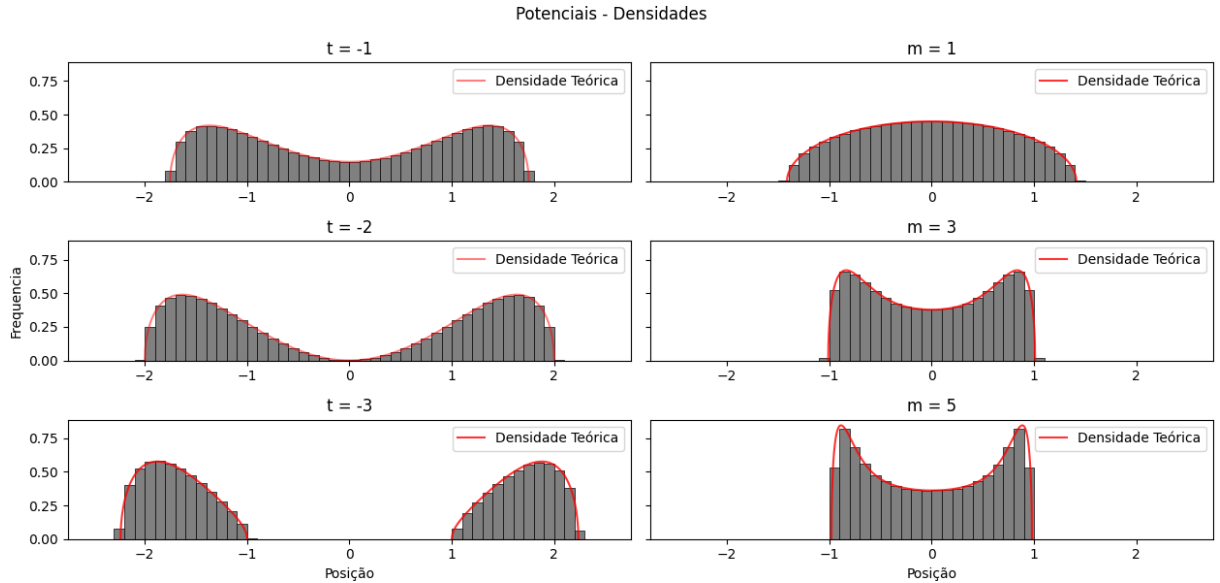


Figura 3 – Potencial Quártico (4.2.3) e Mônico (4.2.2), respectivamente à esquerda e direita. Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.1$, $N = 100$, e $nsteps = 5 \cdot 10^6$ passos. Registra-se a cada 1000 iterações a partir de $nsteps/5$. No Quártico, simula-se $t = -1, -2, -3$. No Mônico fixa-se $t = 1$ e simula-se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

Fonte: Elaborada pelo autor.

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,

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

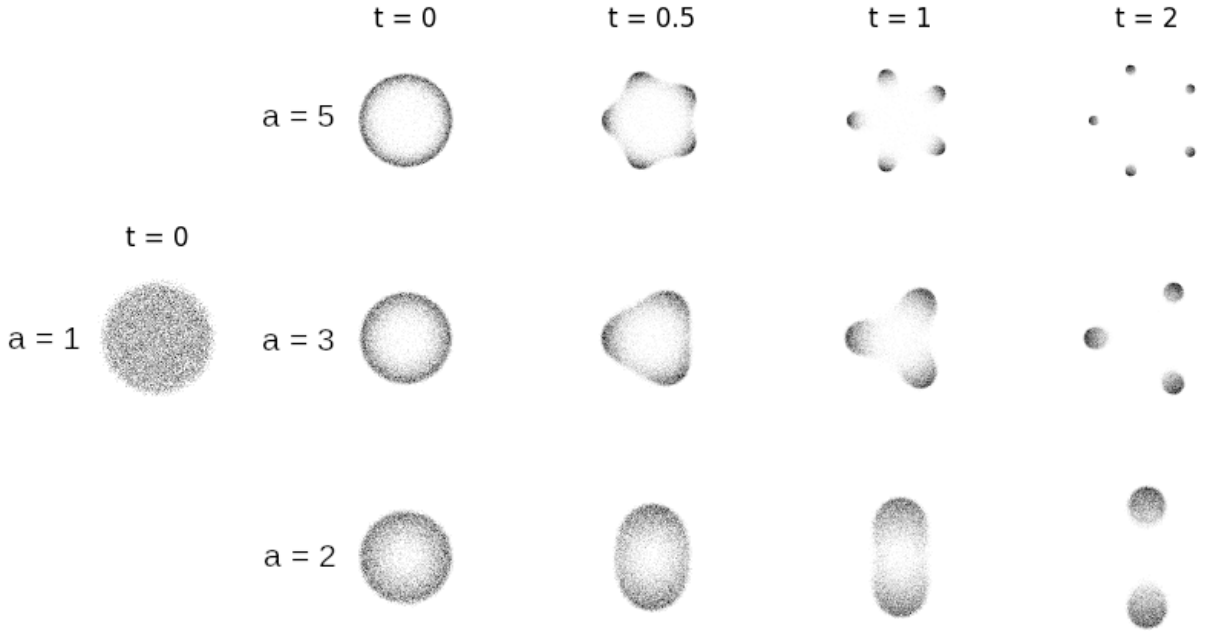


Figura 4 – Medidas referentes à configuração (4.2.4). Tomou-se $\Delta\tilde{t} = 0.5$ e $nsteps = 2 \cdot 10^6$ passos, registrando a cada 500 iterações a partir de $nsteps/5$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

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: 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: 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**. Boca Raton: CRC Press, 2011. ISBN 9781420079425.
- 11 TRACY, C.; WIDOM, H. The distributions of Random Matrix Theory and their applications. *In*: SIDORAVICIUS, V. (ed.). **New trends in mathematical physics**. Dordrecht: Springer, 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.